

LP43 – ÉVOLUTION TEMPORELLE D’UN SYSTÈME QUANTIQUE À 2 NIVEAUX.

14 juin 2019

Lagoin Marc & Ramborghi Thomas

Niveau : L2

Commentaires du jury

- Construire la leçon sur un système quantique à 2 niveaux.
- L’usage d’état stationnaire doit être justifier.
- L’évolution d’un système quantique en régime forcé est trop souvent négligée.

Bibliographie

- ✦ *Physique quantique*, **Le Bellac**
- ✦ *Mécanique quantique Tome 1*, **Cohen-Tannoudji**
- ✦ *Mécanique quantique*, **Basdevant, Dalibard**

Prérequis

- Formalismes et notions de bases en MQ
- Particule dans un puits de potentiel
- Effet tunnel
- Moment magnétique
- Opérateur évolution temporel

Table des matières

1	RMN	2
1.1	Position du problème	2
1.2	Mise en équation	2
1.3	Résolution dans le référentiel tournant	3
1.4	Oscillations de Rabi :	4
1.5	ordre de grandeur et ouverture	5
2	Molécule d’ammoniac	5
2.1	Positionnement du problème et rappel des résultats d’une particule dans un puits de potentiel	5
2.2	Résolution des états propres et énergies propres du système	5
2.3	Évolution temporelle	7
2.4	Applications	8
3	Justification de l’importance de l’utilisation de l’outil informatique dans la pratique de professeur	10

Introduction

Il existe de nombreux systèmes dont la résolution peut se faire via l'étude d'un système à 2 niveaux. Certains d'entre eux sont des systèmes possédant réellement 2 niveaux comme un spin $\frac{1}{2}$ que nous étudierons en détail dans la première partie portant sur la résonance magnétique nucléaire. D'autres sont des systèmes plus complexe possédant un grand nombre de niveau d'énergie mais dont nous pouvons restreindre l'étude à 2 niveaux effectifs. Pour illustrer de tel système, nous regarderons le cas de la molécule d' NH_3 en seconde partie.

1 RMN

1.1 Position du problème

On considère un atome. Son noyau a une charge q une masse m et un spin ¹ $\vec{s}$. Il porte un moment magnétique $\vec{\mu}$

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{s} \quad (1)$$

où γ est le **facteur gyromagnétique** :

$$\gamma = g \frac{q}{2m} \quad \text{avec } g \text{ le facteur de Landé} \quad (2)$$

On impose un champ magnétique extérieur $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + \vec{B}_1$.

$\vec{B}_0$ est un champ de norme importante qui est maintenu constant suivant $\vec{e}_z$.

$\vec{B}_1$ est un champ d'amplitude faible ($B_1 \ll B_0$) qui tourne dans le plan (xOy) à la pulsation ω :

$$\vec{B}_1 = B_1 (\cos(\omega t) \vec{e}_x + \sin(\omega t) \vec{e}_y) \quad (3)$$

Ici, on choisit de considérer uniquement le cas où $s = 1/2$

1.2 Mise en équation

On repère les états de la particule comme ceci : $|+\rangle = (1, 0)$ correspond à un spin suivant $+\vec{e}_z$; $|-\rangle = (0, 1)$ correspond à un spin suivant $-\vec{e}_z$. Le Hamiltonien d'interaction entre la particule de spin 1/2 et le champ magnétique extérieur est :

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{s} \cdot \vec{B} \quad (4)$$

ATTENTION, cette notation est très ambiguë. $\vec{s} = (\sigma_x \sigma_y \sigma_z)$ où les σ_i sont les matrices de Pauli correspondantes. Il désigne donc ici un vecteur d'opérateurs.

On a donc :

$$H = \underbrace{\left[-\frac{\hbar}{2} \gamma B_0 \sigma_z \right]}_{H_0} + \underbrace{\left[-\frac{\hbar}{2} \gamma B_1 (\cos(\omega t) \sigma_x + \sin(\omega t) \sigma_y) \right]}_{H_1} \quad (5)$$

Posons $\omega_0 = -\gamma B_0$, et $\omega_1 = -\gamma B_1$. On a alors :

$$H = \hbar \frac{\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \hbar \frac{\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \\ \cos(\omega t) + i \sin(\omega t) & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

