

---

# Diffusion et réactivité de NH<sub>3</sub> et CO<sub>2</sub> dans des glaces interstellaires: études par les méthodes de la chimie théorique

Pierre Ghesquiere<sup>\*†</sup>, Dahbia Talbi<sup>‡</sup>, and Tzonka Mineva<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut Charles Gerhardt-Montpellier (ICGM) – Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier – Equipe Matériaux Avancés pour la Catalyse et la Santé (MACS) Institut Charles Gerhardt - UMR 5253 (CNRS/ENSCM/UM2/UM1) 8, rue de l'École Normale - 34296 Montpellier cedex 5 - France, France

## Résumé

Les observations astrophysiques ont révélé que le milieu interstellaire était riche en glaces d'eau dites sales car contenant aussi du CO, NH<sub>3</sub>, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH. Il est postulé que ces glaces ont un rôle important dans la complexification de la matière organique de l'espace : elles joueraient le rôle du catalyseur qui fournit une surface sur laquelle atomes et molécules se fixent aux basses températures (10-50 K), et qui réagissent si la température du milieu s'élève (50 - 200 K) formant ainsi des molécules complexes qui lorsqu'elles s'échappent de la glace, enrichissent le milieu interstellaire.

Le but de notre étude est d'utiliser les méthodes de la chimie théorique pour mieux comprendre ce rôle catalytique de la glace. De façon plus précise nous nous intéressons à la formation de l'acide carbamique et du carbamate d'ammonium à partir de NH<sub>3</sub> et CO<sub>2</sub> dans un modèle de glace interstellaire ainsi qu'à la diffusion de ces dernières, facteur limitant leur réactivité. Notre étude théorique est entreprise en complémentarité à des expériences menées au Laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires (PIIM) de l'Université de Provence.

Elle repose sur des simulations :

- de dynamique moléculaire (DM) classique pour calculer en fonction de la température (de 60 à 170K) les constantes de diffusion de NH<sub>3</sub> et de CO<sub>2</sub> dans un modèle de glace amorphe de basse densité.

- de dynamique quantique Born Oppenheimer (BOMD) pour étudier la réactivité de NH<sub>3</sub> et CO<sub>2</sub> dans ce même modèle. Des calculs ab-initio de type super molécules incluant réactifs et quelques molécules de solvant sont entrepris en parallèle pour nous guider dans les calculs BOMD.

Les résultats obtenus à ce jours sur la diffusion et la réactivité de NH<sub>3</sub> et CO<sub>2</sub> dans un modèle de glace amorphe de basse densité sont présentés et discutés par rapport à l'expérience.

---

\*Intervenant

†Auteur correspondant: pierre.ghesquiere@univ-montp2.fr

‡Auteur correspondant: dahbia.talbi@univ-montp2.fr

**Mots-Clés:** Glaces Interstellaires, Dynamique Moléculaire, Diffusion, Réactivité