

**ÉPREUVE DE PHYSIQUE
DU SECOND SEMESTRE**

MP2 – T2

03 Mai 2018

Durée : 4h

PROBLÈME 1 : CONFORMATIONS DE LA MOLÉCULE D'AMMONIAC (DS)

La molécule d'ammoniac $^{14}\text{NH}_3$ adopte la géométrie pyramidale trigonale dont l'atome d'azote occupe un sommet. Si l'on fixe comme référence le plan formé par les trois atomes d'hydrogène, la molécule peut se trouver dans deux conformations symétriques correspondant à deux positions symétriques de l'atome d'azote (figure 1). On note "conformation D" celle pour laquelle l'atome d'azote se trouve à droite du plan de référence, "conformation G" celle pour laquelle l'atome d'azote se trouve à gauche de ce plan. On appelle inversion de la molécule d'ammoniac le passage d'une conformation à l'autre.

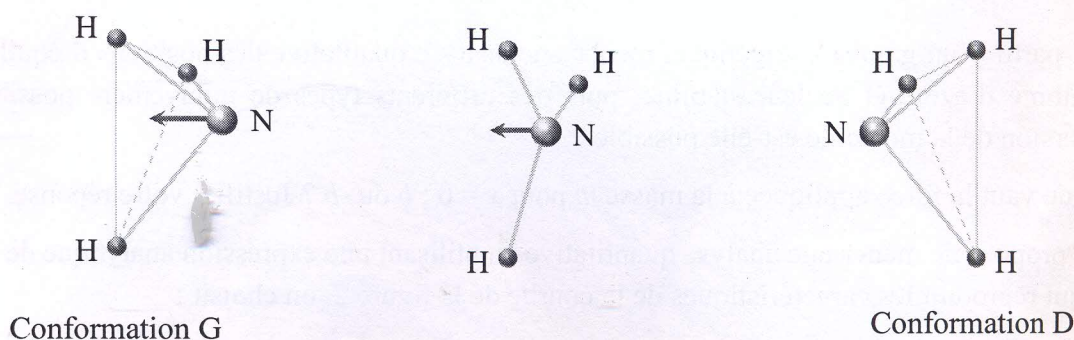


Figure 1 : inversion de la molécule d'ammoniac

Dans un modèle simple de ces conformations de la molécule, on repère la position de l'atome d'azote par son abscisse x par rapport au plan Oyz formé par les trois atomes d'hydrogène (figure 2) ; l'atome d'azote est alors assimilé à une masse m qui est soumise à une force conservative dont l'énergie potentielle $V(x)$ a la forme donnée en figure 2. On prendra $m = 2,5m_H$.

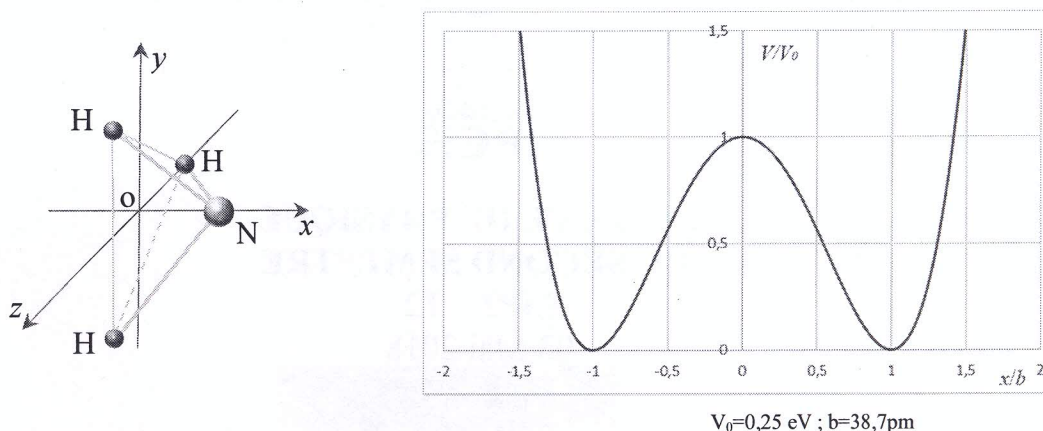


Figure 2 : géométrie et énergie potentielle de la molécule d'ammoniac

On examine dans une première partie le mouvement de la masse m en mécanique classique pour mettre en évidence la nécessité d'un traitement quantique, qui fait l'objet de la deuxième partie

