

(I) Inversion de la molécule d'ammoniac

1. La courbe de potentiel est symétrique par rapport au point d'abscisse $x = 0$, correspondant au plan formé par les trois atomes d'hydrogène. Ces atomes sont à l'origine de la barrière de potentiel (de hauteur V_0) en $x = 0$.

De part et d'autre de la barrière, la courbe présente 2 minima (en $x = -l$ et en $x = l$) qui correspondent aux 2 positions d'équilibre de l'atome d'azote de la molécule (respectivement, conformations gauche et droite).

Le potentiel tend vers l'infini lorsque $|x| \rightarrow +\infty$, traduisant la liaison de l'atome d'azote aux atomes d'hydrogène.

2. À $T = 300 \text{ K}$, on a $k_B T = 4.14 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 2.6 \cdot 10^{-2} \text{ eV} < V_0$.

La molécule d'ammoniac ne peut donc pas s'inverser sous l'effet de l'agitation thermique à température ambiante.

$k_B T_{\text{inv}} = V_0 \text{ e} \Rightarrow T_{\text{inv}} = V_0 \text{ e} / k_B = 2900 \text{ K}$. Il faudrait chauffer la molécule d'ammoniac à $T_{\text{inv}} = 2900 \text{ K}$ pour qu'elle puisse s'inverser thermiquement.

À température ambiante, l'inversion est donc due aux effets d'origine quantique.

3. Si la longueur d'onde de de Broglie $\lambda = h / p$ associée à un système est comparable à sa taille caractéristique (ou inférieure), alors ce système doit être étudié du point de vue de la mécanique quantique.

Ici, on a $\lambda_N = h / p_N = h / m_N v_N$, où v_N est la vitesse de l'atome d'azote.

L'énergie de cet atome étant purement d'origine cinétique, on a $E_N = \frac{1}{2} m_N v_N^2 \Rightarrow v_N = \sqrt{2E_N / m_N}$, d'où $\lambda_N = h / \sqrt{2E_N m_N}$ soit $\lambda_N \approx 4.9 \cdot 10^{-11} \text{ m} \sim d$.

λ_N et d étant comparables, on doit traiter l'atome d'azote quantiquement, ce qui est cohérent avec la question précédente.

4. La probabilité de trouver la particule entre les positions x et $x + dx$ à l'instant t est $|\psi(x, t)|^2 dx$.

Cette probabilité devant sommer à 1 sur tout l'espace (ici, $\mathbb{R}$), on a $\int_{\mathbb{R}} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$.

Cette condition portant sur le module au carré de ψ , les fonctions

$\mathcal{E}$ ψ et $\psi' = \psi e^{i\varphi}$ possèdent la même distribution de probabilité :
 $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ et $|\psi'|^2 = \psi'\psi'^* = \psi e^{i\varphi} \psi^* e^{-i\varphi} = \psi\psi^* = |\psi|^2$.
 La fonction ψ est alors déterminée à une phase φ près : ce n'est pas un problème car en mécanique quantique, la phase d'une fonction d'onde n'a pas de signification physique, et ψ' représente le même état physique que ψ .

5. En injectant l'expression $\psi(x,t) = \varphi(x)\chi(t)$ dans l'équation de Schrödinger (1), on obtient :

$$i\hbar \varphi \dot{\chi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \chi \varphi'' + V \varphi \chi$$

Les fonctions φ et χ n'étant a priori pas identiquement nulles on peut alors écrire :

$$i\hbar \dot{\chi} / \chi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\varphi''}{\varphi} + V$$

Dans cette équation, le membre de gauche est fonction de t seulement alors que celui de droite est fonction de x seulement. Chacun des deux membres est donc constant, et on peut en particulier écrire

$$i\hbar \frac{1}{\chi} \dot{\chi} = \mathcal{E},$$

où $\mathcal{E}$ est une constante de dimension $[\hbar/t] = [E][T]/[T] = [E]$.

