

Devoir de Physique : Mécanique Quantique et Optique

15 Novembre 2025

Ce sujet est composé de deux problèmes indépendants. Le premier porte sur les oscillations de l'atome d'azote dans la molécule d'ammoniac (NH_3). Le second aborde une méthode de spectroscopie de Fourier, et son application au cas d'une lampe à vapeur de sodium (Na). Des données et un formulaire sont disponibles à la fin de cet énoncé.

1 Inversion de la molécule d'ammoniac

On s'intéresse dans ce problème aux oscillations effectuées par l'atome d'azote d'une molécule d'ammoniac entre deux conformations stables. À l'échelle quantique, les énergies sont usuellement exprimées en électron-Volt (eV), 1eV correspondant à l'énergie acquise par un électron accéléré sous un potentiel de 1V. On rappelle la conversion d'une énergie exprimée en eV en une énergie exprimée en J : $E[J] = e E[\text{eV}]$, où e est la charge élémentaire.

1.1 Traitement quantique et fonction d'onde

La molécule d'ammoniac 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 un plan de référence, et la position de l'atome d'azote est alors repérée par l'abscisse x telle que $|x|$ est la distance de l'atome d'azote au plan de référence (voir figure 1a). La molécule d'ammoniac peut se trouver dans deux états de conformation, selon que l'atome se trouve du côté $x > 0$ ou du côté $x < 0$. Les deux états sont séparés par une barrière de potentiel $V_0 = 0.25$ eV (voir figure 1b). On appelle inversion le passage d'une conformation à l'autre, lorsque l'atome d'azote traverse la barrière de potentiel.

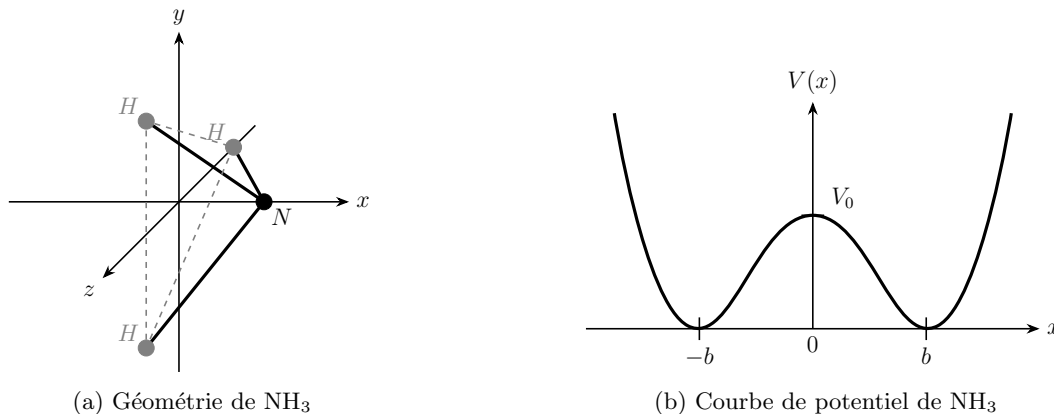


Figure 1: Géométrie et énergie potentielle de la molécule d'ammoniac

1. Interpréter la forme, la symétrie et les points particuliers de la courbe d'énergie potentielle présentée en figure 1b.
2. L'énergie thermique $k_B T$ est-elle suffisante pour que la molécule d'ammoniac puisse s'inverser à température ambiante ? À partir de quelle température cette inversion peut-elle s'effectuer ? Commenter.

Une des spécificités de la théorie quantique est que tout objet qu'elle décrit présente simultanément des comportements corpusculaire et ondulatoire. De cette manière, à toute particule

d'énergie E et de quantité de mouvement p , on peut associer une onde :

- de fréquence ν et de pulsation $\omega = 2\pi\nu$, telles que $E = h\nu = \hbar\omega$;
- de longueur d'onde λ et de vecteur d'onde de norme $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, tels que $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$.

