

# MÉCANIQUE

## CALCULATRICES AUTORISÉES

### I. Modélisation du monoxyde de carbone

#### Données générales :

Célérité de la lumière dans le vide .....  $c = 3,0 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$

Perméabilité magnétique du vide .....  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H.m}^{-1}$

Unité de masse atomique .....  $1 \text{ u.m.a} = 1,66 \times 10^{-27} \text{ kg}$

Masse atomique du carbone .....  $m_1 = m(\text{C}) = 12 \text{ u.m.a}$

Masse atomique de l'oxygène .....  $m_2 = m(\text{O}) = 16 \text{ u.m.a}$

#### Données relatives à la molécule CO :

Distance intermoléculaire C-O .....  $r_0 = 1,13 \times 10^{-10} \text{ m}$

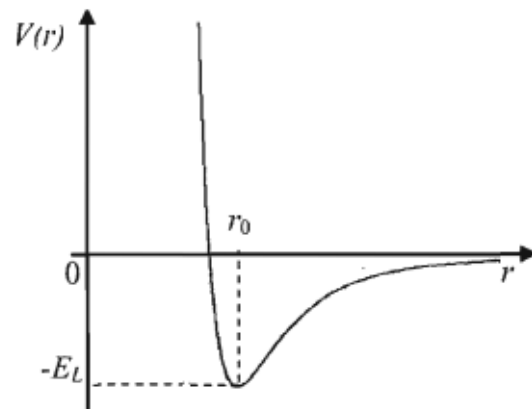
Fréquence propre d'élongation .....  $\nu_0 = \frac{\omega_0}{2\pi} = 6,425 \times 10^{13} \text{ Hz}$

#### I.1. Modélisation classique des oscillations d'une molécule diatomique

On considère une molécule diatomique électriquement neutre formée des deux atomes ( $A_1$ ) et ( $A_2$ ) dont les noyaux sont assimilés à deux points matériels  $P_1$  et  $P_2$ , de masses respectives  $m_1$  et  $m_2$ . On note  $\vec{r} = \overrightarrow{P_1 P_2}$  et  $r = P_1 P_2$ . La molécule est considérée dans son état électronique quantique fondamental. On modélise alors son énergie mécanique totale par

$$E_m = E_c + V(r)$$

où  $E_c$  représente l'énergie cinétique des deux noyaux (celle des électrons étant négligeable), et  $V(r)$  l'énergie potentielle électrique de la molécule, représentée ci-contre.



Energie potentielle d'une molécule diatomique

On travaille dans le cadre de la mécanique classique. On admet qu'il est équivalent d'étudier la molécule en considérant le noyau  $P_1$  fixe dans un référentiel galiléen et le noyau  $P_2$  mobile, mais à condition d'affecter à ce dernier une *masse réduite*  $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ . On néglige les mouvements de rotation propre de la molécule, d'énergies négligeables au regard des *énergies de vibration* associées aux variations de la distance  $r$ . On se ramène donc au mouvement rectiligne (angles sphériques  $\theta$  et  $\varphi$  constants) d'un point matériel de masse  $m$  d'énergie potentielle  $V(r)$ , et d'énergie cinétique

$$E_c = \frac{1}{2} m \dot{r}^2.$$

Pour les applications numériques, les masses  $m_1$  et  $m_2$  correspondent ici aux masses du carbone et de l'oxygène.

1. On note  $r_0$  la valeur de  $r$  telle que  $V(r)$  est minimale. Pour de faibles variations de  $r$  autour de  $r_0$ , justifier qu'il est légitime de poser :

$$V(r) = -E_L + \frac{1}{2} k (r - r_0)^2 \quad (1)$$

en précisant comment la constante  $k$  est reliée à la fonction  $V(r)$ .

2. Quelle est la signification physique de  $E_L$  ?

3. Montrer que dans ces conditions de petites variations, la distance inter-nucléaire  $r(t)$  vérifie l'équation différentielle :

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} + k(r - r_0) = 0 \quad (2)$$

Donner la forme générale de la solution  $r(t)$ . On notera  $r_m$  et  $\omega_0$  l'amplitude et la pulsation des oscillations. Donner l'expression de  $\omega_0$ .

