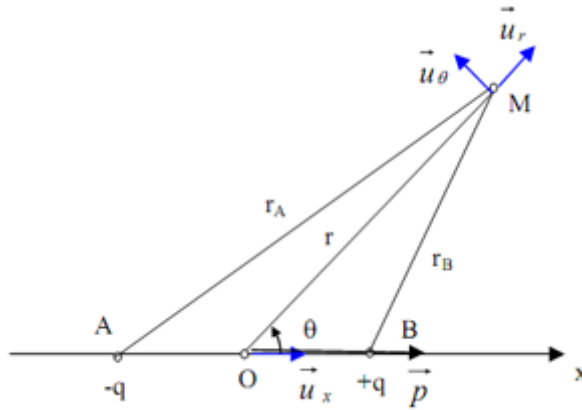


# Forces de Van Der Walls

On se propose dans ce sujet d'expliquer par un modèle simple les interaction entre dipôles.

## I- Champ électrique créé par un dipôle électrostatique

On considère le dipôle électrostatique constitué d'une  $+q$  en  $B$  et d'une  $-q$  en  $A$ . On note  $O$  le centre du système de repérage sphérique. Soit  $\vec{p} = q\vec{AB}$  le moment dipolaire associé :



1) Donner l'expression du potentiel électrique total en fonction de  $r_a$  et  $r_b$  (pour chaque charge on prendra un potentiel nul à l'infini).

$$V = \frac{q}{(4\pi\epsilon_0)} \left( \frac{1}{r_B} - \frac{1}{r_A} \right)$$

2) On note  $d = AB$  et on se place dans le cas où  $d \ll r$ , en déduire que  $V(M) \approx \frac{pcos\theta}{(4\pi\epsilon_0 r^2)}$

En négligeant, les infiniments petits du second ordre en  $\frac{d}{r}$  :

$$r_A \approx r(1 + d/r \cos\theta) \text{ et } r_B \approx r(1 - d/r \cos\theta) \text{ Donc } V(M) \approx \frac{pcos\theta}{(4\pi\epsilon_0 r^2)}$$

3) En déduire les deux composantes du champ électrique  $\vec{E}$ .

$$\vec{E} = \vec{\text{grad}}(V)$$

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial V}{\partial r} \\ -\frac{\partial V}{r \partial \theta} \\ 0 \end{pmatrix}$$

/ 2 pages \

4) Interpréter les situations pour lesquelles  $\theta = 0$  et  $\theta = \frac{\pi}{2}$

En  $\theta = 0$  on a une infinité de plans de symétrie qui imposent un champ suivant l'axe  $x$ .

En  $\theta = \frac{\pi}{2}$  on a un plan d'antisymétrie qui impose un champ suivant l'axe  $x$ .

Dans la suite on utilisera les variables globales suivantes :

Entrée [53]:

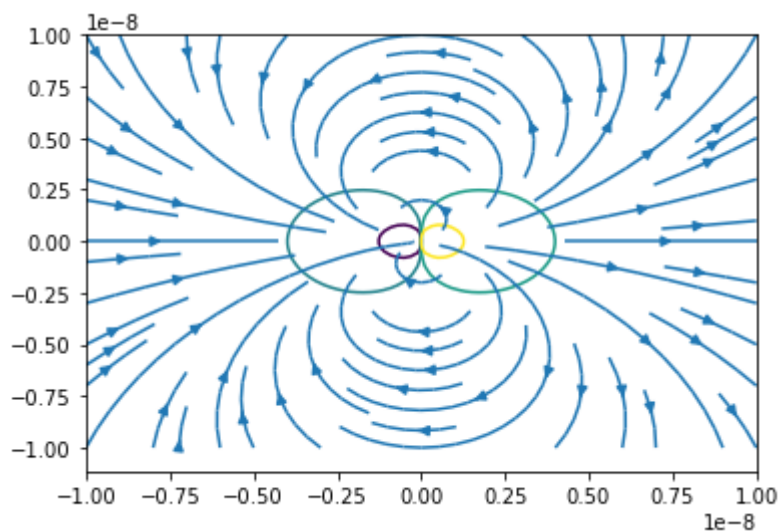
```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 q = 0.1*1.6*10**(-19) #10% de la charge élémentaire délocalisé
4 AB = 10**-9 # nm
5 p = q*AB
6 k = 4*np.pi*8*10**-12
7 x = np.linspace(-10,10,100)*AB #colonnes <=> abscisse
8 y = np.linspace(-10,10,100)*AB #lignes <=> ordonnée
9 X,Y = np.meshgrid(x,y)
```

5) Obtenir le tracé de quelques :

- équipotentielles
- ligne de champ (on rappelle que  $E_y, E_x = \text{np.gradient}(V)$ )

Entrée [54]:

```
1 r = (X**2+Y**2)**0.5
2 cos_theta = X/r
3 V = p*cos_theta/(k*r**2)
4 scale = [-10**-1, -10**-2, 10**-2, 10**-1]
5 plt.contour(X,Y,V,scale)
6 Ey,Ex = np.gradient(V)
7 Ex,Ey = -Ex, -Ey
8 plt.streamplot(X,Y,Ex,Ey,density=0.7) #
9 plt.show()
```



