



## Soutenance de thèse

**Maëlle BONNIN**

*Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), Orsay*

### **Diversité structurale des agrégats de carbone et d'hydrogène, implications pour les porteurs des Bandes Aromatiques Infrarouges**

L'émission IR de nombreuses lignes de visée dans le milieu interstellaire (ISM) présente des bandes d'émission appelées AIBs, habituellement attribuées aux hydrocarbures aromatiques polycycliques (PAHs). Identifier les porteurs des AIBs permettrait une meilleure compréhension de l'évolution de la matière carbonée dans l'ISM. Le but est ici de pouvoir comparer les AIBs avec des spectres IR théoriques et expérimentaux de nanoparticules hydrocarbonées. Le travail réalisé ici a porté sur l'analyse structurale de ces systèmes. Des systèmes moléculaires désordonnés contenant de 24 à 60 atomes de carbone sont générés par des simulations Monte Carlo par échange de répliques à l'aide du potentiel réactif empirique AIREBO. Après minimisation de leur énergie potentielle, les structures ainsi créées sont caractérisées à l'aide de divers paramètres d'ordre. L'évolution de l'organisation structurale est analysée en fonction de la taille et de la composition chimique (rapport C/H) des systèmes. Les structures obtenues présentent une grande diversité. L'étude statistique des différents paramètres d'ordre permet de mettre en évidence des tendances. La forme globale prise par les agrégats dépend de leur taille. Les atomes d'hydrogène, souvent périphériques sur les structures de type cage, favorisent un degré d'organisation plus fort. Le calcul des spectres IR de ces structures sera réalisé dans le futur. Pour obtenir des spectres expérimentaux de nanoparticules hydrocarbonées en phase gazeuse, le développement du spectromètre en émission IR FIREFLY a été poursuivi et FIREFLY a été couplé avec une source de nanoparticules. Ces développements permettront bientôt de mesurer les spectres expérimentaux des systèmes d'intérêt.

**Mardi 5 juin 2018 à 14 h**

**Amphithéâtre du bât 520 (3<sup>ème</sup> étage)**

**Université Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex**

*La soutenance sera suivie d'un pot auquel vous êtes chaleureusement conviés.*