On ² a alors :

$$H = \hbar \frac{\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \hbar \frac{\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Soit $|\Psi\rangle = a_+ |+\rangle + a_- |-\rangle$ ($|a_+|^2 + |a_-|^2 = 1$) la fonction d'onde décrivant le spin de la particule. On s'intéresse à l'évolution des coefficients a_+ et a_- , obtenue par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle \quad (8)$$

1. Trouver le spin d'un noyau n'est pas toujours trivial :

si Z pair et Z-A pair, $\vec{s} = \vec{0}$

si Z et Z-A sont de parité différente, $\vec{s} \neq \vec{0}$

si Z et Z-A sont tous deux impairs, on ne peut pas conclure facilement

2. A ce moment là, il est plutôt commode de remarquer (Formule de Moivres) que :

$$\cos(\omega t) \pm i \sin(\omega t) = e^{\pm i\omega t}$$

ce qui donne :

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_+ = \frac{\omega_0}{2} a_+ + \frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} a_- \quad (9)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_- = -\frac{\omega_0}{2} a_- + \frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} a_+ \quad (10)$$

Arrêtons nous un instant sur cette formulation :

- Le Hamiltonien fait apparaître des termes non diagonaux qui couplent les dépendances temporelles de a_+ et a_- .
- Le Hamiltonien est dépendant du temps. L'équation est donc pénible à résoudre.

1.3 Résolution dans le référentiel tournant

Si on recherche l'origine de la dépendance temporelle du Hamiltonien, on remarque qu'elle provient de la dépendance temporelle de l'orientation du champ $\vec{B}_1$.

L'idée de ce traitement est de se placer dans un nouveau référentiel dans lequel le champ est fixe. En réalité, il faut ajouter un facteur $\frac{1}{2}$ pour enlever la dépendance temporelle des coefficients. Pour cela, on pose le changement de fonction :

$$c_+ = \exp(i\frac{\omega}{2}t) a_+ \quad c_- = \exp(-i\frac{\omega}{2}t) a_- \quad (*) \quad (11)$$

Les équations précédentes deviennent ainsi :

$$i \frac{\partial}{\partial t} c_+ = \frac{\omega_0 - \omega}{2} c_+ + \frac{\omega_1}{2} c_- \quad (**)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} c_- = -\frac{\omega_0 - \omega}{2} c_- + \frac{\omega_1}{2} c_+ \quad (**)$$

Ces nouvelles équations de Schrödinger décrivent un nouveau système qui est en interaction avec un champ constant. On obtient alors en dérivant (**) et en réutilisant dessus (**) pour substituer :

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} c_{\pm} = -\frac{1}{4} \underbrace{((\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2)}_{\Omega^2} c_{\pm} \quad (12)$$

On note Ω la fréquence de Rabi, $\Omega^2 = (\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2$. On a donc :

$$c_+ = D \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + E \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad c_- = F \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + G \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (13)$$

D, E, F, G sont des constantes à déterminer.

Conditions aux limites et solutions

- On propose que $|\Psi\rangle(t=0) = |+\rangle$
 - $a_+(0) = 1$ donc $D = 1$
 - $a_-(0) = 0$ donc $F = 0$
- Les équations de Schrödinger (**) donnent :
 - (*) donne $i\frac{\Omega}{2}E = \frac{\omega_0 - \omega}{2}$ donc $E = -i\frac{\omega_0 - \omega}{\Omega}$
 - (*) donne $i\frac{\Omega}{2}G = -\frac{\omega_1}{2}$ donc $G = i\frac{\omega_1}{\Omega}$

Donc, on a, d'après (*) :

$$|\Psi(t)\rangle = \left(\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\frac{\omega_0 - \omega}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right) e^{-i\frac{\omega t}{2}} |+\rangle + \left(0 + i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right) e^{i\frac{\omega t}{2}} |-\rangle \quad (14)$$

