

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

Université Abou Bekr Belkaid
Tlemcen Algérie



جامعة أبي بكر بلقايد

تلمسان الجزائر

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE



Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la
Recherche Scientifique
Université Abou-Bekr Belkaid Tlemcen
FACULTE DE TECHNOLOGIE
DEPARTEMENT DU GENIE ELECTRIQUE ET
ELECTRONIQUE



MEMOIRE

Pour l'obtention du diplôme de :
MAGISTER NANOPHYSIQUE ET NANOTECHNOLOGIE

Intitulé :

**Effet tunnel, Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac,
Application au Maser à Ammoniac.**

Présenté par :

Mohammed El Amin BENFOULA

devant le Jury :

Mr LEMERINI Mostepha professeur à l'université de Tlemcen Algérie. Président du jury.

Mr BENABDELAH Sidi-Mohamed professeur à l'université de Tlemcen Algérie. Examineur.

Madame BENSAOULA Amaria professeur à l'université de Tlemcen Algérie. Examinatrice.

Madame. Amrani zoubida maître de conférences classe A de l'université Abou-Bekr Belkaid

Tlemcen Algérie. Encadreur

Remerciements

Je remercie ALLAH le Tout-Puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

Je tiens à exprimer d'abord toute ma gratitude à mon encadreur pour sa disponibilité et la qualité de l'encadrement, Madame Amrani zoubida de l'université Abou-Bekr Belkaid Tlemcen, ainsi que pour le temps et l'aide qu'elle m'a accordée tout au long de la réalisation de ce travail.

Mes remerciements s'adressent à Mr LEMERINI Mostepha et Mr BENABDELAH Sidi-Mohamed et Madame Bensooula Amaria professeurs à l'université de Tlemcen à l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail en acceptant d'être président du jury et examinateurs.

J'adresse également mes remerciements à tous les membres de Laboratoire de Simulation, Caractérisation et Développement des Micro systèmes (L.S.C.D.M) U.R.M.E.R.Université Abou-Bekr BELKAID Tlemcen.

Mes derniers mots s'adressent tout particulièrement à ma famille : mon père, ma sœur, mes frères, ma femme et mon fils malik et yousra surtout ma mère dont les encouragements et le soutien ont été indispensables à l'aboutissement de mes études, et que sans elle je n'aurai jamais pu réussir.

Dédicace

A ma chère mère

Pour son grand amour, ses sacrifices et toute l'affection qu'elle m'a toujours offerte.

A mon cher père

Pour sa patience et son soutien moral pour arriver à ce niveau.

Spécialement à ma femme pour ses encouragements, sa patience et son aide.

A ma sœur, mes frères et leurs familles.

A mes chers amis.

Je dédie ce modeste travail.

Amine.

TABLE DES MATIÈRES

Introduction générale

Chapitre I : Effet Tunnel

1 1. Introduction

1 2. Mécanique quantique

1 2 1. Historique

1 2 2. L'équation de Schrödinger

1 2 3. L'interprétation de la fonction d'onde

1 3. Effet tunnel

1 3 1. Franchissement de barrières de potentiel

1 3 2. États propre de l'hamiltonien

1 3 3. Conditions aux limites dans le cas d'un potentiel discontinu

1 3 4. Réflexion sur une marche de potentiel

1 3 5. Traversée d'une barrière de potentiel, effet tunnel

1 3 6. Simulation de l'effet tunnel

1 4. Application

1 4 1. Microscope à effet tunnel

1 4 2. Radioactivité

1 4 3. Diode à effet tunnel

1 4 4. Molécule d'ammoniac

1 5. Conclusion

Chapitre II :

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac.

2 1. Introduction

2 2. États stationnaires et des niveaux d'énergie

2 3. États localisés d'un côté du plan des atomes d'hydrogène

2 4. Formulation matricielle

2 5. Évolution temporelle d'un état initialement localisé

2 6. Orientation du moment dipolaire

2 7. Conclusion

Chapitre III

Application au Maser à Ammoniac.

3 .1 introduction

3 .2 Maser

3 .3 Notions élémentaires sur l'émission stimulée

3 .4 Le modelé de la molécule d'ammoniac

3.4.1 Restriction à un espace de Hilbert de dimension 2

3.4.2 Base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$

3.4.3 Base $\{|\psi_D\rangle, |\psi_G\rangle\}$

3 .5 Molécule NH₃ dans un champ électrique

3.4.1 Le couplage de NH₃ à un champ électrique

3.5.2 Niveaux d'énergie dans un champ fixe

3.5.2.1 Champ faible

3.5.2.2 Champ fort

3.5.3 Force subie dans un champ inhomogène

3 .6 Champ oscillant et effet maser

3 .7 Principe et applications du maser

3.7.1. Amplificateur

3.7.2. Oscillateur

3.7.3. L'horloge à ammoniac

3 .8 Conclusion

Conclusion Générale

Bibliographie

Résumé

Table des figures

Figure I.1 : Variation rapide du potentiel au voisinage de $x = 0$

Figure I.2 : Marche de potentiel

Figure I.3: Barrière de potentiel.

Figure I.3 : une barrière de largeur $1.8 \cdot 10^{-10}$ m .

Figure I.4 : Une barrière de largeur $3.6 \cdot 10^{-10}$ m.

Figure I.5: Principe du microscope à effet tunnel. On déplace une pointe au voisinage de la surface d'un cristal et on ajuste la distance de façon que le courant soit constant. Ceci donne une cartographie de la distribution électronique sur la surface.

Figure I.6: Représentation simplifiée de l'effet tunnel dans le STM.

Figure I.7: Le courant tunnel dépend de la densité d'états électroniques de la pointe et de l'échantillon.

Figure I.8: Modes de fonctionnement du microscope à effet tunnel.

Figure I.9 : Dépôt d'atomes par microscope à effet tunnel. Des atomes de fer (les pics) sont disposés en cercle sur un substrat de cuivre et forment des états résonants électroniques (les vagues) sur la surface du cuivre. D'après un cliché IBM (droits réservés).

Figure I 10. Radioactivité alpha.

Figure II 1. Structure de la molécule d'ammoniac. Figure II 2. Potentiel $V(x)$ dans lequel évolue l'atome d'azote; x est la distance de l'azote au plan des atomes d'hydrogène.

Figure II 3. Résolution graphique.

Figure II 4. Etat stationnaire ψ_S , pair.

Figure II 5. Etat stationnaire ψ_A , impair.

Figure II 6. Représentation des états droit ψ_D et gauche ψ_G .

Figure II 7. Les deux premiers niveaux d'énergie.

Figure II 8. Tracé de la densité de probabilité de présence $|\varphi(t, x)|^2$.

Figure III 1. Charles Townes et ses collègues ont été les premiers à construire un "maser", qui fonctionne dans la plage de fréquence micro-ondes.

Figure III 2. Mécanisme de pompage puis d'émission stimulée.

Figure III 3. Oscillation de la molécule d'ammoniac.

Figure III 4. Les deux configurations classiques de la molécule NH_3 et le dipôle électrique correspondant.

Figure III 5. Energies propres d'une molécule NH_3 dans un champ électrique.

Figure III 6. Stabilisation du faisceau $|\psi_+\rangle$ et divergence du faisceau $|\psi_-\rangle$ dans un champ électrique quadripolaire ($\mathcal{E}^2 \propto y^2 + z^2$).

Figure III 7. Oscillation de Rabi.

(a) : Probabilité de trouver la molécule dans l'état $|\psi_S\rangle$ en fonction du temps.

(b) : Courbe de résonance montrant la probabilité maximum de transition en fonction de la pulsation ω du champ externe.

Figure III 8. Schéma d'un dispositif de maser à NH_3 .

Figure III 9. La molécule d'ammoniac.

Figure III 10. La première horloge atomique, dévoilée au NBS, le bureau américain des étalons de mesure, en 1949. Elle fonctionnait grâce à l'absorption d'ondes radio par de l'ammoniac gazeux à la fréquence de 23 870 mégahertz. Le directeur du NBS, Edward Condon (à gauche) contemple un modèle de la molécule d'ammoniac, sous le regard intéressé de l'inventeur de l'horloge, Harold Lyon

Introduction Générale

La mécanique quantique a d'inattendu que l'on n'arrive pas jusqu'à présent à la mettre en défaut. La seule indication qu'une « nouvelle » forme de physique pourrait exister se trouve dans la cosmologie, et concerne les 10^{-43} premières secondes de l'univers. Cela contraste avec toutes les autres théories physiques. La physique quantique a germé au début du XXe siècle de l'interrogation des physiciens devant une quantité de faits expérimentaux qui s'accumulaient sans pouvoir être interprétés globalement. Interrogation extraordinairement ambitieuse et féconde qui en fait l'une des grandes aventures intellectuelles de l'humanité, peut-être la plus grande du XXe siècle.

Sa destinée est presque inattendue. Construite d'abord phénoménologiquement pour expliquer les lois du rayonnement, elle allait déboucher sur une explication complète de la matière, de la structure des atomes et des molécules. La théorie atomique cesse d'être source de bavardage, devient réalité, et cela frappe les esprits.

L'étendue de son champ d'application est également inattendue. Rapidement, toute la physique et toute la chimie deviennent quantiques. La théorie rend compte des atomes, de la structure moléculaire, mais aussi de la structure nucléaire, des propriétés des électrons dans les solides, de la conductibilité, des chaleurs spécifiques, etc. L'astrophysique, payée de retour, connaît un extraordinaire développement grâce à la théorie quantique. Celle-ci permet une compréhension profonde et fine du rayonnement, et ouvre des accès nouveaux et quantitatifs au cosmos, à sa composition, aux conditions physiques qui y règnent. La théorie quantique seule permet de comprendre certains états et processus cosmiques : formation et évolution d'étoiles, existence d'astres quantiques comme les naines blanches ou les étoiles à neutrons.

Par sa puissance analytique et prédictive, la physique quantique a permis de prévoir des effets dont les applications fabuleuses, depuis une cinquantaine d'années, de bouleverser d'innombrables secteurs de la technologie, d'ouvrir des voies nouvelles, de changer l'ordre de grandeur de ce qu'il était concevable de réaliser.

L'effet tunnel est l'une des conséquences les plus spectaculaires de la mécanique ondulatoire introduite dans les années 1923-1927 essentiellement par Louis de Broglie et Erwin Schrödinger l'origine de cet effet provient de ce qu'on a appelé la dualité onde corpuscule. A toute onde on peut associer des particules, par exemple, la lumière peut se décrire comme des ondes électromagnétiques ou se comporter comme un flux de photons, et inversement toute particule matérielle peut avoir des comportements relevant plutôt du domaine des ondes. La

probabilité qu'une particule traverse une barrière de potentielle est non nulle ! Cet effet, inconnu en physique classique, cette probabilité tend exponentiellement vers zéro si la barrière est très haute ou très étendue.

Il existe de nombreuses situations physiques où le potentiel auquel est soumise une particule possède plusieurs minima et présente l'allure d'une succession de puits. Dans le cas le plus simple, on a un puits double. Un exemple standard est fourni par la molécule d'ammoniac NH_3 si l'on s'intéresse à la position de l'atome d'azote N par rapport au plan défini par les trois atomes d'hydrogène H. On dit en général que la forme de la molécule est pyramidale. Ceci veut dire que l'atome N est en équilibre lorsqu'il se trouve à une distance déterminée des trois atomes H, et passe d'une position d'équilibre à l'autre par effet tunnel.

L'atome d'azote a tendance à attirer vers lui les électrons des trois atomes d'hydrogène, la molécule d'ammoniac possède un dipôle électrique proportionnel à la valeur moyenne $\langle X \rangle$ de la position de la particule fictive que nous avons étudiée. Ce dipôle est une fonction oscillante du temps et dans ces conditions la molécule d'ammoniac est susceptible d'émettre ou d'absorber du rayonnement électromagnétique à la fréquence d'inversion. Expérimentalement, la valeur de cette fréquence tombe dans le domaine des ondes centimétriques. En radioastronomie, on a pu ainsi mettre en évidence la présence de molécules d'ammoniac dans l'espace interstellaire.

La fréquence des deux premiers niveaux de vibration d'inversion de la molécule d'ammoniac est calculée par une résolution de l'équation de Schrödinger en se basant sur des outils mathématiques, des matrices, La programmation Maple, des approximations : KRÔNIG-PENEY, Développement Limités..., permettant des résultats les plus précis possibles.

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 plus adaptée à la bande de fréquence correspondant aux micro-ondes (24 GHz pour le MASER à ammoniac).

Le maser trouve rapidement des applications, en particulier l'amplification des ondes. Il représente également une alternative intéressante pour mesurer le temps avec une très grande précision, en raison de la qualité de son résonateur.

Chapitre I

Chapitre 1

Effet Tunnel

1 1.INTRODUCTION

La Physique Quantique est la théorie fondamentale décrivant les phénomènes se produisant au cœur de la matière. Elle a permis nombre d'applications technologiques –Maser, Laser, microscope à effet tunnel, supraconducteurs - mais elle est, avant tout, à l'origine d'une révolution complète dans notre conception du monde, notre rapport à la réalité et à notre définition même de "soi".

L'effet tunnel désigne la propriété que possède un objet quantique de franchir une barrière de potentiel, franchissement impossible selon la mécanique classique. Généralement, la fonction d'onde d'une particule, dont le carré du module représente l'amplitude de sa probabilité de présence, ne s'annule pas au niveau de la barrière, mais s'atténue à l'intérieur de la barrière, pratiquement exponentiellement pour une barrière assez large. Si, à la sortie de la barrière de potentiel, la particule possède une probabilité de présence non nulle, elle peut traverser cette barrière. Cette probabilité dépend des états accessibles de part et d'autre de la barrière.

Tout à bord Dans ce chapitre, nous décrirons les points importants de la mécanique quantique et l'équation de Schrödinger ensuite une brève description de la mathématique d'une onde, pour pouvoir traiter le fameux phénomène, *l'effet tunnel* et également étudier ces différents applications.

1 2. MECANIQUE QUANTIQUE

1 2 1. Historique

La naissance de la physique quantique s'est produite le 14 décembre 1900, lorsque Planck, devant la Société Allemande de Physique, proposa une formule simple en parfait accord avec les expériences sur le spectre du rayonnement du corps noir. Planck avait d'abord obtenu son résultat à partir d'arguments empiriques, mais s'était aperçu qu'on pouvait déduire le point central de son argumentation à partir de la thermodynamique statistique en faisant l'hypothèse curieuse que des oscillateurs mécaniques chargés, de fréquence ν , ne pouvaient émettre ou absorber de l'énergie lumineuse que par quantités discrètes (des « quanta » d'énergie $nh\nu$).

Planck comprit que le *quantum d'action* h , est une constante fondamentale :

$$h = 6,6261 \times 10^{-34} \text{ J s .}$$

Les quanta de Planck étaient mystérieux, mais son résultat étonnamment efficace. Jusqu'en 1905, pas plus la communauté scientifique que Planck lui-même n'apprécièrent la portée de sa découverte. A cette date, Einstein publie son célèbre mémoire Sur un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière [1], suivi d'une série d'articles fondamentaux où il relève et rectifie certaines incohérences dans les raisonnements de Planck.

Si l'on pousse les idées de celui-ci, il faut admettre que la lumière elle-même a des propriétés «quantiques », et Einstein introduit le concept de *quantum de rayonnement*, appelé *photon* par Lewis en 1926, particule qui, pour une lumière de fréquence ν ou de pulsation ω , a une énergie :

$$E = h\nu = \hbar \omega \quad \text{Avec } \hbar = h/2\pi = 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

Au passage, Einstein comprend l'explication et les lois de l'effet photoélectrique, découvert en 1887 par Hertz, et étudié systématiquement par Lenard entre 1899 et 1902, puis par Millikan. Le photon est également pourvu d'une impulsion :

$$p = \hbar k \quad |k| = 2\pi/\lambda$$

où k est le vecteur d'onde de l'onde électromagnétique, comme le prouveront en 1923 les expériences de Compton (diffusion des rayons X par les électrons libres d'une mince feuille d'aluminium).

Même si les quanta de Planck étaient mystérieux, ils étaient bien acceptés par la communauté scientifique, étant donné la qualité de son résultat. Au contraire, les quanta d'Einstein soulevèrent de sérieuses controverses qui persistèrent plusieurs années. Plusieurs physiciens considéraient l'idée comme absurde car en contradiction flagrante avec les équations de Maxwell qui décrivent l'énergie et l'impulsion du rayonnement comme des fonctions continues tant dans l'espace que dans le temps. Einstein en était bien conscient, mais il pensait que les mesures en optique ne concernaient que des moyennes dans le temps, et qu'il était concevable que les équations de Maxwell fussent insuffisantes dès lors que l'on avait affaire à des processus quasi-instantanés. Einstein qualifiait son hypothèse corpusculaire de « pas en avant révolutionnaire ».

Il avait compris la « dualité » de la manifestation des propriétés de la lumière qui peuvent être à la fois ondulatoires et corpusculaires. C'est la découverte primordiale, le véritable point de départ de la théorie quantique.

La seconde étape se situe pendant les années 1912–1914. Niels Bohr, en cherchant un modèle cohérent de la structure des atomes, effectue la synthèse entre le principe de combinaison des raies spectrales de Ritz, le modèle atomique de Rutherford (qui venait, en 1911, de découvrir l'existence du noyau), et les quanta de Planck et Einstein. Bohr postule que les énergies des édifices atomiques et moléculaires n'adoptent que des valeurs discrètes, et que l'émission ou l'absorption de lumière par ces édifices ne se fait que pour certaines fréquences lumineuses bien précises :

$$\nu_{if} = |E_i - E_f|/h$$

où E_i et E_f sont les énergies du système avant et après l'émission (ou l'absorption). Ayant eu fortuitement connaissance de la formule empirique de Balmer, Bohr devine une règle de quantification des énergies et développe en quelques semaines son célèbre modèle de l'atome d'hydrogène. Le mécanisme de l'émission et de l'absorption de la lumière restait obscur dans la théorie de Bohr. Il ne fut expliqué que plus tard, en particulier par Einstein. Cependant, dès 1914, les expériences de Franck et Hertz montraient directement la quantification des énergies dans les atomes.

Ainsi, l'histoire avait voulu que la quantification du rayonnement fût découverte avant celle de la matière. Cette dernière, cependant, semblait impliquer un caractère « discontinu » des lois de la nature qui heurtait la sensibilité de certains physiciens, et c'est avec enthousiasme qu'Einstein, entre autres, accueillit la remarquable hypothèse ondulatoire de

Louis de Broglie, en 1923. De même que la lumière présente un comportement corpusculaire, de même, suppose Louis de Broglie, les particules, par exemple l'électron, peuvent présenter un comportement ondulatoire. A toute particule de vitesse v et d'impulsion $p = mv$, de Broglie « associe » une onde, de longueur d'onde :

$$\lambda = h/p .$$

Cette hypothèse ondulatoire permettait d'entrevoir la quantification de la matière comme un phénomène d'ondes stationnaires, et restaurait la continuité étant désirée par Einstein.

Louis de Broglie s'était inspiré d'une série de travaux théoriques, notamment de Marcel Brillouin. Par ailleurs, il fréquentait le laboratoire de son frère Maurice de Broglie, et il s'étonnait d'entendre les physiciens parler du même être physique tantôt en tant qu'«électron», tantôt en tant que « rayon β » dans la radioactivité.

La théorie de la mécanique quantique dans son formalisme actuel s'est faite très rapidement entre 1925 et 1927, et apparait comme le fruit de la conjonction exceptionnelle des talents de physiciens et de mathématiciens comme Schrödinger, Heisenberg, Born, Bohr, Dirac, Pauli, Hilbert, Von Neumann, etc. Cette synthèse remarquable, suivie d'expériences cruciales qui allaient rapidement ancrer la nouvelle mécanique, provenait de tout un travail expérimental et théorique effectué dans le premier quart du XXe siècle, dont nous n'avons traité un de ces phénomènes appelé effet tunnel.

1 2 2. L'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui décrit l'évolution au cours du temps de la fonction d'onde d'un système physique. Elle prend la forme suivante :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

où H est l'opérateur hamiltonien (associé à l'énergie totale) du système considéré. Celui ci est la somme des opérateurs d'énergie cinétique et potentielle :

$$H(t) = T + V(t)$$

L'opérateur hamiltonien dépend donc du temps si les potentiels qui entrent en jeu dépendent eux-mêmes explicitement du temps. Lorsque l'opérateur H ne dépend pas du temps, on est ramené par séparation des variables spatiales et temporelle à une équation aux valeurs propres, appelée équation de Schrödinger stationnaire [2]. Par contre si l'hamiltonien est fonction du temps, on est obligé de résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps. C'est le cas par exemple lorsqu'on traite certains problèmes de manière semi-classique [3, 4] ou quand on étudie l'effet sur un atome ou une molécule d'un champ électrique extérieur variable [5]. Il est également parfois intéressant de résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps même si les potentiels ne dépendent pas du temps. On peut citer entre autres les problèmes de calcul de coefficients de transmission au travers de barrières de potentiel [6].

On peut montrer, d'après les propriétés de l'équation de Schrödinger, qu'il existe un opérateur, appelé opérateur d'évolution qui, appliqué à l'état d'un système à un instant donné, fournit l'état du système à un instant ultérieur [2]. La résolution de l'équation de Schrödinger est alors ramenée à la recherche de cet opérateur qui est lui-même solution d'une équation, appelée équation d'évolution.

Hormis quelques cas extrêmement rares [7], il n'est en général pas possible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger dépendant du temps. On est obligé de faire appel à des méthodes numériques.

L'équation de Schrödinger sous sa forme "time dependante", pour une particule libre, dans un état quelconque d'énergie (cas le plus simple):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)$$

Dans cette équation:

- la fonction $\psi(\vec{r}, t)$ représente la fonction d'ondes,
- \vec{r} , la position.

Lorsque la particule est immergée dans un potentiel scalaire U (par exemple dans un champ électrique), l'équation de Schrödinger devient:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r})\right) \psi(\vec{r}, t)$$

l'opérateur hamiltonien du système devient:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$$

Pour une particule évoluant dans un potentiel constant ou nul, il existe des états d'énergie dits «stationnaires»[8]. Dans ces états, la densité de probabilité de présence $||\psi||^2$ est indépendante du temps.

Dans ce cas, la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ répond à la contrainte $||\psi(\vec{r}, t)||^2 = ||\psi(\vec{r})||^2$.

La forme des solutions de cette équation sont $\psi_n(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{i\alpha t}$ où $\psi_n(\vec{r}, t)$ décrit l'état stationnaire d'énergie E_n . Si l'on reporte cette écriture dans l'équation de Schrödinger, on obtient:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(\vec{r}, t) = -\hbar\alpha\psi_n(\vec{r}, t) = H\psi_n(\vec{r}, t)$$

Comme on sait que $H\psi_n = E_n\psi_n$, on obtient la valeur de α :

$$\alpha = -\frac{E_n}{\hbar}$$

d'où finalement l'équation:

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) \exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right)$$

Que l'on écrit sous la forme condensée:

$$H_n\psi(\vec{r}) = E_n\psi(\vec{r})$$

1 2 3. L'interprétation de la fonction d'onde

Rappelons tout d'abord que l'équation de Schrödinger est un postulat. Elle ne découle d'aucune démonstration formelle ni d'aucun axiome. Schrödinger a postulé cette équation pour représenter les états d'un système quantique. Elle a été confrontée à l'expérience et celle-ci a

montré que, jusqu'à présent, on pouvait déduire toutes les données expérimentales de l'équation.

Les physiciens font aussi un autre postulat : la fonction d'onde d'un système, que l'on note génériquement ψ , contient toute l'information que l'on peut connaître du système. Il n'existe pas d'autre moyen d'aborder les propriétés de ce système. Du moins, dans l'état actuel des connaissances.

L'équation de Schrödinger est une équation aux valeurs propres pour l'opérateur hamiltonien du système. Ses solutions sont des fonctions propres [9] (ou des combinaisons linéaires de fonctions propres) de l'hamiltonien. Encore faut-il donner un sens physique à ces fonctions propres, que l'on nomme ψ ou fonction d'onde.