$\mathcal{E}$ est donc une énergie, exprimée en J (ou en eV).

En considérant $\chi(t) = \exp(-i\omega t)$, on obtient :

$$i\hbar \frac{1}{\chi} \dot{\chi} = i\hbar \exp(i\omega t) (-i\omega) \exp(-i\omega t) = \hbar\omega$$

$\hbar\omega$ étant bien une constante, la fonction $\chi(t) = \exp(-i\omega t)$ convient pour la partie temporelle, et on a alors $\mathcal{E} = \hbar\omega$.

N.B. : la fonction χ n'étant a priori pas normalisée, il faut bien que la condition de normalisation portée sur φ pour que χ convienne.

6. On dit qu'une fonction d'onde est localisée sur un domaine lorsque celle-ci est nulle en dehors de ce domaine.

Le potentiel étant infini en dehors des puits, la particule a une probabilité nulle de s'y trouver, et l'on doit donc considérer les fonctions identiquement nulles sur ces domaines.

Par continuité de la fonction ψ (imposée par les puits infinis), on a

$$\psi_a(-x_0) = \psi_a(-x_0 - \ell) = 0 \text{ et } \psi_b(x_0) = \psi_b(x_0 + \ell) = 0.$$

7. Dans le puits A, on a $\psi_a(x,t) = \varphi_a(x) \exp(-i\omega_a t)$. En injectant cette expression dans (1), on obtient :

$$\mathcal{E}_a \varphi_a = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_a''$$

où $\mathcal{E}_a = \hbar\omega_a$, et en se souvenant que $V=0$ dans le puits A.

3. On a donc une équation de la forme : $\varphi''_A + k^2 \varphi_A = 0$, avec $k = \frac{\sqrt{2mE_A}}{\hbar}$.

On reconnaît l'équation de l'oscillateur harmonique, dont les solutions sont de la forme :

$$\varphi_A(x) = A' \cos(kx) + B' \sin(kx), \text{ puisque } k^2 > 0.$$

Pour faciliter les calculs, et étant donnée la position du puits, on écrit :

$$\varphi_A(x) = A' \cos(k(x+x_0)) + B' \sin(k(x+x_0)).$$

La condition $\varphi_A(-x_0) = 0$ impose $A' = 0$. On a alors :

$$\varphi_A(x) = B' \sin(k(x+x_0)),$$

et la condition $\varphi_A(-x_0 - l) = 0$ impose $B' \sin(-kl) = 0$.

Comme $B' \neq 0$ (φ_A est non-identiquement nulle), on a :

$$\sin(-kl) = -\sin(kl) = 0 \Rightarrow kl = 0 [\pi].$$

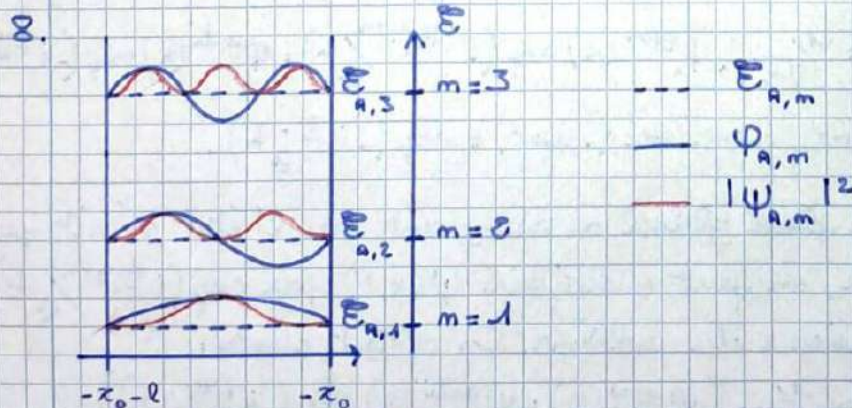
On a donc $k_m l = m\pi$ ($m \in \mathbb{N}^*$), soit $2mE_{A,m}/\hbar^2 l^2 = m^2 \pi^2$.