3. Proposer un critère permettant de déterminer si l'étude d'une particule nécessite un traitement quantique ou non. Appliquer ce critère au cas d'un atome d'azote de masse $m_N = 2.3 \cdot 10^{-26}$ kg et d'énergie $E_N = 25$ meV dans une molécule d'ammoniac de taille $d = 3 \cdot 10^{-10}$ m. Est-ce cohérent avec le résultat de la question précédente ?

On s'intéresse à une particule quantique de masse m astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel, assimilé à l'axe Ox . À cette particule est associée la fonction d'onde $\psi(x, t)$.

4. Rappeler la probabilité de trouver la particule entre les positions x et $x + dx$ à l'instant t . En déduire la condition de normalisation portant sur la fonction d'onde ψ . Montrer alors que la fonction ψ est fixée à une phase près. Est-ce un problème ?

La fonction d'onde ψ est régie par l'équation de Schrödinger à une dimension :

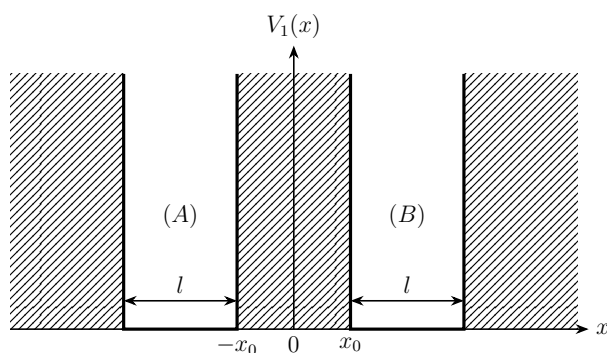
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi, \quad (1)$$

où V est le potentiel dans lequel évolue la particule. On suppose dans la suite que le potentiel est fonction de la dimension spatiale seulement : $V = V(x)$.

5. En cherchant la fonction d'onde ψ sous la forme $\psi(x, t) = \varphi(x) \chi(t)$, montrer que $i\hbar \frac{1}{\chi} \frac{d\chi}{dt} = \mathcal{E}$, où \mathcal{E} est une constante dont on donnera l'unité. Établir que la fonction $\chi(t) = \exp(-i\omega t)$ convient pour la partie temporelle, sous réserve que la normalisation porte sur la partie spatiale. Relier alors \mathcal{E} et ω .

1.2 Double puits de potentiel infini

On modélise dans un premier temps la molécule d'ammoniac par un potentiel V_1 à double puits infini symétrique rectangulaire (voir figure 2). Les fonctions d'onde localisées dans le puits A (resp. dans le puits B) sont notées ψ_A (resp. ψ_B). Les fonctions spatiales associées sont notées respectivement φ_A et φ_B .



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

Figure 2: Double puits de potentiel infini.

6. Que veut-dire qu'une fonction d'onde est localisée sur un domaine ? Pourquoi doit-on considérer les fonctions identiquement nulles en dehors des puits de potentiel ? Donner les conditions aux limites pour les fonctions φ_A et φ_B .

7. Déterminer, à un facteur de normalisation près, la forme des solutions $\varphi_{A,n}$ (indexées par un entier $n \in \mathbb{N}^*$) dans le puits A (indication : poser $y = x - x_0$). Exprimer la valeur de $\mathcal{E}_{A,n}$ relative à chacune de ces solutions. Commenter la valeur du niveau d'énergie le plus bas (énergie de point zéro).

8. Tracer, sur un même graphique représentant le puits de potentiel A selon Ox , les niveaux d'énergie $\mathcal{E}_{A,n}$, les fonctions $\varphi_{A,n}$, et les fonctions $|\psi_{A,n}|^2$ pour $n \in \{1, 3\}$.

9. Soit une molécule d'ammoniac dans un état décrit par $\psi_{A,n}$ d'énergie $\mathcal{E}_{A,n}$ à un instant t donné. Quelle est la probabilité de trouver l'atome d'azote dans le puits B à l'instant $t' > t$? Conclure.

