



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Interstellar catalysts and the PAH universe

Campisi, D.

Citation

Campisi, D. (2021, September 14). *Interstellar catalysts and the PAH universe*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/3210124>

Version: Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/3210124>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <https://hdl.handle.net/1887/3210124> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Campisi, D.

Title: Interstellar catalysts and the PAH universe

Issue Date: 2021-09-14

BIBLIOGRAPHY

- [1] Usselman, M. C.; Rocke, A. J. "Chemistry". Encyclopedia Britannica, <https://www.britannica.com/science/chemistry>.
- [2] Tielens, A. G. G. M. *Molecular Astrophysics*; Cambridge University Press, 2021.
- [3] Gorbunov, D. S.; Rubakov, V. A. *Introduction to the Theory of the Early Universe*; World Scientific Publishing Company, 2011.
- [4] Boxaider, G. Big Bang. 1991; <http://cds.cern.ch/record/39140>.
- [5] Atkins, P.; Paula, J. *Atkins' physical chemistry*; Oxford University press, 2008.
- [6] Tennyson, J. *Astronomical Spectroscopy: An Introduction to the Atomic and Molecular Physics of Astronomical Spectra (2ND Edition)*; 2011.
- [7] Klemperer, W. *Annu. Rev. Phys. Chem* **2011**, 62, 173–184.
- [8] Tielens, A. G. G. M. *Rev. Mod. Phys.* **2013**, 85, 1021–1081.
- [9] Cuppen, H. M.; Walsh, C.; Lamberts, T.; Semenov, D.; Garrod, R. T.; Penteado, E. M.; Ioppolo, S. *Space Sci. Rev.* **2017**, 212, 1–58.
- [10] Hanefeld, U.; Lefferts, L. *Catalysis: An Integrated Textbook for Students*; WILEY-VCH Verlag GmbH Co. KGaA, Weinheim, 2008.
- [11] Jensen, F. *Introduction to Computational Chemistry*; John Wiley Sons, Inc.: Hoboken, NJ, USA, 2006.
- [12] Campisi, D.; Lamberts, T.; Dzade, N. Y.; Martinazzo, R.; ten Kate, I. L.; Tielens, A. G. G. M. *J. Phys. Chem. A* **2021**, 125, 2770–2781.

- [13] Pechukas, P. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **1981**, 32, 159–177.
- [14] Tielens, A. G. G. M. *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*; Cambridge University Press, 2005.
- [15] Anders, E.; Hayatsu, R.; Studier, M. H. *Astrophys. J. Lett.* **1974**, 192, L101.
- [16] Campisi, D.; Candian, A. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, 22, 6738–6748.
- [17] Rauls, E.; Hornekær, L. *Astrophys. J.* **2008**, 679, 531–536.
- [18] Ferullo, R. M.; Zubieta, C. E.; Belelli, P. G. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, 21, 12012–12020.
- [19] Rimola, A.; Taquet, V.; Ugliengo, P.; Balucani, N.; Ceccarelli, C. *Astron. Astrophys.* **2014**, 572, A70.
- [20] Goumans, T. P. M.; Catlow, C. R. A.; Brown, W. A. *J. Chem. Phys.* **2008**, 128, 134709.
- [21] Watanabe, N.; Kouchi, A. *Astrophys. J.* **2002**, 571, L173–L176.
- [22] Shock, E. L.; Schulte, M. D. *Nature* **1990**, 343, 728–731.
- [23] Andrews, H.; Boersma, C.; Werner, M. W.; Livingston, J.; Allamandola, L. J.; Tielens, A. G. G. M. *Astrophys. J.* **2015**, 807, 99.
- [24] Henning, T.; Salama, F. *Science* **1998**, 282, 2204–2210.
- [25] Allamandola, L.; Sandford, S.; Valero, G. *Icarus* **1988**, 76, 225–252.
- [26] Tielens, A. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **2008**, 46, 289–337.
- [27] van Dienenhoven, B.; Peeters, E.; Van Kerckhoven, C.; Hony, S.; Hudgins, D. M.; Allamandola, L. J.; Tielens, A. G. G. M. *Astrophys. J.* **2004**, 611, 928–939.
- [28] McGuire, B. A.; Burkhardt, A. M.; Kalenskii, S.; Shingledecker, C. N.; Remijan, A. J.; Herbst, E.; McCarthy, M. C. *Science* **2018**, 359, 202–205.
- [29] Hony, S.; Van Kerckhoven, C.; Peeters, E.; Tielens, A. G. G. M.; Hudgins, D. M.; Allamandola, L. J. *Astron. Astrophys.* **2001**, 370, 1030–1043.
- [30] Zhen, J.; Castellanos, P.; Paardekooper, D. M.; Linnartz, H.; Tielens, A. G. G. M. *Astrophys. J.* **2014**, 797, L30.
- [31] Berné, O.; Tielens, A. G. G. M. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2012**, 109, 401–406.

