

DS6 de Physique du 24/01/26**Calculatrice interdite****3h*****Rappel des consignes :****Présentation de la copie :*

- *Laisser une marge à gauche pour la notation.*
- *Encadrer ou souligner les résultats.*
- *Donner le numéro complet de la question à laquelle vous répondez.*

Rédaction :

- *Répondre précisément aux questions posées*
- *Respecter les notations de l'énoncé.*
- *Ne pas utiliser d'abréviations (sauf si elles ont été définies)*
- *Justifier tous les résultats.*
- *Rédiger de façon claire, précise et concise.*
- *Citer le nom des lois utilisées.*
- *Toujours donner un résultat littéral (avant de faire éventuellement l'application numérique), sans application numérique intermédiaire, sans mélanger littéral et numérique.*
- *Contrôler l'homogénéité du résultat.*

Applications numériques :

- ***En l'absence de calculatrice, les applications numérique seront faite avec 1 (maximum 2) chiffres significatifs.***
- *Arrondir correctement la valeur donnée par la calculatrice.*
- *Ne jamais oublier les unités.*
- *Contrôler que l'ordre de grandeur est raisonnable.*
- *Ne jamais réutiliser le résultat arrondi d'une application numérique précédente (pour éviter les erreurs d'arrondis)*

La notation prendra en compte le respect de ces consignes (aucun point pour un résultat non homogène, des points de rédaction...)

Problème 1 : Spectre de la molécule d'ammoniac

Des données numériques sont présentes en fin d'énoncé de ce problème.

A – Conformations de la molécule d'ammoniac

La molécule d'ammoniac $^{14}\text{NH}_3$ se présente sous la forme d'une pyramide symétrique, l'atome d'azote étant à son sommet. Les trois atomes d'hydrogène définissent le plan de référence. La position de l'atome d'azote est repérée par l'abscisse x telle que $|x|$ soit la distance de l'atome au plan de référence Oyz (figure 8).

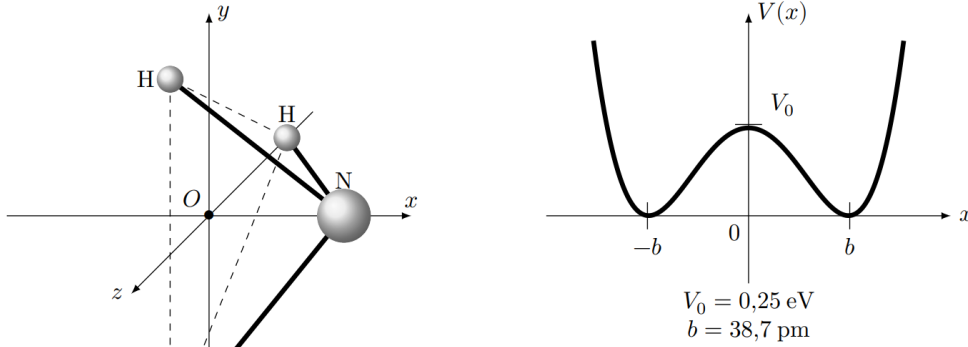


Figure 8 Géométrie et énergie potentielle de la molécule d'ammoniac

III.A.1) Interpréter la forme, la symétrie et les points particuliers de la courbe d'énergie potentielle $V(x)$.

La molécule d'ammoniac peut se trouver dans deux états de conformation, selon que l'atome se trouve du côté $x > 0$ (conformation D, figure 9) ou du côté $x < 0$ (conformation G). Les deux états sont séparés par une barrière de potentiel $V_0 = 0,25\text{ eV}$. On appelle inversion le passage d'une conformation à l'autre, lorsque l'atome d'azote traverse la barrière d'énergie due aux trois atomes d'hydrogène.