L'interprétation communément admise aujourd'hui est l'interprétation probabiliste proposée par Born et Jordan en 1926. C'est celle qu'on va présenter très succinctement. Il en existe d'autres, plus ou moins exotiques, dont on ne parlera pas.

Essayons de suivre le raisonnement. Plusieurs expériences, en particulier, les fentes de Young, laissent à penser que la fonction d'onde pouvait avoir un rapport plus ou moins lointain avec une probabilité de présence de la particule dans un endroit donné. Cette supposition découle de la mécanique ondulatoire de Broglie.

Cette supposition présente quand même un léger problème : ψ est une fonction complexe alors qu'une probabilité est réelle et même restreinte à des valeurs comprises entre 0 et 1. Sur le plan physique, il y a aussi un problème: pour expliquer la manip des fentes d'Young, il faut supposer que la fonction d'onde change de signe! Il ressort donc que ψ ne peut être une probabilité.

En électromagnétisme, l'intensité des franges d'interférence est donnée par le carré des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} . Born et Jordan ont donc eu l'idée d'étudier le carré du module de ψ , $|\psi|^2$.

Ils ont postulé (encore une fois...) que la probabilité de présence d'une particule dans un volume d^3r centré autour d'un point défini par le vecteur r est donné par:

$$dP(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$$

Cette équation est le fondement de l'interprétation probabiliste de l'équation de Schrödinger. $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ est donc une densité de probabilité, avec une dimension L^{-3} dans l'espace classique.

La fonction ψ désigne une amplitude de probabilité de présence, toujours par analogie avec l'amplitude des champs électromagnétiques. Bien sur, ce postulat à quelques conséquences sur la nature de ψ .

L'une de ces conséquences est qu'elle doit posséder des propriétés d'intégrabilité bien particulières. On voit mal l'intégrale diverger ou ne pas être normalisée à 1, cela ferait tâche pour une probabilité. Il faut aussi que cette intégrale soit finie sur un domaine fini. Cela lui interdit en passant de diverger à l'infini. On définit deux critères:

- le critère de normalisabilité, qui fait apparaître la quantification des états liés (l'intégrale ne diverge pas à l'infini)
- le critère de normalisation, qui exprime le fait assez trivial (en apparence) qu'une particule doit bien être quelque part (la probabilité de la trouver n'importe où dans le domaine est de 1)

Ce qui se traduit par l'équation suivante:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

Une autre conséquence importante est que l'on doit disposer d'une équation de conservation. En effet, l'évolution de la probabilité au cours du temps est analogue à l'écoulement d'un fluide sans perte [10]. Si la probabilité de présence augmente dans une région de l'espace, elle doit diminuer ailleurs! Aussi, on doit observer l'analogie d'un courant, un courant de "probabilité" qui s'écoule de la région de probabilité de présence la plus élevée mais la région de probabilité de présence la moins élevée. Ça tombe bien, car Schrödinger avait déjà établi que son équation prévoyait une équation de conservation et donc la notion de courant!

1 3. Effet tunnel

L'effet tunnel est l'une des conséquences les plus spectaculaires de la mécanique ondulatoire introduite dans les années 1923-1927 essentiellement par Louis de Broglie et Erwin Schrödinger l'origine de cet effet provient de ce qu'on a appelé la dualité onde corpuscule [11]. A toute onde on peut associer des particules: par exemple, la lumière peut se décrire comme des ondes électromagnétiques ou se comporter comme un flux de photons, et inversement toute particule matérielle peut avoir des comportements relevant plutôt du domaine des ondes.

Imaginez une balle que vous lanciez contre un mur. Soit elle est lancée assez fort, et elle passe au dessus du mur, soit elle n'est pas lancée assez fort, et elle rebondit. La même chose existe, pour un électron essayant de sortir du métal qui le contient. Si on le lance assez fort, il franchit la barrière et retombe de l'autre côté (autrement dit, si on lui impose un champ électrique assez fort, il est capable de sortir du métal pour traverser le vide jusqu'à un autre métal ou matériau conducteur).

Mais là où une grosse différence intervient, c'est si vous ne lancez pas assez fort votre électron. A la différence d'une balle, un électron est une sorte de nuage, une partie de ce nuage peut passer le mur tandis que l'autre va rebondir. C'est la différence avec la balle. Confronté à une barrière, un électron a donc la possibilité de se scinder en deux : une partie franchit la barrière, et l'autre non.

Mais un tel état scindé ne dure pas, un électron ne reste pas longtemps scindé, parce que les deux parties de l'électron interagissent avec le matériau dans lequel elles se trouvent. Et il se passe alors que l'une des deux parties fond, tandis que l'autre grossit, l'électron se retrouve alors entier d'un côté ou de l'autre, il peut être passé ou pas selon la partie qui grossit.

En gros, la partie restée en arrière du mur a la possibilité d'être "téléportée" avec l'autre, comme si il y avait eu un tunnel dans le mur par lequel elle serait passée. Alors qu'elle n'est passée nulle part ! Ceci ne s'applique qu'à des obstacles de taille infinitésimale.

1 3 1. Franchissement de barrières de potentiel

Dans cette partie, nous considérons, à titre d'exemple. Quelques cas de mouvement de particules dans des potentiels à une dimension $V(x)$ formés de marches successives. La

résolution de l'équation de Schrödinger est la même que dans un problème de physique ondulatoire classique.

Nous nous intéressons à la propagation d'ondes planes dans ces potentiels.

Dans les régions où l'énergie cinétique est positive, les états propres de l'hamiltonien se présentent soit comme une onde plane e^{ikx} , soit comme superposition de deux ondes planes $e^{\pm ikx}$. Une fois que les états propres connus, on peut interpréter les résultats de deux façons équivalentes, qui mènent à des conclusions identiques :

1. On peut considérer qu'une onde plane représente un flux ininterrompu de particules[12]. On calcule alors les coefficients de réflexion et de transmission à partir des rapports de ces deux flux.
2. Après avoir fait le calcul pour une onde plane quelconque, on peut, par superposition, fabriquer un paquet d'onde dont on étudie l'évolution.

Dans ce qui suit nous considérons la première interprétation, mais il est utile de garder en tête la seconde, ne serait-ce que pour acquérir une intuition de la physique des paquets d'ondes.

1 3 2. États propre de l'hamiltonien

Plaçons-nous dans une région de l'espace où le potentiel est constant $V(x) = V$; l'équation de Schrödinger indépendante du temps a la forme simple :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (V - E)\psi(x) = 0 \quad \dots(1)$$

Pour simplifier, nous omettons ici l'indice α dans la fonction $\psi_\alpha(x)$ et dans l'énergie E_α . Cette équation s'intègre immédiatement :

$$\psi(x) = Ae^{ipx/\hbar} + A'e^{-ipx/\hbar}$$

où les A et A' sont des constantes et p est relié à E par la relation :

$$p^2/2m = E - V$$

On remarque que :

1. Si $E - V > 0$, p est réel et la fonction d'onde se présente sous forme d'une superposition d'ondes planes monochromatiques se dirigeant vers la droite ou vers la gauche :

$$\psi(x) = Ae^{(ipx-Et)/\hbar} + A'e^{-(ipx-Et)/\hbar}$$

La particule se propage librement dans cette région, p est le module de son impulsion, et $p^2/2m$ est son énergie cinétique.

2. Si $E - V > 0$, la quantité $p^2/2m$ est négative et la fonction d'onde est une somme d'exponentielles réelles. Classiquement, la particule ne peut pas pénétrer dans une région où son énergie totale est inférieure à l'énergie potentielle. Quantiquement, comme nous allons le voir, si une particule ne peut pas passer librement dans une telle région, elle y a néanmoins une probabilité de présence non nulle.

1 3 3. Conditions aux limites dans le cas d'un potentiel discontinu

Pour faciliter les calculs, au cours de ce chapitre et des chapitres suivants, nous substituerons au potentiel réel des formes simplifiées soit des discontinuités, soit des valeurs infinies. On doit alors imposer à la fonction et à sa dérivée des conditions de continuité, qui sont des conséquences directes de l'équation différentielle.

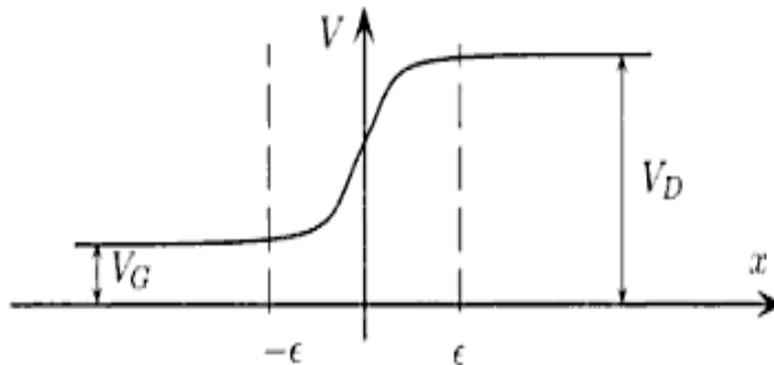


Figure 1.1 : Variation rapide du potentiel au voisinage de $x = 0$

Soit un potentiel $v(x)$ qui subit au voisinage de $x = 0$ une variation rapide (Figure.1). En intégrant l'équation différentielle de $x = -\epsilon$ à $x = +\epsilon$, on trouve :

$$\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} (v(x) - E)\psi(x)dx.$$

Lorsque l'intervalle 2ϵ sur lequel le potentiel varie de V_G à V_D tend vers 0, l'intégrale tend vers zéro. La dérivée ψ' de la fonction d'onde est donc continue, ainsi, bien entendu, que la fonction d'onde elle-même.

Cette propriété se démontre rigoureusement en théorie des distributions :

Si ψ était discontinue en $x = 0$, on pourrait l'écrire sous la forme $\psi(x) = \varphi(x) + b\theta(x)$, où $\varphi(x)$ est continue, θ est la fonction de Heaviside et b la discontinuité de ψ . Donc ψ'

contiendrait un terme $b\delta(x)$ et ψ'' un terme $b\delta'(x)$. Or, l'équation $\psi'' = 2m(V - E)\psi/\hbar^2$ imposerait immédiatement $b = 0$ (aucun terme dans le membre de droite ne comprenant $b\delta'(x)$). ψ doit donc être continue, et il en va de même pour ψ' .

Cela est valable pour un saut de potentiel fini. Nous étudierons par la suite des discontinuités de potentiel (saut infini, fonction δ) pour lesquelles la fonction d'onde est continue.

1 3 4. Réflexion sur une marche de potentiel

Considérons le potentiel de la figure $V = 0$ pour $x < 0$, $V = V_0 > 0$ pour $x \geq 0$

Classiquement, on doit considérer deux cas :

- Si la particule venant de la gauche a une énergie supérieure à V_0 , elle poursuit son chemin vers la droite.
- si son énergie est inférieure à V_0 , la particule rebondit vers la gauche.

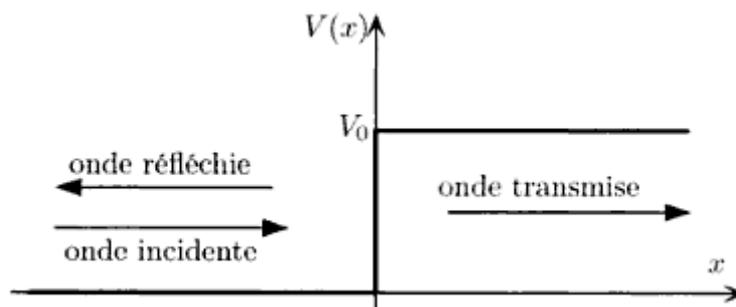


Figure I.2 : Marche de potentiel

Dans le problème quantique, considérons une solution de la forme c'est-à-dire :

$$\psi(x, t) = \psi(x) \exp(-iEt/\hbar)$$

Où E est l'énergie, et posons :

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

De même qu'en physique classique, on doit considérer deux cas :

Cas 1 : $E < V_0$. Posons :

$$k' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar.$$

La forme générale de la solution de l'équation différentielle est, à un facteur multiplicatif près,

$$x < 0 : \psi(x) = e^{ikx} + \xi e^{-ikx} ; x > 0 : \psi(x) = \beta e^{k'x} \dots \dots \dots (2)$$

Pour $x > 0$, nous n'avons gardé que l'exponentielle décroissante pour des raisons de normalisabilité (il n'est pas possible de normaliser une superposition de fonctions croissant exponentiellement à l'infini).

Pour $x < 0$, nous avons normalisé à 1 le terme e^{ikx} qui représente l'onde plane incidente, progressive vers la droite. Les conditions de continuité de ψ et ψ' nous donnent :

$$1 + \xi = \beta \quad , \quad ik(1 - \xi) = k'\beta.$$

Dont nous déduisons :

$$\xi = \frac{k - ik'}{k + ik'}$$

On note en particulier que $|\xi|^2 = 1$, ce que signifie que l'onde réfléchiée a la même intensité que l'onde incidente : il y a réflexion totale de l'onde, ce qui est à rapprocher du résultat classique. On notera cependant que la fonction d'onde est non nulle à l'intérieur de la marche de potentiel : elle y exponentiellement décroissante et la distance de pénétration moyenne est proportionnelle à $\hbar/\sqrt{2m(E - V_0)}$. Ce que l'on rapprochera de l'effet de peau en électromagnétisme. Cette distance de pénétration s'annule dans les trois limites :

$$\hbar \rightarrow 0, m \rightarrow \infty, V_0 - E \rightarrow \infty,$$

ce qui est conforme à notre attente dans la limite classique :

Cas 2 : $E > V_0$. Posons :

$$k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$$

La solution générale de (1) s'écrit :

$$\begin{aligned} X < 0 & : \quad \psi(x) = \xi_+ e^{ikx} + \xi_- e^{-ikx}. \\ X > 0 & : \quad \psi(x) = \beta_+ e^{ik'x} + \beta_- e^{-ik'x}. \end{aligned}$$

La continuité de ψ et ψ' en $x = 0$ donne deux relations entre les quatre coefficients ξ_{\pm}, β_{\pm} :

$$\xi_+ + \xi_- = \beta_+ + \beta_- \quad , \quad k (\xi_+ + \xi_-) = k' (\beta_+ - \beta_-).$$

Ce qui permet d'exprimer deux des coefficients, comme ξ_- et β_+ , en fonction des deux autres ξ_+ et β_- comme l'interprétation de la fonction d'onde reste la même si on la multiplie par une constante (on ne peut de toute façon la normaliser), on peut poser un des coefficients égal à 1, comme nous l'avons fait en (2). Il nous reste un coefficient arbitraire, ce qui illustre le principe de superposition. En effet, deux cas peuvent se présenter $E > V_0$:

- (i) on peut envoyer une particule de la gauche (e^{ikx}) et obtenir une onde réfléchie ($e^{-ik'x}$), et une onde transmise ($e^{ik'x}$) auquel cas $\beta_- = 0$;
- (ii) On peut à l'inverse, envoyer une particule de la droite ($e^{-ik'x}$) et voir une onde réfléchie (e^{ikx}) et une onde transmise (e^{-ikx}). auquel cas $\xi_+ = 0$.

La solution générale de (1) est une superposition linéaire arbitraire de ces deux solutions particulières. Considérons la solution (i) et posons $\xi_+ = 1$ et $\beta_- = 0$ de façon que l'amplitude de l'onde incidente de la gauche soit normalisée à 1, et qu'à droite il n'y ait qu'une onde transmise. On obtient :

$$\xi_- = \frac{k-k'}{k+k'} \quad , \quad \beta_+ = \frac{2k}{k+k'} \dots \dots \dots (5)$$

On remarque que le coefficient de réflexion $|\xi_-|^2$ n'est jamais nul. Cela est contraire à la mécanique classique où la particule passe toujours à droite si son énergie est supérieure à V_0 ; quantiquement il y a une probabilité $|\xi_-|^2$ que la particule soit réfléchie.

Pour interpréter physiquement les résultats (5), calculons les courants de probabilité J_i, J_r et J_t associés respectivement aux ondes incidente (e^{ikx}) , réfléchie ($\xi_- e^{-ikx}$), et transmise $\beta_+ (e^{ik'x})$.

On obtient :

$$J_i = \frac{\hbar k}{m} \quad J_r = \frac{\hbar k}{m} |\xi_-|^2 \quad J_t = \frac{\hbar k'}{m} |\beta_+|^2 \quad .$$

On vérifiera en utilisant (5) que $J_i = |J_r| + J_t$, ce qui signifie que le courant est conservé. Comme on s'y attend dans un état stationnaire unidimensionnel. On définit ainsi des coefficients de réflexion R et de transmission T pour la barrière :

$$R = \frac{|J_r|}{J_i} = |\xi_-|^2 \qquad T = \frac{J_t}{J_i} = |\beta_+|^2 \frac{k'}{k},$$

avec $R + T = 1$

On pourra s'étonner de ce que le coefficient de réflexion $|\xi_-|^2$ ne s'annule pas dans la limite classique $\hbar \rightarrow 0$. Cela est dû au choix de notre potentiel abrupt en marche d'escalier, qui correspond à une force infinie ($-V_0\delta(x)$) en $x = 0$. Pour des potentiels plus lentement variable, donc plus réalistes, on retrouve bien le passage à droite pour $E > V_0$ et $\hbar \rightarrow 0$. Par exemple, pour un potentiel $V(x) = V_0/(1 + e^{-\alpha x})$, qui devient carré pour $\alpha \rightarrow +\infty$, le coefficient de réflexion est proportionnel à $R \sim \exp(-4\pi\sqrt{2mE}/(\alpha\hbar))$, qui s'annule bien pour α fini lorsque $\hbar \rightarrow 0$. Mais garde une valeur constante si l'on prend d'abord la limite $\alpha \rightarrow \infty$.

1 3 5. Traversée d'une barrière de potentiel, effet tunnel

Considérons le modèle unidimensionnel, une barrière de potentiel représentée sur la figure et supposons que l'énergie du faisceau incident soit inférieure à V_0 , si $E < V_0$, on sait que classiquement la particule ne franchit pas cette barrière de potentiel.

Examinons le résultat quantique. Posons encore $k' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. On

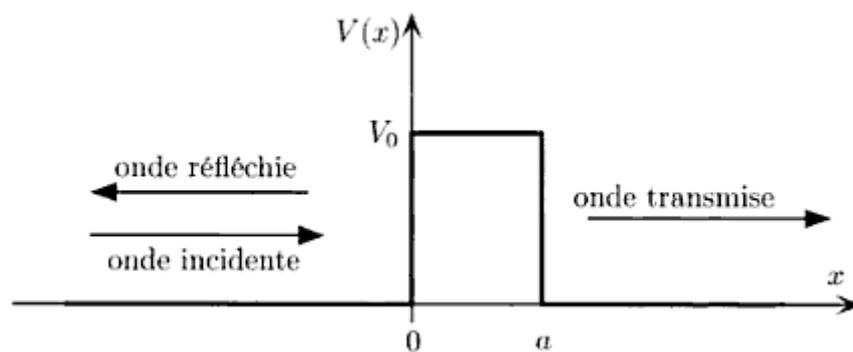


Figure I.3: Barrière de potentiel.

On cherche une solution de (1) de la forme :

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \xi e^{-ikx} & x < 0 \\ \gamma e^{-k'x} + \delta e^{k'x} & 0 \leq x \leq a \\ \beta e^{ikx} & a < x \end{cases}$$

Comme précédemment, nous considérons le cas d'une onde venant de la gauche. Les conditions de continuité pour ψ et ψ' donnent :

$$\begin{cases} 1 + \xi = \gamma + \delta \\ ik(1 - \xi) = k'(\delta - \gamma) \end{cases} \quad \begin{cases} \gamma e^{-k'a} + \delta e^{k'a} = \beta e^{ika} \\ k'(\delta e^{k'a} - \gamma e^{-k'a}) = ik\beta e^{ika} \end{cases}$$

De cela on déduit :

$$\beta = \frac{4ikk'e^{-ika}}{(k + ik')^2 e^{k'a} - (k - ik')^2 e^{-k'a}}$$

Dans le cas ou $k'a \gg 1$, qui nous intéressera, on a simplement :

$$|\beta|^2 \approx \frac{16k^2 k'^2}{(k^2 + k'^2)^2} e^{-2k'a}$$

La probabilité $|\beta|^2$ que la particule traverse la barrière est non nulle ! Cet effet, inconnu en physique classique, est appelé *effet tunnel*. On note que cette probabilité tend *exponentiellement* vers zéro dans les limites suivantes :

- a) $\hbar \rightarrow 0, m \rightarrow \infty$: limite classique.
- b) $(V_0 - E) \rightarrow \infty$: barrière très haute.
- c) $a \rightarrow \infty$: barrière très étendue.

1 3 6. Simulation de l'effet tunnel

Pour simuler l'effet tunnel, nous allons nous placer dans la situation expérimentale où un faisceau d'électrons homogène frappe une barrière de potentiel de hauteur V_0 et de largeur a . L'énergie des électrons incidents sera notée E , et bien sur $E < V_0$.

Nous considérerons que les électrons ne sont pas relativistes, histoire de pouvoir utiliser Schrödinger!

Classiquement, on définit un repère XOV , la marche gauche de la barrière de potentiel étant centrée sur l'origine du repère, c'est plus facile pour les calculs. Toujours aussi classiquement, on décide que le faisceau d'électrons proviendra de la gauche du repère, de $x = -INF$.

Nous allons découper l'espace 1D en trois régions et poser l'équation de la fonction d'onde solution de Schrödinger, propre à chaque région, comme vous avez appris à le faire en cours:

1. la région 1, pour $x < 0$, $\psi(x) = \exp(i * k * x) + \xi * \exp(-i * k * x)$
2. la région 2, pour $0 < x < a$, $\psi(x) = \gamma * \exp(i * k' * x) + \delta * \exp(-i * k' * x)$
3. la région 3, pour $x > a$, $\psi(x) = \beta * \exp(i * k * x)$

Dans ces équations :

- $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $k' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, avec m masse de l'électron.
- ξ, γ, δ , et β , les coefficients recherchés.
- Dans la mesure où le potentiel est fini partout, on ajoute à ces équations les conditions de continuité de la fonction d'onde et de la dérivée de la fonction d'onde.

On s'intéresse aussi au coefficient de transmission T , c'est à dire la proportion d'électrons qui ont traversé la barrière de potentiel par effet tunnel. Dans notre cas, on a $T = |\beta|^2$.

paramètres de la simulation

`me := 9.1e-31: # masse de l'électron (USI)`

`V0 := 10*1.6e-19: # hauteur de la barrière de potentiel (10 eV en USI)`

`a := 1.8e-10: # largeur de la barrière de potentiel (USI)`

`h := 1.055e-34: # hbarre`

L'énergie de l'électron et de sa fréquence

`En := 6*1.6e-19: # énergie de l'électron incident (6 eV)`

`w := E/h: # fréquence de l'onde associée à l'électron`

Voilà, le cadre est fixé, nous avons toutes les informations nécessaires pour écrire un petit programme qui va nous tracer l'évolution de la fonction d'onde avant la barrière, dans la barrière et après la barrière, puis nous calculer T .

Le programme de simulation est écrit en Maple, ce qui simplifie grandement l'écriture par rapport à un programme C!

La programmation Maple n'appelle pratiquement pas de commentaires, tant elle est conforme aux données de spécification indiquées ci-dessus. Si, peut être à signaler les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée dans l'appel de solve(). Ou encore l'usage de la fonction piecewise pour définir la barrière de potentiel, une fonction continue par morceaux.

On laissera le programme le calculer! Il sera intéressant de faire varier la largeur de la barrière a , pour étudier l'influence de a sur T .

Les résultats :

Voici l'allure de la fonction d'onde pour une largeur de barrière de 1.8×10^{-10} m. On distingue bien le comportement de l'onde incidente avant, pendant et après le passage de la barrière. En mécanique classique, il n'y aurait aucun signal à droite de la barrière. En quantique, le signal est affaibli mais existe toujours!