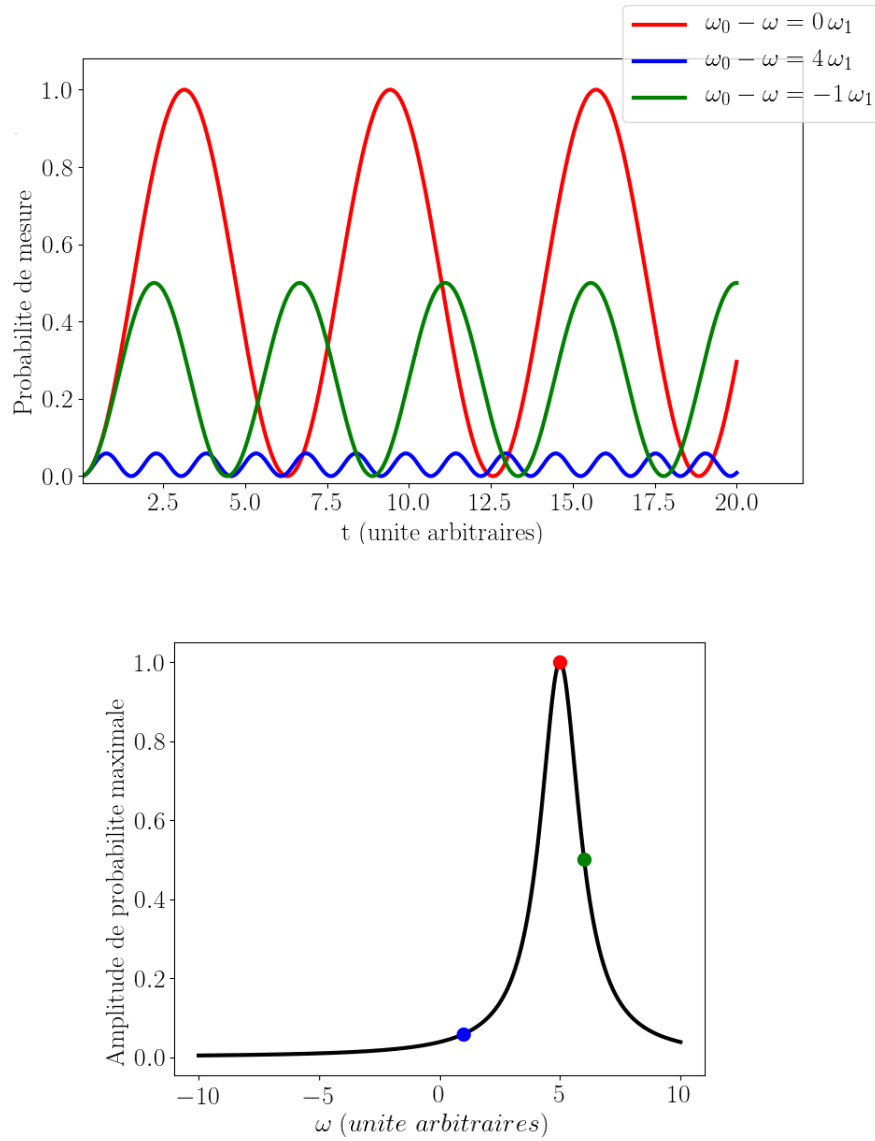


FIGURE 1 – Probabilité $P_{|+\rangle \rightarrow |-\rangle}(t)$ et son amplitude pour différentes valeurs de ω ($\omega_1 = 1$, $\omega_0 = 5$)

1.4 Oscillations de Rabi :

On se pose la question suivante : Quelle est la probabilité $P_{|+\rangle \rightarrow |-\rangle}(t)$ de mesurer $|-\rangle$ en t en étant parti de $|\Psi(0)\rangle = |+\rangle$? Par définition :

$$P_{|+\rangle \rightarrow |-\rangle}(t) = \langle - | \Psi(t) \rangle \langle \Psi(t) | - \rangle^* \quad (15)$$

Donc :

$$P_{|+\rangle \rightarrow |-\rangle}(t) = \left| i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{i \frac{\omega t}{2}} \right|^2 \quad (16)$$

Donc :

$$P_{|+\rangle \rightarrow |-\rangle}(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (17)$$

On observe donc que la probabilité de trouver l'état dans l'état $|-\rangle$ oscille au cours du temps à la fréquence Ω : ce sont les **oscillations de Rabi**. Il faut garder à l'esprit l'expression de Ω :

$$P_{|+\rangle \rightarrow |-\rangle}(t) = \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \sin^2\left(\frac{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}}{2} t\right) \quad (18)$$

- la fréquence des oscillations dépend de la fréquence d'excitation. Ainsi, la probabilité d'être mesuré en $|+\rangle$ est de 1 tous les $n \frac{2\pi}{\Omega}$ (n entier).
- On observe que l'amplitude présente une résonance pour $\omega = \omega_0$. Dans ce cas précis, périodiquement la probabilité de trouver $|-\rangle$ devient 1 même si B_1 est faible.
- à la résonance, la pulsation de Rabi vaut ω_1 ce qui peut permettre de mesurer γ par exemple.³