4. En déduire que dans le cadre de ces petites oscillations, l'énergie mécanique s'écrit

$$E_m = -E_L + \frac{1}{2} m \omega_0^2 r_m^2. \quad (3)$$

La molécule est ici supposée polaire du fait de la dissymétrie du nuage électronique, qui se traduit par une charge  $-q$  attachée à  $P_1$  et une charge  $+q$  attachée à  $P_2$ . Elle possède alors un moment dipolaire électrique  $\vec{p} = q\vec{r}$ , qui oscille dans la même direction que  $\vec{r}$  avec une amplitude  $p_m = qr_m$  et une pulsation  $\omega_0$ . Or la théorie du rayonnement dipolaire permet d'établir que cette oscillation va générer un rayonnement électromagnétique dont la *puissance moyenne sur une période* vaut :

$$\langle P_{ray} \rangle = \frac{\mu_0 \omega_0^4 p_m^2}{12\pi c} \quad (4)$$

Ainsi l'énergie  $E_m$  de la molécule ne peut être considérée rigoureusement constante. Si elle varie très peu au cours d'une période d'oscillation, de telle sorte que l'on peut utiliser le résultat de l'équation 3, on doit toutefois considérer qu'elle varie lentement en suivant l'équation

$$\frac{dE_m}{dt} = -\langle P_{ray} \rangle. \quad (5)$$

5. En déduire que l'amplitude du mouvement  $r_m$  décroît en fait lentement et exponentiellement avec une constante de temps caractéristique  $\tau$  que l'on exprimera en fonction de  $m$ ,  $\omega_0$ ,  $q$  et de constantes fondamentales.
6. Montrer qu'on peut alors prendre en compte phénoménologiquement cet effet de rayonnement par l'ajout d'une force de frottement fluide linéaire  $-\alpha \dot{\vec{u}}_r$  s'appliquant sur le noyau  $P_2$ . Donner l'expression du coefficient de frottement  $\alpha$  en fonction de  $\tau$  et  $m$ .
7. En utilisant les données numériques fournis en début d'énoncé, ainsi que  $q = 3,60 \times 10^{-21} \text{C}$ , vérifier numériquement que pour la molécule de monoxyde de carbone CO, cette hypothèse de variation lente est bien vérifiée.

## 1.2. Modélisation classique de l'absorption dans l'infrarouge

La molécule diatomique polaire étudiée précédemment est maintenant soumise à l'action d'une onde électromagnétique plane progressive et harmonique de pulsation  $\omega$  (correspondant au domaine de l'infrarouge, donc de fréquence  $10^{11} \text{ Hz} < f < 10^{14} \text{ Hz}$ ), se propageant selon les  $x$  croissants. Le champ électromagnétique de l'onde est décrit par un champ électrique  $\vec{E}(x, t) = E(x, t) \vec{u}_z$  et un champ magnétique  $\vec{B}(x, t) = B(x, t) \vec{u}_y$ .

On admettra que l'onde n'a pas d'effets notoires sur le nuage électronique, de sorte que le modèle obtenu à la fin de la première partie reste valable. On suppose toujours une charge  $-q$  attaché à  $P_1$  qu'on suppose toujours fixe dans un référentiel galiléen et une charge  $+q$  attachée à  $P_2$  mobile avec une masse réduite  $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ .

Le gaz de molécule dans lequel se propage l'onde électromagnétique est suffisamment dilué pour qu'on puisse considérer que la célérité de l'onde est celle d'une onde électromagnétique dans le vide, notée  $c$ .

8. L'onde est-elle polarisée ? Si oui sous quelle forme ?

Rappeler la forme de  $E(x, t)$  et  $B(x, t)$ , en introduisant  $\omega$  et la longueur d'onde  $\lambda$ .

Montrer que compte tenu des ordres de grandeur en jeu, les champs  $\vec{E}(x, t) = E(x, t) \vec{u}_z$  et  $\vec{B}(x, t) = B(x, t) \vec{u}_y$  peuvent être considérés uniformes à l'échelle de la molécule.

9. On peut montrer que l'effet du champ magnétique sur le mouvement est négligeable compte-tenu des faibles vitesses en jeu. En déduire que l'élongation  $\xi(t) = r(t) - r_0$  vérifie une équation différentielle du mouvement du type :

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \frac{2}{\tau} \frac{d\xi}{dt} + \omega_0^2 \xi = \frac{q}{m} E_0 \cos(\omega t) \quad (6)$$

10. On se place en régime sinusoïdal forcé. Déterminer l'expression de l'amplitude complexe de l'élongation  $\xi_m$ . Préciser succinctement les comportements fréquentiels haute et basse fréquence et commenter physiquement le comportement haute fréquence.
11. Déterminer la pulsation pour laquelle l'amplitude du mouvement sera maximale. Comment se simplifie-t-elle aux vues des valeurs numériques données en début d'énoncé et  $q = 3,60 \times 10^{-21} \text{C}$  ?

On cherche maintenant à étudier l'absorption du rayonnement incident en fonction de sa fréquence, c'est-à-dire la puissance moyenne absorbée par la molécule de CO et provenant de l'onde électromagnétique incidente.

12. Exprimer la puissance instantanée  $P_{abs}$  fournie par l'onde à la molécule.  
En déduire que la puissance moyenne absorbée par la molécule s'écrit  $\langle P_{abs} \rangle = \frac{m}{\tau} \langle \dot{\xi}(t)^2 \rangle$
13. Calculer l'amplitude de la vitesse  $\dot{\xi}(t)$ , puis en déduire une expression de la puissance moyenne absorbée  $\langle P_{abs} \rangle$  en fonction de la pulsation  $\omega$ .
14. Tracer l'allure de  $\langle P_{abs} \rangle(\omega)$ .
15. Exprimer la pulsation de résonance associée. Se situe-t-elle dans l'infra-rouge ?
16. On définit la bande passante comme l'ensemble des fréquences telles que  $\langle P_{abs} \rangle(\omega) \geq \frac{P_{abs,max}}{2}$ . Déterminer la largeur  $\Delta\omega$  de la bande passante et estimer la largeur relative  $\frac{\Delta\omega}{\omega_0}$  avec les valeurs numériques données dans la partie précédente. Commenter cette valeur.
17. En pratique un autre phénomène peut être responsable de l'élargissement de la bande d'absorption, c'est l'effet Doppler dû au mouvement des molécules dans le gaz.  
Expliquer succinctement, puis établir l'expression du décalage relatif de pulsation d'absorption  $\frac{\Delta\omega}{\omega_0}$  qui serait causé par l'effet Doppler pour une molécule de vitesse  $v$ .
18. Pour un gaz à la température  $T$ , la largeur de la bande d'absorption qui résulte de l'effet Doppler peut alors être estimée par :

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \approx \frac{k}{c} \sqrt{\frac{RT}{M_{CO}}} \quad (7)$$

où  $k$  est un facteur sans dimension (de l'ordre de l'unité),  $R = 8,314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$  est la constante des gaz parfait et  $M_{CO} = 28 \text{ g.mol}^{-1}$  la masse molaire du monoxyde de carbone.

Entre l'élargissement par effet Doppler et celui du au freinage par rayonnement, quel effet prédomine à température ambiante ?

19. On place le gaz dans une cavité optique constituée de deux miroirs très réfléchissants distants de  $L = 10 \text{ cm}$  (par exemple dans le but de concevoir un LASER Infra-Rouge). Les miroirs ont pour effet d'annuler le champ électrique là où ils sont placés.  
En déduire l'espacement en pulsation  $\Delta\omega_n$  des modes propres possibles pour les ondes électromagnétiques dans cette cavité.  
D'après les questions précédentes, quel est l'ordre de grandeur du nombre de modes propres pouvant être absorbés dans cette cavité ?