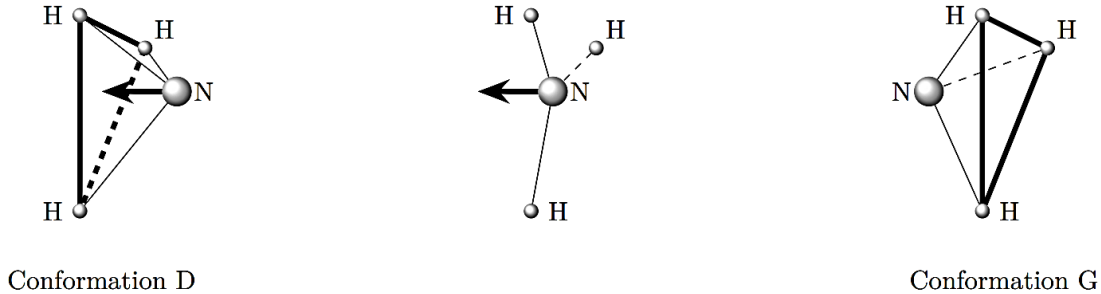


Figure 9 Inversion de la molécule d'ammoniac

B – Inversion quantique de la molécule d'ammoniac

On se propose de montrer que l'inversion de la molécule d'ammoniac est possible du point de vue quantique, indépendamment de la température. La fonction d'onde décrivant le mouvement relatif de l'atome d'azote et des trois atomes d'hydrogène est notée $\psi(x, t)$; elle vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x)\psi(x, t)$$

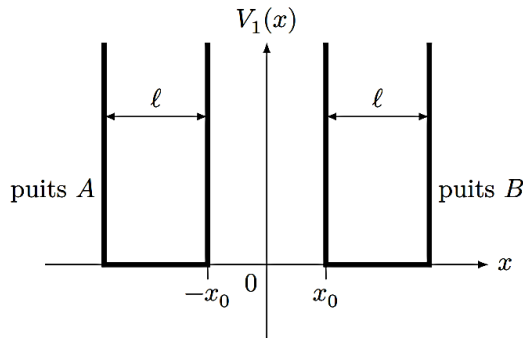
où m est la masse réduite du système composé de l'atome d'azote et des trois atomes d'hydrogène (on prendra $m \approx 2,5 m_{\text{H}}$).

III.B.1) On s'intéresse aux états stationnaires d'énergie E et on pose $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-iEt/\hbar)$.

Montrer que $\varphi(x)$ vérifie l'équation III.1

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad (\text{III.1})$$

On considère dans un premier temps un modèle de potentiel $V_1(x)$ à double puits infini symétrique rectangulaire (figure 10).



$$V_1 = \begin{cases} +\infty & \text{si } |x| < x_0 \\ 0 & \text{si } x_0 \leq |x| \leq x_0 + \ell \\ +\infty & \text{si } x_0 + \ell \leq |x| \end{cases}$$

Figure 10 Profil en double puits infini symétrique rectangulaire

Les fonctions d'onde localisées dans le puits A sont notées $\psi_A(x, t)$, celles localisées dans le puits B, $\psi_B(x, t)$. Les fonctions $\varphi(x)$ associées sont notées respectivement $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$.

III.B.2)

- Que veut dire qu'une fonction d'onde est localisée sur un domaine ?
- Pourquoi doit-on considérer les fonctions d'onde identiquement nulles pour $|x| < x_0$ et $|x| > x_0 + \ell$? Quelles sont les conditions aux limites de $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$?
- Donner, sous forme intégrale, sans les calculer, les conditions de normalisation pour $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$.

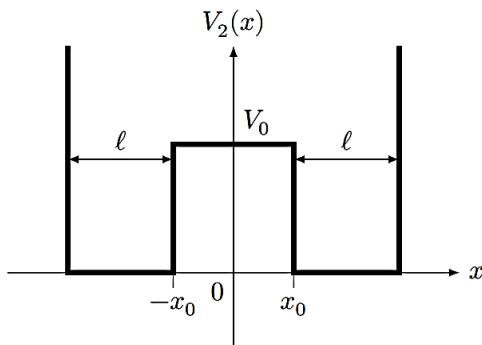
III.B.3)

- Résoudre l'équation III.1 pour le potentiel $V_1(x)$ dans l'intervalle $[-x_0 - \ell, -x_0]$ correspondant au puits A. On donnera les solutions normalisées $\varphi_{A,n}(x)$ indicées par un entier $n \in \mathbb{N}^*$ et les énergies E_n^A associées.

On démontrera les expressions des énergies et des solutions (et de leurs normes !) en fonction de n, m, l, x, x_0 et \hbar .

- Quelles sont, sans calculs, les solutions $\varphi_B(x)$ et les énergies E_n^B ?
- Soit une molécule d'ammoniac dans un état décrit par $\psi_{A,n}(x, t)$ d'énergie E_n^A à un instant t donné. Quelle est la probabilité de trouver l'atome d'azote dans l'intervalle $[x_0, x_0 + \ell]$ à l'instant $t' > t$? Conclure.

