

DM N°13 Vers une nouvelle définition du kelvin

(D'après Centrale 2016, Physique 2 PC)

I - L'agitation thermique

I.A) L'agitation thermique dans l'atmosphère

I.A.1) a) A partir de l'équation de la statique des fluides projetée sur l'axe vertical ascendant

$$\frac{dP}{dz} = -\rho g$$

dans l'hypothèse de l'atmosphère gaz parfait

$$PV = nRT \text{ d'où } \rho = \frac{m_{tot}}{V} = \frac{nM}{V} = \frac{PM}{RT}$$

Si l'atmosphère est isotherme, $T = \text{cste}$ d'où par intégration, avec $P(z = 0) = P_0$

$$P(z) = P_0 \exp(-Mgz/RT)$$

b) En considérant une masse moyenne m par molécule constituant l'atmosphère,

$$M = mN_A \text{ et } R = k_B N_A \text{ d'où } P(z) = P_0 \exp(-mgz/k_B T)$$

d'où $n_v(z) = \frac{n}{V} N_A = \frac{P}{k_B T} = N_0 \exp\left(\frac{-mgz}{k_B T}\right)$: on retrouve une statistique de Boltzmann, $mgz =$

E_{pp} énergie potentielle de pesanteur, $n_v(z) = N_0 \exp\left(\frac{-E_{pp}}{k_B T}\right)$

I.A.2) En écrivant $n_v(z)$ sous la forme $n_v(z) = N_0 \exp\left(\frac{-z}{H}\right)$ on identifie la hauteur caractéristique de l'atmosphère : $H = \frac{k_B T}{mg}$

La vitesse limite atteinte en chute libre s'obtient par conservation de l'énergie mécanique :

$E_{minit} = mgH = E_{mfin} = \frac{1}{2} m v_l^2$ d'où $v_l = \sqrt{2gH}$ ou encore en exprimant H : $v_l = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$: on retrouve une expression proche de la vitesse quadratique moyenne atteinte pour un gaz à la température T : $v_l = \sqrt{\frac{2}{3}} v_q$: ces deux vitesses qui caractérisent l'atmosphère isotherme sont bien du même ordre de grandeur.

Remarque: Pour l'atmosphère, plutôt diatomique (O₂ 19%, N₂ 80%, autres 1%), les auteurs auraient dû proposer $v_q^2 = \frac{5k_B T}{m}$

I.A.3) Quelques pistes pour cette question :

Le centre de gravité de la balle est immobilisé, mais il reste une agitation thermique, désordonnée, de toutes les particules qui la composent ?

En terme d'énergie localement, cette énergie cinétique des molécules se transforme en énergie potentielle de déformation ?

Autre piste le mouvement des particules est aléatoires, vectoriellement la vitesse du centre de gravité est alors nulle ?

IB - L'agitation thermique dans un circuit électrique

I.B.1) La vitesse d'agitation thermique des électrons dans le métal est donnée en ordre de

grandeur par la vitesse quadratique $v_q = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$ d'où pour $T @ 300K$ $v_q @ 10^5 ms^{-1} \ll c$: ces électrons ne sont pas relativistes !

I.B.2) Les deux relations s'obtiennent à partir des lois de Kirchhoff :

- loi des mailles : $u_e = u_s + L \frac{di_e}{dt}$
- loi des nœuds : $i_e = i_s + C \frac{du_s}{dt}$

I.B.3) a) Les mêmes relations s'appliquent sur le schéma de la ligne bifilaire proposée :

$$u(x, t) = u(x + dx, t) + \lambda dx \frac{\partial i(x, t)}{\partial t} \text{ qui donne au premier ordre en } dx : \frac{\partial u}{\partial x} = -\lambda \frac{\partial i}{\partial t} (1)$$

$$\text{puis } i(x, t) = i(x + dx, t) + \gamma dx \frac{\partial u(x + dx, t)}{\partial t} \text{ qui donne au premier ordre en } dx : \frac{\partial i}{\partial x} = -\gamma \frac{\partial u}{\partial t} (2)$$

b) L'équation de d'Alembert vérifiée par i et u s'obtient alors en découplant les équations et en utilisant le théorème de Schwartz :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\lambda \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial i}{\partial t} \right) = -\lambda \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial i}{\partial x} \right) = \gamma \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \text{ d'où } \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c_e^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} (3) \text{ avec } c_e = \frac{1}{\sqrt{\gamma \lambda}} (4)$$

c) En remplaçant dans l'équation de d'Alembert on obtient l'équation de dispersion pour les ondes planes harmoniques se propageant selon les x croissants : $\omega = kc_e$. La résistance caractéristique s'obtient en remplaçant dans une des équations de couplage, par exemple

$$\text{dans (1) : } -ikU = -\lambda(-i\omega)I \quad \text{d'où} \quad R_c = \frac{U}{I} = \lambda \frac{\omega}{k} = \lambda c_e = \sqrt{\frac{\lambda}{\gamma}} \quad (5)$$