- [32] Rapacioli, M.; Calvo, F.; Spiegelman, F.; Joblin, C.; Wales, D. J. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 2487–2497.
- [33] Wakelam, V.; Bron, E.; Cazaux, S.; Dulieu, F.; Gry, C.; Guillard, P.; Habart, E.; Hornekær, L.; Morisset, S.; Nyman, G.; Pirronello, V.; Price, S. D.; Valdivia, V.; Vidali, G.; Watanabe, N. *Mol. Astrophys.* **2017**, *9*, 1–36.
- [34] Hollenbach, D. J.; Tielens, A. G. G. M. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **1997**, *35*, 179–215.
- [35] Draine, B. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **2003**, *41*, 241–289.
- [36] Navarro-Ruiz, J.; Sodupe, M.; Ugliengo, P.; Rimola, A. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 17447–17457.
- [37] Navarro-Ruiz, J.; Ugliengo, P.; Sodupe, M.; Rimola, A. *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 6873–6876.
- [38] Ruffle, D. P.; Herbst, E. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2000**, *319*, 837–850.
- [39] Campisi, D.; Simonsen, F. D. S.; Thrower, J. D.; Jaganathan, R.; Hornekær, L.; Martinazzo, R.; Tielens, A. G. G. M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, *22*, 1557–1565.
- [40] Jensen, P. A.; Leccese, M.; Simonsen, F. D. S.; Skov, A. W.; Bonfanti, M.; Thrower, J. D.; Martinazzo, R.; Hornekær, L. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2019**, *486*, 5492–5498.
- [41] Andrews, H.; Candian, A.; Tielens, A. G. G. M. *Astron. Astrophys.* **2016**, *595*, A23.
- [42] Jones, A. P. *ESA Special Publication* **2005**, *577*, 239–244.
- [43] Min, M.; Waters, L. B. F. M.; de Koter, A.; Hovenier, J. W.; Keller, L. P.; Markwick-Kemper, F. *Astron. Astrophys.* **2007**, *462*, 667–676.
- [44] Brucato, J. R.; Strazzulla, G.; Baratta, G.; Colangeli, L. *Astron. Astrophys.* **2004**, *413*, 395–401.
- [45] Jones, A. P.; Tielens, A. G. G. M.; Hollenbach, D. J.; McKee, C. F. *AIP Conf. Proc.* **1997**, *402*, 595–613.
- [46] Ehrenfreund, P.; Charnley, S. B. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **2000**, *38*, 427–483.
- [47] Sephton, M. A. *Nat. Prod. Rep.* **2002**, *19*, 292–311.
- [48] Aponte, J. C.; Elsil, J. E.; Glavin, D. P.; Milam, S. N.; Charnley, S. B.; Dworkin, J. P. *ACS Earth Space Chem.* **2017**, *1*, 3–13.

- [49] Pizzarello, S.; Schrader, D. L.; Monroe, A. A.; Lauretta, D. S. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A* **2012**, *109*, 11949–11954.
- [50] Wing, M. R.; Bada, J. L. *Orig. Life Evol. Biosph* **1991**, *21*, 375–383.
- [51] Basile, B. P.; Middleditch, B. S.; Oró, J. *Org. Geochem.* **1984**, *5*, 211–216.
- [52] Kalpana, M.; Babu, E.; Mani, D.; Tripathi, R.; Bhandari, N. *Planet. Space Sci.* **2021**, *198*, 105177.
- [53] Huang, Y.; Aponte, J. C.; Zhao, J.; Taroza, R.; Hallmann, C. *Earth Planet. Sci. Lett.* **2015**, *426*, 101–108.
- [54] Liu, L.; Qing, M.; Wang, Y.; Chen, S. *J. Mater. Sci. Technol.* **2015**, *31*, 599–606.
- [55] Brayfindley, E.; Irace, E. E.; Castro, C.; Karney, W. L. *J. Org. Chem.* **2015**, *80*, 3825–3831.
- [56] Yu, H.-G.; Nyman, G. *Astrophys. J.* **2012**, *751*, 3.
- [57] Stone, A. J.; Wales, D. J. *Chem. Phys. Lett.* **1986**, *128*, 501–503.
- [58] Stanković, S.; Marković, S.; Gutman, I.; Sretenović, S. *J. Mol. Model.* **2010**, *16*, 1519–1527.
- [59] Bollmann, W. *Crystal Defects and Crystalline Interfaces*; Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1970.
- [60] Cortese, R.; Campisi, D.; Duca, D. *ACS Omega* **2019**, *4*, 14849–14859.
- [61] Burr, P. A.; Cooper, M. W. D. *Phys. Rev. B* **2017**, *96*, 094107.
- [62] Brodholt, J. P.; Refson, K. *J. Geophys. Res. Solid Earth* **2000**, *105*, 18977–18982.
- [63] Marrocchi, Y.; Bekaert, D. V.; Piani, L. *Earth Planet. Sci. Lett.* **2018**, *482*, 23–32.
- [64] Kohn, W.; Sham, L. J. *Phys. Rev.* **1965**, *140*, A1133–A1138.
- [65] Hohenberg, P.; Kohn, W. *Phys. Rev.* **1964**, *136*, B864–B871.
- [66] Blinder, S. M. *Am. J. Phys.* **1965**, *33*, 431–443.
- [67] Perdew, J. P.; Schmidt, K. *AIP Conf. Proc.* **2001**, *577*, 1–20.
- [68] Perdew, J. P.; Wang, Y. *Phys. Rev. B* **1992**, *45*, 13244–13249.

- [69] Mattsson, A. E.; Armiento, R.; Schultz, P. A.; Mattsson, T. R. *Phys. Rev. B* **2006**, 73, 195123.
- [70] Zhang, Y.; Yang, W. *Phys. Rev. Lett.* **1998**, 80, 890–890.
- [71] Miehlisch, B.; Savin, A.; Stoll, H.; Preuss, H. *Chem. Phys. Lett.* **1989**, 157, 200–206.
- [72] Dion, M.; Rydberg, H.; Schröder, E.; Langreth, D. C.; Lundqvist, B. I. *Phys. Rev. Lett.* **2004**, 92, 246401.
- [73] Klimeš, J.; Bowler, D. R.; Michaelides, A. *J. Phys. Condens. Matter* **2009**, 22, 022201.
- [74] Becke, A. D. *J. Chem. Phys.* **1993**, 98, 5648–5652.
- [75] Perdew, J. P.; Ernzerhof, M.; Burke, K. *J. Chem. Phys.* **1996**, 105, 9982–9985.
- [76] Heyd, J.; Scuseria, G. E.; Ernzerhof, M. *J. Chem. Phys.* **2006**, 124, 219906.
- [77] Zhao, Y.; Truhlar, D. G. *Theor. Chem. Account* **2008**, 120, 215–241.
- [78] Tran, F.; Blaha, P.; Schwarz, K.; Novák, P. *Phys. Rev. B* **2006**, 74, 155108.
- [79] Biczysko, M.; Bloino, J.; Puzzarini, C. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2018**, 8, e1349.
- [80] Check, C. E.; Gilbert, T. M. *J. Org. Chem.* **2005**, 70, 9828–9834.
- [81] Grimme, S. *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **2011**, 1, 211–228.
- [82] Berland, K.; Cooper, V. R.; Lee, K.; Schröder, E.; Thonhauser, T.; Hyldgaard, P.; Lundqvist, B. I. *Rep. Prog. Phys.* **2015**, 78, 066501.
- [83] Lee, K.; Murray, E. D.; Kong, L.; Lundqvist, B. I.; Langreth, D. C. *Phys. Rev. B* **2010**, 82, 081101.
- [84] Hyldgaard, P.; Jiao, Y.; Shukla, V. *J. Phys. Condens. Matter* **2020**, 32, 393001.
- [85] Becke, A. D.; Johnson, E. R. *J. Chem. Phys.* **2005**, 123, 154101.
- [86] Frisch, M. J. et al. Gaussian 16 Revision C.01. 2016; Gaussian Inc. Wallingford CT.
- [87] Aprà, E. et al. *J. Chem. Phys.* **2020**, 152, 184102.

- [88] Smith, D. G. A. et al. *J. Chem. Phys.* **2020**, 152, 184108.
- [89] Sholl, D. S.; Steckel, J. A. *Density Functional Theory A Practical Introduction*; John Wiley Sons, Ltd, 2009.
- [90] Kresse, G.; Joubert, D. *Phys. Rev. B* **1999**, 59, 1758–1775.
- [91] Blöchl, P. E. *Phys. Rev. B* **1994**, 50, 17953–17979.
- [92] Kresse, G.; Furthmüller, J. *Phys. Rev. B* **1996**, 54, 11169–11186.
- [93] Giannozzi, P. et al. *J. Phys. Condens. Matter*. **2009**, 21, 395502.
- [94] Romero, A. H. et al. *J. Chem. Phys.* **2020**, 152, 124102.
- [95] Enkovaara, J. et al. *J. Phys. Condens. Matter*. **2010**, 22, 253202.
- [96] Slater, J. C.; Koster, G. F. *Phys. Rev.* **1954**, 94, 1498–1524.
- [97] Ruggiero, M. T.; Erba, A.; Orlando, R.; Korter, T. M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, 17, 31023–31029.
- [98] Soler, J. M.; Artacho, E.; Gale, J. D.; García, A.; Junquera, J.; Ordejón, P.; Sánchez-Portal, D. *J. Phys. Condens. Matter*. **2002**, 14, 2745–2779.
- [99] Dovesi, R.; Erba, A.; Orlando, R.; Zicovich-Wilson, C. M.; Civaleri, B.; Maschio, L.; Rérat, M.; Casassa, S.; Baima, J.; Salustro, S.; Kirtman, B. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2018**, 8, e1360.
- [100] Boys, S.; Bernardi, F. *Mol. Phys.* **1970**, 19, 553–566.
- [101] Sordo, J. A.; Chin, S.; Sordo, T. L. *Theor. Chem. Acc.* **1988**, 74, 101–110.
- [102] Monkhorst, H. J.; Pack, J. D. *Phys. Rev. B* **1976**, 13, 5188–5192.
- [103] Pham, H. Q.; Hermes, M. R.; Gagliardi, L. *J. Chem. Theory Comput.* **2020**, 16, 130–140.
- [104] Bisbo, M. K.; Hammer, B. *Phys. Rev. Lett.* **2020**, 124, 086102.
- [105] Candian, A.; Zhen, J.; Tielens, A. G. G. M. *Phys. Today* **2018**, 71, 38–43.
- [106] Berné, O.; Fuente, A.; Pantin, E.; Bujarrabal, V.; Baruteau, C.; Pilleri, P.; Habart, E.; Ménard, F.; Cernicharo, J.; Tielens, A. G. G. M.; Joblin, C. *Astron. Astrophys.* **2015**, 578, L8.
- [107] Beshore, E.; Lauretta, D.; Boynton, W.; Shinohara, C.; Sutter, B.; Everett, D.; Gal-Edd, J.; Mink, R.; Moreau, M.; Dworkin, J. *2015 IEEE Aerospace Conference* **2015**, 1–14.