1.5 ordre de grandeur et ouverture

Pour un proton, avec $B_0 = 21\text{ T}$, on atteint $\omega_0 = 900\text{ MHz}$. Cette méthode peut également s'appliquer à des électrons. Avec $B_0 = 1\text{ T}$, on mesure $\omega_0 = 28\text{ GHz}$. Donc $\gamma = -1.76 \times 10^{11}$ et donc $g(e^-) = 2$. Un grand succès de la méca Q.) En chimie, c'est très utile : La RMN du proton notamment permet de trouver le squelette des molécules organiques. On peut également faire de la RMN avec C^{13} , F^{19} qui ont des spins nucléaires non nuls ($g(C^{13}) = 1.4$, $g(F^{19}) = 5.26$, $g(H) = 5.59$).

2 Molécule d'ammoniac

2.1 Positionnement du problème et rappel des résultats d'une particule dans un puits de potentiel

Le second système que nous allons étudier est la molécule d'ammoniac. Elle est composée de 3 atomes d'hydrogène constituant la base d'une pyramide et d'un atome d'azote occupant le sommet. Elle possède de nombreux degrés de liberté dont la translation de la base suivant sa normale, modifiant sa distance par rapport à l'atome d'azote. Nous repérerons cette distance relative à l'aide de la variable x . L'étude de l'énergie associée est donnée par un potentiel $V(x)$ composé de 2 minimums symétriques. Ils sont séparés par une barrière énergétique traduisant la répulsion à courte distance. Ce potentiel croît à grande distance traduisant la cohésion des liaisons chimiques. Nous pouvons donc le modéliser en première approximation par un double puits avec une barrière de taille finie.

Commençons par rappeler les résultats obtenus pour 2 puits infinis de largeur a centrée en b et $-b$ (donc sans couplage) :

L'énergie associée à une particule piégée dans l'un des puits est de la forme :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad \text{avec :} \quad k_n = n \frac{\pi}{a} \quad \text{et} \quad m = \frac{3m_H m_N}{3m_H + m_N} \quad (19)$$

Notons que pour chaque niveau n , l'énergie E_n est associée à 2 fonctions d'onde $\psi_n^L(x)$ et $\psi_n^R(x)$ de la forme :

$$\begin{aligned} \psi_n^R(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(k_n\left(b + \frac{a}{2} - x\right)\right) \quad \text{si} \quad x \in \left[b - \frac{a}{2}; b + \frac{a}{2}\right] \\ \psi_n^L(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(k_n\left(b + \frac{a}{2} + x\right)\right) \quad \text{si} \quad x \in \left[-b - \frac{a}{2}; -b + \frac{a}{2}\right] \\ \psi_n^L(x) &= \psi_n^R(x) = 0 \quad \text{ailleurs} \end{aligned}$$

2.2 Résolution des états propres et énergies propres du système

Nous pouvons à présent reprendre le cas d'un double puits avec barrière de taille finie de potentiel V_0 . Cette modification par rapport au cas précédent se traduit par la possibilité à la particule initialement dans un puits de passer dans l'autre même si son énergie est inférieure à celle requise par effet tunnel. Les fonctions d'onde ne sont plus nulles entre les 2 puits. Elles prennent la forme :

³. On peut aussi utiliser des impulsions de champ B_1 pour préparer le système dans un certain état ou bien lire l'état du système. (cf méthode spin-echo)

$$\begin{aligned}
\psi_n^{A/S}(x) &= A \sin(k_n^{A/S}(b + \frac{a}{2} - x)) \quad \text{si } x \in [b - \frac{a}{2}; b + \frac{a}{2}] \\
\psi_n^{A/S}(x) &= \pm A \sin(k_n^{A/S}(b + \frac{a}{2} + x)) \quad \text{si } x \in [-b - \frac{a}{2}; -b + \frac{a}{2}] \\
\psi_n^{A/S}(x) &= \begin{cases} B_S & \cosh(q_n^S x) \\ B_A & \sinh(q_n^A x) \end{cases} \quad \text{si } x \in [-b + \frac{a}{2}; b - \frac{a}{2}] \\
\psi_n^{A/S}(x) &= \psi_n^R(x) = 0 \quad \text{ailleurs}
\end{aligned}$$

où $k_n^{A/S}$ sont définis comme précédemment par $E_n^{A/S} = \frac{(\hbar k_n^{A/S})^2}{2m}$ et $q_n^{A/S} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n^{A/S})}}{\hbar}$.

