

ÉPREUVE MUTUALISÉE AVEC E3A-POLYTECH

ÉPREUVE SPÉCIFIQUE - FILIÈRE PC

MODÉLISATION DE SYSTÈMES PHYSIQUES OU CHIMIQUES

Durée : 4 heures

N.B. : le candidat attachera la plus grande importance à la clarté, à la précision et à la concision de la rédaction. Si un candidat est amené à repérer ce qui peut lui sembler être une erreur d'énoncé, il le signalera sur sa copie et devra poursuivre sa composition en expliquant les raisons des initiatives qu'il a été amené à prendre.

RAPPEL DES CONSIGNES

- *Utiliser uniquement un stylo noir ou bleu foncé non effaçable pour la rédaction de votre composition ; d'autres couleurs, excepté le vert, bleu clair ou turquoise, peuvent être utilisées, mais exclusivement pour les schémas et la mise en évidence des résultats.*
 - *Ne pas utiliser de correcteur.*
 - *Écrire le mot FIN à la fin de votre composition.*
-

Les calculatrices sont interdites.

Le sujet est composé de deux parties indépendantes et d'une annexe.

Sujet : page 2 à page 13

Annexe : page 14 à page 16

Étude d'un spectrophotomètre infrarouge

La spectroscopie infrarouge est une spectroscopie moléculaire d'absorption dans laquelle la substance étudiée est exposée à un rayonnement électromagnétique. Certaines radiations sont absorbées par la molécule et leur examen permet d'en déduire des informations sur la structure de la molécule.

La première partie de ce sujet aborde l'absorption vibrationnelle sous divers modèles.

Le principe d'un spectrophotomètre (figure 1) est étudié dans la seconde partie.

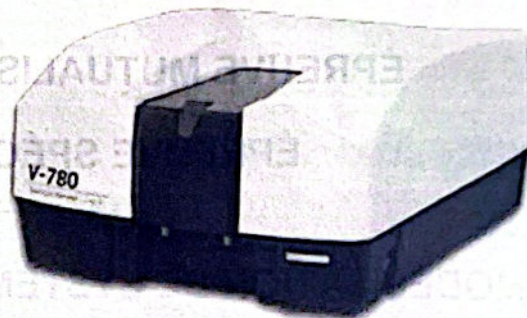


Figure 1 - Spectrophotomètre infrarouge

Partie I - Absorption vibrationnelle

I.1 - Modèle classique de la vibration d'une molécule diatomique

Dans le modèle classique d'une molécule diatomique, on assimile les deux atomes A et B unis par une liaison covalente à deux masses ponctuelles m_A et m_B . On suppose que la molécule est isolée et que les noyaux vibrent selon l'axe Ox . L'énergie potentielle de ce système est notée $E_p(x)$, où x est la distance internucléaire AB ($x = x_B - x_A$, où x_A et x_B sont les positions de A et de B dans un référentiel d'étude supposé galiléen) (figure 2).

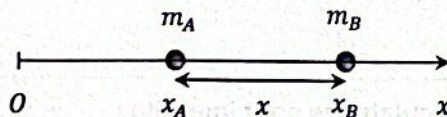


Figure 2 - Molécule diatomique AB

Dans cette sous-partie, le mouvement des atomes sera traité dans le cadre de la mécanique newtonienne.

I.1.1 - Potentiel de Morse

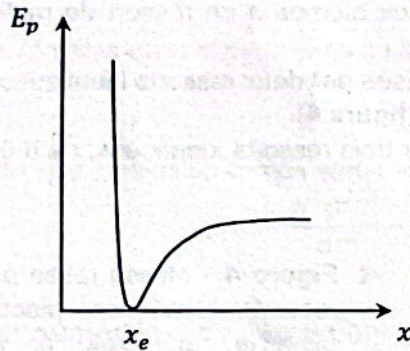
L'énergie potentielle d'interaction peut être modélisée par le potentiel de Morse (figure 3) :

$$E_p(x) = D(1 - e^{-\alpha(x-x_e)})^2$$

où D , α et x_e sont des constantes positives appelées constantes de Morse.

Q1. Préciser les unités de D , α et de x_e dans le Système International. Justifier.

Q2. En utilisant la courbe de la **figure 3**, indiquer si le système possède une position d'équilibre. Si oui, laquelle ? Indiquer si cet équilibre est stable. Justifier votre résultat à l'aide d'une phrase, sans calcul.



◀ **Figure 3** - Énergie potentielle d'une molécule diatomique en fonction de la distance entre les noyaux

Q3. Dessiner la courbe $E_p(x)$ sur la copie et y indiquer la constante D en justifiant la réponse. Préciser si le système se trouve dans un état lié ou un état libre lorsque son énergie mécanique E_m est supérieure à D , puis lorsqu'elle est inférieure à D .

1.1.2 - Modèle élastique

On se place dans l'approximation harmonique, c'est-à-dire que l'on ne considère que des petites variations de x autour de x_e .

Q4. Dans cette approximation, en effectuant un développement limité à l'ordre deux (rappelé en annexe) de $E_p(x)$ autour de x_e , donner une expression approchée de $E_p(x)$.

