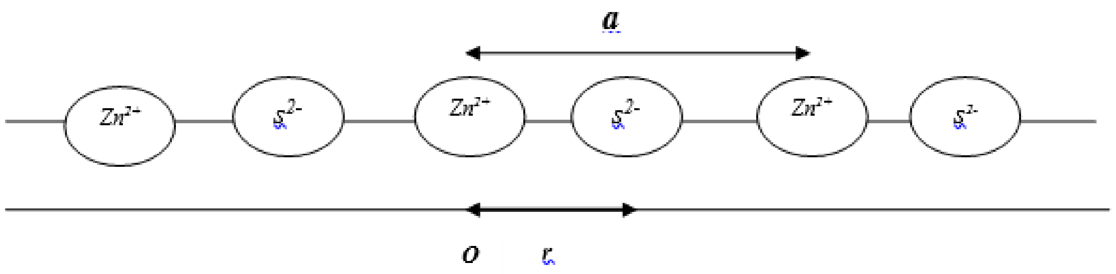
TD №1

Exercice 1 :

Soit une chaîne linéaire de 2N ions équidistants de a et de charges alternativement égales à $\pm\boldsymbol{q}$. Soit $\boldsymbol{r_p}$ la distance entre l'ion placé à l'origine et l'ion d'indice p. On pose : $\boldsymbol{rp = p \times r}$

$\boldsymbol{r}$ étant la distance entre l'ion placé en O et ses proches voisins (voir figure ci-dessous).



1) Donner l'expression de l'énergie potentielle électrostatique $\boldsymbol{U}$p(r) de l'ion placé à l'origine O en fonction de q, $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{et\ \varepsilon 0}$.

2) Donner l'expression de l'énergie de répulsion $\boldsymbol{UR}$ $(\boldsymbol{r})$, sachant que l'énergie de répulsion entre-deux ions est de la forme (potentiel de Born-Landé).

3) Donner l'expression de l'énergie totale des 2N ions de la chaine.

4) Soit $\boldsymbol{r0}$ la distance à l'équilibre entre proches voisins. Déterminer l'expression de A.

5) Déduire l'expression simplifiée de l'énergie totale en fonction de $\boldsymbol{r0}$, e, $\boldsymbol{\varepsilon 0}$ et p.

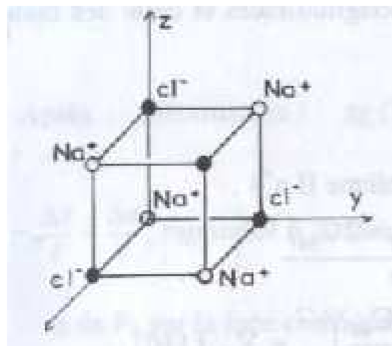
6) Les ions Zn2+ et S2- adoptent la configuration du néon, dans ce cas p = 8. Calculer numériquement la valeur de l'énergie totale pour une mole à l'équilibre. On donne a_{ZnS}=5.4 Å

Exercice 2 :

Un cristal de chlorure de sodium est représenté par un édifice cubique régulier (fig5) au sommets duquel son alternativement situés des ions Na^+ et Cl^- de charge +q et –q. Les positions sont répétées par rapport aux axes Ox, Oy, Oz parallèles aux arrêtes du cube élémentaire. A l'origine l'ion O est situé un ion Na^+. La plus petite distance entre deux ions Na^+ et Cl^- est notée μr. La kilomole de NaCl contient N molécules soit 2N ions. Q=1,6.10^{-19} C

1)Pour évaluer le potentiel électrostatique V(O) crée en O par les ions du réseau. On tient compte de l'effet des ions contenus dans une sphère centrée en O du rayon r. On pose $U_p = \frac{4\pi\varepsilon_0\, rV(O)}{q}$

Calculer la valeur de Up en fonction de μ^2pour $1<\mu^2<12$.



2) On remarquera que la méthode précédente ne semble par permettre un calcul rapide de V(O), on utilise donc la méthode suivante (due à Evjen) qui tient compte du seule effet des ions ou du fractions d'ions contenus à l'intérieur d'un cube centré en O dont les arrêtes de longueur 2μr (μ entier

positif) sont parallèles à Ox, Oy, Oz : les ions sont supposés sphériques centrés sur leurs sites respectifs et d'électrisation uniforme.
Calculer la valeur de U_p pour μ=1 et pour μ=2. Quel est les conventions faites la charge totale et des fractions d'ions contenus dans un cube d'arête 2μr pour μ=1 et μ=2 ?.
3) Donnez l'expression de l'énergie électrostatique d'interaction Ur de tous les ions par kilomole. On veillera à ne pas compter deux fois l'énergie mutuelle de deux ions .$\alpha = 1.7476$
4) L'énergie correspond à des forces électrostatiques qui tendent à rapprocher les ions les uns des autres ; à ces forces s'opposent des forces de répulsion nécessaires au maintien de la stabilité du cristal. On admet que ces forces de répulsion s'exercent seulement entre ions Na+ e Cl- premiers voisins et que l'énergie mutuelle de répulsion d'un couple d'ions Na^+ et Cl^- peu se représenter par l'expression u_2= $\lambda e^{\frac{-r}{\rho}}$.
Donner l'expression de l'énergie totale de U_2 de l'ensemble des ions (par kilomole sous la forme U_2= $BNe^{\frac{-r}{\rho}}$
5) L'energie de cohesion du crisal U est representée par l'energie totale du réseau, Calculer les valeurs des constants λ et ρ à l'aide des formules suivanes : P= $-\frac{dU}{dV}$ et $1/\beta$ = $-\frac{VdP}{dV}$ .Pour r=r_0 on a P=0.Expliquer la relaion à parir duquelle on peut calculer r_0/ρ en foncion de $1/\beta$ et des aures données de l'exercice puis une relation permettant de calculer λ.
R_0=2.814.10^{-10}m, β=26.10^{-11}(Nm^{-2}

Exercice 3 :

L'énergie potentielle d'attraction entre deux atomes de gaz rare (Van Der Waals), distant de r est de la forme A/r6 alors que l'énergie de répulsion due au recouvrement des orbitales électroniques est de la forme B/r12, or l'énergie potentielle de Lenard-Jones s'exprime habituellement sous la forme Ep= 4ε[$(\sigma/r)^{12}$- $(\sigma/r)^6$]
a) Exprimant A et B en fonction de ε et σ, montrer que les deux expressions sont équivalentes.
b) Dégager le sens physique des paramètres ε et σ en exprimant la distance r0 séparant deux atomes à l'équilibres en fonction de σ ainsi que l'énergie de cohésion qui en résulte en fonction de ε.
c)Le réseau de Bravais des cristaux de gaz rares est cfc de maille à=4.46Å(Ne), a=5.31Å(Ar) ; a= 5.64Å(Kr) ; a=6.13Å(Xe) alors que leur énergie de cohésion est respectivement de 20meV (Ne, 20meV(Ar),116meV(Kr) ;170mev(Xe).En déduire les valeurs numériques de σ .