

TD5 : La molécule d'ammoniac dans un champ électrique et le MASER à ammoniac

Ce problème concerne l'application des principes de la physique quantique à un exemple célèbre : le maser à ammoniac. La généralisation aux lasers, dans d'autres gammes de fréquence, serait possible.

5.1 Modèle du double puits

Une molécule NH_3 a une forme pyramidale, dont l'atome N est le sommet et les trois atomes H forment la base. Soit P le plan des trois hydrogènes, δ la perpendiculaire à P passant par N . Soit x l'abscisse de l'intersection de δ avec P , N étant pris comme origine. Supposons que la molécule reste pyramidale, et que N étant fixé, on cherche comment varie l'énergie potentielle $V(x)$ en fonction de x . $V(x)$ a l'allure donnée sur la figure ci-dessous :

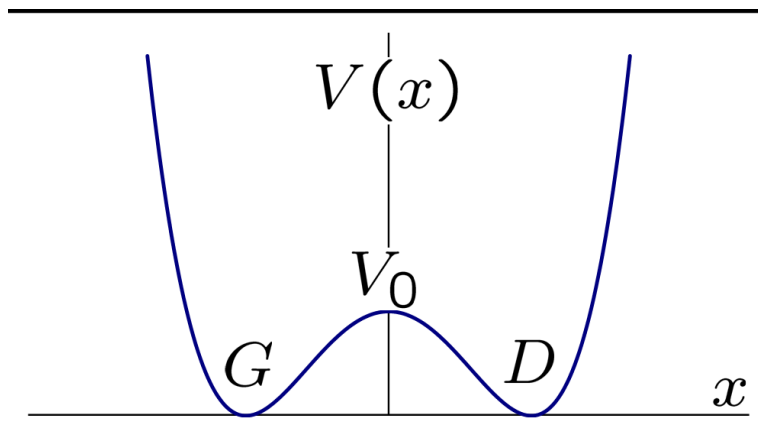


FIGURE 5.12 – Potentiel effectif ressenti par la particule fictive qui représente le barycentre du triangle des hydrogènes

Si l'énergie E de la molécule est plus faible que V_0 , classiquement la "particule représentée par le centre de gravité des trois hydrogènes" demeure dans un des deux puits, gauche (G) ou droite (D) : la molécule ne se retourne pas. Quantiquement cela n'est plus vrai. Le potentiel étant pair en x , l'état de plus basse énergie est pair (S), et le premier état excité impair (A). Soient ψ_S et ψ_A ces deux états, d'énergie E_S et E_A . On posera :

$$E_A - E_S = 2A \quad (5.62)$$

$$\frac{1}{2}(E_S + E_A) = E_0 \quad (5.63)$$

Les fonctions $\psi_S(x)$ et $\psi_A(x)$ décrivent des états propres. On peut les combiner linéairement et définir les deux états localisés :

$$\psi_G = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S - \psi_A)$$

et

$$\psi_D = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S + \psi_A)$$

ψ_G décrit un état où la probabilité de présence de la particule "centre du triangle des hydrogènes" est concentrée à gauche, alors que la localisation est à droite pour ψ_D . Ces états localisés représentent les deux configurations de la molécule mais les seuls états propres du système seront considérés dans toute la suite comme étant ψ_S et ψ_A

1. On suppose qu'au temps $t=0$, la molécule est dans la conformation D , décrite par ψ_D , le plan des hydrogènes étant donc localisé à droite. Écrire $\psi(t)$ au temps t . Montrer que la molécule se retourne périodiquement.

