

# MÉCANIQUE

## I. Modélisation du monoxyde de carbone

(d'après Agrégation Externe 2011)

### I.1. Modélisation classique des oscillations

1.  $r_0$  correspondant à un minimum d'énergie potentielle, on a  $\frac{dV}{dr}(r_0) = 0$ , et le développement limité de l'énergie potentielle autour de  $r_0$  s'écrit à l'ordre 2 :

$$V(r) \approx -E_L + \frac{1}{2} k (r - r_0)^2 \quad \text{avec} \quad E_L = -V(r_0) \quad \text{et} \quad k = \frac{d^2V}{dr^2}(r_0).$$

Remarque : Un potentiel est toujours parabolique au voisinage d'une position d'équilibre, à condition que la dérivée seconde ne s'y annule pas.

2. Il s'agit de l'énergie de liaison, c'est-à-dire l'énergie minimale nécessaire pour scinder la liaison si la molécule est dans son état lié fondamental (position d'équilibre  $r_0$ ), car il faut la faire passer dans un état de diffusion, donc d'énergie positive.
3. On applique le théorème de la puissance cinétique pour un système conservatif dans le référentiel galiléen :

$$\frac{dE_c}{dt} + \frac{dE_p}{dt} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad m\dot{r}\ddot{r} + k\dot{r}(r - r_0) = 0, \quad \forall t \quad \Leftrightarrow \quad m\ddot{r} + k(r - r_0) = 0, \quad \forall t.$$

On en déduit la solution générale, somme d'une solution particulière constante représentant la position d'équilibre et d'une solution générale de l'équation sans second membre :

$$r(t) = r_0 + r_m \cos(\omega_0 t + \varphi)$$

avec  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  et  $\varphi$  un déphasage dépendant des conditions initiales.

4. L'énergie cinétique s'écrit alors  $E_c = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r_m^2 \sin^2(\omega_0 t + \varphi)$ . En notant que  $k = m\omega_0^2$ , on obtient

$$E_m = E_c - E_L + \frac{1}{2} k (r - r_0)^2 = -E_L + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (\cos^2(\omega_0 t + \varphi) + \sin^2(\omega_0 t + \varphi)) \quad \text{donc} \quad E_m = -E_L + \frac{1}{2} m \omega_0^2 r_m^2.$$

Remarque : On retrouve bien que l'énergie mécanique est constante, ce qui a été supposé au départ.

5. On considère maintenant que  $r_m$  est une fonction du temps non constante. En réunissant les équations (3), (4) et (5) de l'énoncé, et avec  $p_m = q r_m$ , on obtient

$$\frac{d}{dt} \left( -E_L + \frac{1}{2} m \omega_0^2 r_m^2 \right) = -\frac{\mu_0 \omega_0^4 q^2}{12\pi c} r_m^2 \quad \Leftrightarrow \quad m \omega_0^2 r_m \dot{r}_m = -\frac{\mu_0 \omega_0^4 q^2}{12\pi c} r_m^2, \quad \forall t$$

$$\Leftrightarrow \quad \dot{r}_m + \frac{1}{\tau} r_m = 0 \quad \text{avec} \quad \tau = \frac{12\pi c m}{\mu_0 \omega_0^2 q^2} \quad \Leftrightarrow \quad r_m(t) = r_{m0} \cdot e^{-\frac{t}{\tau}}$$

6. La solution générale s'écrit donc en fait maintenant  $r(t) = r_0 + r_{m0} \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} \cdot \cos(\omega_0 t + \varphi)$ , ce qui correspond à un régime pseudo-périodique pour un oscillateur très faiblement amorti vérifiant une équation canonique

$$\ddot{r} + \frac{2}{\tau} \dot{r} + \omega_0^2 (r - r_0) = 0 \quad \text{avec} \quad \tau \omega_0 \gg 1.$$