Q5. En déduire que, dans cette approximation, l'énergie potentielle prend la forme d'une énergie potentielle élastique $E_p(x) = \frac{1}{2} k(x - x_e)^2$ où k est appelée constante de force dont on donnera l'expression en fonction des constantes de Morse. Quel est le signe de k ?

À proximité de leur position d'équilibre, le modèle précédent montre que l'on peut considérer que les noyaux sont liés entre eux par un ressort qui aurait une raideur k .

Q6. On considère comme système l'atome A repéré par l'abscisse x_A . En appliquant la deuxième loi de Newton, établir la relation entre \ddot{x}_A , m_A , k , x et x_e (**relation 1**).

Q7. On considère comme système l'atome B repéré par l'abscisse x_B . En appliquant la deuxième loi de Newton, établir la relation entre \ddot{x}_B , m_B , k , x et x_e (**relation 2**).

Q8. En combinant les **relations (1) et (2)**, montrer que la variable x vérifie l'équation différentielle : $\mu\ddot{x} + kx = kx_e$ où μ est la masse réduite du système AB .

Exprimer μ en fonction de m_A et de m_B .

Q9. Exprimer la fréquence f_0 des petites oscillations de la molécule AB en fonction de μ et de k .

Lorsque cette molécule est soumise à l'action d'une onde électromagnétique de fréquence $f = f_0$, on observe que la molécule entre en résonance et absorbe l'onde.

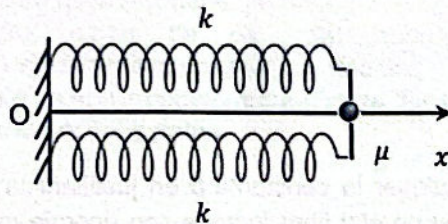
Q10. En spectroscopie, on préfère introduire le nombre d'onde $\sigma_0 = \frac{1}{\lambda_0}$ où λ_0 est la longueur d'onde dans le vide d'une onde électromagnétique de fréquence f_0 . Exprimer σ_0 en fonction de f_0 et de c , la célérité de la lumière dans le vide, puis en fonction de μ , c et de k (loi de Hooke).

I.1.3 - Validité de la loi de Hooke sur la multiplicité de la liaison

La loi de Hooke associe une liaison simple entre deux atomes à un ressort de raideur k et de longueur à vide x_e .

Une liaison double entre deux atomes est alors modélisée par deux ressorts identiques, de même raideur k et de longueur à vide x_e , placés en parallèle (**figure 4**).

Une liaison triple entre deux atomes est modélisée par trois ressorts identiques, de même raideur k et de longueur à vide x_e , placés en parallèle.



◀ **Figure 4** - Masse reliée à deux ressorts identiques, placés en parallèle et fixés à l'autre extrémité

Q11. Considérons un solide assimilé à un point matériel de masse μ et relié à un support fixe par deux ressorts identiques de constante de raideur k et de longueur à vide x_e , placés en parallèle et dont l'autre extrémité est fixe (**figure 4**).

Établir, en fonction de k , l'expression de la constante de raideur k_{eq} du ressort unique équivalent.

Q12. Sans démonstration, exprimer alors, en fonction de la constante k , la constante de raideur du ressort unique équivalent à trois ressorts en parallèle.

Q13. En déduire, dans le cadre de ce modèle, le nombre d'onde σ_0 de l'onde en fonction de μ , c et de k lorsque l'onde est :

- absorbée par une double liaison,
- absorbée par une triple liaison.

Conclure.

Q14. En s'aidant des résultats de la question **Q13** et en justifiant la réponse, attribuer les trois valeurs de nombre d'onde suivantes $1\,650\text{ cm}^{-1}$, $1\,300\text{ cm}^{-1}$ et $2\,200\text{ cm}^{-1}$ aux trois liaisons suivantes :

$$C - N$$

$$C \equiv N$$

$$C = N$$

I.2 - Le modèle quantique

Même s'il permet d'expliquer approximativement les valeurs des fréquences d'absorption, le modèle classique ne permet pas de décrire le comportement discret de la vibration d'une liaison soumise à une onde électromagnétique, c'est pourquoi une étude quantique plus pertinente est présentée.

D'après la mécanique quantique, l'énergie vibrationnelle E est discrète et est donnée par la relation $E = \hbar\omega_0 \left(v + \frac{1}{2} \right)$ où v est un nombre entier positif ou nul appelé nombre quantique

vibrationnel, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ la constante de Planck réduite et ω_0 la pulsation d'absorption.

On considère un problème unidimensionnel dans lequel une particule de masse μ est placée dans un potentiel :

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2.$$

On rappelle l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t).$$

On s'intéresse à des états stationnaires de la forme :

$$\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

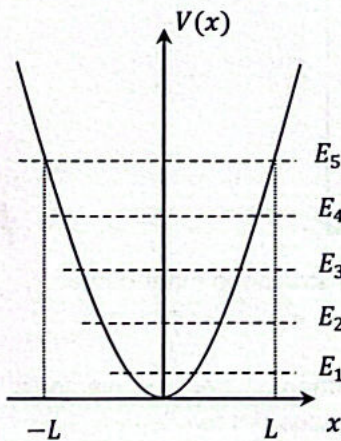
Q15. Montrer que la fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ vérifie l'équation différentielle :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{\mu}{\hbar^2} (2E - \mu\omega_0^2 x^2) \varphi(x) = 0.$$

Résolution numérique de l'équation

On cherche à résoudre numériquement l'équation de la question **Q15**.