Données numériques

Charge élémentaire : $e = 1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$

Constante de Planck : $h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

Constante de Boltzmann : $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$

Masse de l'atome d'hydrogène : $m_H = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$

Définition de l'électron-Volt : $1 \text{ eV} = 1,60 \times 10^{-19} \text{ J}$

Partie I : Analyse du mouvement en mécanique classique

I.1. À partir d'un graphe énergétique, mener une analyse qualitative des positions d'équilibre de l'atome d'azote et de leur stabilité, puis des différents types de mouvement possibles. L'inversion de la molécule est-elle possible ?

I.2. Que vaut la force appliquée à la masse m pour $x = 0$; b ou $-b$? Justifier votre réponse.

On se propose de mener une analyse quantitative en utilisant une expression analytique de $V(x)$ qui reproduit les caractéristiques de la courbe de la figure 2; on choisit :

$$V(x) = V_0 \left(\frac{x^2}{b^2} - 1 \right)^2$$

I.3. Vérifier que l'expression ci-dessus rend bien compte des caractéristiques principales de la courbe de la figure 2.

I.4. Calculer la force exercée sur l'atome d'azote.

I.5. On examine le mouvement de la masse m au voisinage de sa position d'équilibre stable d'abscisse x_e positive.

a. Que vaut x_e ?

b. On note $\xi(t) = x(t) - x_e$, avec $|\xi| \ll x_e$ et $t = 0$ un instant tel que $\xi(0) = \xi_0$ et $\dot{\xi}(0) = 0$. En appliquant le principe fondamental de la dynamique, montrer que $\xi(t)$ obéit à l'équation différentielle :

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \frac{8V_0}{mb^2}\xi = 0$$

En déduire que $\xi(t)$ est une fonction périodique dont on déterminera la période T_1 , littéralement et numériquement.

c. Déterminer $p_x(t)$, composante selon Ox de la quantité de mouvement de la masse m .

I.6. On note par ξ_m et p_{xm} les amplitudes respectives de $\xi(t)$ et $p_x(t)$. Déterminer, pour $\xi_0 = 0,1b$, l'ordre de grandeur (littéral et numérique) du produit des amplitudes $A = \xi_m P_{xm}$. Quelle est la dimension de A ? À quelle valeur doit-on la comparer pour juger si l'approche classique est pertinente ? Conclure.

I.7. On considère la molécule dans un état d'énergie minimale. Quelle énergie faut-il lui fournir pour obtenir l'inversion ? À partir de quelle température est-il possible de fournir cette énergie grâce à l'agitation thermique ?

Partie II. Étude quantique de l'inversion

On examine maintenant du point de vue quantique la possibilité de l'inversion de la molécule d'ammoniac, indépendamment de l'agitation thermique. On note $\psi(x, t)$ la fonction d'onde décrivant le mouvement de l'atome d'azote par rapport au plan de référence Oyz contenant les trois atomes d'hydrogène ; elle vérifie l'équation de Schrödinger :

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

II.1. On s'intéresse aux états stationnaires d'énergie E et on pose $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$.

Montrer que $\varphi(x)$ satisfait l'équation suivante :

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

Dans un premier temps, on simplifie le modèle du système en considérant, à la place de $V(x)$, un potentiel $V_I(x)$ à double puits infini symétrique rectangulaire (figure 3).

II.2. Les fonctions d'onde des états localisés dans le puits A (respectivement B) sont notées $\psi_A(x, t)$ (respectivement $\psi_B(x, t)$) ; les fonctions $\varphi(x)$ associées sont notées respectivement $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$.

a. Qu'appelle-t-on "état localisé dans un domaine" ?

b. Indiquer pourquoi les fonctions d'onde sont nulles pour $|x| < x_0$ et $|x| > x_0 + \ell$.

c. Quelles sont les conditions aux limites de $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$?

d. Donner, en les justifiant, sous forme intégrale, les conditions de normalisation portant sur $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$.