L'exposant A/S signifie que les états propres choisis sont respectivement antisymétrique et symétrique (Il s'agit de simple combinaisons linéaire des état L et R). Ce choix est justifier en remarquant la symétrie du problème imposant que l'hamiltonien commute avec l'opérateur parité. Par continuité des fonctions d'onde et de leur dérivée, nous pouvons établir une relation entre les coefficients A et B et déterminer les valeurs discrètes de vecteurs d'onde autorisés. Nous détaillerons ici uniquement le cas symétrique puisque le cas antisymétrique se résout exactement de la même manière.

Par continuité en $x = \pm(b - \frac{a}{2})$ nous obtenons les équations :

$$\begin{aligned}
A \sin(k_n^S a) &= B_S \cosh(q_n^S(b - \frac{a}{2})) \\
-A k_n^S \cos(k_n^S a) &= B_S \sinh(q_n^S(b - \frac{a}{2}))
\end{aligned}$$

Puis en effectuant le rapport des 2 équations précédentes, nous obtenons :

$$\tan(k_n^S a) = -\frac{k_n^S}{q_n^S} \coth(q_n^S(b - \frac{a}{2})) \quad (20)$$

Cette relation auto-cohérente, impliquant la discrétisation des valeurs prises par le vecteur d'onde, peut être résolu graphiquement en repérant les points de croisement entre le terme de gauche et celui de droite :

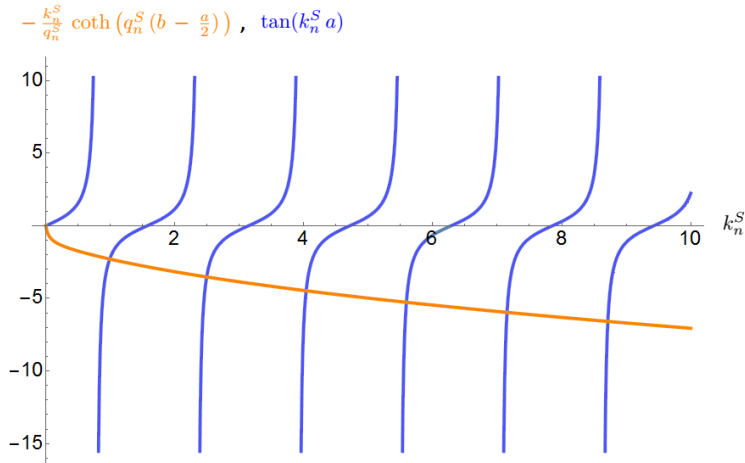


FIGURE 2 – Résolution graphique des vecteurs d'ondes permis. Ici $b = 5$, $a = 2$

On trouve $k_1^S = 0.991408$ pour la première valeur permise (et $k_2^S = 2.49459$ pour la seconde). De la même manière, $k_1^A = 1.00902$. En les injectant dans l'équation de leur fonction d'onde respective, on trouve une distribution de la forme :

