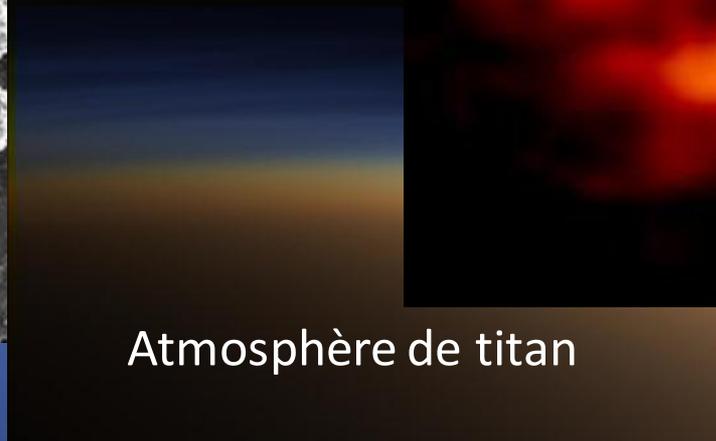
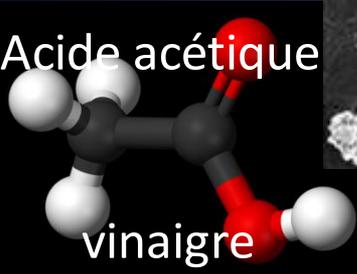
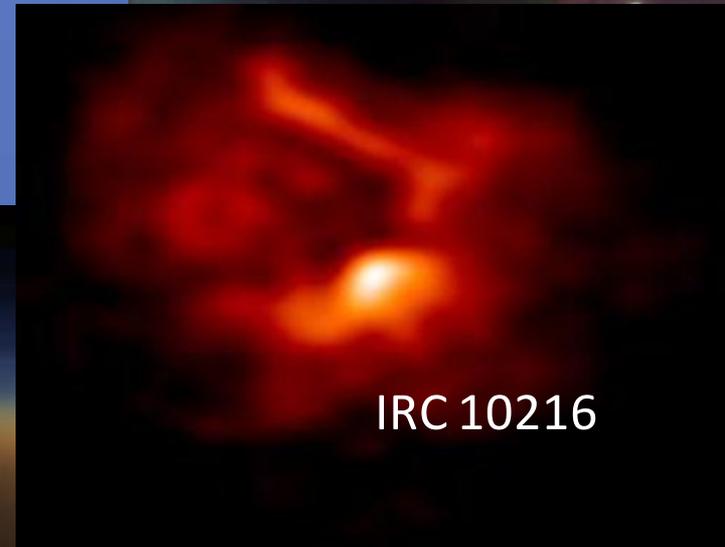
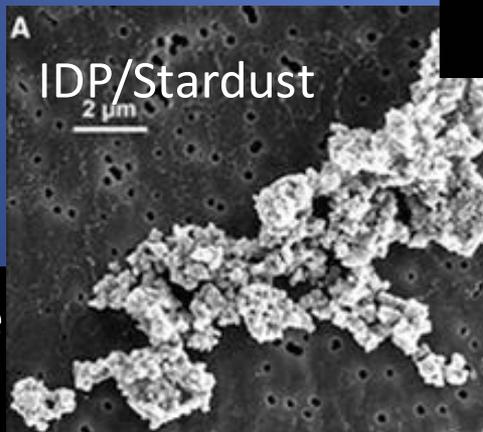
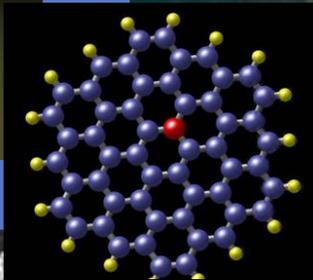
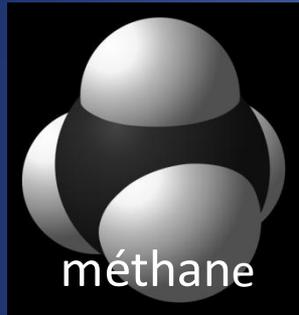
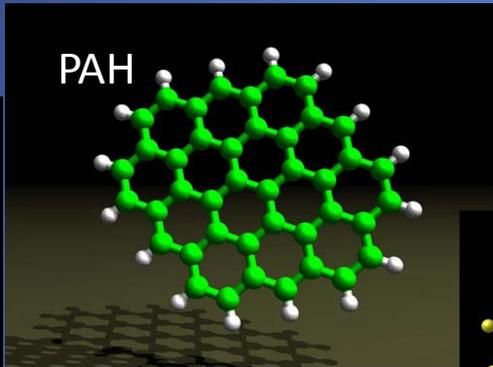
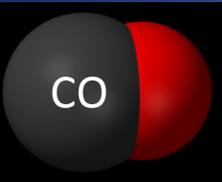


