

Séminaire LIONS



Jeudi 24 octobre 2013 à 11h00, pce. 157, bât. 125

**Que d'eau, que d'eau!!!
Corrélation de paires du liquide H₂O SPC/E pur obtenues par l'association
Simulation Monte Carlo + Equation Intégrale**

Luc BELLONI

CEA de Saclay, IRAMIS, UMR 3299 SIS2M, LIONS, 91191 Gif-sur-Yvette

La compréhension fine des propriétés de solvation de molécules et macromolécules dans l'eau à température ambiante exige une description atomique du solvant aqueux. Même avec les ressources informatiques actuelles et même pour simplement de l'eau pure en volume, la simulation numérique (Dynamique Moléculaire ou Monte Carlo) de centaines ou milliers de molécules H₂O au sein d'une boîte de simulation demande un temps de calcul rapidement prohibitif pour une étude systématique et ne produit qu'une information tronquée sur les corrélations au sein du liquide. D'un autre côté, la théorie alternative de physique statistique des liquides basée sur l'équation Ornstein-Zernike et les équations intégrales peut certes être résolue très rapidement grâce à des codes numériques très puissants mais ne produit que des résultats approchés en raison de l'approximation HNC généralement utilisée. C'est finalement l'utilisation couplée des données de simulation Monte Carlo à courte distance et de l'approximation HNC à grande distance qui permet d'avoir une vue complète et très fine des fonctions de corrélation de paires (spatiale et angulaire) totale, directe et bridge, de la thermodynamique et des facteurs de structure dans le liquide H₂O SPC/E.