Solution

À $t=0$, la molécule est dans la configuration D, on a donc $\psi(0) = \psi_D = \frac{\psi_S + \psi_A}{\sqrt{2}}$. Or l'évolution temporelle d'un état $\Psi(t)$, décomposé sur une base de vecteurs propres de \hat{H} (non dégénérée pour simplifier), est donnée par :

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \Psi_n$$

Dans notre cas, ψ_A et ψ_S étant des états propres du hamiltonien, on obtient :

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} \psi_S + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} \psi_A$$

Pour visualiser le système, il est utile de remplacer les vecteurs propres par les vecteurs de configuration ψ_D et ψ_G :

$$\psi(t) = \frac{1}{2} e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} (\psi_D + \psi_G) + \frac{1}{2} e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} (\psi_D - \psi_G)$$

soit

$$\psi(t) = \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} + e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} \right) \psi_D + \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} - e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} \right) \psi_G$$

En utilisant maintenant $E_A = E_0 + A$ et $E_S = E_0 - A$, on a :

$$\psi(t) = e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} \left[\cos\left(\frac{At}{\hbar}\right) \psi_D + i \sin\left(\frac{At}{\hbar}\right) \psi_G \right]$$

Le système oscille périodiquement entre la configuration D et la configuration G avec un période $T = \frac{\hbar\pi}{A}$:

$$\psi\left(t = \frac{n\pi\hbar}{A}\right) \propto \psi_D \text{ et } \psi\left(t = \frac{\hbar}{A}\left(n\pi + \frac{\pi}{2}\right)\right) \propto \psi_G.$$

2. On donne une estimation de $E_A - E_S \approx 10^{-4}$ eV. Calculer la pulsation, la fréquence et la période de retournement. A quel domaine de longueur d'onde correspond cette fréquence ?

Solution

$$E_A - E_S = 2A = 10^{-4} \text{ eV}$$

On peut alors calculer la période $T = \frac{\hbar\pi}{A} \approx 4,1 \cdot 10^{-11}$ s, et en déduire la fréquence $\nu = \frac{1}{T} \approx 24$ GHz et la pulsation $\omega = 2\pi\nu = 1,5 \cdot 10^{11}$ rad.s⁻¹ de retournement. La longueur d'onde associée aux photons émis ou absorbés lors de la transition est $\lambda = cT \approx 1,24$ cm. Ce sont des ondes radiométriques, aisément détectables.

Dans ce qui précède, nous n'avons tenu compte que de l'état fondamental et du premier état excité. Cette approximation est justifiée par le fait que le second niveau excité E_1 est à 0,12 eV au dessus de E_S et son rôle peut en général être négligé. La molécule de NH_3 peut donc être décrite dans un espace de Hilbert à deux dimensions.

Un vecteur d'état quelconque peut s'écrire sous la forme :

$$|\psi\rangle = \lambda|\psi_S\rangle + \mu|\psi_A\rangle$$

où λ et μ sont deux complexes, avec : $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$

3. Pour un état général $|\psi\rangle$, exprimer la valeur moyenne de l'énergie et son écart type.

Solution

Calculons la valeur moyenne de l'énergie :

$$\langle E \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \lambda \psi_S + \mu \psi_A | H | \lambda \psi_S + \mu \psi_A \rangle$$

En utilisant le fait que les vecteurs propres d'un opérateur hermitien (\hat{H}) sont orthogonaux, on en déduit :

$$\langle E \rangle = \langle \lambda \psi_S | H | \lambda \psi_S \rangle + \langle \mu \psi_A | H | \mu \psi_A \rangle = |\lambda|^2 E_S + |\mu|^2 E_A$$

On procède de même pour calculer $\langle E^2 \rangle = \langle \psi | H^2 | \psi \rangle$: $\langle E^2 \rangle = |\lambda|^2 E_S^2 + |\mu|^2 E_A^2$

On peut alors calculer la variance :

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = |\lambda|^2 E_S^2 + |\mu|^2 E_A^2 - (|\lambda|^4 E_S^2 + |\mu|^4 E_A^2 + |\lambda|^2 |\mu|^2 E_S E_A) \\ &= (|\lambda|^2 - |\lambda|^4) E_S^2 + (|\mu|^2 - |\mu|^4) E_A^2 - 2|\lambda|^2 |\mu|^2 E_S E_A \\ &= |\lambda|^2 (1 - |\lambda|^2) E_S^2 + |\mu|^2 (1 - |\mu|^2) E_A^2 - 2|\lambda|^2 |\mu|^2 E_S E_A \\ &= |\lambda|^2 |\mu|^2 E_S^2 + |\mu|^2 |\lambda|^2 E_A^2 - 2|\lambda|^2 |\mu|^2 E_S E_A \end{aligned}$$

en utilisant $|\mu|^2 + |\lambda|^2 = 1$ pour normer la fonction ψ .

