

---

# Propriétés énergétiques et thermodynamiques des agrégats d'eau purs et protonés sur des PAHs

Luiz Fernando Lopes Oliveira<sup>\*†1</sup>, Mathias Rapacioli<sup>1</sup>, Jérôme Cuny<sup>1</sup>, Aude Simon<sup>1</sup>, and Fernand Spiegelman<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques (LCPQ) – Université Paul Sabatier (UPS) - Toulouse III, CNRS : UMR5626 – 118 Route de Narbonne Bât. 3R1 b4 Toulouse 31062 Toulouse cedex 9, France

## Résumé

Les hydrocarbures aromatiques polycycliques (PAHs) sont une importante classe de molécules en astrochimie, proposés comme candidats pour expliquer les bandes infrarouges aromatiques [1]. Par ailleurs, les PAHs, qui peuvent être formés lors de la combustion de substances carbonées, sont aussi présents dans l'atmosphère où ils rentrent en interaction avec des molécules d'eau. Pour mieux comprendre les phénomènes mis en jeu, nous avons mené une étude théorique des propriétés des agrégats d'eau, des PAHs et des agrégats d'eau sur des PAHs. Cette étude a été réalisée en complément d'études expérimentales.

Nous avons utilisé la méthode self-consistent-charge density-functional based tight-binding (SCC-DFTB) [2] qui a déjà montré sa capacité à décrire la structure électronique des agrégats de PAHs et d'eau [3]. Pour obtenir les propriétés thermodynamiques ou structurales de ces systèmes, il est nécessaire d'explorer correctement leur surface d'énergie potentielle (PES). Pour cela, nous avons utilisé différentes méthodes, telle que la dynamique moléculaire, le Monte Carlo et le force biased Monte Carlo. Toutes ces approches ont été utilisées dans leurs implémentations de type parallel tempering.

Dans ce poster, après avoir exposé les méthodes mentionnées ci-dessus nous présenterons et discuterons la modélisation des courbes de capacité calorifique pour des agrégats d'eau de différentes tailles. Nous montrerons que nos résultats dans le cas d'agrégats d'eau protonés,  $(\text{H}_2\text{O})_n\text{H}^+$  ( $n=21-23$ ), sont en accord qualitatif avec de récents résultats expérimentaux [4].

Finalement, des résultats obtenus concernant l'adsorption de l'hexamère  $(\text{H}_2\text{O})_6$  et de l'octamère  $(\text{H}_2\text{O})_8$  d'eau sur deux types de PAHs: coronene ( $\text{C}_{24}\text{H}_{12}$ ) et circumcoronene ( $\text{C}_{54}\text{H}_{18}$ ), seront discutés.

## Références

Léger et al. *Astron. Astrophys.* **1984**, 137 L5.

Elstner et al. *Phys. Rev. B*, **1998**, 58, 7260–7268.

Dontot et al. *Phys. Status Solidi* **2012**, 249, 245; Simon et Spiegelman, *J. Chem. Phys.* **2013**, 138, 194309.

Boulon et al. *J. Chem. Phys.* **2014**, 140, 164305.

---

\*Intervenant

†Auteur correspondant: luiz.oliveira@irsamc.ups-tlse.fr

**Mots-Clés:** PAHs, agrégats d'eau, DFTB, Parallel tempering Monte Carlo, Parallel tempering molecular dynamics