1.3 Double puits de potentiel fini

On considère maintenant un profil d'énergie potentielle V_2 plus réaliste : un double puits infini rectangulaire à saut fini de hauteur V_0 (voir figure 3). Dans la suite, on considère $\mathcal{E} < V_0$.

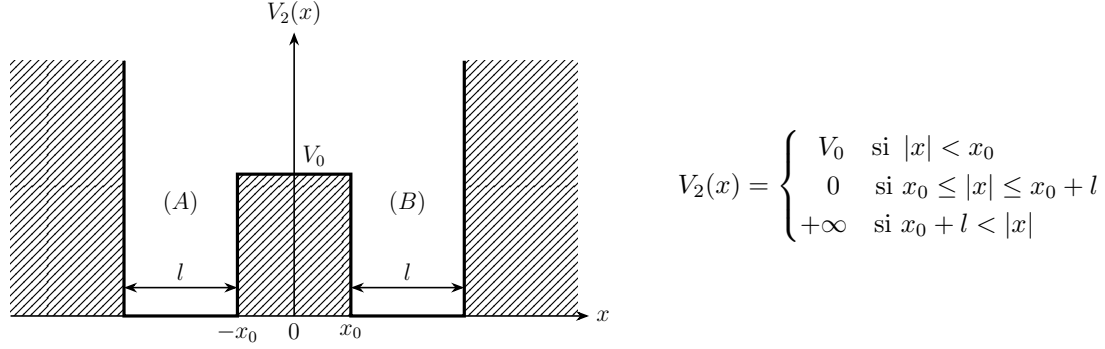


Figure 3: Double puits de potentiel fini.

10. Justifier que, dans le domaine $x_0 \leq x \leq x_0 + l$, on a :

$$\varphi_B(x) = \mathcal{B} \sin(k(x - x_0 - l)), \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}, \quad (2)$$

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

11. Dans le domaine $-x_0 < x < x_0$, les solutions φ_C s'écrivent

$$\varphi_C(x) = C_1 \cosh(Kx) + C_2 \sinh(Kx), \quad (3)$$

où C_1 , C_2 , et K sont des constantes. Justifier la forme des solutions φ_C . Exprimer K en fonction de \mathcal{E} , V_0 , m , et \hbar .

12. En tout point où le potentiel est borné, la fonction d'onde ψ doit être de classe \mathcal{C}^1 (i.e. ψ ainsi que ses dérivées d'ordre un sont continues). 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 reliant K à k , il est possible de déterminer l'énergie \mathcal{E} de l'état stationnaire φ , selon qu'il est symétrique (i.e. pair en x , ce qui conduit à $C_2 = 0$) ou antisymétrique (i.e. impair en x , ce qui conduit à $C_1 = 0$). On note φ_1^{sym} la première solution symétrique, d'énergie $\mathcal{E}_1^{\text{sym}}$, et φ_1^{anti} la première solution antisymétrique, d'énergie $\mathcal{E}_1^{\text{anti}}$. On définit alors les fonctions spatiales φ_G et φ_D , respectivement localisées dans les puits A et B :

$$\varphi_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1^{\text{sym}}(x) + \varphi_1^{\text{anti}}(x)) \quad \text{et} \quad \varphi_D(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1^{\text{sym}}(x) - \varphi_1^{\text{anti}}(x)) \quad (4)$$

13. On considère que l'atome d'azote est localisé dans le puits A à $t = 0$. On a alors $\psi(x, 0) = \varphi_G(x)$. Écrire l'expression de la fonction d'onde ψ de la molécule d'ammoniac à un instant t quelconque, en fonction de φ_1^{sym} , $\mathcal{E}_1^{\text{sym}}$, φ_1^{anti} , $\mathcal{E}_1^{\text{anti}}$, et \hbar .

14. En exploitant l'invariance par rotation de phase, déduire que la fonction d'onde ψ décrit une évolution périodique de l'état de la molécule d'ammoniac, dont on exprimera la période τ en fonction de $\delta\mathcal{E} = \mathcal{E}_1^{\text{anti}} - \mathcal{E}_1^{\text{sym}}$ et de \hbar . Calculer la fréquence f correspondante si $\delta\mathcal{E} = 9.85 \cdot 10^{-5}$ eV.