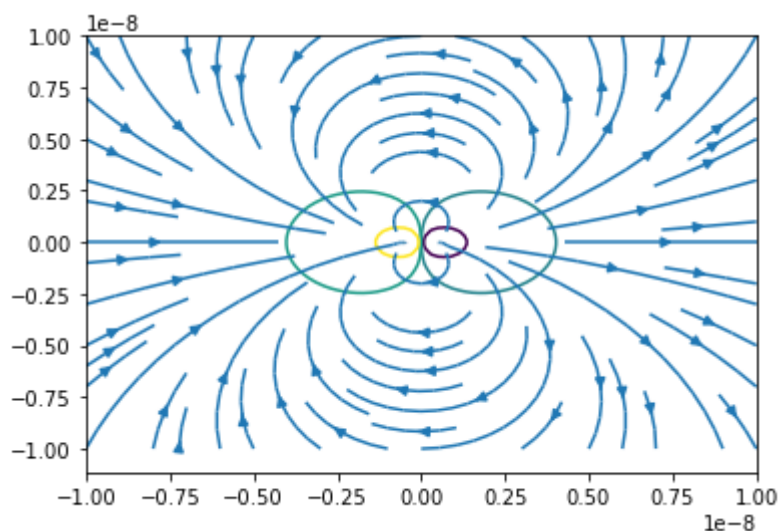
A titre de comparaison, on peut obtenir les mêmes résultats en travaillant avec le champ de Coulomb:

Entrée [56]:

```

1 def E_dipole(xp1, yp1, xp2, yp2, xm, ym) :
2     PM1=( (xm-xp1)**2+(ym-yp1)**2)**0.5
3     Ex1=-q*(xm-xp1)/(k*PM1**3)
4     Ey1=-q*(ym-yp1)/(k*PM1**3)
5     PM2=( (xm-xp2)**2+(ym-yp2)**2)**0.5
6     Ex2=q*(xm-xp2)/(k*PM2**3)
7     Ey2=q*(ym-yp2)/(k*PM2**3)
8     Ex=Ex1+Ex2
9     Ey=Ey1+Ey2
10    V=q/(k*PM1)-q/(k*PM2)
11    return Ex, Ey, V
12 Ex, Ey, V=E_dipole(-AB/2, 0, AB/2, 0, X, Y)
13 plt.contour(X, Y, V, scale)
14 plt.streamplot(X, Y, Ex, Ey, density=0.7) #
15 plt.show()

```



## II- Interaction entre deux dipôles

6) On considère un second dipôle identique au premier, situé sur l'axe Ox à une distance  $x \gg d$ , montrer que la force électrique s'appliquant sur le dipôle est donnée par

$$\vec{f} = \vec{\text{grad}}(\vec{p} \cdot \vec{E})$$

On se place en  $\theta = 0$  donc :

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} \frac{p}{2\pi\epsilon_0 r^3} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{f} = -q\vec{E}(x) + q\vec{E}(x+d) = qd \frac{\partial \vec{E}}{\partial x} \vec{u}_x$$

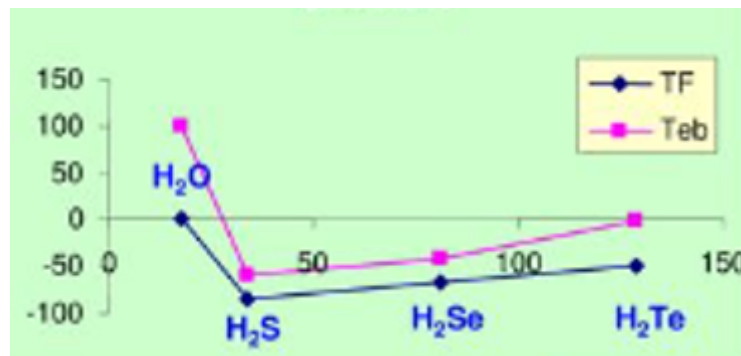
$$\vec{f} = \vec{p} \cdot \vec{\text{grad}} E \vec{u}_x$$

$$\vec{r} \quad \vec{r} \quad \vec{r} \quad \vec{r}$$

7) Cette force est-elle attractive ou répulsive ?

Comme le champ décroît avec la distance, cette force est attractive. On retrouve que les interactions dipôle-dipôle ont tendance à rapprocher les molécules entre elles. Ces interactions nécessitent un apport d'énergie de l'ordre de 10kJ/mol pour être vaincues. Elles peuvent expliquer des évolutions de températures de changement d'état

8) Expliquer les évolutions des températures de changement d'état du tableau suivant :



Plusieurs observations :

- la polarisation augmente avec la taille des atomes. On comprend donc l'augmentation des températures de changement d'état lorsqu'on descend dans le tableau périodique
- l'accident observé entre H<sub>2</sub>O et H<sub>2</sub>S s'explique la présence de liaison hydrogène