

Colloque général

19-21 novembre 2012

Paris

www.pcmi.univ-montp2.fr

*Couvent des cordeliers,
21 rue de l'école de médecine*

Thématiques du colloque :

*Vues nouvelles du milieu interstellaire
avec Herschel, Planck et ALMA*

Cycle des poussières interstellaires

*Physique et dynamique du milieu
interstellaire*

*Session Complexification moléculaire :
lien vers la chimie prébiotique*



Conférenciers invités :

*E. Falgarone (LERMA)
E. van Dishoeck (Leiden Obs.)
J.-P. Bernard (IRAP)
P. Hennebelle (LERMA)
C. Kahane (IPAG)
J. Cernicharo (CSIC Madrid)*

Colloque Général du programme national
Physique et **C**himie du **M**ilieu **I**nterstellaire

19-21 Novembre 2012 – Paris

Message du comité scientifique de PCMI

Le programme national Physique et Chimie du Milieu Interstellaire (PCMI) fédère une communauté d'astrophysiciens, de physiciens et de chimistes qui ont construit un véritable champ d'activités interdisciplinaires autour de l'observation, la modélisation chimique et dynamique des milieux interstellaires et circumstellaires ainsi que l'étude des processus physico-chimiques qui sont fondamentaux dans l'évolution de ces milieux, par des moyens expérimentaux et théoriques.

Le colloque général PCMI 2012 s'inscrit dans la démarche des colloques biannuels qui permet à notre communauté de se retrouver pour échanger autour des résultats obtenus. Il sera aussi l'occasion de faire le bilan du mandat 2009-2012 et de définir les grandes lignes de la prospective pour les années à venir.

Les présentations orales ont été organisées en grands thèmes qui mettent en avant les activités du programme et soulignent l'implication très grande de notre communauté dans la préparation et l'exploitation des missions spatiales Herschel et Planck sur la période 2009-2012. L'IRAM avec NOEMA à venir et l'interféromètre ALMA qui commence à fonctionner jouent également un rôle important. Le colloque sera l'occasion de faire le point sur les avancées réalisées grâce à ces grands instruments, les questions ouvertes et le rôle de la communauté PCMI.

Le développement d'outils expérimentaux et théoriques pour l'acquisition de données physico-chimiques originales reste un point fort de l'activité interdisciplinaire du PCMI et l'ensemble des présentations (orales et posters) reflète bien ce dynamisme.

Nous espérons que le colloque illustrera la diversité et la richesse de notre programme et la volonté de maintenir de forts échanges interdisciplinaires autour des grandes questions de l'astrophysique qui motive notre Programme.

Un grand merci au LOC pour l'organisation pratique et un bon colloque à tous,

Le Comité scientifique du PCMI

Comité scientifique de PCMI :

Maryvonne Gérin, Directrice du programme PCMI, Observatoire de Paris (co-chair)

Christine Joblin, Présidente du programme PCMI, Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie, Toulouse (co-chair)

André Canosa, Directeur-adjoint du programme PCMI, Institut de Physique de Rennes (co-chair)

Raphaël Bachiller, OAN, Madrid

Sylvie Cabrit, LERMA, Paris

Cecilia Ceccarelli, IPAG, Grenoble

Thierry Chiavassa, PIIM, Marseille

Emmanuel Dartois, IAS, Orsay

Anne Dutrey, L3AB, Bordeaux

Alexandre Faure, IPAG, Grenoble

Jean-Hugues Fillion, LPMAA, UPMC, Paris

Jean-Claude Guillemin, ENSC, Rennes

Stéphane Guilloteau, L3AB, Bordeaux

Patrick Hennebelle, LERMA, Paris

Franck Le Petit, LUTH, Paris

Marc-Antoine Miville-Deschênes, IAS, Orsay

Thomas Pino, ISMO, Orsay

Isabelle Ristorcelli, IRAP, Toulouse

Dahbia Talbi, LUPM, Montpellier

Comité local d'organisation du congrès :

Jean-Hugues Fillion, Université Pierre et Marie Curie (UPMC), Paris (chair)

Mathieu Bertin, LPMAA, UPMC

Mikhail Doronin, LPMAA, UPMC

Sylvie Cabrit, LERMA, OBSPM

Aline Gardez, LPMAA, UPMC

Maryvonne Gérin, LERMA, OBSPM

Xavier Michaut, LPMAA, UPMC

Françoise Pauzat, LCT, UPMC

Laurent Philippe, LPMAA, UPMC

Salem Tacine, LPMAA, UPMC

Walter Yvart, LERMA, OBSPM

Localisation / Plan d'accès

Conférence

Les séances scientifiques auront lieu sur le site des Cordeliers de l'Université Pierre et Marie Curie: Couvent des Cordeliers 21 rue de l'Ecole de Médecine, Paris 75006.

Les conférences et présentations orales se dérouleront dans l'amphithéâtre Pasquier. Les affiches seront exposées dans les vitrines réservées à cet usage dans le cloître.

Les pauses café et les déjeuners seront servis dans une salle donnant sur le cloître.

La station de métro Odéon (**lignes 4 et 10**) est située en face et la station Saint Michel (**accès aux RER B et C**) est très proche. Plusieurs lignes d'autobus (**63, 86, 87, 96**) desservent le site.

Dîner de conférence

Le dîner de conférence aura lieu à L'observatoire de Paris, salle Cassini. L'entrée se fait par le 77, avenue Denfert-Rochereau, 75014 Paris

Stations de Métro ou de RER les plus proches :

- Denfert-Rochereau (**lignes 4, 6, RER B**)
- Port Royal (**RER B**)
- Accès par autobus : Arrêt Observatoire-Port Royal (**Lignes 38, 83, 91**)

Plans d'accès:



Site de la conférence



Dîner de conférence

Sommaire

Programme du colloque	13
-----------------------	----

Présentations Orales	17
Milieu interstellaire avec Herschel et Planck (<i>E. Falgarone</i>)	19
The Anomalous Microwave Emission: a new window on the physics of Small grains ? (<i>L. Verstraete</i>)	20
Spectroscopie submillimétrique de molécules complexes et de radicaux pour les missions ALMA, Herschel (<i>R. Motiyenko</i>)	21
Analyzing observations of molecules in the ISM: Theoretical and experimental studies of energy transfer (<i>L. Wiesenfeld</i>)	22
A complete model of CH ⁺ rotational excitation including radiative and chemical pumping processes (<i>B. Godard</i>)	23
Unraveling the labyrinth of star formation with Herschel (<i>Ph. André</i>)	24
Star formation regions with Herschel and ALMA. Astrochemistry in the Netherlands (<i>E. van Dishoeck</i>)	25
Physical Structure of gas and dust in photodissociation regions observed with Herschel (<i>M. Köhler</i>)	26
Photodésorption d'analogues de glaces interstellaires (<i>E. Fayolle</i>)	27
Formation des structures dans le milieu interstellaire : aspects théoriques et numériques (<i>P. Hennebelle</i>)	28
Vers une cartographie 3D du MIS galactique par inversion des mesures individuelles d'absorption (<i>R. Lallement</i>)	29

Low velocity shocks as signatures of turbulent dissipation in diffuse irradiated gas (<i>P. Lessaffre</i>)	30
Early phases of Solar System formation: 3D physical & chemical modeling of the collapse of a prestellar dense core (<i>U. Hincelin</i>)	31
Cosmic-ray propagation in molecular clouds (<i>M. Padovani</i>)	32
Protostellar shocks in the time of Herschel (<i>B. Lefloch</i>)	33
Nouveau modèle PDR pour modéliser la physico-chimie du gaz interstellaire (<i>F. Le Petit</i>)	34
Molecular Spectroscopy in the ALMA era and Laboratory Astrophysics in Spain (<i>J. Cernicharo</i>)	35
Quelles Molécules faut-il rechercher dans le Milieu Interstellaire ? (<i>J.-C. Guillemin</i>)	36
Physics and chemistry of UV illuminated neutral gas: The Horsehead case (<i>P. Gratier</i>)	37
Nitrogen fractionation in dark clouds (<i>P. Hily-Blant</i>)	38
Molecular spectral surveys from millimeter range to far infrared. (<i>C. Kahane</i>)	39
Mécanismes et synthèses à la surface des grains froids (<i>F. Dulieu</i>)	40
Ice deuteration : models and observations to interpret the protostar history (<i>V. Taquet</i>)	41
Complexité moléculaire induite par des réactions thermiques dans des analogues de glaces interstellaires. (<i>F. Duvernay</i>)	42
VUV spectroscopy and photochemistry of interstellar and putative prebiotic molecules (<i>M. Schwell</i>)	43
Internal rotation in astrophysical and prebiotic molecules (<i>I. Kleiner</i>)	44
Détection et rapports de branchement des produits de réactions chimiques en phase gazeuse à très basses températures: nouveaux développements expérimentaux (<i>S. Le Picard</i>)	45

Investigation of ion chemistry and polymerization processes on interstellar grain and meteorite stimulants (<i>C. Pirim</i>)	46
Formation of the Sun in a dense collected shell: Evidence from meteorites (<i>M. Gounelle</i>)	47
Dust: From the Milky Way to nearby Galaxies (<i>J.-P. Bernard</i>)	48
Émission des poussières dans les régions denses : séparer les effets du transfert de rayonnement des propriétés des grains (<i>N. Ysard</i>)	49
Propriétés optiques d'analogues de la poussière interstellaire à basse température (<i>K. Demyk</i>)	50
Effets des rayons cosmiques sur les poussières hydrocarbonées (<i>M. Godard</i>)	51
Stabilité d'hydrocarbures aromatiques polycycliques isolés et en agrégat sondée par collision avec des ions lents (<i>P. Rousseau</i>)	52
Recent advances in the simulation of the absorption and emission spectroscopy of polycyclic aromatic hydrocarbons (<i>F. Falvo</i>)	53
Emission infrarouge de molécules aromatiques mesurée avec le spectromètre FIREFLY (<i>G. Féraud</i>)	54
From PAHs to carbon clusters in photodissociation regions (<i>J. Montillaud</i>)	55
VO-Theory & Services théoriques pour le Milieu Interstellaire (<i>F. Le Petit</i>)	56

Présentations par Affiches 57

Affiche n° 1. Détection de molécules organiques complexes dans les cœurs pré-stellaires (<i>A. Bacmann</i>)	59
Affiche n° 2. Anion production and relaxation in high velocity C_n^+ -He collisions; astrochemical implications (<i>K. Béroff</i>)	60
Affiche n° 3. A Herschel view of gas photoevaporation in the interstellar medium and protoplanetary disks (<i>O. Berné</i>)	61

Affiche n° 4. Adsorption des molécules organiques complexes sur les glaces interstellaires (<i>M. Bertin</i>)	62
Affiche n° 5. Croissance des anions dans les enveloppes circumstellaires : apports expérimentaux (<i>L. Biennier</i>)	63
Affiche n° 6. Dust destruction and heating in the IGM (<i>M. Bocchio</i>)	64
Affiche n° 7. Etude des isotopologues ¹³ C de l'éthanol : Spectres millimétriques et applications à la Radioastronomie (<i>A. Bouchez-Giret</i>)	65
Affiche n° 8. Formation de H ₂ : Influence des fluctuations de la température des grains (<i>E. Bron</i>)	66
Affiche n° 9. Photoionization / Mass Spectrometry Detection for Kinetic Studies of Neutral – Neutral Reactions at low Temperature: Development of a new apparatus (<i>M. Capron</i>)	67
Affiche n° 10. La formation de d'eau par la réaction O ₂ +D sur des surfaces d'intérêt astrophysique de silicates et de glace amorphes (<i>H. Chaabouni</i>)	68
Affiche n° 11. Rapports de branchements semi-empiriques pour la chimie des petits hydrocarbures très insaturés (<i>M. Chabot</i>)	69
Affiche n° 12. Extractions automatisées des bandes diffuses des spectres d'étoiles froides (<i>H.-C. Chen</i>)	70
Affiche n° 13. NH ₂ OH formation through NO hydrogenation on interstellar relevant substrates (<i>E. Congiu</i>)	71
Affiche n° 14. La deutération de l'eau dans les proto-étoiles de faible masse (<i>A. Coutens</i>)	72
Affiche n° 15. Analyses des composés organiques volatiles et des résidus organiques réfractaires provenant du réchauffement d'analogues de glace cométaire/interstellaire (<i>G. Danger</i>)	73
Affiche n° 16. Clathrate hydrates FTIR spectroscopy (<i>E. Dartois</i>)	74
Affiche n° 17. Rotational Excitation of CS in Collision with H ₂ : Ab-initio Potential Energy Surface, Bound States and Inelastic Cross Section (<i>O. Denis-Alpizard</i>)	75

