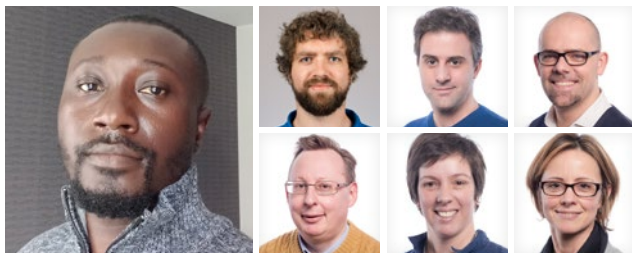


CT8

CHIMIE QUANTIQUE ET MODÉLISATION MOLÉCULAIRE

OCCIGEN, JEAN ZAY &amp; JOLIOT-CURIE : 4,3 MILLIONS D'HEURES

**RICHARD OPOKU**, DOCTORANT, UMR8523

De gauche à droite et de haut en bas : **Antoine Roose** (Chercheur, UMR8523), **André Severo Pereira Gomes** (Chargé de Recherche CNRS, UMR8523), **Florent Réal** (Maître de Conférences, UMR8523), **Denis Duflot** (Maître de Conférences, UMR8523), **Valérie Vallet** (Directrice de Recherche CNRS, UMR8523), **Céline Toubin** (Professeur des Universités, UMR8523)

UMR8523, Université de Lille

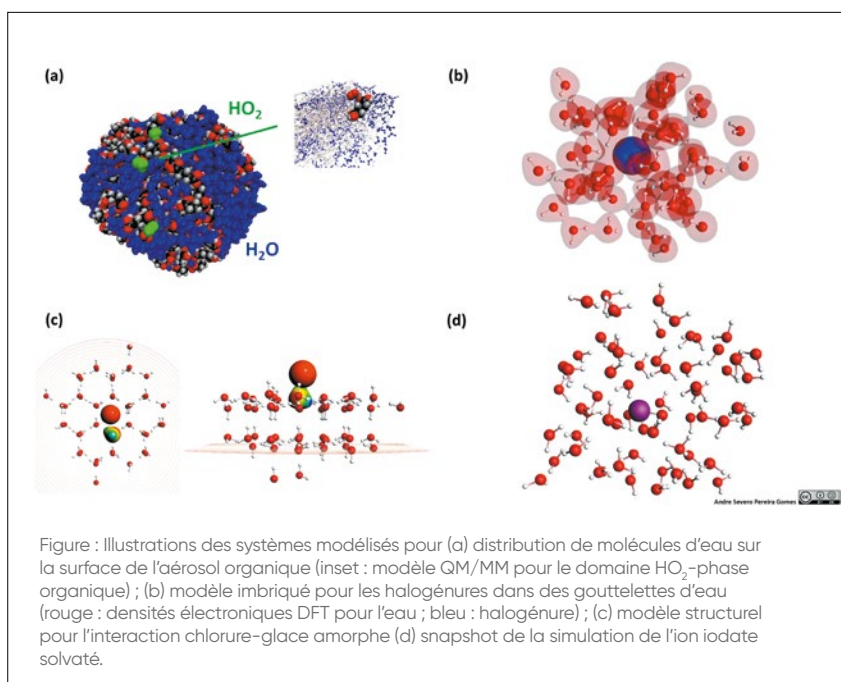
**BIOLOGIE, CHIMIE ET MATÉRIAUX**

# La compréhension des processus physiques et chimiques à l'échelle moléculaire par la modélisation multiméthodes

Les aérosols sont des petites particules solides ou des gouttelettes liquides en suspension. Elles proviennent de sources naturelles (composés organiques volatils émis par la biomasse, sels marins, etc.) ou par l'action humaine (suies issues de la combustion incomplète de carburant).

Ces aérosols jouent un rôle clé en tant que substrats sur lesquels des espèces présentes dans l'atmosphère peuvent s'attacher, réagir en contribuant à leur dispersion autour du globe, y compris les radionucléides tels que l'iode. Ces phénomènes impliquent de multiples processus physico-chimiques qui pour être compris à l'échelle moléculaire requièrent d'utiliser des modèles théoriques combinant différentes approches.

Notre équipe utilise et développe ces modèles et les codes de simulation associés. Nos simulations visent à décrire les propriétés électriques et/ou magnétiques, et/ou thermodynamiques par une approche soluté/solvant en incluant les effets de l'environnement et les effets de température (en moyennant les résultats sur un ensemble de configurations). Nous pouvons notamment simuler: (a) l'**uptake réactif de HO<sub>2</sub> sur des aérosols organiques**, à travers la combinaison de simulations de dynamique moléculaire classique (CMD) et de calculs ab initio QM/MM non-relativistes; (b) les **spectres XPS de l'ion iodure**



**microhydraté**, et l'évolution des spectres d'ionisation de valence d'halogénures avec la taille des gouttelettes, en combinant diverses méthodes développées par l'équipe (champs de force polarisables pour les simulations CMD, et la méthode d'imbriquantique EOM-IP-CCSD-in-DFT QM/QM relativiste); (c) les spectres XPS de HCl et de l'ion chlorure aux interfaces air/glace couplant des "snapshots" CMD et

la méthode EOM-IP-CCSD-in-DFT relativiste; et (d) la solvatation de l'ion iodate (IO<sub>3</sub><sup>-</sup>), utilisant des simulations Car-Parinello MD (CPMD) faute de champs de force polarisables classiques.

Le très grand volume de simulations requis pour ces exemples d'études a rendu l'utilisation des centres de calcul nationaux indispensable pour atteindre nos objectifs. ■