On a finalement :

$$\sigma^2 = |\lambda|^2 |\mu|^2 (E_S - E_A)^2$$

D'où l'écart-type $\sigma = 2A|\lambda||\mu|$.

4. On suppose que les molécules sont en équilibre thermique à 100K et que le rapport des populations des molécules d'énergies différentes est donné par la loi de Boltzmann. Comparer les populations des niveaux E_A et E_S . Conclusion ?

Solution

Dans le cours de physique statistique, on verra que la population d'un niveau d'énergie, pour un gaz à une température "grande" (quelques dizaines de Kelvin suffisent), est donnée par la loi de Maxwell-Boltzmann :

$$N_r = N \frac{e^{-\frac{E_r}{k_B T}}}{\zeta}$$

où N est le nombre total de particules, N_r le nombre de particules sur un état d'énergie E_r , k_B la constante de Boltzmann, T la température en Kelvin, et ζ la fonction de normalisation appelée fonction de partition : $\zeta = \sum_{\text{états } r} e^{-\frac{E_r}{k_B T}}$

Cette relation permet effectivement de retrouver que $N = \sum_{\text{états } r} N_r$.

On peut ainsi en déduire le rapport entre les occupations des niveaux E_A et E_S :

$$\frac{N_A}{N_S} = e^{-\frac{2A}{k_B T}} \approx e^{-0.02} \approx 0.98$$

Les deux niveaux sont à peu près équilibrés : $N_A \sim N_S$.

De la même manière, on évalue l'occupation du niveau E_1 : $\frac{N_1}{N_S} = e^{-\frac{E_1 - E_S}{k_B T}} \approx 9.10^{-7}$. L'hypothèse d'un espace de Hilbert à deux dimensions est a posteriori justifiée : la population du niveau E_1 est en effet négligeable devant celle des deux premiers niveaux (même s'il peut exister un nombre conséquent de molécules occupant ce niveau ; pour une mole constituant le système il y a aura ainsi environ 10^{17} molécules d'ammoniac sur E_1).

5.2 Molécule NH_3 dans un champ électrique

La molécule NH_3 possède un moment dipolaire permanent \vec{D} porté par l'axe de symétrie de la molécule, dirigé de N vers le plan P : $D = 0,6 \cdot 10^{-29} \text{C.m.}$ Lorsque la molécule passe de l'état $|\psi_D\rangle$ à $|\psi_G\rangle$, il y a renversement du moment dipolaire.

1. Montrer que dans les états propres $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$, il n'y a pas de moment dipolaire permanent.

Solution

En l'absence de champ électrique, la molécule oscille périodiquement entre l'état $|\psi_D\rangle$ et l'état $|\psi_G\rangle$, ce qui implique l'absence de moment dipolaire moyen.

Une autre façon de s'en convaincre est d'associer au moment dipolaire l'opérateur \hat{D} tel que :

$$\begin{aligned}\hat{D}|\psi_D\rangle &= D|\psi_D\rangle \\ \hat{D}|\psi_G\rangle &= -D|\psi_G\rangle\end{aligned}$$