ASTROCHEMIE

comprendre la formation et la destruction des molécules et grains de l'espace



Pourquoi cet intérêt pour les molécules et les grains de l'espace

- ✓ Les molécules sont utilisées pour diagnostiquer la température (T_{kin}) la densité (n_{H}) et le champ de radiation caractérisant les objets où elles sont observées
- ✓ Les molécules refroidissent le milieu



La radiation s'échappe du nuage → il se refroidit

- ✓ Les grains protègent les molécules des photons destructeurs UV/Visibles
- ✓ Les grains jouent le rôle de catalyseur pour former les molécules : H_2
- ✓ Les grains sont les briques des corps solides (planétésimaux, ..., planètes)

100K, 10^2 cm^{-3}

Nuages diffus

Cirrus infrarouges

Nuages moléculaires

Chimie ion-molécule

10K, $10^4 - 10^9 \text{ cm}^{-3}$

Le MIS est continuellement enrichi par des éléments éjectés par les étoiles qui se meurent (vents stellaires des géantes rouges, nova et supernova)

Coeurs préstellaires

Chimie gaz-grains

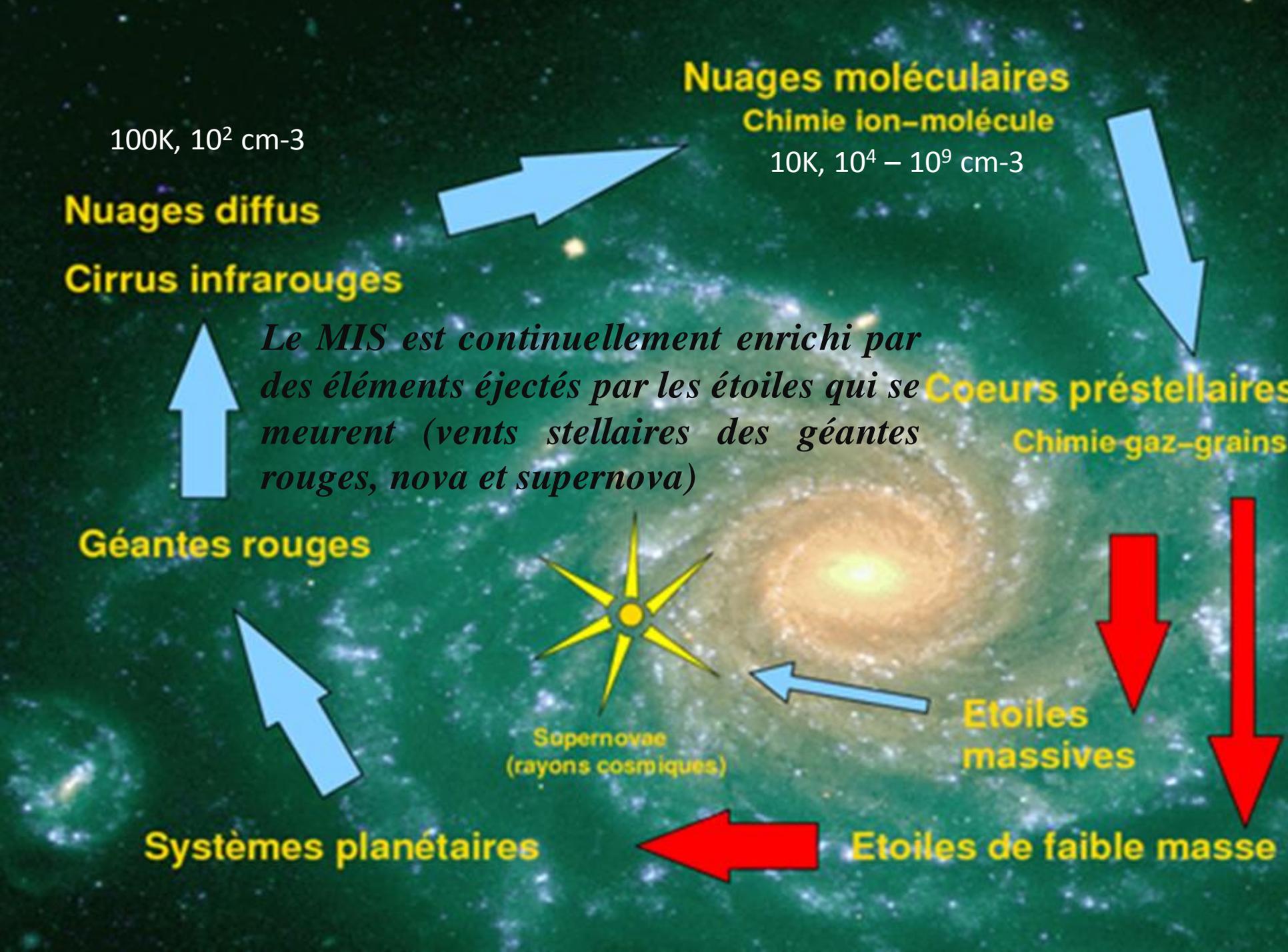
Géantes rouges

Supernovae
(rayons cosmiques)

Etoiles massives

Systèmes planétaires

Etoiles de faible masse



Différences majeures entre la chimie interstellaire et la chimie terrestre

- ✓ Les densités : faibles : $n \sim 100 - 10^4 \text{ cm}^{-3}$
à comparer à $n \sim 3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
- ✓ Températures : basses $\sim 10 - 100 \text{ K}$
à comparer à $T = 300 \text{ K}$
- ✓ Sources externes d'énergie
 - radiations: IR (grains), UV (étoiles)
 - Rayons cosmiques : $\zeta \sim 2 \cdot 10^{-17} \text{ s}^{-1}$
 - Les chocs (rayons X)

✓ Echelle de temps

Temps de vie d'un nuage $\approx 10^7 \text{ a}$

Formation d'une étoile $\approx 10^6 \text{ a}$

Temps de collision $\approx 1 \text{ mois}$ à 10^4 cm^{-3} (dans un nuage dense)

Temps chimique $\approx 10^5 \text{ a}$!

Milieu plutôt hostile pour de la chimie !

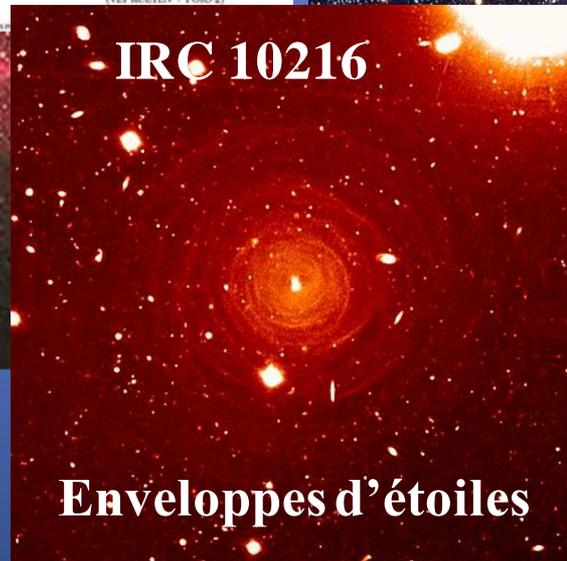
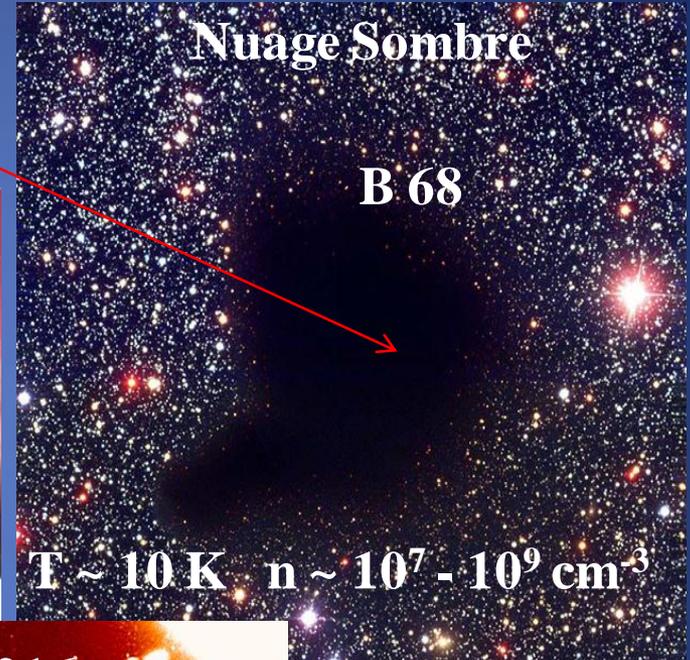
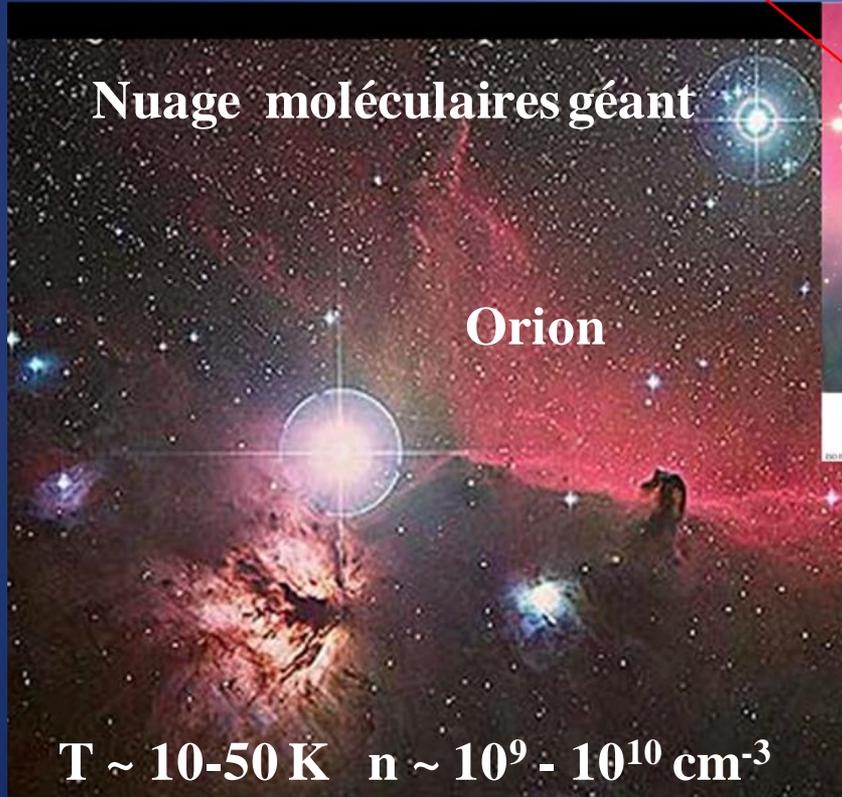
et pourtant ! > de 150 molécules détectées à ce jour