On définit une valeur L déterminée par l'intersection du potentiel V avec le niveau d'énergie correspondant à $\nu = 5$ (**figure 5**).



◀ **Figure 5** - Représentation graphique de L déterminée par l'intersection de $V(x)$ avec E_5

On discrétise l'intervalle $[-L, L]$ représentant les valeurs de x accessibles à la particule en $N = 10\,000$ points régulièrement espacés d'un pas spatial dx . On souhaite déterminer $\varphi(x)$ en chacun de ces points.

Q16. À l'aide d'un développement limité à l'ordre deux (rappelé en annexe), exprimer $\varphi(x + dx)$ d'une part et $\varphi(x - dx)$ d'autre part au second ordre par rapport à x .

Q17. En déduire une expression de $\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2}$ en fonction de dx , $\varphi(x)$, $\varphi(x - dx)$ et de $\varphi(x + dx)$.

On note x_i , $i \in [0, N[$, les abscisses des points discrétisés.

On pose φ_i et V_i les valeurs de la fonction d'onde spatiale φ et du potentiel V à l'abscisse x_i .

Q18. En reformulant le résultat de la question **Q17**, écrire une relation entre φ_{i+1} , φ_{i-1} , φ_i , $\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2}$ et dx .

Q19. À partir des questions **Q15** et **Q18**, montrer que :

$$\varphi_{i+1} = \left(2 + \frac{2\mu\omega_0}{\hbar^2} dx^2 \left(\frac{1}{2} \mu\omega_0 x_i^2 - \hbar \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \right) \right) \varphi_i - \varphi_{i-1}.$$

Le **programme 1** permet de déterminer les valeurs de la fonction d'onde spatiale aux points de discrétisation pour des nombres quantiques de vibration ν .

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

#données du problème
hbar=1.05e-34
mu=1e-28
omega0=1e14
N=10000

#discrétisation de l'axe x
[instruction 1.1]
[instruction 1.2]
[instruction 1.3]

def fonction_onda(v):
    #calcul de la fonction d'onde pour chaque valeur de x
    [instructions 2]

    #normalisation de la fonction d'onde
    [instruction 3.1]
    [instruction 3.2]

