



Mini-Colloque « Effets quantiques nucléaires : structure et dynamique »

Organisateurs :

Fabio Finocchi

Institut des NanoSciences de Paris (INSP)
 Université Pierre et Marie Curie – Paris 6
fabio.finocchi@upmc.fr

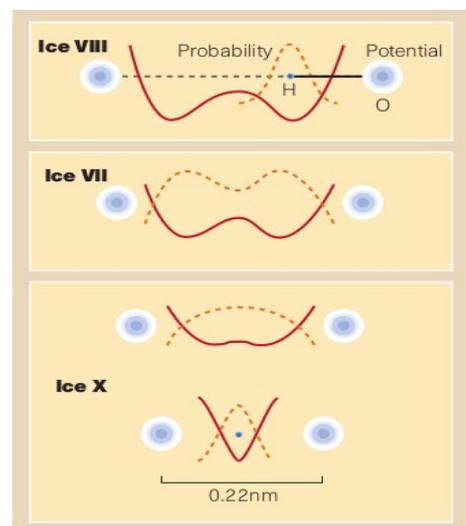
José Teixeira

Laboratoire Léon Brillouin
 CEA Saclay
jose.teixeira@cea.fr

Les noyaux atomiques sont des particules quantiques comme les autres, mais comme leur masse est relativement élevée, ils sont en général traités classiquement. Pourtant, la longueur d'onde thermique des noyaux légers comme le proton n'est pas négligeable devant les distances interatomiques, avec parfois des conséquences sensibles comme leur aptitude à passer des barrières d'énergie par effet tunnel ; l'énergie de point zéro peut modifier sensiblement des diagrammes de phases. Or, l'hydrogène est un composant très répandu : des problématiques aussi diverses que la circulation de l'eau dans le manteau terrestre, la liaison hydrogène - omniprésente dans la matière vivante -, jusqu'à la conduction protonique dans des matériaux pressentis pour des piles à combustible, sont potentiellement concernées. La prise en compte de ces « effets quantiques nucléaires », fondamentalement liés à l'extension non nulle des fonctions d'onde des noyaux légers, dans les simulations numériques fait l'objet de tentatives diverses. Des méthodes existent, d'autres sont en cours de développement, qui posent à la fois des problèmes fondamentaux et des questions techniques redoutables. Les expérimentateurs sont parfois confrontés à des résultats paradoxaux, manquant d'une contrepartie théorique.

Ainsi, le développement ou le perfectionnement de nouvelles méthodes expérimentales, comme la diffusion inélastique Compton et la spectroscopie infrarouge ultra-rapide, l'étude détaillée des échanges isotopiques, rendent possible d'identifier les effets dus à la nature quantique des noyaux. Du point de vue théorique, on assiste à un certain frémissement, comme en témoigne le développement ou le renouveau de plusieurs méthodes de simulation, de nature semi-classique (Initial Value Representation, Quantum Thermal Bath, Ehrenfest Dynamics, etc.) ou bien complètement quantique (Path Integrals, Bohmian Dynamics, etc.). Sans entrer dans les détails de ces méthodes, celles semi-classiques sont efficaces mais elles peuvent comporter des problèmes majeurs, qui se manifestent de manières assez diverses selon les systèmes considérés; les méthodes quantiques sont basées sur des approches plus fondamentales, mais elles sont trop lourdes numériquement, certaines ne permettant pas un accès direct à la dynamique des noyaux, d'autres demeurent peu testées. On est très loin des progrès accomplis dans la théorie de la structure électronique, qui ont permis des avancées considérables, rendant les simulations un outil de prédiction et d'accompagnement des expériences.

À des pressions élevées, la glace passe de la phase VII où chaque hydrogène est lié de façon asymétrique à deux oxygènes (par une liaison covalente et une liaison hydrogène), à la phase X où le H se situe à mi-distance entre les deux O. La transition de symétrisation a lieu vers 65 GPa alors que les calculs *ab initio*, qui traitent le proton comme une particule classique, la prédisent vers 100 GPa. Cet écart est dû à la nature quantique du noyau H, importante même à T ambiante. Grâce à des simulations incluant les effets quantiques nucléaires (intégrales de chemin ou bain thermique quantique « QTB »), on retrouve la valeur de la pression de transition expérimentale en expliquant le mécanisme sous-jacent: la symétrisation des liaisons OH a lieu bien avant la disparition de la barrière sous l'effet de la pression, essentiellement à cause de l'énergie de point zéro [M. Benoit et al, *Nature* 392, 258 (1998) ; J. Teixeira, *Nature* 392, 232 (1998) ; Y. Bronstein et al, *Phys. Rev. B* 89, 214101 (2014)].



La richesse et la complexité de ce thème transversal, ce qui fait son intérêt, est aussi à la racine de la dispersion des chercheurs confrontés aux effets quantiques nucléaires. Cette communauté très variée comporte des physiciens de la matière condensée et des chimistes théoriciens, des biophysiciens et des chercheurs en sciences de la Terre ; bien qu'émergente, elle pourrait se connaître davantage. Dans ce contexte, ce mini-colloque affiche plusieurs objectifs : (1) mettre en contact les expérimentateurs, qui travaillent dans des domaines assez différents, avec les théoriciens, qui cherchent des applications afin de tester l'efficacité des nouvelles méthodes de simulation. (2) Créer une dynamique autour des effets quantiques nucléaires, qui puisse devenir un fil rouge entre des disciplines diverses: de la biophysique aux sciences planétaires, de la chimie physique à la science des matériaux. (3) Faire rencontrer les jeunes chercheurs engagés dans des thèses ou des projets postdoctoraux où les effets quantiques sont cruciaux, qui ignorent souvent que les résultats de leurs recherches pourraient avoir un écho important dans d'autres disciplines.

L'atmosphère relativement informelle des JMC favorise les échanges sans pénaliser les jeunes chercheurs. Le mini-colloque sera ouvert par des chercheurs confirmés, afin de préciser le cadre dans lequel les effets quantiques nucléaires sont importants. Ensuite, nous prévoyons des communications orales ainsi qu'une séance poster autour d'un café, pour conclure avec une table ronde « structurée », comportant des interventions de jeunes chercheurs, avec un espace de discussion autour d'un nombre relativement restreint de questions fondamentales. Ce type de programme nécessite évidemment une adhésion des intervenants à un rôle actif et constructif, que nous sollicitons. N'hésitez donc à nous envoyer vos contributions et d'éventuelles suggestions d'intervenants sans tarder !

Mots clés : effets quantiques nucléaires, effets isotopiques, tunneling, liaison hydrogène, degrés de libertés classiques/quantiques, méthodes expérimentales et théoriques pour sonder la dynamique des noyaux.

Dates à retenir (voir aussi : <http://jmc15.sciencesconf.org/resource/page/id/6>) :

15 avril 2016 - limite des demandes de bourse pour les étudiants

1er mai 2016 - limite de soumission pour les présentations orales et posters

Inscription sur le site de la conférence : <http://jmc15.sciencesconf.org>