Maths L1 : fonctions usuelles et dérivées

1. Puits d'énergie d'interaction double

a) $f'(x) = 4x^3 - 4x$

b) $f'(x) = 0 \Leftrightarrow 4x(x^2-1) = 0$

$\Leftrightarrow x = 0$ ou $x = 1$ ou $x = -1$

c) $f''(x) = 12x^2 - 4$

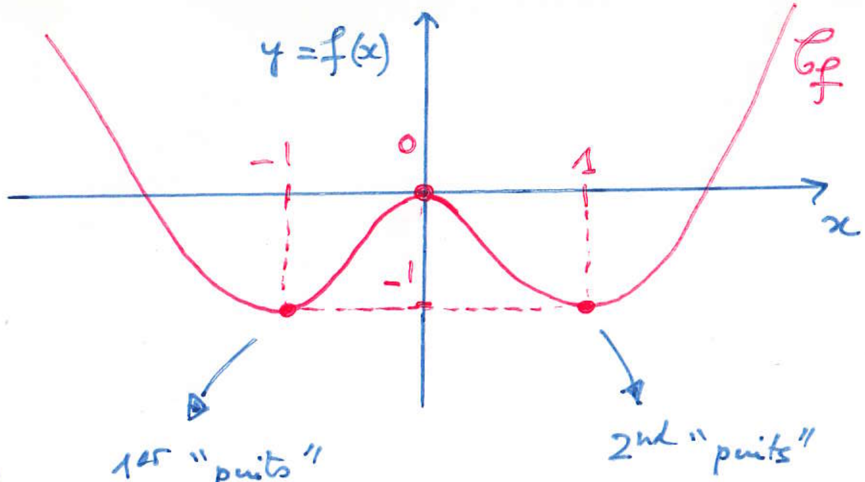
d) $f''(0) = -4 < 0 \rightarrow$ $x=0$ est un point d'équilibre instable

$f''(1) = f''(-1) = 8 > 0 \rightarrow$ $x = 1$ et $x=-1$ sont des points d'équilibre stables.

e) $f'(x) = 4x(x+1)(x-1) \leftarrow$ d'après 1. a.

x	$-\infty$		-1		0		$+1$		$+\infty$
$4x$		$-$	|	$-$	0	$+$	|	$+$	
$x+1$		$-$	0	$+$	|	$+$	|	$+$	
$x-1$		$-$	|	$-$	|	$-$	0	$+$	
$f'(x)$		$-$	0	$+$	0	$-$	0	$+$	
f	$+\infty$	$\searrow$	-1	$\nearrow$	0	$\searrow$	-1	$\nearrow$	$+\infty$

f)



g) $\lambda = 1$ et $k = 1$

h) $V'(x) = 4\lambda x^3 - 4kx = 0 \Leftrightarrow x = 0$ ou $x = \sqrt{\frac{k}{\lambda}}$ ou $x = -\sqrt{\frac{k}{\lambda}}$

$= 4x\lambda\left(x^2 - \frac{k}{\lambda}\right)$

Comme $V''(x) = 12\lambda x^2 - 4k$ il vient $V''(0) = -4k < 0 \rightarrow$ instable

$V''(\sqrt{k/\lambda}) = V''(-\sqrt{k/\lambda})$

$= 12k - 4k$

$= 8k > 0 \rightarrow$ stable

Ainsi $\boxed{x_0 = \sqrt{\frac{k}{\lambda}}}$

i) $W = V(0) - V(x_0) = -\lambda x_0^4 + 2kx_0^2 = -\lambda\left(\frac{k}{\lambda}\right)^2 + 2k \cdot \frac{k}{\lambda} = \frac{k^2}{\lambda}$

j) $V(x) = \lambda x^4 - 2kx^2$ avec $W = \lambda \cdot \frac{k^2}{\lambda^2} = \lambda x_0^4$

de sorte que $\boxed{\lambda = \frac{W}{x_0^4}}$, $x_0^2 = \frac{k}{\lambda} \Rightarrow \boxed{k = \frac{W}{x_0^2}}$, et

$$V(x) = \frac{W}{x_0^4}x^4 - \frac{2W}{x_0^2}x^2 = \boxed{W\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\left[\left(\frac{x}{x_0}\right)^2 - 2\right] = V(x)}$$

2. Cinétiques chimiques d'ordre 1 et 2

a) • $f(t) = e^{-2t}$. On vérifie que $f(0) = 1$.