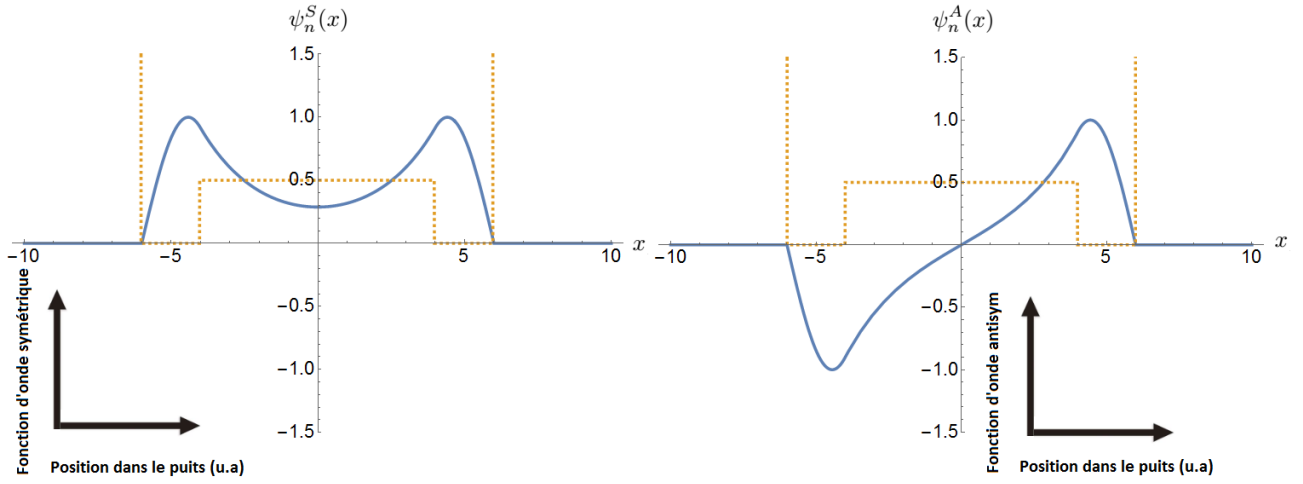


FIGURE 3 – Évolution de la fonction d'onde symétrique (à gauche) et antisymétrique (à droite) en fonction de la position dans le puits. Ici $n = 1$, $b = 5$, $a = 2$ et $A = m = 1$.

On remarque que la différence entre les vecteurs d'onde k_1^S et k_1^A est beaucoup plus faible que la différences entre k_1^S et k_2^S . Il est en est donc de même pour les énergies associées (les résultats expérimentaux donnent un facteur 1000 entre les 2 ΔE). Nous pouvons donc garder uniquement le premier niveaux symétrique et celui antisymétrique et nous ramener ainsi à un système à 2 niveaux.

2.3 Évolution temporelle

Maintenant que le système à 2 niveaux a été correctement identifié, nous pouvons nous intéresser à son évolution temporelle. Nous allons considérer qu'à l'instant initial le plan des trois atomes d'hydrogène est situé sur l'une des position d'équilibre par rapport à l'atome d'azote ; c'est à dire dans l'état $|\Psi^R\rangle$ (ou $|\Psi^L\rangle$). Nous pouvons l'écrire comme une combinaison linéaire des états propres symétrique et antisymétrique déterminés précédemment :

$$|\Psi(x, t = 0)\rangle = |\Psi^R\rangle = \frac{1}{2}(|\psi_1^S(x)\rangle + |\psi_1^A(x)\rangle) \quad (21)$$

S'agissant d'état stationnaire, nous pouvons leur appliquer l'opérateur d'évolution temporelle. Nous obtenons ainsi :

$$|\Psi(x, t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\frac{E_1^S}{\hbar}t} |\psi_1^S(x)\rangle + e^{-i\frac{E_1^A}{\hbar}t} |\psi_1^A(x)\rangle) \quad (22)$$

Que nous récrivons sous la forme :

$$|\Psi(x, t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_1^S + E_1^A}{2\hbar}t} (e^{i\Omega t} |\psi_1^S(x)\rangle + e^{-i\Omega t} |\psi_1^A(x)\rangle) \quad (23)$$

où Ω est la fréquence de Bohr traduisant le passage d'un puits à l'autre donc d'une position d'équilibre du plan d'hydrogène à l'autre par effet tunnel.

Nous pouvons alors finalement remonter à la densité de probabilité :

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_1^S(x)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_1^A(x)|^2 + \cos(\Omega t) \psi_1^S(x) \psi_1^A(x) \quad (24)$$

Si nous traçons cette densité à différents temps, nous remarquons que le système passe d'une configuration à l'autre périodiquement. Le résultat est donné en figure 4.

Finalement nous savons que l'atome d'azote est plus électronégatif que ceux d'hydrogènes. Par conséquent nous sommes donc en présence d'un dipôle oscillant qui émet une onde électromagnétique de l'ordre du centimètre. Cette onde est effectivement observée expérimentalement et permet de l'identifier dans le milieux interstellaire. La différence d'énergie ΔE entre l'état symétrique et antisymétrique nous permet de remonter à la période des oscillations. On trouve : $T = \frac{h}{\Delta E} \simeq 4 \times 10^{-11} \text{s}$. À l'inverse, la molécule AsH_3 possède un période d'environ 2 ans. Cette différence est uniquement dû à la masse 5 fois plus grande de l'atome d'arsenic.