Affiche n° 18. Molécules complexes dans la nébuleuse d'Orion Kleinmann-Low (<i>D. Despois</i>)	76
Affiche n° 19. Modélisation d'agrégats de pyrène cationiques : Structure, thermodynamique et spectroscopie (<i>L. Dontot</i>)	77
Affiche n° 20. Virtual Atomic and Molecular Data Centre: An interoperable infrastructure (<i>M.-L. Dubernet</i>)	78
Affiche n° 21. BASECOL2012: A Collisional Database Repository and Web Service within VAMDC (<i>M.-L. Dubernet</i>)	79
Affiche n° 22. The rotational excitation of AlCN and AlNC by He (<i>F. Dumouchel</i>)	80
Affiche n° 23. Mécanismes self assistés de reconstruction de la glace (<i>Y. Ellinger</i>)	81
Affiche n° 24. Ortho-para conversion of molecular hydrogen by proton and hydrogen exchange (<i>A. Faure</i>)	82
Affiche n° 25. Les grains interstellaires froids couverts de molécules sont-ils des catalyseurs efficaces pour la formation de H ₂ ? (<i>L. Gavilan</i>)	83
Affiche n° 26. The ortho-to-para ratio of newly formed H ₂ and D ₂ on amorphous solid water (<i>L. Gavilan</i>)	84
Affiche n° 27. Etude théorique des réactions C ₆ H ₆ ⁺ + C ₂ H ₂ , C ₆ H ₆ ⁺ + C ₂ H et C ₆ H ₆ + C ₄ H ₃ ⁺ pour la formation du naphtalène cation (<i>P. Ghesquiere</i>)	85
Affiche n° 28. Le milieu interstellaire diffus en direction de l'amas IRAS 18511+0146 : une bande à 3.4 μm particulièrement profonde (<i>M. Godard</i>)	86
Affiche n° 29. Détection du spectre THz du cation HN ₂ ⁺ par FTIR sur la ligne AILES du synchrotron SOLEIL (<i>S. Gruet</i>)	87
Affiche n° 30. The Horsehead WHISPER line survey (<i>V. Gùzman</i>)	88
Affiche n° 31. Effet des calculs électroniques pour la génération des surfaces de potentiel multi dimensionnelles sur les taux de collisions non réactives (<i>M. Hochlaf</i>)	89
Affiche n° 32. Impact of PAH evolution on the energetic of photon-dominated regions (<i>C. Joblin</i>)	90

Affiche n° 33. (De-)excitation rate coefficients for collisions of O ₂ with H ₂ (<i>Y. Kaliguna</i>)	91
Affiche n° 34. A New Approach to the Detection and Characterization of PAH Cations and PAH Photo-Products (<i>D. Kokkin</i>)	92
Affiche n° 35. Nouvelle méthodologie pour l'étude de réactions photo-induite : Application à la photochimie de l'ammoniac (<i>L. Krim</i>)	93
Affiche n° 36. Nouvelles surfaces d'énergie potentielle pour l'excitation rotationnelle de HCl par He et par H ₂ (<i>M. Lanza</i>)	94
Affiche n° 37. Grains, molécules et adsorption : de l'hydrogène aux COMs (<i>M. Lattalais</i>)	95
Affiche n° 38. The large scale environment of Betelgeuse from radio observations (<i>T. Le Berte</i>)	96
Affiche n° 39. An updated network for nitrogen chemistry (<i>R. Le Gal</i>)	97
Affiche n° 40. Spectroscopie de la molécule CO dans le VUV (<i>J.-L. Lemaire</i>)	98
Affiche n° 41. Anions chemistry in the interstellar medium (<i>F. Lique</i>)	99
Affiche n° 42. Herschel CHESS view of the intermediate-mass protocluster OMC-2 FIR 4 (<i>A. López-Sepulcre</i>)	100
Affiche n° 43. Integral wide-field spectroscopy of the interstellar medium sitelle: an imaging FTS on the CFH telescope (<i>J.-P. Maillard</i>)	101
Affiche n° 44. Depletion and ionization fraction in the L1498 and L1517B prestellar cores (<i>S. Maret</i>)	102
Affiche n° 45. Equilibration des états de spins nucléaires dans l'espace : apports des études en laboratoire (<i>X. Michaut</i>)	103
Affiche n° 46. Diffusion and reactivity of O and O ₂ (<i>M. Minissale</i>)	104
Affiche n° 47. Sensitivity analysis of gas-grain models for dense cloud chemistry (<i>H. Mokrane</i>)	105
Affiche n° 48. Le programme 'Galactic Cold Cores' : les propriétés des cœurs froids révélées par Herschel (<i>J. Montillaud</i>)	106

Affiche n° 49. La cohérence optique en astrophysique (<i>J. Moret-Bailly</i>)	107
Affiche n° 50. La réaction thermique de HCN et NH ₃ dans les glaces interstellaires (<i>J. Noble</i>)	108
Affiche n° 51. Les glaces interstellaires : catalyseur de l'hydrogénation de CO vers le méthanol ? (<i>A. Pernet</i>)	109
Affiche n° 52. Chimie sous irradiation dans les glaces interstellaires : une étude théorique (<i>J. Pilmé</i>)	110
Affiche n° 53. Spectroscopic study of the rotational structure of small PAHs IR/FIR bands. Experiments and calculations (<i>O. Pirali</i>)	111
Affiche n° 54. Cartographie 3D du MIS galactique par inversion des mesures d'absorption (<i>L. Puspitarini</i>)	112
Affiche n° 55. Nuclear spin selection rules in the chemistry of nitrogen hydrides (<i>C. Rist</i>)	113
Affiche n° 56. Expériences de laboratoire pour l'étude de la réactivité des ions et de leur spectroscopie (<i>C. Romanzin</i>)	114
Affiche n° 57. Characterization of PAH Content and Distribution in Selected Meteorites Employing the PIRENEA Set-up (<i>H. Sabbah</i>)	115
Affiche n° 58. The formation of cold atomic gas in the local interstellar medium (<i>E. Saury</i>)	116
Affiche n° 59. Resonant effects in photoionization and dissociative recombination of hydrogen species of astrochemical interest (<i>I. Schneider</i>)	117
Affiche n° 60. The F + H ₂ reaction at low temperatures (<i>I. Sims</i>)	118
Affiche n° 61. Interaction d'atomes avec des surfaces de type graphénique et ses applications astrophysiques (<i>D. Teillet-Billy</i>)	119
Affiche n° 62. La chimie chaude dans les disques protoplanétaires vue par Herschel (<i>W.F. Thi</i>)	120
Affiche n° 63. Réactivité du formaldéhyde et méthylamine dans des analogues de glaces interstellaires, évolution chimique (<i>V. Vinogradoff</i>)	121

Affiche n° 64. Water emission lines as diagnostics of disk winds
in young low-mass protostars (*W. Yvart*) 122

Affiche n° 65. Turbulence and Star Formation
in the Antennae Galaxies (*C.N. Herrera*) 123

Affiche n° 66. CN excitation in cold molecular clouds
and in circumstellar envelope. (*Y.N. Kalugina*) 124

Liste des participants 125

Programme du colloque

Lundi 19 Novembre

8h30	Accueil des participants, café dans la salle Marie Curie
10h00-10h20	Ouverture du colloque
<i>Session Vues Nouvelles du milieu interstellaire avec Herschel Planck et ALMA</i>	
10h20-11h00	Milieu interstellaire avec Herschel et Planck (<i>E. Falgarone</i>)
11h00-11h20	The Anomalous Microwave Emission: a new window on the physics of Small grains? (<i>L. Verstraete</i>)
11h20-11h40	Spectroscopie submillimétrique de molécules complexes et de radicaux pour les missions ALMA, Herschel (<i>R. Motiyenko</i>)
11h40 -12h00	Analyzing observations of molecules in the ISM: Theoretical and experimental studies of energy transfer (<i>L. Wiesenfeld</i>)
12h00-12h20	A complete model of CH ⁺ rotational excitation including radiative and chemical pumping processes (<i>B. Godard</i>)
12h20-12h40	Unraveling the labyrinth of star formation with Herschel (<i>Ph. André</i>)
12h40-14h00	Buffet
14h00-15h00	Séance de Poster
15h00-15h40	Star formation regions with Herschel and ALMA. Astrochemistry in the Netherlands (<i>E. van Dishoeck</i>)
15h40-16h00	Physical Structure of gas and dust in photodissociation regions observed with Herschel (<i>M. Köhler</i>)
16h00-16h30	Pause café
16h30-16h50	Photodésorption d'analogues de glaces interstellaires (<i>E. Fayolle</i>)
<i>Session Physique et dynamique du Milieu Interstellaire (I)</i>	
16h50-17h30	Formation des structures dans le milieu interstellaire : aspects théoriques et numériques (<i>P. Hennebelle</i>)
17h30-17h50	Vers une cartographie 3D du MIS galactique par inversion des mesures individuelles d'absorption (<i>R. Lallement</i>)
17h50-18h10	Low velocity shocks as signatures of turbulent dissipation in diffuse irradiated gas (<i>P. Lesaffre</i>)

Mardi 20 Novembre

Session Physique et dynamique du Milieu Interstellaire (II)

- 9h00-9h20 Early phases of Solar System formation: 3D physical & chemical modeling of the collapse of a prestellar dense core (*U. Hincelin*)
- 9h20-9h40 Cosmic-ray propagation in molecular clouds (*M. Padovani*)
- 9h40-10h00 Protostellar shocks in the time of Herschel (*B. Lefloch*)
- 10h00-10h20 Nouveau modèle PDR pour modéliser la physico-chimie du gaz interstellaire (*F. Le Petit*)
- 10h20-10h45 Pause Café**

Session Complexification moléculaire : lien vers la chimie prébiotique

- 10h45-11h25 Molecular Spectroscopy in the ALMA era and Laboratory Astrophysics in Spain (*J. Cernicharo*)
- 11h25-11h45 Quelles Molécules faut-il rechercher dans le Milieu Interstellaire ? (*J.C. Guillemin*)
- 11h45-12h05 Physics and chemistry of UV illuminated neutral gas: The Horsehead case (*P. Gratier*)
- 12h05-12h25 Nitrogen fractionation in dark clouds (*P. Hily-Blant*)
- 12h25-12h40 Présentations Neyco et Bruker (*exposants*)
- 12h40-14h00 Buffet**
- 14h00-15h00 Séance de Poster
- 15h00-15h40 Molecular spectral surveys from millimeter range to far infrared. (*C. Kahane*)
- 15h40-16h00 Mécanismes et synthèses à la surface des grains froids (*F. Dulieu*)
- 16h00-16h30 Pause café**
- 16h30-16h50 Ice deuteration : models and observations to interpret the protostar history (*V. Taquet*)
- 16h50-17h10 Complexité moléculaire induite par des réactions thermiques dans des analogues de glaces interstellaires (*F. Duvernay*)

17h10-18h10 Table ronde: Complexification moléculaire : lien vers la chimie prébiotique (*L. d'Hendecourt*)

Interventions orales courtes et discussions :

- VUV spectroscopy and photochemistry of interstellar and putative prebiotic molecules (*M. Schwell*)
- Internal rotation in astrophysical and prebiotic molecules (*I. Kleiner*)
- Détection et rapports de branchement des produits de réactions chimiques en phase gazeuse à très basses températures: nouveaux développements expérimentaux (*S. Le Picard*)
- Investigation of ion chemistry and polymerization processes on interstellar grain and meteorite stimulants (*C. Pirim*)
- Formation of the Sun in a dense collected shell Evidence from meteorites (*M. Gounelle*)

Mercredi 21 Novembre

Session Cycle de la poussière interstellaire

- 9h00-9h40 Dust: From the Milky Way to nearby Galaxies (*J.-P. Bernard*)
- 9h40-10h00 Émission des poussières dans les régions denses : séparer les effets du transfert de rayonnement des propriétés des grains (*N. Ysard*)
- 10h-10h20 Propriétés optiques d'analogues de la poussière interstellaire à basse température (*K. Demyk*)
- 10h20-10h50 Pause Café**
- 10h50-11h10 Effets des rayons cosmiques sur les poussières hydrocarbonées (*M. Godard*)
- 11h10-11h30 Stabilité d'hydrocarbures aromatiques polycycliques isolés et en agrégat sondée par collision avec des ions lents (*P. Rousseau*)
- 11h30-11h50 Recent advances in the simulation of the absorption and emission spectroscopy of polycyclic aromatic hydrocarbons (*F. Falvo*)
- 11h50-12h10 Emission infrarouge de molécules aromatiques mesurée avec le spectromètre FIREFLY (*G. Féraud*)
- 12h10-12h30 From PAHs to carbon clusters in photodissociation regions (*J. Montillaud*)
- 12h30-14h00 Buffet**

Session Bilan et prospective du PCMI

- 14h00-14h30 Présentation du bilan du PCMI (*A. Canosa, S. Cabrit*)
- 14h30-15h15 Présentations OV, bases de données, codes numériques (*F. Le Petit et invitées M.-L. Dubernet et V. Wakelam (TBC)*)
- 15h15- 17h15 Présentation de la prospective et discussions
- Instrumentation : moyens d'observation sol et espace (*E. Dartois, S. Guilloteau*)
 - Instrumentation : moyens de laboratoire, grands équipement de la physique (*J.-H. Fillion, A. Canosa*)
 - PCMI et enseignement (*C. Ceccarelli, T. Chiavassa*)
- Prospective scientifique*
- Des nuages moléculaires aux systèmes protoplanétaires (*S. Cabrit, P.Hennebelle*)
 - Origine de la complexité de la matière (*C. Joblin, C. Ceccarelli*)
 - Le MIS de la Voie lactée à l'extragalactique (*M.-A. Miville Deschênes, I. Ristorcelli*)
- 17h15-17h25 Conclusions
- 18h30 Visites organisées à l'observatoire de Paris**
- 19h30 Apéritif**
- 20h00 Dîner de conférence**

Présentations Orales

New perspectives on the interstellar medium: *Herschel* and *Planck* highlights

Edith Falgarone¹

¹ *LERMA/LRA, UMR 8112 CNRS, Ecole Normale Supérieure & Observatoire de Paris, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05 – France*

Herschel and *Planck* are profoundly modifying our perspectives on the evolution of interstellar matter (ISM) and star formation because they have opened key spectral windows with unprecedented combinations of high sensitivity with spectral and spatial resolution for the former, and with all-sky coverage and polarization capabilities for the latter.

