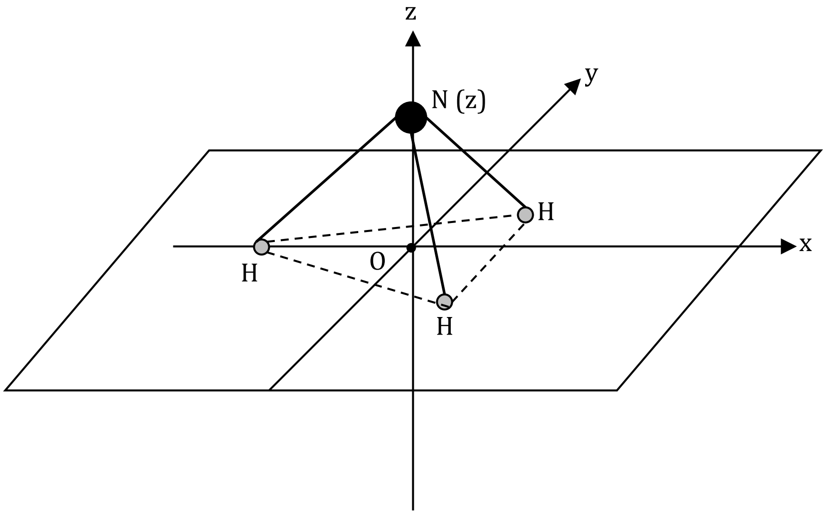
VIBRATIONS DE LA MOLECULE D'AMMONIAC (APPROCHE CLASSIQUE)

ENONCE

Dans le modèle simplifié de la molécule d'ammoniac NH_3, les trois atomes d'hydrogène H forment la base d'une pyramide dont l'azote N de masse m occupe le sommet.

Les trois atomes d'hydrogène sont fixes dans le référentiel du laboratoire supposé galiléen et définissent le plan (Oxy)

L'atome d'azote est en mouvement suivant l'axe (Oz) perpendiculaire au plan des atomes d'hydrogène. Il peut passer de part et d'autre de ce plan et sa cote est notée z.



Le champ de pesanteur est négligeable pour décrire cette structure et la résultante des forces électromagnétiques qui s'exercent sur l'atome N supposé ponctuel est :

$$\vec{F} = -\alpha z\left(z^2 - a^2\right)\vec{e_z}$$

Les constantes α et a sont positives.

1. L'origine de l'énergie potentielle est choisie pour z = 0. De quelle énergie potentielle E_p la force $\vec{F}$ dérive-t-elle ? représenter graphiquement E_p lorsque z varie de $-\infty$ à $+\infty$.
2. Définir la condition générale de stabilité d'un équilibre et déterminer les positions d'équilibre stables et instables de l'atome d'azote.
3. Une énergie $\Delta E \leq \dfrac{\alpha a^4}{4}$ est apportée à l'atome N alors qu'il est dans une position d'équilibre stable (correspondant à z >0).
   a. Montrer graphiquement que le système va osciller entre deux valeurs limites z_1 et z_2 que l'on déterminera.
   b. Dans le cas où $\Delta E << \dfrac{\alpha a^4}{4}$ montrer que le mouvement de N est celui d'un oscillateur harmonique. Déterminer la période des oscillations.
   c. Que se passe-t-il si $\Delta E > \dfrac{\alpha a^4}{4}$?

CORRIGE

1. $dE_p = -\vec{F}.\vec{dr} = \alpha z\left(z^2 - a^2\right)dz = \alpha\left(z^3 - a^2 z\right)dz$

$$\Rightarrow \boxed{E_p = \alpha\left(\frac{z^4}{4} - \frac{a^2 z^2}{2}\right) + \underbrace{Cste}_{0} = \frac{\alpha z^2}{2}\left(\frac{z^2}{2} - a^2\right)}$$

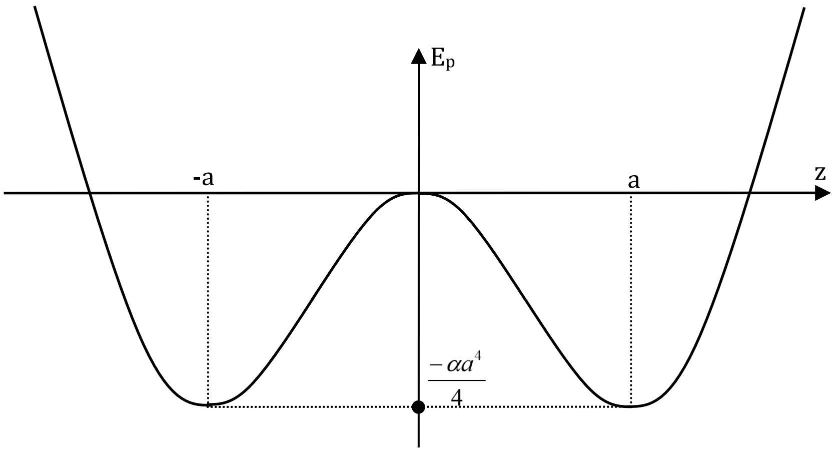
Etude de E_p :

$\frac{dE_p}{dz} = -F = \alpha\left(z^3 - a^2 z\right)$=0 pour z = 0 et z ±a

$$\frac{d^2E_p}{dz^2} = \alpha\left(3z^2 - a^2\right) \Rightarrow \quad \left.\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_0 = -\alpha a^2 < 0 \Rightarrow \text{Maximum en } 0$$

$$\left.\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_{\pm a} = 2\alpha a^2 > 0 \Rightarrow \text{Minimum en } \pm a$$

Notons enfin que $E_p \underset{z=\pm\infty}{\approx} \infty$



2.