On modélise cette fois le profil d'énergie potentielle par un double puits infini rectangulaire à saut fini, $V_2(x)$ (figure 11).



$$V_2 = \begin{cases} V_0 & \text{si } |x| < x_0 \\ 0 & \text{si } x_0 \leq |x| \leq x_0 + \ell \\ +\infty & \text{si } x_0 + \ell \leq |x| \end{cases}$$

Figure 11 Profil en double puits à saut fini

On donne $V_0 = 0,25 \text{ eV}$, $x_0 = 10 \text{ pm}$. On considère $0 \leq E \leq V_0$.

III.B.4) Justifier que dans le domaine $x_0 \leq x \leq x_0 + \ell$, la solution de l'équation III.1 s'écrit

$$\varphi_B(x) = \mathcal{B} \sin(k(x - x_0 - \ell)) \quad \text{Où vous préciserez l'expression de } k \text{ en fonction de } E \text{ et } m \text{ et de constantes}$$

où \mathcal{B} une constante que l'on ne cherchera pas à exprimer. En déduire une forme de solution $\varphi_A(x)$ dans le domaine $-x_0 - \ell \leq x \leq -x_0$.

III.B.5) Dans le domaine $-x_0 < x < x_0$, les solutions de l'équation III.1 s'écrivent

$$\varphi_C(x) = C_1 \cosh(Kx) + C_2 \sinh(Kx)$$

où C_1 , C_2 et K sont des constantes.

- Exprimer K en fonction de E , V_0 , m et \hbar .

b) Quelles conditions doivent être vérifiées par la fonction d'onde $\psi(x, t)$ en tout point où le potentiel est borné ? En déduire deux relations entre $\varphi_C(x_0^-)$, $\varphi_B(x_0^+)$, $\frac{d\varphi_C}{dx}(x_0^-)$ et $\frac{d\varphi_B}{dx}(x_0^+)$.

À partir de ces relations qui relient K à k , il est possible de déterminer l'énergie E de l'état stationnaire $\varphi(x)$, selon qu'il est symétrique (ou pair en x , ce qui conduit à $C_2 = 0$) ou antisymétrique (ou impair en x , donc $C_1 = 0$).

III.B.6) La première solution symétrique $\varphi_1^{\text{sym}}(x)$ d'énergie E_1^{sym} et la première solution antisymétrique, impaire en x , $\varphi_1^{\text{anti}}(x)$ d'énergie E_1^{anti} sont représentées figure 12. Dans le cas où les énergies de ces deux états sont très petites devant V_0 , leur différence est

$$\delta E = E_1^{\text{anti}} - E_1^{\text{sym}} = \frac{4\pi^2\hbar^3}{m\ell^3} \frac{\exp(-2x_0\sqrt{2mV_0}/\hbar)}{\sqrt{2mV_0}}$$

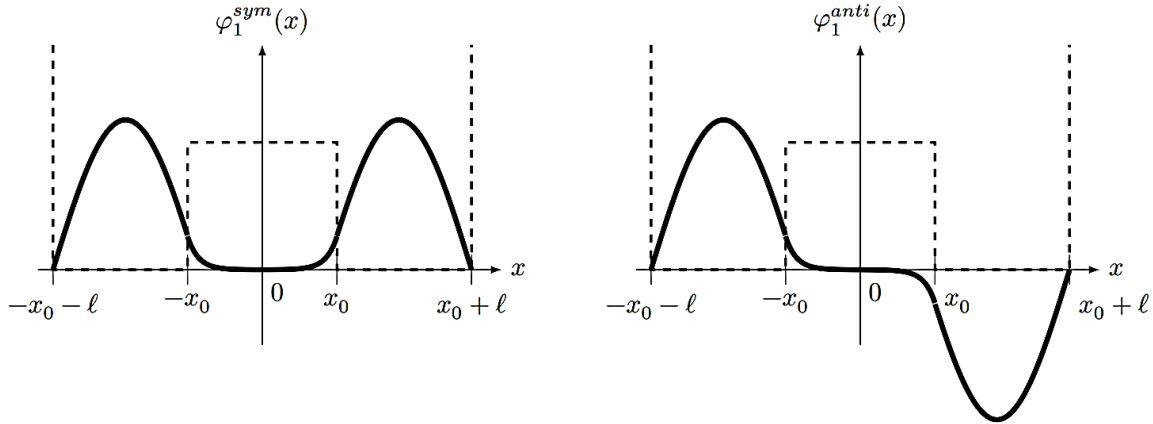


Figure 12 Solutions φ_1^{sym} et φ_1^{anti}

À l'instant $t = 0$, la molécule d'ammoniac est dans une conformation G (figure 13), décrite par la fonction d'onde