The talk will focus on the gems brought by these two missions in the field of interstellar matter and cold dense cores which either challenge existing models and theories or bring unique clues to the physics of gas and dust. It will include (1) the wealth of unique informations offered by the unexpected molecular richness of the diffuse ISM, in particular that of light hydrides (HF, CH⁺, SH⁺ and SH, OH⁺ and H₂O⁺, H₃O⁺), (2) questions raised by the high spectral resolution observations of the [CII] line, the major coolant of the diffuse ISM, (3) the self-similar structure of dust emission in diffuse molecular clouds, (4) the tight association of molecular emissions and high-energy tracers in selected extra-galactic environments, (5) the existence of CO-dark and overluminous-CO diffuse gas, as seen by *Planck*, (6) outlines of the dust polarization properties.

Far-reaching implications in our interpretation of extra-galactic observations, up to the high-*z* universe, will be discussed.

The Anomalous Microwave Emission : a new window on the physics of Small grains ?

Laurent Verstraete¹ & Nathalie Ysard¹

*¹ IAS, UMR8617 du CNRS, Institut d'Astrophysique Spatiale, Université Paris Sud,
Bât. 121 91405, Orsay Cedex – France*

Since the mid 90's, observations of the microwave sky have shown the presence of an unexpected emission component centered around 30 GHz and called Anomalous Microwave Emission (AME). This emission is believed to originate from dust grains because it correlates with dust emission IR tracers (e.g. 100 microns). Because it falls in the spectral range where cosmic microwave background fluctuations are best studied, AME is since actively studied. We will discuss recent observations of this emission component in intensity and polarization including the Planck early results. We will show that among the several emission mechanisms proposed to explain AME, the emission of small, rapidly spinning dust grains is the most probable at this stage. Current models of this emission will be discussed and the potential of AME observations to study dust evolution will be highlighted.

Spectroscopie submillimétrique de molécules complexes et de radicaux pour les missions ALMA, Herschel.

R. A. Motiyenko¹, L. Margulès¹, S. Bailleux¹, M. Goubet¹, T. R. Huet¹,
G. Wlodarczak¹ et J. C. Guillemin²

¹ *Laboratoire Phlam, UMR CNRS 8523, Université de Lille 1, Bat. P5, 59655
Villeneuve d'Ascq Cedex, France*

² *Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS – ENSCR, Avenue du Général
Leclerc, CS 50837, 35708 Rennes Cedex 7, France*

Nos travaux portent sur la spectroscopie en laboratoire (du domaine centimétrique au THz) de molécules organiques complexes, d'ions et de radicaux, d'intérêt astrophysique en support aux missions Alma, Herschel. Une détection sans ambiguïté de nouvelles molécules ne peut se faire sans des études préliminaires en laboratoire avec de bonnes précision et résolution.

L'étude des espèces isotopiques des molécules organiques complexes (acétaldéhyde, diméthyl-ether, méthylamine) reste un axe important, mais nous mettons un effort particulier sur les molécules potentiellement détectables dans le milieu interstellaire qui ne sont pas stables dans les conditions du laboratoire et nécessitent des synthèses in-situ. Telles que les molécules étudiées récemment : aminopropionitrile[1] , di-isocyanométhane[2]

Enfin, le groupe de spectroscopie du Laboratoire Phlam développe également une activité autour de la ligne AILES du synchrotron SOLEIL (St Aubin), dans le domaine THz. Les études récentes concernent des molécules organiques complexes importantes telles que le formiate de méthyle[3], et son isomère le glycolaldéhyde, ainsi que des radicaux : ¹⁵NH[4], ¹⁵NH₂.

Références

- [1] H. Møllendal, L. Margulès, A. Belloche, R. A. Motiyenko, A. Konovalov, K. M. Menten, and J. C. Guillemin, *A&A*, 538, A51 (2012)
- [2] R. A. Motiyenko, L. Margulès, and J.-C. Guillemin, *A&A*, 544, A82 (2012)
- [3] M. Tudorie, V. Ilyushin, J. Vander Auwera, O. Pirali, P. Roy and T. R. Huet, *J. Chem. Phys.*, 137 064304 (2012)
- [4] S. Bailleux, M. A. Martin-Drumel, L. Margulès, O. Pirali, G. Wlodarczak, P. Roy, E. Roueff, M. Gerin, A. Faure and P. Hily-Blant, *A&A*, 538, A135 (2012)

Analyzing observations of molecules in the ISM: Theoretical and experimental studies of energy transfer.

L. Wiesenfeld¹, A. Faure¹, F. Lique², N Dumouchel², N. Feautrier³,
A. Spielfiedel³, M. Hochlaf⁴

¹ *UJF-Grenoble 1/CNRS, Institut de Planétologie
et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG) UMR 5274, Grenoble*

² *LOMC CNRS, Le Havre University, 76058 Le Havre France*

³ *LERMA and UMR 8112 of CNRS, Observatoire de Paris-Meudon, 92195 Meudon
Cedex, France*

Our laboratories have recently calculated a set of collision coefficients characterizing the efficiency of energy transfer between molecular hydrogen or helium and a large variety of interstellar molecules. We have considered with molecules ranging from light molecules or ions, observed by the Herschel Space Observatory, to medium size molecules, observed by mm antennas [1,2], to heavy complex organic molecules [3]. Various range of kinetic temperatures have been probed, from the low temperature pertaining to cold ISM environment ($T \sim 10$ K) up to warm shocked gas ($T \geq 500$ K).

In order to assess the theoretical results that we put forward in the literature and the databases, we try and compare theoretical and experimental results from various set-ups. In particular, we shall present extensive experimental and theoretical data for water colliding with ortho and para H_2 , as well as sets of pressure broadening data drawn both from theory and experiments [4,5]

References

- [1] F. Lique, MA Alexandre, J ChemPhys, **136**, 124312 (2012).
- [2] A. Spielfiedel et al., MNRAS, **421**, 1891 (2012).
- [3] A. Faure, L. Wiesenfeld, K. Szalewicz, J. Chem. Phys., **135**, 024301 (2012)
- [4] B Drouin, L. Wiesenfeld, Phys. Rev A, **86**, 022705 (2012)
- [5] A Faure, L. Wiesenfeld, B. Drouin, J. Tennyson, JQSRT, 2012 (in print).

A complete model of CH⁺ rotational excitation including radiative and chemical pumping processes.

Godard B.¹, Cernicharo J.²

¹ *Departamento de Astrofísica, Centro de Astrobiología, CSIC-INTA, Torrejon de Ardoz, Madrid, Spain*

Excitation of far-infrared and submillimetric molecular lines may originate from non-reactive collisions, chemical formation [1], or near-infrared and optical fluorescences [2,3]. As a template, we investigate the impact of each of these processes on the excitation of the methylidyne cation CH⁺ and on the intensities of its rotational transitions recently detected in emission in dense photodissociation regions (PDRs) and in planetary nebulae [4,5].

We have developed a non-local thermodynamic equilibrium (non-LTE) excitation model including the entire energy structure of CH⁺ [6], i.e. taking into account the pumping of its vibrational and electronic states by near-infrared and optical photons. The model includes the theoretical cross-sections of non-reactive collisions with H, H₂, He, and e, and takes into account the recent measurement of state-specific chemical rates [7], i.e. the excitation and deexcitation of the rotational levels of CH⁺ during its chemical formation and destruction. In order to confirm our results we have also performed an extensive analytical study, which we use to predict the main excitation process of several diatomic molecules, namely HF, HCl, SiO, CS, and CO.

At densities $n_{\text{H}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, the excitation of the rotational levels of CH⁺ is dominated by the radiative pumping of its electronic and vibrational states if the intensities of the radiation field at 0.4 and 4 μm are larger than 10^5 and 10^8 times those of the local interstellar radiation field (ISRF) respectively. Below these values, the chemical pumping is the dominant source of excitation of the $J > 1$ levels, even at large kinetic temperature ($\sim 1000 \text{ K}$). The far-infrared emission lines of CH⁺ observed in the Orion Bar and the NGC 7027 PDRs are consistent with the predictions of chemical models assuming an incident far-ultraviolet (FUV) radiation field of $\sim 3 \times 10^4$ (in Draine's unit) and densities of $\sim 5 \times 10^4$ and $\sim 2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ respectively. In the case of NGC 7027, the estimation of the density is 10 to 100 times smaller than those deduced by traditional excitation models. Applying our excitation model to other X¹ Σ^+ ground state diatomic molecules, we find that HF and SiO are the species the most sensitive to radiative pumping of their vibrational and electronic states respectively. In both cases, the minimal near-infrared and optical/UV radiation field intensities required to modify their rotational level populations are $\sim 10^3$ times those of the local ISRF at densities $n_{\text{H}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$. All these results point towards interstellar and circumstellar media with densities lower than previously established and cast doubts on the clumpiness of well studied molecular clouds.

Références

- [1] Black, J. H. 1998, *Faraday Discussions*, 109, 257
- [2] Scoville, N. Z., Krotkov, R., & Wang, D. 1980, *ApJ*, 240, 929
- [3] Black, J. H. & van Dishoeck, E. F. 1987, *ApJ*, 322, 412
- [4] Naylor, D. A., Dartois, E., Habart, E., et al. 2010, *A&A*, 518, L117
- [5] Cernicharo, J., Liu, X.-W., Gonzalez-Alfonso, E., et al. 1997, *ApJ*, 483, L65
- [6] Hakalla, R., Ke,pa, R., Szajna, W., & Zachwieja, M. 2006, *European Physical Journal D*, 38, 481
- [7] Plasil, R., Mehner, T., Dohnal, P., et al. 2011, *ApJ*, 737, 60
- [8] Zanchet et al., 2012, in prep.

Unraveling the labyrinth of star formation with Herschel

Ph. André¹, V. Könyves^{1,2}, D. Arzoumanian¹, P. Palmeirim¹,
N. Peretto¹, A. Menshchikov¹, and the Herschel Gould Belt Consortium

¹ *Laboratoire d'Astrophysique, UMR AIM, CEA Saclay, Orme des Merisiers - Bât. 709, 91191, Gif-sur-Yvette Cedex – France ;*

² *Institut d'Astrophysique Spatiale, UMR 8617, 91405, Orsay Cedex – France*

The Herschel Space Observatory is providing us with unprecedented images of the initial conditions and early phases of star formation at far-infrared and submillimeter wavelengths. We will present a brief overview of recent results obtained on the structure of molecular clouds as part of the Herschel Gould Belt survey. The role of filaments in the star formation process and their likely connection to interstellar turbulence will be emphasized.

Overall, the Herschel results suggest that it may be possible to understand both the IMF and the global rate of star formation in galaxies by studying the physics of how dense structures (e.g. filaments, cores) form and grow in the ISM of our own Galaxy. Despite an apparent complexity, global star formation may be governed by relatively simple universal laws from filament to galactic scales.

Références

- [1] André Ph., Men'shchikov, A., Bontemps, S. et al., A&A, 518, L102 (2010)
- [2] Arzoumanian, D., André Ph., Didelon, P. et al., A&A, 529, L6 (2011)
- [3] Bontemps, S., André Ph., Könyves, V. et al., A&A, 518, L85 (2010)
- [4] Könyves, V., André Ph., Men'shchikov, A. et al., A&A, 518, L106 (2010)
- [5] Men'shchikov, A., André, Ph., Didelon, P. et al., A&A, 518, L103 (2010)
- [6] Palmeirim, P., André, Ph., Kirk, J. et al., A&A, submitted
- [7] Peretto, N., André, Ph., Könyves, V. et al., A&A, 541, A63 (2012)
- [8] Ward-Thompson, D., Kirk, J., André, Ph. et al. A&A, 518, L106 (2010)

Star-forming regions with Herschel and ALMA

Ewine F. van Dishoeck^{1,2}

¹ *Leiden Observatory, Leiden University, The Netherlands*

² *Max Planck Institute for Extraterrestrial Physics, Garching, Germany*

Astrochemistry is entering a golden age, with new powerful telescopes from radio to infrared wavelengths opening up studies of molecules from the smallest <1 AU scales in protoplanetary disks to the largest kpc scales in high redshift star-forming galaxies. In this talk, an overview will be given of recent developments in the field, including the wealth of data on water and other molecules from Herschel and the surprisingly rich near- and mid-infrared spectra of disks. Recent results from single dish and millimeter interferometers on simple and complex molecules will be summarized in the context of models of the physical and chemical evolution of star- and planet-forming regions. The promise of ALMA in revolutionizing the field will be illustrated with early results, and the need for further laboratory work emphasized. Also, a brief overview of activities and organization of astrochemistry in the Netherlands will be given.