En effet l'échelle de temps  $\tau$  de décroissance de l'amplitude est grande devant la période propre  $T_0 = \frac{2\pi}{\omega_0}$  des oscillations, donc  $\tau \omega_0 \gg 2\pi$ , ce qui conduit à une pseudo-pulsation  $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{1}{\tau^2}} \approx \omega_0$ . Cette équation différentielle s'obtient en considérant, en plus de la force de rappel vers la position d'équilibre, une force de frottement fluide  $-\alpha \dot{r} \vec{u}_r = -\alpha \dot{v}$ , avec  $\frac{2}{\tau} = \frac{\alpha}{m}$  donc  $\alpha = \frac{2m}{\tau} = \frac{\mu_0 \omega_0^2 q^2}{6\pi c}$ .

7. On obtient ici  $\tau \omega_0 = \frac{12\pi c m}{\mu_0 \omega_0 q^2} = \frac{6cm}{\mu_0 \nu_0 q^2} \approx 2 \times 10^{16} \gg 1$ . L'approximation est donc parfaitement justifiée.

## I.2. Modélisation classique de l'absorption

8. L'onde est de nature vectorielle donc peut être polarisée. Ici  $\vec{E}$  est constamment dirigé selon  $\vec{u}_y$  et  $\vec{B}$  est constamment dirigé selon  $\vec{u}_z$ . Il s'agit donc d'une polarisation rectiligne. L'onde étant progressive selon les  $x$  croissants et monochromatique, on a

$$E(x, t) = E_0 \cos(\omega t - kx + \varphi_0) \quad \text{et} \quad B(x, t) = B_0 \cos(\omega t - kx + \psi_0)$$

en notant le nombre d'onde angulaire (ou pulsation spatiale)  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , où  $\lambda$  est longueur d'onde ou période spatiale, et  $\varphi_0$  et  $\psi_0$  des phases à l'origine quelconques<sup>1</sup>.

Comparons la longueur d'onde à la longueur moyenne de la liaison :

$$\frac{\lambda}{r_0} = \frac{c}{r_0 f} > \frac{3 \times 10^8}{1,13 \times 10^{-10} \times 10^{14}} = 3 \times 10^7 \quad \text{d'où} \quad \frac{\lambda}{r_0} \gg 1.$$

Donc les champs peuvent être considérés uniformes à l'échelle de la molécule pour l'infrarouge.

9. La molécule est un oscillateur amorti caractérisé en régime libre dans la partie précédente (paramètres  $\tau$  et  $\omega_0$  en question 6.). La particule  $P_1$  étant de charge  $q$ , elle subit une force électrique  $\vec{F} = q\vec{E}$ , avec  $\vec{E}(t) = E_0 \cos(\omega t) \vec{u}_z$  car on peut choisir arbitrairement  $-kx + \varphi_0 = 0$  pour l'onde (qui est supposée uniforme donc à  $x$  constant) à condition de choisir l'origine des temps pour cela. En notant que  $\dot{\xi} = \dot{r}$  et  $\ddot{\xi} = \ddot{r}$ , on obtient une équation du mouvement forcée selon  $\vec{u}_z$  :

$$\ddot{r} + \frac{2}{\tau} \dot{r} + \omega_0^2 (r - r_0) = \frac{q}{m} E(t) \quad \Leftrightarrow \quad \ddot{\xi} + \frac{2}{\tau} \dot{\xi} + \omega_0^2 \xi = \frac{q}{m} E_0 \cos(\omega t).$$

10. L'équation différentielle étant linéaire à coefficients constants, la solution particulière en régime sinusoïdal forcé s'écrit  $\xi(t) = \xi_m \cos(\omega t + \varphi)$ . Et on peut l'écrire en notation complexe en définissant  $\underline{\xi} = \xi_m e^{j\omega t}$  avec  $j^2 = -1$  et  $\underline{\xi}_m = \xi_m e^{j\varphi}$ . Cela conduit à

$$\left( -\omega^2 + 2\frac{j\omega}{\tau} + \omega_0^2 \right) \underline{\xi}_m = \frac{qE_0}{m} \quad \Leftrightarrow \quad \underline{\xi}_m = \frac{\frac{q}{m} E_0}{-\omega^2 + 2\frac{j\omega}{\tau} + \omega_0^2}$$

On observe un comportement de filtre passe-bas d'ordre 2. L'inertie du système (terme en  $-\omega^2$ ) et dans une moindre mesure le terme d'amortissement (terme en  $\frac{j\omega}{\tau}$ ) impliquent qu'il ne va pas suivre des variations rapides du champ électromagnétique (hautes fréquences).

