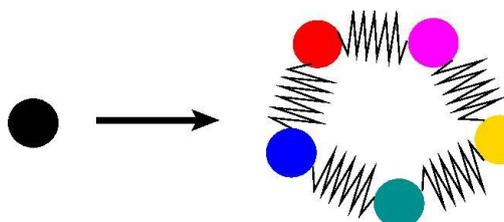


La méthode de dynamique moléculaire des Intégrales de Chemin : Applications et perspectives

Magali Benoit

*CEMES CNRS UPR 8011 and Université de Toulouse, 29 rue Jeanne Marvig, BP 94347, 31055
Toulouse cedex 4, France*

La méthode de dynamique moléculaire des Intégrales de Chemin est une méthode de choix pour la prise en compte des effets des fluctuations quantiques sur les noyaux atomiques dans l'étude de systèmes de grande taille. Elle est basée sur un isomorphisme entre la fonction de partition quantique du système physique et la fonction de partition classique d'un système fictif de plus grande dimension dans lequel chaque particule quantique est remplacée par un polymère en anneau constitué de répliques connectées par des oscillateurs harmoniques. L'extension spatiale des polymères en anneau représente la délocalisation des fonctions d'onde nucléaires. Couplée à la dynamique moléculaire, cette méthode a l'avantage de donner accès à la fois aux effets quantiques et aux effets thermiques sur les noyaux des atomes.



Au cours de cette présentation, les fondements théoriques de la méthode des Intégrales de Chemin seront d'abord brièvement décrits. Quelques exemples d'application de cette méthode seront ensuite présentés. Les développements récents de la méthode, permettant entre autres d'accéder aux propriétés dynamiques, mais aussi d'accélérer les temps de calcul, seront également abordés.