Ces relations peuvent être inversées : (5) donne $\lambda = \frac{R_c}{c_e}$ puis (4) $\gamma = \frac{1}{\lambda c_e^2} = \frac{1}{R_c c_e}$

I.B.4) a) L'équation vérifiée par $U(x)$ s'obtient en remplaçant $u(x, t)$ dans (3) :

$$U''(x) \cos(\omega t) = \frac{1}{c_e^2} (-\omega^2) U(x) \cos(\omega t) \text{ d'où } U''(x) + \frac{\omega^2}{c_e^2} U(x) = 0$$

équation d'un oscillateur harmonique. Les conditions aux limites $U(0) = U(D) = 0$ fixent la forme de la solution : on pose $K = \frac{\omega}{c_e}$

$$U(0) = 0 \text{ impose } U(x) = U_o \sin(Kx)$$

$$U(D) = 0 \text{ impose } KD = n\pi \text{ avec } n \text{ entier, d'où } K_n = \frac{n\pi}{D} \text{ et } U(x) = U_{on} \sin(K_n x) : \text{ mode propre } n, \text{ associé à la pulsation } \omega_n = c_e K_n = \frac{n\pi c_e}{D}$$

b) L'intervalle entre deux fréquences propres consécutives est $\delta f = \frac{\delta \omega}{2\pi} = \frac{c_e}{2D}$ donc si Δf est grand $N = \frac{\Delta f}{\delta f} = \frac{2D \Delta f}{c_e}$ (à une unité près, $\ll N$)

$$c) \quad i_n(x, t) \text{ est donné par } u_n(x, t) \text{ à partir de (1) ou (2) : } \frac{\partial i_n(x, t)}{\partial x} = -\gamma \frac{\partial (U_{on} \sin(K_n x) \cos(\omega_n t))}{\partial t} = \gamma \omega_n U_{on} \sin(K_n x) \sin(\omega_n t)$$

qui s'intègre, avec l'hypothèse $i_n(x, t) = 0$ lorsque $U_{on} = 0$, sous la forme :

$$i_n(x, t) = \frac{-\gamma \omega_n}{K_n} U_{on} \cos(K_n x) \sin(\omega_n t)$$

$$\text{avec } \gamma \frac{\omega_n}{K_n} = \frac{1}{R_c c_e} c_e = \frac{1}{R_c} \text{ donc } i_n(x, t) = \frac{-U_{on}}{R_c} \cos(K_n x) \sin(\omega_n t)$$

I.B.5) Sur une portion dx l'énergie emmagasinée dans le circuit pour le mode n est : $de_n =$

$$\frac{1}{2} \lambda dx i_n(x, t)^2 + \frac{1}{2} \gamma dx u_n(x, t)^2 = \frac{1}{2} \lambda dx \frac{U_{on}^2}{R_c^2} \cos^2(K_n x) \sin^2(\omega_n t) +$$

$$\frac{1}{2} \gamma dx U_{on}^2 \sin^2(K_n x) \cos^2(\omega_n t)$$

d'où $\langle de_n \rangle = (\frac{1}{4} \gamma U_{on}^2 \cos^2(K_n x) + \frac{1}{4} \gamma U_{on}^2 \sin^2(K_n x)) dx = \frac{1}{4} \gamma U_{on}^2$: la densité linéique moyenne est uniforme

I.B.6) a) En intégrant sur la ligne de longueur D on en déduit $\langle E_n \rangle = \frac{1}{4} \gamma D u_{on}^2 = \frac{D}{4R_c c_e} u_{on}^2$

on impose $\langle E_n \rangle = k_B T$ d'où $\frac{D}{4R_c c_e} u_{on}^2 = k_B T$

$$\text{et } u_n(x, t) = \sqrt{\frac{4R_c c_e k_B T}{D}} \sin(K_n x) \cos(\omega_n t) = \sqrt{2} U_{eff,n}(x) \cos(\omega_n t)$$

$$\text{avec } u_{eff,n}(x) = \sqrt{\frac{2R_c c_e k_B T}{D}} \sin(K_n x)$$

et finalement $u_{eff,n}^2(x) = \frac{2R_c c_e k_B T}{D} \sin^2(K_n x) U_{eff,n}^2 = \frac{2R_c c_e k_B T}{D}$ indépendant de n.

b) Il y a N modes possibles dans l'intervalle de fréquence Δf donc $U_{eff}^2 = N U_{eff,n}^2 = \frac{2D \Delta f}{c_e} \frac{2R_c c_e k_B T}{D}$ d'où, avec $R = R_c$ le résultat attendu : $U_{eff} = \sqrt{4k_B T R \Delta f}$

I.B.7)a) Je ne comprends pas bien comment la valeur de R peut être une variable puisque $R=R_c$

On poursuit à partir des résultats précédents...