11. On cherche une résonance en  $\omega_r$  donc un maximum de l'amplitude  $\xi_m = \frac{\frac{q}{m} E_0}{\sqrt{(1-x^2)^2 + \frac{4x^2}{\tau^2 \omega_0^2}}}$  avec  $x = \omega/\omega_0$ .

L'amplitude sera maximale quand le dénominateur sera minimal. On va donc chercher à annuler la dérivée de la fonction  $f(X) = (1 - X)^2 + \frac{4X^2}{\tau^2 \omega_0^2}$  avec  $X = x^2$  :

$$-2(1 - X) + \frac{4}{\tau^2 \omega_0^2} X = 0 \quad \Leftrightarrow \quad X = 1 - \frac{2}{\tau^2 \omega_0^2} \quad \Leftrightarrow \quad x = \sqrt{1 - \frac{2}{\tau^2 \omega_0^2}} \quad \Leftrightarrow \quad \omega_r = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{2}{\tau^2 \omega_0^2}}.$$

Cette résonance existe bien puisque  $\tau \omega_0 \gg 1$ , ce qui permet aussi d'approximer  $\omega_r \approx \omega_0$ .

12. La puissance absorbée instantanée est  $P_{abs} = q \vec{E} \cdot \vec{v} = q \dot{\xi} E_0 \cos(\omega t)$ . Le bilan en puissance instantané, ou théorème de la puissance cinétique, peut être obtenu en multipliant l'équation du mouvement ci-dessus (question 9.) par  $m \dot{\xi}$  :

$$m \dot{\xi} \ddot{\xi} + \frac{2m}{\tau} \dot{\xi}^2 + m \omega_0^2 \xi \dot{\xi} = q \dot{\xi} E_0 \cos(\omega t) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + \frac{1}{2} k \xi^2 \right) = -\frac{2m}{\tau} \dot{\xi}^2 + q \dot{\xi} E_0 \cos(\omega t),$$

1. On verra en SPE que ces phases sont reliées entre elles à cause des équations de Maxwell de l'électromagnétisme.

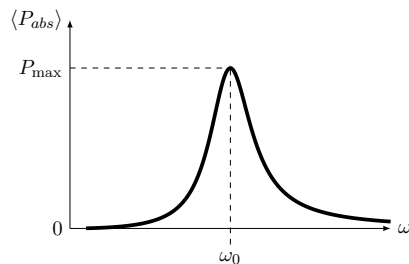
le premier membre étant la dérivée de l'énergie mécanique (toujours dans l'hypothèse des petits mouvements), et le second la somme des puissances du frottement fluide et de la force électrique due à l'onde. **La valeur moyenne du premier membre de cette équation est nulle car chaque énergie varie de façon périodique**, ce qui conduit à  $\langle P_{abs} \rangle = \left\langle \frac{2m}{\tau} \xi^2 \right\rangle$ . Cela signifie qu'en moyenne en régime sinusoidal forcé, **toute l'énergie provenant de l'onde se propageant selon  $x$ , et absorbée par la molécule, est entièrement dissipée par frottement, c'est-à-dire en réalité ici sous forme de rayonnement dans toutes les directions**. Ce phénomène est appelé *diffusion élastique*<sup>3</sup> de la lumière.

