



ID de Contribution: 73

Type: **Contribution orale**

## Microsolvatation par l'hélium de composés hydrocarbonés polyaromatiques

*mardi 4 juillet 2023 09:00 (15 minutes)*

Dans cette contribution, nous explorons la propension de molécules hydrocarbonées polyaromatiques telles que fullérènes ou PAH à lier des atomes d'hélium à suffisamment basse température. Des mesures par spectrométrie de masse (groupe de P. Scheier, Innsbruck) renseignant sur les abondances relatives, couplées à des modélisation atomistiques combinant champs de force polarisables et simulations par intégrales de chemins fournissent des informations précieuses sur l'importance des effets quantiques de délocalisation vibrationnelle. En particulier nous montrons que l'isomère a une influence significative sur l'organisation du solvant et la fermeture de sa première couche.

Dans le cas du cation hexaphénylbenzène, l'orientation des cycles aromatiques latéraux affecte la capacité d'adsorption de l'hélium suffisamment pour mettre en évidence un abaissement de la symétrie survenant dans l'état cationique.

### Affiliation de l'auteur principal

Laboratoire Interdisciplinaire de Physique, CNRS & Université Grenoble Alpes

**Auteur principal:** CALVO, Florent (CNRS)

**Orateur:** CALVO, Florent (CNRS)

**Classification de Session:** Mini-colloques: MC13 Effets d'environnement et de solvatation sur les processus moléculaires

**Classification de thématique:** MC13 Effets d'environnement et de solvatation sur les processus moléculaires