Titre du cours : Modélisation atomique : un outil fiable et accessible pour interpréter et prédire les propriétés physico-chimiques.

Intervenant : Christian Simon

Résumé et objectifs : La dynamique moléculaire est une méthode de simulation des matériaux qui fournit une image détaillé des mouvements atomiques, et permet donc de calculer de très nombreuses propriétés physico-chimiques. Ceci est d'autant plus vrai que les modèles que cette technique exploite sont devenus véritablement fiables et facilement extensibles, sans nécessiter de calibration expérimentale. Nous montrerons comment sont bâtis ces modèles, et comment les utiliser pour produire des données thermodynamiques, spectroscopiques ou dynamiques.

Pré-requis : Notions de base de thermodynamique.

Mots clés : Dynamique Moléculaire, simulation, polarisabilité, grandeurs thermodynamiques, spectroscopies, propriétés de transport

Plan détaillé :

1. Introduction aux simulations atomiques (~ 10 min).
    - Liens entre théorie, modèles, simulation et expériences.
    - Principe de la simulation par dynamique moléculaire.
    - Rôles possibles de la simulation : prédiction de grandeurs, aide à l'interprétation (prédire et expliquer). Réutilisation de résultats par d'autres techniques (modèles quasi-chimiques, modèles mésoscopiques, génie des procédés)
    - Avantages et inconvénients des divers niveaux de description (quantique, classique, …).
    - Utilisation de la dynamique moléculaire dans d'autres domaines d'application.

2. Les modèles classiques (~40 min)
    - Historique
    - Limites des modèles à charges rigides
    - Modèles polarisables : origine physique, sens des paramètres, établissement des paramètres. Limites actuelles.

- Inventaire des modèles disponibles pour les fluorures, les chlorures et les oxydes. Mélanges de sels.

3. La dynamique moléculaire en pratique (~10 min)
    - Algorithmes de base
    - Paramètres des simulations
    - Puissances de calcul et temps requis

4. Obtention des grandeurs thermodynamiques (~10-15 min)
    - Calculs de structures, relations avec les méthodes de diffusion de rayonnement (XRD, neutrons, EXAFS,…)
    - Solvatation et spéciation, temps de résidence, liens avec la RMN.
    - Energie interne, densité, compressibilité, capacité calorifiques, températures de transitions de phases
    - Tensions de surfaces
    - …

5. Obtention des grandeurs dynamiques (~ 10-15 min)
    - Coefficients de transport : coefficients d'autodiffusion, conductivité électrique, viscosité.
    - Vibrations : spectroscopie IR et Raman, phonons dans les solides.
    - Dynamique hors équilibre : conductivité thermique

6. Vers l'électrochimie (~20 min)
    - Coefficients d'activité : acidité, modification des potentiels électrochimiques
    - Description d'électrodes – structure du liquide au voisinage de l'électrode
    - Théorie de Marcus

7. Evolutions futures de la dynamique moléculaire (~5 min)
Modèles en cours de développement métaux, RTIL, nitrates et carbonates, …, systèmes mésoscopiques, ….