13. La vitesse s'écrit  $\dot{\xi} = -\omega \xi_m \sin(\omega t + \varphi)$ . Son amplitude est  $\omega \xi_m$ . Comme  $\langle \sin^2(\omega t + \varphi) \rangle = \frac{1}{2}$ , on obtient en remplaçant  $\xi_m$  par son expression trouvée en 11. :

$$\langle P_{abs} \rangle = \frac{m}{\tau} \omega^2 \xi_m^2 = \frac{q^2 E_0^2}{m \tau \omega_0^2} \frac{x^2}{(1-x^2)^2 + \frac{4x^2}{\tau^2 \omega_0^2}} \quad \text{d'où} \quad \langle P_{abs} \rangle = \frac{P_{max}}{1 + \frac{\tau^2 \omega_0^2}{4} \left( \frac{\omega - \omega_0}{\omega} \right)^2} \quad \text{avec} \quad P_{max} = \frac{q^2 E_0^2 \tau}{4m}$$

14.

L'expression ci-dessus fait apparaître un comportement de type passe-bande pour la vitesse, et donc pour la puissance absorbée. On a donc une résonance de l'absorption à la pulsation propre  $\omega = \omega_0$ , dont l'acuité dépend de l'amortissement, ou du facteur de qualité  $Q = \frac{\omega_0 \tau}{2}$ . On obtient l'allure ci-contre.



15. La puissance absorbée est maximale quand  $\omega = \omega_0$  donc  $f = \nu_0 = 6,4 \times 10^{13}$  Hz, donc une longueur

d'onde de  $\lambda = \frac{c}{\nu_0} = 4,7 \mu\text{m}$ . Il s'agit donc bien d'une résonance dans l'infrarouge.

16. Il s'agit du calcul classique de la largeur de résonance d'un filtre passe-bande, du point-de-vue de la puissance. On introduit  $x = \frac{\omega}{\omega_0}$  et le facteur de qualité  $Q = \frac{\omega_0 \tau}{2}$  pour alléger les calculs :

$$\langle P_{abs} \rangle(\omega) = \frac{P_{abs,max}}{2} \Leftrightarrow 1 + Q^2 \left( x - \frac{1}{x} \right)^2 = 2 \Leftrightarrow x^2 \pm \frac{1}{Q} x - 1 = 0 \Leftrightarrow x_{\pm} = \pm \frac{1}{2Q} + \sqrt{1 + \frac{1}{4Q^2}}$$

$$\text{d'où} \quad \Delta x = x_+ - x_- = \frac{1}{Q} = \frac{4}{\tau \omega_0} \quad \text{c'est-à-dire} \quad \Delta \omega = \omega_+ - \omega_- = \frac{\omega_0}{Q} = \frac{4}{\tau}$$

On obtient  $\frac{\Delta \omega}{\omega_0} = \frac{\nu}{\nu_0} = \frac{4}{\tau \omega_0} = 2 \times 10^{-16}$ . Ainsi la largeur de résonance en puissance absorbée liée à l'amortissement par rayonnement est extrêmement fine (de l'ordre du millième de Hertz!).

17. Lorsque le récepteur d'une onde électromagnétique est en mouvement par rapport à l'émetteur de l'onde, alors la fréquence perçue par le récepteur est décalée par rapport à celle émise par l'émetteur, c'est l'effet Doppler. Dans le cas du gaz, ce décalage en fréquence permet de décaler le maximum d'absorption si la molécule est en mouvement, ce qui va globalement élargir la bande d'absorption, qui apparaît comme une *raie d'absorption* sur le spectre de la lumière après traversée du gaz.

Notons  $T = \frac{1}{f}$  la période d'émission de l'onde lumineuse par la source. Si la molécule avance en direction

2. Erreur d'énoncé suite à la définition de  $\tau$  dans l'équation canonique,  $\frac{\tau}{2}$  est le temps de décroissance de l'énergie en régime libre.