    return phi

#tracé des courbes
[instructions 4]
```

Programme 1 - Résolution numérique de l'équation de Schrödinger

Dans les questions suivantes, on cherchera à compléter les instructions manquantes.

Q20. Donner l'instruction 1.1 qui permet de calculer L .

Q21. Écrire l'instruction 1.2 qui crée un tableau unidimensionnel (ou vecteur) appelé X contenant les N positions discrètes accessibles à la particule dans l'intervalle $[-L, L]$.

Q22. Écrire l'instruction 1.3 qui calcule le pas d'espace dx à partir du vecteur X défini en **Q21**.

On définit une fonction appelée `fonction_onda` qui prend pour argument d'entrée la valeur du nombre quantique ν et retourne un tableau unidimensionnel `phi` contenant les valeurs de la fonction d'onde spatiale normalisée pour chaque valeur du tableau X .

On choisit comme condition aux limites $\varphi(x = x_0) = 0$. Comme la valeur de φ en $x = x_1$ est inconnue, on fait le choix arbitraire de prendre $\varphi(x = x_1) = 1$.

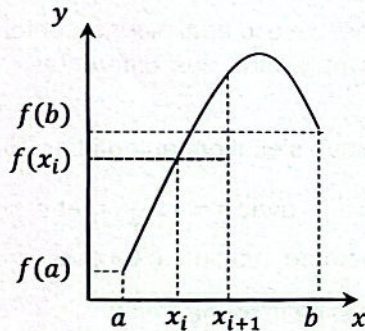
Q23. Compléter les instructions 2 qui créent le tableau `phi`, le remplissent à 0, puis le remplissent par les valeurs de la fonction d'onde spatiale pour chaque valeur de X .

La fonction d'onde spatiale doit être normalisée pour exprimer que la probabilité de trouver une particule dans l'espace qui lui est accessible est égale à 1. Pour normaliser la fonction d'onde, on calcule l'intégrale $\int_{-L}^L \varphi(x)^2 dx$, puis on divise chaque élément du tableau phi1 par la racine carrée de cette intégrale.

Rappel sur la méthode des rectangles à gauche (figure 6) :

On cherche à calculer de manière approchée l'intégrale $F = \int_a^b f(x) dx$ d'une fonction $f : [a; b] \rightarrow \mathbb{R}$ continue.

La méthode des rectangles à gauche consiste à découper l'intervalle $[a; b]$ en intervalles élémentaires $[x_i; x_{i+1}]$, puis sur chacun de ces intervalles, on remplace $f(x)$ sur le segment $[x_i; x_{i+1}]$ par $f(x_i)$. L'intégrale $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$ est alors approchée par $(x_{i+1} - x_i) f(x_i)$.

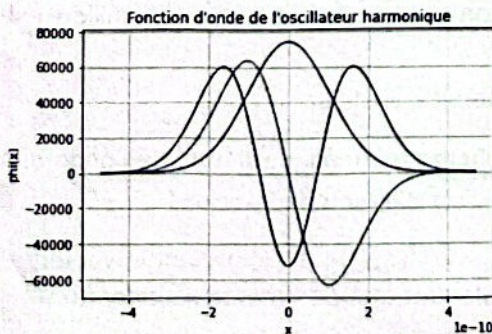


◀ **Figure 6** - Méthode des rectangles à gauche

Q24. Compléter l'instruction 3.1 qui calcule $\int_{-L}^L \varphi(x)^2 dx$ par la méthode des rectangles à gauche et l'appelle norm. On pourra le faire en une seule ligne (en utilisant l'annexe) ou en plusieurs lignes de code.

Q25. Compléter l'instruction 3.2 qui divise chaque élément du tableau phi par la racine carrée de cette intégrale.

Q26. Compléter les instructions 4 qui permettent d'afficher les courbes d'évolution de la fonction d'onde spatiale normalisée selon la variable x pour $v \in \{0; 1; 2\}$ sur un seul graphique comme représenté sur la **figure 7**.



◀ **Figure 7** - Évolution de la fonction d'onde spatiale normalisée pour $v = 0, 1$ et 2

I.3 - Le modèle ondulatoire : absorption d'une onde électromagnétique par une solution chimique

Une source de lumière émet une lumière incidente monochromatique de longueur d'onde λ qui traverse une cuve de longueur e contenant la solution chimique. On étudie l'interaction entre la lumière et ce milieu.

Ce milieu occupe la région de l'espace $0 \leq x \leq e$. L'espace est rapporté à une base orthonormée directe $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$.

On note μ_0 la perméabilité magnétique du vide.

Une onde plane, progressive, harmonique, de pulsation ω et de longueur d'onde $\lambda = 6000$ nm se propage dans l'air (assimilé au vide) dans la direction des x croissants.

Cette onde arrive sous incidence normale en $x = 0$ sur une cuve d'épaisseur e contenant une solution chimique. L'influence des parois de la cuve et les réflexions aux différentes interfaces seront négligées.

