7 Dipôle électrostatique

1 Introduction

1.1 La molécule d'eau

La figure 7.1 représente la configuration géométrique d'une molécule d'eau H_2O. Les propriétés des atomes d'hydrogène et d'oxygène font que le nuage électronique de chaque liaison covalente OH est déplacé en moyenne vers l'atome d'oxygène.

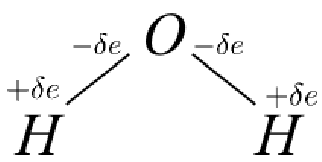

FIGURE 7.1: Configuration géométrique d'une molécule d'eau H_2O

Tout se passe comme si l'atome d'oxygène acquierait une petite charge négative $-2\delta e$ alors que les atomes d'hydrogène avaient chacun une petite charge positive δe. On dit que chaque liaison OH est une liaison polarisée.

Cette propriété est très importante dans la nature, un grand nombre d'interactions sont des interactions entre molécules polarisées, chacune restant neutre globalement.

1.2 Définition

Modélisation d'une molécule polarisée.

Ensemble de deux charges ponctuelles de charges opposées = **dipôle électrostatique**

Si la distance entre les deux charges reste constante, le dipôle est **rigide**.

On verra qu'une notion très utile, qui caractérise le dipôle, est la notion de **moment dipolaire** $\vec{p}$ qui est défini par

$$\vec{p} = q.\overrightarrow{AB} \tag{7.1}$$

où la charge négative $-q$ est en A et la charge positive $+q$ en B.

Convention : moment dirigé de la charge négative $-q$ vers la charge positive $+q$.

ATTENTION : Cette convention est la convention inverse de celle utilisée en chimie (à vérifier auprès des chimistes)

1.3 Interactions dipolaires

Deux molécules dipolaires interagissent de la façon suivante :
– le moment dipolaire d'une molécule crée un champ au voisinage de l'autre molécule
– le moment dipolaire de la deuxième molécule interagit avec ce champ
– on peut bien sûr considérer l'action simultanée de chaque moment dipolaire sur l'autre. Il y a bien interaction.

Recherche personnelle

Interactions de Van der Waals dans un gaz

2 Potentiel et champ créés à grande distance

La figure 7.2 fixe les notations utilisées dans tous ce qui suit. Si on se place en 3 dimensions, l'axe du doublet

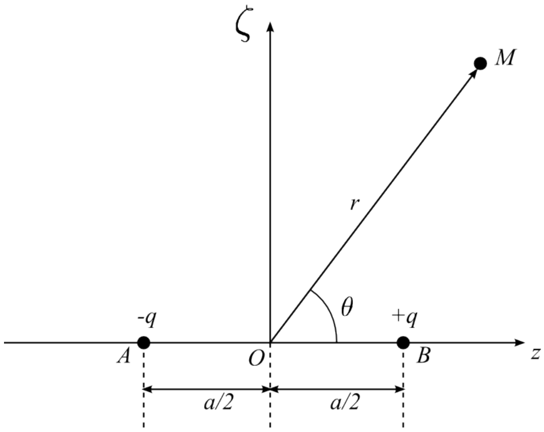

Figure 7.2: Notations utilisées pour les calculs de champ et potentiel dans le cas du dipôle

de charges représente un axe de symétrie cylindrique. Le plan méridien contenant l'axe Oz et le point M en lequel on cherche le potentiel et le champ est également un plan de symétrie. Le champ électrique suivra cette symétrie et sera contenu dans le plan méridien.

2.1 Potentiel dipolaire

On peut calculer le potentiel en un point M quelconque en utilisant le principe de superposition. Ce potentiel sera la somme des potentiels créés par chacune des charges :

$$V(M) = \frac{+q}{4\pi\epsilon_0.BM} + \frac{-q}{4\pi\epsilon_0.AM} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{BM} - \frac{1}{AM}\right) \tag{7.2}$$

L'expression de AM et BM en fonction des données du problème, par exemple r, θ et a se calcule :

$$\begin{aligned} AM &= \left\|\overrightarrow{AO} + \overrightarrow{OM}\right\| \\ &= \sqrt{\left(\overrightarrow{AO} + \overrightarrow{OM}\right)^2} \\ &= \sqrt{\overrightarrow{AO}^2 + \overrightarrow{OM}^2 + 2\overrightarrow{AO}.\overrightarrow{OM}} \\ &= \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + r^2 + 2\left(\frac{a}{2}\right) r.\cos(\theta)} \end{aligned}$$

pour BM, on obtient presque le même résultat, mais le vecteur $\overrightarrow{BO}$ étant dirigé vers les z négatifs, le produit scalaire négatif. On obtient (noter le signe "$-$" dans l'expression sous la racine) :

$$BM = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + r^2 - 2\left(\frac{a}{2}\right) r.\cos(\theta)}$$

