



UNIVERSITÉ
CAEN
NORMANDIE

Séminaire

Jeudi 14 décembre

14h00

Lieu à communiquer

Construction d'un pseudopotentiel transférable pour l'eau : Vers la dynamique de système en solution

Clément DUBOSQ¹, Benoit GERVAIS¹

¹Centre de recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique (CIMAP), UMR CNRS 6252, ENSICAEN, CNRS, CEA/IRAMIS, Université de Caen, Boulevard Henry Becquerel BP 5133, F-14070 CAEN cedex 5, France

Mail: clement_dubosq@hotmail.fr ; gervais@ganil.fr

Les systèmes en solution représentent une part importante de la chimie et englobent des domaines tels que les électrolytes, la radiolyse de l'eau, la synthèse de composés chimiques, etc. Ces systèmes font l'objet de nombreuses études expérimentales. Cependant l'interprétation des données expérimentales nécessite l'emploi de calculs. Le coût numérique des méthodes *ab-initio* étant important, de nombreux auteurs ont développé des potentiels modèles dans le but d'alléger les calculs. Or ces potentiels modèles ont été paramétrés pour des systèmes spécifiques. Ils sont par conséquent peu transférables. C'est dans ce cadre que nous avons développé un pseudopotentiel transférable pour l'eau.

Durant ce séminaire, je présenterai les fondements de ce pseudopotentiel à zéro électron pour l'eau. Plusieurs paramétrisations ont été développées pour ce dernier. Je présenterai les différents tests menés avec ce pseudopotentiel sur $X(\text{H}_2\text{O})_n$ ($X=\text{OH}^-$, OH , NH_3 , Na^+ , etc). Ces tests bien que concluants, présentent quelques limites que j'aborderai.