En appliquant cet opérateur à $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$, on peut alors définir la matrice de \hat{D} dans la base $(|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle)$:

$$\begin{aligned}\hat{D}|\psi_S\rangle &= \hat{D}\left(\frac{|\psi_D\rangle + |\psi_G\rangle}{\sqrt{2}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(D|\psi_D\rangle - D|\psi_G\rangle) = D|\psi_A\rangle \\ \hat{D}|\psi_A\rangle &= \hat{D}\left(\frac{|\psi_D\rangle - |\psi_G\rangle}{\sqrt{2}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(D|\psi_D\rangle + D|\psi_G\rangle) = D|\psi_S\rangle\end{aligned}$$

d'où

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} 0 & D \\ D & 0 \end{pmatrix}$$

Les éléments diagonaux étant nuls, la valeur moyenne du moment dipolaire dans les états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ est nulle : $\langle\psi_S|\hat{D}|\psi_S\rangle = 0$ et $\langle\psi_A|\hat{D}|\psi_A\rangle = 0$.

2. On place alors la molécule dans un champ électrique \vec{F} dirigé suivant Ox . Rappeler l'expression classique de l'énergie d'interaction avec la molécule. Déterminer les valeurs propres et vecteurs propres du Hamiltonien en présence du champ, en fonction de F . Représentation graphique.

Solution

Énergie électrique : Si l'on applique un champ électrique \vec{F} , chaque molécule d'ammoniac prend une énergie électrique qui a pour valeur :

$$W = -\vec{F} \cdot \vec{D}$$

Dans notre cas, \vec{F} et \vec{D} sont orientés selon Ox , on peut donc prendre simplement leur projection selon cet axe et écrire, en terme d'opérateur : $\hat{W} = -F\hat{D}$. La matrice de \hat{W} se déduit alors simplement de celle de l'opérateur moment dipolaire : $\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & -FD \\ -FD & 0 \end{pmatrix}$

Hamiltonien : Appelons \hat{H}_0 le hamiltonien d'une molécule d'ammoniac en l'absence d'un champ électrique. Ses états propres et leurs valeurs propres associées sont $(|\psi_S\rangle, E_S)$ et $(|\psi_A\rangle, E_A)$. Dans la base $(|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle)$, la matrice de \hat{H}_0 s'écrit donc : $\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_S & 0 \\ 0 & E_A \end{pmatrix} =$

$$\begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}$$

En présence d'un champ électrique, il faut rajouter au potentiel l'énergie électrique, on obtient donc un nouvel hamiltonien : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ dont la matrice s'écrit :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & -FD \\ -FD & E_0 + A \end{pmatrix}$$

Valeurs propres : Dans un premier temps, on cherche à déterminer les valeurs propres du Hamiltonien. On doit donc résoudre $\det(H - \lambda I) = 0$, soit

$$\begin{vmatrix} E_0 - A - \lambda & -FD \\ -FD & E_0 + A - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Cela conduit à l'équation du second degré : $\lambda^2 - 2\lambda E_0 + (E_0^2 - A^2 - F^2 D^2) = 0$ qui admet les deux solutions :

$$\begin{aligned} E_+ &= E_0 + \sqrt{A^2 + F^2 D^2} \\ E_- &= E_0 - \sqrt{A^2 + F^2 D^2} \end{aligned}$$

En considérant un champ électrique nul ($F=0$), on retrouve bien les deux niveaux d'énergie E_A et E_S .

Vecteurs propres : On cherche à déterminer les états $|\psi_-\rangle$ et $|\psi_+\rangle$ tels que $\hat{H}|\psi_-\rangle = E_-|\psi_-\rangle$ et $\hat{H}|\psi_+\rangle = E_+|\psi_+\rangle$. En posant $|\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ (toujours dans la base $(|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle)$), on doit résoudre :

$$\begin{pmatrix} E_0 - A - \lambda & -FD \\ -FD & E_0 + A - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [E_0 - \sqrt{A^2 + F^2 D^2}] \alpha \\ [E_0 - \sqrt{A^2 + F^2 D^2}] \beta \end{pmatrix}$$

On trouve ainsi :

$$\beta = \frac{FD}{A + \sqrt{A^2 + F^2 D^2}} \alpha$$

On choisit de poser :

$$\tan \theta = \frac{FD}{A + \sqrt{A^2 + F^2 D^2}}$$

On en déduit immédiatement les valeurs normées des composantes du vecteur d'état recherché : $|\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$

