Inversion de la molécule d'ammoniac.

1. Energie potentielle.

. On recherche le travail élémentaire de la force $\vec{F}$.

$$\delta W = \vec{F}\cdot d\vec{ON} = -\alpha z(z^2-a^2)\vec{e_z}\cdot(dx\,\vec{e_x}+dy\,\vec{e_y}+dz\,\vec{e_z})$$

$$\delta W = -\alpha z(z^2-a^2)\,dz = -\alpha z^3 dz + \alpha a^2 z\,dz$$

$$\delta W = -\frac{\alpha}{4}dz^4 + \frac{\alpha}{2}a^2 dz^2 = -d\left(\frac{\alpha}{4}z^4 - \frac{\alpha}{2}a^2z^2\right)$$

Le travail élémentaire peut se mettre sous la forme de l'opposé d'une différentielle d'une fonction E_p :

$$\delta W = -dE_p \Rightarrow E_p = \frac{1}{4}\alpha z^2(z^2-2a^2) + cte$$

Pour $z=0$ on a $E_p(0) = 0 = cte$

0,25

$$\boxed{E_p = \frac{1}{4}\alpha z^2(z^2-2a^2)}$$

. On effectue une étude succincte de la fonction $E_p(z)$.

0,25 ⊛ $E_p(z) = E_p(-z)$ fonction paire, la courbe est symétrique par rapport à l'axe Oz.

⊛ On peut écrire $E_p(z)$ sous la forme :

$$E_p = \frac{1}{4}\alpha z^2(z-\sqrt{2}a)(z+\sqrt{2}a)$$

0,50 L'énergie potentielle s'annule en $z=0$, $z=\sqrt{2}a$, $z=-\sqrt{2}a$.

⊛ Détermination des positions correspondant à une énergie potentielle extrémale :

0,50 $\frac{dE_p}{dz} = \alpha z(z^2-a^2) = 0 \Rightarrow z=0,\ z=+a,\ z=-a$

0,25 Conclusion.

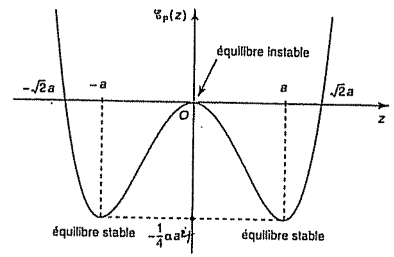
⊛ tableau de variation pour $z \in [0,+\infty[$

0,25

z	0		a		$+\infty$
$\frac{dE_p}{dz}$	0	$-$	0	$+$	
$E_p(z)$	0	↘	$-\frac{1}{4}\alpha a^4$	↗	$+\infty$

⊛ Diagramme.

01



2. Positions d'équilibre - Stabilité - Instabilité

L'observation du diagramme d'énergie potentielle permet de localiser les positions d'équilibres stables (minimum de l'énergie potentielle) et instables (maximum) de l'atome d'azote.

0,25 L'énergie potentielle est extrémale en $z=0$, $z=-a$, $z=+a$.
Ces positions sont les positions d'équilibre de l'atome d'azote N.
L'étude du signe de $\left(\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_{z=z_{eq}}$ permet d'en considérer la stabilité.

0,250 $\frac{d^2E_p}{dz^2} = +\alpha(3z^2-a^2)$

0,25 $\left(\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_{z=0} = -\alpha a^2 < 0$ $z_{eq}=0$ est position d'équilibre instable

0,25 $\left(\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_{z=-a} = \left(\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_{z=+a} = 2\alpha a^2 > 0$ $z_{eq}=-a$ et $z_{eq}=+a$ sont positions d'équilibre stables

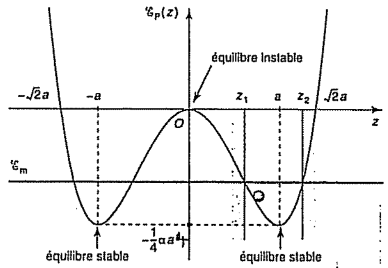
3_ Fréquence des petites oscillations_

Supposons que l'atome d'azote se trouve dans la position d'équilibre stable $z=a$ avec

Sa vitesse est nulle et son énergie mécanique se réduit alors à l'énergie potentielle

$$E_m(z=a) = -\frac{1}{4}\alpha a^4$$

Une élévation d'énergie de $\Delta E \leq \frac{1}{4}\alpha a^4$ augmente l'énergie mécanique de l'atome d'azote qui reste négative.
0,5 Il s'agit d'un état lié de l'atome qui est piégé dans une cuvette de potentielle. Il y a transfert permanent d'énergie potentielle en énergie cinétique, celle-ci s'annulant pour z_1 et z_2 : l'atome oscille entre ces deux valeurs limites.

0,5


$$E_m = E_c + E_p = \frac{1}{2} m \dot{z}^2 + E_p(z) \qquad z = z_{eq} + \varepsilon$$

$$E_m = \frac{1}{2} m \dot{\varepsilon}^2 + E_p(z_{eq}) + \underbrace{(z - z_{eq})\left(\frac{dE_p}{dz}\right)_{z=z_e}}_{=0\ (\text{équilibre})} + \frac{(z-z_{eq})^2}{2}\left(\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_{z=z_e}$$ 01

$$E_m = \frac{1}{2} m \dot{\varepsilon}^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\left(\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_{z=z_e} + E_p(z_{eq})$$

or $\left(\frac{d^2E_p}{dz^2}\right)_{z=z_e=a} = 2\alpha a^2$ d'après la question (2).

01 $$E_m = \frac{1}{2} m \dot{\varepsilon}^2 + \alpha a^2 \varepsilon^2 + E_p(z_{eq})$$

le système est conservatif :

$$\frac{dE_m}{dt} = m \ddot{\varepsilon}\dot{\varepsilon} + 2\alpha a^2 \varepsilon\dot{\varepsilon} = 0$$

0,5 $$\ddot{\varepsilon} + \frac{2\alpha a^2}{m}\varepsilon = 0$$

Il s'agit de l'équation d'un oscillateur harmonique de pulsation

$$\omega_0 = \left(\frac{2\alpha a^2}{m}\right)^{1/2}$$

La fréquence des petites oscillations est donc

0,5 $$\boxed{f_0 = \frac{\omega_0}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{2\alpha a^2}{m}\right)^{1/2}}$$

4. Énergie cédée supérieure à $\frac{1}{4}\alpha a^4$

L'énergie mécanique de l'atome est maintenant positive, l'atome est maintenant confiné dans un double puits de potentiel. C'est encore un état lié, mais les oscillations ne sont plus sinusoïdales. La particule oscille entre les positions limites z_3 et z_4. L'énergie apportée est suffisante pour franchir le col d'énergie en $z=0$. L'atome passe alternativement des deux côtés du plan des molécules d'hydrogène. La molécule subit un renversement en parapluie.