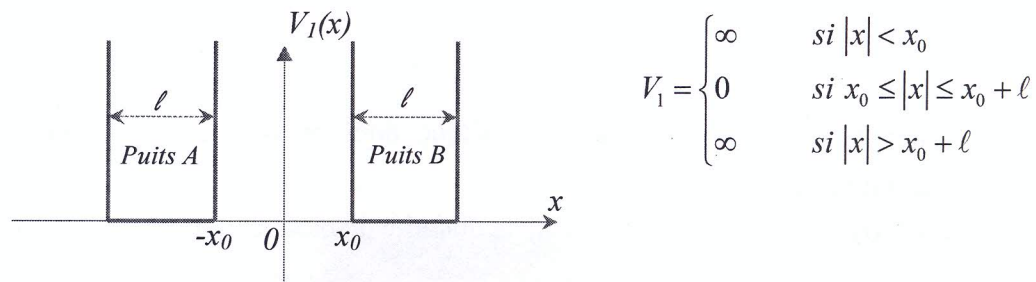


Figure 3 : Potentiel en double puits infini symétrique rectangulaire

II.3.a. Résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps 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 $E_{A,n}$ associées.

b. Donner sans calcul les solutions $\varphi_{B,n}(x)$ et les énergies $E_{B,n}$ associées.

c. Comparer les énergies des états localisés dans les deux puits.

d. Soit une molécule d'ammoniac dans l'état décrit par $\psi_{A,n}(x, t)$ d'énergie $E_{A,n}$ 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 maintenant le profil d'énergie potentielle par un double puits infini rectangulaire

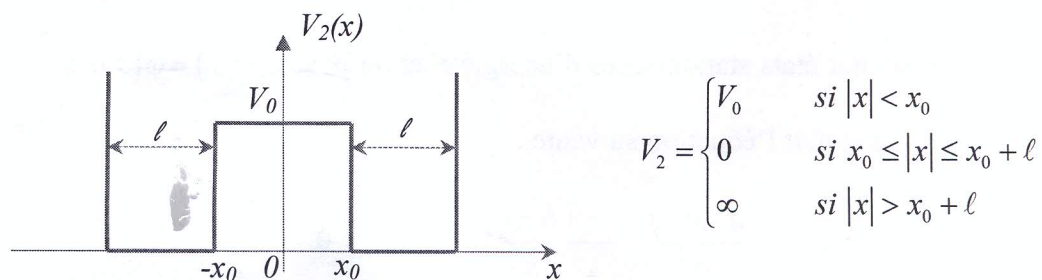


Figure 4 : Potentiel en double puits à saut fini

à saut fini, $V_2(x)$ (figure 4). On donne $V_0 = 0,25 \text{ eV}$ et $x_0 = 10 \text{ pm}$. On considère $0 \leq E \leq V_0$.

II.4. Justifier que la fonction φ s'écrit dans le domaine $x_0 \leq x \leq x_0 + \ell$:

$$\varphi_B(x) = B \sin(k(x - x_0 - \ell)) \text{ avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

II.5. Dans le domaine $-x_0 < x < x_0$, la fonction φ s'écrit sous la forme :

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

où C_1 , C_2 et K sont des constantes. Exprimer K en fonction de E , V_0 , m et \hbar .

II.6. Écrire, en traduisant les propriétés de continuité, les équations qui permettent de rechercher les états symétriques (φ^{sym} étant une fonction paire). Dédire une équation qui aboutit à une quantification de l'énergie E .

II.7. Écrire de même les équations qui permettent de rechercher les états antisymétriques (φ^{asym} étant une fonction impaire). Dédire une équation qui aboutit à une quantification de l'énergie E .