15. Décrire l'état de la molécule d'ammoniac à l'instant $t = \frac{\tau}{2}$. Quel phénomène quantique ce changement d'état entre les instants $t = 0$ et $t = \frac{\tau}{2}$ permet-t-il d'illustrer ?

2 Spectroscopie de Fourier et doublet du sodium

On s'intéresse dans ce problème à une méthode de spectroscopie de sources radiatives. Elle est basée sur des mesures de cohérences temporelles du rayonnement dont on cherche à caractériser le spectre. Son nom vient du fait qu'une transformation de Fourier est nécessaire pour convertir les données brutes en un spectre réel.

2.1 Théorie de la spectroscopie de Fourier

La méthode de spectroscopie étudiée ici repose sur un montage d'interféromètre de Michelson (voir figure 4). Celui-ci comporte un miroir M_1 fixe et un miroir M_2 mobile. La lame séparatrice S réfléchit 50% du rayonnement en intensité, et en transmet 50%. On enregistre l'intensité I_D arrivant sur le détecteur D , situé en sortie de l'interféromètre, en fonction du déplacement e du miroir M_2 .

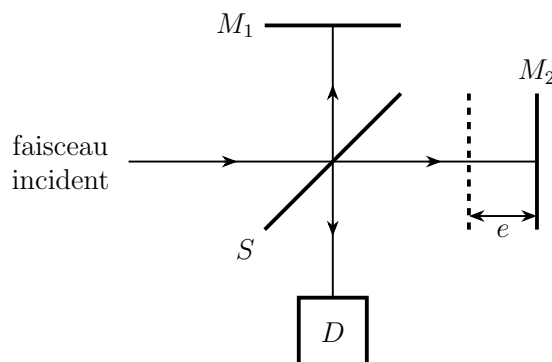


Figure 4: Interféromètre de Michelson.

On considère dans un premier temps un faisceau incident monochromatique de fréquence ν_0 , que l'on note $E_0(t) = A \cos(2\pi\nu_0 t)$. Par définition, son intensité est $I_0 = \varepsilon_0 c \langle E_0(t)^2 \rangle_T$, où ε_0 est la permittivité diélectrique du vide, c la célérité de la lumière dans le vide, et $\langle \cdot \rangle_T$ désigne la moyenne d'une fonction périodique sur sa période.

1. Dans le cas d'une source monochromatique et ponctuelle, décrire qualitativement la figure d'interférences obtenue en sortie de l'interféromètre.
2. Calculer la différence de marche δ ainsi que la différence de temps de marche τ en fonction des données du problème.
3. Calculer l'intensité du faisceau I_D arrivant sur le détecteur D en fonction de la différence de temps de marche τ , de la fréquence ν_0 et de l'intensité I_0 du faisceau incident.

On considère maintenant un faisceau incident polychromatique $E_0(t) = \int_{\mathbb{R}} A(\nu) \cos(2\pi\nu t) d\nu$, de densité spectrale $\mathcal{D}(\nu) = A(\nu)^2$. Par convention, on fixe $\int_{\mathbb{R}} \mathcal{D}(\nu) d\nu = A^2$.

4. Calculer la valeur de l'intensité I_D arrivant sur le détecteur D en fonction des données du problème.
5. Justifier que l'interférogramme obtenu est lié à la transformée de Fourier de

$$\mathcal{D}'(\nu) = \frac{1}{2} (\mathcal{D}(\nu) + \mathcal{D}(-\nu)). \quad (5)$$

6. Montrer que la mesure de l'interférogramme permet de calculer \mathcal{D}' , et par conséquent \mathcal{D} . Commenter cette méthode de spectroscopie.