En raisonnant de même pour $|\psi_+\rangle$, on trouve la relation

$$\alpha = \frac{A - \sqrt{A^2 + F^2 D^2}}{FD} \beta = \frac{A^2 - (A^2 + F^2 D^2)}{FD (A + \sqrt{A^2 + F^2 D^2})} \beta = \frac{-FD}{A + \sqrt{A^2 + F^2 D^2}} \beta$$

Avec la notation définie précédemment, on a alors : $|\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \end{pmatrix}$

3. On suppose le champ électrique faible ($D.F/A \ll 1$). Donner un ordre de grandeur des champs concernés par cette approximation. Déterminer la valeur moyenne du moment dipolaire dans chacun des états propres. Discuter l'évolution de ces états propres en fonction de F .

Solution

On se place dans la limite d'un champ très faible ($\frac{FD}{A} \ll 1$), cela correspond donc à un champ électrique F tel que $F \ll 10^6 \text{ V.m}^{-1}$.

La valeur moyenne du moment dipolaire sur un état $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ est donnée par :

$$\langle \hat{D} \rangle = \langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle = (\alpha \quad \beta) \begin{pmatrix} 0 & D \\ D & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 2\alpha\beta D$$

Pour nos deux états $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$, en utilisant le fait que pour un champ électrique faible $\tan \theta \sim \sin \theta \sim FD/2A$ et $\cos \theta \sim 1$, on a :

$$\begin{aligned} \langle D_+ \rangle &= -2D \sin \theta \cos \theta = -\frac{FD^2}{A} \\ \langle D_- \rangle &= 2D \sin \theta \cos \theta = \frac{FD^2}{A} \end{aligned}$$

En faisant le développement limité à l'ordre 2 en $\frac{FD}{A}$, on obtient pour les valeurs propres :

$$\begin{aligned} E_+ &= E_0 + A\sqrt{1 + \frac{F^2 D^2}{A^2}} \approx E_0 + A\left(1 + \frac{F^2 D^2}{2A^2}\right) = E_A + \frac{F^2 D^2}{2A} \\ E_- &= E_0 - A\sqrt{1 + \frac{F^2 D^2}{A^2}} \approx E_0 - A\left(1 + \frac{F^2 D^2}{2A^2}\right) = E_S - \frac{F^2 D^2}{2A} \end{aligned}$$

L'écart énergétique obtenu relativement au cas où il n'y a pas de champ électrique appliqué est en F^2 . Cette dépendance peut s'expliquer en deux temps :

- l'énergie électrique est proportionnelle à F , donc la moitié de l'exposant est expliquée,
- cette énergie est due à l'existence d'un dipôle induit par le champ ; on vient de montrer que la valeur moyenne de ce dipôle induit n'est pas nulle mais proportionnelle au champ lui-même.

Voici donc pour l'explication "grossière" de la dépendance quadratique. On constate de plus que l'on peut écrire : $\langle D_{\pm} \rangle = -\frac{\partial E_{\pm}}{\partial F}$.

Pour les états propres, à l'ordre 0, on a :

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \sin \theta |\psi_S\rangle - \cos \theta |\psi_A\rangle \sim -|\psi_A\rangle \\ |\psi_-\rangle &= \cos \theta |\psi_S\rangle + \sin \theta |\psi_A\rangle \sim |\psi_S\rangle \end{aligned}$$

À l'ordre 1, on a $\sin \theta \sim \frac{FD}{2A}$ et $\cos \theta \sim 1$, soit, en fonction des configurations :

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \frac{FD}{2A} \left(\frac{|\psi_D\rangle + |\psi_G\rangle}{\sqrt{2}} \right) - \left(\frac{|\psi_D\rangle - |\psi_G\rangle}{\sqrt{2}} \right) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{FD}{2A} \right) |\psi_D\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{FD}{2A} \right) |\psi_G\rangle \\ |\psi_-\rangle &= \left(\frac{|\psi_D\rangle + |\psi_G\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \frac{FD}{2A} \left(\frac{|\psi_D\rangle - |\psi_G\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{FD}{2A} \right) |\psi_D\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{FD}{2A} \right) |\psi_G\rangle \end{aligned}$$

On se place maintenant dans le cas d'un champ fort, c'est-à-dire lorsque $FD \gg A$, ce qui correspond à $F \gg 10^6 \text{ V.m}^{-1}$.

