Simulation des processus moléculaires à la surface de la glace.
Cas de la photodissociation de la molécule HCl.

Stéphane Briquez (*)(**), Maurice Monnerville(**), Brigitte Pouilly(*)(**), Céline Toubin(**), Sylvain Woittequand(***).

** IUT A – Université Lille 1-Département Mesures Physiques*
Boulevard Langevin-BP 179 59653 621 Villeneuve d'Ascq Cedex

*** Laboratoire PhLAM –UMR CNRS 8523- Bat P5bis- Université Lille 1*
59655 Villeneuve d'Ascq Cedex

**** LIC- Gorlaeus Laboratoria*
Universiteit Leiden- Postbus 9502-2300 RA Leiden (Pays-bas)

Stephane.briquez@univ-lille1.fr

Sections de rattachement : 30
Secteur : Secondaire

RÉSUMÉ La glace présente au sein des nuages polaires stratosphériques ou des cirrus troposphériques joue un rôle primordial dans l'évolution de la composition chimique de l'atmosphère. Afin de mieux quantifier l'impact de ces nuages sur la chimie atmosphérique, il est nécessaire d'avoir une meilleure caractérisation des mécanismes fondamentaux à l'origine de la chimie hétérogène à la surface de la glace et d'étudier comment la glace influence la physico-chimie et la photochimie des différents composés dans l'atmosphère.

Notre équipe utilise des méthodes numériques de dynamique moléculaire afin de simuler ces processus moléculaires à la surface de la glace. Dans la première partie de cette présentation, nous décrirons le type de glace présente dans l'atmosphère ainsi que les différents processus pouvant se dérouler à sa surface. Dans la deuxième, nous présenterons succinctement les méthodes permettant de simuler la dynamique de systèmes moléculaires. Enfin, nous donnerons, à titre d'illustration, les résultats obtenus pour la simulation du processus de photodissociation d'une molécule de HCl adsorbée à la surface de la glace.

.

MOTS-CLÉS : surface de glace, interactions moléculaires, photodissociation, paquet d'ondes quantiques, HCl.