Références

[1] van Dishoeck, E.F. et al., *PASP* 123, 138(2011)

[2] van Dishoeck, E.F., *Astrochemistry of dense protostellar and protoplanetary environments*, in *Astrophysics in the next decade (Astrophysics and Space Science proceedings, Springer)*, p.187 (2009)

[3] Caselli, P., Ceccarelli, C., *Astronomy & Astrophysics Review*, in press (2012) 2012arXiv1210.6368C

Physical structure of gas and dust in photodissociation regions observed with Herschel

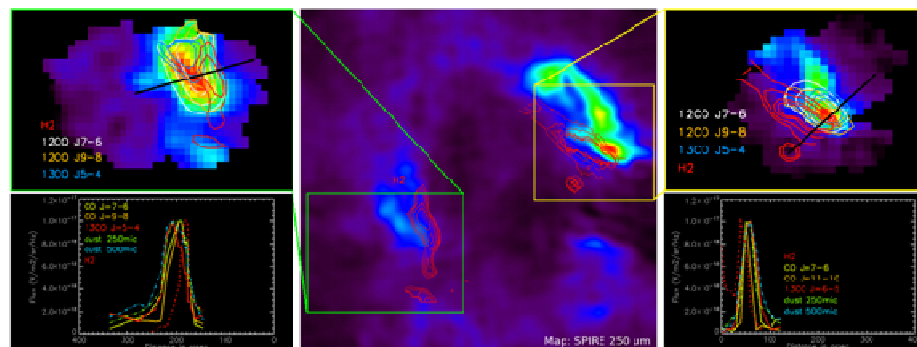
Köhler, M.¹, Habart, E.¹, Arab, H.¹, Ayasso, H.¹, Bernard-Salas, J.¹, Abergel, A.¹ et Joblin, C.²

¹ Institut d'Astrophysique Spatiale, 91405, Orsay Cedex– France

² CESR-CNRS, University of Toulouse, 31028, Toulouse. Cedex 04 – France

To understand the formation and evolution of molecular clouds and the star formation process it is of main interest to determine the density, temperature and dynamic of gas and dust. We study photodissociation regions (PDRs), at the interface between the ionised and cold molecular gas, observed with Herschel. PDRs are ideal to study the influence of young stars on the surrounding gas and dust and whether these young stars trigger star formation. We present the Herschel observations and analysis of dust and gas in different PDRs, including in NGC 7023, NGC 2023, the Horsehead nebula and the Orion bar. Herschel SPIRE FTS fully sampling maps with the best resolution for each wavelength allow us to study the spatial and spectral energy distribution of a wealth of intermediate rotational ^{12}CO and ^{13}CO lines. A radiative transfer code is used to assess the kinetic temperature, density and column density in which the lines arise at different positions in the cloud. The dust continuum emission is analysed by combining Herschel and Spitzer observations. The physical properties are derived using a dust model in combination with a radiative transfer code.

We find in several PDRs, such as NGC 7023 (see Figure), that the medium is highly inhomogeneous and structured, containing several relatively dense and irradiated condensations. Excited ^{12}CO and ^{13}CO lines reveal a high column density of warm/cool and dense gas at the edge of the condensations seen in the bulk of the dust emission. Excited H_2 traces a diffuse and warmer gas which is slightly shifted towards the star with a much smaller column density. The CO and dust analysis agree with each other in the density and column density. The dust temperature is lower than those of the gas close to the PDRs edge while it is similar further inside the cloud. Comparing the physical conditions to the positions of known young stellar objects candidates, we find that new stars are being formed in the dense and cold condensation regions found here.



Photodésorption d'analogues de glaces interstellaires

Edith Fayolle¹, Mathieu Bertin², Claire Romamzin³, Xavier Michaut², Laurent Philippe², Karin Öberg⁴, Harold Linnartz¹, et Jean-Hugues Fillion²

¹ *Leiden Observatory, Sackler Laboratory for Astrophysics, PO Box 9513, 2300RA, Leiden – The Netherlands*

² *LPMAA, CNRS UMR 7092, Université Pierre et Marie Curie, case 76, 4 place Jussieu, 75252, Paris Cedex 05 – France*

³ *LCP, CNRS UMR 8000, Université Paris-Sud, Bât 349, 15 avenue Jean Perrin, 91405, Orsay Cedex – France*

⁴ *University of Virginia, Chemistry Department, P.O. Box 400319, VA22904-4319, Charlottesville, Virginia – United States of America*

Dans les régions froides du milieu interstellaire (MIS), les molécules se forment et/ou se condensent à la surface des grains interstellaires, formant les manteaux de glaces. Aux très basses températures, la désorption thermique peut être négligée, mais des phénomènes de désorption non-thermiques peuvent contribuer à expliquer la présence de molécules en phase gazeuse. En particulier, plusieurs études en laboratoire, basées sur l'emploi de lampes à décharges large bande, ont démontré l'importance de la désorption induite par photons UV (photodésorption). Les taux de photodésorption estimés sont pris en compte dans diverses régions du MIS (bords et intérieur des nuages denses, disques protoplanétaires [1,2]).

Nous avons entrepris une approche nouvelle du phénomène de photodésorption à différentes énergies dans l'ultraviolet lointain (7-14 eV) à l'aide du rayonnement synchrotron (SOLEIL, ligne de lumière DESIRS). L'intérêt de l'étude en fonction de l'énergie des photons est double. Elle permet d'une part de rendre compte du spectre du rayonnement, qui peut varier d'une région du MIS à l'autre, sur l'efficacité du processus. D'autre part, elle permet d'identifier avec précision quel processus physique est responsable de l'éjection des molécules, et donc de contraindre le mécanisme de photodésorption à l'échelle moléculaire.

Les spectres de photodésorption obtenus pour CO et N₂ révèlent une très forte dépendance des taux absolus de photodésorption avec l'énergie d'excitation [3]. La structure de ces spectres, ainsi que des expériences mettant en jeu des isotopologues de CO, ont permis d'établir un mécanisme indirect de désorption, dans lequel les interactions intermoléculaires jouent un rôle prépondérant [4]. Ceci implique alors, comme il sera montré lors de cette présentation, des effets remarquables sur la photodésorption de mélanges de glaces par rapport aux cas des glaces pures.

Références

- [1] C. Dominik, C. Ceccarelli, D. Hollenbach, and M. Kaufman, *ApJL* 635, L85 (2005)
- [2] F. Hersant, V. Wakelam, A. Dutrey, S. Guilloteau, et E. Herbst, *A&A* 493, L49-L52 (2009)
- [3] E. Fayolle, M. Bertin, C. Romanzin, X. Michaut, K. Öberg, H. Linnartz et J.-H. Fillion, *ApJL* 739, L36 (2011)
- [4] M. Bertin, E. Fayolle, C. Romanzin, K. Öberg, X. Michaut, A. Moudens, L. Philippe, P. Jeseck, H. Linnartz et J.-H. Fillion, *PCCP* 14, 9929-9935 (2012)

Formation des structures dans le milieu interstellaire : aspects théoriques et numériques

Patrick Hennebelle^{1,2}

¹ AIM, CEA Saclay

² Ecole Normale supérieure et Observatoire de Paris, LERMA

Au cours de l'exposé, je ferai une revue des progrès théoriques récemment effectués concernant la formation des structures dans le milieu interstellaire en mettant l'accent en particulier sur les études menées en France.

Vers une cartographie 3D du MIS galactique par inversion des mesures individuelles d'absorption

Lallement R¹, Puspitarini¹, Vergely J.L.², Chen Hui-Chen¹, Babusiaux C¹, Bonifacio P¹, Hill V.³

¹ *GEPI (UMR9111), Observatoire de Paris, Université Paris-Diderot, 5 Place Jules Janssen, 92190, Meudon France*

² *ACRI-ST, 260 rue du Pin Montard, 06904 Sofia-Antipolis*

³ *Laboratoire Lagrange (UMR7293), Université de Nice Sophia Antipolis, CNRS, Observatoire de la Côte d'Azur, BP 4229, 06304, Nice Cedex 4*

Je discuterai des possibilités présentes et futures d'obtention de la tomographie du MIS par inversion Bayésienne de mesures d'absorption ou d'extinction sur des étoiles individuelles. Après présentation des méthodes et implémentations récentes, je montrerai les derniers résultats obtenus sur le milieu proche à partir de mesures d'extinction existantes, et illustrerai quelques implications en ce qui concerne la structure locale. Je discuterai des futurs apports de données qui devraient permettre de progresser en distance et précision, et surtout du contexte Gaia. Je présenterai enfin des études récentes sur les bandes diffuses, extraites des spectres d'étoiles chaudes ou froides, et de leur possible utilisation comme traceur/localisateur du MIS au même titre que les raies d'absorption du gaz.

Références

- [1] Vergely J.L., et al, 2010, A&A, 518,3 1
- [2] Puspitarini L., Lallement R., 2012, A&A, 545, 21
- [3] Chen Hui-Chen , et al, 201x, A&A, submitted
- [4] Raimond S., et al, 2012, A&A, 544, 136

Low velocity shocks as signatures of turbulent dissipation in diffuse irradiated gas.

P. Lesaffre¹, G. Pineau des Forêts^{2,1}, B. Godard³, P. Guillard⁴, F. Boulanger² et E. Falgarone¹

¹ *ENS, LERMA, UMR 8112, CNRS, Observatoire de Paris, ENS/LRA 24 rue Lhomond
75005 Paris France*

² *Institut d'Astrophysique Spatiale (IAS), UMR 8617, CNRS, Université Paris-Sud 11,
Bâtiment 121, 91405 Orsay Cedex, France*

³ *LUTH, Observatoire de Paris, CNRS, Université Paris Diderot, 5 place Jules
Janssen, 92190 Meudon, France*

⁴ *Spitzer Science Center (SSC), California Institute of Technology, MC 220-6,
Pasadena, CA 91125, USA*

Turbulent motions in the interstellar medium (ISM) are thought to cascade down to small scales where they are dissipated into heat. Dissipation may impact the abundance and excitation of key species commonly used as spectral diagnostics of the cold ISM in galaxies. Here, we establish and quantify the diagnostics of turbulent dissipation in mildly irradiated diffuse gas in the specific context of shock structures.

We incorporate the basic physics of photon-dominated regions into a state-of-the-art steady-state shock code. We compute magnetised shock models propagating in irradiated ($G_0=1$) diffuse ($n_H=10^2$ to 10^4 cm⁻³) media at low to moderate velocities (from 3 to 40 km/s).

The sensitivity of their chemical and emission properties on entrance velocity suggests observations can constrain the probability distribution function of shocks. We illustrate this on two lines of sight. This shows that both low and moderate velocity shocks are important in shaping the composition and excitation state of the interstellar gas.

References

Lesaffre P., G. Pineau des Forêts, B. Godard, P. Guillard, F. Boulanger, E. Falgarone (2012), *A&A submitted*

Early phases of Solar System formation: 3D physical & chemical modeling of the collapse of a prestellar dense core.

Hincelin U.¹, Wakelam V.¹, Commerçon B.², Hersant F.¹ and Guilloteau S.¹.

¹ LAB, UMR5804 du CNRS, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, 2 rue de l'Observatoire, 33271, Floirac Cedex – France ;

² LERMA, UMR8112 du CNRS, Laboratoire d'Etude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique, Observatoire de Paris, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231, Paris Cedex 05 – France, *idem*

Low mass stars, like our Sun, are born from the collapse of a molecular cloud. The matter falls in the center of the cloud, creating a protoplanetary disk surrounding a protostar. Planets and other Solar System bodies will be formed in the disk. The chemical composition of the interstellar matter and its evolution during the formation of the disk are important to better understand the formation process of these planets and other bodies. In order to study the chemical evolution during the early phases of Solar System formation, one needs to know the evolution of the density and the temperature of the matter during the collapse process. Indeed, the chemical composition and its evolution depend mostly on these quantities.

We present a tri-dimensional physical and chemical model of the collapse of a prestellar dense core up to the first Larson core formation [1,2]. We have interfaced the state-of-the-art radiation magneto-hydrodynamic (RMHD) model of star formation RAMSES [3,4,5] with the full gas-grain chemical model NAUTILUS [6,7]. NAUTILUS computes the chemical evolution of gas and ices using the time dependent physical structure derived by RAMSES. Within the structure of the object, we identify the different components: the central core, the outflow, the rotating disk, the pseudodisk and the envelope [8]. Our results show that the chemical composition of interstellar matter computed in the initial cloud does not evolve much during the formation of the first Larson core. However, the ice/gas ratio of a given chemical species depends to the considered component, which can be explained by the temperature and density conditions of the component.

