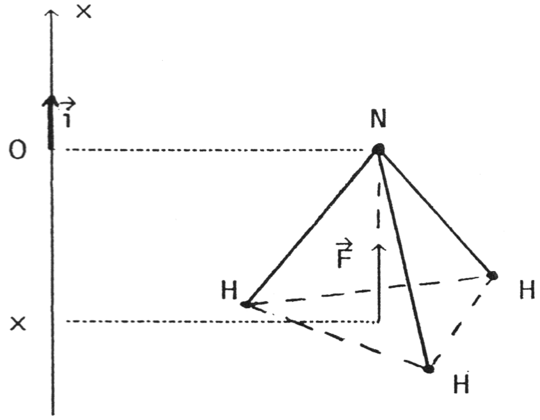
C - STABILITE D'UN EQUILIBRE

Dans un modèle simplifié de la molécule d'ammoniac NH_3, on considère que les trois atomes d'hydrogène forment la base d'une pyramide dont l'azote occupe le sommet. L'atome d'azote reste fixe. Par contre le plan contenant les trois atomes d'hydrogène peut passer de part et d'autre de l'atome d'azote. Soit Ox un axe fixe perpendiculaire au plan mobile des trois atomes d'hydrogène, soit x l'abscisse de ce plan; l'abscisse de l'atome d'azote est prise nulle. La force totale appliquée sur le système constitué par les trois atomes d'hydrogène est :

$$\vec{F} = -\alpha x(x^2 - a^2)\,\vec{i}$$

où α et a sont des constantes positives, et $\vec{i}$ un vecteur unitaire de Ox.



1) De quelle énergie potentielle U, la force $\vec{F}$ dérive-t-elle? (On prendra l'origine des énergies potentielles en $x = 0$). Représenter graphiquement U quand x varie de $-\infty$ à $+\infty$.

2) Rappeler (en terme énergétique) la condition générale de stabilité d'un équilibre et déterminer les positions d'équilibre stables et instables du système.

3) On cède au système une énergie ΔE au moment où les atomes d'hydrogène sont en équilibre dans une position d'équilibre stable.

a- On se place dans le cas où $\Delta E < \alpha a^4/4$. Montrer que le plan des atomes d'hydrogène va osciller entre deux valeurs limites x_1 et x_2 que l'on caractérisera à l'aide d'une représentation graphique.

b- Que si passe-t-il si $\Delta E > \alpha a^4/4$?

C - NH_3

1) U vérifie $\vec{F} = -\overrightarrow{grad}\, U$, soit $\begin{cases} F_x = -\alpha x(x^2 - a^2) = -\dfrac{\partial U}{\partial x} \\ F_y = 0 = -\dfrac{\partial U}{\partial y} \\ F_z = 0 = -\dfrac{\partial U}{\partial z} \end{cases}$

Donc U ne dépend que de x et $\dfrac{dU}{dx} = \alpha x(x^2 - a^2) = \alpha x^3 - \alpha a^2 x$

$U = \dfrac{\alpha x^4}{4} - \dfrac{\alpha a^2 x^2}{2} + b$

On convient que $U(0) = 0$; on en déduit $b = 0$

$\boxed{U = \dfrac{\alpha x^2}{4}(x^2 - 2a^2)}$

$\dfrac{dU}{dx} = \alpha x^3 - \alpha a^2 x \qquad \dfrac{dU}{dx} = 0 \iff \alpha x(x^2 - a^2) = 0$

$\iff x = 0$ ou $x = -a$ ou $x = +a$

$\lim\limits_{x \to -\infty} U(x) = +\infty$; $\lim\limits_{x \to +\infty} U(x) = +\infty$