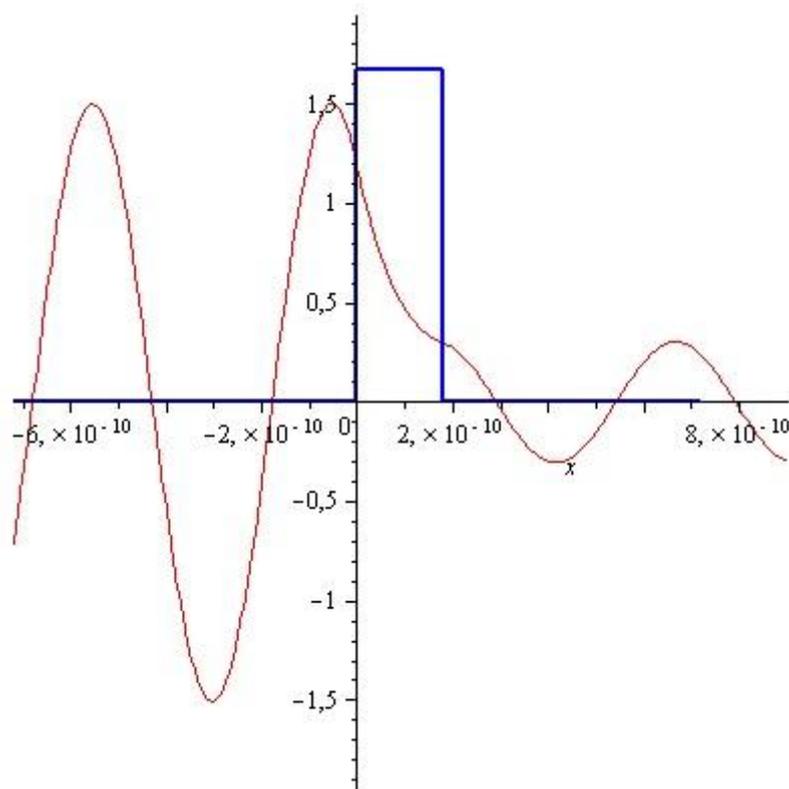


Figure I.3 : une barrière de largeur 1.8×10^{-10} m .

La valeur du coefficient de transmission T calculée à partir des paramètres de la simulation est de $T = 0.092$ pour une largeur de barrière de 1.8×10^{-10} m.

Pour une largeur de barrière de 3.6×10^{-10} m, le coefficient de transmission tombe à 0.002, soit une atténuation d'un ordre de grandeur pour un doublement de la largeur, et la fonction d'onde devient:

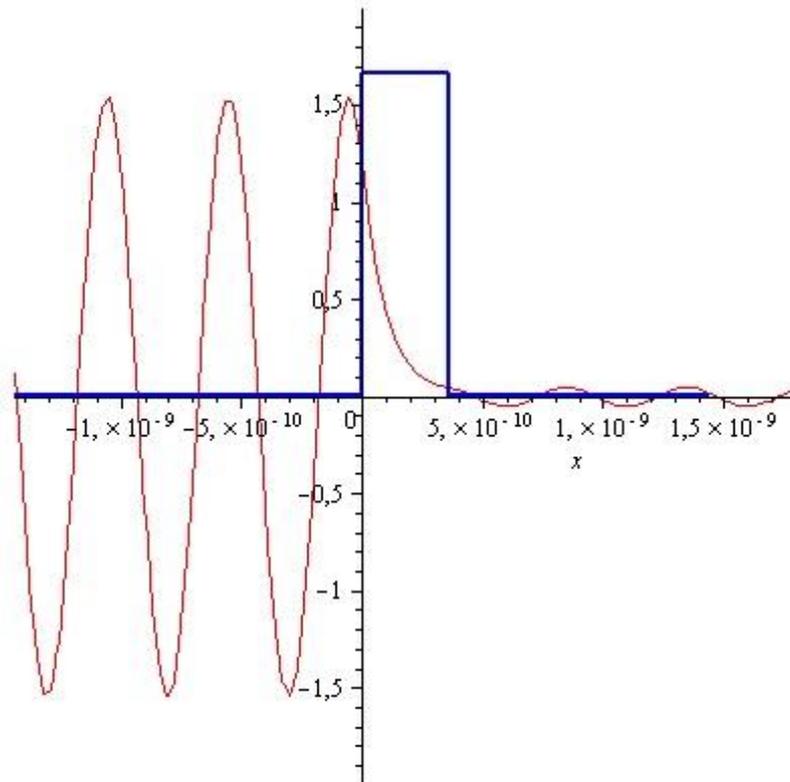


Figure I.4 : Une barrière de largeur 3.6×10^{-10} m.

Il est important de savoir la forte influence de la largeur de la barrière sur la proportion d'électrons qui traversent la barrière.

1 4. Application

Il faut dire que c'est une conséquence assez troublante de la mécanique quantique et plus précisément de l'équation de Schrödinger, mais qui est vérifiée tous les jours!

Ses conséquences et applications sont nombreuses:

- Gamow a expliqué, en 1928, la radioactivité alpha comme étant la sortie par effet tunnel d'une particule alpha d'un noyau lourd. La frontière du noyau forme une barrière de potentiel, que la particule alpha franchit avec une probabilité plus ou moins grande, dépendante du type de noyau. Plus la probabilité est faible, plus la demi-vie du noyau est grande (on verra en quoi la largeur de la barrière intervient dans la probabilité de transmission)
- la plupart des semi-conducteurs sont dits 'à effet de champ': ils utilisent l'effet tunnel! Il existe même un type de diode dit 'à effet tunnel'.
- L'effet tunnel est exploité pour construire un microscope particulier qui permet de "voir" les atomes. C'est le microscope à effet tunnel.

1 4 1. Microscope à effet tunnel

Une application très importante de l'effet tunnel est le microscope à effet tunnel. Un microscope à effet tunnel est un microscope mesurant un courant tunnel résultant de l'application d'une différence de potentiel entre une pointe métallique et une surface conductrice que constitue l'échantillon.

L'idée de base est d'approcher une pointe métallique, très près de la surface afin de collecter un courant, appelé courant tunnel. En simplifiant, l'intensité du courant tunnel dépend exponentiellement de la distance pointe échantillon[12]. Typiquement, le courant qui s'établit entre la pointe et la surface a une intensité de l'ordre du nano-ampère.

Le courant tunnel est multiplié par 10 quand la pointe s'approche de la surface de 0,1 nm. Les déplacements de la pointe dans les trois directions de l'espace (X, Y, Z) sont contrôlés par des quartz piézo-électriques. Une tension est appliquée sur chaque céramique piézo-électrique provoquant ainsi une contraction ou une dilatation de celle-ci suivant la polarité. En déplaçant la sonde le long de la surface à l'aide des céramiques piézoélectriques X et Y par un balayage point par point, on obtient une série de profils d'isointensité pointe/surface ; le long de la direction Z, une boucle d'asservissement oblige la pointe à se déplacer normalement à la surface pour maintenir un courant tunnel constant.

Pour atténuer les effets des vibrations qui pourraient perturber la résolution, le microscope repose sur un coussin en mousse, déposé sur une plaquette en marbre supportée par des pieds en caoutchouc. Enfin le dispositif est abrité par une cloche en plexiglas qui permet de réduire les courants d'air perturbateurs autour de la pointe.

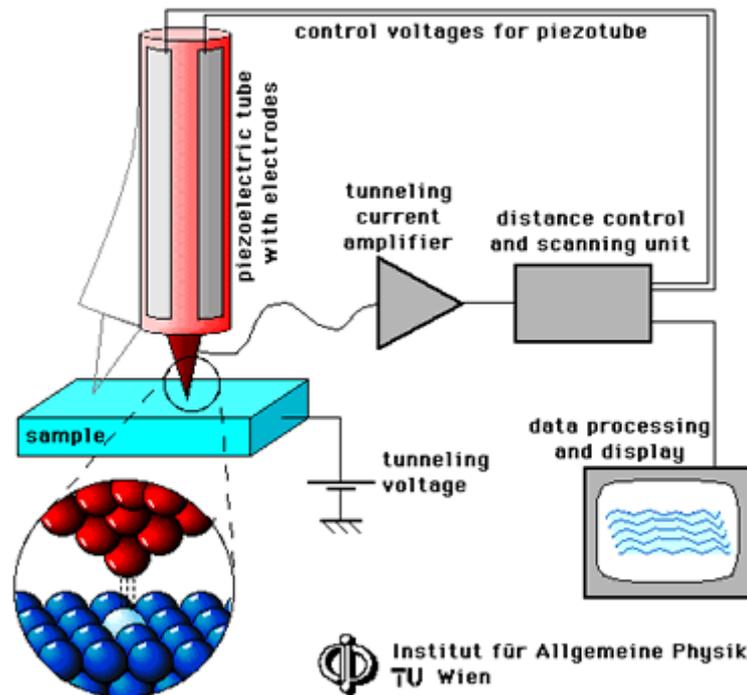


Figure I.5: Principe du microscope à effet tunnel. On déplace une pointe au voisinage de la surface d'un cristal et on ajuste la distance de façon que le courant soit constant. Ceci donne une cartographie de la distribution électronique sur la surface.

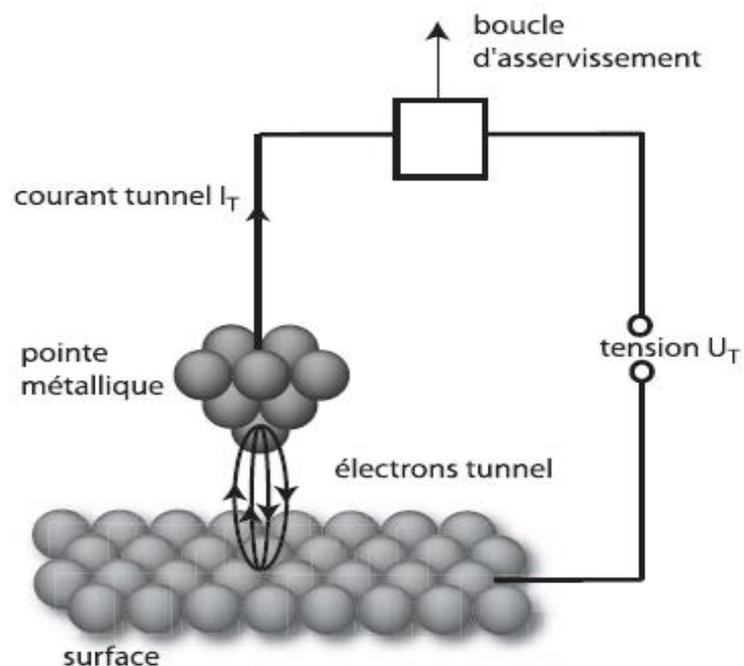


Figure I.6: Représentation simplifiée de l'effet tunnel dans le STM

Il existe différents modes de fonctionnement :

- balayage à courant constant (*figure I.8 A*): le courant mesuré est comparé à chaque instant au courant de consigne de la boucle d'asservissement. Si le courant est plus faible que la consigne alors la pointe s'approche de la surface dans le cas contraire elle s'éloigne de la surface.

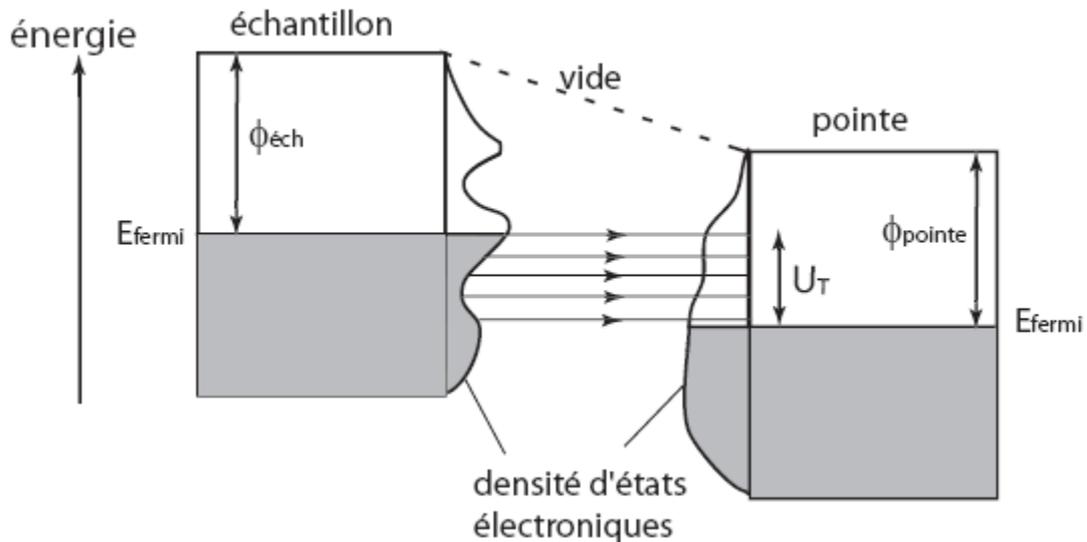
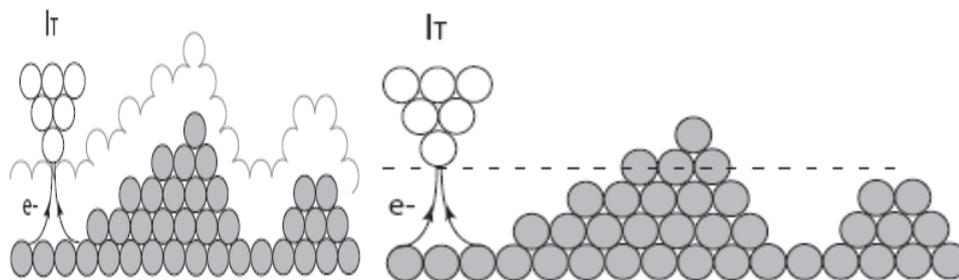


Figure I.7: Le courant tunnel dépend de la densité d'états électroniques de la pointe et de l'échantillon.



A: courant constant

B: hauteur constante

Figure I.8: Modes de fonctionnement du microscope à effet tunnel.

On enregistre alors le déplacement de la pointe.

- balayage à hauteur constante (*figure I.8 B*): dans ce cas, il n'y a plus de consigne de courant (la boucle d'asservissement est ouverte) et c'est le courant tunnel qui est mesuré. Pour ce mode de mesure on doit s'assurer au préalable que la surface est parfaitement plate pour éviter de détériorer la pointe.

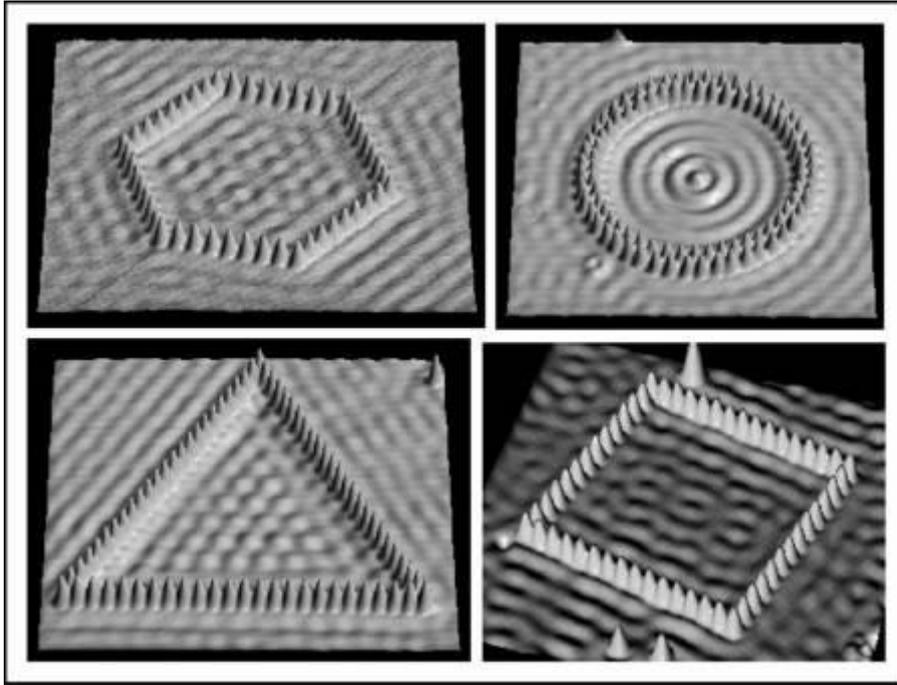


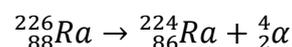
Figure I.9 : Dépôt d'atomes par microscope à effet tunnel. Des atomes de fer (les pics) sont disposés en cercle sur un substrat de cuivre et forment des états résonants électroniques (les vagues) sur la surface du cuivre. D'après un cliché IBM (droits réservés).

A partir d'un phénomène quantique, l'effet tunnel, le STM permet de sonder localement les propriétés d'une surface. Avec une résolution atomique et à température ambiante, le microscope à effet tunnel permet de rendre compte de la densité électronique et d'envisager la topographie de surface conductrice. L'accès à la structure d'une surface demande donc de savoir interpréter des clichés de densité électronique. On notera que les contraintes principales sont liées à la température et aux vibrations, la STM exige donc des conditions expérimentales particulières pour pouvoir s'affranchir de phénomènes perturbateurs tels les dérives thermiques.

1 4 2. Radioactivité

Pour des noyaux ayant un nombre de nucléons devenant trop important, la répulsion coulombienne entre protons prend des valeurs indicatives par rapport à l'interaction forte qui assure la cohésion du noyau. On assiste au phénomène de saturation, qui donne lieu à la désintégration qui est un cas particulier d'une fission spontanée.

Par exemple :



La particule α est émise avec une énergie de $4,78 \text{ MeV}$.

Si on schématise le potentiel auquel est soumise la particule en fonction de sa distance au noyau, on voit une barrière de potentiel très grande devant l'énergie avec laquelle la particule sort du noyau. Gamow a proposé une explication à ce phénomène en 1928. Il suppose que la particule α pré-existe dans le noyau et cogne sur les parois. Elle a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel par effet tunnel.

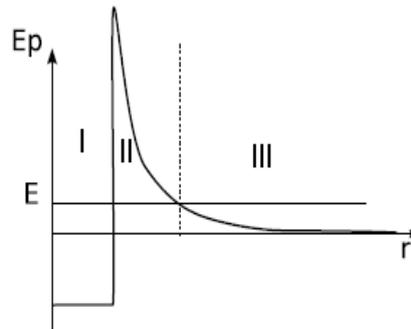


Figure I.10 : Radioactivité alpha.

1 4 3. Diode à effet tunnel

Une diode à effet tunnel est un dipôle électrique semi-conducteur, qui remplit la fonction d'une diode dans les circuits où un temps de commutation très court devient indispensable (jusqu'à 5 GHz).

Dans une diode classique réalisée avec des semi-conducteurs, la conduction se produit si la jonction PN est polarisée positivement, et s'arrête dès que la polarisation devient négative. La conduction étant bloquée jusqu'à la tension de claquage de la diode lors d'une polarisation négative (dans cette zone une diode classique est détruite). Dans la diode tunnel, le dopage des couches P et N est si important que la tension de claquage est égale à zéro volt (contre une tension qui peut atteindre plusieurs centaines de milli volts pour une diode classique). Cette diode conduit donc en inverse (polarisée négativement), mais lors de son utilisation en direct (sens positif), l'effet tunnel se produit donnant à la caractéristique de cette diode une zone où l'augmentation de la tension aux bornes de la diode entraîne une diminution du courant la traversant[13]. Cela correspondant à une résistance négative. Cette résistance dynamique négative peut être employée pour réaliser une version semi-conducteur de l'oscillateur dynatron qui utilise normalement une tétrode un type de tube électronique.

La diode tunnel offre de grandes perspectives dans le domaine des oscillateurs UHF / SHF (Ultra / Super Hautes Fréquences), par exemple la fréquence utilisée dans les fours à micro-

ondes. Cependant, depuis sa découverte, les progrès des semi-conducteurs classiques permettent à ceux-ci de dépasser la diode tunnel avec les techniques conventionnelles.

L'intégration d'une diode à effet tunnel dans une diode laser peut améliorer les performances du laser[14]. On parlera alors de jonction tunnel.

1 4 4. Molécule d'ammoniac

Dans la molécule d'ammoniac NH_3 , de structure tétraédrique, l'atome d'azote N oscille de part et d'autre du plan d'hydrogène par effet tunnel. Dans les chapitres qui suivent nous allons étudier en détaille cette molécule active et son application au Maser à Ammoniac.

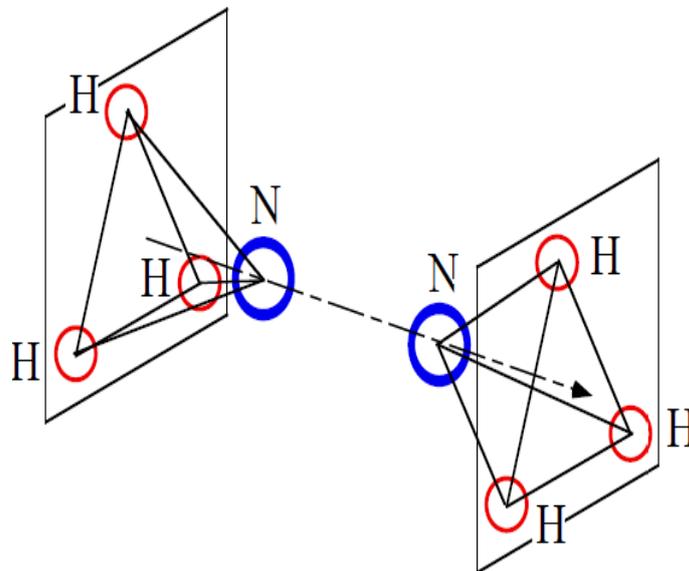


Figure I 11. Les deux états d'équilibres de la molécule NH_3 .

1 5. Conclusion :

Au niveau théorique le comportement tunnel n'est pas fondamentalement différent du comportement classique de la particule quantique face à la barrière de potentiel ; elle satisfait à l'équation de Schrödinger, équation différentielle impliquant la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première dans tout l'espace. De même que l'équation des ondes électromagnétiques mène au phénomène des ondes évanescentes, de même la fonction d'onde rencontre des cas où l'amplitude de probabilité de présence est non nulle dans des endroits où l'énergie potentielle est supérieure à l'énergie totale.

Si, au niveau mathématique l'évaluation de l'effet tunnel peut parfois être simple, l'interprétation que l'on cherche à donner aux solutions révèle le fossé qui sépare la mécanique classique, domaine du point matériel suivant une trajectoire définie dans l'espace-temps, de la mécanique quantique où la notion de trajectoire simple disparaît au profit de tout un ensemble de trajectoires possibles, dont des trajectoires où le temps apparaît complexe ou imaginaire pur... où les vitesses deviennent imaginaires.

On notera à ce propos que la durée de traversée tunnel d'une particule à travers une barrière quantique a été, et est encore, le sujet d'âpres discussions. Des études assez nombreuses dans le domaine électromagnétique ou photonique ont révélé l'apparition de ce que l'on peut interpréter comme des vitesses supraluminiques, respectant toutefois la relativité restreinte : il s'agit du phénomène connu sous le nom d'effet Hartman.

L'effet tunnel est à l'œuvre dans la molécule d'ammoniac NH_3 , où l'atome l'azote N franchi le plan d'hydrogène par effet tunnel, a une fréquence qu'on va déterminer au chapitre suivant.

Chapitre II

Chapitre 2

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

2 1. Introduction

L'ammoniac est un composé chimique, de formule NH_3 (groupe générique des nitrures d'hydrogène). Dans les conditions de température et de pression ordinaire, c'est un gaz. Celui-ci est produit industriellement en quantité gigantesque par le procédé Haber-Bosch à partir de di-azote et de dihydrogène (c'est un des composés le plus synthétisé au monde). Il sert à la synthèse de nombreux autres composés dont ceux de forts tonnages utilisés comme engrais. Ce gaz incolore est irritant, il possède une odeur piquante, il brûle les yeux et les poumons. Sur le plan chimique, c'est à la fois une base, un nucléophile, un ligand et un réducteur. Sa propriété basique est mise à profit pour produire quantité de sels d'ammonium. Ses propriétés de nucléophile en font un réactif de base en chimie organique pour la préparation des amides, des imides, etc. Ses propriétés de ligand sont connues depuis le début de la chimie de coordination et le fameux débat scientifique entre Sophus Mads Jorgensen et Alfred Werner qui conduisit au prix Nobel de ce dernier [18]. Enfin, sa propriété de réducteur lui permet d'être industriellement oxydé en acide nitrique et en hydrazine notamment, deux produits industriels de forts tonnages. Biologiquement, l'ammoniac joue un rôle physiologique majeur tant à long terme, puisque c'est par son intermédiaire que l'azote est artificiellement incorporé par les plantes, qu'à court terme puisqu'il est impliqué dans l'élimination de l'azote du corps et la régulation du PH sanguin.

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

La molécule d'ammoniac NH_3 a la forme d'une pyramide assez aplatie (voir la figure II 1) dont l'atome d'azote occupe le sommet et les trois atomes d'hydrogène forment la base, en forme de triangle équilatéral. La hauteur de la pyramide (distance de l'azote au plan des hydrogènes) vaut 37,7 pm; les liaisons NH ont une longueur $d = 101,2 \text{ pm}$. Chaque liaison NH fait un angle $106,8^\circ$ avec ses voisines et l'angle 68° avec la normale au plan des hydrogènes [15].

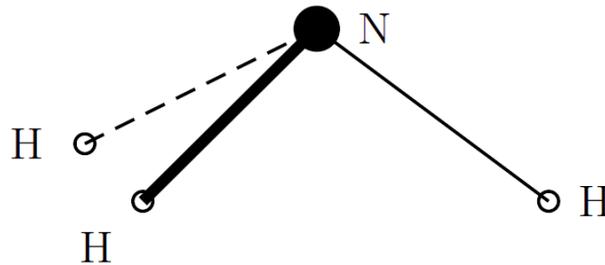


Figure II 1. Structure de la molécule d'ammoniac.

On s'intéresse ici à un mouvement particulier des atomes de cette molécule, dans lequel l'azote se rapproche du plan des hydrogènes et peut le traverser pour aboutir à une nouvelle position d'équilibre.

2.2. Etats stationnaires et des niveaux d'énergie :

La mécanique classique prédit un mouvement oscillatoire de l'atome d'azote confiné dans un des deux puits si $E < V_0$, confiné dans l'ensemble de la molécule si au contraire $E > V_0$. Ce qui est important, c'est que l'atome d'azote ne peut pas passer à travers le plan des atomes d'hydrogène si son énergie $E < V_0$. En revanche, la mécanique quantique autorise un tel passage, appelé effet tunnel, du nom de tous les types qui s'appellent tunnel et n'y sont pour rien là-dedans : l'onde de probabilité traverse la barrière de potentiel, donc la probabilité de trouver l'atome à droite de la barrière s'il se trouvait initialement à gauche est non-nulle, et réciproquement.

La première chose à faire dans un problème de mécanique quantique, c'est de calculer les états stationnaires et les niveaux d'énergie, car ils permettent ensuite de construire des états quelconques non-stationnaires par combinaison linéaire on dit aussi hybridation.

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

Les états stationnaires sont les états propres de l'opérateur hamiltonien H associé à l'énergie, et les niveaux d'énergie E_n sont les valeurs propres associées à chaque état propre. Le potentiel $V(x)$ étant constant par morceaux (5 régions),

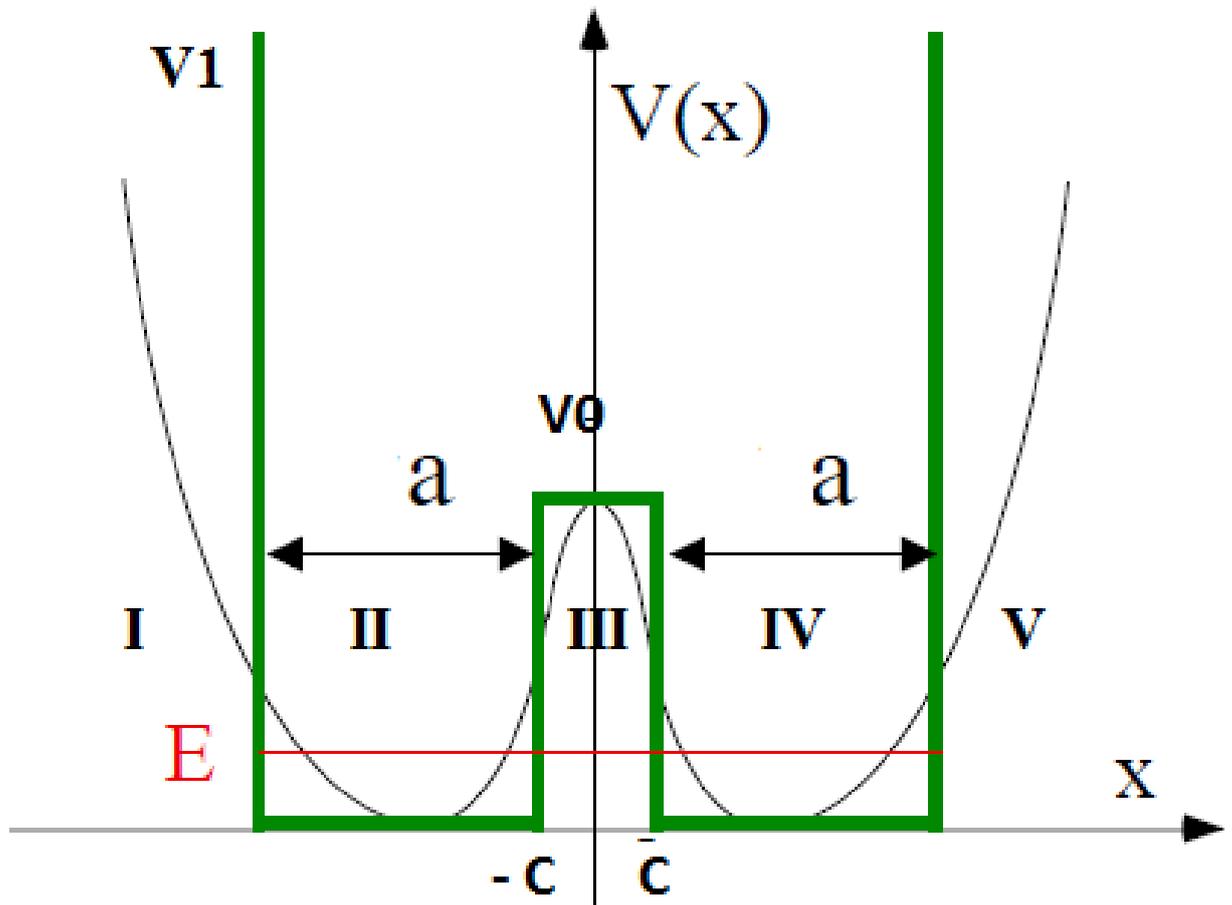


Figure II 2. Potentiel $V(x)$ dans lequel évolue l'atome d'azote; x est la distance de l'azote au plan des atomes d'hydrogène.

Qualitativement, la variation de l'énergie potentiel $v(x)$ en fonction de x est la suivante. Pour la position d'équilibre $x = b$, $v(x)$ passe par minimum figure II2. Si nous obligent x à diminuer, l'énergie croit, passe par un maximum pour $x = 0$, état instable pour lequel les quatre atomes sont dans le meme plan. Si x devien négatif, nous avons retourné la molécule comme un parapluie contre le vent. Manifestement il existe un autre minimum pour $x = -b$ et l'énergie $v(x)$ est symétrique par rapport à l'origine :

$$v(x) = -v(x).$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

Dans ce qui suit nous allons remplacer le potentiel réel $v(x)$ par le potentiel caré $V(x)$ en vert sur la figure II 2.

Dans ce potentiel qui reproduit les caractéristiques qualitative de $v(x)$, nous étudions le mouvement collectif des trois atomes d'hydrogène, en supposant qu'ils restent dans le même plan.

l'équation $H[\psi_n] = E_n\psi_n$, qui s'écrit explicitement

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + V(x)\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \dots \dots \text{(II 1)}$$

Avec m représente la masse de la particule fictive en mouvement, puisqu'on a un problème à 2 corps, l'atome d'azote de masse $14m_p$ d'une part, le bloc rigide des 3 atomes d'hydrogène de masse $3m$ d'autre part. Pour simplifier on peut considérer que l'atome d'azote oscille de part et d'autre du plan des hydrogènes, mais il faut garder à l'esprit qu'en fait, tout bouge, seul le centre de masse de la molécule restant immobile, le concept de particule fictive permet effectivement de se ramener à un mouvement d'oscillation autour d'une position de repos « fixe », le centre de masse. Cette particule fictive a pour masse

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{14m_p 3m_p}{14m_p + 3m_p} = 2.47m_p$$

Masse du proton : $m_p = 1.6726 \times 10^{-27} \text{kg}$

$$m = 2.47m_p = 4.135 \times 10^{-27} \text{kg}$$

On ne considère que les états d'énergie inférieure à V_0 , bien qu'une étude complète soit en réalité nécessaire. Simplement, comme les niveaux d'énergie supérieure à V_0 sont des niveaux fortement excités, on suppose que, dans le cas du MASER, la molécule ne s'y trouve jamais, et contente d'osciller entre les 2 niveaux les plus bas.

On pose pour la suite :

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \alpha_0 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \alpha_1 = \frac{\sqrt{2m(V_1 - E)}}{\hbar} \dots \dots (II\ 2)$$

Ensuite, on résout (II 1) dans chacune des 5 régions :

$$\psi_I(x) = C'_I e^{\alpha_1 x} + C''_I e^{-\alpha_1 x}$$

$$\psi_{II}(x) = C'_{II} e^{ikx} + C''_{II} e^{-ikx}$$

$$\psi_{III}(x) = C'_{III} e^{\alpha_0 x} + C''_{III} e^{-\alpha_0 x}$$

$$\psi_{IV}(x) = C'_{IV} e^{ikx} + C''_{IV} e^{-ikx}$$

$$\psi_V(x) = C'_V e^{\alpha_1 x} + C''_V e^{-\alpha_1 x}$$

et on écrit les conditions de continuité de $\psi_n(x)$ et de sa dérivée première $\psi'_n(x)$ aux 4 frontières, i.e. $x = -c, x = -c, x = a$ et $x = c + a$, ce qui nous mène à un système de 8 équations. On peut diviser ce nombre par 2, en cherchant, d'abord des solutions paires, puis des solutions impaires.

On remarque que dans la région II et IV, l'énergie cinétique $E - V$ est positive, et l'on a bien des solutions oscillante du type e^{ikx} , tandis que dans les régions I, III et V, l'énergie cinétique $E - V$ est négative, et l'on a des solutions évanescents de type $e^{\alpha x}$. On peut utiliser au choix des exponentielles ou des fonctions trigonométrique.

Dans les calculs on se limite à une fonction de classe C^1 pour $\psi_n(x)$, tout simplement parce que $\psi_n(x)$ subissant des discontinuités de type « échelon », l'équation (2 1) montre que $\psi_n(x)$ en subit forcément aussi. D'ailleurs, lorsqu'on fait tendre (voir plus bas) V_0 vers l'infini, on pourrait montrer que n'est plus que de classe C^0 , puisqu'alors $V(x)$ subit des discontinuités d'ordre plus élevé associées à une impulsion de DIRAC. Ceci explique que, dans le cas d'un puits de potentiel infini, on n'exige comme condition de raccordement la continuité de $\psi_n(x)$. Pour éviter de semer le trouble, on propose de déterminer les conditions

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

de continuité avant passage à la limite de V_0 et V_1 , puis de les simplifier après passage à la limite.

Les solutions paires sont telles que :

$$\psi_{I,s}(x) = \psi_{V,s}(-x)$$

$$\psi_{II,s}(x) = \psi_{IV,s}(-x)$$

$$\psi_{III,s}(x) = \psi_{III,s}(-x)$$

Les solutions impaires sont telles que :

$$\psi_{I,a}(x) = -\psi_{V,a}(-x)$$

$$\psi_{II,a}(x) = -\psi_{IV,a}(-x)$$

$$\psi_{III,a}(x) = -\psi_{III,a}(-x)$$

Les indices s et a sont bien sûr là pour symétrique (i.e. pair) et antisymétrique (i.e. impair). Évidemment, tout ceci permet de se contenter d'écrire les conditions de raccordement en $x = c$ et $x = c + a$, en l'occurrence

$$\psi_{III}(c) = \psi_{IV}(c)$$

$$\psi'_{III}(c) = \psi'_{IV}(c)$$

$$\psi_{IV}(c + a) = \psi_V(c + a)$$

$$\psi'_{IV}(c + a) = \psi'_V(c + a)$$

que les solutions soient paires ou impaires. Après, il faut développer en parallèle le calcul pour les 2 types de solution.

Dans la région III , la parité impose que

$$C'_{III} = C''_{III}$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

ce qui permet d'écrire directement (noter le changement de coeff)

$$\psi_{III,s}(x) = A \cosh(\alpha_0 x)$$

et évite de se trimbaler des exponentielles jusqu'à la fin du calcul. De même, on aura pour les solutions impaires

$$\psi_{III,a}(x) = A \sinh(\alpha_0 x)$$

Pour assurer l'homogénéité de la notation des coefficients, je noterai désormais

$$\psi_{IV}(x) = B e^{ikx} + C e^{-ikx}$$

La convergence de $\psi(x)$ est indispensable pour qu'elle soit de carré sommable, donc que la probabilité de présence totale soit finie, et cela n'est assurée que si

$$C''_I = 0$$

$$C''_V = 0$$

Finalement, je note aussi

$$\psi_V(x) = D e^{-\alpha_1 x}$$

ce qui nous réduit le nombre de coefficients de 10 au départ à 4 désormais.

En résumé, on écrit :

Les solutions paires,

$$\psi_{I,s}(x) = D e^{\alpha_1 x}$$

$$\psi_{II,s}(x) = B e^{-ikx} + C e^{ikx}$$

$$\psi_{III,s}(x) = A \cosh(\alpha_0 x)$$

$$\psi_{IV,s}(x) = B e^{ikx} + C e^{-ikx}$$

$$\psi_V(x) = D e^{\alpha_1 x}$$

Les solutions impaires,

$$\psi_{I,a}(x) = -D e^{\alpha_1 x}$$

$$\psi_{II,a}(x) = -B e^{-ikx} + C e^{ikx}$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

$$\psi_{III,a}(x) = A \sinh(\alpha_0 x)$$

$$\psi_{IV,a}(x) = B e^{ikx} + C e^{-ikx}$$

$$\psi_{V,a}(x) = D e^{-\alpha_1 x}$$

Passons aux conditions de raccordement proprement dites.

— Solutions paires

D'abord en $x = c$

$$A \cosh(\alpha_0 c) = B e^{ikc} + C e^{-ikc} \dots (II\ 3)$$

$$A \alpha_0 \sinh(\alpha_0 c) = ik B e^{ikc} - ik C e^{-ikc} \dots (II\ 4)$$

Ensuite $x = c + a$

$$B e^{ik(c+a)} + C e^{-ik(c+a)} = D e^{-\alpha_1(c+a)} \dots (II\ 5)$$

$$ik B e^{ik(c+a)} - ik C e^{-ik(c+a)} = \alpha_1 D e^{-\alpha_1(c+a)} \dots (II\ 6)$$

— Solutions impaires

En $x = c$

$$A \sinh(\alpha_0 c) = B e^{ikc} + C e^{-ikc} \dots (II\ 7)$$

$$A \alpha_0 \cosh(\alpha_0 c) = ik B e^{ikc} - ik C e^{-ikc} \dots (II\ 8)$$

Et en $x = c + a$ les mêmes équations que (II 5) et (II 6)

$$B e^{ik(c+a)} + C e^{-ik(c+a)} = D e^{-\alpha_1(c+a)}$$

$$ik B e^{ik(c+a)} - ik C e^{-ik(c+a)} = \alpha_1 D e^{-\alpha_1(c+a)}$$

Afin de simplifier la résolution de ce système d'équations, on peut utiliser l'approximation :

$$V_1 \rightarrow \infty$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

De (II 2) on peut noter

$$\alpha_1 \rightarrow \infty$$

En divisant (II 5) par (II 6), on obtient

$$\frac{Be^{ik(c+a)} + Ce^{-ik(c+a)}}{ikBe^{ik(c+a)} - ikCe^{-ik(c+a)}} = \frac{-1}{\alpha_1}$$

soit

$$Be^{ik(c+a)} + Ce^{-ik(c+a)} = 0$$

d'où

$$B = -Ce^{-2ik(c+a)} \dots \dots (II 9)$$

Si on injecte (II 9) dans (II 6), on a

$$2Be^{ik(c+a)} = \alpha_1 De^{-\alpha_1(c+a)}$$

$$\Rightarrow D = \frac{2Be^{ik(c+a)}}{\alpha_1 e^{-\alpha_1(c+a)}}$$

$$\Rightarrow D = \frac{2Be^{ik(c+a)}}{\alpha_1 e^{-\alpha_1(c+a)}}$$

$$\Rightarrow D = \frac{2Be^{(\alpha_1+k)(c+a)}}{\alpha_1}$$

Comme B et k sont finis,

$$D \propto \frac{e^{\alpha_1(c+a)}}{\alpha_1},$$

et par conséquent, $\psi_V(x) \propto \frac{e^{\alpha_1(c+a-x)}}{\alpha_1}$ qui tend vers 0 pour tout $x \geq c + a$

$$\psi_V(x) \rightarrow 0, \quad x \geq c + a$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

Pour poursuivre les calculs on peut utiliser l'approximation de KRÖNIG-PENEY qui consiste à faire tendre la barrière centrale vers une impulsion de Dirac, i.e. $c \rightarrow 0$ à aire constant $\eta = 2cV_0$, ce qui impose naturellement $V_0 \rightarrow \infty$, et plus précisément que $\alpha_0 \approx \sqrt{2mV_0}/\hbar$.

Par conséquent, comme

$$\alpha_0 c = \frac{\sqrt{2mV_0 c^2}}{\hbar} = \frac{\sqrt{m\eta c}}{\hbar}$$

On déduit que $\alpha_0 c \rightarrow 0$ à l'approximation.

$$\cosh(\alpha_0 c) \approx 1$$

$$\alpha_0 \sinh(\alpha_0 c) \approx \alpha_0^2 c \approx \frac{m\eta}{\hbar^2}$$

D'où, en divisant (II 4) par (II 3),

$$\frac{m\eta}{\hbar^2} = \frac{ikBe^{ikc} - ikCe^{-ikc}}{Be^{ikc} + Ce^{-ikc}} \dots \dots (II 10)$$

Pour les solutions impaires, on a

$$\sinh(\alpha_0 c) \approx 0$$

$$\alpha_0 \cosh(\alpha_0 c) \approx 0$$

D'où, on utilisant simplement (II 7)

$$0 = Be^{ikc} + Ce^{-ikc} \dots \dots (II 11)$$

Finalement, on injecte l'expression de B dans (II 9) dans (II 10) et (II 11), et on obtient,

$$\tan(ka) = -\frac{\hbar^2}{m\eta} k \dots \dots (II 12)$$

Pour les solutions paire, et

$$\sin(ka) = 0 \dots \dots (II 13)$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

Finalement, l'approximation $V_1 \rightarrow \infty$ consiste à imposer $\psi_{IV}(c+a) = 0$, et à ne rien imposer sur la dérivée: c'est le cas du puits de potentiel infini. L'approximation de KRÔNIG-PENEY consiste elle aussi à n'imposer de conditions que sur $\psi(x)$, mais ce n'est pas aussi simple: il y a bien raccordement à 0 en $x = c$ pour les solutions impaires, mais pas pour les solutions paires. Ceci résulte de ce que l'impulsion de DIRAC n'est pas équivalente à un mur de potentiel infini car elle est d'épaisseur nulle, contrairement aux parois du puits infini.

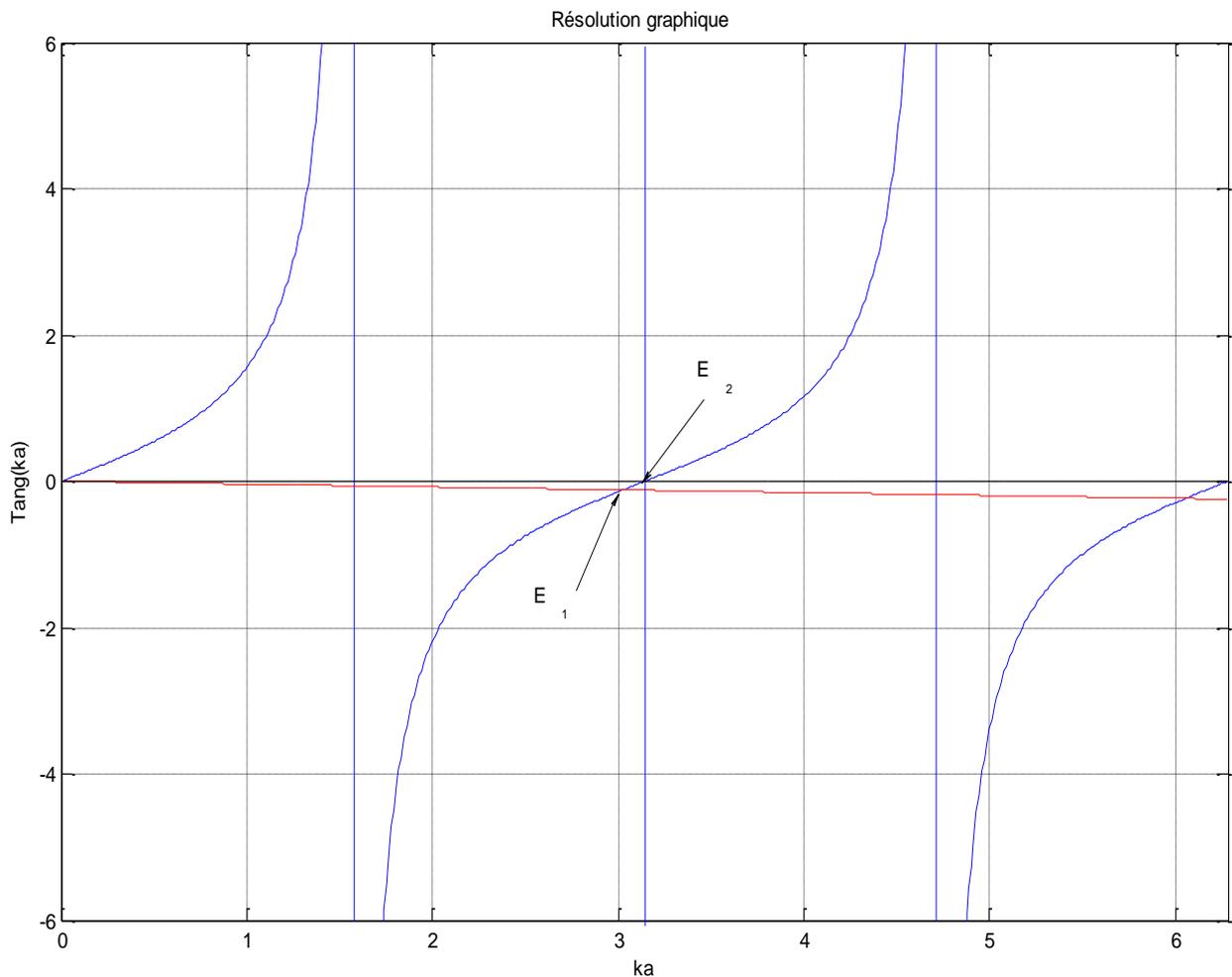


Figure II 3. Résolution graphique

Les niveaux d'énergie se calculent aisément pour les solutions impaires, et on obtient $k = n\pi/a$, $n \in \mathbb{N}$, soit encore

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

$$E_{n,a} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma}$$

Pour les solutions paires, il faut résoudre numériquement

On a

$$\tan(ka) = -\frac{\hbar^2}{m\eta} k$$

On peut faire un D.L autour de ka , i.e $\tan(ka) \sim ka - n\pi$.

