TD n° 14

Oscillateur non harmonique

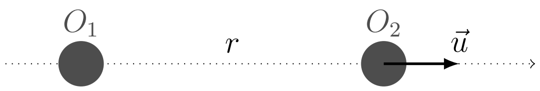
Dans le TD précédent, on a étudié l'oscillateur harmonique. On a vu en cours que tout système au voisinage de sa position d'équilibre se comporte comme un oscillateur harmonique, mais ce n'est qu'une approximation. Si l'amplitude du mouvement augmente et que le système s'éloigne de plus en plus de l'équilibre, alors des termes non-linéaires apparaissent, qu'on va étudier aujourd'hui à l'aide de `scipy.integrate.odeint`.

On va s'intéresser par exemple à une molécule diatomique O_2 : ce sont deux atomes identiques d'oxygène, de masse $m = 16\times 1{,}7\times 10^{-27}$ kg, qui restent attachés par une force d'origine partiellement quantique, partiellement électrique ; cette force les attire mais pas trop, car quand ils s'approchent trop, leurs nuages électroniques se repoussent. Il existe divers modèles pour représenter cette force ; nous prendrons ici celui d'une force conservative d'énergie potentielle

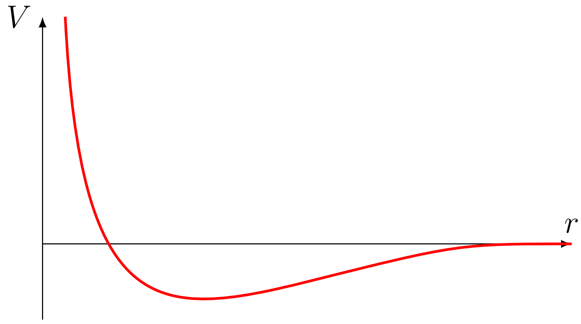
$$V(r) = A\left(\frac{3r_e^4}{5r^{10}} - \frac{1}{r^6}\right) \tag{1}$$

avec r la distance entre les atomes, A une constante et $r_e = 110\,\text{pm}$.

Toutes les autres forces (dont le poids) sont négligeables ici. On admettra qu'une théorie totalement hors programme (la théorie du mobile fictif) nous permet de traiter le mouvement des deux atomes comme si l'un des deux était fixe et l'autre se déplaçait avec une masse $m^* = \frac{m}{2}$. On repèrera alors la position du premier atome par un point O_1 fixe, et celle du second par $\vec{O_1O_2} = r\vec{u}$ avec $\vec{u}$ un vecteur unitaire fixe.



Modèle de la molécule



Allure de l'énergie potentielle

1. Exprimez $\frac{dV}{dr}$ et déduisez-en que r_e représente la distance à l'équilibre.
2. La molécule de dioxygène possède une raie d'absorption infrarouge à $\lambda = 9{,}10\,\mu\text{m}$. Cette raie correspond à la fréquence f_0 de vibration de la molécule au voisinage de sa position d'équilibre : quand on envoie de la lumière ayant la même fréquence f_0, alors il apparaît un phénomène qu'on étudiera bientôt, appelé *résonance*, qui provoque l'absorption de la lumière. Calculez numériquement f_0 ; on donne $c = 3\times 10^8\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$.

   D'après le cours, $f_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{1}{m^*}\frac{d^2V}{dr^2}(r_e)}$. Exprimez A en fonction de r_e, m et f_0. Déduisez-en la valeur numérique de A.
3. Tracez la courbe $V(r)$ (idéalement en électron-volt : $1\,\text{eV} = 1{,}6\times 10^{-19}\,\text{J}$) entre $0,1r_e$ et $5r_e$. Quel sera le type de mouvement en fonction de l'énergie mécanique ?
4. À partir de l'expression de l'énergie mécanique, montrez que r vérifie l'équation différentielle

$$\frac{m}{2}\ddot{r} + 6A\left(\frac{1}{r^7} - \frac{r_e^4}{r^{11}}\right) = 0 \tag{2}$$

5. Simulez alors $r(t)$ sur une durée de quelques périodes (attention à bien choisir le temps de simulation, qui est ici très très court) à l'aide de la fonction `odeint`. On prendra comme CI : $r(0) = 0{,}9999r_e$ et $\dot{r}(0) = 0$.

6. Tracez les nouvelles courbes $r(t)$ pour $r(0) = 0{,}9r_e$, puis $r(0) = 0{,}88r_e$. Commentez.
7. Pour interpréter ces courbes, calculez numériquement les énergies mécaniques correspondant aux 3 conditions initiales utilisées précédemment, et tracez pour chacune d'entre elles une ligne horizontale sur le graphique de $V(r)$ (on peut le faire à l'aide de `plt.axhline(valeur)`).
8. Pour les deux premières conditions initiales, le mouvement est périodique, mais trois changements apparaissent :
   - comment évolue la période des oscillations lorsque l'amplitude augmente ?
   - comment évolue la valeur moyenne de l'oscillation (on pourra se contenter de mesurer $\frac{r_{max}+r_{min}}{2}$) ?
   - comment évolue la forme du signal ?
9. Que représente physiquement l'énergie du minimum de V ? Comparez avec les valeurs tabulées trouvées sur Internet.