Cependant, pour que le modèle reste pertinent, il faut que le niveau d'énergie E_1 demeure statistiquement inoccupé soit : $FD \ll E_1$, soit numériquement $F \ll 3.10^9 \text{ V.m}^{-1}$.

Dans ces conditions, les énergies propres deviennent :

$$\begin{aligned} E_+ &\sim E_0 + FD \\ E_- &\sim E_0 - FD \end{aligned}$$

Cette fois-ci, $\tan \theta \sim 1$ donc $\cos \theta \sim \sin \theta \sim 1/\sqrt{2}$, on en déduit immédiatement les vecteurs propres en présence d'un champ fort :

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_S\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_A\rangle \sim -|\psi_D\rangle \\ |\psi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_S\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_A\rangle \sim |\psi_G\rangle \end{aligned}$$

La valeur moyenne du moment dipolaire dans ces deux états est naturellement celle trouvée dans les états de configuration $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$, soit $-D$ et D respectivement.

Cette fois-ci l'énergie est linéaire en fonction du champ électrique, ce que l'on note dans l'écriture du dipôle induit, indépendant du champ.

Compléments

5.2.1 Force subie dans un gradient de champ

1. Considérons le cas d'un champ faible. On suppose qu'il existe un gradient de champ transverse, suivant la direction Oz. Montrer que les molécules subissent une force de signe opposé suivant qu'elles sont dans l'un ou l'autre des états propres du Hamiltonien. Donner l'expression de cette force.

Solution

Le champ électrique appliqué aux molécules étant faible, on peut utiliser les résultats de la question précédente. L'énergie d'une molécule d'ammoniac peut ainsi prendre deux valeurs selon l'état propre dans lequel elle se trouve. Une partie de cette énergie correspond, ainsi que nous l'avons déjà établi, à la valeur sans excitation et la partie due au champ se comporte comme un potentiel (noté ci-dessous E_{elec}). Cette assimilation est d'autant plus pertinente que l'on considère un gradient de champ électrique. On a ainsi :

$$E_+ \approx E_A + \frac{F^2 D^2}{2A}$$

$$E_- \approx E_S - \frac{F^2 D^2}{2A}$$

tandis que $|\psi_+\rangle \sim |\psi_A\rangle$ et $|\psi_-\rangle \sim |\psi_S\rangle$.

La force f qui apparaît dépend donc de l'état de la molécule, et vaut :

$$f_{\pm} = -\nabla E_{elec} = -\frac{D^2}{2A} \nabla(\pm F^2)$$

On a donc bien deux forces opposées :

$$f_+ = -\frac{D^2}{2A} \frac{dF^2}{dz} \quad \text{si la molécule est dans l'état } |\psi_+\rangle \sim |\psi_A\rangle$$

$$f_- = \frac{D^2}{2A} \frac{dF^2}{dz} \quad \text{si la molécule est dans l'état } |\psi_-\rangle \sim |\psi_S\rangle$$

2. Que se passe-t-il si on envoie un jet monocinétique de molécules NH_3 dans un gradient de champ ? Expliquer pourquoi et comment on peut trier les molécules suivant qu'elles sont dans l'état $|\psi_S\rangle$ ou $|\psi_A\rangle$.

Solution

Ce montage expérimental permet ainsi de séparer les deux ensembles de molécules, selon l'état propre qu'elles occupent au moment de leur entrée dans le champ électrique faible à variation spatiale transverse de flux.