On déduit

$$ka - n\pi = \frac{\hbar^2 k}{m\eta} \rightarrow k = \frac{n\pi}{a + \frac{\hbar^2}{m\eta}}$$

$$\rightarrow k = \frac{n\pi}{a} \left(\frac{1}{1 + \frac{\hbar^2}{m\eta a}} \right)$$

$$\rightarrow k \sim \frac{n\pi}{a} \left(1 - \frac{\hbar^2}{m\eta a} \right)$$

$$k^2 \sim \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \left(1 - \frac{2\hbar^2}{m\eta a} + \frac{\hbar^4}{m^2 \eta^2 a^2} \right)$$

On en déduit alors les niveaux d'énergie des solutions paires

$$E_{n,s} \sim E_{n,a} \left(1 - \frac{2\hbar^2}{m\eta a} + \frac{\hbar^4}{m^2 \eta^2 a^2} \right)$$

$$\frac{\hbar^4}{m^2 \eta^2 a^2} \rightarrow 0$$

On peut écrire

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

$$E_{n,s} \sim E_{n,a} \left(1 - \frac{2\hbar^2}{m\eta a} \right) \dots \dots \dots (II\ 14)$$

De (II 14) on en peut déduire l'écart entre les deux niveaux,

$$\Delta E = E_s - E_a \sim \left(E_a \frac{2\hbar^2}{m\eta a} \right)$$

$$\Delta E = E_a - E_s \sim \frac{\hbar^4 n^2 \pi^2}{m^2 \eta a}$$

Faisons l'application numérique, pour les 2 premiers niveaux, avec $\eta = 0.035 eV * lA$, et $a = 2A$ et $V_0 = 17.5 meV$

Données numériques

Masse du proton: $M_p = 1.6726 * 10^{-27}$

Masse atomique de l'hydrogène: $A = 1$

Masse atomique de l'azote: $A = 14$

Constante de Planck: $h = 6.6261 * 10^{-34}$

Charge de l'électron: $q = 1.6 * 10^{-19}$

$$E_2 = 2.0559 meV$$

$$E_1 = 1.958 meV$$

$$\Delta E = 97.883 \mu eV$$

$$\Delta E = 2A = h\nu$$

- ν la fréquence de raie spectrale
- h la constante de Planck.

$$\nu = 23.658 GHz$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

Les conditions d'approximations sont donc satisfaites.

Dans le cas présent, la longueur d'onde se situe dans le domaine centimétrique ($\lambda \sim 1,25 \text{ cm}$). Elle est mesurable avec grande précision et constitue une « empreinte digitale » de l'ammoniac. C'est grâce à elle que l'on détecte la présence de cette molécule dans le milieu interstellaire.

On notera que, lorsque $\eta \rightarrow 0$, i.e. lorsque la barrière disparaît, ΔE est maximum, et étage les niveaux régulièrement: on retrouve les niveaux d'un puits de potentiel infini de largeur $2a$. Plus précisément, on a pour les états symétriques, $\tan ka \rightarrow \infty$ d'où $k = (2n + 1)\pi/2a$. Comme les états antisymétriques correspondent à $k = n\pi/a$, finalement on a $k = n\pi/2a$.

A l'inverse, lorsque $\eta \rightarrow \infty$, le couplage entre les deux puits disparaissent, et les niveaux pairs et impairs se confondent, i.e $\Delta E \rightarrow 0$. On retrouve alors les niveaux d'un puits de potentiel de largeur a .

D'une manière générale, plus le couplage entre les 2 puits est important ($\eta \rightarrow 0$), plus les niveaux se séparent. C'est une remarque importante dans la mesure où elle permet de justifier la stabilisation des liaisons chimiques par abaissement du niveau d'énergie fondamental lorsque 2 atomes se rapprochent.

IL reste finalement à déterminer les fonctions d'onde dans le cas d'un couplage faible (η grand). Dans l'approximation de KRÔNIG-PENEY, on ne regarde que la forme de la fonction d'onde dans la région II (et on la déduit dans IV par symétrie paire ou impaire), puisque la barrière est de largeur a nulle (donc il n'y a plus de terme en \sinh ou \cosh).

On a, compte-tenu de l'expression de B dans (II 9),

$$\begin{aligned}\psi_{IV}(x) &= B e^{ikx} + C e^{-ikx} \\ &= C^{te} \sin(k(a-x))\end{aligned}$$

où la constante est déterminée par la condition de normalisation

$$\int_{-a}^a |\psi_{IV}(x)|^2 dx = 1$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

Pour les états impairs, on a, après normalisation appropriée:

$$\psi_{IV}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Soit encore

$$\psi_{n,a}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Voir la figure II 3 pour le tracé.

Pour les états pairs, on a

$$\psi_{IV}(x) = C^{te} \sin \left[\frac{n\pi}{a} \left(1 - \frac{\hbar^2}{m\eta a} \right) (a - x) \right]$$

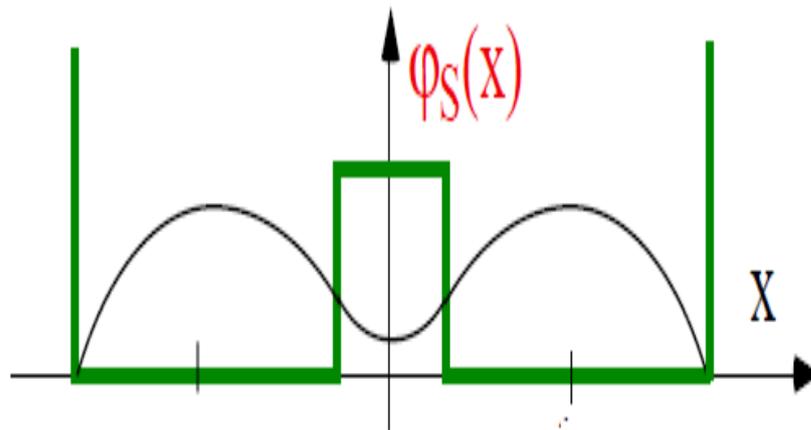


Figure II 4 : Etat stationnaire ψ_1 , pair.

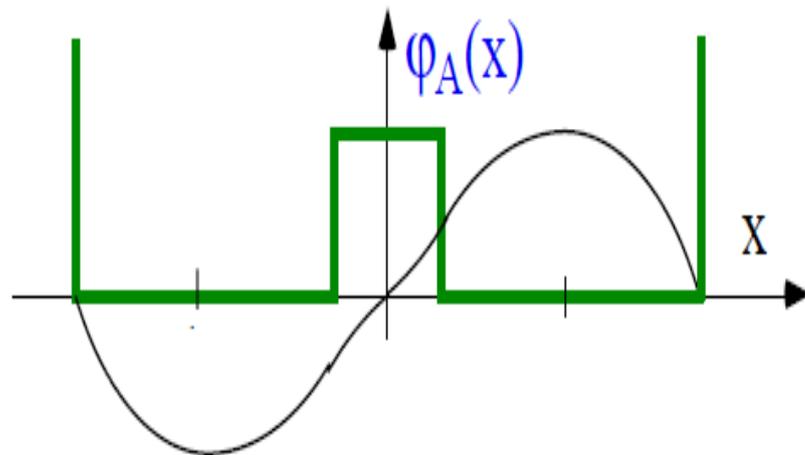


Figure II 5. Etat stationnaire ψ_2 , impair.

qui en $x = 0$ et pour $n=1$ vaut

$$\sin\left(\frac{\pi \hbar^2}{a m \eta a}\right) = 0.0013 \sim 0$$

(avec les valeurs numériques précédentes). On peut donc considérer qu'on a presque

$$\psi_{n,a}(x) \sim \left| \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \right|$$

comme pour l'état impair, à la valeur absolue près. Cette approximation est nécessaire pour traiter la suite du problème (état localisé notamment) sans faire des calculs monstrueux. Pour la suite du problème, on prend donc cette forme approchée. Voir la *figure II 4* pour le tracé réel.

On voit que pour l'état symétrique, la dérivée de ψ n'est plus continue en 0, ce qui correspond bien à l'apparition d'un Dirac en $x = 0$.

2.3. États localisés d'un côté du plan des atomes d'hydrogène

Compte-tenu de la forme des fonctions d'ondes ψ_1 et ψ_2 , qui sont quasiment égales en valeur absolue, on construit facilement un état localisé à gauche du plan:

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

$$\psi_G = \frac{\psi_1 - \psi_2}{\sqrt{2}}$$

$$\psi_D = \frac{\psi_1 + \psi_2}{\sqrt{2}}$$

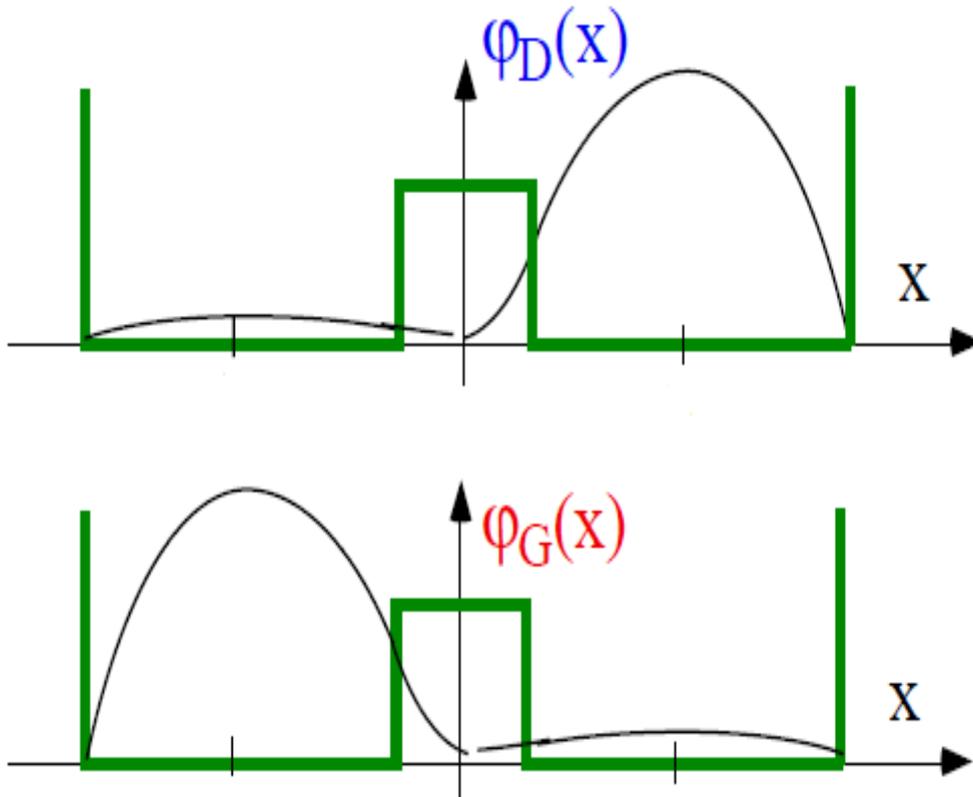


Figure II 6. Représentation des états droit ψ_D et gauche ψ_G

La présence du terme $\sqrt{2}$ pour assure que ces nouveaux états sont normés. On le vérifie aisément, compte- tenu du fait que ψ_1 et ψ_2 sont orthonormés (i.e. $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$), en l'occurrence

$$\langle \psi_G | \psi_G \rangle = \frac{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle}{2} + \frac{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle}{2} = 1$$

En notation « vectorielle » (i.e. de DIRAC), on écrira

$$|\psi_G\rangle = \frac{|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

$$|\psi_D\rangle = \frac{|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

cette notation ayant, pour l'instant du moins, pour objectif de mettre en évidence la profonde analogie entre l'approche fonctionnelle et l'approche vectorielle dans \mathcal{L}^2 .

2 4. Formulation matricielle

Dans cette partie nous allons manipuler les produits scalaires dans \mathcal{L}^2 et les matrices d'opérateurs: c'est une technique un peu troublante au départ, mais elle se révèle rapidement payante en termes d'économie de calcul, puisqu'on ne calcule plus que très rarement les intégrales des produits scalaires. Au demeurant, la formulation matricielle permet de confirmer les résultats précédents, i.e. que l'hamiltonien est diagonal dans la base des états stationnaires, et ne l'est plus dans la base des états localisés ψ_G et ψ_D , ce qui confirme que ces deux états ne sont pas des états stationnaires.

On écrit l'Hamiltonien dans la base $\{\psi_1, \psi_2\}$ en utilisant la formule

$$\begin{aligned} H_{i,j} &= \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle \\ &= \int_{-a}^a \psi_i^*(x) H [\psi_j^*(x)] dx \end{aligned}$$

Noter qu'on peut faire agir H d'abord à droite habituel ou à gauche plus inhabituel, i.e.

$$\langle \psi_i | H \psi_j \rangle = \langle \psi_i H | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$$

d'où la notation avec H au milieu des 2 barres, puisque l'ordre n'a aucune importance.

On peut calculer explicitement les intégrales, mais il y a plus simple, car $H[\psi_n] = E_n \psi_n$ (que l'on écrit aussi $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ en notation de DIRAC), et par conséquent

$$\begin{aligned} H_{i,j} &= \langle \psi_i | E_j | \psi_j \rangle \\ &= E_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \\ &= E_j \delta_{ij} \end{aligned}$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

qui montre que la matrice représentant H dans la base des états stationnaire est bien diagonale, ce qui est réconfortant puisque les états stationnaires sont précisément les états propres de H . Très précisément, on obtient

$$H_{\{1,2\}} = \begin{pmatrix} E_0 - \frac{\Delta E}{2} & 0 \\ 0 & E_0 + \frac{\Delta E}{2} \end{pmatrix}$$

On retrouve également le fait que, si $\Delta E = 0$, les deux états ont même énergie E_0 (i.e. la valeur propre E_0 est dégénérée d'ordre 2), ce qui est logique puisqu'on a alors 2 puits de potentiel indépendant, i.e. deux « oscillateurs » quantiques non-couplés.

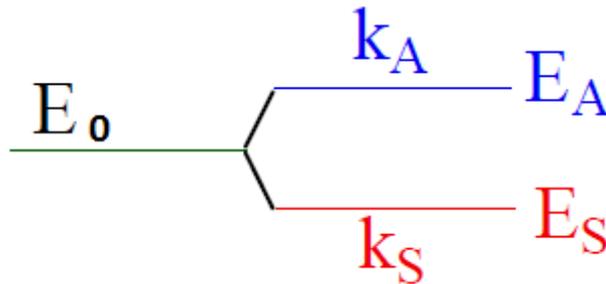


Figure II 7. Les deux premiers niveaux d'énergie

2 5. Évolution temporelle d'un état initialement localisé

On prend donc comme état initial l'état localisé

$$\varphi(0) = \psi_G = \frac{\psi_1 - \psi_2}{\sqrt{2}}$$

qui est une combinaison linéaire d'états stationnaires.

On a donc

$$\begin{aligned} \varphi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_2 t/\hbar} \psi_2 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} \left(\psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\Delta E t/\hbar} \psi_2 \right) \end{aligned}$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

qui montre qu'au bout d'un temps $T = \pi\hbar / \Delta E \approx 21ps$, l'azote est dans l'état ψ_D , et donc se trouve avec certitude à droite. T est le temps caractéristique de traversée par effet tunnel : on note que, conformément au principe d'incertitude d'HEISENBERG [20], plus les niveaux sont proches (donc plus l'énergie est définie précisément), moins l'instant de passage est connu avec précision.

On peut préciser cette notion en calculant explicitement la valeur moyenne $\langle E \rangle_\varphi(t)$ de l'énergie dans l'état $\varphi(t)$, puis la variance $\delta E_\varphi^2 = \langle E^2 \rangle_\varphi - \langle E \rangle_\varphi^2$ (ou l'écart-type δE) reliée aux fluctuations quantiques.

Le calcul de la valeur moyenne peut se faire directement avec la formule $\langle E \rangle_\varphi = \langle \varphi(t) | H | \varphi(t) \rangle$, soit en calculant explicitement l'intégrale, soit en décomposant explicitement $\varphi(t)$ sur les vecteurs φ_1 et φ_2 . Pour être précis sur la notation, on a :

$$\varphi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_2 t/\hbar} \psi_2$$

$$\varphi^*(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{+iE_1 t/\hbar} \psi_1^* - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{+iE_2 t/\hbar} \psi_2^*$$

ou encore, en notation de Dirac,

$$|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-iE_1 t/\hbar} \\ -e^{-iE_2 t/\hbar} \end{pmatrix}$$

$$\langle \varphi(t) | = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{+iE_1 t/\hbar}, -e^{+iE_2 t/\hbar})$$

Naturellement, ψ_1 et ψ_2 sont réelles, mais j'ai explicitement écrit les conjuguées complexes pour montrer comment on construit un « bras » à partir d'un « ket » : on conjugue puis on transpose (rien n'empêche d'ailleurs d'écrire $\langle \varphi(t) | = {}^T(|\varphi(t)\rangle^*)$) En notant que les exponentielles complexes conjuguées l'une de l'autre se compensent, on a

$$\langle E \rangle_\varphi = \langle \varphi(t) | H | \varphi(t) \rangle$$

$$= \frac{E_1 + E_2}{2} = E_0$$

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

On peut encore retrouver ce résultat très simplement : lors d'une mesure de l'énergie, la probabilité d'obtenir E_1 , vaut $\left| \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} \right|^2$ i.e 50% ; de même pour la probabilité de mesure E_2 . Donc la valeur moyenne est E_0 .

On note que, conformément au fait que $\varphi(t)$ est une superposition d'états stationnaires, l'énergie moyenne est constante. En revanche, l'énergie fluctue autour de E_0 , puisqu'une mesure ne peut donner que E_1 , ou E_2 comme résultat.

Calculons ces fluctuations. L'écart-type δE est égal à la racine carrée de $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$, ou $\langle E \rangle^2 = \langle \varphi(t) | H^2 | \varphi(t) \rangle$. On peut aussi calculer directement à partir des probabilités, i.e.

$$\langle E \rangle^2 = 0.5E_1^2 + 0.5E_2^2 = \frac{E_1^2 + E_2^2}{2}$$

d'où l'écart-type

$$\delta E = \frac{E_1 - E_2}{2} = \frac{\Delta E}{2} = A$$

qui représente les fluctuations quantiques d'énergie de la molécule. A partir de là, on peut écrire la relation d'HEISENBERG:

$$\delta E = \frac{\Delta E}{2} \frac{\pi \hbar}{\Delta E} = \frac{h}{4} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Le produit des incertitudes est supérieur à la limite $\hbar/2$ car les coefficients de $\varphi(t)$ n'ont pas une distribution gaussienne.

La densité de probabilité de présence de l'atome d'azote à l'abscisse x est donnée par $|\varphi(t, x)|^2$, i.e.

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

$$\begin{aligned} |\varphi(t, x)|^2 &= \frac{1}{2}(\varphi_1^2 + \varphi_2^2 + e^{-i\Delta Et/\hbar}\varphi_1\varphi_2 + e^{i\Delta Et/\hbar}\varphi_1\varphi_2) \\ &= \varphi_1^2 + \varphi_1\varphi_2 \cos\left(\frac{\Delta Et}{\hbar}\right) \\ &= \varphi_1 \left(\varphi_1 + \varphi_2 \cos\left(\frac{\Delta Et}{\hbar}\right) \right) \end{aligned}$$

Le tracé de $|\varphi(t, x)|^2$ (figure II 8) montre que:

à $t=0$, l'azote est localisé à gauche;

à $t = T/2$, on ne sait pas où est l'azote, $\langle X \rangle = 0$

à $t = T$, l'azote est avec certitude à droite;

à $t = 3T/2$, l'azote est en train de revenir à gauche

etc...

l'azote oscillant à la fréquence $\omega \approx 24\text{GHz}$ autour du plan des hydrogènes.

Comme l'azote entraîne avec lui les 3 paires électroniques liantes de la liaison covalente, il y a probabilité d'émission de rayonnement électromagnétique: bien entendu, si la molécule émet effectivement un photon [19], elle est alors «projetée» sur l'état stationnaire ψ_1 , et s'arrête alors d'osciller, jusqu'à ce qu'un photon incident la réexcite (avec une certaine probabilité) sur l'état ψ_2 : pendant le temps que dure l'absorption, la molécule oscille puisqu'elle dans une superposition des états ψ_1 et ψ_2 .

2 6. Orientation du moment dipolaire

En fait, on peut interpréter directement l'émission de rayonnement électromagnétique à partir de l'oscillation du moment dipolaire de la molécule [16] (ce qui, pédagogiquement, permet aussi de faire le lien avec le rayonnement du doublet de HERTZ vu en électromagnétisme). En outre, utiliser p_o permet de s'affranchir de spécifier la position exacte des doublets de valence dans la molécule. Qualitativement, on voit que le moment dipolaire permanent est

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

dirigé en sens inverse de l'atome d'azote, puisque c'est lui le plus électronégatif (sa position très à droite dans la classification périodique).

Dans cette partie, on s'intéresse à la valeur moyenne (au sens quantique) du moment dipolaire, car c'est ce qui permet de « remonter » à l'analyse faite en électrodynamique classique (et accessoirement de montrer comment on se sert des valeurs moyennes...). Cette valeur moyenne est simplement la valeur moyenne de la position, au facteur p_0 près.

Le calcul de $\langle X \rangle (t)$ est trivial et donne avec un minimum de calculs (on peut même, sauf pour $\langle X \rangle (t)$ se contenter d'une approche graphique)

$$\langle X \rangle (0) = \langle X \rangle_{\psi_G} = -a/2 ;$$

$$\langle X \rangle (T) = \langle X \rangle_{\psi_D} = a / 2 ;$$

$\langle X \rangle (t) = \langle X \rangle_{\psi(t)} = -a/2 \cos (\Delta E t / \hbar)$; ce qui montre que, en moyenne le moment dipolaire oscille à la pulsation de résonance ω , et que la molécule peut émettre à cette fréquence;

$\langle X \rangle_{\psi_1} = \langle X \rangle_{\psi_2} = 0$ qui confirme que, si la molécule est dans un état stationnaire, rien ne bouge, et la molécule n'émet rien.

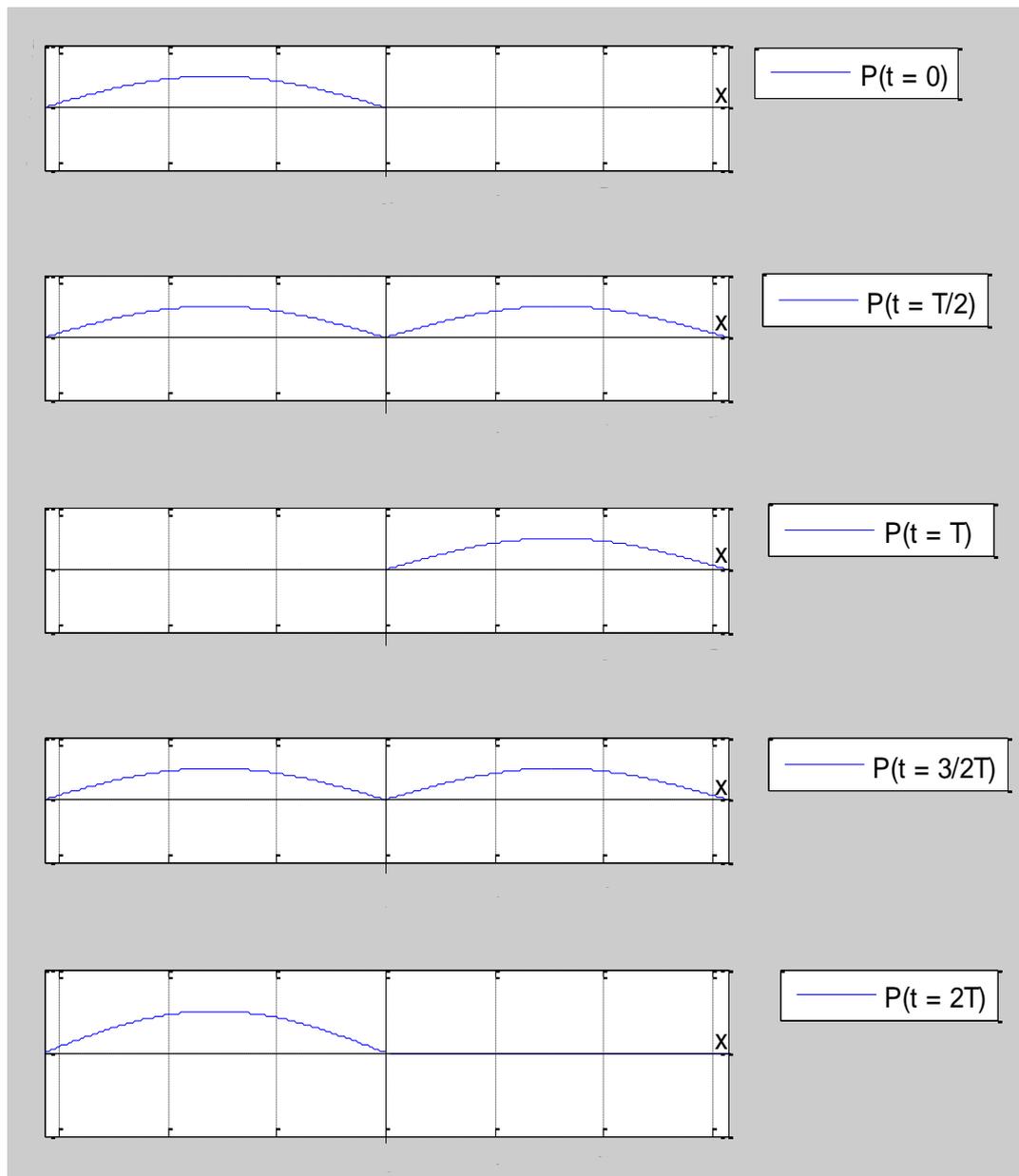


Figure II 8 : Tracé de la densité de probabilité de présence $|\varphi(t, x)|^2$.