2 atoms	3 atoms	4 atoms	5 atoms	6 atoms	7 atoms	8 atoms	9 atoms	10 atoms	11 atoms
H ₂	C ₃	c-C ₃ H	C ₅	C ₅ H	C ₆ H	CH ₃ C ₃ N	CH ₃ C ₄ H	CH ₃ C ₅ N	HC ₉ N
AlF	C ₂ H	l-C ₃ H	C ₄ H	l-H ₂ C ₄	CH ₂ CHCN	HCOOCH ₃	CH ₃ CH ₂ CN	(CH ₃) ₂ CO	CH ₃ C ₆ H
AlCl	C ₂ O	C ₃ N	C ₄ Si	C ₂ H ₄ [*]	CH ₃ C ₂ H	CH ₃ COOH	(CH ₃) ₂ O	(CH ₂ OH) ₂	
C ₂ ^{**}	C ₂ S	C ₃ O	l-C ₃ H ₂	CH ₃ CN	HC ₅ N	C ₇ H	CH ₃ CH ₂ OH	CH ₃ CH ₂ CHO	
CH	CH ₂	C ₃ S	c-C ₃ H ₂	CH ₃ NC	CH ₃ CHO	H ₂ C ₆	HC ₇ N		
CH ⁺	HCN	C ₂ H ₂	H ₂ CCN	CH ₃ OH	CH ₃ NH ₂	CH ₂ OHCHO	C ₈ H		
CN	HCO	NH ₃	CH ₄	CH ₃ SH	c-C ₂ H ₄ O	l-HC ₆ H (?)	CH ₃ C(O)NH ₂		
CO	HCO ⁺	HCCN	HC ₃ N	HC ₃ NH ⁺	H ₂ CCHOH	CH ₂ CHCHO (?)			
CO ⁺	HCS ⁺	HCNH ⁺	HC ₂ NC	HC ₂ CHO	C ₆ H ^δ	CH ₂ CCHCN	C ₈ H ⁻		
CP	HOC ⁺	HNCO	HCOOH	NH ₂ CHO		NH ₂ CH ₂ CN	CH ₂ CHCH ₃		
SiC	H ₂ O	HNCS	H ₂ CNH	C ₅ N					
HCl	H ₂ S	HOCO ⁺	H ₂ C ₂ O	l-HC ₄ H (?)					
KCl	HNC	H ₂ CO	H ₂ NCN	l-HC ₄ N					
NH	HNO	H ₂ CN	HNC ₃	c-H ₂ C ₃ O					
NO	MgCN	H ₂ CS	SiH ₄	H ₂ CCNH (?)					
NS	MgNC	H ₃ O ⁺	H ₂ COH ⁺	C ₅ N ⁻		12 atoms		13 atoms	
NaCl	N ₂ H ⁺	c-SiC ₃	C ₄ H ⁺			C ₆ H ₆ (?)		HC ₁₁ N	PAH
OH	N ₂ O	CH ₃ [*]	CNHCO			C ₂ H ₅ OCH ₃ (?)			
PN	NaCN	C ₃ N ⁻							
SO	OCS	HCNO							
SO ⁺	SO ₂								
SiN	c-SiC ₂								
SiO	CO ₂								
SiS	NH ₂								
CS	H ₃ ⁺								
HF	H ₂ D ⁺ , HD ₂ ⁺								
SH	SiCN								
HD	AiNC								
FeO (?)	SiNC								
O ₂ (?)	HCP								
CF ⁺	CCP								
SiH (?)									
PO									
AlO									



Mais où trouve t'on ces molécules ?

Nuages non pénétrés par les photons UV
grâce aux grains qui font écran et permettent aux
molécules complexes de survivre car protégées



Peu de molécules dans les nuages diffus !

Nuages interstellaires diffus

$T \sim 80-100 \text{ K}$, $n \sim 10^2 \text{ cm}^{-3}$

nuages pénétrés par les photons UV

Photon $<$ IP(H)

Le carbone est ionisé

nuage essentiellement atomique

$f(\text{H}_2) < 0.3$

quelques diatomiques

-CO, OH, CH, CN, CH⁺

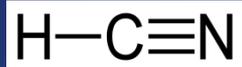


Les Pleiades

La diversité des molécules de l'espace

Plus de 150 molécules différentes détectées

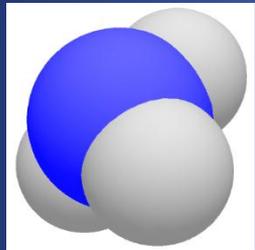
- ✓ ordinaires : NH_3 , H_2O , CH_3OH , HCN , NaCl
- ✓ exotiques : HNC , $\text{c-C}_3\text{H}_3$, C_3 , C_4 , HC_{11}N ,
- ✓ radicaux (20%) : C_2H
- ✓ ions (10%) : H_3^+
- ✓ anions : C_6H^-



Cyanure d'hydrogène

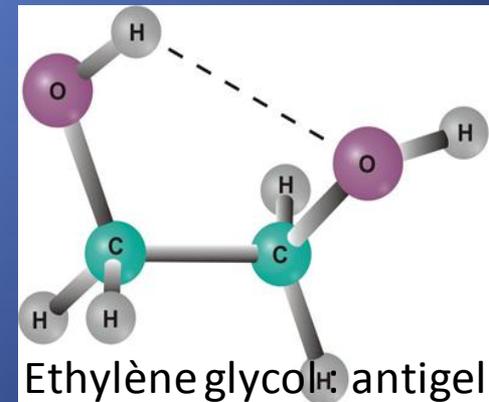
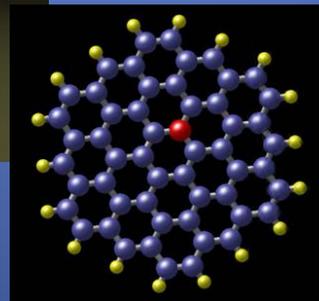
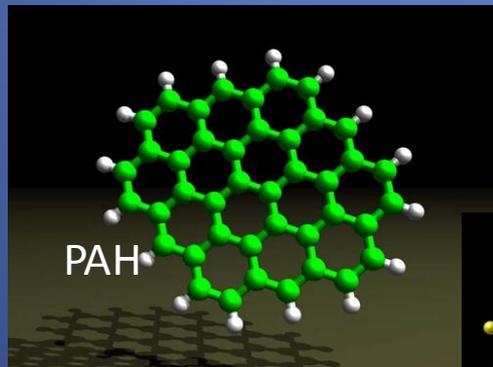