Références

- [1] Hincelin U., Wakelam V., Commerçon B., Hersant F. & Guilloteau S., submitted to ApJ
- [2] Hincelin U., Commerçon B., Wakelam V., Hersant F., Guilloteau S. & Aikawa Y., in preparation
- [3] Teyssier R., A&A 385, 337 (2002)
- [4] Fromang S., Hennebelle P. & Teyssier R., A&A 457, 371 (2006)
- [5] Commerçon B., Teyssier R., Audit E., Hennebelle P. & Chabrier G., A&A 529, A35 (2011)
- [6] Hersant F., Wakelam V., Dutrey A., Guilloteau S. & Herbst E., A&A 493, L49 (2009)
- [7] Hincelin U., Wakelam V., Hersant F., Guilloteau S., Loison J.C. et al., A&A 530, A61 (2011)
- [8] Joos M., Hennebelle P. & Ciardi A., A&A 543, A128 (2012)

Cosmic-ray propagation in molecular clouds

Marco Padovani¹, Daniele Galli² et Alfred E. Glassgold³

¹ *Laboratoire de Radioastronomie Millimétrique, UMR 8112 du CNRS, École Normale Supérieure et Observatoire de Paris, 24 rue Lhomond, 75231 Paris cedex 05, France*

² *Osservatorio Astrofisico di Arcetri, Largo E. Fermi 5, 50125 Firenze, Italy*

³ *Astronomy Department, University of California, Berkeley, CA 94720-3411, USA*

Cosmic-rays constitute the main ionising and heating agent in dense, starless, molecular cloud cores. We reexamine the physical quantities necessary to determine the cosmic-ray ionisation rate (especially the cosmic ray spectrum at $E < 1$ GeV and the ionisation cross sections), and calculate the ionisation rate as a function of the column density of molecular hydrogen. Available data support the existence of a low-energy component (below about 100 MeV) of cosmic-ray electrons or protons responsible for the ionisation of diffuse and dense clouds [1].

We also compute the attenuation of the cosmic-ray flux rate in a cloud core taking into account magnetic focusing and magnetic mirroring, following the propagation of cosmic rays along flux tubes enclosing different amount of mass and mass-to-flux ratios. We find that mirroring always dominates over focusing, implying a reduction of the cosmic-ray ionisation rate by a factor of 3-4 depending on the position inside the core and the magnetisation of the core [2].

Currently [3], we are studying the cosmic-ray propagation using 3D numerical simulations of a collapsing magnetised dense core [4,5] which make use of the RAMSES code [6,7].

Références

- [1] Padovani, M., Galli, D. & Glassgold, A. E. 2009, A&A, 501, 619
- [2] Padovani, M. & Galli, D. 2011, A&A, 530, A109
- [3] Padovani, M., Hennebelle, P. & Galli, D. (*in prep.*)
- [4] Hennebelle, P. & Fromang, S. 2008, A&A, 477, 9
- [5] Hennebelle, P. & Ciardi, A. 2009, A&A, 506, L29
- [6] Teyssier, R. 2002 A&A, 385, 337
- [7] Fromang, S., Hennebelle, P. & Teyssier, R. 2006 A&A, 457, 371

Protostellar shocks in the time of Herschel

Lefloch, B.¹, Ceccarelli, C.¹, Codella, C.², Cabrit, S.³, Busquet, G.⁴,
Benedettini, M.⁴, Cernicharo, J.⁵

¹ *UJF-Grenoble 1/CNRS-INSU, IPAG, UMR 5274, Grenoble, 38041, France*

² *INAF, Osservatorio Astrofisico di Arcetri, Firenze, Italy*

³ *Observatoire de Paris, LERMA, UMR 8112 du CNRS, ENS, UPMC, UCP, 61 Av. de
l'Observatoire, F-75014 Paris, France*

⁴ *Istituto di Astrofisica e Planetologia Spaziali, Via Fosso del Cavaliere 100, 00133 Roma,
Italy*

⁵ *Centro de Astrobiología, INTA, Torrejon de Ardoz, E-28850, Madrid, Spain*

Herschel and the large ground-based millimeter radiotelescopes have revealed the important role of shocks in the chemical evolution of star forming regions. This is well illustrated by the spectral survey of the protostellar shock L1157-B1 from 672 μ m up to 55 μ m, carried out with Herschel, as part of the CHESS key project, and from 80 to 350 GHz with the IRAM 30m telescope. The unprecedented sensitivity of these instruments brings new insight both into the molecular content and the physical conditions of this long studied region, thanks to the detection of hydrides (H₂O, HCl) and of the high-excitation lines of heavy molecules (CO, CS, HCO⁺, HCN,...). With the help of complementary molecular emission maps from the Plateau de Bure interferometer, multi-transition analysis of the line profiles reveals the presence of multiple emission components [1,5,6,7] of differing excitation conditions and constrains the formation/destruction scenarios of various molecular species [2,3,4] including water, in relation with shock models, while unveiling the chemical history of the cloud. I will discuss the new view and questions on the physical and chemical structure of protostellar shocks which emerge from these observations.

Références

- [1] Benedettini M., Busquet G., Lefloch B., et al., 2012, A&A, 539, L3
- [2] Codella C., Salez M., Ceccarelli C., et al., 2012, ApJ, 744, 164
- [3] Viti S., Jimenez-Serra, I., Yates J. A., et al., 2011, ApJ, 740, L3
- [4] Codella C., Ceccarelli C., Lefloch B., et al., 2012, ApJ, 757, L9
- [5] Lefloch B., Cabrit S., Busquet, G., et al., 2012, ApJ, 757, L25
- [6] Codella C., Lefloch B., Ceccarelli C., et al., 2010, A&A, 518, L112
- [7] Lefloch B., Cabrit S., Codella C., et al., 2010, A&A, 518, L113

Nouveau modèle PDR pour modéliser la physico-chimie du gaz interstellaire

Franck Le Petit¹, Evelyne Roueff¹, Jacques Le Bourlot¹, Emeric Bron¹,
Cécilia Pinto¹

¹ LUTH, UMR8102 du CNRS, Observatoire de Paris

Les observations des nouvelles générations d'instruments (Herschel, Planck, ALMA, IRAM, SOFIA, ...) posent de nouveaux défis. L'émission de CO depuis des états très excités ($J > 15$) dans des régions de formation d'étoiles est couramment détectée depuis Herschel et SOFIA. Cette excitation reflète les mécanismes de conversion de l'énergie UV en énergie interne ou thermique et est directement, mais de façon complexe, liée à la physique et à la chimie des grains. La détection de molécules carbonées comme CH₃OH, oxygénées comme O₂, ou tout simplement H₂O, posent la question du couplage chimie en phase gazeuse / chimie sur les grains. Grâce aux campagnes d'observation spatiales couplées aux observations sol (IRAM, CSO, ...), des masses de données de ce type dans différents environnements ont été accumulées. Ces nouvelles découvertes sont autant de défis pour les modélisateurs et nécessitent d'introduire dans les codes de modélisation des processus de plus en plus complexes.

Nous avons introduit de nombreux nouveaux mécanismes dans le code PDR à partir des données de physique atomique et moléculaire les plus récentes et de résultats d'expériences en laboratoire : formation de H₂ sur les grains par Eley-Rideal et Langmuir-Hinshelwood, chimie sur les surfaces pour différentes espèces avec formation de manteaux, processus de transfert de rayonnement fins comme le pompage UV de CO. Pour rappel, le code PDR résout de façon couplée et aussi précise que possible le transfert de rayonnement, la chimie en phase gazeuse et sur les grains, et les processus de chauffage et de refroidissement dans un milieu hors-ETL.

Dans cet exposé, nous montrerons comment les processus physiques et chimiques en jeu sont fortement couplés et qu'il est fondamental de les modéliser le plus soigneusement possible pour interpréter de façon cohérente les masses d'informations que nous procurent les nouvelles générations d'instruments. Nous insisterons en particulier sur le couplage entre la chimie sur les surfaces et le transfert de rayonnement qui, sous certaines conditions, introduit un mécanisme de chauffage pouvant supplanter l'effet photo-électrique sur les grains et contribuer à l'excitation de CO observée par Herschel. Nous montrerons également quels sont certaines des données de physique atomique et moléculaire critiques et manquantes pour l'interprétation des observations.

Molecular Spectroscopy in the ALMA era and Laboratory Astrophysics in Spain

J. Cernicharo¹

¹ CAB, INTA-CSIC, Department of Astrophysics. Crta Torrejón a Ajalvir km 4. 28850 Torrejón de Ardoz. Madrid. Espagne

I will present the Spanish project ASTROMOL which is devoted to astrochemistry and that involves 12 different institutes and more than 100 scientists from the Spanish Council for Research (CSIC), the National Astronomical Observatory (OAN), Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Universidad Complutense de Madrid (UCM), Universidad de Valladolid (UVA), Universidad Paul Olavide (Sevilla) and Universidad de Murcia. These groups are working in theoretical chemistry, laboratory spectroscopy, reactivity, ions, cold plasmas and Astrophysics.

I will explain the motivations for such a project from the astrophysical point of view, in particular based on the need to interpret the huge amount of spectroscopic data that the new instruments such as ALMA, or the already in use facilities such as IRAM, SMA, GBT, are producing. The interpretation of these data requires a detailed long term collaboration plan between different areas of science. Spectroscopy is absolutely necessary to identify all features arising from known molecules and their isotopologues. Vibrationally excited states of these well known polyatomic species dominate the emission over the isotopologues for gas temperatures above 150 K. Only a few species have been fully characterized so far and the amount of work to be done in the field of spectroscopy is huge. This research activity represents an important part of the ASTROMOL project.

The chemical modeling of the gas and dust chemistry is becoming more and more complex as new species are found with abundances that are not well reproduced by the models. Laboratory data have been, and continue to be, one of our strongest limitations to understand the chemical evolution of molecular clouds. A CRESU machine is under construction at the University of Castilla la Mancha in the frame of ASTROMOL. Studies of polyatomic ions is also important for interstellar chemistry. An ion-trap has been built in the University Paul Olavide of Sevilla and several experiments on cold plasmas are performed in the CSIC in Madrid.

From the astrophysical point of view I will present recent results from IRAM instruments, Herschel and ALMA related to the Spanish activity in Astrochemistry, mainly line surveys, and that serve as main motivation for the groups of Laboratory Astrophysics in Spain.

Quelles Molécules faut-il rechercher dans le Milieu Interstellaire ?

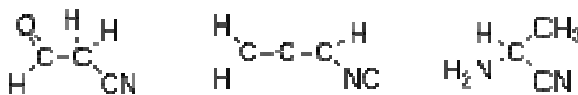
Jean-Claude Guillemin, Nicolas Kerisit, Yann Trolez

Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR CNRS-ENSCR 6226, Avenue du Général Leclerc, CS 50837, 35708 Rennes Cedex 7, France

La recherche de molécules interstellaires ne peut être aléatoire et doit se baser sur un raisonnement tenant compte des molécules observées et des propriétés physico-chimiques qui peuvent leur être associées. Cependant les composés détectés le sont le plus souvent par spectroscopie de microonde, technique associée à des entités possédant un moment dipolaire permanent. Les molécules sont donc d'autant plus faciles à observer que ce moment dipolaire est grand. Ceci a conduit à des détections préférentielles et a probablement influencé les déductions sur les réactions phares de la chimie interstellaire. Choisir des cibles en extrapolant à de nouveaux systèmes les types de réactions chimiques qui s'effectuent dans ce milieu reste ainsi une approche délicate.

Par analogie, il est logique de rechercher des composés avec un substituant de plus, un isomère ou un isotopomère des entités détectées. Les principaux atomes observés étant C, H, N, O et pour une moindre part S, ce substituant doit plutôt contenir ces atomes. De même, les molécules observées étant généralement petites (moins de 13 atomes pour la plupart d'entre elles), il est important que ces substituants contiennent peu d'atomes (CN, CCH, CH₂, ...). La plupart des systèmes observés possédant 0, 1 ou 2 hétéroatomes, il est aussi préférable de rechercher des composés ayant au maximum 3 hétéroatomes ou, à la rigueur, 4 s'il s'agit d'un oligomère d'un composé détecté (par exemple HCN, CH₂O,...). Par ailleurs, la plupart des systèmes observés à ce jour sont les composés thermodynamiquement les plus stables d'une famille d'isomères et la recherche de ceux-ci doit donc être prioritaire.

Ces dernières années, nous avons synthétisé un certain nombre de molécules satisfaisant en grande partie les conditions énoncées ci-dessus et en avons enregistré les spectres de microonde à Lille ou Oslo ; les spectres ont ensuite été confiés à des astrophysiciens.¹⁻⁷ Nous avons aussi étudié des composés plus complexes, voire des briques du vivant (sucres, précurseurs d'aminoacides,³ ...) pour tenter de faire un lien entre chimie interstellaire et pré-prébiotique. Le choix des cibles sera détaillé en expliquant pourquoi nous nous sommes intéressés plus particulièrement par exemple à un nitrile, un isonitrile ou à une molécule chirale. L'enregistrement des spectres de microonde (parfois dans des conditions expérimentales particulières liées à l'instabilité cinétique des systèmes) et la recherche de ces entités dans le MIS seront aussi abordés.



Références.

1. Lattelais, M., Ellinger, Y., Matrane, A. & Guillemin, J.-C. *PhysChemChemPhys*, 12, 4165 (2010).
2. Møllendal, H. ; Samdal, S. ; Matrane, A. & Guillemin, J.-C. *J. Phys. Chem. A*. 115, 7978 (2011).
3. Møllendal, H. ; Margules, L. ; Belloche, A. ; Motiyenko, R. A. ; Kononov, A. ; Menten, K. M. & Guillemin, J.-C. *Astron. & Astrophys.* 538, A51 (2012).
4. Bouchez, A., Margules, L., Motiyenko, R., Guillemin, J.-C., Walters, A., Bottinelli, S., Ceccarelli, C. & Kahane, C., *Astron. & Astrophys.* 540, A51 (2012).
5. Motiyenko, R. A., Margulès, L. & Guillemin, J.-C., *Astron. & Astrophys.*, 544, A82 (2012).
6. Tercero, B., Margules, L., Carvajal, M., Motiyenko, R.A., Huet, T. R., Alekseev, E. A, Kleiner, I., Guillemin, J.-C., Møllendal, H. & Cernicharo, J. *Astron. & Astrophys.*, 538, A119 (2012).
7. Møllendal, H., Margulès, L., Motiyenko, R. A., Larsen, N. W. & Guillemin, J.-C. *J. Phys. Chem. A*, 116, 4047 (2012).

Physics and chemistry of UV illuminated neutral gas: The Horsehead case

P. Gratier¹, J. Pety^{1,2}, V. Guzman¹

M. Gerin², J.R. Goicoechea³, E. Roueff⁴, S. Bardeau¹, A. Sievers⁵, F. Le Petit⁴,
J. Le Bourlot⁴, A. Belloche⁶, D. Talbi⁷, D. Teyssier⁸, A. Faure⁹, J. Gauss¹⁰

¹IRAM, 300 rue de la Piscine, 38406 Saint Martin d'Hères, France

²LERMA, UMR 8112, CNRS and Observatoire de Paris, 61 avenue de l'Observatoire, 75014 Paris, France

³LUTH UMR 8102, CNRS and Observatoire de Paris, Place J. Janssen, 92195 Meudon Cedex, France.

⁴Centro de Astrobiología. CSIC-INTA. Carretera de Ajalvir, Km 4. Torrejón de Ardoz, 28850 Madrid, Spain.

⁵IRAM, 7 Avenida Pastora, Granada, Spain

⁶Max-Planck Institut für Radioastronomie, Auf dem Hügel 69, 53121 Bonn, Germany

⁷LUPM, UMR 5299, Université Montpellier 2, Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier cedex 05, France

⁸European Space Astronomy Centre, ESA, PO Box 78, 28691 Villanueva de la Cañada, Madrid, Spain

⁹UJF-Grenoble 1/CNRS-INSU, Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG) UMR 5274, Grenoble F-38041, France

¹⁰Institut für Physikalische Chemie, Universität Mainz, D-55099 Mainz, Germany

The Horsehead mane is a particularly interesting case for the study of photodissociation regions because the transition from the diffuse, hot and ionised gas to the dense, cold and shielded gas is sharp. The PDR geometry is simple (viewed edge-on [1]) and the density profile across the PDR is well constrained. The combination of small distance to Earth (at 400 pc, 1" corresponds to 0.002 pc), low illumination ($\chi = 60$) and high density ($n_H \sim 10^5 \text{ cm}^{-3}$) implies that all the interesting physical and chemical processes can be probed in a field-of-view of less than 50" (with typical spatial scales ranging between 1 and 10") [2]. The Horsehead PDR is a good source to benchmark the physics and chemistry of UV illuminated neutral gas.

In this talk, I will summarize some results from the Horsehead WHISPER (PI: J.Pety) a sensitive, high spectral resolution, full 1, 2 and 3mm spectral survey of 2 positions in the Horsehead Nebula obtained at the IRAM 30m telescope. This will include 1) photodesorption of molecules in the UV illuminated edge (H₂CO, CH₃OH) [3]; 2) detection of molecular ions: 2nd detection of CF⁺ (hyperfine structure and fluorine abundance) [5,6] and the first detection of the new hydrocarbon cation C₃H⁺; 3) [7] complex species (nitriles and isonitriles) [4]

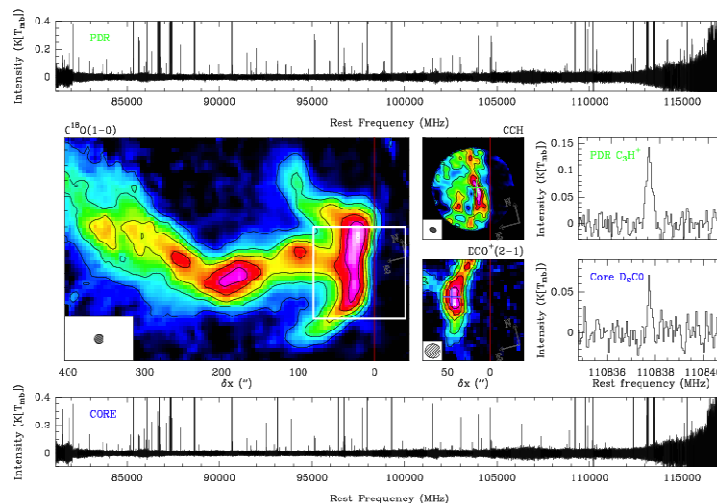


Figure 1 : The upper and lower panels display the spectra of the 3mm band at a spectral resolution of 49 kHz for two different positions in the Horsehead Nebula. Each spectra has about 740 000 channels and a median noise of about 8 mK [Ta*]. The survey positions correspond to two different environment located inside the white square on the C¹⁸O(1-0) integrated emission map (wide, left image): 1) the photo-dissociation region (PDR) marked by the green cross on the CCH emission map (middle, top image), and 2) the dense core marked by the blue cross on the DCO⁺ emission map (middle, bottom image). The middle right panels display two lines zoomed from the line surveys.

Références

- [1] Abergel, A., et al. 2003, A&A, 410, 577
 [2] Pety, J., et al. 2007b, astro-ph/0612588
 [3] Guzman, V., et al. 2011, A&A, 534, 49
 [4] Gratier, P., et al. 2012, in prep.

- [5] Guzman, V., et al. 2012, A&A, 543 1
 [6] Guzman, V., et al. 2012, A&A, submitted
 [7] Pety, J., et al. 2012, A&A, submitted.

Nitrogen fractionation in dark clouds

P. Hily-Blant, L. Bonal, A. Faure, E. Quirico, R. Le Gal, C. Rist (1), G. Pineau des Forêts (2)

¹ *Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble, France*

² *Institut d'Astrophysique Spatiale, Orsay, France*

The Sun formed from a cold and dense core embedded in its parental interstellar molecular cloud, a mixture of gas and dust. The so-called « protosolar nebula » is the evolutionary stage issued from the collapsing prestellar core. One of the current challenges in astrochemistry is to follow the chemical composition of a starless core during its evolution towards a planetary system. The related challenge in cosmochemistry is to identify, in primitive objects of the Solar System, residual materials from the original cloud. Whether, and to which extent, the chemical composition of Solar system objects is inherited from the parental dark cloud is actively debated. Direct comparison of the abundances of chemical species is most likely irrelevant as the physical conditions change dramatically during the evolution of the gas. Isotopic ratios are often used to trace the chemical history along the evolutionary sequence, e.g. between prestellar cores, protoplanetary disks, comets, planetary atmospheres. The $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio has been measured in the solar wind, comets, and a variety of cosmomaterials. These ratios exhibit large variations, with ratios ranging from 50 up to the Sun's value of 440. So far, measurements in dark clouds gave ratios close to that of the Sun. The large range of values for the $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ ratio is currently unexplained.

In this work, we present evidence for strong fractionation of HCN molecules in two dark clouds, with HCN/HC ^{15}N abundance ratios as small as 130. We also propose a chemical origin for the large differences observed within cosmomaterials, and between Solar system objects and dark clouds (Hily-Blant et al 2012, to appear in Icarus). We also present the detection of C ^{15}N in dark clouds, which leads to CN/C ^{15}N isotopic ratios of 500-600. Model calculations using a fractionated version of the Le Gal network are presented which predict both the fractionation of HCN and the non-fractionation of CN (Hily-Blant et al, submitted to A&A).

References

- [1] Hily-Blant P., Bonal L., Faure A., Quirico E., accepted for publication in Icarus
- [2] Le Gal R., Hily-Blant P., Faure A., Rist C., Pineau des Forêts G., in prep.

Molecular spectral surveys from millimeter range to far infrared.

Claudine Kahane¹

¹ Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (UMR 5274)

BP 53 F-38041 GRENOBLE Cedex 9 – France

Over the last 30 years, spectral surveys have been performed with the largest ground based telescopes, covering all the millimeter to the submillimeter wavelengths that can be observed from Earth. At the typical temperatures of the interstellar and circumstellar gas (between 10 K and a few hundred K), this frequency range corresponds to the bulk of molecular gas emission, via rotational lines. More recently, the high resolution spectral surveys performed with the HiFi spectrometer on the Herschel telescope, following the pioneer observations done with the ISO satellite, have extended the frequency coverage to the far infrared domain.

In this talk, I will mainly focus on the spectral surveys performed towards a few bright galactic sources (TMC1, SgrB2, Orion KL, IRAS16293-2422, IRC+10216), likely to be representative of a variety of molecular and circumstellar clouds and the most extensively studied.

I will present the techniques used for analyzing the surveys and show how powerful tools they can be on a wide range of topics :

- discovery and identification of new species allow to study the extraterrestrial chemical complexity and contribute to address the question of our chemical origins ;
- complete census of the chemical content of various molecular sources challenge interstellar and circumstellar gas phase and grain surface chemistry models ;
- modeling the molecular line emissions over broad frequency ranges allows to probe a large variety of excitation conditions and to perform a detailed study of the physical and dynamical parameters of the emitting gas ;
- derivation of several key isotopic abundance ratios can help to explore the nucleosynthesis history of evolved stars or in contrast to probe the early stages of star formation.

I will show that the spectral surveys analysis and interpretation require strong coupling with laboratory and theoretical studies and active collaborations among the various scientific fields typical of the PCMI community : spectroscopy, chemical reactivity, gas-surface exchanges, collision rates...

To illustrate the spectacular progresses allowed by the ongoing increased telescopes and receivers capabilities, I will end my presentation with some recent results obtained with Herschel, the IRAM 30m and PdBI and ALMA. It will be also the opportunity to rapidly present the Astrochemical Surveys at IRAM (ASAI) project, a 30m Large Program which involves a number of the PCMI community members.

Mécanismes et synthèses à la surface des grains froids

F. Dulieu¹, E. Congiu¹, J. A. Noble², S. Baouche¹, H. Chaabouni¹, A. Moudens¹, M. Minissale¹, S. Cazaux³, G. Manico⁴ and V. Pirronello⁴

¹ LERMA - Université de Cergy-Pontoise, Observatoire de Paris, ENS, UPMC
8112 du CNRS, 5 mail Gay Lussac, 95000 Cergy Pontoise Cedex

² PIIM UMR 7345, 13397, Marseille, France,

³ Kapteyn Astronomical Institute, PO box 800, 9700AV Groningen, The Netherlands

⁴ Università di Catania, Via Santa Sofia 64, 95123 Catania, Sicily, Italy

Les réactions à la surface des grains froids entre espèces adsorbées permettent la synthèse de molécules en phase solide, dont la formation en phase gazeuse est inefficace dans de certaines des diverses conditions des nuages interstellaires.

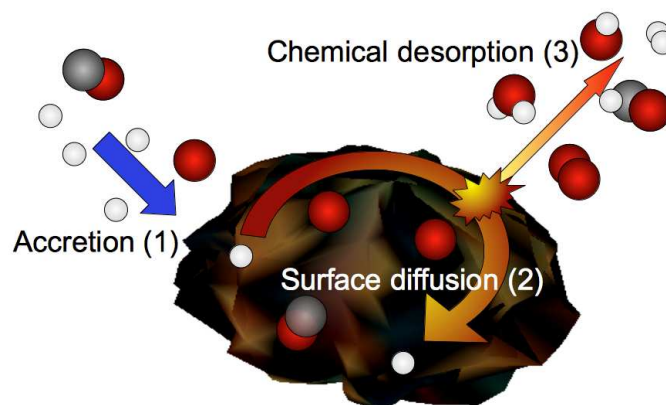
Depuis quelques années de nombreux groupes expérimentaux ont commencé l'étude des voies de formation en phase solide. En particuliers, les voies de formation de H_2 , H_2O , CO_2 , CH_3OH ont été largement étudiées.

Parmi les voies possible d'exploration, notre groupe s'est limité aux réactions en surface, et sans autre apport énergétique extérieur (photons, électrons, ions...) que celui des radicaux adsorbés sur les surfaces.

Dans ce cadre, je rappellerai brièvement quelles nouvelles molécules ont été synthétisées tout récemment, avec une attention particulière pour l'hydroxyle amine. Ensuite, j'essaierai de montrer en quoi les mécanismes fondamentaux à l'oeuvre sur les surfaces froides peuvent influencer les produits de synthèse.

Parmi ces mécanismes j'évoquerai la répartition des états ortho et para de la molécule d' H_2 lors de sa formation sur la glace poreuse, l'importance de la diffusion dans l'équilibre des voies réactionnelles possible au travers de la synthèse de O_2 et O_3 , et enfin le retour en phase gazeuse induit par les réactions sur les surfaces, en prenant l'exemple de la synthèse de l'eau. Au travers de ces exemples, on comprendra que le type de surface employée (silicate, eau ou carbone) peut avoir une influence prépondérante sur les produits obtenus.

Je terminerai avec le cas de la formation de H_2CO en surface d'une couche d'eau, témoignage d'une chimie radicalaire rapide en surface, et la lente polymérisation de H_2CO à l'intérieur d'une glace d'eau, preuve d'une chimie en volume plus lente, mais tout aussi efficace.



Ice deuteration: models and observations to interpret the protostar history.

