

---

# Ions aux interfaces silice/eau liquide par dynamique moléculaire ab-initio (DFT-MD)

Morgane Pfeiffer-Laplaud<sup>\*1</sup> and Marie-Pierre Gageot<sup>†1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement (LAMBE - UMR 8587) – CEA, CNRS : UMR8587, Université d'Evry-Val d'Essonne – Bât. Mapertuis 1 étage bd François Mitterrand 91025 EVRY CEDEX, France

## Résumé

Nous caractérisons les propriétés structurales, d'acidité et de spectroscopie vibrationnelle d'interfaces (0001)  $\alpha$ -quartz/eau liquide, contenant des ions et paires d'ions (NaCl, KCl, NaI) par simulations de dynamique moléculaire ab initio au niveau DFT (DFT-MD). Nos objectifs sont de caractériser la localisation des ions à l'interface (" inner-sphere ", " outer-sphere ") et les modifications induites par leur présence sur la structure de la surface de l'oxyde (i.e. orientations des silanols de surface), de l'eau interfaciale (1ères couches et à plus longue distance), et comment/pourquoi l'eau interfaciale peut être désordonnée (ou ordonnée) par la présence des ions, et jusqu'où les modifications d'organisation de l'eau peuvent être ressenties.

Une analyse vibrationnelle des signatures de ces interfaces ioniques est proposée et comparée à l'interface sans ions, afin de mettre en évidence les modifications apportées par la présence des ions, et d'interpréter ces signatures en termes de structure interfaciale. Nous calculons également les pKa de sites de surfaces, afin de mettre en évidence les modifications possibles d'acidité/basicité des silanols de surface lorsque l'interface aqueuse contient des ions et paires d'ions.

Toutes ces propriétés ont été utilisées pour rationaliser les données spectroscopiques SFG (Sum Frequency Generation) et mesures de pKa de ces interfaces, connues dans la littérature. Ces dynamiques font suite à nos travaux récents par DFT-MD des interfaces (0001)  $\alpha$ -quartz/eau liquide [1,2] et silice amorphe/eau liquide [3] pour lesquelles les structures interfaciales (eau, solide) ont été caractérisées dans le détail et les signatures spectroscopiques calculées et interprétées.

Références :

Gageot, M.-P., Sprik, M., Sulpizi, M., J. Phys. Condens. Matter, 24, 124106, 2012

Sulpizi, M., Gageot, M.-P., Sprik, M., J. Chem. Theory Comput., 8, 1037, 2012

Cimas, A., Tielens, F., Sulpizi, M., Gageot, M.-P., J. Phys. Condens. Matter, Fev 2014

---

\*Intervenant

†Auteur correspondant: [mgageot@univ-evry.fr](mailto:mgageot@univ-evry.fr)

**Mots-Clés:** DFT, MD, interfaces, solide, liquide, spectroscopie vibrationnelle, structure