



SEMINAIRE ISMO

Carine CLAVAGUERA

*Laboratoire de Chimie-Physique
Université Paris Sud et CNRS - UMR8000 - ORSAY*

Apport des champs de forces polarisables à la description physico-chimique de l'interaction d'ions avec leur environnement

Les types d'interactions mises en jeu dans des systèmes complexes comportant des ions multichargés sont très variées. L'équilibre subtil entre polarisation, effets électrostatiques et forces de dispersion détermine l'organisation spatiale des molécules, mais aussi leur dynamique et leurs propriétés thermodynamiques. Une classe de champs de forces, dits de nouvelle génération, a été développée pour prendre en compte explicitement une description des interactions locales mettant en jeu des effets d'environnement de forte nature électrostatique tels que l'interaction entre l'ion et son environnement. Les champs de forces Drude, AMOEBA ou X-Pol sont des exemples de modèles qui prennent en compte l'induction électrostatique.

Au cours de ce séminaire, je présenterai des développements récents de champs de forces polarisables et les améliorations qu'ils peuvent apporter par rapport aux champs de forces standards lors du calcul de différentes propriétés physico-chimiques qu'elles soient dynamiques, thermodynamiques ou spectroscopiques. Je montrerai comment reproduire et comprendre la perturbation exercée par un ion sur le réseau de liaisons hydrogène de l'eau dans des nano-gouttes en associant données expérimentales de spectroscopie et simulations de dynamique moléculaire classique polarisable. Pour cela, un modèle de charges atomiques fluctuantes a été introduit pour l'eau afin permettre plus de flexibilité de la structure intramoléculaire des molécules au cours de la dynamique. Ces fluctuations dans les interactions non liées améliorent la description du réseau de liaisons hydrogène et par conséquent, la réponse spectroscopique.

Je présenterai aussi la mise au point de modèles pour l'étude d'ions dans un contexte biologique tels que l'interaction de la paire d'ions Mg^{2+} -phosphate, ou le cofacteur hème dans sa forme d'ion ferrique et ferreux inclus dans une hémoprotéine. Enfin une implémentation récente d'un potentiel réactif de type « empirical valence bond » dans le champ de forces AMOEBA sera décrit dans le but de traiter des phénomènes de dynamique de transfert de proton.

Mardi 19 février 2019 à 11 h
Amphithéâtre du bât 520 (3^{ème} étage)
Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex