



La molécule d'hydrogène H_2

L'étude de la structure des molécules est très très difficile ! On utilise pour cela l'équation de Schrödinger (1887-1961). Elle permet d'étudier le comportement des molécules en prenant en compte les noyaux et le cortège d'électrons :

$$-\frac{\hbar}{2m} \Delta \psi(\vec{r},t) + V(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r},t) = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r},t)$$

A notre niveau, nous sommes incapables de résoudre une telle « chose » !
Le but de cette fiche est l'étude de l'énergie de deux atomes d'hydrogène.

Nous allons étudier puis tracer une fonction qui représente fidèlement l'énergie de deux atomes d'hydrogène en fonction de leur éloignement. Ceci nous permettra de mieux comprendre la liaison de covalence entre atomes.

On considère : $E(x) = (-400x + 1000) e^{-0,2x}$

E : énergie (en kJ/mol) des deux atomes

x : distance entre les deux noyaux en dixième d'Ångstrom ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$)

- 1) Résoudre l'équation $E(x) = 0$. On note d_0 la solution.
- 2) Calculez la dérivée $E'(x)$. Rappels : $(uv)' = u'v + uv'$ $(e^u)' = u' e^u$
Résoudre $E'(x) = 0$. On note d_s la solution.
- 3) Dressez le tableau de variations sur l'intervalle $[1,5 ; 23]$.
- 4) Complétez le tableau de valeurs ci-dessous (valeurs arrondies à 10 près) :

x	1,5	d_0	4	5,5	d_s	9	11,5	14	17	20	23
$E(x)$											

- 5) Déterminez la limite de $E(x)$ lorsque x tend vers $+\infty$