2.2 Mesure spectroscopique du doublet du sodium

L'interféromètre de Michelson représenté en figure 4 est éclairé par une lampe à vapeur de sodium. Le spectre du sodium présente deux raies brillantes jaunes de longueurs d'onde voisines, notées λ_1 et λ_2 . On note l'écart entre ces raies $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 > 0$. Deux secteurs de l'interférogramme, présentant l'intensité I_D mesurée par le détecteur en fonction de la différence de marche δ , sont reproduits en figure 5. La figure 5a montre l'interférogramme pour $\delta \in [0, 10 \mu\text{m}]$, et 5b pour $\delta \in [0, 1 \text{ mm}]$.

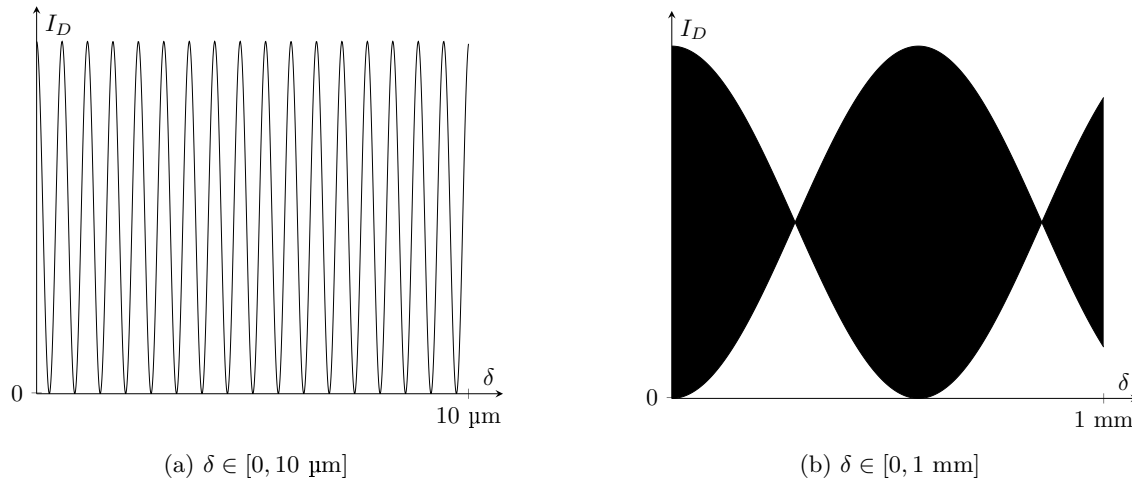


Figure 5: Interférogramme $I_D(\delta)$ d'une lampe à vapeur de sodium.

7. Justifier, sans calcul, le brouillage périodique des interférences. Comment s'appelle ce phénomène ondulatoire ?
8. Dédurre de la lecture de cet interférogramme que les deux raies du spectre du sodium ont la même intensité.
9. On suppose $\Delta\lambda \ll \lambda_1$. En calculant l'intensité I_D arrivant sur l'écran dans cette situation, montrer que la différence de marche δ varie de $\frac{\lambda_1^2}{\Delta\lambda}$ entre deux brouillages successifs.
10. À partir de l'interférogramme, donner une estimation de λ_1 et de $\Delta\lambda$. En déduire λ_2 .

Données et formulaire

Données

- constante de Planck : $h = 6.64 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$;
- constante de Planck réduite : $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$;
- charge élémentaire : $e = 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$;
- constante de Boltzmann : $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$.

Formulaire

- transformation de Fourier : $\tilde{f}(t) = \int_{\mathbb{R}} f(\nu) \exp(2i\pi\nu t) d\nu$;
- somme de deux cosinus : $\cos(a) + \cos(b) = 2 \cos\left(\frac{a+b}{2}\right) \cos\left(\frac{a-b}{2}\right)$;
- produit de deux cosinus : $\cos(a) \cos(b) = \frac{1}{2} (\cos(a+b) + \cos(a-b))$;
- formule d'Euler pour le cosinus : $\cos(a) = \frac{1}{2} (\exp(ia) + \exp(-ia))$.