II.8. La résolution des deux équations précédentes conduit à des valeurs discrètes de l'énergie pour les états symétriques et antisymétriques. La solution symétrique φ_1^{sym} d'énergie E_1^{sym} la plus basse et la solution antisymétrique φ_1^{asym} d'énergie E_1^{asym} la plus basse sont représentées en figure 5. Dans le cas où les énergies de ces deux états sont très petites devant V_0 , leur différence s'écrit :

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

Comparer les largeurs de confinement de la particule dans les états symétrique et antisymétrique et donner alors une explication du signe de δE .

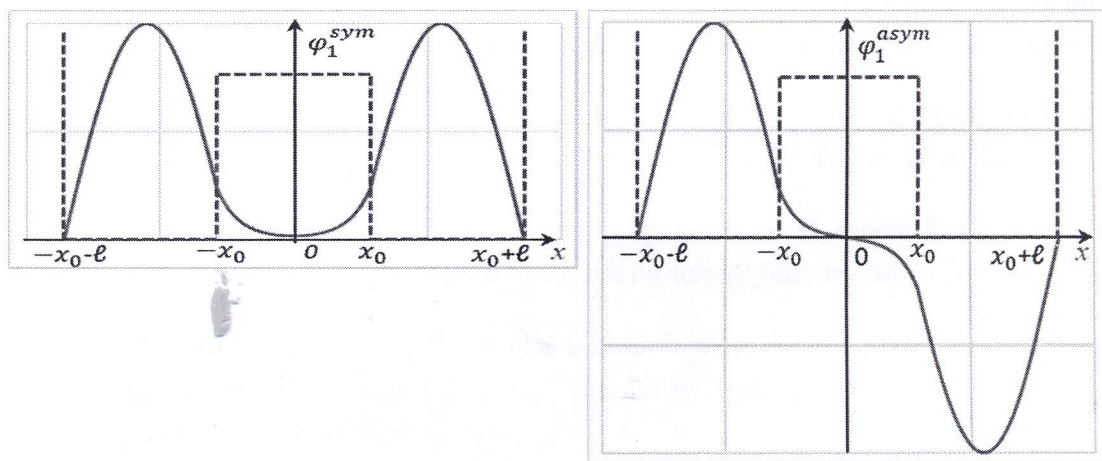


Figure 5 : solutions symétrique et antisymétrique de plus basses énergies

II.9. On suppose que la molécule d'ammoniac se trouve à l'instant $t = 0$ dans l'état :

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

- Quel est le rôle du facteur $1/\sqrt{2}$?
- Montrer que la molécule est alors dans la conformation G.
- Exprimer la fonction d'onde $\psi(x, t)$ à un instant quelconque.

- d. Déterminer la densité linéique de présence de la particule ; montrer qu'elle évolue de façon périodique et exprimer sa période T_0 en fonction de δE et \hbar .
- e. Décrire l'état de la particule pour $t = T_0/2$. En quoi ce changement d'état entre $t = 0$ et $t = T_0/2$ permet-il d'illustrer l'effet tunnel ?

II.10. C'est sur la transition entre les états représentés par $\varphi_1^{sym}(x)$ et $\varphi_1^{asym}(x)$ qu'a fonctionné le premier maser construit par C. Townes, J. Gordon et H. Ziegler en 1954. Calculer la fréquence f de l'onde électromagnétique produite pour $\delta E = 9,85 \times 10^{-5} \text{ eV}$. Quel est le domaine spectral de cette onde ?

PROBLÈME 2 : MÉTHODE PHOTO-THERMIQUE DE MESURE D'UNE TEMPÉRATURE (DC)

Le problème traite la mesure de la température d'un corps opaque. Dans certaines situations, la mesure d'une température à l'aide d'un thermomètre de contact est impossible (températures élevées, objets éloignés, ...). On peut alors mettre en œuvre des méthodes optiques comme le pyromètre optique ou la méthode photo-thermique que nous étudions dans ce problème.

La méthode photo-thermique de mesure de la température T_0 d'un corps solide opaque consiste à perturber localement le champ des températures $T(M, t)$ de ce corps par un apport d'énergie lumineuse variable $\varphi_{\lambda_0}(t) = \varphi_{\lambda_0} \cdot F(t)$. Cette énergie lumineuse est fournie par un faisceau laser cylindrique monochromatique de longueur d'onde λ_0 dans le vide et de section transversale ΔS . La variation temporelle $F(t)$ est obtenue à l'aide d'un hacheur optique.