Ce qui donne une expression assez compliquée de V(M) :

$$\begin{aligned} V(M) &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{\left(\left(\frac{a}{2}\right)^2 + r^2 - 2\left(\frac{a}{2}\right) r.\cos(\theta)\right)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\left(\left(\frac{a}{2}\right)^2 + r^2 + 2\left(\frac{a}{2}\right) r.\cos(\theta)\right)^{\frac{1}{2}}}\right) \\ &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left(\left(\left(\frac{a}{2}\right)^2 + r^2 - 2\left(\frac{a}{2}\right) r.\cos(\theta)\right)^{-\frac{1}{2}} - \left(\left(\frac{a}{2}\right)^2 + r^2 + 2\left(\frac{a}{2}\right) r.\cos(\theta)\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \end{aligned}$$

Mais ceci est l'expression complète, sans approximation. Si on veut tenir compte du fait qu'on se place loin du dipôle, c'est à dire pour $r \gg a$, on peut faire un développement au premier ordre qui donne un réultat particulièrement simple. Dévelopons $\frac{1}{AM}$ au premier ordre. On connaît le développement de $(1+x)^\alpha$. Il est facile de transformer $\frac{1}{AM}$ pour obtenir une expression similaire, il suffit de mettre r^2 en facteur :

$$\begin{aligned} \frac{1}{AM} &= \left(\left(\frac{a}{2}\right)^2 + r^2 + 2\left(\frac{a}{2}\right) r.\cos(\theta)\right)^{-\frac{1}{2}} \\ &= r^{-1}\left(1 + \left(\frac{a}{2r}\right)^2 + 2\left(\frac{a}{2r}\right).\cos(\theta)\right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Puisqu'on a $r \gg a$, le rapport $\frac{\left(\frac{a}{2}\right)}{r} = \frac{a}{2r}$ est très petit. Donc on a bien une expression du type $(1+x)^\alpha$ avec $\alpha = -1/2$ et $x =$l'expression qui suit le "1+...". Le développement donne (rappel : $(1+x)^\alpha = 1 + \alpha x + O(x^2)$) :

$$\frac{1}{AM} \approx r^{-1}\left(1 - \frac{1}{2}\left(\frac{a}{2r}\right)^2 - \frac{1}{2}2\left(\frac{a}{2r}\right).\cos(\theta)\right)$$

de même pour $\frac{1}{BM}$ (faites le calcul complet vous-mêmes...)

$$\frac{1}{BM} \approx r^{-1}\left(1 - \frac{1}{2}\left(\frac{a}{2r}\right)^2 + \frac{1}{2}2\left(\frac{a}{2r}\right).\cos(\theta)\right)$$

Reste à calculer le potentiel $V(M)$ d'après l'équation 7.2. On voit que tous les termes vont se compenser sauf deux, ceux en $\cos\theta$. Tous calculs faits, on trouve :

$$V(M) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{BM} - \frac{1}{AM}\right) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{a}{r^2}\right).\cos(\theta) \tag{7.3}$$

On remarque que le produit qa est la norme du moment dipolaire $\vec{p}$.

Donc le potentiel électrostatique $V(M)$ du dipôle peut se réécrire en fonction du moment dipolaire $p = \|\vec{p}\|$:

$$V(M) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{p\cos(\theta)}{r^2} \tag{7.4}$$

Ce potentiel décroit en $1/r^2$, plus rapidement que le potentiel d'une charge seule, qui lui décroit en $1/r$.

2.2 Champ dipolaire

Le champ se calcule à partir du potentiel. On utilise la relation champ-potentiel $\vec{E}(M) = -\overrightarrow{\text{grad}}\,V(M)$. Comme la symétrie du système est cylindrique, on peut écrire le gradient dans ces coordonnées (équation 2.8) :

$$\vec{E}(M) = -\overrightarrow{\text{grad}}\,V(M) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial V}{\partial r} \\ -\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial \theta} \\ -\frac{\partial V}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2p\cos\theta}{r^3} \\ +\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{p\sin\theta}{r^3} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{7.5}$$