2.7. Conclusion

Dans cette étude, nous avons calculé la fréquence du dédoublement (Ce dédoublement est une conséquence de l'effet tunnel) des deux premiers niveaux de vibration d'inversion de la molécule d'ammoniac on a cherchant toujours à améliorer nos résultats au fur et à mesure que nous avançons dans notre travail.

Pour cela, nous avons cherché les méthodes d'approximations permettant des résultats les plus précis possibles ainsi que l'expression analytique de l'hamiltonien. Mais les améliorations les

Calcul de la fréquence d'inversion de la molécule d'Ammoniac

plus importantes ont été réalisées sur le potentiel et plus précisément sur la barrière de ce potentiel qui sépare les deux puits.

Chapitre III

Chapitre 3

Application au Maser à Ammoniac

3.1 Introduction

Dans les chapitres qui précèdent, nous nous sommes familiarisés avec la théorie quantique dans la version de la mécanique ondulatoire. On y traite du mouvement d'une particule dans l'espace, dont la physique est assez intuitive.

Toutefois, l'outillage mathématique est un peu compliqué, nous nous proposons ici d'exploiter la formulation matricielle de la mécanique quantique, présentée au chapitre précédent, en considérant le cas d'un système physique qui se décrit au contraire dans l'espace de Hilbert le plus simple : un espace à *deux dimensions*.

Dans le reste de chapitre en va traiter le maser à ammoniac (nous nous appuyerons sur le traitement de la molécule NH_3 présenté au chapitre II), mais les résultats auront une portée beaucoup plus large que cet espèce, simplifié intentionnellement. D'innombrables systèmes physiques peuvent être en effet décrits dans des espaces de Hilbert à deux ou trois dimensions, soit de façon exacte (le moment magnétique de l'électron que nous verrons plus tard, les mésons K et B neutres en physique des particules élémentaires, le problème de la masse des neutrinos, etc.), soit de façon approchée (la physique des masers et des lasers, et de multiples cas de physique atomique).

Les vecteurs d'un espace à deux dimensions sont combinaisons linéaires de deux vecteurs de base, et on appelle de tels systèmes des systèmes à deux états. Bien entendu ces systèmes ont un nombre infini d'états, mais tous sont des combinaisons linéaires de deux états de base, d'où cette terminologie.

3.2 Maser

L'invention du MASER (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation, pour Amplification des Micro-ondes par Emission Stimulée de Rayonnement) en 1954 s'inscrit dans le contexte de la guerre froide. La Seconde Guerre mondiale a vu l'explosion de la technologie du radar. La recherche dans ce domaine était parvenue pendant la guerre à réduire la longueur des ondes utilisées, de 10 cm à 1 cm, ce qui permettait à la fois de réduire la taille des appareils utilisés et d'accroître la qualité du signal. Or, en deçà de 1,25 cm, la qualité du signal s'avère très perturbée par l'environnement qui absorbe les ondes et rend difficile leur perception.

Dans un contexte de concurrence avec l'Union soviétique, la recherche dans un domaine comme celui des micro-ondes, d'une longueur d'onde de l'ordre du millimètre, s'avère stratégique pour l'armée des deux pays. Promettant un plus grand secret pour les communications à courte distance, elles constituaient un avantage sur l'ennemi. C'est pourquoi, aux Etats-Unis et en URSS, des programmes sont créés après la guerre, associant militaires et physiciens de la matière. Ces recherches concurrentes sont couronnées par le Prix Nobel de physique de 1964, qui récompensent l'Américain Charles Townes et les Soviétiques Basov et Prokhorov, pour leurs résultats sur les lasers et les masers.

La génération de micro-ondes est finalement réussie en combinant des résultats de la théorie quantique et la technologie des oscillateurs [23]. Depuis le début du XXe siècle, la théorie quantique a mis en évidence que les atomes peuvent absorber et émettre une quantité spécifique d'énergie, sous la forme de photons. Si l'on considère un atome, composé d'un noyau autour duquel gravitent des électrons, ce sont les électrons qui captent ou restituent cette énergie, en passant d'un niveau d'énergie à un autre. Ce phénomène a été mis en évidence en 1913 par Niels Bohr : les atomes disposent de niveaux d'énergie quantifiés, entre lesquels les électrons peuvent transiter. Lorsqu'ils passent d'un niveau supérieur d'énergie x à un niveau inférieur y , ils émettent un photon, dont la longueur d'onde dépend de la différence de quantité d'énergie entre les niveaux x et y . Ce phénomène, spontané, peut être toutefois provoqué : si l'on excite par une émission de photons d'une longueur d'onde spécifique, représentant l'énergie exacte de l'électron dans un niveau supérieur, celui-ci contribuera d'un photon au faisceau de photons en redescendant à un niveau inférieur d'énergie. Ce photon est exactement identique au photon bombardé, par sa longueur d'onde et par sa phase. C'est le phénomène d' " émission stimulée " découvert par Albert Einstein en 1917.

Application au Maser à Ammoniac.

Le principal problème à résoudre était que l'émission stimulée est en compétition avec d'autres modes d'interaction de la lumière avec les atomes, en particulier l'absorption, phénomène symétrique de l'émission de photons. L'idée statistique à laquelle les chercheurs arrivent est qu'il est besoin, pour que l'effet recherché se produise, d'une " inversion de population " d'atomes, c'est-à-dire qu'une majorité d'atomes se trouve dans un état excité de façon à ce que l'effet d'émission l'emporte sur l'effet d'absorption. Cette situation est difficile à réaliser.

Les connaissances de Townes et de ses collègues dans la technologie radar leur ont permis de développer un appareil permettant de produire une fréquence maser, acronyme anglais pour amplification micro-onde à émission stimulée de rayonnement. Le choix de la molécule d'ammoniac qu'ils utilisent s'explique par leurs propres questions scientifiques. L'idée de Townes met toutefois du temps avant d'être acceptée : le phénomène "d'émission spontanée", en effet, n'est jusqu'alors envisagé que dans sa dimension de particule, sans que les physiciens en aient vu les conséquences sur la dimension ondulatoire de la lumière. L'appareil de Townes, fabriqué en 1954, relie une source d'ammoniac à un " focaliseur " qui joue le rôle d'une lentille sur le faisceau de photons et à une cavité micro-ondes qui conserve l'énergie communiquée préalablement aux molécules et leur ajoute de l'énergie haute-tension, de façon à provoquer l'émission stimulée attendue.

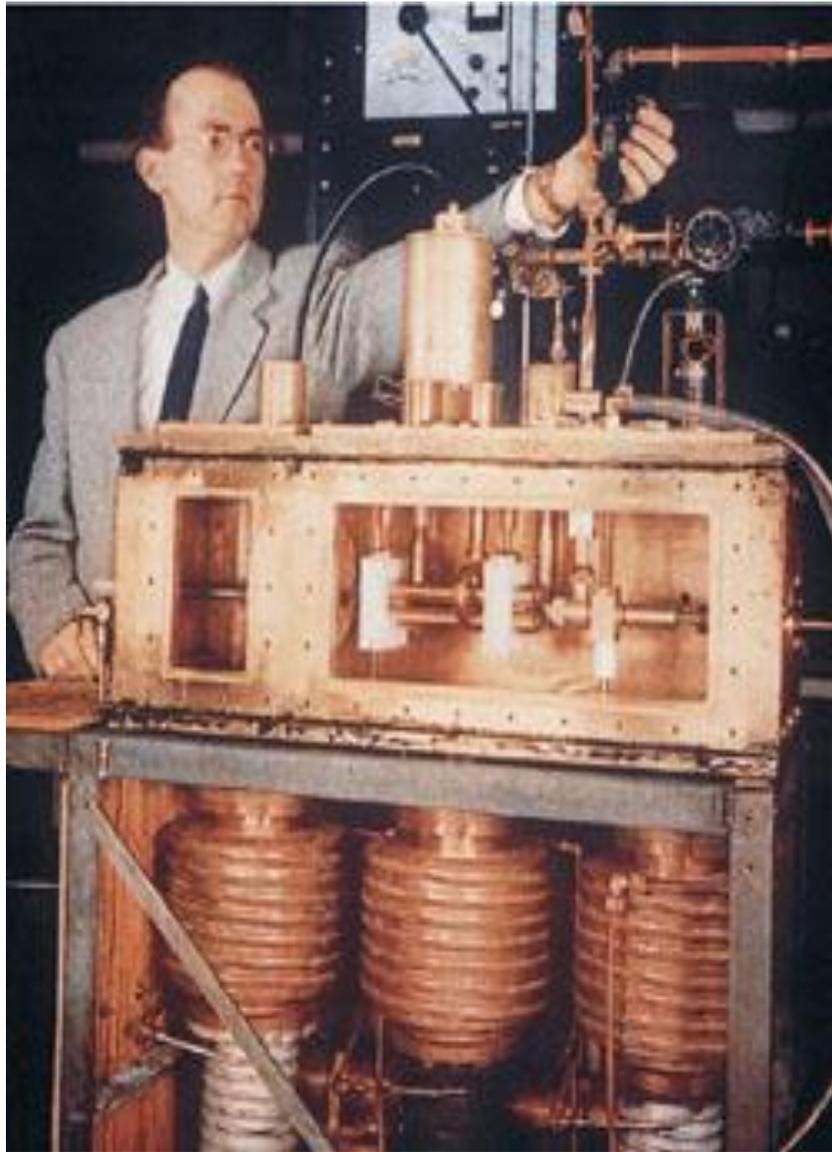


Figure III 1. Charles Townes et ses collègues ont été les premiers à construire un "maser", qui fonctionne dans la plage de fréquence micro-ondes.

Il est proposé d'étudier quelques points de son principe de fonctionnement.

3.3 Notions élémentaires sur l'émission stimulée

Le matériau actif (figure III.3) possède au minimum 2 niveaux d'énergie, E_1 et E_2 , $E_1 < E_2$: à l'équilibre thermodynamique, le facteur de BOLTZMANN $e^{-E/kT}$ montre que les molécules sont pour la plupart situées sur le niveau fondamental E_1 . Le mécanisme d'inversion de population consiste alors à exciter le matériau afin qu'une majorité de molécules transite vers le niveau haut E_2 : le matériau est alors hors de l'équilibre thermodynamique, et tend à y revenir par émission spontanée et totalement aléatoire de photons et retour de facto de la plupart des molécules au niveau E_1 . Ce processus de relaxation étant caractérisé par une constante de temps T , l'idée à la base de l'émission stimulée consiste à profiter de cet

Application au Maser à Ammoniac.

intervalle de temps séparant l'excitation du retour à l'équilibre pour stimuler artificiellement le retour simultané de toutes les molécules du niveau E_2 au niveau E_1 , et l'émission cohérente de photons qui en résulte.

Cette stimulation peut être l'envoi sur le matériau d'un photon de fréquence $w = (E_2 - E_1)/h$: celui-ci provoque le retour d'une première molécule au niveau fondamental, qui émet alors simultanément un photon s'ajoutant au photon initial [24]. Ces deux photons sont réinjectés, après réflexion sur les parois du guide d'onde, dans le matériau, où ils provoquent chacun l'émission d'un photon supplémentaire s'additionnant au flux initial: l'effet d'amplification de rayonnement électromagnétique qui en résulte conduit très rapidement à l'apparition d'un flux intense de photons, parfaitement corrélés entre eux, qui émerge de la cavité via une ouverture dans la cavité dans le cas de Maser. Ou un miroir semi réfléchissant dans le cas du LASER sous la forme d'une impulsion de rayonnement très courte et intense.

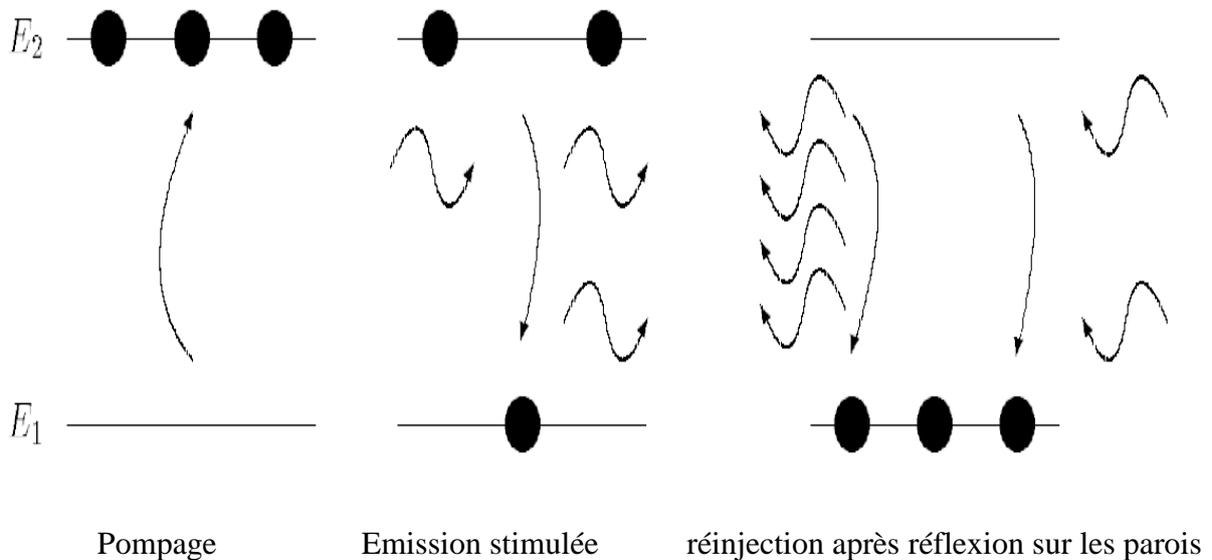


Figure III 2. Mécanisme de pompage puis d'émission stimulée.

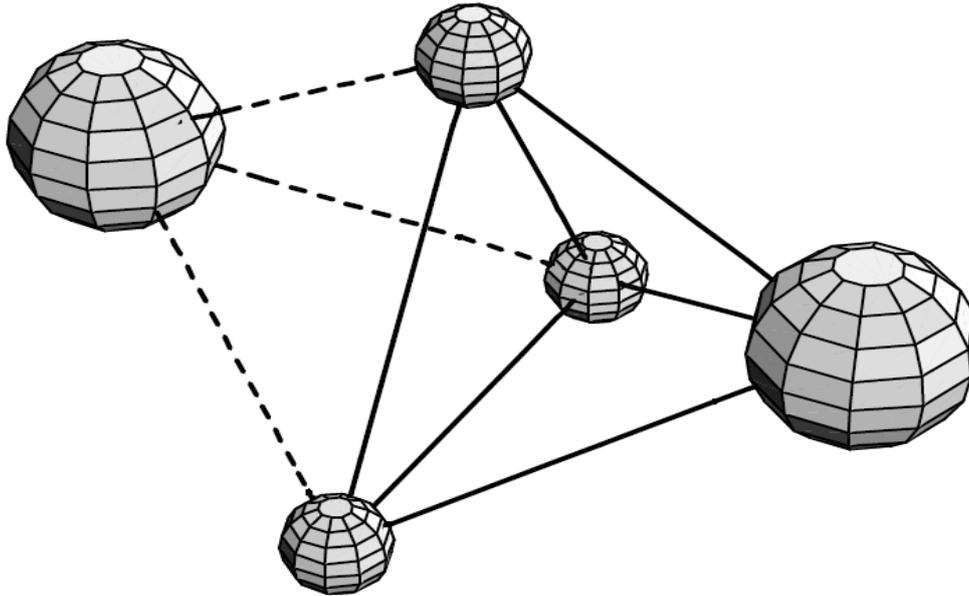


Figure III 3. Oscillation de la molécule d'ammoniac.

3.4 Le modèle de la molécule d'ammoniac

3.4.1 Restriction à un espace de Hilbert de dimension 2

Reprenons le calcul fait au chapitre 2, sur un modèle de puits de potentiel double pour la molécule NH_3 . Les deux niveaux d'énergie les plus bas correspondent à des fonctions d'onde spatiales $\psi_S(x)$ et $\psi_A(x)$ respectivement symétrique et antisymétrique, les énergies correspondantes étant $E_S = E_0 - A$, $E_A = E_0 + A$, $A > 0$. Les autres niveaux d'énergie E_α , sont tels que $E_\alpha - E_0 \gg A$. L'écartement $2A$ des deux niveaux E_S et E_A est donc très petit par rapport à l'écartement d'un de ces niveaux avec les autres niveaux d'énergie du système. Par exemple, dans la molécule d'ammoniac NH_3 , on a $2A \sim 10^{-4} \text{ eV}$; le premier état excité est lui aussi clivé en deux sous-niveaux

$$\begin{array}{l} E_S^1 = E_1 - A_1 \quad \text{et} \quad E_A^1 = E_1 + A_1 \\ \text{avec} \quad 2A_1 \sim 5 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \quad \text{et} \quad E_1 - E_0 \sim 0,12 \text{ eV}. \end{array}$$

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser aux seuls états combinaisons linéaires des deux états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ de plus basse énergie : $|\psi_S\rangle$ $\langle\psi_A|$

$$|\psi\rangle = \lambda |\psi_S\rangle + \mu |\psi_A\rangle. \quad (3.1)$$

Quel est le sens physique de cette restriction ? La molécule NH₃ est un système très complexe. Notons $\{\varepsilon_n\}$ la suite ordonnée de ses niveaux d'énergie et $|n\rangle$ les états propres correspondants. Un état général de la molécule s'écrira :

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle, \quad (3.2)$$

ou la probabilité de trouver la molécule dans l'état d'énergie ε_n est $P(\varepsilon_n) = |a_n|^2$. Il n'est pas difficile physiquement d'imposer des contraintes sur l'énergie des molécules dans un gaz, par exemple si ce gaz est en équilibre thermique avec son environnement. Nous savons qu'à une température T , le rapport des populations de molécules d'énergie E_i et E_j est donné par la loi de Boltzmann :

$$N(E_j)/N(E_i) = e^{-(E_j-E_i)/k_B T}$$

ou k_B est la constante de Boltzmann. Avec les données numériques ci-dessus, on vérifiera qu'à une température de 100 K, $N(E_S)/N(E_A) \sim 1$, alors que

$$N(E'_S)/N(E_S) \sim N(E'_A)/N(E_A) < 10^{-6}.$$

Par conséquent, la probabilité de trouver la molécule dans un état d'énergie supérieure est donc très faible [25], et nous pouvons en très bonne approximation représenter l'état (3.2) de chaque molécule par une combinaison des seuls états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ comme dans (3.1).

3.4.2 Base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$

Plaçons-nous dans la base des états propres de l'énergie $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$. Un vecteur d'état quelconque $|\psi\rangle = \lambda |\psi_S\rangle + \mu |\psi_A\rangle$, ou λ et μ sont des nombres complexes tels que $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$, s'écrit dans cette base :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Les nombres $|\lambda|^2$ et $|\mu|^2$ sont les probabilités de trouver, lors d'une mesure de l'énergie, les valeurs E_S et E_A . L'opérateur hamiltonien \hat{H} est diagonal dans cette base :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Bien entendu, il ne s'agit pas de l'hamiltonien total de la molécule NH_3 , qui est une matrice infinie agissant sur les états (3.2). C'est la *restriction* de cet hamiltonien au sous-espace à deux dimensions qui nous intéresse.

L'évolution dans le temps du vecteur d'état défini à $t = 0$ par (3.3) se calcule en résolvant l'équation de Schrodinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (3.5)$$

et s'écrit donc immédiatement :

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-iE_0 t/\hbar) \begin{pmatrix} \lambda \exp(i\omega_0 t/\hbar) \\ \mu \exp(-i\omega_0 t/2) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

ou nous avons introduit la pulsation de Bohr ω_0 du système :

$$2A = \hbar\omega_0. \quad (3.7)$$

On peut définir les états $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$ qui représentent respectivement les configurations classiques d'une particule à droite ou à gauche, à partir de :

$$|\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_D\rangle + |\psi_G\rangle) \quad |\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_D\rangle - |\psi_G\rangle), \quad (3.8)$$

soit, sous forme matricielle :

$$|\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Ces états $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$ sont états propres avec valeurs propres ± 1 . On définit ainsi une observable \hat{X} que nous appellerons observable *disposition de la particule par rapport au centre* :

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

$$\hat{X} |\psi_D\rangle = |\psi_D\rangle$$

$$\hat{X} |\psi_G\rangle = |\psi_G\rangle \quad (3.10)$$

Cette observable a pour valeurs propres ± 1 . Si le résultat de la mesure est $+1$, la particule est « dans le puits de droite »; si le résultat est -1 , elle est « dans le puits de gauche ». Cette observable \hat{X} 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. On rapprochera (3.10) du premier bloc 2×2 de (5.34) donnant la matrice \hat{x} pour l'oscillateur harmonique.

Par un calcul direct, la valeur moyenne $\langle x \rangle$ de l'observable \hat{X} dans l'état $|\psi(t)\rangle$ de (6.14) est :

$$\langle x \rangle = \lambda^* \mu e^{-i\omega_0 t} + \lambda \mu^* e^{i\omega_0 t} \quad (3.11)$$

En particulier, si à $t = 0$ la particule est « à droite » ($\lambda = \mu = 1/\sqrt{2}$), on obtient :

$$\langle x \rangle = \cos \omega_0 t. \quad (3.12)$$

Comme nous l'avons vu au chapitre 2, la particule oscille entre la gauche et la droite au cours du temps avec la pulsation ω_0 . On retrouve le phénomène d'inversion à la période

$$\tau = 2\pi/\omega_0 = \pi\hbar/A.$$

3.4.3 Base $\{|\psi_D\rangle, |\psi_G\rangle\}$

Les deux vecteurs $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$ forment bien évidemment une autre base de l'espace de Hilbert. Dans cette base, qui correspond aux configurations d'équilibre classiques, il est intéressant de voir l'origine du phénomène d'inversion.

On écrit les vecteurs de base comme :

$$|\psi_D\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_G\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad . \quad (3.13)$$

Dans cette base, les états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ s'écrivent :

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad . \quad (3.14)$$

Ici, le phénomène d'interférences apparaît sous une forme (presque trop) banale :

$|\psi_D\rangle$ (resp. $|\psi_G\rangle$) est une superposition linéaire des états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ qui interfèrent destructivement à gauche (resp. à droite).

Dans cette base, l'observable X est diagonale :

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (3.15)$$

En revanche, l'hamiltonien \hat{H} ne l'est pas. Il a la forme :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} . \quad (3.16)$$

dont les vecteurs propres sont $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ avec valeurs propres $E_0 \mp A$ comme on s'y attend.