On doit vérifier $U_{eff} \propto \sqrt{R}$ donc en log-log une relation linéaire de pente $\frac{1}{2}$, ce qui correspond bien aux deux courbes proposées, les deux décades de variation sur Δf se traduisant par une décade de décalage entre les deux droites.

La détermination de k_B repose avoir sur l'exploitation d'un point particulier. Par exemple :

pour $\Delta f = 1 \text{ Hz}$, $R = 10^2 \Omega$, $U_{eff} = 610^{-7} \text{ V}$ d'où $k_B = (6 \frac{10^{-7}}{500})^2 \frac{1}{4 \cdot 300 \cdot 10^2} = 1,2 \cdot 10^{-23} \text{ USI}$ ce qui donne bien l'ordre de grandeur attendu !

b) Les valeurs des tensions efficaces sont extrêmement faibles, il faut éliminer le bruit électromagnétique, d'où l'enceinte métallique qui isole des champs extérieurs.

La résistance peut chauffer, il faut thermostatier l'enceinte pour assurer une température constante.

II - Mesure acoustique

II.A Principe

II.A.1) La distance moyenne l entre molécules dépend de la densité moléculaire n^* : $n^* \approx 1/l^3$ avec d'après la loi des gaz parfaits $n^* = \frac{P}{k_B T}$. On négligera les interactions si $l > l_{min} = 5 \text{ nm}$ donc si $P < P_{max} = \frac{k_B T}{l^3}$ numériquement $P < 0,4 \text{ bar}$: a priori ce n'est pas le cadre de l'étude proposé, puis P varie entre 0,5 et 7 bar...

II.A.2) a) question de cours : en posant $\mu = \mu_o + \rho$ avec $\rho \ll \mu_o$, $P = P_o + \pi$ avec $\pi \ll P$ et enfin en supposant $v \ll c_{son}$

$$\text{Équation d'Euler : } \mu \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\overrightarrow{\text{grad}} P \text{ linéarisée : } \mu_o \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{-\partial \pi}{\partial x}$$

$$\text{Équation de conservation de la masse : } \frac{\partial \mu}{\partial t} + \text{div}(\mu \vec{v}) = 0 \text{ linéarisée } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mu_o \frac{\partial v}{\partial x} = 0$$

Caractère isentropique : $\chi_S = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_S$ linéarisée $\chi_S = \frac{1}{\mu_0} \frac{\rho}{\pi}$ donc $\rho = \mu_0 \chi_S \pi$

on obtient en découplant ces équations l'équation de d'Alembert : $\frac{\partial^2 \pi}{\partial x^2} = \mu_0 \chi_S \frac{\partial^2 \pi}{\partial t^2} = \frac{1}{c_a^2} \frac{\partial^2 \pi}{\partial x^2}$ avec $c_a = \sqrt{\frac{1}{\chi_S \mu_0}}$

b) Pour un gaz parfait $\mu = \frac{PM}{RT}$ d'où $\chi_T = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T = \frac{M}{\mu RT} = \frac{1}{P}$ d'où $\chi_S = \frac{1}{\gamma P}$ et $c_a^2 = \frac{\gamma P}{\mu_0} = \frac{\gamma RT}{M} = \frac{\gamma N_A k_B T}{M}$

c) Avec la relation donnée, en notant $c_{aGP} = \sqrt{\frac{\gamma N_A k_B T}{M}}$ l'expression de la célérité du son dans le modèle du gaz parfait, on a $c_a = c_{aGP} \left(1 + \frac{\beta P}{2} \right)$ au premier ordre en $\beta P \ll 1$ L'erreur relative sur la célérité lorsqu'on considère le gaz comme parfait est donc $\frac{\Delta c_a}{c_{aGP}} = \frac{\beta P}{2}$.

Pour que l'erreur reste inférieure à 10^{-6} il faut $P < 2 \frac{10^{-6}}{1,310^{-11}} = 1,5 \text{ bar}$

Cette nouvelle condition ne couvre pas totalement le cadre de l'étude de 0.4 à 7 bars.

II.A.3) On repart de l'expression valable pour un gaz parfait : $k_B = \frac{c_a^2 M}{\gamma N_A T}$, on tient compte des incertitudes sur les différents paramètres (sauf γ), la relation rappelée à la fin du texte donne

$$\frac{\delta k_B}{k_B} = \sqrt{4 \left(\frac{\delta c_a}{c_a} \right)^2 + \left(\frac{\delta M}{M} \right)^2 + \left(\frac{\delta N_A}{N_A} \right)^2 + \left(\frac{\delta T}{T} \right)^2} \text{ d'où numériquement à la limite acceptable : } 210^{-6} = \sqrt{4 \left(\frac{\delta c_a}{c_a} \right)^2 + (1,510^{-6})^2 + (1,210^{-8})^2 + (310^{-7})^2}$$

$\frac{\delta c_a}{c_a} = \frac{1}{2} \sqrt{(210^{-6})^2 - (1,510^{-6})^2 - (1,210^{-8})^2 - (310^{-7})^2} = 6,410^{-7}$ on est en dessous de l'erreur prévue au II2) : il faudra corriger l'expression de la célérité pour tenir compte du caractère non parfait du gaz.