3. Le mot « élastique » signifie sans changement de fréquence, c'est-à-dire selon un processus linéaire. Du point de vue quantique, il y a conservation de l'énergie des photons.

de la source à la vitesse  $v$  (algébrique), et qu'elle se situe à la distance  $d$  de la source à l'instant  $t$ , alors elle perçoit une période  $T'$  différente car la distance de propagation a varié de  $-vT$  entre 2 maxima successifs :

$$T' = T - \frac{vT}{c} \Leftrightarrow f' = \frac{1}{T'} = \frac{f}{1 - \frac{v}{c}} \Leftrightarrow \Delta f = f' - f = f \left( \left( 1 - \frac{v}{c} \right)^{-1} - 1 \right) \approx \frac{fv}{c}$$

la dernière approximation se justifiant par le fait que les molécules sont loin d'être relativistes à température ambiante. On obtient donc un élargissement relatif par effet Doppler  $\frac{\Delta \omega}{\omega_0} = \frac{\Delta f}{\nu_0} = \frac{fv}{\nu_0 c}$ .

18. En prenant  $T = 300$  K on obtient  $\frac{\Delta \omega}{\omega_0} \approx 1,5 \times 10^{-6}$ . **L'élargissement de la raie d'absorption par l'effet Doppler est donc largement prédominant** par rapport à celui dû à l'amortissement.

*Remarque : l'élargissement reste cependant petit à l'échelle de  $\omega_0$ , ce qui permet l'association des différentes raies aux différentes liaisons chimiques dans les spectres d'absorption IR.*

19. Les miroirs imposent un confinement de l'onde avec une réflexion quasi totale, donc les modes propres sont des ondes stationnaires sinusoidales qui doivent avoir un nœud sur chaque miroir. Cela impose la condition de quantification suivante :

$$\exists n \in \mathbb{N}, L = n \frac{\lambda_n}{2} = n \frac{\pi c}{\omega_n} \Leftrightarrow \omega_n = n \frac{\pi c}{L} \Rightarrow \Delta \omega_n = \frac{\pi c}{L}$$

En considérant la largeur Doppler, on évalue le nombre de modes propres dans la bande d'absorption par

$$N = \frac{\Delta \omega}{\Delta \omega_n} = \frac{2k\nu_0 L}{c^2} \sqrt{\frac{RT}{MCO}} = 0,07. \text{ Il n'y a donc aucune chance qu'il y ait plusieurs modes propres dans la bande d'absorption. Pour qu'il y en ait un, il faudrait un entier } n \text{ tel que}$$

$$\omega_0 - \frac{\Delta \omega}{2} < \omega_n < \omega_0 + \frac{\Delta \omega}{2} \Leftrightarrow \frac{2\nu_0 L}{c} - \frac{\Delta \omega}{\Delta \omega_n} < n < \frac{2\nu_0 L}{c} + \frac{\Delta \omega}{\Delta \omega_n} \Leftrightarrow 42833,27 < n < 42833,40.$$

C'est impossible, il n'y a donc **pas de mode absorbé dans ces conditions**.

**Quelques commentaires issus du bilan du DS 2019... à méditer !**

→ Deuxième problème sur la molécule CO : beaucoup n'ont pas compris la démarche attendue, à savoir une approche exclusivement énergétique. On **démontre** que le problème se réduit à celui d'un ressort, on ne le postule pas ni ne l'affirme à partir du cours... Pour comprendre cela il faut, comme d'habitude, **lire l'énoncé attentivement dans son ensemble avant de se lancer**.

Par conséquent beaucoup d'élèves ont écrit des choses justes que les 3 premières questions, mais qui ne leur ont pas rapporté de points car cela ne répondait pas réellement à la question posée.