V. Taquet¹, C. Ceccarelli¹, C. Kahane¹, P. Peters², A. López-Sepulcre¹, A. Coutens³, D. Duflot², R. Neri³, C. Toubin², C. Vastel³, L. Wiesenfeld¹.

¹ Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble, Grenoble, France

² Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules, Villeneuve d'Ascq, France

³ Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie, Toulouse, France

⁴ Institut de Radioastronomie Millimétrique, Grenoble, France

Extremely large deuteration of several molecules has been observed around low-mass protostars for a decade. The Herschel Space Telescope, launched in 2009, is now providing measures of the deuterium fractionation of water. First results towards the protostellar prototype, IRAS 16293, revealed that water shows HDO/H₂O and D₂O/H₂O ratios of ~3 and ~0.1 % respectively [1]. Although water shows a higher deuteration than the cosmic deuterium reservoir (10⁻⁵ relative to H nuclei), these values remain lower than the deuteration seen in formaldehyde and methanol [2]. In this presentation, we will discuss 1) a theoretical model focusing on the deuteration of iced water, formaldehyde, and methanol in the cold prestellar phase, 2) new interferometric observations of HDO in Class 0 protostars.

1) We have developed a macroscopic time-dependent gas-grain model, called GRAINOBLE [3], to study the multilayer formation and the deuteration of interstellar ices by using a comprehensive solid chemical network, following recent works. Comparison between a grid of several thousands of runs with the observed deuteration toward IRAS 16293 allowed us to suggest that water is mainly formed during a translucent low-density phase while formaldehyde and methanol are rather formed in denser and colder cores [4] [5].

2) Interferometric mapping of HDO has been carried out with the PdB interferometer toward two low-mass protostars, IRAS2A and IRAS4A [6]. LVG analysis of the integrated line emission coming from the hot corino region as well as other HDO and H₂¹⁸O lines from previous single dish [7] and PdB [8] observations allowed us to estimate a high deuterium fractionation of water in IRAS2A and IRAS4A, suggesting a water formation at high densities.

Références

- [1] Coutens, A., Vastel, C. et al. 2012, A&A, 539, A132
- [2] Parise, B., Ceccarelli et al. 2006, A&A, 453, 949
- [3] Taquet, V., Ceccarelli, C., & Kahane, C. 2012a, A&A, 538, A42
- [4] Taquet, V., Ceccarelli, C., & Kahane, C. 2012b, ApJL, 748, L3
- [5] Taquet, V., Peters, P. al. 2012c, A&A, submitted
- [6] Taquet, V., López-Sepulcre, A. al. 2012d, ApJL, submitted
- [7] Liu, F. C., Parise, B. et al. 2011, A&A, 527, A19
- [8] Persson, M. V., Jorgensen, J. K. & van Dishoeck, E. 2012, A&A, 541, A39

Complexité moléculaire induite par des réactions thermiques dans des analogues de glaces interstellaires.

F. Duvernay¹, V. Vinogradoff¹, G. Danger¹, P. Theulé¹, et T. Chiavassa¹

¹ Université d'Aix-Marseille, Laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires Centre de St-Jérôme, Avenue Escadrille Normandie-Niemen, 13397 Marseille, France

Les observations infrarouges ou radio dans différents environnements astrophysiques (nuages moléculaires denses, disques circumstellaires, comètes) ont révélé l'existence de plus de 170 molécules dont le tiers environ correspond à des molécules organiques qui ont été détectées dans des environnements gazeux. Les analyses réalisées sur des météorites de type chondrites, comme Murchison, ont également révélé toute la richesse et la complexité moléculaire de cette matière. Cependant, les mécanismes de formation de ces molécules organiques complexes (COM) sont loin d'être bien connus. Certaines questions telles que le rôle des glaces et des grains interstellaires dans leur formation font toujours débats.

Une thématique importante de notre équipe est l'étude de l'évolution chimique des glaces primitives interstellaires induite par des processus énergétiques tels que les irradiations par des photons UV, bombardements par des atomes d'hydrogène, ou par des effets thermiques. L'objectif est de déterminer des mécanismes possibles conduisant à la formation de COM à partir d'analogues de glaces interstellaires. Nous avons montré que grâce à des expériences de simulation en laboratoire s'appuyant principalement sur des techniques spectroscopiques (infrarouge, spectrométrie de masse) il était possible d'obtenir des informations sur l'évolution de la matière dans des environnements protostellaires ou cométaires. Par une approche « mécanistique » nous avons pu mettre en évidence un lien direct entre les molécules primitives (H₂O, CH₃OH, NH₃...) contenues dans le manteau de glaces recouvrant les grains interstellaires et des molécules observées dans les résidus organiques réfractaires (HMT, Polymères,...) obtenus après irradiation et réchauffement de ces glaces.^{1,2} Ces résidus peuvent être assimilés à des analogues de grains cométaires.^{3,4} Nous avons également montré le rôle primordial des réactions thermiques à basse température (10 – 100 K) dans la formation des COM observées dans ces résidus.^{1,2} Ces résultats pourront sans doute aider à l'interprétation des données des missions spatiales telles que la mission Rosetta qui a notamment pour objectif d'étudier la composition d'un noyau cométaire.

Références

- [1] Vinogradoff V., Duvernay F., Danger G., Theulé P., & Chiavassa T., A&A 530, A128 (2011)
- [2] Vinogradoff V., Rimola A., Duvernay F., Danger G., Theulé P., & Chiavassa T., Phys. Chem. Chem. Phys. 14,12309-12320 (2012)
- [3] Bernstein M., Sandford S., Allamandola, L., Chang S., & Scharberg M., A.p.J. 454, 327 (1995)
- [4] Muñoz Caro G., Meierhenrich U., Schutte W., Thiemann W., & Greenberg J., A&A 413, 209 (2004)

VUV spectroscopy and photochemistry of interstellar and putative prebiotic molecules

M. Schwell¹, Y. Bénilan¹, M.-C. Gazeau¹, N. Fray¹, S. Leach²,
M. Hochlaf³, J.-C. Guillemin⁴

¹ LISA, UMR7583 du CNRS, Universités Paris Est-Créteil et Paris Diderot
61, Avenue du Général de Gaulle, 94010 Créteil - France

² LERMA, UMR 8112 du CNRS, Observatoire de Paris-Meudon, 5 place Jules
Janssen, 92195 Meudon - France

³ MSME, UMR 8208 du CNRS, Université Paris Est- Marne-La-Vallée, 1 rue Galilée,
77420 Champs-sur-Marne - France

⁴ Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 du CNRS, École Nationale Supérieure
de Chimie de Rennes, Avenue du Général Leclerc, 35708 Rennes Cedex 7 - France

For many years, our group has been investigating the VUV spectroscopy and photochemistry of large molecules of astrophysical and prebiotic interest. We have studied simple molecules like acetic acid, acetonitrile, acetamide, as well as molecules of more immediate biological importance (amino acids, nucleic acid bases). Polyynes and cyanopolyynes have been investigated too since these linear carbon and nitrogen chain molecules are very important in the ISM. An aerosol source for reactive and thermo-labile compounds has been developed since many bigger molecules of astrophysical importance are not easily vaporized. We consider gas phase measurements as particularly necessary since they permit to measure the intrinsic photophysical properties of relevant molecules. Furthermore, comparison to quantum chemical calculations, where in most cases isolated molecules are studied, is straightforward.

Besides measuring absolute absorption and photoionization cross sections, dissociative ionization reaction channels and their involved excited states have been studied in the past. Branching ratios of these reactions are determined. Very recent results include photoionization measurements of diacetylene [1], acetamide [2], methylformate, glycolaldehyde, dimethylether, amino acetonitrile, dicyanoacetylene and cyanoacetylene which have been studied in 2010/2011 in the 9 to 16 eV energy range using the SAPHIRS spectrometer at the DESIRS beamline at SOLEIL. Parts of these results will be presented. We will discuss the remaining needs for modeling the chemical evolution of this type of complex interstellar molecules and present future perspectives for laboratory and theoretical work in the VUV spectral domain.

Références

- [1] M. Schwell, Y. Bénilan, N. Fray, M.-C. Gazeau, Et. Es-Sebbar, F. Gaie-Levrel, N. Champion, S. Leach, Mol. Phys. 2012, in press, available on-line (TaF).
- [2] M. Schwell, Y. Bénilan, N. Fray, M.-C. Gazeau, Et. Es-Sebbar, G.A. Garcia, L. Nahon, N. Champion, S. Leach, Chem. Phys., 393, 107 (2012).

Internal rotation in astrophysical AND prebiotic molecules

I. Kleiner¹, M. Carvajal², H. V. L. Nguyen^{1,3} and M-L. Senent⁴

¹LISA, Laboratoire Interuniversitaire des systèmes atmosphériques, UMR7583 du CNRS, Institut Simon Laplace, Universités Paris Est et Paris Diderot, 65 av. Général de Gaulle, 94010 Créteil, France

²Unidad Asociada IEM-CSIC, Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva, 21071 Huelva, Spain

³RWTH, Institute of Physical Chemistry, RWTH Aachen University, Landoltweg 2, D-52074 Aachen, Germany

⁴IEM, CSIC, Instituto de Estructura de la Materia, Theoretical Chemistry and Physics, Serrano 121, Madrid 28006, Espagne

One of the goals of our work is to provide reliable predictions of line positions and intensities for astrophysical molecules containing one internal rotor CH₃, such as methyl formate HCOOCH₃, acetic acid CH₃COOH, or acetamide CH₃CONH₂. The major new facilities, the Herschel Space Observatory and the Atacama Large Millimeter Array (ALMA) now open the sub-millimeter region up to a few THz for astronomical observations by making investigations with high sensitivity and resolution. Molecules which undergo internal rotation of a methyl group present thousands of lines in this spectral range and therefore their spectra are particularly important to model [1]. We will show some of the recent results obtained by our approach using rotation-torsion Hamiltonians compared to *ab initio* calculations on the methyl formate isotopologues [2], in particular the excited torsional states. Recent results about inequivalent two-top internal rotors, like methyl acetate CH₃-O-C(=O)-CH₃ [3] searched in the ISM but not yet found, or mono-substituted dimethyl ether ¹²CH₃O¹³CH₃ [4] will be also given.

The authors would like to thank the CNRS/CSIC grant for 2012 (Project n° 25333). I.K. and H.V.L. N. thank the ANR Topmodel 08-BLAN-0054.

Références

- [1] E. Herbst and E. F. van Dishoeck, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **47**, 427–80 (2009).
- [2] B. Tercero, L. Margules, M. Carvajal, R. A. Motiyenko, T. R. Huet, A. E. Alekseev, I. Kleiner, J.C. Guillemin, H. Møllendal, N. Marcelino, and J. Cernicharo, *Astron. Astrophys.* **538**, A119-131 (2012)
- [3] M. Tudorie, I. Kleiner, J. T. Hougen, S. Melandri, L. W. Sutikdja, W. Stahl, *J. Mol. Spectrosc.*, **269**, 211-225 (2011).
- [4] M.L. Senent, R. Domínguez-Gómez, M.Villa, and M. Carvajal, *J Phys Chem A*; **116**, 6901-10 (2012); M. Carvajal, O. Álvarez-Bajo, M.L. Senent, R. Domínguez-Gómez, and M. Villa, *J. Mol. Spectrosc.* **279**, 3-11 (2012).

Détection et rapports de branchement des produits de réactions chimiques en phase gazeuse à très basses températures: nouveaux développements expérimentaux

S. D. Le Picard¹, A. Benidar¹, L. Biennier¹, A. Canosa¹, M. Caperon¹, J. Courbe¹, S. Carles¹, G. A. Garcia², L. Nahon², I.R. Sims¹, D. Travers¹

¹ IPR, UMR 6251 du CNRS, Astrophysique de Laboratoire, Département de Physique Moléculaire, Institut de Physique de Rennes, Bât 11C, Campus de Beaulieu, 35042, Rennes Cedex – France

² Synchrotron SOLEIL, Lorme Merisiers, F-91192 Gif Sur Yvette, France

La modélisation photochimique des divers environnements du milieu interstellaire nécessite l'apport d'un certain nombre de données quantitatives parmi lesquelles les constantes de vitesse des réactions chimiques jouent un rôle central pour déterminer l'abondance des diverses espèces présentes. Depuis près de vingt ans, le groupe de Rennes a fourni des constantes de vitesse de plus d'une centaine de réactions impliquant des espèces neutres et/ou des ions à des températures pertinentes pour les environnements le plus froids du milieu interstellaire, jusqu'à 10 K ou moins pour certaines d'entre elles. D'autres groupes, comme par exemple ceux de S. Leone à Berkeley ou, plus récemment, le groupe de Bordeaux (A. Bergeat, K. Hickson, J-C Loison) ont aussi contribué à la détermination de constantes de vitesse, avec une limite en température un peu plus haute toutefois (environ 50 K). Ces résultats expérimentaux, ont permis de faire des avancées significatives et d'améliorer notre compréhension de la physico-chimie du milieu interstellaire : le rôle crucial des réactions entre espèces neutres dans la complexification moléculaire par exemple, n'avait pas été imaginé aussi important avant que des expériences mettent en évidence la rapidité de celles-ci, même à des températures aussi basses que 10 K. La collaboration de nos groupes expérimentaux avec des groupes de théoriciens (T. Stoecklin et al. à Bordeaux, A. Faure et al. à Grenoble, S. Klippenstein à Argonne (USA), F. Lique et al. au Havre) a aussi permis une meilleure compréhension des mécanismes fondamentaux régissant la dépendance en température des constantes de vitesse. Ces avancées conjointes et leur inclusion dans des bases de données astrophysiques telle KIDA, à laquelle les groupes précités participent, doivent permettre d'améliorer significativement la qualité des modèles photochimiques.