Le champ des températures perturbé peut s'écrire en présence du flux laser modulé sous la forme: $T(M, t) = T_0 + \Delta T(M, t)$ avec $\Delta T \ll T_0$.

En présence du faisceau laser, le corps émet localement un rayonnement thermique de température $T(M, t)$ qui est analysé par un détecteur photométrique.

On considère le dispositif expérimental dont le schéma de principe est représenté en figure 6. L'échantillon (Σ) dont on veut mesurer la température T_0 est un solide opaque, cylindrique de section circulaire ΔS et d'épaisseur $e = 1 \text{ cm}$. La paroi latérale de l'échantillon est supposée parfaitement calorifugée par un corps athermane (matériau non conducteur de la chaleur). La face supérieure (FS) de l'échantillon est à l'air libre de température T_a .

L'air ainsi que tous les milieux traversés par les divers flux lumineux sont supposés parfaitement transparents. Tous les instruments de mesure sont supposés à la température constante T_a . On appelle h , supposé constant, le coefficient de transmission thermique de surface entre (FS) et l'air immobile à grande distance de (FS). La face inférieure (FI) de l'échantillon est en contact thermique parfait avec un thermostat de température constante T_0 .

Du fait de l'éclairage ambiant, le solide est soumis en permanence à un flux surfacique lumineux parasite noté φ_{pa} qui apporte au corps une très faible énergie thermique.

Les propriétés radiatives de (Σ) sont modélisées par celles du corps noir. On note c la chaleur massique du solide, λ , sa conductivité thermique et ρ sa masse volumique. Ces grandeurs seront supposées constantes.

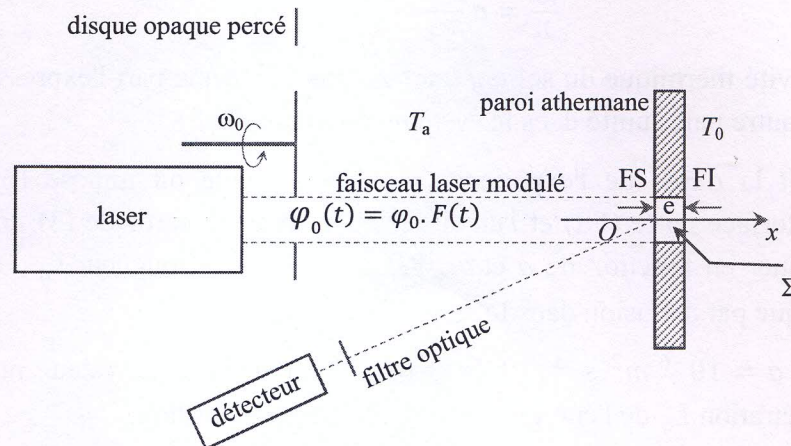


Figure 6 : Schéma de principe du dispositif expérimental.

Partie I. Étude de l'équilibre thermique initial

On considère tout d'abord la situation initiale où le solide n'est pas éclairé par le faisceau laser. Dans ces conditions le corps est en équilibre thermique à la température T_0 constante.

I.1. Rappeler la définition du corps noir.

I.2. Donner l'expression du flux surfacique total φ_e^{CN} émis par le corps noir de température thermodynamique T . Comment appelle-t-on cette loi ?

I.3. La température initiale T_0 du solide étant supposée uniforme, montrer à l'aide d'un bilan d'énergie détaillé que T_0 vérifie l'équation (1) :

$$\sigma(T_0^4 - T_a^4) + h(T_0 - T_a) - \varphi_{pa} = 0 \quad (1)$$

avec σ la constante de Stefan

I.4. Dédire de la faible valeur de φ_{pa} que la température T_0 du corps est très légèrement supérieure à la température ambiante T_a .