→ J'avais abondamment alerté sur l'importance de bien différencier :

- le fait de **dériver l'énergie mécanique par rapport au temps**, ce qui permet d'établir l'équation du mouvement (ED d'ordre 2) pour le ou les degré(s) de liberté du problème, en présence ou non de forces conservatives... par exemple selon  $x$  en présence d'une force de frottement fluide :

$$\frac{dE_m}{dt} = \dot{x} \cdot \left[ m\ddot{x} + \frac{dE_p}{dx} \right] = -\alpha \dot{x}^2 \Leftrightarrow m\ddot{x} + \alpha \dot{x} + \frac{dE_p}{dx} = 0$$

- le fait de **dériver l'énergie potentielle par rapport à la coordonnée** (le degré de liberté restant du problème) pour trouver la/les position(s) d'équilibre, ce qui est un raisonnement purement géométrique qui ne fait pas intervenir le temps,

$$\frac{dE_p}{d\theta} = 0 \Leftrightarrow \theta = \dots$$

ou pour établir que l'énergie potentielle est parabolique au voisinage d'une position d'équilibre (en général) :

$$E_p(r) = E_p(r_0) + \frac{d^2 E_p}{dr^2}(r_0) (r - r_0)^2 + o((r - r_0)^2).$$

La confusion entre ces deux raisonnements engendre forcément des complications, voire des raisonnements aberrants.

→ J'ai aussi abondamment alerté sur la nécessité de vérifier le signe devant l'expression de l'énergie potentielle en faisant appel aux propriétés physiques qui en découlent :

- L'énergie potentielle décroît pour un mouvement dans le sens de la force, c'est-à-dire telle que le travail de la force soit moteur. En particulier lorsque le point se rapproche du centre de la force à laquelle il est soumis. Par exemple l'énergie potentielle de pesanteur s'écrivait ici (premier problème)  $-mgz$  car l'axe était descendant. Si on avait fait l'erreur on pouvait encore s'en rendre compte devant l'équation du mouvement, qui devenait instable dans la position d'équilibre censée être stable (encore fallait-il sentir physiquement que la position stable était celle des deux qui était la plus basse).

→ Il ne suffit pas de dire que  $E_L$  représente l'énergie de liaison (c'est déjà bien de l'avoir retenu!), encore faut-il expliquer ce que cela signifie (énergie à apporter pour rompre la liaison en partant de l'état fondamental) et dire pourquoi (se placer dans un état libre).

→ Le fait que l'énergie mécanique, qui est constante, vérifie  $E_m = E_p(r_0) + \frac{1}{2}m\omega_0^2 r_m^2$  a été démontré de deux manières en cours :

- via  $\cos^2 + \sin^2$  comme dans le corrigé,
- via l'utilisation des situations extrêmes, position d'équilibre et vitesse maximale, ou position extrême et vitesse nulle (fait en TD).

→ Je rappelle que **l'on n'écrit pas** :

- $\frac{dE_p(r_0)}{dr}$  (car ceci est la dérivée d'une constante donc vaut toujours 0) mais  $\frac{dE_p}{dr}(r_0)$ ;
- $\frac{d^2 E_p}{dr}(r_0)$  mais  $\frac{d^2 E_p}{dr^2}(r_0)$  car sinon c'est inhomogène (on divise par une distance à chaque fois qu'on dérive par rapport à une coordonnée de type distance).
- Un vecteur égal à un scalaire... a fortiori quand on a bientôt terminé le programme de mécanique, et donc que ça devient urgent de comprendre qu'il faut faire la différence :

$$\xrightarrow{\text{vecteur}} \xrightarrow{\text{projection par base}} \text{composantes algébriques.}$$

et ne pas systématiquement écrire des normes pour se débarrasser des vecteurs.

**CONCLUSION**

- LIRE L'ÉNONCÉ DANS SON ENSEMBLE avant de se lancer.
- FAIRE PREUVE DE RIGUEUR ET D'EXACTITUDE DANS LE FORMALISME pour s'appuyer sur sa puissance de signification (respecter les notations, vecteur ou scalaire, écriture des dérivées,  $R \neq r...$ ). Cela sera encore plus crucial lorsqu'on étudiera les systèmes de points matériels (systèmes non ponctuels).
- HOMOGÉNÉITÉ... HOMOGÉNÉITÉ... HOMOGÉNÉITÉ... HOMOGÉNÉITÉ... HOMOGÉNÉITÉ...
- VÉRIFICATION DES SIGNES par un raisonnement faisant appel au SENS PHYSIQUE.