cyanopolyynes

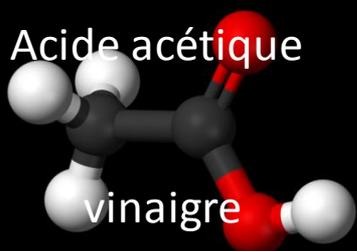


Ammoniac

La complexité des molécules de l'espace



Acide acétique



Comprendre la complexité moléculaire

Comprendre la formation et la destruction de ces molécules

et

Utiliser les molécules comme diagnostique des conditions physiques

Astrochimie

Modélisation astrochimique

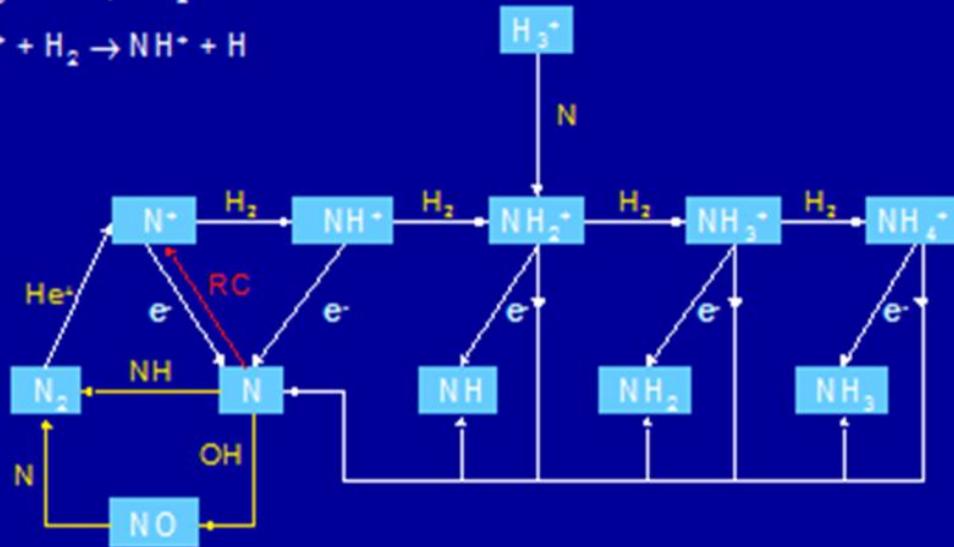
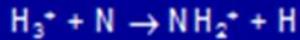
Observations

Astrophysiciens ↔ physico-chimistes

Modélisation astrochimique

1- construire de réseaux de réactions

Formation de NH_3 et des hydrures d'azote



2- résoudre la cinétique

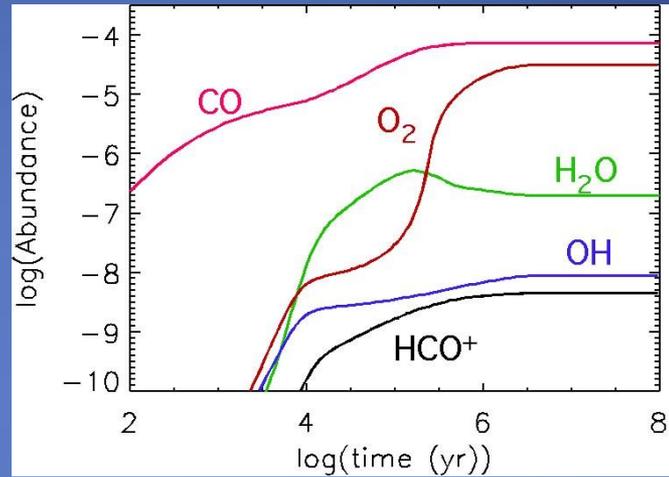
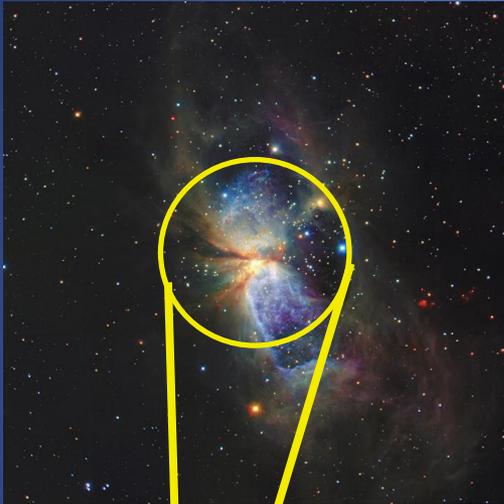
$$\frac{dn_i}{dt} = \sum k_{ij} n_i n_j - n_i \sum k_{ij} n_j$$

Production Destruction

équations différentielles couplées

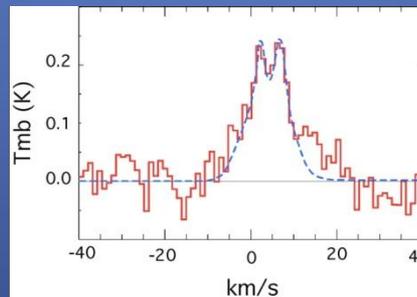
Un modèle astrochimique (osu-09-2008) c'est 455 espèces différentes connectées par 4457 réactions \rightarrow équations différentielles couplées

Les modèles astrochimiques sont utilisés pour diagnostiquer les conditions physiques des objets astrophysiques



Chemical model

Observations



Transfert radiatif

Abondances observées

Modélisation astrochimique

Paramètres:

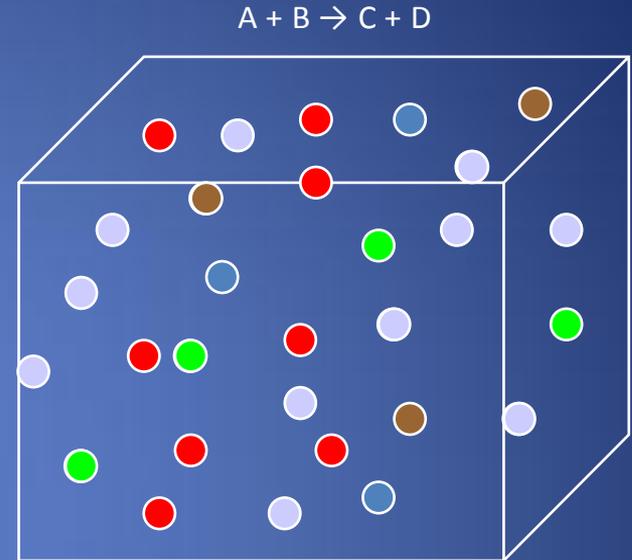
Température (K)

Densité (cm^{-3})

Abondances élémentaires

Champs de radiation (UV, X, RC)

Réseau chimique



Calcul des abondances chimiques

$$\frac{dn_i}{dt} = \underbrace{\sum k_{ij} n_i n_j}_{\text{Production}} - \underbrace{n_i \sum k_{ij} n_j}_{\text{Destruction}}$$

k constante de vitesse

Réseaux Chimiques et Constantes de vitesse



Calculs de chimie théorique

Equation de Schrödinger N noyaux et n électrons

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

Equations de la mécanique quantique appliquées à des systèmes de N atomes

pour

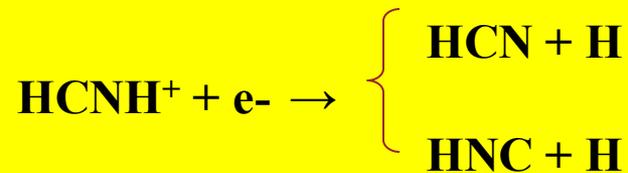
- ✓ Construction / Validation des réseaux de réaction
- ✓ Calcul des Constantes de vitesse / Sections efficaces

Saga du couple HCN et HNC

Modèle astrochimique

Collaboration avec E. Herbst

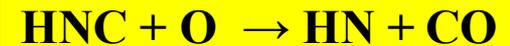
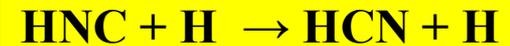
HCN/HNC=1

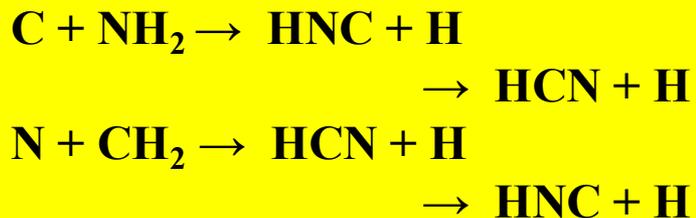
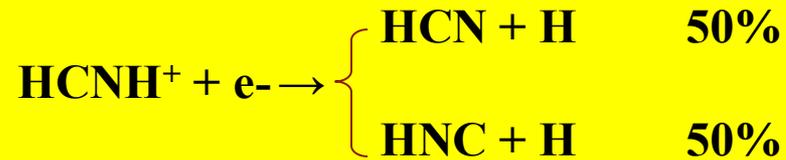


HNC/HCN > 1 dans TMC1



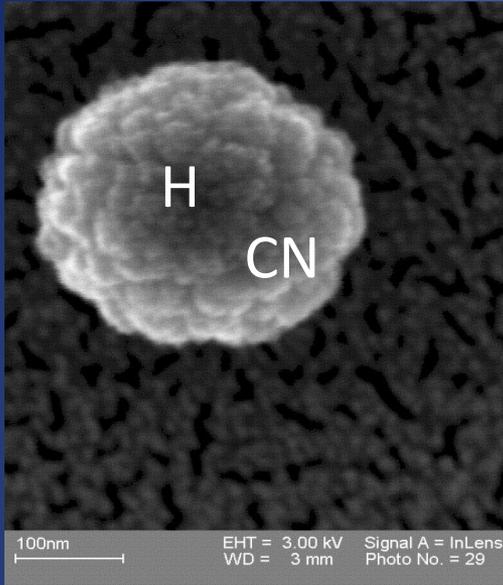
HCN/HNC > 1 dans OMC1





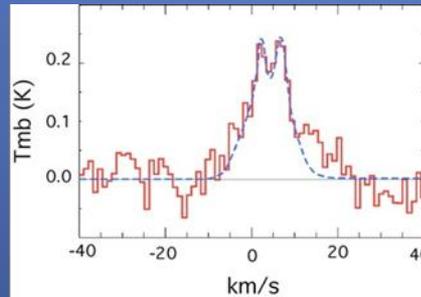
HCN/HNC = 1

Le modèle astrochimique ne peut rendre compte de l'observation !!



