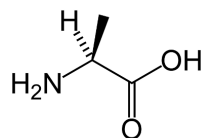


UE 41KM21 - Chimie Physique 2
Interactions Moléculaires - Dynamique Moléculaire

Durée conseillée : 1 heure

Rédiger sur une copie séparée. Aucun document autorisé. Toute réponse doit être justifiée.

Exercice I - (7 points) On considère la molécule de L-alanine :

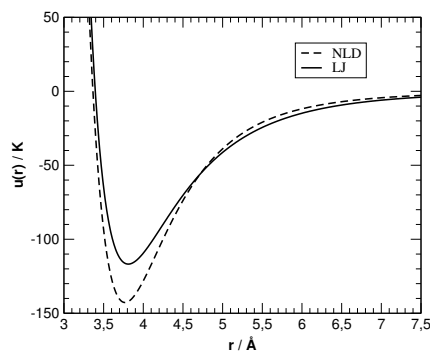


1) Décrire et faire la liste des différents termes d'un champ de force atomistique de type OPLS qui sont nécessaires pour représenter les interactions intramoléculaires et intermoléculaires de cette molécule.

2) Certaines liaisons dans la molécule peuvent être contraintes en dynamique moléculaire : lesquelles et pourquoi ?

Exercice II - (7 points) On considère deux potentiels d'interaction de l'argon, dont l'énergie d'interaction $u(r)$ est représentée sur la figure ci-dessous :

- le potentiel de Lennard-Jones (LJ), dont les paramètres ont été ajustés sur différentes propriétés thermodynamiques de l'argon liquide et vapeur.
- le potentiel NLD, issu de calculs quantiques de deux atomes d'argon à différentes distances (potentiel de force moyenne).



1) Décrire les différents types d'interactions appelées interactions de van der Waals. Quel point commun entre ces types d'interaction permet de les regrouper ? Lesquelles sont absentes dans le cas de l'argon ? Déduire de la figure les paramètres ϵ et σ du potentiel LJ.

2) Pourquoi obtient-on des profils d'énergie aussi différents ? Quelles contributions doivent être rajoutées à quel potentiel pour qu'il reproduise correctement les propriétés thermodynamiques de l'argon ?

Exercice III - (6 points)

1) À partir du principe fondamental de la dynamique, expliquer le principe de l'intégration des équations du mouvement en dynamique moléculaire (algorithme de Verlet).

2) Comment évolue l'énergie totale d'un système lors d'une dynamique moléculaire ? Expliquer simplement les méthodes utilisées pour imposer la température et la pression.