

Conférence - CEISAM - UMR CNRS 6230

Vendredi 13 Juillet 2017- 09h30
Salle Marie Curie

Dr Daniel Borgis
Directeur de recherche CNRS

*Pôle de Physicochimie Théorique, UMR CNRS-UPMC-ENS 8640, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex, France et
Maison de la Simulation, USR CNRS 3441, Digeo labs, Saclay, 91171 Gif-sur-Yvette*

Théorie de la fonctionnelle de la densité classique et ses applications à la solvation

Classical density functional theory and its applications to solvation

Après une brève introduction sur la théorie de la fonctionnelle de la densité **classique**, nous présentons l'application de cette théorie au problème de la solvation moléculaire. Les propriétés de solvation d'une molécule dans un solvant donné, chacun décrit par un champ de force moléculaire, peuvent être obtenues par minimisation d'une fonctionnelle d'énergie libre dépendant de la densité de position et d'orientation des molécules de solvant. Cette procédure fournit, au minimum, la densité d'équilibre tridimensionnelle du solvant ainsi que l'énergie libre de solvation du soluté. Elle est bien plus efficace que des simulations de dynamique moléculaires couplées à des méthodes d'intégration thermodynamique.

Cette approche est illustrée par le calcul des propriétés d'hydratation de molécules organiques et biologiques.