Finalement, $\varphi_{A,m}(x) = B' \sin(k_m(x+x_0))$, avec $k_m = \sqrt{2mE_{A,m}}/\hbar$

$$\text{et } E_{A,m} = m^2 \hbar^2 \pi^2 / 2m l^2 \quad (m \in \mathbb{N}^*).$$

On observe que la plus faible énergie possible pour l'atome d'azote ($E_{A,1} = \hbar^2 \pi^2 / 2m l^2$) est non-nulle. Cela est dû au principe d'indétermination de Heisenberg, $\Delta x \Delta p \gg \hbar/2$: puisque l'atome d'azote est confiné dans le puits de potentiel, alors sa quantité de mouvement est nécessairement non-nulle, ce qui se traduit par une énergie minimale non-nulle également ($E = p^2/2m$).

D'ailleurs, plus la particule est confinée (plus l est faible), plus cette énergie minimale augmente ($E_A \propto 1/l^2$).



9. Si la molécule d'ammoniac est décrite par $\psi_{A,n}(x,t) = \varphi_{A,n}(x) e^{-i\omega_{A,n}t}$ à l'instant t , alors son état est connu pour tout $t' > t$ (état stationnaire). L'atome d'azote reste alors confiné dans le puits A pour tout $t' > t$ puisque $\varphi_{A,n}$ est localisée en A.

La probabilité d'observer l'atome d'azote dans le puits B à $t' > t$ est donc nulle : les états $\psi_{A,n}$ et $\psi_{B,m}$ considérés séparément ne permettent pas de décrire les oscillations de la molécule d'ammoniac.

4 10. Dans le puits B, l'équation de Schrödinger s'écrit $\varphi_B'' + K^2 \varphi_B = 0$ comme précédemment (avec $K = \sqrt{2m(E)/\hbar}$).

De plus, on a toujours $\varphi_B(x_0 + l) = 0$ puisque la barrière de potentiel est infinie en $x = x_0 + l$.

La fonction $\varphi_B(x) = B \sin(K(x - x_0 - l))$ satisfait l'équation de Schrödinger pour $x \in [x_0, x_0 + l]$ et respecte la condition $\varphi_B(x_0 + l) = 0$ donc elle convient en tant que solution dans le puits B.

De la même manière, on a $\varphi_B(x) = B' \sin(K(x + x_0 + l))$ pour $x \in [-x_0, -x_0 - l]$.

11. Pour $-x_0 < x < x_0$, le potentiel est maintenant fini, et les fonctions spatiales φ_c dans ce domaine sont a priori non nulles. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$E \varphi_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_c'' + V_0 \varphi_c \quad \text{soit} \quad \varphi_c'' + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \varphi_c = 0$$

En posant $K^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$, on obtient $\varphi_c'' - K^2 \varphi_c = 0$.

Contrairement au cas précédent, on a ici $V_0 \neq 0$ et $E < V_0$, soit $K > 0$. Les solutions de l'équation sont donc de la forme :

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

avec $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

12. Le potentiel en $x = x_0$ étant maintenant borné, la fonction φ ainsi que sa dérivée première doivent être continues en $x = x_0$. On a donc :

$$\varphi_c(x_0^-) = \varphi_B(x_0^+) \quad \text{et} \quad \varphi_c'(x_0^-) = \varphi_B'(x_0^+).$$

13. Si $\psi(x, 0) = \varphi_B(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1^{\text{sym}}(x) + \varphi_1^{\text{anti}}(x))$, alors on a :

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

puisque $E = \hbar \omega$, donc $\exp(-i \omega t) = \exp(-i \frac{E}{\hbar} t)$.