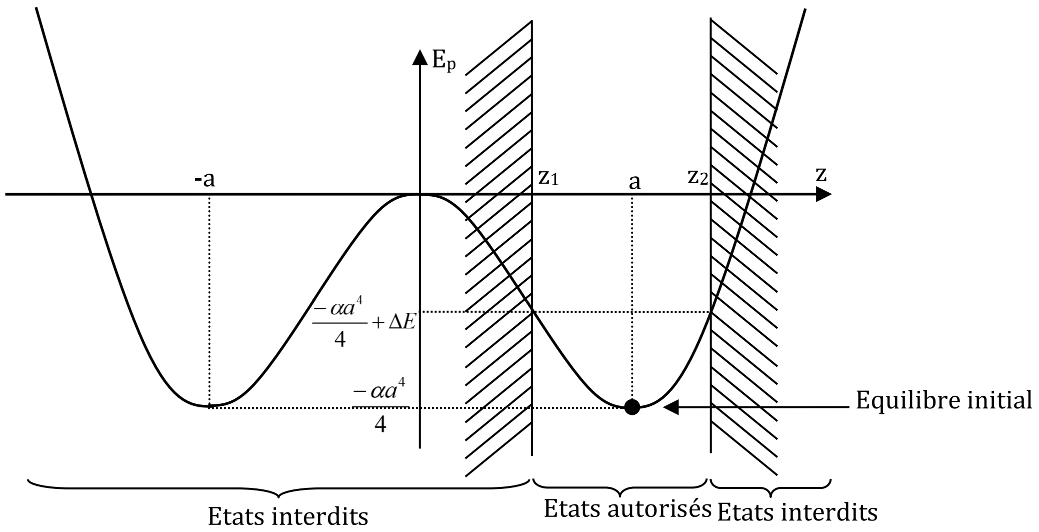
COURS :

Soit un point M, se déplaçant sur la droite *(Ox),* soumis à une force conservative $\vec{F} = \frac{-dE_p}{dx}\vec{u_x}$ et admettant une position d'équilibre en $M_o(x_o)$, on a alors l'énergie potentielle de M admet un extremum en x_o : $\left.\frac{dE_p}{dx}\right)_{x_o} = 0$

Si l'extremum est un minimum, alors l'équilibre est stable : $\left.\frac{dE_p}{dx}\right)_{x_o} = 0$ et $\left.\frac{d^2E_p}{dx^2}\right)_{x_o} > 0$ pour un équilibre stable

Si l'extremum est un maximum, alors l'équilibre est instable : $\left.\frac{dE_p}{dx}\right)_{x_o} = 0$ et $\left.\frac{d^2E_p}{dx^2}\right)_{x_o} < 0$ pour un équilibre instable

3.
a.



Les valeurs extrêmes z_1 et z_2 de z vérifient :

$$E_p = \frac{\alpha z^2}{2}\left(\frac{z^2}{2} - a^2\right) = -\frac{\alpha a^4}{4} + \Delta E \Rightarrow \frac{\alpha z^4}{4} - \frac{\alpha z^2 a^2}{2} + \frac{\alpha a^4}{4} - \Delta E = 0$$

$\Rightarrow$ D'où : $\boxed{z_1 = \sqrt{a^2 - 2\sqrt{\frac{\Delta E}{\alpha}}}}$ et $\boxed{z_2 = \sqrt{a^2 + 2\sqrt{\frac{\Delta E}{\alpha}}}}$

b.

$\Rightarrow$ Posons : z = a+ε avec $|\varepsilon| << a$

$$\Rightarrow E_p(z) = E_p(a+\varepsilon) = \underbrace{E_p(a)}_{\frac{-\alpha a^4}{4}} + \underbrace{\left.\frac{dE_p}{dz}\right)_a}_{0} \varepsilon + \frac{1}{2!}\underbrace{\left.\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_a}_{2\alpha a^2 = K > 0} \varepsilon^2$$

$$\Rightarrow E_p(z) = E_p(a) + \frac{1}{2}K(z-a)^2$$

L'énergie cinétique de N vaut : $E_c = \frac{1}{2}m(\dot{z})^2$

D'où l'intégrale 1[ère] du mouvement : $E_m = \frac{1}{2}m\dot{z}^2 + \frac{1}{2}K(z-a)^2 = \frac{-\alpha a^4}{4} + \Delta E$

Pour obtenir l'équation différentielle du mouvement, dérivons cette équation :

$$m\dot{z}\ddot{z} + K(z-a)\dot{z} = 0$$

$$\Rightarrow \ddot{z} + \frac{K}{m}z = \frac{K}{m}a \Rightarrow \boxed{\ddot{z} + \omega_o^2 z = \omega_o^2 a} \text{ avec : } \omega_o = \sqrt{\frac{K}{m}} = \sqrt{\frac{2\alpha a^2}{m}}$$

$\Rightarrow$ On a bien un oscillateur harmonique de période propre : $\boxed{T_o = \dfrac{2\pi}{\omega_o} = 2\pi\sqrt{\dfrac{m}{2\alpha a^2}}}$

c.

L'énergie de N devient positive : l'état reste lié mais les oscillations ne sont plus celles d'un oscillateur harmonique.