5.2.2 Comportement dans un champ oscillant

On peut par exemple sélectionner les molécules qui sont dans l'état $|\psi_A\rangle$, d'énergie E_A , c'est-à-dire dans l'état initial excité.

On fait donc passer ces molécules, d'état initial $|\psi_A\rangle$, dans une cavité résonnante où règne un champ électrique $F = F_0 \cos(\omega t)$. On posera : $DF_0 = \hbar\omega_1$ et $2A = \hbar\omega_0$.

On décrit aussi l'état instantané du système par :

$$|\psi(t)\rangle = \lambda(t)|\psi_S\rangle + \mu(t)|\psi_A\rangle$$

1. Écrire les équations différentielles vérifiées par $\lambda(t)$ et $\mu(t)$.

Solution

Avec ces notations, la matrice de l'hamiltonien en présence de champ électrique s'écrit :

$$\begin{pmatrix} E_S & -\hbar\omega_1 \cos \omega t \\ -\hbar\omega_1 \cos \omega t & E_A \end{pmatrix}$$

En appliquant l'équation de Shrödinger à $|\psi(t)\rangle$, on en déduit le système d'équations différentielles suivant :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\lambda}{dt} &= E_S \lambda(t) - \hbar\omega_1 \cos(\omega t) \mu(t) \\ i\hbar \frac{d\mu}{dt} &= -\hbar\omega_1 \cos(\omega t) \lambda(t) + E_A \mu(t) \end{aligned}$$

On pose encore :

$$\lambda(t) = \alpha(t) e^{-iE_S t/\hbar}$$

et

$$\mu(t) = \beta(t) e^{-iE_A t/\hbar}$$

On montre, par un calcul un peu long (que l'on s'épargnera) que :

$$\alpha(t) = \frac{i\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{i(\omega - \omega_0)t/2}$$

On a posé : $\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$

2. Soit $P_{AS}(t)$ la probabilité pour que les molécules se trouvent dans l'état $|\psi_S\rangle$ à l'instant t . Montrer que :

$$P_{AS}(t) = P_0[(\omega - \omega_0), \omega_1] \sin^2(\Omega t/2)$$

Solution

La probabilité pour que les molécules se trouvent dans l'état $|\psi_S\rangle$ est simplement donnée par $|\lambda(t)|^2$ soit :

$$P_{AS}(t) = |\lambda(t)|^2 = |\alpha(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

3. Représenter P_0 en fonction de $(\omega - \omega_0)$. Montrer que la désexcitation vers l'état d'énergie E_S est un phénomène résonnant. Pour quelle valeur ω_M de ω observe-t-on un maximum pour P_0 ? Quelle est la largeur de la résonance?

Solution

D'après la question précédente, $P_0 = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$. On reconnaît la forme caractéristique d'une courbe de résonance avec une valeur maximale en $\omega_M = \omega_0$ et une largeur à mi-hauteur de $2\omega_1$.

4. Supposons que $\omega = \omega_M$. Comment choisir T pour avoir une désexcitation totale du faisceau ? Soit L la longueur de la cavité et u la vitesse des molécules : donner la condition entre L , u et ω_1 . Cette condition vous paraît-elle facile à réaliser ?

Solution

La probabilité de transition oscille entre la valeurs 0 et une valeur P_{max} correspondant à la pulsation Ω . On peut choisir la pulsation du champ électrique de manière à obtenir une résonance, en prenant $\omega = \omega_M = \omega_0$.

Au bout du temps $T = \frac{\pi}{\omega_1}$, toutes les molécules se sont vidées de leur énergie $2A$ et sont dans l'état $|\psi_S\rangle$.

Pour que les molécules mettent le temps T à traverser la cavité (et qu'on soit alors sûr qu'elles soient toutes dans l'état $|\psi_S\rangle$), on doit avoir la relation : $uT = L$ soit $\pi u = L\omega_1$.

