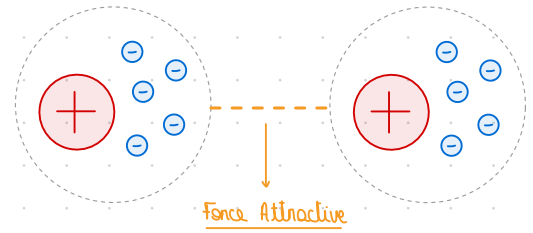


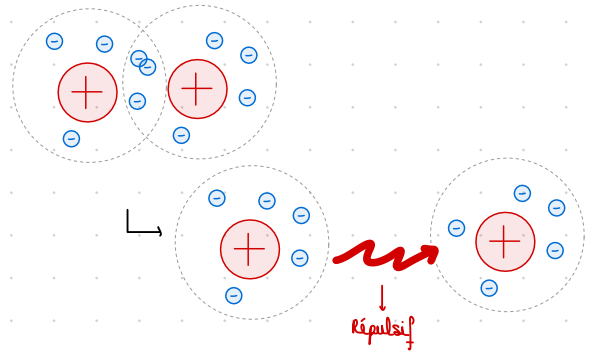
Potentiel de Lennard-Jones → permet de décrire comment les particules s'attirent ou se repoussent en fonctⁿ de la distance qui les séparent.
 Bien que les atomes soient neutres électriquement, ils interagissent quand même entre eux grâce à deux principes :

• Force attractive → force de dispersion de London :
 créatⁿ de dipôles instantanés car les électrons ne sont ni fixes ni symétriques autour du noyau.

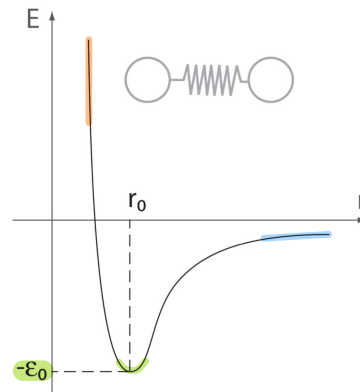
Force d'attraction entre les atomes, modélisée par le terme $2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6$. Plus fort quand atomes proches mais suff. éloignés pour que répulsion ne domine pas.



• Force répulsive → répulsion à courte distance
 si 2 atomes deviennent très proches, leur nuage d'e⁻ se chevauchent. Principe de Pauli entre en jeu : deux électrons ne peuvent pas occuper le même état quantique au même moment ⇒ se traduit par une forte répulsion modélisée par $\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12}$ qui est très grand quand r diminue fortement.



$$E = \varepsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$



- * $r \ll r_0$: répulsion domine ⇒ $E \gg 0$. il faut une énorme quantité d'énergie pour rapprocher les particules !
- * $r \simeq r_0$: état d'équilibre ⇒ $E \simeq -\varepsilon_0$: valeur négative représente un état stable où les particules sont liées l'une à l'autre à la distance d'équilibre. L'énergie étant minimale, c'est là où les particules sont les plus stables et demandent le - d'énergie pour rester en place.
- * $r \gg r_0$: $E \rightarrow 0$: à très grande distance, les particules sont si éloignées qu'elles n'interagissent pratiquement plus.

$$F_{\text{ext}}(r) = -12 \varepsilon_0 \left[\frac{r_0^{12}}{r^{13}} - \frac{r_0^6}{r^7} \right]$$

↳ Force externe à appliquer pour garder 2 atomes à distance $d = r$.