- [108] Levison, H.; Olkin, C.; Noll, K.; Marchi, S. *European Planetary Science Congress* **2017**, EPSC2017–963.
- [109] Bauschlicher, Jr., C. W. *Astrophys. J.* **1998**, 509, L125–L127.
- [110] Thrower, J.; Jørgensen, B.; Friis, E.; Baouche, S.; Menella, V.; Luntz, A.; Andersen, M.; Hammer, B.; Hornekær, L. *Astrophys. J.* **2012**, 750, 1–6.
- [111] Menella, V.; Hornekær, L.; Thrower, J.; Accolla, M. *Astrophys. J. Lett.* **2012**, 745, 1–5.
- [112] Boschman, L.; Cazaux, S.; Spaans, S.; Hoekstra, M. R.; Schlathölter, T. *Astron. Astrophys.* **2015**, 579, 1–11.
- [113] Samanta, S. K.; Singh, O. V.; Jain, R. K. *Trends Biotechnol.* **2002**, 20, 243–248.
- [114] Jacinto, M. J.; Santos, O. H. C. F.; Landers, R.; Kiyohara, P. K.; Rossi, L. M. *Appl. Catal. B.* **2009**, 90, 688–692.
- [115] Segawa, Y.; Stephan, D. W. *Chem. Commun.* **2012**, 48, 11963–11965.
- [116] Scanlon, L. G.; Balbuena, P. B.; Zhang, Y.; Sandi, G.; Back, C. K.; Feld, W. A.; Mack, J.; Rottmayer, M. A.; Riepenhoff, J. L. *J. Phys. Chem. B* **2006**, 110, 7688–7694.
- [117] Knipp, D.; Street, R. A.; Völkel, A.; Ho, J. *J. Appl. Phys.* **2003**, 93, 347–355.
- [118] Anthony, J. E. *Chem. Rev.* **2006**, 106, 5028–5048.
- [119] Samorì, P.; Severin, N.; Simpson, C. D.; Müllen, K.; Rabe, J. P. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 9454–9457.
- [120] Pisula, W.; Feng, X.; Müllen, K. *Chem. Mater.* **2011**, 23, 554–567.
- [121] Bettinger, H. F.; Tönshoff, C. *Chem. Rec.* **2015**, 15, 364–369.
- [122] Salama, F.; Bakes, E. L. O.; Allamandola, L. J.; Tielens, A. G. G. M. *Astrophys. J.* **1996**, 458, 621–636.
- [123] Candian, A.; Sarre, P. J. *Mon. Notices Royal Astron. Soc.* **2015**, 448, 2960–2970.
- [124] Rasmussen, J. A. *J. Phys. Chem. A* **2013**, 117, 4279–4285.
- [125] Joblin, C.; Tielens, A. G. G. M.; Thrower, J. D.; Nilsson, L.; Jørgensen, B.; Baouche, S.; Balog, R.; Luntz, A. C.; Stensgaard, I.; Rauls, E.; Hornekær, L. *EAS Publications Series* **2011**, 46, 453–460.

- [126] Habart, E.; Boulanger, F.; Verstraete, L.; Walmsley, C. M.; Pineau des Forêts, G. *Astron. Astrophys.* **2004**, 414, 531–544.
- [127] Skov, A. L.; Thrower, J. D.; Hornekær, L. *Faraday Discuss.* **2014**, 168, 223–234.
- [128] Rasmussen, J. A.; Henkelman, G.; Hammer, B. *J. Chem. Phys.* **2011**, 134, 164703.
- [129] Cazaux, S.; Boschman, L.; Rougeau, N.; Reitsma, G.; Hoekstra, R.; Teillet-Billy, D.; Morisset, S.; Spaans, M.; Schlathölter, T. *Sci. Rep.* **2016**, 6, 1–7.
- [130] Tschersich, K. *J. Appl. Phys.* **2000**, 87, 2565–2573.
- [131] Frisch, M. J. et al. Gaussian 16, Revision A.03, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
- [132] Jensen, F. *J. Chem. Theory Comput.* **2014**, 10, 1074–1085.
- [133] Schlegel, H. B. *J. Comput. Chem.* **1982**, 3, 214–218.
- [134] Simon, S.; Duran, M.; Dannenberg, J. J. *J. Chem. Phys.* **1996**, 105, 11024–11031.
- [135] Schaftenaar, G.; Vlieg, E.; Vriend, G. *J. Comput.-Aided Mol. Des.* **2017**, 31, 789–800.
- [136] Schaftenaar, G.; Noordik, J. H. *J. Comput.-Aided Mol. Des.* **2000**, 14, 123–134.
- [137] Bonfanti, M.; Casolo, S.; Tantardini, G. F.; Ponti, A.; Martinazzo, R. *J. Chem. Phys.* **2011**, 135, 164701.
- [138] Bell, R. P. *Proc. R. Soc. Lond. A.* **1936**, 154, 414–429.
- [139] Evans, M. G.; Polanyi, M. *Trans. Faraday Soc.* **1938**, 34, 11–24.
- [140] Jurchescu, O. D.; Baas, J.; Palstra, T. T. *Appl. Phys. Lett.* **2004**, 84, 3061–3063.
- [141] De Angelis, F.; Gaspari, M.; Procopio, A.; Cuda, G.; Di Fabrizio, E. *Chem. Phys. Lett.* **2009**, 468, 193–196.
- [142] Roberson, L. B.; Kowalik, J.; Tolbert, L. M.; Kloc, C.; Zeis, R.; Chi, X.; Fleming, R.; Wilkins, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, 127, 3069–3075.
- [143] Klærke, B.; Toker, Y.; Rahbek, D. B.; Hornekær, L.; Andersen, L. H. *Astron. Astrophys.* **2013**, 549, 1–9.