II.B - L'onde acoustique sphérique.

II.B.1) Équation du potentiel

a) La symétrie sphérique impose $\vec{v}(r, t) = v(r, t) \vec{e}_r$ donc $\overrightarrow{rot} \vec{v} = \vec{0}$ (formulaire en fin d'énoncé) et il existe $\phi(r, t)$ tel que $\vec{v}(r, t) = \overrightarrow{grad} \phi(r, t)$.

On est toujours dans l'approximation acoustique, on doit donc vérifier l'équation d'Euler linéarisée $\mu \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\overrightarrow{grad} P$ donne ici $\mu_0 \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{-\partial \pi}{\partial r} \vec{e}_r$ avec $\vec{v}(r, t) = \frac{\partial \phi}{\partial r} \vec{e}_r$, donc, d'après le théorème de Schwartz $\mu_0 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \frac{-\partial \pi}{\partial r}$ qui s'intègre par rapport à r sous la forme $\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{-\pi}{\mu_0} + f(t)$ L'hypothèse $\phi(r, t) = 0$ si $\pi(r, t) = 0 \forall t$ donne $f(t) = 0$ et $\frac{\partial \phi}{\partial t}(r, t) = \frac{-\pi(r, t)}{\mu_0}$

b) on remplace $\pi(r, t) = -\mu_0 \frac{\partial \phi}{\partial t}(r, t)$ dans l'équation de d'Alembert vérifiée par $\pi(r, t)$ on obtient la même équation pour ϕ : $\Delta \phi(r, t) = \frac{1}{c_a^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$ (5)

II.B.2) Le confinement des ondes dans le résonateur va être responsable d'une quantification des pulsations admissibles, la fonction $\phi(r, t)$ devant vérifier des conditions aux limites.

Ici on suppose les parois indéformables, en $r = a$ le champ de vitesse doit s'annuler (pas de

flux sortant) : $\frac{\partial \phi}{\partial r}(r = a, t) = 0$ d'où $f'(r = a, t) = 0$

$$\text{II.B.3)} \vec{j}_e(r, t) = \pi(r, t) \vec{v}(r, t) = -\mu_o \frac{\partial \phi}{\partial t}(r, t) \frac{\partial \phi}{\partial r}(r, t) \vec{e}_r = \mu_o \omega f(r) f'(r) \cos(\omega t) \sin(\omega t) \vec{e}_r$$

donc $\langle \vec{j}_e \rangle = \vec{0}$: en moyenne dans le temps, les modes propres ne permettent pas un transport d'énergie.

II.B.4) On remplace $\phi(r, t) = f(r) \cos(\omega t)$ dans l'équation (5) en utilisant l'expression du laplacien scalaire rappelé en annexe :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2(rf(r))}{\partial r^2} \cos(\omega t) = \frac{1}{c_a^2} (-\omega^2) f(r) \cos(\omega t) \text{ d'où } \frac{\partial^2(rf(r))}{\partial r^2} = \frac{-\omega^2}{c_a^2} rf(r) = -k^2 rf(r) \text{ qui s'intègre sous la forme } rf(r) = a \sin(kr) + b \cos(kr) f(r) = \frac{a}{r} \sin(kr) + \frac{b}{r} \cos(kr) .$$

L'absence de divergence en $r=0$ impose $b=0$ d'où $\phi(r) = \frac{a}{r} \sin(kr) \cos(\omega t)$

II.B.5) ϕ doit vérifier la condition au limite donnée en IIB2) donc $(\frac{-1}{r^2} \sin(kr) + \frac{k}{r} \cos(kr))(r = a) = 0$ d'où $\tan(ka) = ka$. On doit donc avoir $k_n a = x_n$ où x_n est la racine n-ième de la fonction $g(x) = \tan(x) - x$, donc $k_n = \frac{\omega_n}{c_a} = \frac{2\pi \nu_n}{c_a} = \frac{x_n}{a}$ soit $\nu_n = \frac{c_a}{2\pi a} x_n$ qui explicite la relation de quantification attendue pour les fréquences propres.