$$\psi(x, 0) = \varphi_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1^{\text{sym}}(x) + \varphi_1^{\text{anti}}(x))$$

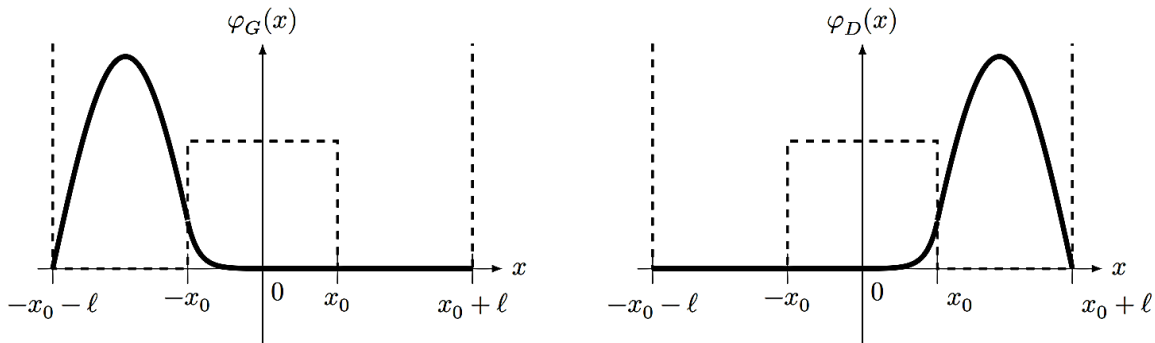


Figure 13 Fonctions φ_G et φ_D

a) Écrire l'expression de la fonction d'onde $\psi(x, t)$ de la molécule d'ammoniac à un instant t quelconque, en fonction de φ_1^{sym} , φ_1^{anti} , des énergies E_1^{anti} et E_1^{sym} et de \hbar .

b) Pourquoi deux fonctions d'onde ψ_1 et ψ_2 telles que $\psi_1 = \psi_2 \exp(i\alpha)$, où $\exp(i\alpha)$ est un nombre complexe de module 1, décrivent-elles le même état physique ?

c) En déduire que la fonction d'onde $\psi(x, t)$ décrit une évolution périodique de l'état de la molécule d'ammoniac, dont on exprimera la période τ en fonction de δE et de \hbar . Calculer la fréquence f correspondante si $\delta E = 9,85 \times 10^{-5} \text{ eV}$. Dans quel domaine spectral se situe une onde électromagnétique de fréquence f ?

C'est sur cette transition que fonctionna le premier maser construit par C. Townes, J. Gordon et H. Ziegler en 1954.

d) Décrire l'état de la molécule d'ammoniac à l'instant $t = \tau/2$. En quoi ce changement d'état entre les instants $t = 0$ et $t = \tau/2$ permet-il d'illustrer l'effet tunnel ?

e) Quelle est l'influence de la barrière de potentiel V_0 et de la largeur x_0 sur la fréquence d'oscillation f ? Pour l'arsine, de formule AsH_3 , de même structure que NH_3 , la hauteur de la barrière de potentiel est multipliée par six et sa largeur par cinq. Que dire de la fréquence d'inversion de l'arsine ? Commenter.

C – Spectre d'absorption de la molécule d'ammoniac

On réalise ici une expérience de spectroscopie laser où une vapeur moléculaire, à l'équilibre thermodynamique, contenue dans une cellule, est en interaction avec une onde laser progressive de fréquence réglable.

On enregistre le profil d'absorption autour d'une fréquence de résonance (Figure 7).

La raie d'absorption moléculaire est élargie par effet Doppler-Fizeau en raison de l'agitation thermique des molécules.