I.5. En utilisant le résultat de la question précédente, montrer que l'on peut linéariser l'équation (1) sous la forme :

$$h_e(T_0 - T_a) - \varphi_{pa} = 0 \quad (2)$$

avec h_e une constante dont on donnera l'expression en fonction de h , σ et T_a .

Partie II. Bilan d'énergie en régime variable

On considère le solide (Σ) de la figure 6. On suppose que sa température est variable et peut s'écrire sous la forme $T = T(x, t)$, du fait d'un apport d'énergie thermique surfacique variable, à l'interface entre (FS) et l'air libre, en $x = 0$.

II.1. Établir à partir d'un bilan détaillé d'énergie que l'équation vérifiée par la température T au sein de l'échantillon est donnée par :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3)$$

avec a la diffusivité thermique du solide, dont on donnera d'une part l'expression en fonction de ρ, λ et c et d'autre part l'unité dans le système international SI.

II.2. On note δt la durée de l'expérience pendant laquelle on impose l'apport d'énergie thermique à l'interface entre (FS) et l'air libre. En écrivant à partir de (3) une équation aux dimensions, donner en fonction de a et δt , l'expression de la longueur L_q de pénétration de l'énergie thermique par diffusion dans le solide.

II.3. On donne $a = 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, et $\delta t = 0,1 \text{ s}$. En déduire la valeur numérique de la longueur de pénétration L_q de l'énergie thermique dans l'échantillon.

II.4. En comparant la valeur numérique de L_q à l'épaisseur $e = 1 \text{ cm}$ de l'échantillon, montrer que l'on a $T(x \gg L_q, t) = T_0$ à chaque instant t de l'expérience.

Partie III. Effet d'un flux lumineux incident variable

On suppose maintenant que l'apport d'énergie thermique au niveau de la face supérieure (FS) de l'échantillon est dû au faisceau laser cylindrique qui illumine exactement la face (FS). Le faisceau laser est modulé dans le temps à l'aide d'un hacheur optique constitué d'un disque opaque percé de plusieurs orifices circulaires transparents de même section que le faisceau laser. Ce disque mis en rotation uniforme à vitesse angulaire constante intercepte périodiquement le faisceau (figure 1).

L'expression de la densité surfacique de puissance lumineuse transportée par le faisceau laser modulé est donnée par :

$$\varphi_0(t) = \varphi_0 \cdot F(t) \quad (4)$$

On suppose que l'intensité lumineuse du faisceau laser est uniforme sur sa section. Seule la contribution variable du flux étant détectée ultérieurement, on se limite à la pulsation fondamentale en écrivant la fonction modulante $F(t)$ sous la forme :

$$F(t) = \cos(\omega_0 t) \quad (5)$$

III.1. La puissance lumineuse du laser utilisé dans cette expérience est $P = 2 \text{ W}$ pour un rayon du faisceau laser qui vaut $r = 5 \text{ mm}$. En déduire l'expression et la valeur numérique de φ_0 . Commenter cette valeur.

III.2. Représenter graphiquement l'allure de $\varphi_0(t)$ en fonction du temps t .

Lors de son interaction avec l'échantillon (Σ), la lumière du laser est absorbée par l'échantillon selon une loi exponentielle. La densité surfacique de puissance lumineuse absorbée par la matière est alors donnée par :

$$\varphi_{\lambda_0}(x, t) = \varphi_0 \cdot F(t) \exp\left(-\frac{x}{L_{\lambda_0}}\right) \quad (6)$$

avec φ_0 et L_{λ_0} des constantes positives. On donne $L_{\lambda_0} = 10^{-7}$ m.

III.3. Quel est le sens physique de la constante L_{λ_0} ?

III.4. Comparer L_{λ_0} à l'épaisseur e de l'échantillon (Σ). En déduire une représentation graphique pertinente de la densité surfacique de puissance lumineuse $\varphi_{\lambda_0}(x, t)$ absorbée par (Σ) pour $x \in [0, e]$.

III.5. Déduire des questions précédentes que l'équation (3) est encore valable lorsque l'échantillon (Σ) est illuminé par le faisceau laser modulé.