II.B.6) $c_a = \frac{2\pi a \nu_n}{x_n}$ d'où numériquement, pour le mode $n=1$, $c_a = 3,07824610^2 \text{ ms}^{-1}$ avec une

incertitude sur c_a donnée par $\frac{\delta c_a}{c_a} = \sqrt{(\frac{\delta a}{a})^2 + (\frac{\delta \nu_1}{\nu_1})^2 + (\frac{\delta x_1}{x_1})^2} = \sqrt{(1,810^{-6})^2 + (510^{-10})^2 + (210^{-11})^2} = 1,810^{-6}$ c'est l'incertitude sur a (la plus forte) qui s'impose, d'où la troncature du résultat sur c_a . La précision sur c_a est insuffisante pour atteindre la précision sur k_B attendue (cf IIA3)

II.B.7) on déduit k_B de c_a à partir de $k_B = \frac{c_a^2 M}{\gamma N_A T}$

d'où $k_B = 1,38064910^{-23} \text{ JK}^{-1}$.

L'incertitude relative est donnée par $\frac{\delta k_B}{k_B} = \sqrt{4(\frac{\delta c_a}{c_a})^2 + (\frac{\delta M}{M})^2 + (\frac{\delta N_A}{N_A})^2 + (\frac{\delta T}{T})^2}$

$$\frac{\delta k_B}{k_B} = \sqrt{4(1,8 \cdot 10^{-6})^2 + (1,510^{-6})^2 + (1,210^{-8})^2 + (310^{-7})^2} = 3,910^{-6} \quad \text{soit} \quad \delta k_B = 5,410^{-29} \text{ JK}^{-1}$$

On dispose de 7 chiffres significatifs sur k_B .

III - Mesure par spectroscopie laser

III.A. Conformations de la molécule d'ammoniac

III.A.1) Dans cette modélisation seule la distance de l'atome d'azote au plan des atomes d'hydrogène est pertinente : $V(x)$ est paire.

Il y a deux positions d'équilibre stable en $|x| = b$ correspondant à la conformation la plus stable de la molécule (compromis entre attraction électrostatique et répulsion des noyaux des différents atomes...), le passage d'une conformation à l'autre se fait par passage par la position où l'atome d'azote est dans le plan des atomes d'hydrogène, situation d'équilibre instable d'où la barrière énergétique qui apparaît. A grande distance l'interaction est attractive.

III.A.2) Il faut comparer la barrière énergétique V_0 à l'énergie thermique $E_{th} = k_B T$. A la

température du point triple $E_{th} = 24meV \approx V_0/10$: l'inversion est peu probable.

Elle le devient pour $T \approx 10T_{PT}$ donc pour $T \approx 3000K$

III.B. Inversion quantique de la molécule d'ammoniac

A noter que la notion de masse réduite est inconnue des étudiants...

III.B.1) En remplaçant $\psi(x, t) = \varphi(x)\exp(-iEt/\hbar)$ dans l'équation de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t)$

on obtient en simplifiant par $\exp(-iEt/\hbar)$: $E \cdot \varphi(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V(x) \cdot \varphi(x)$

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad (6)$$

III.B.2) a) Les fonctions d'onde sont localisées sur un domaine lorsqu'elles sont nulles en dehors de ce domaine.

b) Pour $|x| < x_0$ et $|x| > x_0 + l$ le potentiel est infini, les seules solutions de l'équation (6) sont alors des fonctions identiquement nulles dans ces domaines : $\varphi(x) = 0$.

Le potentiel présentant des discontinuités infinies, on doit avoir continuité des fonctions $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$, donc une annulation sur les bords des domaines, ce sont les conditions aux limites : $\varphi_A(x = -x_0 - l) = \varphi_A(x = -x_0) = 0$ et $\varphi_B(x = x_0 + l) = \varphi_B(x = x_0) = 0$

c) La condition de normalisation des fonctions $\psi(x, t)$ impose une condition de normalisation de $\varphi_{A,B}$: $\int_{-x_0-l}^{-x_0} \varphi_A(x)^2 dx = \int_{x_0}^{x_0+l} \varphi_B(x)^2 dx = 1$

III.B.3) a) dans le puits A l'équation (6) s'écrit $\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$ les solutions correspondant à $E < 0$ (combinaison d'exponentielles réelles) ne pourront pas valider les deux conditions aux limites imposées, il faut donc que $E > 0$ et la solution s'écrit :

$\varphi_A(x) = A \cdot \sin(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot (x + x_0) + \phi)$ où A et ϕ sont donnés par les conditions aux limites et la condition de normalisation $\varphi_A(x = -x_0) = 0$ donne $\phi = 0$; $\varphi_A(x = -x_0 - l) = 0$ impose $\sin(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l) = 0$ d'où une quantification de E : $\boxed{\sqrt{\frac{2mE_n^A}{\hbar^2}} l = n\pi \text{ soit } E_n^A = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}}$