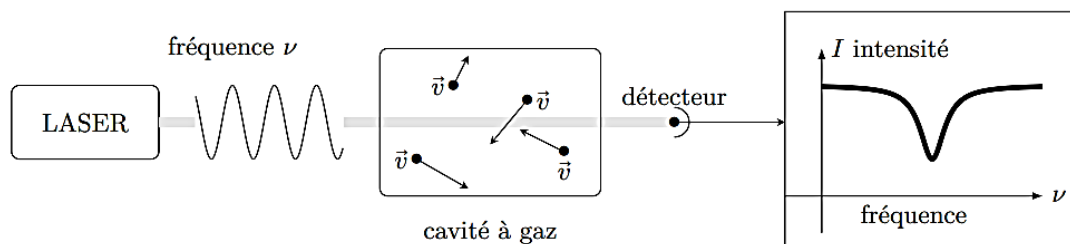


Figure 7 Schéma de principe de la spectroscopie laser

Un faisceau lumineux monochromatique, dont le champ électrique est donné par $\vec{E}(x, t) = E_0 \vec{e}_y \exp i(\omega t - \underline{k}x)$ en notation complexe, traverse, dans le sens des x croissants, un milieu matériel homogène localement neutre, dont la conductivité électrique est $\gamma > 0$. La célérité de la lumière dans le vide est notée c .

III.C.1) Quelle est l'équation de propagation du champ électrique dans le milieu ? En déduire la relation de dispersion $\underline{k}^2(\omega)$ en fonction de γ , μ_0 , c et ω .

III.C.2)

a) On note $\underline{k} = k_r - ik_i$ où k_r et k_i sont respectivement les parties réelle et imaginaire de \underline{k} . Montrer, sans chercher à expliciter k_i , que $k_i > 0$. Que cela signifie-t-il pour l'onde ?

L'onde traverse une cuve de longueur L contenant le milieu puis se propage à nouveau dans le vide. On admet que les coefficients de transmission en amplitude sont égaux à 1, en entrée et en sortie de cuve.

b) Rappeler la relation liant l'intensité I de l'onde électromagnétique et le vecteur de Poynting $\vec{\pi}$. Montrer que l'intensité de l'onde $I(L)$ après la cuve s'exprime en fonction de l'intensité I_0 avant la cuve selon la loi $I(L) = I_0 \exp(-\alpha L)$. Donner l'expression de α en fonction de k_i .

III.C.3) La transition choisie pour la mesure de l'absorption lumineuse est une raie de l'ammoniac de fréquence $\nu_0 = 2,895\,3694 \times 10^{13}$ Hz, fortement absorbante et située dans un domaine d'émission d'un laser à CO_2 . Le spectre d'absorption représente l'intensité lumineuse ayant traversé le milieu, en fonction de la fréquence du rayonnement (figure 14).

a) Quelle longueur d'onde est associée à un rayonnement électromagnétique de fréquence ν_0 ? À quel domaine électromagnétique appartient cette raie ? Calculer en eV l'énergie E_γ d'un photon de cette fréquence.

b) Cette absorption correspond, pour la molécule d'ammoniac, à la transition entre deux états d'énergie E_1 et $E_2 > E_1$. Le niveau E_1 est supposé parfaitement défini alors que le niveau E_2 présente une largeur δE (figure 14). En quoi cette largeur explique-t-elle le spectre d'absorption ? Estimer la valeur de la largeur dite naturelle $\delta \nu$ pour $\delta E = 2,0 \times 10^{-8}$ eV.

Rem : Cette raie ne correspond pas à la transition étudiée en partie IIIB.

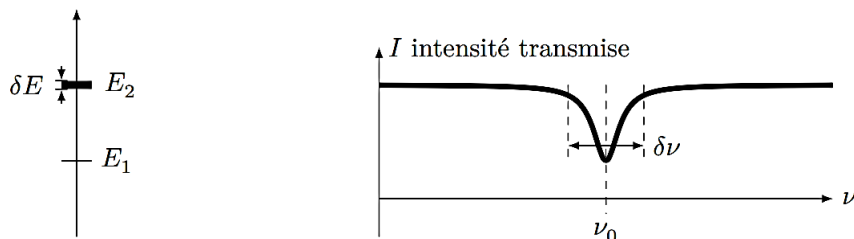


Figure 14 Niveaux d'énergie et spectre d'absorption

III.C.4) Elargissement de la raie

Le faisceau laser traversant le milieu absorbant possède la fréquence ν dans le référentiel du laboratoire. En raison du mouvement des molécules d'ammoniac, la fréquence perçue par ces molécules est décalée par effet Doppler. Elle n'est plus ν mais une fréquence ν' dépendant de leur vitesse. On admet que pour une vitesse v_x suivant l'axe (Ox) très petite devant la vitesse de la lumière c , $\nu' = \nu(1 - \frac{v_x}{c})$.