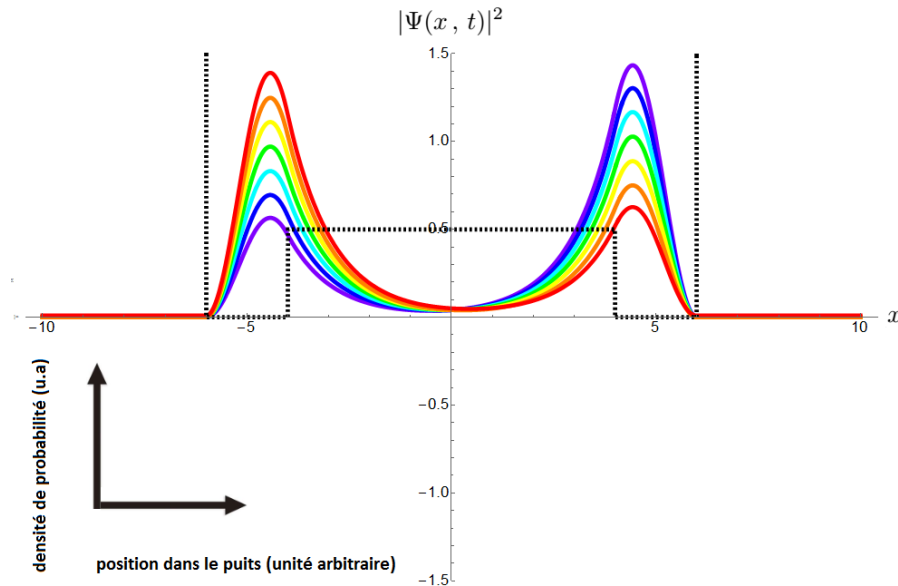


FIGURE 4 – Densité de probabilité dans le puits à différents instant t . Les mêmes paramètres que précédemment ont été utilisés. On remarque ainsi que la particule fictive passe presque entièrement d'un puits à l'autre.

2.4 Applications

Cette étude réalisée sur la molécule d'ammoniac possède de nombreuses applications :

Nous pouvons par exemple justifier la délocalisation des électrons dans un solide (non présente chez les gaz). En effet un électron sous l'influence de 2 atomes peut également être modélisé par un double puits. La période associée à l'effet tunnel pour cet électron est de 10^{-15} s pour un solide et de 10^{-3} s pour un gaz. Les atomes restant à une distance appréciable sur un temps de l'ordre de 10^{-10} s dans le fluide, la délocalisation ne s'effectue pas contrairement au solide.

Un second exemple d'application est le maser à ammoniac. Nous avons vu que la molécule était un dipôle dont la direction dépend de l'état considéré (localisation dans le double puits). Nous pouvons donc faire interagir le système avec un champ électrique. L'énergie associée est : $E = -\vec{d} \cdot \vec{E}$. Si ce champ oscille au cours du temps et que nous nous plaçons dans l'approximation séculaire (perturbation dû à la présence du champ faible devant l'énergie sans champ + choix de ω à la résonance ($\omega = \omega_0 = \frac{\Delta E}{\hbar}$)), nous retrouvons le résultat obtenu pour la résonance magnétique nucléaire. Le système va donc osciller entre les deux états et nous pouvons choisir la longueur de cavité de telle sorte que l'état en sortie soit fixé. Si la molécule, initialement dans l'état de plus haute énergie, sort dans celui de plus basse énergie alors cette dernière a fourni de l'énergie au champ : il s'agit du phénomène d'émission stimulée à la base du maser.

Nous pouvons enfin citer comme dernier exemple d'utilisation d'un système à 2 niveaux l'horloge atomique que nous ne détaillerons pas ici. Pour plus d'information, consulter le livre de Le Bellac (p188) donné en bibliographie.

Conclusion

- système 2 niveaux réel (spin $\frac{1}{2}$) vs système effectif (ammoniacque) justifier par la théorie de la perturbation
- résonance quantique
- oscillation de Rabi (avec forçage) vs oscillation libre (ammoniacque sans champ E) grâce à l'effet tunnel
- applications nombreuses : résonance magnétique nucléaire, maser, horloge atomique, ...

Annexes

Matrices de Pauli

Dans la base où le spin suivant $+\vec{e}_z$ correspond au vecteur $(0, 1)$:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (25)$$

Théorie des perturbations stationnaires

Cadre d'étude : l'hamiltonien de la forme : $H(\lambda) H_0 + \lambda W$ tel que : $H(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle$.

On développe ensuite $E(\lambda)$ et $|\Psi(\lambda)\rangle$ en puissance de λ :

$$(H_0 + \lambda W) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |n\rangle \right) = \left(\sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m E^m \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |n\rangle \right) \quad (26)$$

et l'on développe le résultat ordre par ordre.

