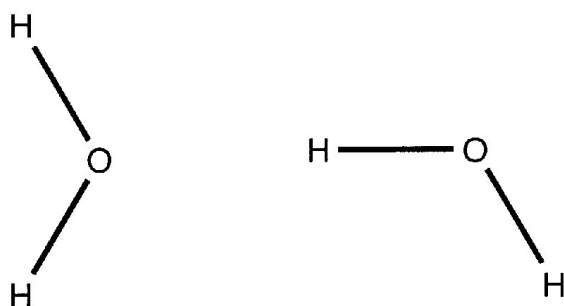


Simulations de dynamique moléculaire Janvier 2008 (2h)

Aucun document de cours n'est autorisé

1. (4 points) En quels termes peut-on décomposer l'énergie d'interaction interatomique ? Quels sont les termes correspondant à des interactions à longue distance et quels sont ceux correspondant à des interactions à courte distance ? Représenter les potentiels d'interaction s'exerçant entre (i) deux ions Na^+ ; (ii) deux ions Cl^- ; (iii) et entre un ion Na^+ et un ion Cl^- .
2. (4 points) Dessinez et décrivez les interactions interatomiques s'exerçant entre deux molécules d'eau interagissant de la manière suivante.



Quelles sont les interactions attractives et répulsives s'exerçant entre ces deux molécules d'eau ? De quels types sont-elles ? Est ce que cette géométrie d'interaction correspond à un minimum de l'énergie d'interaction interatomique ?

3. (4 points) Quels sont les principales caractéristiques différenciant un potentiel de Morse d'un potentiel de van der Waals.
4. (4 points) Pour quelles raisons est-il souhaitable (et souvent indispensable) d'inclure une représentation explicite de l'eau dans des simulations de dynamique moléculaire ?
5. (4 points) Elaborez et décrivez dans les grandes lignes un projet ayant pour objet l'étude d'un système moléculaire de votre choix et qui serait mené à bien en utilisant des techniques de simulations de dynamique moléculaire. Veuillez à bien préciser quelles sont les limitations de votre projet et quels sont les principaux résultats que l'on peut en attendre.