On admet que les équations de Maxwell dans la solution chimique s'écrivent en notation complexe :

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0 \quad \operatorname{rot}(\vec{E}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad \operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad \operatorname{rot}(\vec{B}) = \underline{\varepsilon} \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad \text{avec } \underline{\varepsilon} = \varepsilon_r - j\varepsilon_i \text{ et } \varepsilon_i > 0,$$

$\underline{\varepsilon}$ étant la permittivité diélectrique complexe du milieu et j le nombre imaginaire tel que $j^2 = -1$.

On cherche des solutions complexes des équations de Maxwell de la forme :

$$\vec{E} = E_0 e^{j(\omega t - \underline{k}x)} \vec{u}_y, \quad \underline{k} \text{ a priori complexe.}$$

Q27. Déterminer l'équation de propagation vérifiée par le champ électrique \vec{E} .

Q28. Établir la relation de dispersion de ce milieu. On exprimera pour cela \underline{k}^2 en fonction de ω , μ_0 , ε_r et de ε_i .

On suppose $0 < \varepsilon_i \ll \varepsilon_r$.

Q29. En déduire une expression approchée de \underline{k} . On mettra \underline{k} sous la forme $\underline{k} = k' - jk''$ (avec k' et k'' réels et $k'' > 0$). Exprimer k' et k'' en fonction de ω , μ_0 , ε_r et de ε_i .

Q30. Écrire le champ électrique sous forme réelle $\vec{E}(x, t)$. Pour simplifier l'expression, on écrira $\vec{E}(x, t)$ en fonction de k' et de k'' et non pas en fonction de ω , μ_0 , ε_r et de ε_i . Le milieu est-il absorbant ? Justifier.

Q31. Exprimer la vitesse de phase v_φ . Le milieu est-il dispersif ? Justifier.

Q32. Déterminer, en notation complexe, l'expression du champ magnétique $\vec{B}(x, t)$ de l'onde dans le milieu. On écrira $\vec{B}(x, t)$ en fonction de k' et de k'' pour simplifier son expression.

Q33. On définit l'intensité lumineuse I de l'onde comme $I = \|\langle \vec{\Pi}(x, t) \rangle\|$, $\vec{\Pi}(x, t)$ étant le vecteur de Poynting dont la valeur moyenne est donnée en annexe. Montrer que I se met sous la forme :

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{x}{\delta}\right).$$

Exprimer I_0 en fonction de k' , ω , μ_0 et de E_0 et δ en fonction de k'' .

Q34. On pose $\delta = \frac{1}{\alpha c_0}$ où α est une constante et c_0 la concentration de la substance absorbante.

Que vaut l'intensité lumineuse I_s juste en sortie de la cuve ?

Q35. Exprimer l'absorbance définie par $A = \log \frac{I_0}{I_S}$ et la transmittance définie par $T = \frac{I_S}{I_0}$ en fonction de α , c_0 et de e .

Q36. On pose $\epsilon_{em} = \frac{\alpha}{\ln(10)}$ où ϵ_{em} est le coefficient d'extinction molaire. En déduire l'expression de l'absorbance en fonction de ϵ_{em} , c_0 et de e . Quel est le nom de la relation vérifiée par l'absorbance ?

Partie II - Principe de fonctionnement d'un spectrophotomètre infrarouge

Une source infrarouge émet un faisceau polychromatique. Ce faisceau est ensuite dirigé vers un monochromateur à réseau qui sélectionne une bande étroite de longueur d'onde afin d'en mesurer l'intensité lumineuse.

II.1 - Étude de la source infrarouge

La source infrarouge est une tige composée d'un alliage nickel-chrome. Traversée par un courant électrique, cette tige s'échauffe par effet Joule et émet un rayonnement infrarouge.

II.1.1 - Étude cristalline de la source infrarouge

Q37. Le numéro atomique de l'élément nickel vaut $Z = 28$. Donner sa configuration électronique et indiquer la place de cet élément chimique dans la classification périodique (numéro de la ligne et de la colonne).