- [144] Sánchez-Sánchez, C.; Ignacio Martínez, J. I.; del Arbol, N. R.; Ruffieux, P.; Roman Fasel, R.; López, M. F.; de Andres, P. L.; Martín-Gago, J. A. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 3550–3557.
- [145] Ricca, A.; Bakes, E. L. O.; Bauschlicher, Jr., C. W. *Astrophys. J.* **2007**, *659*, 858–861.
- [146] Hollenbach, D. J.; Tielens, A. G. G. M. *Rev. Mod. Phys.* **1999**, *71*, 173–230.
- [147] Castellanos, P.; Candian, A.; Zhen, J.; Linnartz, H.; Tielens, A. G. G. M. *Astron. Astrophys.* **2018**, *616*, A166.
- [148] Montillaud, J.; Joblin, C.; Toubanc, D. *Astron. Astrophys.* **2013**, *552*, A15.
- [149] Page, V. L.; Snow, T. P.; Bierbaum, V. M. *Astrophys. J.* **2009**, *704*, 274–280.
- [150] Boersma, C.; Bregman, J.; Allamandola, L. J. *Astrophys. J.* **2018**, *858*, 67.
- [151] Pety, J.; Teyssier, D.; Fossé, D.; Gerin, M.; Roueff, E.; Abergel, A.; Habart, E.; Cernicharo, J. *Astron. Astrophys.* **2005**, *435*, 885–899.
- [152] Foley, N.; Cazaux, S.; Egorov, D.; Boschman, L. M. P. V.; Hoekstra, R.; Schlathölter, T. *Mon. Notices Royal Astron. Soc.* **2018**, *479*, 649–656.
- [153] Castellanos, P.; Candian, A.; Andrews, H.; Tielens, A. G. G. M. *Astron. Astrophys.* **2018**, *616*, A167.
- [154] Bettinger, H. F. *J. Phys. Chem. B* **2005**, *109*, 6922–6924.
- [155] Pokropivny, V. V.; Ivanovskii, A. L. *Russ. Chem. Rev.* **2008**, *77*, 837–873.
- [156] Rodrigues, J. N. B.; Goncalves, P.; Rodrigues, N. F. G.; Ribeiro, R. M.; Lopes dos Santos, J. M. B.; Peres, N. M. R. *Phys. Rev. B* **2011**, *84*, 155435.
- [157] Ma, J.; Alfé, D.; Michaelides, A.; Wang, E. *Phys. Rev. B* **2009**, *80*, 033407.
- [158] Eggen, B. R.; Heggie, M. I.; Jungnickel, G.; Latham, C. D.; Jones, R.; Briddon, P. R. *Sci.* **1996**, *272*, 87–90.
- [159] Qi, X.; Guo, X.; Zheng, C. *App. Surf. Sci.* **2012**, *259*, 195–200.
- [160] Duplock, E. J.; Scheffler, M.; Lindan, P. J. D. *Phys. Rev. Lett.* **2004**, *92*, 225502.

- [161] Nascimento, A. J. M.; Nunes, R. W. *Nanotechnology* **2013**, 24, 435707.
- [162] Yu, H.; Nyman, G. *Astrophys. J.* **2012**, 751, 1–7.
- [163] Oetttl, S.; Huber, S. E.; Kimeswenger, S.; Probst, M. *Astron. Astrophys.* **2014**, 568, 1–8.
- [164] Yamanaka, S.; Kawakami, T.; Nagao, H.; Yamaguchi, K. *Chem. Phys. Lett.* **1994**, 231, 25–33.
- [165] Letardi, S.; Celino, M.; Cleri, F.; Rosato, V. *Surf. Sci.* **2002**, 496, 33–38.
- [166] Sebree, J. A.; Kislov, V. V.; Mebel, A. M.; Zwier, T. S. *J. Phys. Chem. A* **2010**, 114, 6255–6262.
- [167] Denis, P. A.; Iribarne, F. *J Mol.Struc.: THEOCHEM* **2009**, 907, 93 – 103.
- [168] Mardirossian, N.; Head-Gordon, M. *J. Chem. Theory Comput.* **2016**, 12, 4303–4325.
- [169] Bonfanti, M.; Martinazzo, R.; Tantardini, G. F.; Ponti, A. *J. Phys. Chem. C* **2007**, 111, 5825–5829.
- [170] Hornekær, L.; Šljivančanin, Z.; Xu, W.; Otero, R.; Rauls, E.; Stensgaard, I.; Lægsgaard, E.; Hammer, B.; Besenbacher, F. *Phys. Rev. Lett.* **2006**, 96, 156104.
- [171] Petucci, J.; Semone, S.; LeBlond, C.; Karimi, M.; Vidali, G. *J. Chem. Phys.* **2018**, 149, 014702.
- [172] Ricca, A.; Bauschlicher, C. W.; Jr.; Allamandola, L. J. *Astrophys. J.* **2011**, 729, 94.
- [173] Frenklach, M. *Phys. Chem. Chem. Phys* **2002**, 4, 2028–2037.
- [174] Cherchneff, I. *EAS Publ. Ser.* **2011**, 46, 177–189.
- [175] Baer, T.; Mayer, P. M. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **1997**, 8, 103–115.
- [176] Zewail, A. H. *Femtochemistry: Ultrafast Dynamics of the Chemical Bond*; pp 3–22.
- [177] Postma, J. *Interaction Dynamics in Collisions of Ions with Molecules and Clusters*. Ph.D. thesis, Rijksuniversiteit Groningen, 2011.
- [178] Huber, S. E.; Mauracher, A.; Probst, M. *AIP Adv.* **2013**, 3, 122104.
- [179] Vala, M.; Szczepanski, J.; Oomens, J.; Steill, J. D. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 5784–5791.