Les termes non diagonaux dans l'hamiltonien ci-dessus sont appelés *termes de transition*. Ce sont eux qui induisent les transitions périodiques des états $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$ l'un vers l'autre : plus A est grand, plus cette transition est rapide.

Le formalisme matriciel a considérablement simplifié les choses par rapport aux calculs du chapitre 2. Bien entendu, un élément essentiel de ce calcul matriciel est la donnée du paramètre A , que nous avons pu calculer analytiquement pour le potentiel en double puits carré. Dans de nombreux cas, le calcul analytique ou numérique de ce paramètre est trop complexe et seule une détermination expérimentale est possible. Néanmoins, une fois cette valeur connue, le résultat du calcul matriciel est pratiquement immédiat.

3.5 Molécule NH₃ dans un champ électrique

Munis de ces techniques, nous pouvons aborder le principe du Maser qui a révolutionné la physique des ondes hertziennes et l'astrophysique. Nous considérons le cas spécifique du maser à ammoniac.

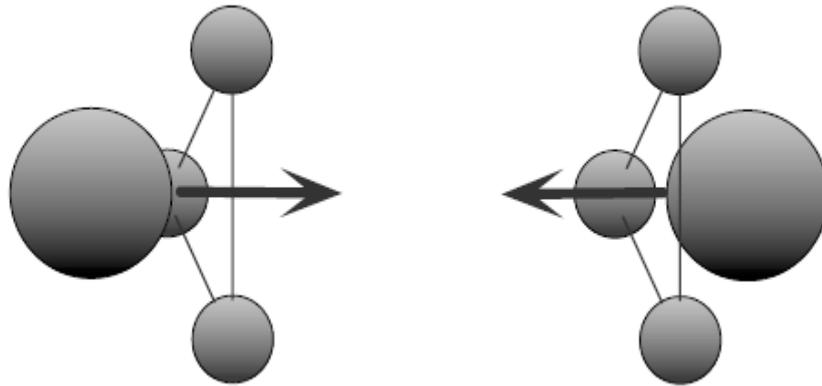


Figure III 4. Les deux configurations classiques de la molécule NH_3 et le dipôle électrique correspondant.

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 NH_3 est le prototype.

3.5.1 Le couplage de NH_3 à un champ électrique

Dans les configurations classiques de la molécule représentées en figure III.4, celle-ci possède un moment électrique dipolaire D . Ce moment dipolaire est porté par l'axe de symétrie de la molécule pour des raisons de symétrie évidentes. L'atome d'azote est électronégatif et attire les électrons, d'où l'orientation de D qui change de signe si la molécule se retourne [26].

Plaçons notre molécule dans un champ électrique statique \mathcal{E} . Classiquement, l'énergie potentielle W de la molécule dans un champ \mathcal{E} s'écrit :

$$W = -D \cdot \mathcal{E}. \quad (3.17)$$

Supposons pour simplifier que le champ \mathcal{E} est parallèle à x . Nous nous posons la question de connaître la forme de l'observable énergie potentielle W correspondante.

Nous travaillons désormais dans la base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$. Pour le problème qui nous intéresse (système à deux états), le choix naturel pour l'observable moment dipolaire électrique de la molécule est de supposer qu'elle est proportionnelle à l'observable \hat{X} définie plus haut :

$$\hat{D} = d_0 \hat{X} \begin{pmatrix} 0 & d_0 \\ d_0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

ou d_0 est un paramètre mesurable de la molécule (expérimentalement $d_0 \sim 3 \cdot 10^{-11} \text{ eV}/(\text{V}/\text{m})$). Autrement dit, nous supposons que si, en mesurant la disposition (droite ou gauche) de la molécule, nous trouvons les valeurs ± 1 avec certaines probabilités, en mesurant son moment électrique dipolaire, nous trouverons $\pm d_0$ avec les mêmes probabilités. Ce choix reproduit bien le fait que D change de signe lorsque la molécule se retourne.

Le choix naturel pour l'observable énergie potentielle de la molécule dans le champ, consiste alors à s'inspirer de la formule classique (3.17), c'est-à-dire considérer le produit de l'observable \hat{D} par la valeur du champ \mathcal{E} :

$$\hat{W} = -E \hat{D} = E d_0 . \quad (3.19)$$

Bien entendu, ce choix, quelque naturel qu'il puisse paraître, a pour réelle justification qu'il conduit à une explication correcte des résultats expérimentaux.

Dans le système complexe qu'est NH_3 , pour toute configuration spatiale de l'ensemble des particules, on peut définir les barycentres r^+ et r^- des charges positives (4 noyaux) et des charges négatives (10 électrons). Pour cette configuration, le moment dipolaire est $D = Q(r^+ - r^-)$ avec $Q = 10q$ (q est la charge élémentaire). Par le principe de correspondance, l'observable \hat{W} est $\hat{W} = -E \cdot \hat{D} = -Q E \cdot (\hat{r}^+ - \hat{r}^-)$. La forme (6.27) est la restriction de cet opérateur au sous-espace à deux dimensions qui nous intéresse ici.

3.5.2 Niveaux d'énergie dans un champ fixe

Dans un champ E , l'hamiltonien de la molécule est donc :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta \\ -\eta & E_0 + A \end{pmatrix} = E_0 \hat{I} - \sqrt{A^2 + \eta^2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

avec $\tan 2\theta = \eta/A$ et $-\pi/4 < \theta < \pi/4$, et où \hat{I} est la matrice unité. Les valeurs propres et vecteurs propres de \hat{H} s'obtiennent aisément :

$$E_- = E_0 - \sqrt{A^2 + \eta^2}, \quad |\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

$$E_+ = E_0 + \sqrt{A^2 + \eta^2}, \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Pour la validité de ce 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 $E_+ \ll E_1$ ou E_1 est l'énergie du premier état excipée. Autrement, les états d'énergie supérieure doivent être incorporés dans le calcul. Etant données les valeurs de A et de $E_1 - E_0$ pour NH_3 , il y a une bonne marge de manœuvre. L'approximation est justifiée pour tout champ réalisable en laboratoire. Deux cas limites intéressants sont à considérer.

3.5.2.1 Champ faible

Dans le régime de champ faible, $\theta \ll 1$ et les niveaux et états propres sont alors à l'ordre le plus bas non nul en \mathcal{E} :

$$E_{\mp} \cong E_0 \mp \left(A + \frac{d_0^2 \mathcal{E}^2}{2A} \right) \quad (3.23)$$

$$|\psi_{-}\rangle \cong |\psi_S\rangle + \frac{d_0 \mathcal{E}}{2A} |\psi_A\rangle \quad |\psi_{+}\rangle \cong |\psi_A\rangle - \frac{d_0 \mathcal{E}}{2A} |\psi_S\rangle \quad (3.24)$$

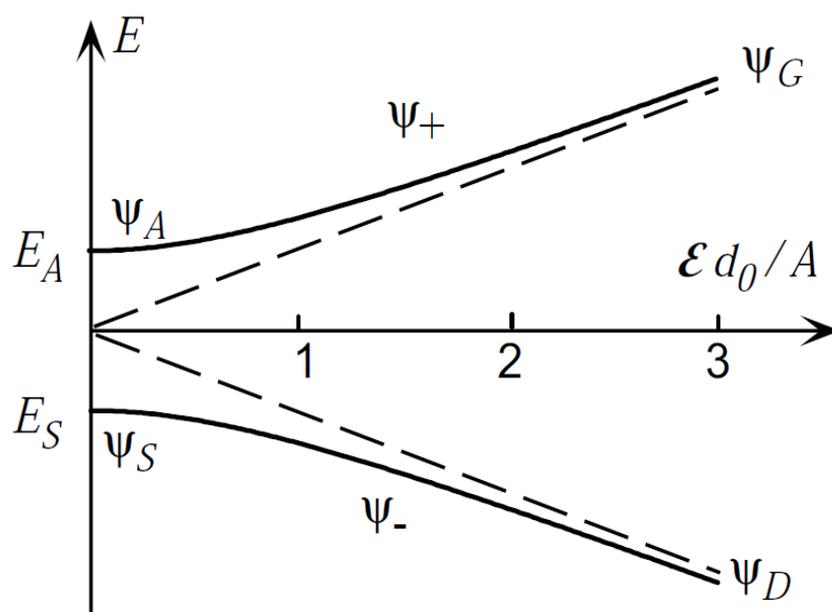


Figure III 5. Energies propres d'une molécule NH_3 dans un champ électrique.

En l'absence de champ, chaque état propre de \hat{H} est symétrique ou antisymétrique et la valeur moyenne du dipôle D dans ces états est nulle. L'effet d'un champ faible est de polariser partiellement la molécule. La valeur moyenne du moment dipolaire induit dans les états $|\psi_{+}\rangle$ et $|\psi_{-}\rangle$ est proportionnelle à \mathcal{E} :

$$\langle D \rangle_{\mp} \cong \pm \frac{d_0^2}{A} \mathcal{E}.$$

La quantité d_0^2/A s'appelle la polarisabilité de la molécule. Elle est grande pour NH_3 car la valeur de A est faible. Le déplacement des niveaux d'énergie varie quadratiquement avec le champ \mathcal{E} . Cela se comprend puisque l'énergie d'interaction est proportionnelle au produit du champ \mathcal{E} par le dipôle induit dans la molécule, lui-même proportionnel au champ.

3.5.2.2 Champ fort

Si le champ est fort, c'est-à-dire $\eta \gg A$, l'angle de mélange approche $\theta \sim \pi/4$, et les valeurs propres et états propres sont alors :

$$E_{\mp} \cong E_0 \pm d_0 \mathcal{E} \qquad |\psi_{-}\rangle \cong |\psi_D\rangle \qquad |\psi_{+}\rangle \cong -|\psi_G\rangle. \quad (3.25)$$

En régime de champ fort, les états propres de l'hamiltonien correspondent à une molécule presque complètement polarisée :

$$\langle D \rangle_{\mp} \cong \mp d_0.$$

Les énergies sont approximativement linéaires dans le champ, comme pour un dipôle classique.

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 , du 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 $|\psi_G\rangle$. La figure III.5 donne l'évolution des niveaux d'énergie en fonction de l'intensité du champ (en unités A/d_0). Le moment électrique dipolaire d_0 de l'ammoniac vaut $d_0 \cong 3 \cdot 10^{11} \text{ eV}/(\text{V/m})$. La démarcation entre les deux régimes se situe vers $\mathcal{E}_c = A/d_0 \sim 1,7 \cdot 10^6 \text{ V/m}$. A titre de comparaison, pour la molécule PH_3 ou le clivage A est beaucoup plus faible, on aurait $A/d_0 \sim 30 \text{ V/m}$.

3.5.3 Force subie dans un champ inhomogène

Plaçons-nous en régime de champ faible, où les niveaux d'énergie sont donnés par (3.23). Le terme $d_0^2 \mathcal{E}^2 / 2A$ peut être interprété comme un terme d'énergie potentielle de la molécule dans le champ, dont nous voyons qu'il a un signe opposé suivant que l'état interne de la molécule $|\psi_{-}\rangle$ ou $|\psi_{+}\rangle$.

Préparons un jet moléculaire se propageant suivant une direction x , auquel nous faisons traverser une région où règne un champ électrique inhomogène.

Ces molécules sont de « gros » objets, et leur mouvement peut être décrit en bonne approximation de façon classique. En passant dans ce champ inhomogène, elles vont subir une force :

$$F_{\mp} = \pm \nabla \left(\frac{d_0^2 \mathcal{E}^2}{2A} \right). \quad (3.26)$$

Le signe de cette force dépend de l'état interne ($|\psi_{-}\rangle$ ou $|\psi_{+}\rangle$) de la molécule.

Par conséquent, à la sortie de la zone de champ inhomogène, le faisceau initial sera séparé en deux faisceaux, l'un ne contenant que des molécules dans l'état $|\psi_S\rangle$, l'autre des molécules dans l'état $|\psi_A\rangle$.

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 $|\psi_{-}\rangle \sim |\psi_S\rangle$.

Le jet obtenu ne correspond pas à un équilibre thermodynamique puisque l'état le plus peuplé n'est pas l'état fondamental $|\psi_S\rangle$. On appelle ce type d'opération une *inversion de population*.

Le dispositif simple ci-dessus n'est qu'un exemple parmi une multitude de techniques d'inversion de population.

L'inversion de population rompt l'équilibre thermodynamique qui existait entre les états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ dans le faisceau initial.

Commentaires :

1) Un faisceau dans l'état pur $|\psi_{+}\rangle$ sera focalisé et un faisceau dans l'état $|\psi_{-}\rangle$ sera délocalisé. Il n'est pas du tout évident de deviner ce qui se passera pour un faisceau dans la superposition quantique $\alpha|\psi_{-}\rangle + \beta|\psi_{+}\rangle$. Nous étudierons ce

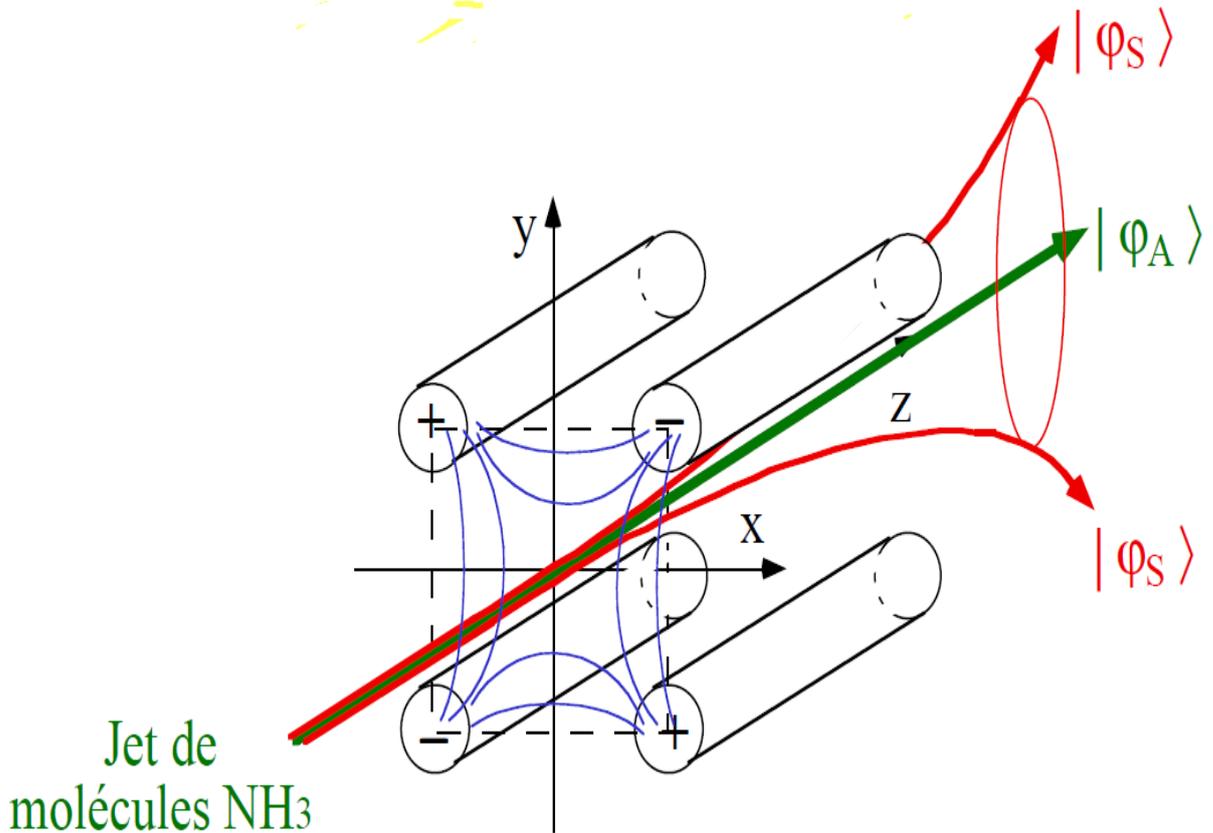


Figure III 6. Stabilisation du faisceau $|\psi_+\rangle$ et divergence du faisceau $|\psi_-\rangle$ dans un champ électrique quadripolaire ($E^2 \propto y^2 + z^2$).

Les molécules dans l'état $|\psi_A\rangle$ sont guidées, les molécules dans l'état $|\psi_S\rangle$ sont éjectées. Le résultat net est l'on observe deux faisceaux émergents d'intensités relatives $|\alpha|^2$ et $|\beta|^2$ respectivement délocalisé et focalisé. Les molécules du faisceau délocalisé seront dans l'état interne $|\psi_-\rangle$, les autres dans $|\psi_+\rangle$.

2) 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-espaces propres correspondants E_S et 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 compliqué 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

certaines sont focalisés (comme $|\psi_+\rangle$), et les autres expulsés du centre du faisceau (comme $|\psi_-\rangle$).

3.6 Champ oscillant et effet maser

Pour passer au principe du maser, nous allons obliger les molécules sélectionnées dans l'état $|\psi_A\rangle$ à restituer leur énergie $2A$ en retombant dans l'état fondamental $|\psi_S\rangle$. Spontanément, les molécules se désexcitent, mais avec une vie moyenne très longue de l'ordre d'un mois. On stimule cette émission en soumettant ces molécules à un champ électrique oscillant de pulsation ω : $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$, à condition que ω soit accordée à la fréquence de Bohr ω_0 du système.

Posons encore $\eta = d_0 \mathcal{E}_0$; l'hamiltonien dépend maintenant du temps :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta \cos \omega t \\ -\eta \cos \omega t & E_0 + A \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

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 :

$$i\hbar \dot{a} = (E_0 - A)a - \eta b \cos \omega t, \quad (3.28)$$

$$i\hbar \dot{b} = (E_0 + A)b - \eta a \cos \omega t. \quad (3.29)$$

En posant

$$a(t) = e^{-i(E_0 - A)t/\hbar} \alpha(t) \quad \text{et} \quad b(t) = e^{-i(E_0 + A)t/\hbar} \beta(t),$$

on obtient :

$$2i\dot{\alpha} = -\omega_1 \beta (e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{-i(\omega + \omega_0)t}), \quad (3.30)$$

$$2i\dot{\beta} = -\omega_1 \alpha (e^{-i(\omega - \omega_0)t} + e^{i(\omega + \omega_0)t}). \quad (3.31)$$

Ce système fait intervenir trois pulsations :

$$\omega, \omega_0 = 2A/\hbar, \quad \text{et} \quad \omega_1 = \eta/\hbar = d_0 E_0/\hbar. \quad (3.32)$$

Physiquement, ce système différentiel correspond à des oscillations forcées avec un phénomène de *résonance* 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 $e^{\mp i(\omega + \omega_0)t}$. On se ramène alors à un système différentiel exactement soluble, nous nous contentons ici d'en donner la solution. La probabilité de transition $P_A \rightarrow S(t)$ qu'au bout du temps t ces molécules, sous l'influence du champ oscillant, soient passées dans l'état $|\psi_S\rangle$ et se soient donc « vidées » de l'énergie $2A = E_A - E_S$ est donnée par :

$$P_A \rightarrow S(t) \cong \frac{\omega^2}{(\omega - \omega_0)^2} + \sin^2 \left(\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \frac{t}{2} \right) \quad (3.33)$$

Cette formule est due à Rabi. Comme on le voit sur la figure III 7a, la probabilité $P_A \rightarrow S(t)$ oscille dans le temps entre 0 et une valeur maximum P_{max} donnée par :

$$P_{max} = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$$

Lorsqu'on fait varier la pulsation ω du champ appliqué (figure III 7b), la probabilité maximale P_{max} a un comportement résonant caractéristique, avec un maximum égal à 1 pour $\omega = \omega_0$. La largeur à mi-hauteur de la courbe de résonance est ω_1 .

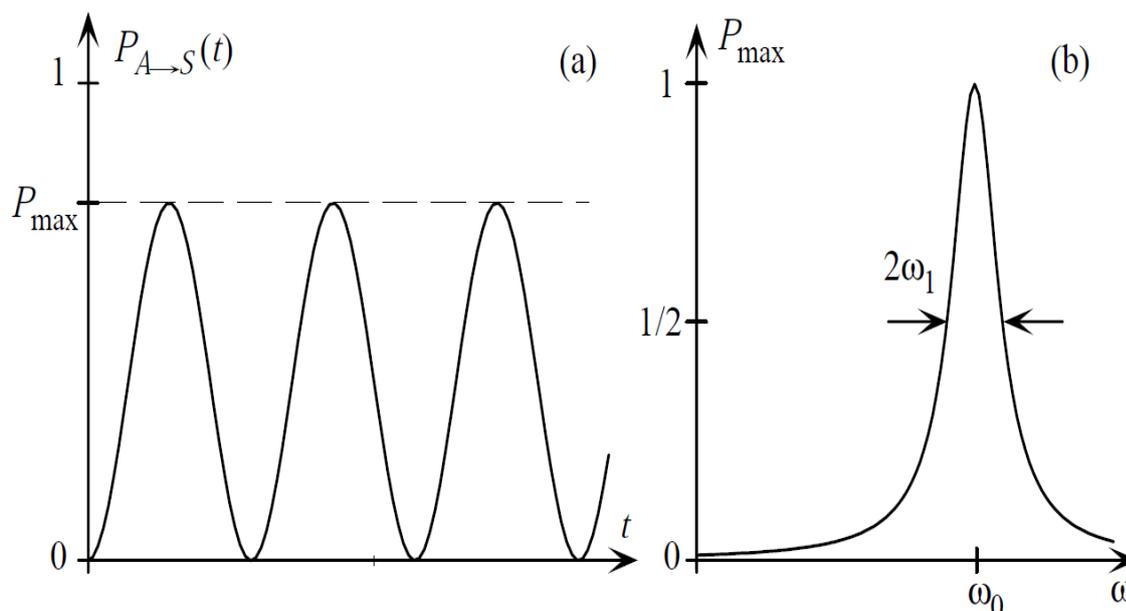


Figure III 7. Oscillation de Rabi. (a) : Probabilité de trouver la molécule dans l'état $|\psi_S\rangle$ en fonction du temps. (b) : Courbe de résonance montrant la probabilité maximum de transition en fonction de la pulsation ω du champ externe.

Si la fréquence du champ est accordée au voisinage de la résonance, c'est-à-dire $|\omega - \omega_0| \ll \omega_1$, pratiquement toutes les molécules se vident de leur énergie

$2A$ au bout du temps $T = \pi/\omega_1$. Cette émission d'énergie se fait sous la forme d'un rayonnement électromagnétique de fréquence $\nu = \omega_0/2\pi = 24 \text{ GHz}$.

On appelle cela le phénomène d'*émission stimulée*. Plus ω_1 est faible, plus la courbe de résonance de la figure III.7 b est étroite, et plus le temps qu'il faut pour restituer l'énergie est grand.

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 très long (1 mois). Par le mécanisme d'émission stimulée, on a forcé cette transition à se faire très rapidement ($T \sim 7 \cdot 10^{-8} \text{ s}$ pour un champ $\mathcal{E}_0 \sim 10^3 \text{ V m}^{-1}$). C'est Einstein qui, en 1917, dans une analyse de l'équilibre matière-rayonnement, a le premier compris l'existence du phénomène d'émission stimulée.