14. Un décalage de phase global ne changeant pas l'état décrit par une fonction d'onde, on peut multiplier $\psi(x, t)$ par $\exp(i \frac{E_1^{\text{sym}}}{\hbar} t)$ sans affecter la physique du problème. On obtient alors :

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

où $\delta E = E_1^{\text{anti}} - E_1^{\text{sym}}$.

On observe alors que ψ oscille périodiquement entre les fonctions φ_B et φ_c décrivant respectivement les conformations gauche et droite de NH_3 , avec une période $\tau = \frac{2\pi\hbar}{\delta E}$. Si $\delta E = 9.85 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$, $\tau = \frac{1}{\nu} = 2.4 \cdot 10^{10} \text{ Hz}$.

15. Pour $t = \tau/2$, l'atome d'azote est localisé dans le puits B (conf. droite). L'atome d'azote traverse la barrière de potentiel : c'est l'effet tunnel.

5 II) Spectroscopie de Fourier et doublet du sodium

1. Pour une source monochromatique ponctuelle, la figure d'interférences obtenue est une succession d'anneaux concentriques, alternativement sombres et clairs.

Cette géométrie s'explique par la symétrie circulaire du dispositif. En effet, une différence de marche constante correspond à un angle d'inclinaison entre les rayons incidents et l'écran de visualisation constant, ce qui explique la forme de la figure d'interférences.

2. La différence de marche correspond ici à la distance supplémentaire parcourue par le faisceau se réfléchissant sur le miroir M_2 par rapport à celui se réfléchissant sur le miroir M_1 . On a donc $\delta = 2e$. Ces faisceaux se propageant à la vitesse de la lumière dans le vide c , on a alors une différence de temps de marche $\tau = 2e/c$.

3. Calculons dans un premier temps $I_0 = E_0 c \langle E_0(t)^2 \rangle_T$.

$$I_0 = E_0 c \langle A^2 \cos^2(2\pi\nu_0 t) \rangle_T = E_0 c A^2 / 2, \text{ car } \langle \cos^2(\pi) \rangle_T = 1/2.$$

Ensuite, le champ E_D en sortie de l'interféromètre est une superposition équilibrée du champ E_0 incident et de ce même champ temporellement décalé de τ : $E_D(t) = A/2 (\cos(2\pi\nu_0 t) + \cos(2\pi\nu_0(t+\tau)))$.

On a donc: $I_D = E_0 c \langle E_D(t)^2 \rangle_T$. Puis, la moyenne étant linéaire:

$$\begin{aligned} I_D &= E_0 c A^2 / 4 (\langle \cos^2(2\pi\nu_0 t) \rangle_T + \langle \cos^2(2\pi\nu_0(t+\tau)) \rangle_T \\ &\quad + 2 \langle \cos(2\pi\nu_0 t) \cos(2\pi\nu_0(t+\tau)) \rangle_T) \\ &= I_0 / 2 (1/2 + 1/2 + 2 (1/2 \langle \cos(2\pi\nu_0(2t+\tau)) \rangle_T + \langle \cos(2\pi\nu_0 \tau) \rangle_T)) \end{aligned}$$

Ici, le premier terme en cosinus étant de fréquence $2\nu_0$ non-nulle, sa moyenne est nulle. Le second terme est quant à lui constant, donc égal à sa moyenne. Finalement, on a:

$$I_D = I_0 / 2 (1 + \cos(2\pi\nu_0 \tau)).$$

4. On considère maintenant $E_0(t) = \int_{\mathbb{R}} A(\nu) \cos(2\pi\nu t) d\nu$. Pour les mêmes raisons que précédemment, on a:

$$E_D(t) = \int_{\mathbb{R}} A(\nu) / 2 (\cos(2\pi\nu t) + \cos(2\pi\nu(t+\tau))) d\nu$$

