
Caractérisation microscopique des interfaces CaF2 / H2O : simulations SFG

Rémi Khatib^{*†}, Maria-Jose Perez-Haro², Ellen H. G. Backus², and Marialore Sulpizi¹

¹Condensed Matter Theory Group (KOMET 331) – KOMET 331, Institute of Physics, Johannes Gutenberg-University, D-55099 Mainz, Allemagne

²Max-Planck-Institut für Polymerforschung (MPI-P) – Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Ackermannweg 10, 55128 Mainz, Allemagne

Résumé

Des membranes biologiques à la catalyse hétérogène en passant par la chimie atmosphérique, les interfaces impliquant l'eau liquide sont très courantes sur Terre. La spectroscopie vibrationnelle par génération de la fréquence somme (SFG) est une technique qui est interdite dans les milieux centro-symétriques. Elle permet donc, entre autre, d'étudier spécifiquement les molécules d'eau à l'interface. Afin de rationaliser les résultats expérimentaux obtenus pour les interfaces CaF2 / H2O, une approche théorique (DFT) a été employée. Celle-ci est basée sur des simulations de dynamiques moléculaires.

Plus précisément, la dynamique moléculaire de Born-Oppenheimer a été utilisée sur différents modèles d'interfaces susceptibles de décrire le système pour une large gamme de pH. Différents outils, comme la densité d'états vibrationnels (VDOS) ou la fonction de distribution radiale (RDF), ont été employés pour analyser les données. Les résultats préliminaires sont très prometteurs : un pic attribué à un groupe " OH libre " a été mesuré par SFG sous conditions basiques, celui-ci a pu être reproduit grâce à un modèle où des ions F⁻ ont été substitués par des ions HO⁻ à l'interface. D'autres résultats concernant l'organisation des molécules d'eau à l'interface sont également disponibles à pH neutre et acide.

Mots-Clés: DFT MD, spectroscopie SFG, interfaces aqueuses

*Intervenant

†Auteur correspondant: rekhatib@uni-mainz.de