Le spectre d'absorption de la figure 14 est celui d'une molécule d'ammoniac au repos dans le laboratoire. Tracer le spectre d'absorption d'une molécule de vitesse $v_x > 0$ telle que $\nu_0 v_x / c > \delta\nu$.

On considère dans la suite que les molécules d'ammoniac au repos absorbent uniquement les rayonnements dont la fréquence se situe dans l'intervalle de largeur $\delta\nu$ autour de la fréquence ν_0 , soit l'intervalle $[\nu_0 - \delta\nu/2, \nu_0 + \delta\nu/2]$. Dans l'ammoniac gazeux à la température T , les molécules de masse m_a sont animées de vitesses aléatoires, dont la répartition suit la loi de Maxwell-Boltzmann. Selon cette loi, la probabilité $dP(v_x)$ que la composante selon \vec{e}_x de la vitesse soit comprise entre v_x et $v_x + dv_x$ est donnée par

$$dP(v_x) = K_0 \exp\left(-\frac{m_a v_x^2}{2k_B T}\right) dv_x$$

où K_0 est une constante de normalisation.

III.C.5) L'ammoniac gazeux est traversé par un faisceau laser de fréquence ν dirigé selon \vec{e}_x . Exprimer la probabilité $dP(\nu, \nu_0)$ qu'une molécule perçoive la fréquence ν_0 à $\delta\nu$ près, en fonction de K_0 , m_a , k_B , T , c , ν , $\delta\nu$ et ν_0 . Si n_0 est le nombre de molécules éclairées par le faisceau laser, quel est le nombre δn de molécules pouvant absorber une partie de l'intensité du faisceau ?

III.C.6)

a) Expliquer pourquoi le spectre d'absorption d'une vapeur à la température T diffère de celui d'une molécule au repos dans le référentiel du laboratoire.

b) En se référant aux propriétés de la courbe de Gauss (figure 16), donner l'expression de la largeur $\Delta\nu$ du spectre d'absorption, en fonction de k_B , T , m_a et c .

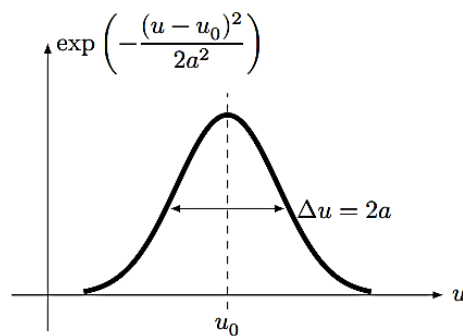


Figure 16 Courbe de Gauss

c) A $T = 273$ K, évaluer l'ordre de grandeur de $\Delta\nu$. Comparer à la largeur naturelle $\delta\nu$.

Données numériques

Célérité de la lumière dans le vide	$c = 299\,792\,458 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$
Charge élémentaire	$e = 1,602\,176\,621 \times 10^{-19} \text{ C}$
Constante d'Avogadro	$\mathcal{N}_A = 6,022\,140\,86 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Constante de Planck	$h = 6,626\,070\,040 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
	$\hbar = h/2\pi = 1,054\,571\,800 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
Masse de l'électron	$m_e = 9,109\,383\,56 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Masse de l'atome d'hydrogène	$m_H = 1,673\,72 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Masse molaire de l'ammoniac	$M_{\text{NH}_3} = 17,031 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$
Température du point triple de l'eau	$T_{PT} = 273,16 \text{ K}$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$

Analyse vectorielle : $\overrightarrow{\text{rot}}(\overrightarrow{\text{rot}} \vec{A}) = \overrightarrow{\text{grad}}(\text{div} \vec{A}) - \Delta \vec{A}$

Problème 2 : L'oscillateur harmonique en physique quantique

Hormis le nombre i tel que $i^2 = -1$, les nombres complexes sont soulignés : $\underline{z} \in \mathbb{C}$. Les vecteurs seront traditionnellement surmontés d'une flèche, par exemple \vec{v} pour une vitesse ; sauf s'ils sont unitaires et seront alors surmontés d'un chapeau, par exemple \hat{u} tel que $\|\hat{u}\| = 1$.

