Le Professeur Rodolphe Vuilleumier, dans son exposé intitulé « Simulation de dynamique moléculaire : un microscope numérique pour sonder la matière à l’échelle atomique », présenté le lundi 4 février 2019 à l’AEIS, nous a invités à un voyage intellectuel passionnant.

Nous commençons avec la projection d’un film où nous nous trouvons assis sur un atome, au sein d’une simulation d’argon dans un état liquide supercritique à -190 ° C , et où nous observons les atomes voisins qui se rapprochent ou s’éloignent en écoutant en musique l’intensité des chocs qu’ils transmettent. Au delà de la prouesse computationnelle et technique, c’est bien une réflexion profonde sur les principes physiques de l’émergence d’une grande variété de comportements de la matière à partir de quelques atomes simples qui est au cœur de toutes les simulations de dynamiques qui vont suivre, toujours à l’échelle moléculaire. « *Expliquer du visible compliqué à partir de l’invisible simple*», cette formule de Jean Perrin (1913), écrite à une époque où les doutes des siècles précédents sur le bien-fondé des modèles atomistiques ne sont plus d’actualité, traduit bien l’espoir de compréhension de la complexité du monde réel à partir de règles de fonctionnement simples à une échelle que nous considérons comme microscopique.

Les travaux présentés se restreignent pour l’instant à la compréhension de la matière dans des états liquides, dont les arrangements sont déjà extrêmement plus variés qu’il n’y paraît avec un simple diagramme de phase. La théorie physique sous-tendant l’analyse reste celle de la théorie cinétique des gaz et de la thermodynamique, avec la définition classique de l’entropie de Maxwell et Boltzmann *S=kB LogW* , où les simulations montrent que l’on doit de fait rajouter une division par *N!* - nombre de configurations d’une assemblée de N atomes - lorsque l’on passe au calcul effectif, ce que les simulations rendent désormais possible. La simulation des dynamiques est basée sur les équations Newtonniennes, appliquées ici avec des calculs discrétisés des vitesses et accélérations pour des millions d’entités et des algorithmes tournant sur de puissantes grilles de calcul, avec des représentations explicites des électrons générant les forces de liaison physico-chimiques. C’est grâce à ce type de simulation qu’il devient possible d’expliquer les propriétés dits anormales de l’eau, où l’orientation des molécules H2O et les liaisons hydrogène différent en fonction de la température, et par exemple pourquoi la glace à structure tétraédrique peu dense flotte aux dessus des lacs par temps de gel au lieu de couler... C’est ainsi aussi que l’on lève une ambiguïté entre les notions de H+ aqueux ou de pseudo-molécule H3O+ en montrant dans ces études théoriques conduites par simulation que le transport de H+ est en fait un partage entre 2 molécules d’eau voisines, un peu à la façon d’un passage de relai à double bâton, et où le proton qui finit une traversée n’est pas celui que l’on a vu partir… Les formes moléculaires intermédiaires ne sont que des équilibres ultra-rapides, de l’ordre de la picoseconde, dont l’existence réelle n’a pu être décelée expérimentalement que récemment (Science 2017), soit après en avoir compris les mécanismes virtuellement !

Un autre type de simulations numériques concerne un « transport » similaire, celui du CO2, par simple échange d’atomes de carbone dans du carbonate pur liquide (CaCO3) ainsi que la création d’espèces inattendues (qui ne sont pas vraiment non plus des espèces tant leur durée de vie est brève et transitoire). Sur le plan des simulations, il a fallu de longues semaines d’observation avant de voir apparaitre le phénomène pressenti, et pour ce qui est des vérifications expérimentales, toujours par spectroscopie ultra-rapide, elles sont sur le point de démarrer. Les applications potentielles sont dans le domaine de la géologie, où l’on peut imaginer piéger du gaz carbonique dans des liquides carbonatés en utilisant un procédé inverse de celui qui permet déjà de fabriquer des piles à combustibles. Si le coût de la mise en œuvre ne permet pas d’envisager des applications opérationnelles à ce jour, la compréhension de tels processus reste fondamentale pour les études des fluides sous le manteau terrestre, car même si les carbonates y sont moins présents et moins connus que les silicates, il apparaît que leur rôle pourrait être la clef pour la dynamique du manteau et les éruptions de lave.

Rodolphe Vuilleumier a terminé son exposé avec une citation qui lui paraît amusante, discutable, mais éclairant bien sa démarche, et même peut-être transposable aux méthodes de recherche expérimentale… : « *La science est ce que nous comprenons suffisamment bien pour l’expliquer à un ordinateur. L’art, c’est tout ce que nous faisons d’autre*» (D. Knuth, 1995). Quoi qu’il en soit, il nous a convaincu, si besoin était, que les simulations permettent d’apporter des éléments tout à fait originaux à la recherche scientifique.

*Le lecteur peut consulter les diapositives de la conférence de Rodolphe Vuilleumier. Pour accéder au fichier concerné,* [*cliquez ici*](https://www.dropbox.com/s/okwdbwg7ljbxhew/Expos%C3%A9%20Rodolphe%20Vuillemier.ppsx?dl=0)*; pour accéder aux séquences audio de chaque diapositive, ouvrir ensuite avec Powerpoint online, puis affichage-mode lecture-lancer le diaporama*

Résumé rédigé par Edith Perrier, AEIS