
Vers un potentiel quantique de l'eau

Claude Leforestier*¹

¹Institut Charles Gerhardt- Institut de Chimie de la Matière Condensée et des Matériaux (ICGICMCM)
– CNRS : FR1878, Université Montpellier II - Sciences et techniques, Ecole Nationale Supérieure de
Chimie de Montpellier – C.C. 003 2 Place Eugène Bataillon 34095 MONTPELLIER CEDEX 5, France

Résumé

La plupart des potentiels disponibles pour décrire l'eau liquide sont intrinsèquement classiques car obtenus en ajustant une fonction potentiel plus ou moins simple aux propriétés de la phase condensée au moyen de simulations de dynamique moléculaire. On commence seulement à disposer de véritables potentiels quantiques, c'est-à-dire indépendants de toute référence expérimentale et susceptibles de décrire tant ses agrégats en phase gazeuse que sa phase condensée.

L'une des approches suivies ces dernières années repose sur un développement multi-corps d'un tel potentiel défini au niveau ab initio tronqué au troisième ordre mais incluant la polarisation d'ensemble à N corps, essentielle pour toute description réaliste. Si le terme à un corps (monomère flexible) est maintenant connu avec une précision spectroscopique, une description satisfaisante de celui à deux corps (dimère) n'a été obtenue que récemment grâce aux progrès réalisés en Chimie Quantique et à la possibilité de comparer aux résultats expérimentaux de Spectroscopie en jets moléculaires des premiers agrégats (H₂O)₂ et (H₂O)₃. Nous décrirons comment la Spectroscopie Moléculaire théorique permet de tester la validité des différents termes apparaissant dans un tel développement multi-corps, en soulignant la difficulté de tels calculs. Il est en effet nécessaire de considérer explicitement les mouvements de grande amplitude qui relient les nombreux minima équivalents de la surface de potentiel (8 pour le dimère, 48 pour le trimère,...), et qui conduisent à un éclatement des niveaux par effet tunnel, observable expérimentalement. De tels mouvements de grande amplitude modifient également les déplacements infra-rouges des fréquences d'excitation des monomères par rapport aux valeurs qu'on peut déterminer à la géométrie d'équilibre de l'agrégat.

Mots-Clés: potentiel de l'eau, spectroscopie moléculaire

*Intervenant