3.7 Principe et applications du maser

Un dispositif schématisé de MASER est représenté sur la figure III 8 à partir d'un jet moléculaire de vitesse v , on sépare les molécules dans l'état $|\psi_A\rangle$ par un champ électrique

inhomogène. On fait ensuite passer le faisceau ainsi préparé dans une cavité à haute fréquence où règne un champ $\mathcal{E}_0 \cos \omega_0 t$

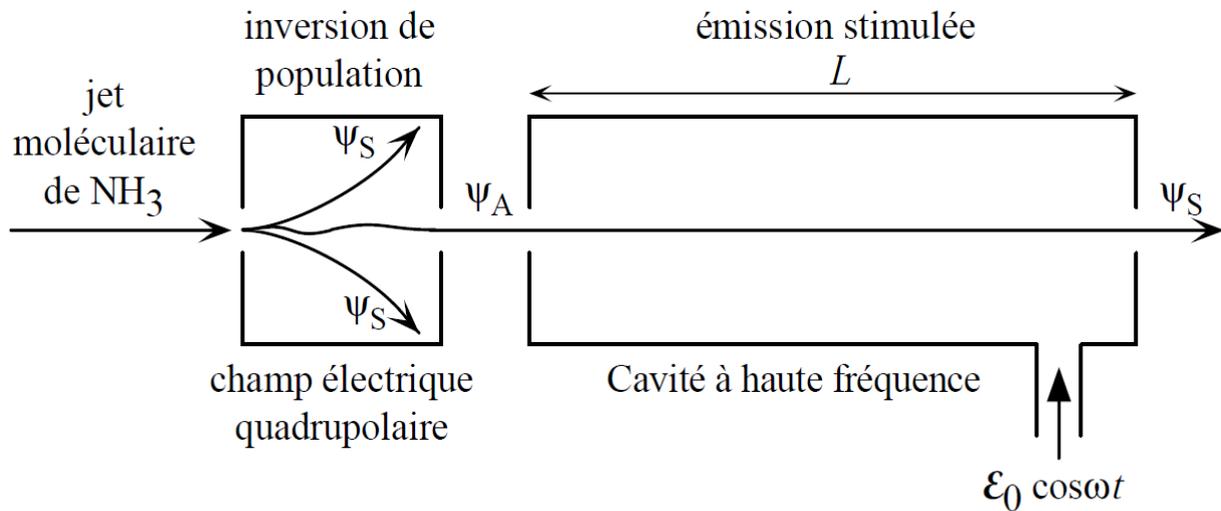


Figure III 8. Schéma d'un dispositif de maser à NH_3 .

et dont la longueur L est ajustée de façon à ce que $L/v = T = (2n + 1)\pi/\omega_1$.

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 .

Il y a trois types principaux d'utilisation d'un tel dispositif.

3.7.1 Amplificateur

On peut *amplifier* de façon très sélective, et sans bruit de fond, un signal très faible (pour NH_3 , on peut facilement sélectionner une bande de largeur 3 kHz, soit $\delta\omega/\omega \sim 10^{-7}$). D'où des applications extrêmement importantes en radioastronomie pour l'étude du milieu interstellaire [28].

A l'origine, Townes utilisait un faisceau de 10^{14} molécules par seconde d'où une puissance à résonance de 10^{-9} W. A l'heure actuelle, on utilise des masers à l'état solide, comme un cristal de rubis (un cristal Al_2O_3 avec des ions de Cr^{+3} d'une concentration d'environ 0,05 %) [29]. Cela permet d'atteindre des gains de 36 dB. De tels Masers furent utilisés en 1965 par A. Penzias et R.W. Wilson lorsqu'ils firent la découverte du rayonnement fossile à 3 Kelvin, qui constitue l'une des preuves observationnelles les plus nettes du Big Bang.

Tel que nous le présentons, le dispositif de la figure III 8 n'est pas un amplificateur mais un émetteur ou un oscillateur, puisque la puissance de sortie ne dépend pas de l'intensité du

signal d'entrée. Pour voir le dispositif fonctionner en amplificateur, il faut calculer sa réponse à un signal incohérent étalé en fréquence. Notre calcul concernait explicitement un champ excitateur monochromatique et cohérent.

3.7.2 Oscillateur

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.

3.7.3 L'horloge à ammoniac

Les horloges atomiques, qui sont les étalons de temps actuels, fonctionnent suivant un principe très voisin de celui du MASER.

Pourtant, le destin fit que la première horloge atomique n'employa pas de césium du tout. En fait, elle n'utilisa aucun atome simple, mais une molécule. Harold LYONS, physicien du NBS américain (*National Bureau of Standards*, ou bureau national de métrologie, situé à l'époque dans la ville de Washington), choisit de concevoir une horloge fondée sur la molécule d'ammoniac[30].

Cette molécule est composée de quatre atomes, un d'azote et trois d'hydrogène. On peut la représenter comme un atome d'azote situé au sommet d'une pyramide à base triangulaire, dont les trois hydrogènes occupent chacun un angle. Il existe deux formes de cette molécule ; une pyramide « normale » et une pyramide « inversée », où l'atome d'azote est au-dessous de la base constituée par les atomes d'hydrogène. Chaque molécule d'ammoniac peut se trouver alternativement dans l'une ou l'autre de ces deux configurations, par « traversée » de l'atome d'azote au travers du triangle d'atomes d'hydrogène (voir la figure III 9)

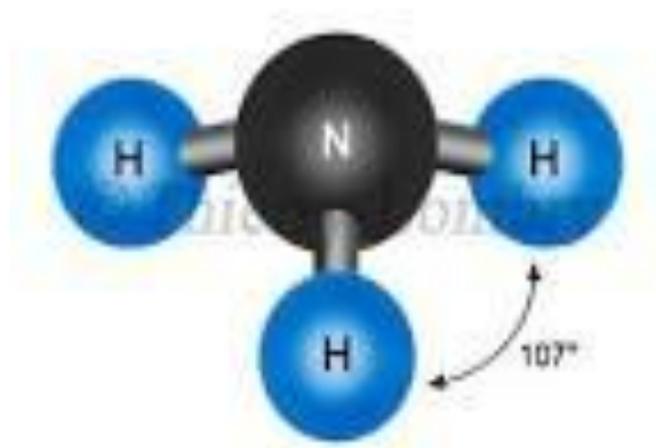


Figure III 9. La molécule d'ammoniac.

Pour des raisons liées à la théorie quantique, et dans lesquelles nous n'entrerons pas, la molécule d'ammoniac possède deux états d'énergies voisines, combinaisons des précédents :

elle peut passer de l'un à l'autre sous l'influence d'un photon dont l'énergie est égale à la différence d'énergie des deux niveaux. Cette différence d'énergie correspond à une fréquence de 23 658 mégahertz, soit une longueur d'onde de 1,25centimètre. Comme dans le cas de la transition hyperfine du césium, cette longueur d'onde se trouve dans la zone des micro-ondes, utilisées dans les radars que Lyons et ses collègues avaient employés durant la guerre. Le NBS avait pour mission de réaliser des étalons de fréquence dans le domaine des micro-ondes, pour aider au développement de radars fonctionnant avec des ondes de fréquences de plus en plus élevées [31]. A cette époque, la transition « miroir » de l'ammoniac était déjà connue, car elle avait été étudiée depuis le début des années 1930.

L'ammoniac est un gaz qui comporte habituellement un mélange des deux états de la molécule en quantités égales, avec des transitions incessantes entre ces deux états. Toutefois, si l'on est capable d'envoyer un faisceau de micro-ondes accordé sur la bonne fréquence à travers le gaz, la moitié des molécules situées sur le niveau d'énergie le plus bas absorberont ces photons micro-ondes et monteront sur le second niveau, plus élevé.

Au cœur de l'horloge du NBS, se trouvait un tuyau de cuivre rectangulaire de 10 mètres de long (un « guide d'ondes ») rempli de gaz d'ammoniac sous une faible pression. Les micro-ondes étaient envoyées à une extrémité du tuyau, et un récepteur les détectait à l'autre bout. Quand la fréquence des micro-ondes était différente de la fréquence d'inversion, les ondes traversaient le gaz sans encombre.

Au contraire, quand la fréquence choisie était voisine de cette fréquence d'inversion, le gaz absorbait des photons micro-ondes et le récepteur enregistrait une baisse de l'intensité des ondes ayant traversé le tuyau. Grâce à cette méthode, il était possible de régler exactement la fréquence des micro-ondes pour que l'absorption soit maximale. Pour ce réglage, la fréquence des micro-ondes envoyées par l'émetteur était égale à la fréquence d'inversion, soit 23 870 mégahertz.

Il faut souligner que cette fréquence d'inversion n'a rien à voir avec la manière dont on a construit le dispositif ; elle ne dépend que des propriétés intrinsèques de la molécule d'ammoniac. Au contraire de l'horloge à balancier, dont la période dépend de la longueur exacte du pendule, ou de l'horloge à quartz, dont la période dépend de la façon dont on a taillé le cristal, le battement d'une horloge atomique ne dépend que de la nature des atomes ou des molécules utilisés pour réaliser l'étalon de fréquence.

En 1949, cette horloge excita la curiosité du grand public quand on la présenta pour la première fois, peut-être était-ce parce qu'elle emblait « faite pour le rôle » (voir la figure III 10).



Figure III 10. La première horloge atomique, dévoilée au NBS, le bureau américain des étalons de mesure, en 1949. Elle fonctionnait grâce à l'absorption d'ondes radio par de l'ammoniac gazeux à la fréquence de 23 870 mégahertz. Le directeur du NBS, Edward Condon (à gauche) contemple un modèle de la molécule d'ammoniac, sous le regard intéressé de l'inventeur de l'horloge, Harold Lyons.

Lyons avait installé l'équipement dans deux étagères d'apparence ordinaire, mais au sommet trônait le guide d'onde en plaqué or, enroulé autour d'une horloge électrique banale. Grâce aux journalistes, ce guide d'onde devint immédiatement une célébrité.

Malheureusement, cette horloge ne tint pas ses promesses. Une version améliorée atteignit une stabilité de vingt parties par milliard, mais ce résultat était à peine supérieur à celui des horloges à quartz, ou de la rotation terrestre. Lors de sa présentation, l'horloge ne pouvait fonctionner que pendant quelques heures ; cette durée fut ensuite portée à quelques jours.

La limitation principale de l'horloge à ammoniac était que la gamme de fréquences d'absorption était trop large. Au lieu d'absorber les micro-ondes à la fréquence précise de l'inversion, les molécules absorbaient une vaste plage de fréquences. Cela était dû à l'effet Doppler[32]. A température ambiante, les molécules de gaz se précipitent dans toutes les directions à plusieurs centaines de mètres par seconde. Si, à l'échelle moléculaire, l'on pouvait observer l'intérieur du guide d'onde de l'horloge à ammoniac, on verrait à peu près la moitié des molécules s'éloignant rapidement de l'observateur, tandis que l'autre moitié se rapprocheraient. Celles qui iraient à contre-courant des micro-ondes percevraient une fréquence plus élevée (on dit aussi, improprement, décalée vers le bleu). Parallèlement, les molécules allant dans le même sens que l'onde à contre-courant des micro-ondes percevraient une fréquence plus élevée (on dit aussi, improprement, décalée vers le bleu). Parallèlement, les molécules allant dans le même sens que l'onde verraient une fréquence plus basse (« décalée vers le rouge »). En conséquence, même si le faisceau de micro-ondes est précisément ajusté à la fréquence d'inversion, de nombreuses molécules n'absorberont pas ces micro-ondes parce qu'elles verront une fréquence trop haute, ou trop basse. De plus, si la fréquence radio est légèrement différente de la fréquence d'inversion, quelques molécules absorberont tout de même les micro-ondes car elles auront une vitesse telle que cela sera possible. Le résultat net est qu'une bande de fréquence trop large est susceptible d'être absorbée autour de la fréquence d'inversion, et cela réduit d'autant la précision de l'étalon de fréquence. L'usage de l'ammoniac dans la réalisation d'une horloge atomique n'est pas en cause, c'est le mouvement des molécules qui dégrade la précision du dispositif [33].

Les horloges actuelles ont une précision relative de 10^{-15} , ce qui fait du temps le plus précis des étalons de mesure. Une telle précision est essentielle aussi bien dans le domaine de la physique appliquée, comme le positionnement et la navigation, terrestre ou par satellite (système GPS), qu'en physique fondamentale pour l'astrophysique ou pour les tests de la théorie de la relativité[34].

3 8. Conclusion :

Le Maser et le Laser fonctionnent sur le même principe d'amplification du rayonnement basé sur l'émission stimulée. Le Maser émet un rayonnement dans le domaine radio à des

Application au Maser à Ammoniac.

longueurs d'onde très supérieures (du millimètre au mètre) à celles des lasers qui fonctionnent en optique dans le domaine visible ($\lambda \approx 400 - 700 \text{ nm}$) ou infra-rouge ($\lambda \approx 1 - 10 \mu\text{m}$).

L'émission de photons est produite par des transitions d'une particule (atome ou molécule) qui passe d'un état haut 2 vers un état bas 1. Contrairement à l'émission spontanée isotrope, l'émission stimulée émet un photon qui se propage strictement dans la même direction que le photon « stimulant ». C'est ce qui conduit aux propriétés du faisceau : directivité et cohérence.

Conclusion générale

On s'intéresse ici à un mouvement particulier des atomes de la molécule ammoniac NH_3 , où l'azote se rapproche du plan des hydrogènes et le traverse pour aboutir à une nouvelle position d'équilibre, symétrique de la précédente.

En effet, nous avons d'abord travaillé sur l'effet tunnel, nous avons simulé sur Mapel la situation expérimentale où un faisceau d'électrons homogène frappe une barrière de potentiel de hauteur V_0 et de largeur a variable, ou les résultats montrent la forte influence de la largeur de la barrière sur la proportion d'électrons qui traversent la barrière.

Par la suite dans cette étude, nous avons calculé le dédoublement des deux premiers niveaux d'énergies (E_1 et E_2) de vibration d'inversion de la molécule d'ammoniac, ce calcul se caractérise essentiellement par l'utilisation de la méthode approximation de KRÔNIG-PENEY pour résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger relative au mouvement de l'atome d'azote N, en cherchant toujours à améliorer nos résultats au fur et à mesure que nous avançons dans notre travail. Pour cela, nous avons utilisé les outils mathématiques (développement limité, des conditions de continuité, des équations différentielles ...) pour nous rapprocher des résultats les plus précis possibles ainsi de l'expression analytique de l'hamiltonien. Sachant que les améliorations les plus importantes ont été réalisées sur le potentiel et plus précisément sur la barrière de ce potentiel qui sépare les deux puits.

Par ailleurs, l'approximation faite sur l'hamiltonien a donné des résultats très satisfaisants puisque nous arrivons à calculer très correctement le dédoublement des deux premiers niveaux d'énergie de vibration dans l'ammoniac, et à comparer la fréquence calculée avec les résultats de la littérature.

Nos résultats prouvent ainsi que la prise en compte des deux premiers niveaux d'énergies pour le calcul du potentiel est indispensable, et permettant une interprétation qualitative du modèle double puits de la molécule d'ammoniac NH_3 utilisé dans le MASER à ammoniac.

Le MASER utilise ce matériau actif qui permet l'envoi d'un photon à une fréquence de 23 658 mégahertz, celui-ci provoque le retour d'une première molécule au niveau fondamental, qui émet alors simultanément un photon s'ajoutant au photon initial. Celui-ci provoque le retour d'une première molécule au niveau fondamental, qui émet alors simultanément un photon s'ajoutant au photon initial. Ces deux photons sont réinjectés, après réflexion sur les parois du guide d'onde, dans le matériau provoquent chacun l'émission d'un photon supplémentaire s'additionnant au flux initial: l'effet d'amplification de rayonnement électromagnétique qui en résulte conduit très rapidement à l'apparition d'un flux intense de photons, parfaitement corrélés entre eux, qui émerge de la cavité via une ouverture dans la cavité dans le cas du MASER, sous la forme d'une impulsion de rayonnement très courte et intense.

A la fin, nous avons étudié le principe du MASER et l'interaction ou le couplage du champ électrique avec le moment dipolaire de la molécule ou :

- 1- soit la molécule s'oriente vers le champ dans un mouvement de rotation dans l'espace.
- 2- soit l'atome azote passe à travers le plan d'hydrogènes.

Dans tous les cas l'énergie diminue, ce qui permettra de réaliser le tri des molécules pour l'inversion de population.

Pour poursuivre ces travaux, une étude prospective d'un maser à ammoniac qui oscille avec une cavité résonnante constituée par deux résonateurs couplés. Le premier résonateur reçoit le jet de « molécules actives », le second est placé dans le champ magnétique et contient l'échantillon que l'on désire étudier par résonance paramagnétique électronique (RPE). Ce maser oscillateur se comporte vis-à-vis du phénomène de RPE comme un « oscillateur marginal » utilisé en résonance magnétique nucléaire.

Bibliographie

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Annalen der Physik (1905) ; traduit en anglais par A.B. Arons et M.B. Peppard, American Journal of Physics (1965).
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Mécanique quantique, Hermann, Paris, 1973
- [3] N. Yamanaka, Y. Kino, Phys. Rev. A, 64, 042715 (2001)
- [4] V.S. Melezhik, D. Baye, Phys. Rev. C, 59, 3232 (1999)
- [5] D. Dundas, Phys. Rev. A, 65, 023408 (2002)
- [6] S.A. Chin, C.R. Chen, J. Chem. Phys., 114, 7338 (2001)
- [7] E. Kerner, Can. J. Phys., 36, 371 (1958)
- [8] "Eléments de théorie des quantas et de mécanique ondulatoire" de Louis de Broglie
- [9] "Mémoires sur la mécanique ondulatoire" d'Erwin Schrödinger himself, qui présente en différents articles sa démarche pour aboutir à l'équation éponyme.
- [10] "Erwin Schrödinger and the quantum revolution" de John Gribbin, qui retrace l'histoire des travaux de Schrödinger et de sa vie.
- [11] "Microscope à effet tunnel : F. Salvan, Le Microscope à effet tunnel, Octobre 1986 ; C.F. Quate, Vacuum Tunneling : A new technique for microscopy, Physics
- [12] C.F. Quate, Vacuum Tunneling : A new technique for microscopy, Physics Today, **39**, aout 1986. P. Zeppenfeld, D.M.
- [13] Eigler et E.K. Schweitzer, "On manipule même les atomes", La Recherche, mars 1992. K. Likarov and T. Claeson, "L'électronique ultime", Pour laScience, aout 1992.

Bibliographie

- [14] M. Johnson et G. Kearley, L'effet tunnel et les protéines, Pour la Science, mars 2001
- [15] B.H. Bransden et C.J. Joachain : Physics of atoms and molecules, Prentice Hall, Harlow, G.B., 2^{ème} édition, 2003.
- [16] E. Merzbacher : Quantum mechanics, Wiley, New-York, 2^{ème} édition, 1970.
- [17] M. Abramowitz et I.A. Stegun : Handbook of mathematical functions, . Dover, New York, 1972.
- [18] B.H. Bransden et C.J. Joachain : Physics of atoms and molecules, Prentice Hall, Harlow, G.B., 2^{ème} édition, 2003.
- [19] F. Cailliez : Inversion de la molécule d'ammoniac, rapport de licence., 2000.
- [20] A.M. Halpern, B.R. Ramachandran et E.D. Glendening : The inversion potential of ammonia : an intrinsic reaction coordinate calculation for student investigation. J. Chem. Educ., 84:1067–1072, 2007.
- [21] J.-P. Grivet : Méthodes numériques appliquées pour le scientifique et l'ingénieur. EDP Sciences, Les Ulis, 2^{ème} édition, 2013.
- [22] K. Schmidt et M.A. Lee : Visual Schrödinger : a visualizer-solver applet for the one-dimensional Schrödinger equation, 1998.
- [23] C.H. Townes et A.L. Schawlow, Microwave Spectroscopy, Mc. Graw and Hill (1954).
- [24] A.A. Vuytsteke : Maser states in ammonia inversion. Am. J. Phys., 27:554–565, 1959.
- [25] J.P. Gordon : Hyperfine structure in the inversion spectrum of $^{14}\text{NH}_3$ by a new high-resolution microwave spectrometer. Phys. Rev., 99:1253–1263, 1955.
- [26] C.H. Townes, in C.H. Townes (Ed.), Quantum Electronics, Columbia University Press, New York, 1960; C. Kittel, Phys. Rev. Letters, 6 (1961) 449.

Bibliographie

[27] C. H. Townes, in J. R. Singer (Ed.), *Advances in Quantum Electronics*, Columbia University Press, New York, 1961.

[28]. Shimoda, Wang and Townes, *Phys. Rev.*, 102 (1956) 1308.

[29]. A.L. Schawlow and C.H. Townes, *Phys. Rev.*, 112 (1958) 1940.

[30]. A correction of a factor of 2 to d given by Gordon, Zeiger and Townes¹⁰, and Schawlow and Townes¹⁵, is demonstrated by P. Grivet and A. Blaquiere, *Proc. Symp. Optical Masers*, Polytechnic Inst., Brooklyn, 1963.

[31] J.P. Gordon, H.J. Zeiger et C.H. Townes : The maser, new type of microwave amplifier, frequency standard and amplifier. *Phys. Rev.*, 99:1264–1274, 1955.

[32] les horloges atomiques : J. Vanier et C. Audouin, *The Quantum*

[33] *Physics of Atomic Frequency Standards* (Adam Hilger, Bristol, 1989) ;

[34] W. Itano et N. Ramsey, *Atomes piégés et mesure du temps*, *Pour la Science*, juillet 1993.

Résumé

L'acronyme M.A.S.E.R "Micro wave Amplification by Stimulated Emission of Radiations". Comme le LASER, le MASER exploite le mécanisme d'émission stimulé, mais en diffère par une technologie plus adaptée à la bande de fréquence correspondant aux micro-ondes 24GHZ pour le MASER à ammoniac. Le modèle quantique consiste à supposer que l'atome d'azote N possède deux positions d'équilibre thermodynamique de part et d'autre du plan des hydrogènes, séparées par une barrière de potentiel. Ou le passage d'une position à l'autre a lieu par effet tunnel.

Dans ce travail nous avons tout d'abord étudié l'effet tunnel, ensuite, cherché à mettre en évidence l'existence de deux niveaux d'énergie et calculé la fréquence d'émission / absorption associée, à partir des méthodes d'approximations permettant de résoudre l'équation de Schrödinger. Et aussi détailler le mécanisme de l'émission stimulée et la dynamique interne de la molécule en particulier les mouvements d'oscillations sur laquelle repose le principe du Maser à Ammoniac.

Mots clés :

Effet Tunnel, Mécanique Quantique, Ammoniac NH_3 , Equation de Schrödinger, Barrière de Potentiel, Méthodes d'Approximations, Maser à Ammoniac.

Abstract

The acronym MASER "Micro Wave Amplification by Stimulated Emission of Radiation." As LASER the MASER operates the stimulated emission mechanism, but differs in a suitable frequency band corresponding to microwave technology 24GHz for ammonia maser. The quantum model is to assume that the nitrogen atom N has two positions thermodynamic equilibrium on either side of the plane of the hydrogens, separated by a potential barrier. The passage from one position to another takes place by tunnel effect.

In this work we first studied the tunnel effect then sought to highlight existence of two energy levels and calculated the frequency of emission / absorption associated, from approximations methods for solving the Schrödinger equation. And also detail the mechanism of stimulated emission and the internal dynamics of the molecule NH_3 in particular oscillation movements on which the principle rests Ammonia Maser.

Keywords:

Tunnel effect, Quantum Mechanics, Ammonia NH_3 , Schrödinger Equation, potential barrier, methods approximations, Ammonia Maser

ملخص

كما المازر تعمل آلية الانبعاث LASER "مايكرو موجة التضخيم بواسطة الانبعاث المستحث للإشعاع". M.A.S.E.R في اختصار تكنولوجيا الميكروويف لمدة المازر الأمونيا. نموذج الكم هو 24GHZ المستحث، ولكنه يختلف في نطاق ترددات مناسبة المقابلة لموقعين التوازن الحرارية على جانبي الطائرة من الهيدروجين، مفصولة بحاجز المحتملة. N أن نفترض أن لديه ذرة النيتروجين في هذا العمل قمنا بدراسة لأول مرة نفق ثم سعى لتسليط الضوء على وجود مرور من وظيفة واحدة إلى أخرى تجري بواسطة نفق. اثنين من مستويات الطاقة وحساب تردد من الانبعاثات / امتصاص المرتبطة تقريبية من الأساليب من أجل حل معادلة شرودنجر. وأيضاً بالتفصيل آلية من الانبعاث المستحث والديناميات الداخلية للجزء وبخاصة الحركات التذبذب التي تقع مبدأ المازر الأمونيا.

كلمات البحث :

تأثير النفق، ميكانيكا الكم، الأمونيا NH_3 ، معادلة شرودنجر، حاجز المحتملة، وطرق التقريب، المازر الأمونيا.