De plus $f'(t) = -2 \times e^{-2t} = -2f(t)$

donc e^{-2t} est bien la solution cherchée.

• $f'(t) = -2\underbrace{f(t)}_{>0}$ donc f décroît avec le temps, ce qui est cohérent puisque il s'agit de la concentration d'un réactif.

b) $f(t) = f(0)\, e^{-kt}$. On vérifie bien que $f(0) = f(0)\, e^{-0} = f(0)$!

De plus $f'(t) = f(0) \times (-k)\, e^{-kt} = -k f(t)$

donc $f(0)\, e^{-kt}$ est bien la solution cherchée.

c) $f(1) = e^{-k} \rightarrow$ Plus k augmente plus $f(1)$ est petit.

k décrit donc la vitesse avec laquelle la réaction se produit. Si $k=0$ alors $f(1) = 1 = f(0) \rightarrow$ pas de réaction !

d) $\ln f(t) = \ln f(0) + \ln e^{-kt} = \ln f(0) - kt \rightarrow$ fonction affine de t donc la représentation est une droite de pente $-k$.

Pour vérifier qu'une réaction a une cinétique d'ordre 1, il faut tracer $g(t) = \ln f(t)$ en fonction de t et voir si l'on obtient une droite.

Si c'est le cas, la pente $\dfrac{g(t_B) - g(t_A)}{t_B - t_A}$ donne la valeur de $-k$, où t_A et t_B sont deux instants différents.

e) $f(t) = \dfrac{f(0)}{1 + f(0)kt}$. On vérifie que $f(0) = \dfrac{f(0)}{1 + 0 \times f(0)} = f(0)$!

De plus $f'(t) = \dfrac{f(0) \times (-1) \times f(0)k}{(1 + f(0)kt)^2}$

$= -k \dfrac{f(0)^2}{(1 + f(0)kt)^2} = \underbrace{-k f^2(t)}_{<0}$!

donc $f(t)$ décroît avec t, ce qui est cohérent avec le fait que $f(t)$ décrit la concentration d'un réactif à l'instant t.

f) $\dfrac{1}{f(t)} = \dfrac{1}{f(0)} + kt \rightarrow$ fonction affine dont la représentation est une droite de pente k.

Pour vérifier qu'une réaction est d'ordre deux il faut donc tracer $\dfrac{1}{f(t)}$ en fonction de t et voir si l'on obtient une droite. Si c'est le cas, sa pente donne la valeur de k.

3. Loi d'Arrhénius

a) $f(1/T) = 2e^{-\frac{3T}{2}} \longrightarrow \ln f(1/T) = \underbrace{\ln 2 - \frac{3}{2}T}_{\text{fonction affine}}$

dont la représentation est une droite de pente $-\frac{3}{2}$ et d'ordonnée à l'origine $\ln 2$.

b) $k(1/T) = A e^{-E_a T/R} \longrightarrow \ln k(1/T) = \underbrace{\ln A - \frac{E_a}{R}T}_{\text{fonction affine}}$

représentée par une droite de pente $\alpha = -\frac{E_a}{R}$ et d'ordonnée à l'origine $\ln A = \beta$.

Détermination expérimentale de E_a et A :

1) On choisit des valeurs de température $T_0, T_1, T_2, \ldots$
2) On mesure k pour les températures $\frac{1}{T_0}, \frac{1}{T_1}, \frac{1}{T_2}$, etc...
3) On trace $\ln k(1/T)$ en fonction de T
4) On détermine la pente α et l'ordonnée à l'origine β de la droite obtenue
5) On obtient alors $E_a = -R\alpha$ et $A = e^{\beta}$.