Par le même calcul qu'à la question précédente:

$$\begin{aligned} I_D &= \int_{\mathbb{R}} E_0 c A(\nu)^2 / 4 (\langle \cos^2(2\pi\nu t) \rangle_T + \langle \cos^2(2\pi\nu(t+\tau)) \rangle_T \\ &\quad + 2 \langle \cos(2\pi\nu t) \cos(2\pi\nu(t+\tau)) \rangle_T) d\nu \\ &= \int_{\mathbb{R}} E_0 c A(\nu) / 4 (1 + \underbrace{\langle \cos(2\pi\nu(2t+\tau)) \rangle_T}_{=0} + \langle \cos(2\pi\nu \tau) \rangle_T) d\nu \end{aligned}$$

6

Par conséquent, on a donc :

$$I_D = \frac{E_0 c}{4} \int_{\mathbb{R}} D(\nu) (1 + \cos(2\pi\nu\tau)) d\nu$$

5. En exprimant le cosinus sous sa forme exponentielle complexe (formule d'Euler), on obtient :

$$\begin{aligned} I_D &= \frac{E_0 c}{4} \int_{\mathbb{R}} D(\nu) \left(1 + \frac{1}{2} (\exp(2i\pi\nu\tau) + \exp(-2i\pi\nu\tau)) \right) d\nu \\ &= \frac{E_0 c}{4} \left(\int_{\mathbb{R}} D(\nu) d\nu + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} D(\nu) \exp(2i\pi\nu\tau) d\nu \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} D(\nu) \exp(-2i\pi\nu\tau) d\nu \right) \end{aligned}$$

En utilisant la normalisation de D et en posant $\nu' = -\nu$ dans la seconde intégrale, on obtient :

$$\begin{aligned} I_D &= \frac{E_0 c}{4} A^2 + \frac{E_0 c}{4} \left(\frac{1}{2} \left(\int_{\mathbb{R}} D(\nu) e^{2i\pi\nu\tau} d\nu + \int_{\mathbb{R}} D(-\nu') e^{2i\pi\nu'\tau} d\nu' \right) \right) \\ &= \frac{I_0}{2} + \frac{E_0 c}{4} \left(\frac{1}{2} (\tilde{D}(\tau) + \tilde{D}(-\tau)) \right) \end{aligned}$$

On a donc finalement : $I_D = \frac{I_0}{2} + \frac{E_0 c}{4} \tilde{D}'(\tau)$, où $\tilde{D}'(\tau)$ est la transformée de Fourier de $D'(\nu) = \frac{1}{2} (D(\nu) + D(-\nu))$.

6. La mesure de l'interférogramme pour une valeur de τ (donc de $e = c\tau/2$) permet donc d'accéder à $\tilde{D}'(\tau)$.

À partir de $\tilde{D}'(\tau)$, il est alors facile de remonter à $D'(\nu)$ puis à $D(\nu)$ par simple transformée de Fourier inverse.

Cette méthode est puissante car elle permet de déterminer l'intégralité du spectre d'une source radiative. Néanmoins, elle requiert de mesurer l'intensité en sortie pour de nombreuses valeurs de e (donc de τ ou δ) si l'on veut obtenir des résultats précis.

7. Le brouillage périodique est ici causé par la superposition des deux ondes de longueurs d'onde λ_1 et λ_2 très proches en sortie de l'interféromètre.

Ces oscillations dues à un très faible décalage fréquentiel entre 2 ondes que l'on superpose est appelé phénomène de battement.

8. On remarque sur l'interférogramme que le brouillage des interférences est total (les noeuds de l'enveloppe n'ont pas de "largeur"). Le brouillage ayant lieu lorsque l'intensité max. d'un système d'interférences coïncide avec le minimum du second, on a alors nécessairement $\max I(\lambda_1) + \min I(\lambda_2) = \min I(\lambda_1) + \max I(\lambda_2)$ (= et non $\approx$), soit $I_1 + 0 = 0 + I_2$: $I_1 = I_2$.

9. L'hypothèse $\Delta\lambda \ll \lambda$, signifie $\lambda_2 - \lambda_1 \ll \lambda_1$, soit $\lambda_1 \approx \lambda_2$.

