

Vibrations d'une molécule HCl

La molécule diatomique HCl est modélisée, selon un axe fixe, par deux masses ponctuelles distantes de r . Puisque l'atome de chlore est beaucoup plus lourd que celui d'hydrogène, il peut être considéré comme fixe. Seul le noyau d'hydrogène de masse m est alors susceptible de se déplacer. Il subit l'énergie potentielle d'interaction :

$$E_p(r) = \frac{C}{r^n} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

où C , α et n sont des constantes positives (n est un entier). En l'absence de tout champ extérieur, la distance d'équilibre inter-atomique est r_0 . L'énergie minimale à fournir pour dissocier cette molécule sera notée E_d .

1. Retrouver la dimension de la constante ϵ_0 ? En déduire une unité SI possible.
2. Interpréter les deux termes de l'énergie potentielle et représenter l'allure de $E_p(r)$. On précisera graphiquement la position r_0 et l'énergie E_d en les justifiant.
3. Calculer r_0 en fonction des constantes du problème. Puis exprimer la pulsation ω_0 des petites oscillations de la molécule, ainsi que l'énergie de dissociation E_d , en fonction de n , C et r_0 .
4. Des mesures spectroscopiques permettant d'accéder expérimentalement à r_0 , ω_0 et E_d . Exprimer la constante n en fonction de r_0 , ω_0 , E_d et des constantes nécessaires, puis faire l'application numérique (cf ci-dessous).

En déduire les expressions de C , et α en fonction notamment de n , r_0 , et E_d , puis faire les applications numériques. Commenter la valeur de α .

Données : $m = 1,66 \times 10^{-27}$ kg ; $e = 1,6 \times 10^{-19}$ C ; $r_0 = 1,27 \times 10^{-10}$ m ; $\omega_0 = 5,45 \times 10^{14}$ rad.s⁻¹ ; $E_d = 400$ kJ.mol⁻¹ ; $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \times 10^9$ (SI) et $\mathcal{N}_A = 6,02 \times 10^{23}$.

On souhaite maintenant étudier les oscillations de la molécule (ou de l'atome d'hydrogène) forcées par une onde électromagnétique. L'objectif est de déterminer l'amplitude minimale du champ électrique de l'onde nécessaire pour rompre la molécule. Ainsi, on considère l'action d'un champ électrique sinusoïdal de pulsation ω et d'amplitude E_0 , polarisé selon la direction \vec{u}_x :

$$\vec{E}(t) = E(t) \vec{u}_x \quad \text{avec} \quad E(t) = E_0 \cos(\omega t).$$

La molécule étant fortement polarisée, l'atome d'hydrogène porte une charge partielle positive de l'ordre de e , alors que le chlore porte une charge de l'ordre de $-e$. En présence du champ \vec{E} , la molécule s'oriente dans sa direction, donc selon \vec{u}_x . D'autre part nous admettons alors que l'hydrogène peut être quasiment assimilé à un proton, et que la force qu'il subit est

$$\vec{F}(t) = \beta e \vec{E}(t),$$

où β est de l'ordre de l'unité : $\beta \sim 1$.

En oscillant au voisinage de sa position d'équilibre, le proton rayonne de l'énergie électromagnétique, et donc perd de son énergie mécanique. Pour des mouvements de faible amplitude, on modélise cela par l'existence d'une force de frottement fluide agissant sur le proton. En considérant des petites oscillations au voisinage de r_0 , le proton se comporte donc comme un oscillateur amorti de pulsation propre ω_0 et de facteur de qualité Q . On suppose que le référentiel de travail, dans lequel l'atome de chlore est fixe, est galiléen. En notant $x(t)$ l'écart de la position du proton par rapport à sa position d'équilibre (selon \vec{u}_x), l'équation différentielle du mouvement issue du principe fondamental de la dynamique selon \vec{u}_x s'écrit donc

$$m\ddot{x} = -kx - \lambda\dot{x} + \beta e E(t) \Leftrightarrow \boxed{\ddot{x} + \frac{\omega_0}{Q} \dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{\beta e}{m} E(t)}.$$

5. On mesure que le temps de réponse caractéristique du proton est de l'ordre de $\tau = 2 \times 10^{-9}$ s. Calculer le facteur de qualité Q de cet oscillateur. Commenter.

6. On s'intéresse maintenant au régime sinusoïdal forcé par le champ $\vec{E}(t)$, qu'on notera $x(t) = X_m \cos(\omega t + \varphi)$. En définissant une notation complexe $\underline{x}(t)$ associée à $x(t)$ qu'on explicitera, calculer l'amplitude du mouvement X_m en fonction de la pulsation réduite $u = \frac{\omega}{\omega_0}$, et des constantes nécessaires.
7. D'après les valeurs numériques trouvées, montrer qu'il peut exister une résonance en élongation pour cet oscillateur. Etablir l'expression de la pulsation de résonance ω_r . On en donnera un résultat approché tenant compte de la valeur de Q .
8. A quelle fréquence est-il judicieux d'exciter la molécule si l'on souhaite rompre la liaison ? A quelle longueur d'onde cela correspond-il ? On justifiera en établissant l'expression de l'amplitude des oscillations du proton pour cette fréquence, et en comparant au cas statique.
9. Pour avoir une idée de la précision requise pour le choix de cette fréquence, on calcule la bande passante $\Delta f = f_2 - f_1$ où f_1 et f_2 (avec $f_1 < f_2$) sont les fréquences de coupure de la molécule oscillante considérée comme un filtre mécanique. Calculer Δf en fonction de la fréquence propre f_0 et du facteur de qualité Q , puis sa valeur numérique. A quelle largeur $\Delta \lambda$ cela correspond-il pour les longueurs d'ondes ?

*Conseil : Pour simplifier les calculs, on pourra conserver uniquement les termes d'ordre **le plus bas non nul** en $\frac{1}{Q}$. On rappelle aussi que $\sqrt{1 + \varepsilon} \approx 1 + \frac{\varepsilon}{2}$ si $\varepsilon \ll 1$.*

10. Montrer qu'à la pulsation propre ω_0 , l'énergie mécanique du proton est constante. Exprimer sa valeur en fonction de l'amplitude de son mouvement X_m , de ω_0 , m et de E_d .
11. En déduire que pour briser la molécule, il faut atteindre une amplitude d'oscillations X_m vérifiant :

$$E_d = \frac{1}{2} m \omega_0^2 X_m^2.$$

Comparer alors X_m à r_0 .

12. En déduire l'ordre de grandeur de l'amplitude E_0 du champ électrique nécessaire pour briser la molécule, en supposant que l'on se place exactement à la fréquence optimale déterminée précédemment.
13. Que dire de la validité du modèle linéaire dans ces conditions ? Quelles sont les conséquences sur le choix de la longueur d'onde excitatrice ?