

# Propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques de clusters de molécules d'eau.

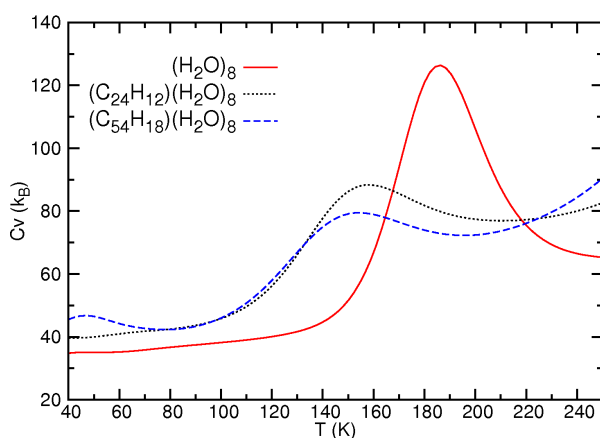
J. Cuny, K. Korchagina, L. F. Oliveira, M. Rapacioli, A. Simon, F. Spiegelman

LCPQ, UMR5626 du CNRS, Université Paul Sabatier - Bat. 3R1b4, 118 route de Narbonne 31062 Toulouse Cedex 09, France.

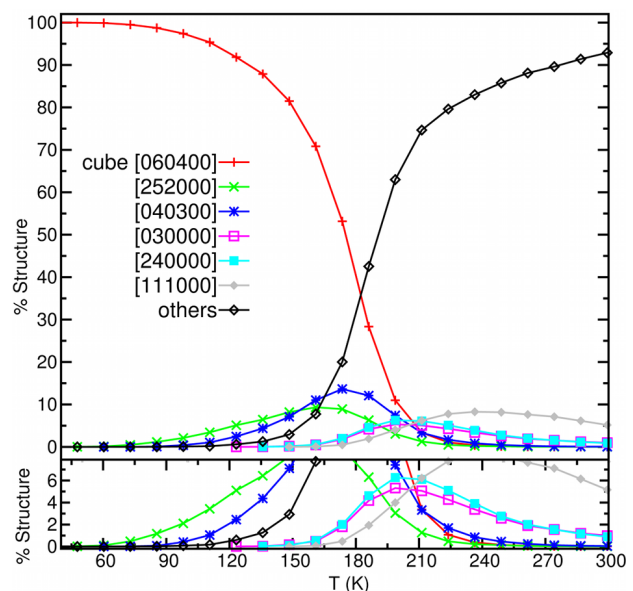
L'objectif du travail que nous allons présenter est l'étude des propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques de clusters d'eau purs, en interaction avec un PAH et contenant des ions, par des approches de dynamique moléculaire. Pour mener à bien ce travail, nous avons réalisé des simulations de dynamique moléculaire parallel-tempering sur différents systèmes : des agrégats  $X(\text{H}_2\text{O})_n$  (avec  $X = \text{H}^+, \text{SO}_4^{2-}, \text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}^+$  ;  $n = 5-21$ ) et des agrégats  $(\text{H}_2\text{O})_{6,8}$  purs et sur coronène et circumcoronène.

L'ensemble de ces simulations ont été réalisées en utilisant l'approche Self-Consistent-Charge Density-Functional based Tight-Binding (SCC-DFTB) pour décrire la surface d'énergie potentielle des systèmes étudiés.

Après avoir validé l'utilisation de l'approche SCC-DFTB pour ces systèmes, nous montrerons comment nous avons modélisé des courbes de capacité calorifique à partir de simulations parallel-tempering et comment ces courbes peuvent être analysées en terme de modification structurale dans les agrégats (c.f. **Figure 1** et **2**). Nous présenterons également une description de la dynamique des systèmes en fonction de la température au travers de l'utilisation de diverses fonctions d'autocorrélation.



**Figure 1.** Courbes de capacité calorifique obtenues pour le cluster  $(\text{H}_2\text{O})_8$  pur, sur coronène et sur circumcoronène



**Figure 2.** Evolution des populations de différents isomères du cluster  $(\text{H}_2\text{O})_8$  en fonction de la température.