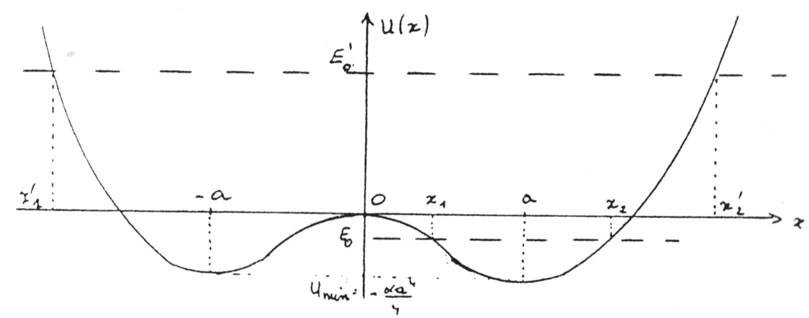
D'où le tableau de variation et le graphe :

x	$-\infty$		$-a$		0		a		$+\infty$
$\frac{dU}{dx}$		$-$	0	$+$	0	$-$	0	$+$	
$U(x)$	$+\infty$	↘	$-\alpha a^4/4$	↗	0	↘	$-\alpha a^4/4$	↗	$+\infty$

$U(0) = 0$

$U(a) = U(-a) = -\dfrac{\alpha a^4}{4}$

$= U_{min}$



2) x_e est une position d'équilibre stable si et seulement si :

$\dfrac{dU}{dx}(x_e) = 0$ et $\dfrac{d^2U}{dx^2}(x_e) > 0$

$\dfrac{d^2U}{dx^2} = 3\alpha x^2 - \alpha a^2 \qquad \dfrac{d^2U}{dx^2}(0) = -\alpha a^2 < 0$

$\dfrac{d^2U}{dx^2}(a) = \dfrac{d^2U}{dx^2}(-a) = 3\alpha a^2 - \alpha a^2 = 2\alpha a^2 > 0$

On a donc 2 positions d'équilibre stable : $x = \pm a$ et une position d'équilibre instable $x = 0$

3) ⓐ Lorsqu'on a cédé ΔE au système, son énergie est alors :

$E = \Delta E + U_{min} = \Delta E - \dfrac{\alpha a^4}{4} < 0$

Cette énergie reste ensuite constante et égale à $E_c + U = E_0$

Or $E_c \geq 0$. On en déduit $U \leq \Delta E + U_{min} = E_0$

soit $U \leq \Delta E - \dfrac{\alpha a^4}{4}$ $\qquad x_1$ et x_2 / $U(x_{1 ou 2}) = E$

La zone permise de variation de x est donc du type $[x_1, x_2]$ avec x_1 et x_2 du même signe (positif si la position d'équilibre initial était $+a$, négatif si elle était $-a$)

Le plan des atomes d'hydrogène oscille donc autour d'une des positions $x = \pm a$ en restant du même côté de l'azote N.

ⓑ Si $\Delta E > \dfrac{\alpha a^4}{4}$, l'énergie du système est :

$E_0' = \Delta E + U_{min} = \Delta E - \dfrac{\alpha a^4}{4} > 0$

Or $E_0' = E_c + U$ et $E_c \geq 0$ Donc $U \leq E_0' = \Delta E - \dfrac{\alpha a^4}{4}$

La zone permise de variation de x est donc du type $[x_1', x_2']$ avec x_1' et x_2' de signe contraire (cf figure du 2))

Le plan des atomes d'hydrogène oscille de part et d'autre de l'atome d'azote de façon symétrique.

B 1) L'énergie potentielle dont dérive $\vec{F}$ est telle que $\delta W(\vec{F}) = -dU$:

$\vec{F} \cdot \vec{dr} = -dU \quad . \quad F_r(r)\, dr = -dU$

$2\dfrac{U_0}{a}\left(\dfrac{a^3}{r^3} - \dfrac{a^2}{r^2}\right) dr = -dU \quad : \quad \dfrac{dU}{dr} = -2\dfrac{U_0}{a}\left(\dfrac{a^3}{r^3} - \dfrac{a^2}{r^2}\right)$

$U(r) = -\dfrac{2U_0}{a}\left[a^3\left(\dfrac{-1}{2r^2}\right) - a^2\left(-\dfrac{1}{r}\right)\right] + b = U_0\left(\dfrac{a^2}{r^2} - 2\dfrac{a}{r}\right) + b$

On suppose $\lim\limits_{r \to +\infty} U(r) = 0$: on déduit $b = 0$

$\boxed{U(r) = U_0\left(\dfrac{a^2}{r^2} - 2\dfrac{a}{r}\right)}$

2) L'énergie totale E est une constante du mouvement puisque la seule force exercée sur la particule dérive d'une énergie potentielle.