- Q1.** Citer deux exemples d'oscillateurs harmoniques en physique classique, l'un en mécanique et l'autre en électricité. Pour chacun d'entre eux faire un schéma, établir l'équation d'évolution par une méthode énergétique et décrire les échanges énergétiques mis en jeu.

On envisage dans cette partie un traitement quantique de l'oscillateur harmonique décrivant les vibrations d'une molécule diatomique. L'objectif est d'obtenir l'expression quantifiée des valeurs possibles de l'énergie de cet oscillateur harmonique dans cette théorie.

On note $\underline{\Psi}(x,t)$ la fonction d'onde du système décrivant l'oscillateur harmonique associé à une molécule diatomique. Le système est assimilé à un point matériel M dont la masse est notée μ . Ce point évolue le long d'un axe (O, \hat{u}_x) , la distance $x = OM$ représente l'élongation du ressort de raideur k modélisant la liaison chimique entre les deux atomes à travers le potentiel $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Il s'agit donc d'un problème unidimensionnel.

Le système est de plus stationnaire, on peut donc séparer la fonction d'onde en deux parties sous la forme $\underline{\Psi}(x,t) = f(x) \cdot \exp(-iEt/\hbar)$ où E représente les valeurs de l'énergie accessibles à ce système.

La fonction $\underline{\Psi}(x,t)$ est une solution de norme unité de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \underline{\Psi}(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \underline{\Psi}(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\underline{\Psi}(x,t)$$

- Q2.** En utilisant la relation d'indétermination spatiale de Heisenberg, montrer que les états stationnaires d'une particule de masse m confinée dans un puits de potentiel de largeur L et d'énergie potentielle minimale nulle ($V(0) = 0$ J) ont une énergie minimale E_{\min} qui ne peut pas être nulle. Exprimer E_{\min} en fonction de L , \hbar , m .

On en déduit que les énergies E accessibles à l'oscillateur harmonique quantique sont strictement positives.

- Q3.** Écrire l'équation différentielle vérifiée par la fonction $f(x)$ en fonction des paramètres k , μ , \hbar et E .

On effectue le changement de variable $\alpha = x \left(\frac{\mu k}{\hbar^2} \right)^{1/4}$ et l'on pose $\gamma = \left(\frac{4\mu E^2}{\hbar^2 k} \right)^{1/2}$.

- Q4.** Quelles sont les dimensions de α et de γ ?
- Q5.** Écrire l'équation différentielle vérifiée par la fonction $f(\alpha)$ en fonction du seul paramètre γ .
- Q6.** Vérifier que dans le régime $\alpha \rightarrow \pm\infty$, on peut écrire $f(\alpha) \sim e^{\pm \frac{1}{2}\alpha^2}$.
- Q7.** Justifier succinctement que seule la solution $\alpha \rightarrow e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$ est physiquement acceptable.

Dès lors que nous connaissons le comportement asymptotique de la solution recherchée, nous pouvons l'extraire de celle-ci en effectuant le changement de fonction $f(\alpha) = g(\alpha) \cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$.

- Q8.** Déterminer l'équation différentielle vérifiée par la fonction $\alpha \rightarrow g(\alpha)$.

Pour résoudre cette équation, on effectue un développement en série entière de la fonction g :

$$g(\alpha) = \sum_0^{+\infty} b_p \alpha^p .$$

Q9. Exprimer le coefficient b_{p+2} en fonction du coefficient b_p , de l'entier p et de γ .

Si l'on conserve tous les termes de la série, on montre que le comportement asymptotique de la fonction $\alpha \rightarrow g(\alpha)$ l'emporte sur $\exp(-\alpha^2/2)$ en $\pm\infty$ ce qui ne permet pas de construire de solution physiquement acceptable. La seule possibilité est de tronquer la série en imposant l'existence d'un entier n tel que si $p \geq n$ alors $b_{p+2} = 0$.

Q10. En déduire que les énergies accessibles à un oscillateur harmonique en régime quantique sont de la forme :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \text{ avec } n \in \mathbb{N} \quad \text{où } \omega \text{ est une grandeur que l'on exprimera en fonction de } \mu \text{ et } k.$$