- [180] Szczepanski, J.; Oomens, J.; Steill, J. D.; Vala, M. T. *Astrophys. J.* **2011**, 727, 12.
- [181] Pilleri, P.; Joblin, C.; Boulanger, F.; Onaka, T. *Astron. Astrophys.* **2015**, 577, A16.
- [182] Trinquier, G.; Simon, A.; Rapacioli, M.; Gadéa, F. X. *Molecular Astrophysics* **2017**, 7, 27–36.
- [183] Wiersma, S. D.; Candian, A.; Bakker, J. M.; Martens, J.; Berden, G.; Oomens, J.; Buma, W. J.; Petrigiani, A. *Astron. Astrophys.* **2020**, 635, A9.
- [184] Bauschlicher, C. W.; Ricca, A.; Boersma, C.; Allamandola, L. J. *Astrophys. J., Suppl. Ser.* **2018**, 234, 32.
- [185] Sephton, M. In *Treatise on Geochemistry (Second Edition)*, second edition ed.; Holland, H. D., Turekian, K. K., Eds.; Elsevier: Oxford, 2014; pp 1–31.
- [186] Sánchez, M.; Ruetter, F. *Chem. Phys. Lett.* **2020**, 738, 136913.
- [187] Bohme, D. K. *Chem. Rev.* **1992**, 92, 1487–1508.
- [188] Ehrenfreund, P.; Rasmussen, S.; Cleaves, J.; Chen, L. *Astrobiology* **2006**, 6, 490–520.
- [189] Watanabe, N.; Kouchi, A. *Prog. Surf. Sci.* **2008**, 83, 439–489.
- [190] Fedoseev, G.; Cuppen, H. M.; Ioppolo, S.; Lamberts, T.; Linnartz, H. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2015**, 448, 1288–1297.
- [191] Chuang, K. J.; Fedoseev, G.; Qasim, D.; Ioppolo, S.; van Dishoeck, E. F.; Linnartz, H. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2017**, 467, 2552–2565.
- [192] Álvarez Barcia, S.; Russ, P.; Kästner, J.; Lamberts, T. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2018**, 479, 2007–2015.
- [193] Butscher, T.; Duvernay, F.; Danger, G.; Torro, R.; Lucas, G.; Carissan, Y.; Hagebaum-Reignier, D.; Chiavassa, T. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2019**, 486, 1953–1963.
- [194] Cherchneff, I.; Barker, J. R.; Tielens, A. G. G. M. *Astrophys. J.* **1992**, 401, 269.
- [195] Frenklach, M.; Feigelson, E. D. *Astrophys. J.* **1989**, 341, 372.
- [196] Joblin, C.; Tielens, A.; Cherchneff, I. *EAS Publ. Ser.* **2011**, 46, 177–189.

- [197] Bernstein, M. P.; Elsila, J. E.; Dworkin, J. P.; Sandford, S. A.; Allamandola, L. J.; Zare, R. N. *Astrophys. J.* **2002**, 576, 1115–1120.
- [198] Cook, A. M.; Ricca, A.; Mattioda, A. L.; Bouwman, J.; Roser, J.; Linnartz, H.; Bregman, J.; Allamandola, L. J. *Astrophys. J.* **2015**, 799, 14.
- [199] Brittain, D. R. B.; Lin, C. Y.; Gilbert, A. T. B.; Izgorodina, E. I.; Gill, P. M. W.; Coote, M. L. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2009**, 11, 1138–1142.
- [200] Kresse, G.; Hafner, J. *Phys. Rev. B* **1993**, 47, 558–561.
- [201] Kresse, G.; Hafner, J. *Phys. Rev. B* **1994**, 49, 14251–14269.
- [202] Kresse, G.; Furthmüller, J. *Comput. Mater. Sci.* **1996**, 6, 15–50.
- [203] Rimola, A.; Sodupe, M.; Ugliengo, P. *Life (Basel, Switzerland)* **2019**, 9, 10.
- [204] Salvador, P.; Paizs, B.; Duran, M.; Suhai, S. *J. Comput. Chem.* **2001**, 22, 765–786.
- [205] Grimme, S.; Antony, J.; Ehrlich, S.; Krieg, H. *J. Chem. Phys.* **2010**, 132, 154104.
- [206] Caldeweyher, E.; Ehlert, S.; Hansen, A.; Neugebauer, H.; Spicher, S.; Bannwarth, C.; Grimme, S. *J. Chem. Phys.* **2019**, 150, 154122.
- [207] Hamada, I. *Phys. Rev. B* **2014**, 89, 121103.
- [208] Buimaga-Iarinca, L.; Morari, C. *Theor. Chem. Acc.* **2014**, 133, 1502.
- [209] Demichelis, R.; Bruno, M.; Massaro, F. R.; Prencipe, M.; De La Pierre, M.; Nestola, F. *J. Comput. Chem.* **2015**, 36, 1439–1445.
- [210] Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, 77, 3865–3868.
- [211] Garrod, R. T.; Widicus Weaver, S. L. *Chemical Reviews* **2013**, 113, 8939–8960.
- [212] Suhasaria, T.; Thrower, J. D.; Zacharias, H. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2017**, 472, 389–399.
- [213] Navarro-Ruiz, J.; Ugliengo, P.; Rimola, A.; Sodupe, M. *J. Phys. Chem. A* **2014**, 118, 5866–5875.
- [214] Becker, L.; Glavin, D. P.; Bada, J. L. *Geochim. Cosmochim. Acta* **1997**, 61, 475–481.
- [215] de Leeuw, N. H.; Parker, S. C.; Catlow, C. R. A.; Price, G. D. *Phys. Chem. Miner.* **2000**, 27, 332–341.

