

Où: ILM, Université Claude Bernard Lyon 1

<http://ilm-perso.univ-lyon1.fr/~fcaupin/>

Qui: Frédéric CAUPIN, frederic.caupin@univ-lyon1.fr

Tél : 04 72 44 85 65

Laurent JOLY, laurent.joly@univ-lyon1.fr

Mieux comprendre l'eau en simulant un mélange réactif modèle

Une approche fructueuse pour décrire les anomalies de l'eau est de la considérer comme un mélange non-idéal de deux états différents. Les deux états s'interconvertissent l'un en l'autre sans arrêt, comme dans une réaction chimique. Les fractions des deux états ne sont pas libres, mais déterminées par la constante de réaction qui dépend de la température et de la pression. Si la non-idéalité du mélange est suffisante, elle conduit à une séparation du système en deux phases liquides différentes, qui se distinguent par des proportions différentes des deux états. C'est un phénomène qu'on nomme *polyamorphisme* (existence de plusieurs états amorphes d'un même corps pur) en référence au *polymorphisme* (cristaux de différente symétrie pour un même corps pur).

La thermodynamique générale de tels systèmes a été récemment étudiée théoriquement [1]. Cette approche a également été appliquée au cas de l'eau, et a permis de reproduire quantitativement ses propriétés thermodynamiques [2] et dynamiques [3], y compris dans l'état surfondu. Ceci est en lien avec l'hypothèse du polyamorphisme de l'eau formulée par Poole *et al.* [4] et toujours âprement débattue [5].

Le but du stage proposé est de mieux comprendre la physique de ce type de mélange réactif à l'aide de simulations de dynamique moléculaire. Pour simplifier on considérera des potentiels d'interaction bien plus simples que dans l'eau. On pourra alors faire varier les paramètres, en particulier la fréquence d'interconversion entre les espèces, pour étudier l'effet sur les propriétés thermodynamiques et dynamiques du fluide. En ajustant la dépendance en pression et température de la constante de réaction, on pourra mimer les anomalies de l'eau comme son maximum de densité. L'approche microscopique permettra une meilleure compréhension des phénomènes, et en particulier du lien entre thermodynamique et dynamique.

Ce stage pourra se prolonger en thèse sur ce sujet et d'autres sujets théoriques, comme la nucléation.

Figure

[1] Anisimov *et al.*, *PRX* **8** 011004 (2018).

[2] Holten *et al.*, *JPCRD* **43** 043101 (2014).

[3] Singh *et al.*, *PNAS* **114** 4312 (2017).

[4] Poole *et al.*, *Nature* **360** 324 (1992).

[5] Gallo *et al.*, *Chem. Rev.* **116** 7463 (2016).