Il reste à déterminer A :

$$\int_{-x_0-l}^{-x_0} \varphi_A(x)^2 dx = A^2 \int_{-x_0-l}^{-x_0} \sin^2(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} (x + x_0)) dx =$$

$$A^2 \int_{-l}^0 \sin^2(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} X) dX = A^2 \int_0^l \sin^2(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} X) dX \quad \text{grâce au changement de variable } X = x + x_0,$$

et en utilisant la parité de la fonction à intégrer puis par linéarisation

$$(1 - \cos(2 \cdot \theta)) = 2 \cdot \sin^2(\theta)$$

$$\int_{-x_0-l}^{-x_0} \varphi_A(x)^2 dx = A^2 \cdot \frac{l}{2} = 1 \text{ d'où } \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{l}}} \text{ et finalement } \boxed{\varphi_{A,n}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\sqrt{\frac{2mE_n^A}{\hbar^2}} (x + x_0))}$$

b) Les mêmes calculs dans le puits B conduisent à $\boxed{\varphi_{B,n}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\sqrt{\frac{2mE_n^B}{\hbar^2}} (x - x_0))}$ avec

$$\boxed{E_n^B = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}}$$

c) Les puits étant infinis la fonction φ_A (resp φ_B) reste localisée dans le puits A (resp B) : la probabilité qu'une molécule d'ammoniac passe d'un puits à l'autre est nulle. Le modèle du double puits infini ne peut rendre compte des oscillations de la molécule.

III.B.4) Dans le domaine $x_o \leq x \leq x_o + l$ le potentiel est nul, on résout la même équation que dans la question III.B.3) avec comme unique condition au limite $\varphi_B(x = x_o + l) = 0$ imposée par le bord infini du potentiel en $x = x_o + l$.

La forme proposée convient : $\varphi_B(x) = B \sin(k(x - x_o - l))$ avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

de même on aura pour $-x_o - l \leq x \leq -x_o$ $\varphi_A(x) = A \sin(k(x + x_o + l))$.

III.B.5) a) Dans le domaine $-x_o \leq x \leq x_o$ l'équation stationnaire de Schrödinger devient $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m(E-V_o)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$ avec ici $E - V_o < 0$, les solutions peuvent alors s'écrire

$$\varphi(x) = C_1 \cosh(Kx) + C_2 \sinh(Kx) \text{ avec } K = \frac{\sqrt{2m(V_o - E)}}{\hbar}$$

b) Le potentiel étant borné, il doit y avoir continuité de $\varphi(x)$ et $\frac{d\varphi}{dx}(x)$ en x_o

$$\text{d'où } \varphi_c(x_o^-) = \varphi_B(x_o^+) \text{ et } \frac{d\varphi_c}{dx}(x_o^-) = \frac{d\varphi_B}{dx}(x_o^+).$$

III.B.6) a) Pour obtenir la dépendance temporelle de $\psi(x, t)$ il faut multiplier par $\exp(-iEt/\hbar)$ les fonctions d'onde spatiales.

$$\text{Comme } \psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1^{\text{sym}}(x) + \varphi_1^{\text{anti}}(x)) \text{ on aura } \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1^{\text{sym}}(x)\exp(-iE_1^{\text{sym}} t/\hbar) + \varphi_1^{\text{anti}}(x)\exp(-iE_1^{\text{anti}} t/\hbar))$$

b) Seul le module au carré des fonctions d'onde a un sens physique, donc les fonctions ψ_1 et $\psi_2 = \psi_1 \exp(i\alpha)$, de même module et donc $|\psi_1|^2 = |\psi_2|^2$, représentent le même état physique.

$$\text{c) Ecrivons : } \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-iE_1^{\text{sym}} t/\hbar) (\varphi_1^{\text{sym}}(x) + \varphi_1^{\text{anti}}(x) \exp(-i(E_1^{\text{anti}} - E_1^{\text{sym}}) t/\hbar))$$

$$\text{soit } \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \exp(-iE_1^{\text{sym}} t/\hbar) \cdot (\varphi_1^{\text{sym}}(x) + \varphi_1^{\text{anti}}(x) \exp(-i\delta E t/\hbar))$$

Calculons son module au carré

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \cdot (|\psi_1^{\text{sym}}|^2 + |\psi_1^{\text{anti}}|^2 + 2 \cdot |\psi_1^{\text{sym}}| \cdot |\psi_1^{\text{anti}}| \cdot \cos(i\delta E t/\hbar))$$

La densité de probabilité de présence évolue périodiquement à la pulsation $\delta E/\hbar$ donc à la période $\tau = 2\pi \frac{\hbar}{\delta E}$ et à la fréquence $f = \frac{\delta E}{2\pi\hbar}$

A.N. $f = 2,3810^{10} \text{ Hz}$ qui correspond au domaine des micro-ondes ($\lambda = c/f = 1,25 \text{ cm}$)

d) A l'instant $t = \tau/2$ la molécule est passée dans le puits de droite, c'est l'état représenté à droite de la figure 13 $\psi(x, t = \tau/2) = \varphi_D(x)$: la molécule dont l'énergie est inférieure à la barrière de potentiel est passé d'un puits à l'autre par effet tunnel, ce qui lui serait interdit en mécanique classique.

e) L'expression de la fréquence serait d'après l'expression II.B.6)

$$f = \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2}{m \cdot l^2} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2 \cdot m \cdot V_o}} \cdot \exp \left(- \frac{2 \cdot x_o \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot V_o}}{\hbar} \right)$$

A V_o fixé, plus la largeur x_o est grande plus la fréquence diminue, elle diminue même de

façon exponentielle.

