

UE 41KM21 - Chimie Physique 2
Dynamique Moléculaire

Durée conseillée : 30 minutes

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

Exercice I - (7 points)

On souhaite effectuer une dynamique moléculaire à température constante. Comment impose-t-on une température donnée ? Comment calcule-t-on la température à partir d'une configuration donnée ?

Exercice II - (7 points) On considère deux atomes i et j chargés positivement ($q_i = q_j = +1$) interagissant à une distance r_{ij} par un potentiel coulombien :

$$U(r_{ij}) = C \frac{q_i q_j}{r_{ij}^2} \quad (1)$$

où C est une constante. En déduire l'intensité de la force f s'exerçant entre ces atomes. Faire un schéma, en le justifiant par le calcul, de la direction des forces f_{ij} et f_{ji} . À partir du principe fondamental de la dynamique, expliquer comment l'expression de l'énergie d'interaction est utilisée pour prévoir la dynamique d'un système.

Exercice III - (6 points)

Quels sont les paramètres à considérer pour le choix de pas d'intégration δt d'une dynamique ? Dans une dynamique moléculaire, quel est le critère principal pour ce choix ? Comment peut-on augmenter δt sans trop perturber la thermodynamique d'un système moléculaire ?