

Interfaces entre des solides d'oxydes et l'eau liquide étudiées par dynamiques moléculaires DFT-MD : structure, dynamique, acidité/basicité, spectroscopie vibrationnelle SFG

Marie-Pierre Gaigeot

LAMBE UMR8587 Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement
Université d'Evry val d'Essonne, Blvd F. Mitterrand, Bat Maupertuis
91025 EVRY

mgaigeot@univ-evry.fr
<http://mpgaigeot-research.fr/>

Nous présentons notre activité théorique concernant la structure, dynamique, pKa, spectroscopie vibrationnelle non linéaire de type SFG (Sum Frequency Generation) d'interfaces entre oxydes et eau liquide par simulations de dynamique moléculaire ab initio DFT-MD (représentation électronique DFT).

Nous avons typiquement étudié les interfaces entre le quartz et l'eau liquide et entre l'alumine et l'eau liquide pour lesquelles l'organisation de l'eau interfaciale a été caractérisée dans le détail, les pKa des sites de surface des solides ont été calculés à l'aide de nos dynamiques DFT-MD, la relation entre pKa et organisation de l'eau à l'interface a été caractérisée, et les signatures vibrationnelles des molécules d'eau à l'interface ont été calculées et expliquées en fonction de leur organisation structurale et des liaisons hydrogène formées avec les sites (acides, basiques) des surfaces d'oxydes. L'interface silice amorphe/eau liquide a également été étudiée, et nous caractérisons ainsi l'influence d'une surface non cristalline sur les propriétés interfaciales de l'eau.

Ces études se poursuivent avec la caractérisation des perturbations de ces interfaces en fonction du pH de la solution, et lorsque des électrolytes sont présents à l'interface.

Les méthodes employées ainsi que nos principaux résultats seront présentés.