TD №1

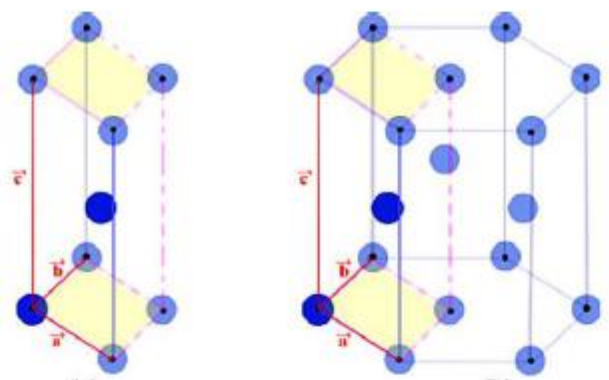
Exercice 1 :

On considère un réseau hexagonal compact (h.c), calculer :

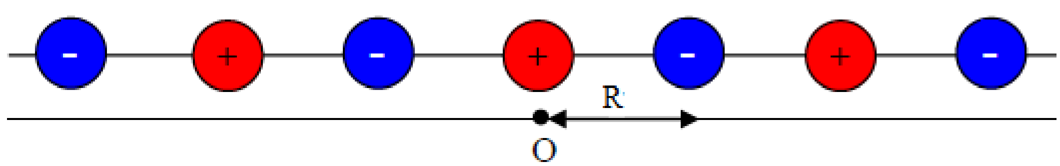
La multiplicité

La coordinence

La compacité



Exercice 2 :



Soit une ligne d'ions équidistants de R et de charges alternativement égales à $\pm q$.
1) Donner l'expression de l'énergie potentielle électrostatique U_p de l'ion placé à l'origine dans le champ de tous les autres ions.
2) Donner l'expression l'énergie de répulsion U_r qu'exerce sur cet ion (l'ion placé à l'origine) ses deux proches voisins. (En foncions de R, A, P et proches voisins)
3) Etablir l'expression de l'énergie totale des 2N ions de la chaine.
4) Déduire à l'équilibre l'expression littérale de A, ainsi que l'expression simplifiée de l'énergie totale.

Exercice 3:
L'édifice cristallin de CsCl est représenté sur la figure.

La constante de Madelung α de ce cristal en considérant les charges et fractions contenues dans un cube d'arrête 2a est centré dans un ion Cs^+ est $\alpha = 3.065$ avec a : arrête de la maille élémentaire.

1) Donner l'expression du potentiel en O : V(O)

2) Exprimer en fonction de α et la distance entre premiers voisin r_0, l'énergie potentielle d'interaction U_p des 2N ions d'une kilomole et évaluer numériquement (en eV) cette énergie rapportée à une molécule avec $r_0 = 3.57$Å.

3) L'énergie de répulsion U_r entre 2 premiers voisins peut être représentée par l'expression $U_r = \lambda e^{-r/\rho}$.

4) Donner l'expression de l'énergie de répulsion Ur pour l'ensemble des 2N ions puis l'expression de l'énergie (de cohésion) totale U= Ur+Up.

5) La constante de Madelung peut être calculée, l'énergie de cohésion et r_0 son accessibles à l'expérience : à l'aide de la relation précédente e d'une expression qui s'en déduit et qui traduit l'équilibre du cristal, établir une relation permettant d'évaluer le paramètre ρ. $U(r_0) = -155.1$ kcal/mole, Calculer ρ.

Exercice 4 :

L'énergie potentielle d'attraction entre deux atomes de gaz rare (Van Der Waals), distant de r est de la forme A/r^6 alors que l'énergie de répulsion due au recouvrement des orbitales électroniques est de la forme B/r^{12}, or l'énergie potentielle de Lenard-Jones s'exprime habituellement sous la forme $E_p = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$

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 r_0 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 .