A x_0 fixé, plus la hauteur V_0 est grande plus la fréquence diminue. La fonction est plus compliquée, quoique que le terme en exponentielle l'emporte.

On peut calculer la nouvelle fréquence pour $x'_0=5.x_0$ et $V'_0=6.V_0$, il vient

$$\frac{f'}{f} = \frac{\sqrt{V_0}}{\sqrt{6.V_0}} \cdot \frac{\exp\left(-\frac{2.5.x_0.\sqrt{2.m.6.V_0}}{\hbar}\right)}{\exp\left(-\frac{2.x_0.\sqrt{2.m.V_0}}{\hbar}\right)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \exp\left(-\frac{2.x_0.\sqrt{2.m.V_0}}{\hbar}(5.\sqrt{6} - 1)\right)$$

Numériquement on trouve $f'/f=1,4.10^{-18}/2,45=5,7.10^{-19}$ soit $f'=1,38.10^{-8}\text{Hz}$ soit $T'=7.36.10^7\text{s}=2\text{ans et }4\text{mois}$! L'échelle de temps est devenue bien grande pour observer expérimentalement l'inversion de la molécule d'arsine.

III.C - Spectre d'absorption de la molécule d'ammoniac

III.C.1) L'équation de propagation résulte des équations de Maxwell :

$\text{div}\vec{B} = 0, \text{div}\vec{E} = 0$ (milieu localement neutre), $\overrightarrow{\text{rot}}\vec{E} = \frac{-\partial\vec{B}}{\partial t}$ et $\overrightarrow{\text{rot}}\vec{B} = \mu_0(\gamma\vec{E} + \epsilon_0\frac{\partial\vec{E}}{\partial t})$ dans un milieu de conductivité γ où $\vec{j} = \gamma\vec{E}$

on en déduit $\overrightarrow{\text{rot}}(\overrightarrow{\text{rot}}\vec{E}) = \frac{-\partial}{\partial t}(\mu_0(\gamma\vec{E} + \epsilon_0\frac{\partial\vec{E}}{\partial t})) = -\mu_0(\gamma\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} + \epsilon_0\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2}) = -\vec{\Delta}\vec{E}$ d'où l'équation de propagation : $\vec{\Delta}\vec{E} = \mu_0(\gamma\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} + \epsilon_0\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2})$ dont on déduit pour une onde plane $\vec{E}(x, t) = E_0\vec{e}_y \exp(i(\omega t - kx))$ l'équation de dispersion : $k^2 = -\mu_0(\gamma i\omega - \epsilon_0\omega^2)$

III.C.2) a) d'après la relation ci dessus, avec $k = k_r - ik_i$ en identifiant la partie imaginaire de l'équation $k_i k_r = \mu_0 \gamma \omega > 0$: k_i et k_r sont de même signe. On veut $k_r > 0$ pour que l'onde se propage dans le sens des x croissants, donc $k_i > 0$: l'onde est donc atténuée à mesure qu'elle se propage (terme en $\exp(-k_i x)$ dans E : absorption due à la conductivité du milieu)

b) $I = \int \int \langle \vec{\pi} \rangle dS$ avec $\vec{\pi} = \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{\mu_0}$ et $\langle \vec{\pi} \rangle$ = moyenne temporelle.

On calcule \vec{B} à partir de l'équation de Maxwell Faraday $\overrightarrow{\text{rot}}\vec{E} = \frac{-\partial\vec{B}}{\partial t}$ avec $\vec{E}(x, t) = E_0\vec{e}_y \exp(i(\omega t - kx))$ et $\vec{B}(x, t) = \vec{B}_0 \exp(i(\omega t - kx))$: $-ikE_0\vec{e}_z = -i\omega\vec{B}_0$ $\vec{B}(x, t) = \frac{k}{\omega} E_0 \exp(i(\omega t - kx))\vec{e}_z$.

On repasse en notation réelle pour calculer $\vec{\pi}$ $\vec{\pi} = \frac{1}{\omega} E_0^2 \exp(-2k_i x) (k_r \cos^2(\omega t - k_r x) + k_i \cos(\omega t - k_r x) \sin(\omega t - k_r x)) \vec{e}_x$ donc $\langle \vec{\pi} \rangle = \frac{k_r}{2\omega} E_0^2 \exp(-2k_i x) \vec{u}_x = \vec{\pi}_0 \exp(-2k_i x)$ et $I(x) = I_0 \exp(-2k_i x)$ avec $I_0 = \int \int \vec{\pi}_0 dS$ d'où $I(L) = I_0 \exp(-\alpha L)$ avec $\alpha = 2k_i L$

III.C.3) Remarque : il ne s'agit plus de la transition « parapluie » étudiée dans la partie III B mais les notations n'ont pas changé, en particulier pour v_0 ...

a) La longueur d'onde associée à cette transition est donnée par $\lambda_o = \frac{c}{\nu_o} = 10,36\mu m$ transition dans l'infrarouge.