Cas d'un niveau non-dégénéré :

$$|\Psi_n(\lambda)\rangle = |\Psi_{n0}\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \Psi_p^i | W | \Psi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\Psi_n^i\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (27)$$

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \Psi_{n0} | W | \Psi_{n0} \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{(\langle \Psi_p^i | W | \Psi_n \rangle)^2}{E_n^0 - E_p^0} + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (28)$$

On voit donc avec ses équations que plus les niveaux d'énergie sont éloignées, plus leur perturbation mutuelle est faible. Cette argument justifie donc que l'on peut considérer l'ammoniaque comme un système à 2 niveaux.

3 Justification de l'importance de l'utilisation de l'outil informatique dans la pratique de professeur

Nous allons, dans cette partie, montrer en quoi l'utilisation d'outils informatique permet d'améliorer grandement la qualité d'une leçon qui sera présentée à des élèves. Je commenterai uniquement la seconde partie de cette leçon portant sur la molécule d'ammoniaque puisqu'il s'agit de la partie que j'ai personnellement rédigé (la première partie ayant été rédigé par mon binôme Marc Lagoin).

Tout d'abord, l'utilisation de Mathematica m'a permis effectuer une résolution graphique en d'en montrer l'intérêt et l'importance. Cette leçon se place au niveau L2 et, à ce stade, un élève connaît la méthode analytique pour déterminer les pré-facteurs inconnus dans l'expression de la fonction d'onde lors de la résolution d'une particule se trouvant dans un puits de potentiel. En effet, il suffit d'imposer que la fonction d'onde s'annule aux 2 extrémités du puits. Ici le problème est plus compliqué car, le potentiel étant sous la forme d'un double puits de taille finis, la particule peut "tunneler" d'un puits à l'autre et les conditions aux limites imposent un raccordement des fonctions d'onde trouvées pour les différentes régions du puits. La résolution est donc beaucoup plus ardue puisqu'il faut alors trouver k tel que :

$$\tan(k_n^S a) = -\frac{k_n^S}{q_n^S} \coth\left(q_n^S \left(b - \frac{a}{2}\right)\right) \quad (29)$$

Il faut donc passer par une résolution graphique. J'ai choisi de la réaliser via Mathematica et de projeter les courbes obtenues aux élèves via un vidéo-projecteur. *Ce choix permet d'illustrer visuellement cette méthode de résolution sans avoir à ce lancer dans un dessin au tableau qui serait moins clair. Elle possède aussi l'avantage de pouvoir changer un paramètre et de montrer la répercussions sur les solutions de manière très rapide. Enfin l'usage de Mathematica montre comment un chercheur théoricien résout des équations le plus souvent, ces dernières étant plus compliquées que celles auxquelles ont été confronté les élèves jusqu'ici. L'outil permet donc de donner une vision plus réaliste de ce métier à une classe dont une partie non-négligeable des élèves s'orientera dans cette branche.*

Ce second avantage de l'utilisation de Mathematica se retrouve lorsque j'ai représenté la fonction d'onde des modes propres symétrique et antisymétrique en fonction de la position dans le potentiel. La mécanique quantique et ces outils (fonction d'onde) étant souvent très abstraits et contre intuitifs, il est important d'essayer au maximum d'illustrer un résultat obtenu. Dans le cas de la fonction d'onde je pense que *la représentation graphique réalisée peut aider les élèves à en avoir une vision plus claire en l'assimilant à ce tracé.* Le risque de cette matière, se reposant beaucoup sur les mathématiques, est de passer à côté de cette représentation visuelle et de la résumer à des calculs systématiques.

Un autre apport pour cette leçon de l'utilisation de l'outil informatique est l'animation associé à l'évolution temporelle de la densité de probabilité. L'intérêt est ici encore de *capter l'esprit et d'inscrire le résultats dans la mémoire des élèves.* Je suis convaincu de l'efficacité de cette utilisation de part mon expérience personnelle. En effet les éléments de cours les plus clairs que j'ai encore en mémoire datant de plusieurs années sont ceux qui étaient illustrés par ce genre d'animation.

Je citerai enfin un dernier avantage (bien que ma liste ne soit pas exhaustive) qui est l'efficacité. *Le recours au numérique peut permettre un gain de temps pendant le cours lorsque le dessin équivalent à réaliser au tableau serait long à mettre en place. Ce temps gagné peut ainsi servir à montrer une application concrète ou un autre exemple.*