

Proposition de financement doctorale pour la rentrée 2021-2022

Titre de la thèse :

Etude de la dynamique de transferts de protons aux interfaces aqueuses par réseaux de neurones

Directeur de thèse : Damien Laage (damien.laage@ens.psl.eu)

Laboratoire d'accueil : PASTEUR – UMR 8640

Les réactions chimiques à une interface aqueuse sont essentielles dans des domaines allant de la chimie atmosphérique à l'électrochimie, et la réactivité à l'interface est radicalement différente de celle dans le bulk, mais les raisons en restent mal connues. Cette thèse propose d'étudier le mécanisme et la dynamique de transferts de protons à une interface aqueuse pour deux systèmes clés : la diffusion d'un proton en excès hydraté à l'interface eau/air importante en chimie atmosphérique, et le mécanisme d'électrolyse de l'eau à l'interface eau/rutile. Des champs de force réactifs seront développés par apprentissage machine et donneront accès à des durées de simulation et des dimensions de systèmes largement supérieures aux approches traditionnelles, permettant d'obtenir une description moléculaire du rôle du solvant. Ces champs de force seront combinés avec des simulations de dynamique moléculaire classique et par intégrale de chemin ainsi que des modèles analytiques, en lien avec des expériences de spectroscopie vibrationnelle non linéaire.

Mots clés : chimie théorique – intelligence artificielle – transport de protons – spectroscopie vibrationnelle – décomposition de l'eau par électrolyse