Partie IV. Résolution et conditions aux limites

On cherche à résoudre l'équation (3) qui donne le champ des températures $T(x, t)$ au sein de (Σ) lorsque le solide est éclairé par le faisceau laser modulé. Le faible flux parasite φ_{pa} , la température ambiante T_a et la température T_0 du thermostat sont supposés avoir les mêmes valeurs que dans la situation statique.

On pose la température absolue complexe $\underline{T}(x, t)$ sous la forme :

$$\underline{T}(x, t) = \underline{\theta}(x) e^{i\omega_0 t} + T_0 \quad (7)$$

avec $\underline{\theta}(x)$ une fonction complexe de la position x uniquement et $T(x, t) = \text{R  el}(\underline{T}(x, t))$. On rappelle que $i^{1/2} = \frac{1+i}{\sqrt{2}}$ et que $e^{-i\frac{\pi}{4}} = \frac{1-i}{\sqrt{2}}$.

IV.1. D  duire des relations (3) et (7) l'  quation diff  rentielle v  rifi  e par la fonction $\underline{\theta}(x)$.

IV.2. En d  duire que la fonction $\underline{\theta}(x)$ est de la forme :

$$\underline{\theta}(x) = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$$

avec A et B deux constantes a priori complexes, dont on ne demande pas l'expression ici et α une constante complexe que l'on exprimera en fonction de ω_0 et de a .

IV.3. En remarquant que la temp  rature $T(x \gg L_q, t)$ de l'  chantillon est finie, simplifier l'expression de $\underline{\theta}(x)$.

IV.4. L'  cart entre la temp  rature absolue $T(x, t)$ et la temp  rature ambiante T_a   tant faible, montrer que la partie $\varphi_1^R = \sigma(T^4(0, t) - T_a^4)$ du flux radiatif surfacique de l'  chantillon peut se mettre sous la forme lin  aris  e :

$$\varphi_1^R = 4\sigma T_a^3(T(0, t) - T_a) \quad (8)$$

IV.5. Donner l'expression de chacun des courants volumiques d'  nergie thermique existant    l'interface $x = 0$ de l'  chantillon. On distinguera les termes correspondants aux flux conductif, conducto-convectif et radiatifs.

IV.6. En déduire une équation de continuité faisant intervenir $T(0, t)$, T_a , $\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=0}$, $\varphi_0(t)$ et φ_{Pa} .

IV.7. En utilisant les équations (2) et (8), montrer que la fonction $\underline{\theta}(x)$ obéit à l'équation de continuité :

$$-\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=0} = \varphi_0 - h_e \underline{\theta}(x=0) \quad (9)$$

IV.8. Déduire de l'équation (9) l'expression de la constante B en fonction de φ_0 , h_e , λ et α .

IV.9. Application numérique : Montrer par un calcul d'ordre de grandeur que $h_e \ll \lambda|\alpha|$ où $|\alpha|$ désigne le module de α . On donne : $a = 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $h = 20 \text{ W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$, $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{K}^{-4} \cdot \text{m}^{-2}$, $\lambda = 10 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $T_a = 300 \text{ K}$ et $f_0 = \frac{\omega_0}{2\pi} = 500 \text{ Hz}$.

En déduire finalement que B peut s'écrire sous la forme :

$$B = \frac{\varphi_0}{\lambda} \sqrt{\frac{a}{\omega_0}} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right)$$

IV.10. En déduire que l'expression de $\underline{\theta}(x, t) = \underline{\theta}(x) \exp(i\omega_0 t)$ peut se mettre sous la forme : $\underline{\theta}(x, t) = \frac{\varphi_0}{\lambda} \sqrt{\frac{a}{\omega_0}} \exp\left(-\sqrt{\frac{\omega_0}{2a}} x\right) \exp\left(i\omega_0 t - \sqrt{\frac{\omega_0}{2a}} x - \frac{\pi}{4}\right)$

IV.11. Donner finalement l'expression du champ des températures $T(x, t)$ dans le solide (Σ). Discuter le sens physique de chacun des termes qui apparaissent dans l'expression de $T(x, t)$. Vérifier qu'en absence de faisceau laser on retrouve la situation statique.