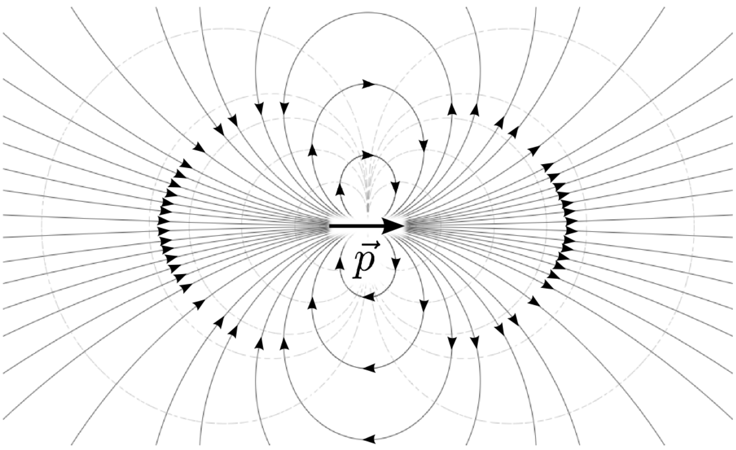

FIGURE 7.3: Lignes de champ (lignes foncées) et équipotentielles (lignes claires) dans le cas d'un dipôle de moment dipolaire $\vec{p}$

3 Action d'un champ sur un dipôle

3.1 Dipôle rigide dans un champ uniforme

Nous allons supposer que le dipôle est rigide, mais il peut se déplacer et tourner autour d'un axe. Dans un champ électrique extérieur $\vec{E}$ uniforme, la somme des forces qui s'exercent sur le système des deux charges est nul ($+q\vec{E}$ sur la charge positive, $-q\vec{E}$ sur la charge négative).

Il reste un couple dont le moment est la somme des moments des deux forces appliquées à chacune des deux charges (figure 7.4).

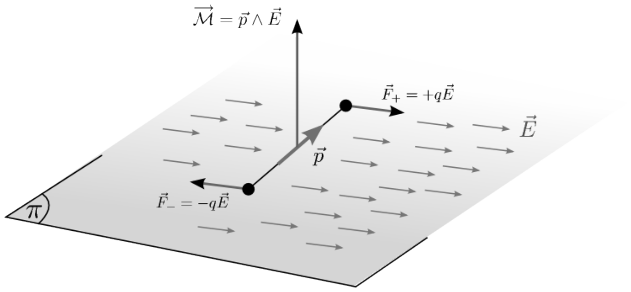

FIGURE 7.4: Moment exercé sur un dipôle dans un champ électrostatique extérieur uniforme

Appelons A le point où est située la charge $-q$ et B celui où est située $+q$. Le moment s'écrit :

$$\begin{aligned}
\vec{\mathcal{M}} &= \overrightarrow{OB} \wedge (+q\vec{E}) + \overrightarrow{OA} \wedge (-q\vec{E}) \\
&= (\overrightarrow{OB} - \overrightarrow{OA}) \wedge (q\vec{E}) \\
&= (\overrightarrow{AO} - \overrightarrow{OB}) \wedge (q\vec{E}) \\
&= \overrightarrow{AB} \wedge (q\vec{E})
\end{aligned}$$

Dans la dernière égalité, on reconnait $\vec{p} = q\overrightarrow{AB}$ le moment dipolaire. Le moment total exercé sur le dipôle est donc :

$$\vec{\mathcal{M}} = \vec{p} \wedge \vec{E} \tag{7.6}$$

Ce moment tend à orienter le moment dipolaire électrique dans la direction et le sens du champ électrique extérieur appliqué $\rightarrow$ orientation des petites parcelles de limaille de fer dans le sens du champ.

3.2 Dipôle rigide dans un champ non uniforme

Deux actions sur le dipôle : d'abord rotation jusqu'à aligner le dipôle selon la direction du champ puis la force sur l'une des charges est plus importante que sur l'autre (champ non uniforme) $\Rightarrow$ le dipôle est entraîné vers les régions de champ fort.

Expression de l'action d'un champ, force totale exercée sur le dipôle :

$$\vec{F} = -\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,(\vec{p}.\vec{E}) \tag{7.7}$$

3.3 Energie d'interaction champ-dipôle

Travail nécessaire pour ammener un dipôle rigide (+q,-q) de l'infini vers une point donné situé dans un champ extérieur $\vec{E}$ (variations de $\vec{E}$ faibles à l'échelle du dipôle) :

$$W = q\,(V(B) - V(A)) \tag{7.8}$$

AB peut être considéré comme une très petite distance → la différence $(V(B) - V(A))$ est une différentielle dV. Si on l'écrit en fonction du champ (on se rappelle la relation $dV = -\vec{E}.\vec{dl}$), on a alors

$$W = q\,(V(B) - V(A)) = q\left(-\vec{E}.\overrightarrow{AB}\right) = -q\overrightarrow{AB}.\vec{E} = -\vec{p}.\vec{E} \tag{7.9}$$

Ce travail est également l'énergie qu'il faut fournir pour "arracher" le dipôle au champ. C'est ce que nous appelerons l'énergie d'interaction entre le champ et le dipôle :

$$\mathcal{E} = -\vec{p}.\vec{E} \tag{7.10}$$