Chimie sur des grains ?

Problème observationnel ?



Analyse du
transfert radiatif

Abondances
observées

Les derniers calculs de taux de collision → réinterprétation des observations !
HCN/HNC = 1 !

Astrochimie au LUPM



Calcul de chimie théorique / quantique



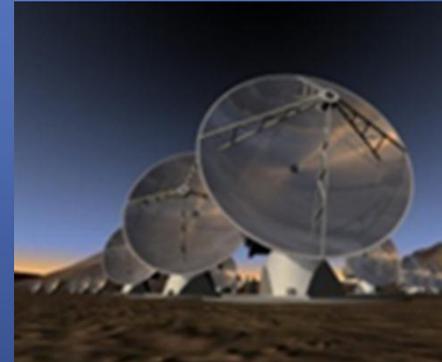
Formation - destruction des molécules et grains

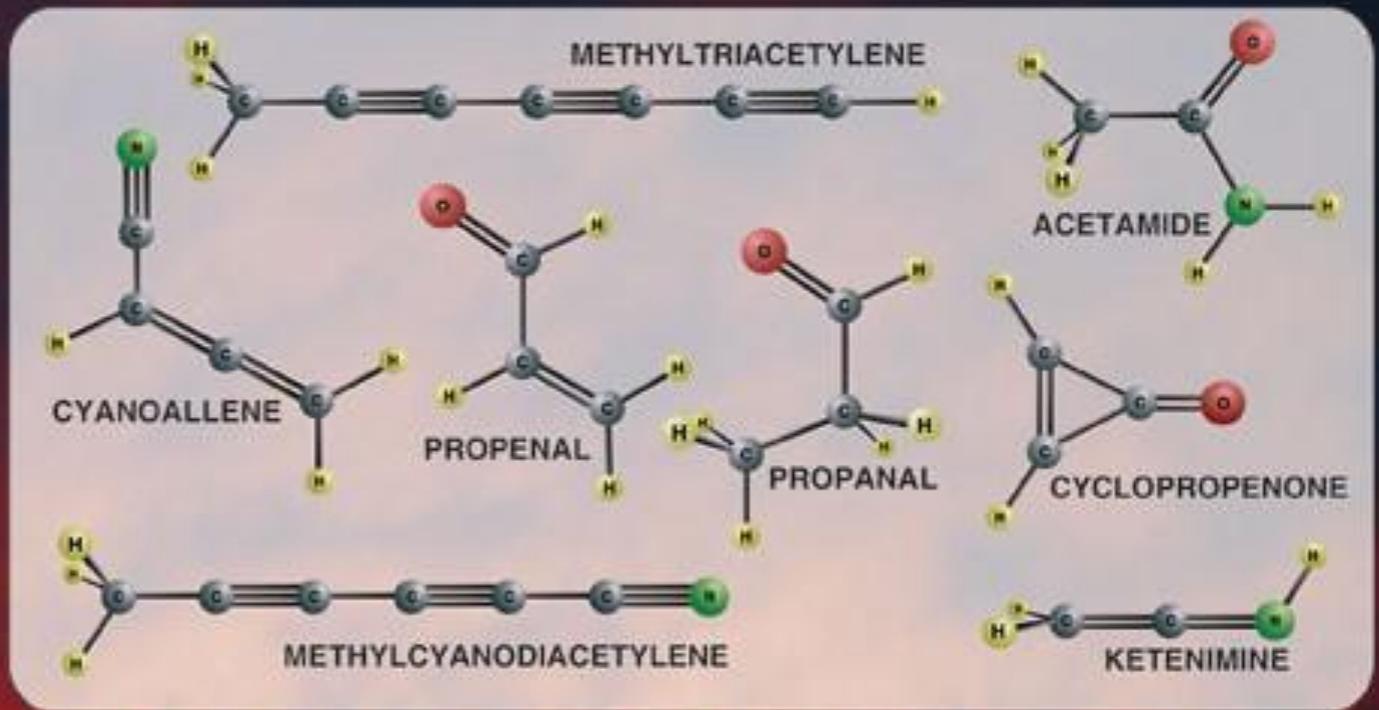
- ✓ milieu interstellaire
- ✓ enveloppes d'étoiles évoluées
- ✓ premières étoiles



Possibilité :

- ✓ calculs de constantes rotationnelles
- ✓ calculs de spectres IR
- ✓ calculs des transitions électroniques





Complexité moléculaire !

Green Bank Telescope (100m) – Hollis et al.

Détection récente à l'IRAM (30m) de l'aminonitrile $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CN}$
Précurseur possible de la glycine (acide aminé le plus simple)