- [216] Watson, G. W.; Oliver, P. M.; Parker, S. C. *Phys. Chem. Miner.* **1997**, *25*, 70–78.
- [217] de Leeuw, N. H. *J. Phys. Chem. B* **2001**, *105*, 9747–9754.
- [218] Rimola, A.; Trigo-Rodríguez, J. M.; Martins, Z. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19*, 18217–18231.
- [219] Asaduzzaman, A.; Zega, T.; Laref, S.; Runge, K.; Deymier, P.; Muralidharan, K. *Earth Planet. Sci. Lett.* **2014**, *408*, 355–361.
- [220] Watson, G. W.; Kelsey, E. T.; de Leeuw, N. H.; Harris, D. J.; Parker, S. C. *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **1996**, *92*, 433–438.
- [221] Caldeweyher, E.; Bannwarth, C.; Grimme, S. *J. Chem. Phys.* **2017**, *147*, 034112.
- [222] Caldeweyher, E.; Mewes, J.-M.; Ehlert, S.; Grimme, S. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, *22*, 8499–8512.
- [223] Grimme, S.; Ehrlich, S.; Goerigk, L. *J. Comput. Chem.* **2011**, *32*, 1456–1465.
- [224] Smith, D. G. A.; Burns, L. A.; Patkowski, K.; Sherrill, C. D. *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, *7*, 2197–2203.
- [225] Risthaus, T.; Grimme, S. *J. Chem. Theory Comput.* **2013**, *9*, 1580–1591.
- [226] Dudarev, S. L.; Botton, G. A.; Savrasov, S. Y.; Humphreys, C. J.; Sutton, A. P. *Phys. Rev. B* **1998**, *57*, 1505–1509.
- [227] Shankland, T. J. *Science* **1968**, *161*, 51–53.
- [228] Smyth, J. R.; Hazen, R. M. *Am. Mineral.* **1973**, *58*, 588–593.
- [229] Morin, F. J.; Oliver, J. R.; Housley, R. M. *Phys. Rev. B* **1979**, *19*, 2886–2894.
- [230] Nitsan, U.; Shankland, T. J. *Geophys. J. Int.* **1976**, *45*, 59–87.
- [231] Guan, S.-H.; Zhang, X.-J.; Liu, Z.-P. *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 25110–25116.
- [232] Kirfel, A.; Lippmann, T.; Blaha, P.; Schwarz, K.; Cox, D. F.; Rosso, K. M.; Gibbs, G. V. *Phys. Chem. Miner.* **2005**, *32*, 301–313.
- [233] Bruno, M.; Massaro, F. R.; Prencipe, M.; Demichelis, R.; De La Pierre, M.; Nestola, F. *J. Phys. Chem. C* **2014**, *118*, 2498–2506.

- [234] Geng, M.; Jónsson, H. *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 464–472.
- [235] Garcia-Gil, S.; Teillet-Billy, D.; Rougeau, N.; Sidis, V. *J. Phys. Chem. C* **2013**, *117*, 12612–12621.
- [236] Fei, H.; Katsura, T. *Phys. Chem. Miner.* **2016**, *43*, 119–126.
- [237] Weinbruch, S.; Palme, H.; Spettel, B. *Meteorit. Planet. Sci.* **2000**, *35*, 161–171.
- [238] Palme, H.; Lodders, K.; Jones, A. In *Treatise on Geochemistry (Second Edition)*, second edition ed.; Holland, H. D., Turekian, K. K., Eds.; Elsevier: Oxford, 2014; pp 15–36.
- [239] Westphal, A. J. et al. *Science* **2014**, *345*, 786–791.
- [240] Demircan, C. A.; Bozkaya, U. *J. Phys. Chem. A* **2017**, *121*, 6500–6509.
- [241] Kolakkandy, S.; Pratihari, S.; Aquino, A. J. A.; Wang, H.; Hase, W. L. *J. Phys. Chem. A* **2014**, *118*, 9500–9511.
- [242] Kulik, H. J. *J. Chem. Phys.* **2015**, *142*, 240901.
- [243] Schröder, H.; Creon, A.; Schwabe, T. *J. Chem. Theory Comput.* **2015**, *11*, 3163–3170.
- [244] Dang, Y.; Liu, Y.; Feng, X.; Chen, X.; Yang, C. *Appl. Surf. Sci.* **2019**, *486*, 137–143.
- [245] Ehrlich, S.; Moellmann, J.; Grimme, S. *Acc. Chem. Res.* **2013**, *46*, 916–926.
- [246] Lee, K.; Yu, J.; Morikawa, Y. *Phys. Rev. B* **2007**, *75*, 045402.
- [247] Langhoff, S. R. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 2819–2841.
- [248] Mackie, C. J.; Candian, A.; Huang, X.; Maltseva, E.; Petrignani, A.; Oomens, J.; Buma, W. J.; Lee, T. J.; Tielens, A. G. G. M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 1189–1197.
- [249] Parshall, G. W. *Science* **1980**, *208*, 1221–1224.
- [250] Nakao, Y.; Kashiwara, N.; Kanyiva, K. S.; Hiyama, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 16170–16171.
- [251] Davico, G. E.; Bierbaum, V. M.; DePuy, C. H.; Ellison, G. B.; Squires, R. R. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 2590–2599.
- [252] Arndtsen, B. A.; Bergman, R. G.; Mobley, T. A.; Peterson, T. H. *Acc. Chem. Res.* **1995**, *28*, 154–162.