Dans un alliage nickel-chrome, les atomes cristallisent dans une structure cubique à faces centrées. Dans chaque maille, les atomes de nickel occupent tous les sommets et le centre de quatre faces tandis que les atomes de chrome occupent le centre des deux autres faces opposées.

Q38. Combien y a-t-il d'atomes de chrome et de nickel par maille ?

Q39. Exprimer littéralement le paramètre de maille a de l'alliage en fonction de la masse volumique de l'alliage nickel-chrome $\mu(\text{NiCr})$ et des masses molaires du nickel $M(\text{Ni})$ et du chrome $M(\text{Cr})$. Le calcul conduit à la valeur numérique $a = 350$ pm.

Q40. En déduire la valeur numérique de la distance moyenne d entre deux atomes voisins de l'alliage, dans un modèle où il serait formé d'atomes identiques. On pourra utiliser l'aide aux calculs donnée en annexe.

II.1.2 - Évaluation de la température ambiante autour de la source infrarouge

La source infrarouge est une tige cylindrique, de longueur L , de rayon a et de conductivité électrique γ .

Cette tige traversée par un courant électrique d'intensité i s'échauffe par effet Joule jusqu'à ce que sa température de surface T_s atteigne 1 000 K.

Elle échange de la chaleur par rayonnement thermique et par conducto-convection avec le gaz environnant dont on cherche à déterminer la température T_a lorsque l'équilibre thermique est atteint.

La résistance électrique de la tige vaut $R = \frac{L}{\gamma \pi a^2}$.

Rappelons les deux lois suivantes :

Loi de Stefan : la puissance surfacique φ_s rayonnée par un corps noir dont la température de surface est T s'écrit $\varphi_s = \sigma T^4$ où σ est la constante de Stefan qui vaut $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{K}^{-4} \cdot \text{m}^{-2}$.

Loi de Newton : la puissance thermique échangée entre un solide de surface S , à la température T et un fluide à la température T_a s'écrit $|HS(T - T_a)|$ où H est une constante appelée constante de conducto-convection.

On donne $H = 1 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$.

On se place en régime permanent.

Q41. Écrire l'expression de la puissance électrique P_{elec} reçue par la tige en fonction de γ , L , a et de i .

La tige et le gaz environnant sont considérés comme des corps noirs.

Q42. Exprimer la puissance thermique P_{ray} échangée par rayonnement thermique entre la tige et le gaz environnant en fonction de la constante de Stefan σ , a , L , T_a et de T_s .

Q43. Exprimer la puissance thermique P_{cc} échangée par conducto-convection entre la tige et le gaz environnant en fonction de la constante de conducto-convection H , a , L , T_a et de T_s .

Q44. Effectuer un bilan énergétique de la tige et montrer que T_a vérifie l'équation suivante :

$$\sigma T_a^4 + HT_a = \sigma T_s^4 + HT_s - \frac{i^2}{2\pi^2 \gamma a^3}$$

II.1.3 - Détermination de la température T_a par dichotomie

Principe de la méthode (figure 8) :

Soient deux valeurs b et c et une fonction $f : x \rightarrow f(x)$ strictement monotone et continue sur l'intervalle $[b, c]$.

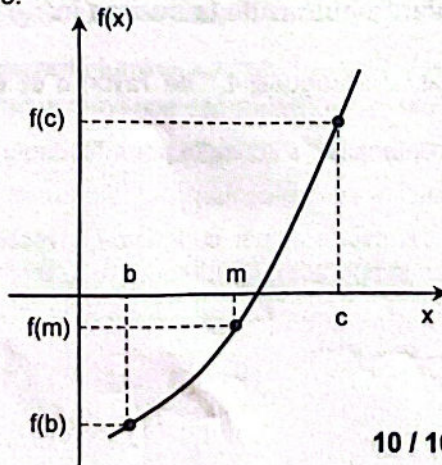
On suppose que $f(b)$ et $f(c)$ sont de signes opposés. Dans ces conditions, l'équation $f(x) = 0$ admet une solution unique.

L'objectif est de déterminer la solution de l'équation $f(x) = 0$ avec une précision p .

Pour trouver la solution, on divise l'intervalle en deux parties égales avec comme milieu $m = \frac{b+c}{2}$.

Si $f(b)$ et $f(m)$ sont de même signe, la solution se trouve alors dans l'intervalle $[m, c]$, sinon elle se trouve dans l'intervalle $[b, m]$.

On réitère alors la recherche dans l'intervalle où la fonction change de signe jusqu'à obtenir la précision voulue.



◀ **Figure 8 - Méthode de dichotomie**

Le programme 2 permet de déterminer la valeur de T_a par dichotomie.

