



La molécule d'hydrogène H_2

L'étude de la structure des molécules est très 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.

L'idée : étudier puis tracer une fonction qui représente fidèlement l'énergie de deux atomes d'hydrogène en fonction de leur éloignement. Ceci vous permettra de mieux comprendre la liaison de covalence entre atomes (après quelques recherches sur le net...).

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'Ångström ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$)

- 1) Résoudre l'équation $E(x) = 0$. On note d_0 la solution.
- 2) Calculer 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) Dresser le tableau de variations sur l'intervalle $[1,5 ; 25]$.
- 4) Compléter 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	25
$E(x)$											

- 5) Déterminez la limite de $E(x)$ lorsque x tend vers $+\infty$ puis tracez la courbe sur un graphique du type ci-dessous :