- [253] Thalji, R. K.; Ahrendt, K. A.; Bergman, R. G.; Ellman, J. A. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 9692–9693.
- [254] Jia, C.; Piao, D.; Oyamada, J.; Lu, W.; Kitamura, T.; Fujiwara, Y. *Science* **2000**, *287*, 1992–1995.
- [255] Gorelsky, S. I. *Coord. Chem. Rev.* **2013**, *257*, 153–164.
- [256] Cho, J.-Y.; Tse, M. K.; Holmes, D.; Maleczka, R. E.; Smith, M. R. *Science* **2002**, *295*, 305–308.
- [257] Stephan, D.; Erker, G. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 46–76.
- [258] L  gar  , M.-A.; Courtemanche, M.-A.; Rochette,   .; Fontaine, F.-G. *Science* **2015**, *349*, 513–516.
- [259] Abu El-Rub, Z.; Bramer, E. A.; Brem, G. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2004**, *43*, 6911–6919.
- [260] James Cleaves II, H.; Michalkova Scott, A.; Hill, F. C.; Leszczynski, J.; Sahai, N.; Hazen, R. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 5502–5525.
- [261] Zamirri, L.; Corno, M.; Rimola, A.; Ugliengo, P. *ACS Earth Space Chem.* **2017**, *1*, 384–398.
- [262] Li, Q.; Dai, W.; Liu, B.; Sarre, P.; Xie, M.; Cheung, A.-C. *Mol. Astrophys.* **2018**, *13*, 22–29.
- [263] Ferrante, R.; Moore, M.; Nuth, J.; Smith, T. *Icarus* **2000**, *145*, 297–300.
- [264] Quadery, A. H.; Pacheco, S.; Au, A.; Rizzacasa, N.; Nichols, J.; Le, T.; Glasscock, C.; Schelling, P. K. *J. Geophys. Res. Planets* **2015**, *120*, 643–661.
- [265] Schwartz, K.; Lang, M. In *Encyclopedia of Geochemistry: A Comprehensive Reference Source on the Chemistry of the Earth*; White, W. M., Ed.; Springer International Publishing: Cham, 2016; pp 1–5.
- [266] Cami, J. *Proc. Int. Astron. Union.* **2013**, *9*, 370–374.
- [267] Maier, J. P.; Campbell, E. K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 4920–4929.
- [268] Radzig, V. In *Physico-Chemical Phenomena in Thin Films and at Solid Surfaces*; Trakhtenberg, L. I., Lin, S. H., Ilegbusi, O. J., Eds.; Thin Films and Nanostructures; Academic Press, 2007; Vol. 34; pp 231–345.
- [269] Liu, D. C.; Nosedal, J. *Math. Program.* **1989**, *45*, 503–528.

- [270] Fonseca Guerra, C.; Handgraaf, J.-W.; Baerends, E. J.; Bickelhaupt, F. M. *J. Comput. Chem.* **2004**, 25, 189–210.
- [271] Henkelman, G.; Uberuaga, B. P.; Jónsson, H. *J. Chem. Phys.* **2000**, 113, 9901–9904.
- [272] Larsen, A. H. et al. *J. Phys. Condens. Matter* **2017**, 29, 273002.
- [273] Bahn, S. R.; Jacobsen, K. W. *Comput. Sci. Eng.* **2002**, 4, 56–66.
- [274] Bitzek, E.; Koskinen, P.; Gähler, F.; Moseler, M.; Gumbusch, P. *Phys. Rev. Lett.* **2006**, 97, 170201.
- [275] Garrido Torres, J. A.; Jennings, P. C.; Hansen, M. H.; Boes, J. R.; Bligaard, T. *Phys. Rev. Lett.* **2019**, 122, 156001.
- [276] Brodholt, J. *Am. Mineral.* **1997**, 82, 1049–1053.
- [277] Stoneham, A. M. *Contemporary Physics* **1979**, 20, 535–545.
- [278] Rodríguez-Fortea, A.; Irle, S.; Poblet, J. M. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2011**, 1, 350–367.
- [279] Simon, A.; Joblin, C. *J. Phys. Chem. A* **2007**, 111, 9745–9755.
- [280] Schwieger, S.; Wagner, C.; Bruhn, C.; Schmidt, H.; Steinborn, D. *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2005**, 631, 2696–2704.
- [281] Russell D. Johnson III, *NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database*, NIST Standard Reference Database Number 101, Release 21. 2020.
- [282] Rokob, T. A.; Bakó, I.; Stirling, A.; Hamza, A.; Pápai, I. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 4425–4437.
- [283] Fukui, K.; Yonezawa, T.; Shingu, H. *J. Chem. Phys.* **1952**, 20, 722–725.
- [284] Reddy, V.; Dunn, T. L.; Thomas, C. A.; Moskovitz, N. A.; Burbine, T. H. *Asteroids IV*; 2015; pp 43–63.
- [285] Draine, B. T. *Interstellar extinction in the infrared. Infrared Spectroscopy in Astronomy*. 1989; p 93.
- [286] Kemper, F.; Vriend, W. J.; Tielens, A. G. G. M. *Astrophys. J.* **2004**, 609, 826–837.
- [287] Zeegers, S. T.; Costantini, E.; Rogantini, D.; de Vries, C. P.; Mutschke, H.; Mohr, P.; de Groot, F.; Tielens, A. G. G. M. *Astron. Astrophys.* **2019**, 627, A16.

- [288] Molster, F.; Kemper, C. *Space Sci. Rev.* **2005**, *119*, 3–28.
- [289] Bringa, E. M.; Kucheyev, S. O.; Loeffler, M. J.; Baragiola, R. A.; Tielens, A. G. G. M.; Dai, Z. R.; Graham, G.; Bajt, S.; Bradley, J. P.; Dukes, C. A.; Felter, T. E.; Torres, D. F.; van Breugel, W. *Astrophys. J.* **2007**, *662*, 372–378.
- [290] Carrez, P.; Demyk, K.; Cordier, P.; Gengembre, L.; Grimblot, J.; D'hendecourt, L.; Jones, A. P.; Leroux, H. *Meteorit. Planet. Sci.* **2002**, *37*, 1599–1614.
- [291] Henning, T. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **2010**, *48*, 21–46.
- [292] Rapacioli, M.; Joblin, C.; Boissel, P. *Astron. Astrophys.* **2005**, *429*, 193–204.
- [293] Lodders, K. *Astrophys. J.* **2003**, *591*, 1220–1247.
- [294] Anders, E.; Grevesse, N. *Geochim. Cosmochim. Acta* **1989**, *53*, 197–214.
- [295] Hammond, M. R.; Zare, R. N. *Geochim. Cosmochim. Acta* **2008**, *72*, 5521–5529.
- [296] Allain, T.; Leach, S.; Sedlmayr, E. *Astron. Astrophys.* **1996**, *305*, 602.
- [297] Hughbanks, T.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1983**, *105*, 3528–3537.