L'énergie du photon associé est $E_\gamma = h\nu_o = 0,16eV$

b) L'énergie du niveau excité est définie à δE près, donc celle du photon permettant la transition du fondamental vers le niveau excité sera définie de la même façon, d'où une largeur spectrale $\delta\nu = \frac{\delta E}{h} = 4,8MHz$ pour la raie d'absorption.

III.C.4) Effet Doppler Fizeau

a) $\phi = 2\pi\nu(t - x/c)$ pour une onde se propageant dans le sens des x croissants (à une constante additive près). **Note : la fréquence de l'onde est ν plutôt que de ν_o ?**

b) Dans le cas de la mécanique newtonienne $x' = O'M = O'O + O\vec{M} = -v_x t + x$

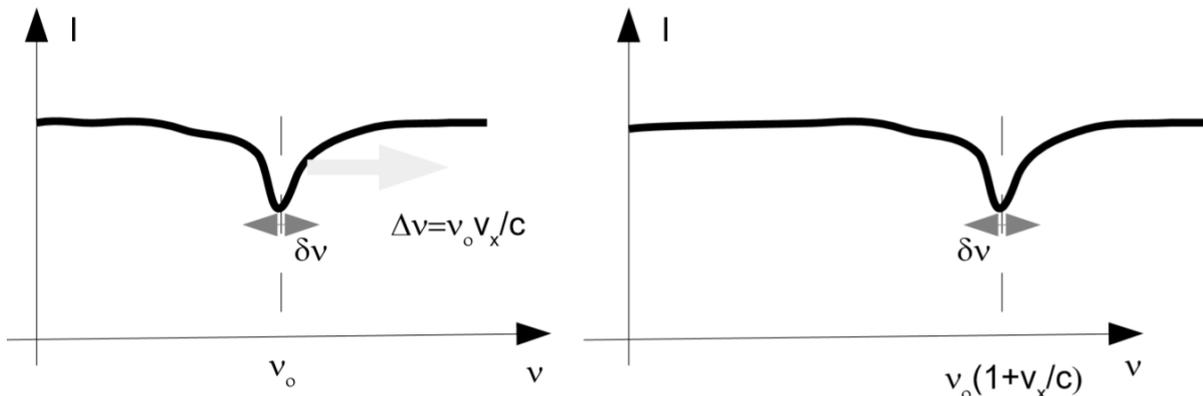
En considérant que la phase a la même expression et la même valeur dans les deux référentiels on doit avoir

$\phi' = 2\pi\nu'(t - x'/c) = 2\pi\nu'(t - (x - v_x t)/c) = 2\pi\nu(t - x/c)$ en identifiant les termes en t on obtient $\nu'(1 + v_x/c) = \nu$ avec $v_x \ll c$ un développement limité d'ordre 1 donne $\nu' \approx \nu(1 - v_x/c)$

PB : les termes en x ne peuvent pas être identifiés en même temps que ceux en t...

on en déduit $v_x \approx c(1 - \frac{\nu'}{\nu})v_x \approx c \frac{\nu - \nu'}{\nu'}$ au premier ordre n v_x/c

c) Le spectre va être décalé de $\nu v_x/c \approx \nu_o v_x/c$:



III.C.5) Pour qu'une molécule absorbe le rayonnement à ν il faut que sa vitesse lui permette de le voir à ν_o donc que $v_x \approx c \frac{\nu - \nu_o}{\nu_o}$ donc d'après la statistique de Boltzmann $dP(\nu, \nu_o) =$

$$K_o \frac{c}{\nu_o} \exp\left(\frac{-m_a c^2 (\nu - \nu_o)^2}{2\nu_o^2 k_B T}\right) \delta\nu$$

Le nombre de molécules pouvant absorber une partie de l'intensité du faisceau est $\delta n = n_o dP$

III.C.6) a) Ainsi l'agitation thermique élargit la raie naturelle par effet Doppler

b) La largeur liée à l'effet Doppler est donnée par la relation trouvée en III.C.5) $\Delta\nu = \nu_o \sqrt{\frac{k_B T}{m_a c^2}}$

c) à $T=273,16K$ la valeur numérique de $\Delta\nu$ est $\Delta\nu = 1,210^{-6}\nu_o = 35,2MHz > \delta\nu$ mais pas très grande devant $\delta\nu$. Compte tenu de la précision attendue on ne pourra pas négliger $\delta\nu$