7

Le résultat de la question précédente nous permet d'écrire :

$$E_o(t) = A (\cos(2\pi\nu_1 t) + \cos(2\pi\nu_2 t)) \quad , \quad \nu_\alpha = c/\lambda_\alpha$$

On a alors en sortie de l'interféromètre :

$$E_D(t) = A/2 (\cos(2\pi\nu_1 t) + \cos(2\pi\nu_1(t+\tau)) + \cos(2\pi\nu_2 t) + \cos(2\pi\nu_2(t+\tau)))$$

En ne conservant que les termes de fréquence nulle (donc de moyenne non-nulle), on obtient :

$$\begin{aligned} I_D &= E_o c \langle E_D(t)^2 \rangle_T \\ &= E_o c A^2/4 (\langle \cos(2\pi\nu_1 t)^2 \rangle_T + \langle \cos(2\pi\nu_1(t+\tau))^2 \rangle_T + \langle \cos(2\pi\nu_2 t)^2 \rangle_T \\ &\quad + \langle \cos(2\pi\nu_2(t+\tau))^2 \rangle_T + 2 \langle \cos(2\pi\nu_1 t) \cos(2\pi\nu_1(t+\tau)) \rangle_T \\ &\quad + 2 \langle \cos(2\pi\nu_2 t) \cos(2\pi\nu_2(t+\tau)) \rangle_T) \\ &= E_o c A^2/4 (4 \times 1/2 + \cos(2\pi\nu_1 \tau) + \cos(2\pi\nu_2 \tau)) \\ &= I_o/2 (1 + \cos(\pi(\nu_1 + \nu_2)\tau) \cos(\pi(\nu_1 - \nu_2)\tau)) \\ &= I_o/2 (1 + \cos(\pi \delta \bar{n}_1 + \bar{n}_2 / \bar{n}_1 \bar{n}_2) \cos(\pi \delta \bar{n}_2 - \bar{n}_1 / \bar{n}_1 \bar{n}_2)) \quad , \text{ soit :} \\ I_D &\approx I_o/2 (1 + \cos(2\pi \delta / \bar{n}_1) \cos(\pi \delta \Delta \bar{n} / \bar{n}_1^2)) \end{aligned}$$

Les brouillages périodiques sont les oscillations lentes observées sur l'interférogramme. Elles sont donc dues au terme $\cos(\pi \delta \Delta \bar{n} / \bar{n}_1^2)$, de plus basse fréquence.

Entre deux zéros successifs de ce terme, la quantité $\delta \Delta \bar{n} / \bar{n}_1^2$ augmente de 1, donc δ augmente de $\bar{n}_1^2 / \Delta \bar{n}$.

10. Estimons d'abord $\bar{n}_1$: la période du terme $\cos(2\pi \delta / \bar{n}_1)$, responsable des oscillations rapides sur l'interférogramme, est $\delta / \bar{n}_1$.

Par lecture de la figure 1.a., on observe que 17 périodes correspondent à $\delta = 10 \mu\text{m}$. On a alors,

$$10 \cdot 10^{-6} / \bar{n}_1 = 17 \Rightarrow \bar{n}_1 = 588 \text{ nm}$$

De la même manière, la période de l'enveloppe causée par le terme $\cos(\pi \delta \Delta \bar{n} / \bar{n}_1^2)$ est $\delta \Delta \bar{n} / 2 \bar{n}_1^2$.

Par lecture de la figure 1.b., on observe qu'une demi-période correspond à $\delta = 0.6 \text{ mm}$. On a alors

$$0.6 \cdot 10^{-3} \Delta \bar{n} / 2 \bar{n}_1^2 = 1/2 \Rightarrow \Delta \bar{n} = 0.58 \text{ nm}$$

On déduit alors que $\bar{n}_2 = \bar{n}_1 + \Delta \bar{n} = 588.58 \text{ nm}$.