```
#données du problème
H=1
sigma=5.67e-8
Ts=1000
i=25
a=1e-3
gamma=1e7

#définition de la fonction considérée
def f(x):
    [instruction 4]

#recherche de la valeur de Ta par dichotomie
[instructions 5]

#résultat
print(f"La température Ta vaut : {Dichotomie(f,298,1000,1):.0f} K ")
```

Programme 2 -
Recherche par
dichotomie de la
température du gaz
environnant la tige
métallique

Q45. Compléter l'instruction 4 qui définit la fonction f considérée.

Q46. Compléter les instructions 5 qui définissent une fonction appelée dichotomie comprenant les arguments f , b , c et p et qui permet de déterminer la solution de l'équation $f(x) = 0$ avec une précision p .

Q47. L'instruction finale :

`print(f"La température Ta vaut : {Dichotomie(f,298,1000,1):.0f} K ")`
renvoie le résultat : La température Ta vaut : 986 K. Commenter cette valeur.

II.2 - Monochromateur à réseau

Un spectromètre contient un réseau qui joue le rôle de monochromateur. Un monochromateur est un dispositif optique qui permet d'obtenir une onde lumineuse quasi monochromatique à partir d'une source polychromatique.

Le réseau à transmission considéré a $n = 50$ traits par millimètre et $N = 1\,000$ traits au total.

Il est éclairé sous incidence nulle par un faisceau parallèle de lumière polychromatique.

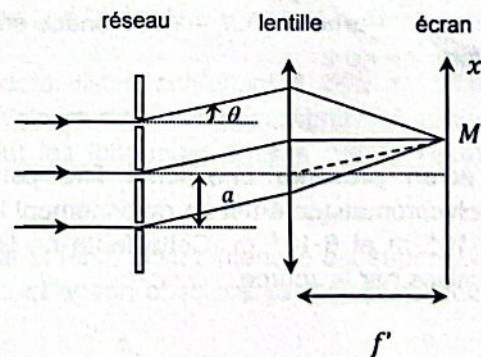


Figure 9 - Schéma d'un monochromateur

Une lentille convergente mince, de distance focale $f' = 20$ cm, a son axe optique perpendiculaire au réseau et est placée à la distance focale de l'écran (figure 9).

Q48. Établir l'expression de la différence de marche δ en un point M de l'écran d'ordonnée x entre deux rayons de même longueur d'onde λ_0 et diffractés parallèlement sous un angle θ par deux fentes consécutives séparées d'une distance $a = \frac{1}{n}$. En déduire que le déphasage φ entre ces deux rayons, dans les conditions de Gauss, s'écrit $\varphi = \frac{2\pi x}{\lambda_0 n f'}$.

Le déphasage entre deux rayons consécutifs et de même longueur d'onde étant égal à φ , les amplitudes complexes des vibrations lumineuses diffractées successives ont pour expressions (du trait 1 au trait N) en un point M de l'écran :

$$A_0 ; A_0 \exp(-j\varphi) ; A_0 \exp(-2j\varphi) ; \dots ; A_0 \exp(-j(N-1)\varphi).$$

L'amplitude complexe totale diffractée au point M est la somme de chaque amplitude complexe :

$$\underline{A} = A_0(1 + \exp(-j\varphi) + \exp(-2j\varphi) + \dots + \exp(-j(N-1)\varphi)).$$

L'intensité lumineuse résultant de la superposition de ces N vibrations lumineuses au point M est obtenue en multipliant l'amplitude complexe \underline{A} par son complexe conjugué \underline{A}^* :

$$I = \underline{A} \cdot \underline{A}^*.$$

On désigne par $I_0 = A_0^2$ l'intensité lumineuse émise par chacune des fentes.

Le tracé de la variation de $\frac{I}{I_0} = \frac{\underline{A} \cdot \underline{A}^*}{A_0 A_0}$ pour une longueur d'onde fixée en fonction de l'abscisse x est donné sur les figures 10 et 11. Ces tracés montrent que l'intensité lumineuse est concentrée principalement sur certaines valeurs de x et est nulle partout ailleurs.

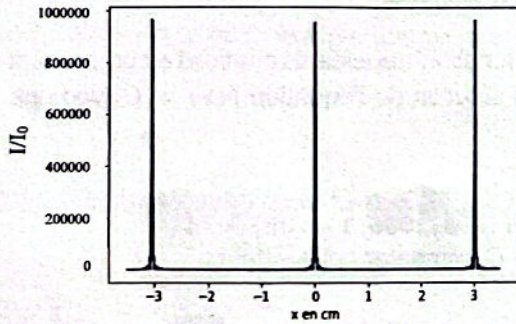


Figure 10 - Répartition de l'intensité pour des interférences à $N = 1\,000$ ondes en fonction de x

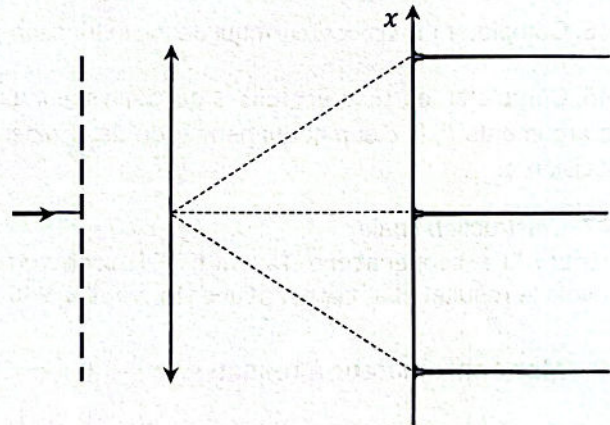
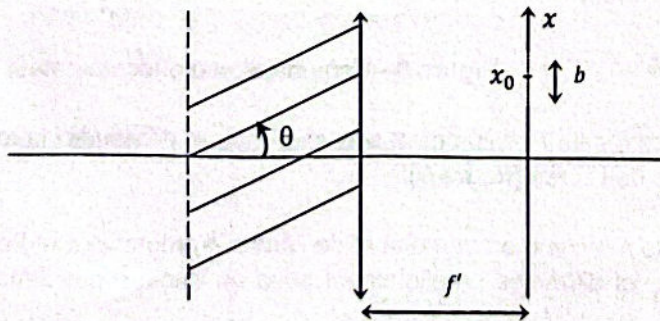


Figure 11 - Répartition de l'intensité lumineuse en fonction de x sur l'écran

L'écran présente une fente fine centrée en x_0 et de largeur b (figure 12). La source polychromatique émet un rayonnement infrarouge dont les longueurs d'onde sont comprises entre $2 \cdot 10^{-6}$ m et $6 \cdot 10^{-6}$ m. Cette fente ne laisse passer qu'une bande étroite des longueurs d'onde émises par la source.



◀ Figure 12 - Filtrage spectral à l'aide d'une fente

Le **programme 3** détermine la résolution du monochromateur, c'est-à-dire l'ensemble des longueurs d'onde transmises par la fente.

```
n=50_000          # nombre de traits par mètre
f=0.2            # distance focale de la seconde lentille
N=1000          # nombre total de traits

# Définition de la fonction phi
instruction 6

# Définition de la fonction intensite
def intensite(x,lamda) :
    instructions 7

def resolution(x0,b):
    instructions 8.1
    instructions 8.2
    instruction 8.3
    instructions 8.4
    instruction 8.5
```

Programme 3 - Recherche de la résolution du monochromateur

Q49. Compléter l'instruction 6 qui définit une fonction appelée phi qui utilise deux paramètres x et λ notés x et lamda et qui retourne le déphasage φ exprimé à la question **Q48**.

Q50. Compléter les instructions 7 qui définissent une fonction appelée intensite qui utilise les mêmes paramètres précédents x et lamda, qui font appel à la fonction phi définie à la **Q49** et retournent l'expression de l'intensité lumineuse I . Pour cela, on utilisera les commandes qui sont données en **annexe**.

La fonction resolution utilisant deux arguments x_0 l'abscisse centrale de la fente nommée x_0 et b sa largeur nommée b , permet d'obtenir l'ensemble des longueurs d'onde transmises par la fente.

Q51. Compléter les instructions 8.1 qui déterminent les valeurs limites x_{min} et x_{max} de l'abscisse x fixées par l'ouverture de la fente, valeurs limites que l'on notera x_{min} et x_{max} .

Q52. Compléter les instructions 8.2 qui définissent deux listes contenant 1 000 éléments chacune. La première liste nommée X_list contient les valeurs de x comprises entre x_{min} et x_{max} . La seconde liste nommée Lambda_list contient les longueurs émises par la source comprises entre $2 \cdot 10^{-6}$ m et $6 \cdot 10^{-6}$ m.

On considère qu'une vibration lumineuse est transmise par la fente si son intensité est supérieure à une intensité seuil égale à 0,1 fois l'intensité maximale et si son abscisse est comprise entre x_{min} et x_{max} .

Q53. Compléter l'instruction 8.3 qui définit l'intensité seuil appelée I_seuil.

Q54. Compléter les instructions 8.4 qui initialisent une liste vide nommée longueur_onde, puis qui, pour chaque élément lamda de la liste Lambda_list et pour chaque élément x de la liste X_list, compare son intensité à I_seuil et finalement remplissent la liste longueur_onde de l'élément lamda si l'intensité est supérieure à I_seuil.

Q55. Compléter l'instruction 8.5 qui retourne $\Delta\lambda$, l'écart entre la plus grande longueur d'onde transmise par la fente et la plus petite.

Q56. Pour $x_0 = 3$ cm et $b = 0,1$ mm, on obtient $\Delta\lambda = 1,2 \cdot 10^{-9}$ m. Commenter.

ANNEXE

Quelques commandes utiles en langage Python

A - Bibliothèque NUMPY de Python (gestion des tableaux, matrices, vecteurs)

B - Bibliothèque MATPLOTLIB.PYPLOT de Python (gestion des graphes)

A - Bibliothèque NUMPY de Python (gestion des tableaux, matrices, vecteurs)

`np.sqrt(x)`

Description : renvoie la racine carrée non négative d'un tableau, élément par élément.

Argument d'entrée : un tableau dont on cherche la racine carrée de chaque élément.

Argument de sortie : un tableau de même forme que x contenant la racine carrée de chaque élément de x.

	Commande	Résultat
<i>Exemple :</i>	<code>np.sqrt([1,4,9])</code>	<code>[1. 2. 3.]</code>
	<code>np.sqrt(2)</code>	<code>1.4142135623730951</code>

`np.linspace(start, stop, N_points)`

Description : renvoie des nombres uniformément espacés sur un intervalle spécifié.

Arguments d'entrée : `start` : la valeur de départ de la séquence.

`stop` : la valeur de fin de la séquence.

`N_points` : Nombre d'échantillons à générer.

Argument de sortie : un tableau unidimensionnel de `N_points` éléments régulièrement espacés entre `start` et `stop`.

	Commande	Résultat
<i>Exemple :</i>	<code>np.linspace(1,5,5)</code>	<code>[1. 2. 3. 4. 5.]</code>

`np.zeros(n)`

Description : fonction créant un tableau unidimensionnel de longueur n dont tous les éléments sont nuls.

Argument d'entrée : un entier correspondant à la longueur du tableau unidimensionnel à créer.

Argument de sortie : un tableau unidimensionnel d'éléments de type flottant et égaux à 0.

	Commande	Résultat
<i>Exemple :</i>	<code>np.zeros(4)</code>	<code>[0. 0. 0. 0.]</code>

`np.sum(a)`

Description : somme de tous les éléments de a.

Argument d'entrée : a, une liste de valeurs numériques.

Argument de sortie : somme des valeurs numériques de la liste a.

<i>Exemple</i>	a=[1,2,3]	
	Commande	Résultat
	np.sum(a)	6

`a.conjugate()`

Description : renvoie le conjugué complexe de a, élément par élément.

Argument d'entrée : a, un tableau de type array.

Argument de sortie : un tableau dont les éléments sont les conjugués complexes de a.

<i>Exemple</i>	a=np.array([1j, 2+3j])	
	Commande	Résultat
	a.conjugate()	[-1.j, 2.-3.j]

`max(), min()`

Description : renvoie la plus grande (la plus petite) valeur d'un ensemble de données.

Argument d'entrée : a, une liste.

Argument de sortie : la plus grande (la plus petite) valeur de a.

<i>Exemple</i>	a=[1, 9.2, 6, 3.3]	
	Commande	Résultat
	max(a)	9.2

B - Bibliothèque MATPLOTLIB.PY PLOT de Python (gestion des graphes)

Cette bibliothèque permet de tracer des graphiques. Dans les exemples ci-dessous, la bibliothèque `matplotlib.pyplot` a préalablement été importée à l'aide de la commande :

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
plt.plot(x,y)
```

Description : fonction permettant de tracer un graphique de n points dont les abscisses sont contenues dans le tableau unidimensionnel x et les ordonnées dans le tableau unidimensionnel y . Cette fonction doit être suivie de la fonction `plt.show()` pour que le graphique soit affiché.

Argument d'entrée : un tableau unidimensionnel de n éléments d'abscisses x et un tableau unidimensionnel de n éléments d'ordonnées y .

Argument de sortie : un graphique.

Formules utiles

$$\overline{\text{rot}}(\overline{\text{rot}}(\vec{E})) = \overline{\text{grad}}(\text{div}(\vec{E})) - \vec{\Delta}(\vec{E}).$$

$$\overline{\Pi}(x, t) = \frac{1}{2} \text{Re} \left(\frac{\vec{E} \wedge \vec{B}^*}{\mu_0} \right) \text{ où } \vec{B}^* \text{ est le conjugué de } \vec{B} \text{ et } \text{Re} \left(\frac{\vec{E} \wedge \vec{B}^*}{\mu_0} \right) \text{ représente la partie réelle du produit vectoriel } \frac{\vec{E} \wedge \vec{B}^*}{\mu_0}.$$

$$\log(x) = \frac{\ln(x)}{\ln(10)}.$$

Développement limité à l'ordre 2 de $f(x)$ autour de a :

$$f(x) \approx f(a) + (x - a) \times f'(a) + \frac{1}{2} (x - a)^2 \times f''(a).$$

Aide aux calculs

$$\begin{aligned} 350 \times 1,4 &= 490 \\ 350 / 1,4 &= 250 \\ 350 \times 1,7 &= 595 \\ 350 / 1,7 &\approx 206 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (2)^{\frac{1}{3}} &\approx 1,3 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} &\approx 0,6 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{2} &\approx 1,4 \\ \sqrt{3} &\approx 1,7 \\ \sqrt{5} &\approx 2,2 \end{aligned}$$

FIN