Cependant, au-delà de la connaissance des constantes de vitesse des réactions chimiques prenant place dans le milieu interstellaire, une information essentielle fait encore défaut dans les modèles: celle de la proportion de chaque voie de sortie des réactions chimiques. Cette donnée quantitative, difficile d'accès d'un point de vue théorique, cruciale pour comprendre la croissance moléculaire, n'a jamais été obtenue expérimentalement à très basse température (< 200 K). Je présenterai brièvement lors de cette table ronde les projets de développement expérimentaux de l'équipe d'Astrophysique de Laboratoire de Rennes qui permettront d'accéder à cette donnée pour des réactions entre espèces neutres (ANR CRESUSOL) et pour des réactions entre ions et molécules (projet soutenu par PCMI).

Investigation of ion chemistry and polymerization processes on interstellar grain and meteorite simulants

Claire Pirim¹, Thomas Orlando¹

*¹ School of Chemistry and Biochemistry, Georgia Institute of Technology,
Atlanta, GA 30332, U.S.A.*

Electron Stimulated Desorption experiments from organic ices relevant to Titan's atmosphere but also to interstellar icy dust grains were investigated at low temperature. Latest results and DEA cross section to H⁻ desorption will be discussed.

Condensed HCN has been processed as a function of electron energy (1eV-3keV) and upon photon irradiation with the goal of elucidating formation of complex organic pathways.

Current challenges and ongoing work on the use of real meteoritic substrates for the study of prebiotic chemical reactions will be discussed.

Formation of the Sun in a dense collected shell Evidence from meteorites

Matthieu Gounelle¹ et Georges Meynet²

¹Laboratoire de Minéralogie et de Cosmochimie du Muséum, UMR 7202, Muséum National d'Histoire Naturelle & CNRS, 75005 Paris, France

²Geneva Observatory, University of Geneva, Maillettes 51, 1290 Sauverny, Suisse

Little is known about the stellar environment of our Sun at its birth.

Isotopic measurements of primitive meteorites showed that short-lived radionuclides (SLRs, mean lifetime τ shorter than 100 Myr) were present in the solar protoplanetary disk 4.56 Gyr ago, during the earliest phases of our Solar System. SLRs could potentially provide insight into the stellar environment of our solar system at its birth, were their origin understood.

We will propose a generic explanation for the past presence of SLRs in the nascent solar system, based on a collect-injection-and-collapse mechanism, occurring on a diversity of spatial/temporal scales. In that model, the presence of SLRs with a diversity of mean lifetimes in the solar protoplanetary disk is simply the fossilized record of sequential star formation within a hierarchical interstellar medium.

In particular, we will show that our Sun was born together with a few hundred stars in a dense collected shell situated at a distance of 5–10 pc from a parent massive star having a mass greater than about 30 solar masses and belonging to a cluster containing ~ 1200 stars.

Références

[1] Gounelle M. & Meynet G., *A&A*, 545, A4 (2012)

Dust: From the Milky Way to nearby Galaxies

Jean-Philippe Bernard

*Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie (IRAP), 9 avenue du
colonel roche, Toulouse*

Observations of the dust emission in the Far-IR have made tremendous progress recently, in particular thanks to observations with the Spitzer, Herschel and Planck satellites, which have opened the FIR-mm observation window.

I will review some of the recent results related to the physics of dust grains in our galaxy, ranging from small to large grains and from the solar neighborhood to nearby galaxies. I will in particular discuss the recent findings in the Herschel and Planck data about the dust SED in the FIR and submm, which appears flatter than expected and shows variations with wavelength and potentially with dust temperature, environment and metallicity. These results indicate that the FIR-submm emission of thermal dust is complex and variable. The possible reasons for that, such as the presence of very cold dust, spinning dust, the mechanical structure of dust grains and/or the aggregation of dust particles will be discussed. We will see that some of these hypotheses can now be tested through dedicated laboratory measurements on dust analogs. I will also discuss some of the most recent attempts to use dust emission as a tracer of total gas column density in our galaxy and nearby ones and will highlight their limitations. Finally, I will present the prospect for the future, in particular with the polarization measurements in emission by Planck and balloon experiments and the high angular resolution capabilities of ALMA.

Émission des poussières dans les régions denses : séparer les effets du transfert de rayonnement des propriétés des grains

N. Ysard¹, M. Juvela², K. Demyk¹, V. Guillet¹ et al.

¹ IAS, CNRS (UMR8617), Université Paris 11, Bât 121, 91400 Orsay

² Department of Physics, PO Box 64, FI-00014 University of Helsinki, Finlande
3 IRAP, CNRS (UMR5277), Université Paul Sabatier, 9 avenue du Colonel Roche,
BP 44346, 31028 Toulouse cedex 4

L'émission des grains est de plus en plus utilisée comme traceur de la masse dans le milieu interstellaire (MIS). Les observations de Planck et Herschel ont la couverture spectrale et la résolution angulaire nécessaires pour étudier les nuages les plus denses et les plus froids grâce à cette émission. Cependant, ces nuages étant optiquement épais dans l'UV/visible et minces dans l'IR lointain et le submm, il est difficile de déterminer les propriétés des grains sans prendre en compte le transfert de rayonnement. Notre but est donc de séparer les effets du transfert de l'évolution des propriétés des grains dans les environnements denses [1].

Nous modélisons pour cela des nuages ayant des densités variables ($A_v = 1$ à 20) et réalisons un calcul complet du transfert radiatif [1,2]. La température des grains est déterminée avec le code DustEM développé à l'IAS et à l'IRAP [3]. Nous traitons le cas de grains amorphes de carbone et de silicate (caractéristiques du MIS diffus), de grains recouverts d'un manteau de carbone, et d'agrégats mixtes de carbone et de silicate. Dans chaque cas, nous mesurons la température de couleur (T_{col}) et l'indice spectral (β) résultants, grandeurs directement comparables avec les résultats observationnels.

Nous montrons que le transfert radiatif seul ne peut expliquer ni les basses températures, ni l'augmentation de l'émissivité submm observées dans les régions denses qui indiquent plutôt une croissance des grains. En ajoutant un niveau de bruit réaliste aux simulations, nous montrons qu'il est peu probable que l'anti-corrélation observée entre T_{col} et β soit uniquement due au bruit. Enfin, nous donnons des facteurs correctifs pour l'estimation de la densité de colonne des nuages quand le transfert de rayonnement est ignoré.

Références

- [1] Ysard et al. A&A, 542A, 21Y (2012)
- [2] Juvela & Padoan, A&A, 397, 201J (2003)
- [3] Compiegne et al., A&A, 525A, 103C (2011)

Propriétés optiques d'analogues de la poussière interstellaire à basse température

Demyk K. ¹, Meny C. ¹, Depecker C. ², Leroux H. ²

¹ IRAP, UMR5277 du CNRS, Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie, 9 avenue du Colonel Roche, 31028, Toulouse Cedex 4 – France ;

²UMET, Unité Matériaux Et Transformation, Bât. C6, 59655, Villeneuve d'Ascq – France

L'émission observée par Herschel (et Planck) dans le domaine de l'infrarouge lointain au submillimétrique est due aux grains de poussière froids (10-100K) de taille submicronique en équilibre thermodynamique avec le champ de rayonnement. Elle est généralement modélisée à l'aide d'un corps noir modifié par les propriétés optiques de la poussière (le coefficient d'absorption massique approximé dans le FIR par: $\kappa \propto \kappa_0 (\lambda/\lambda_0)^{-\beta}$ avec $\beta=2$). La compréhension de cette émission est essentielle pour de nombreuses études: de la détermination de la masse des cœurs pré-stellaires pour l'étude de la formation stellaire à la soustraction des avant-plans galactiques pour la cosmologie. Les observations d'Herschel et de Planck montrent que les variations d'émissivité de la poussière froide mise en évidence par PRONAOS et ARCHEOPS sont très courantes [1-3]. Ces variations, mises en évidence par l'anti-corrélation de l'indice spectral β avec la température de la poussière, semblent indiquer que les propriétés de la poussière sont dépendantes de sa température. Elles pourraient aussi refléter des changements des propriétés physico-chimiques de la poussière.

L'interprétation de ces résultats se heurte à la méconnaissance des propriétés optiques des grains à grande longueur d'onde et de leur comportement avec la température. C'est dans ce contexte que nous avons entrepris de mesurer le coefficient d'absorption massique d'analogues de la poussière interstellaire dans le FIR/submm en fonction de la température. L'indice spectral observé étant moyenné sur les différentes compositions de grains (silicates, oxydes, matière carbonée), il est nécessaire de mener des études sur différents types d'analogues de grains interstellaires. Après un premier travail expérimental sur les silicates magnésiens montrant que les propriétés spectroscopiques des grains varient avec la température [4] nous nous sommes intéressés aux silicates contenant du fer et du magnésium. Les premiers résultats de cette étude seront présentés. Les perspectives des études expérimentales et du travail théorique développé pour comprendre les variations des propriétés optiques des grains avec la température [5,6] seront exposées.

Références :

- [1] A&A 518 Special Issue *Herschel: the first science highlights* (2010)
- [2] Planck Collaboration, A&A, 536, A22, (2011)
- [3] Paradis D., et al., A&A, 537, A113, (2012)
- [4] Coupeaud A., et al., A&A, 535, A124 (2010)
- [5] Meny C., et al., A&A, 468, 171 (2007)
- [6] Paradis D., et al., A&A 534, A118, (2011)

Effets des rayons cosmiques sur les poussières hydrocarbonées

Marie Godard^{1,2}, Géraldine Féraud³, Marin Chabot⁴, Thomas Pino³, Rosario Brunetto¹, Yvain Carpentier^{3,5}, Jean Duprat⁶, Cécile Engrand⁶, Philippe Bréchnignac³, Louis d'Hendecourt¹ et Emmanuel Dartois¹

¹ IAS, Institut d'Astrophysique Spatiale, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay – France

² NASA GSFC, Goddard Space Flight Center, Astrochemistry Laboratory code 691, 8800 Greenbelt Road, Greenbelt MD 20771 – USA

³ ISMO, Institut des Sciences Moléculaires, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay – France

⁴ IPNO, Institut de Physique Nucléaire, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay – France

⁵ PhLAM, Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules, Univ. Lille 1, 59665 Villeneuve d'Ascq – France

⁶ CSNSM, Centre de Spectrométrie Nucléaire et de Spectrométrie de Masse, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay – France

Une composante importante de la poussière interstellaire carbonée est largement observée dans le milieu diffus de la Voie Lactée et d'autres galaxies, au travers de bandes d'absorption à 3.4 μm (modes d'élongations des liaisons C-H des groupements méthyle -CH₃ et méthylène -CH₂-), 6.85 et 7.25 μm (modes de pliages correspondants) [1]. Ces signatures interstellaires des grains hydrocarbonés aliphatiques sont bien reproduits par des analogues de laboratoire : les carbones amorphes hydrogénés (a-C:H ou HAC). La bande à 3.4 μm est observée dans le milieu interstellaire diffus, mais n'est pas détectée dans les nuages denses. Un mécanisme efficace de destruction/modification des poussières hydrocarbonées aliphatiques est donc requis pour rendre compte de l'évolution entre ces deux phases interstellaires.

L'exposition de la poussière interstellaire aux rayons cosmiques pourrait avoir un rôle dans la disparition de la bande à 3.4 μm des nuages denses [2]. Afin d'étudier l'évolution de la poussière carbonée soumise au rayonnement cosmique, nous avons irradié des analogues interstellaires carbonés (a-C:H et suies) par des ions énergétiques. Les échantillons ont été exposés à différents ions (de l'hydrogène à l'iode) et énergies (entre 0.2 et 160 MeV). Cette large gamme de conditions a permis d'explorer les distributions d'éléments et d'énergies des rayons cosmiques interstellaires. La déshydrogénation et les modifications chimiques induites ont été étudiées par spectroscopie infrarouge in situ. La diminution de l'absorbance des bandes aliphatiques avec la fluence a été analysée grâce à un modèle décrivant la perte de l'hydrogène du matériau irradié. Les résultats sont comparés aux modifications induites par les photons UV et les atomes d'hydrogène dans les différentes régions interstellaires [3].

Références

[1] Sandford S.A., Allamandola L. J., Tielens A., Sellgren K., Tapia M., Pendleton Y. J., ApJ, 371, 607 (1991)

[2] Mennella V., Baratta G. A., Esposito A., Ferini G., Pendleton Y. J. ApJ, 587, 727 (2003)

[3] Godard M., Féraud G., Chabot M., Pino T., Brunetto R., Carpentier Y. et al, A&A, 529, A146 (2011)

Stabilité d'hydrocarbures aromatiques polycycliques isolés et en agrégat sondée par collision avec des ions lents.

P. Rousseau¹, H. Zettergren², A. Ławicki¹, F. Seitz², M. Gatchell²,
H. A. B. Johansson², A. I. S. Holm², S. Maclot¹, M. Capron¹, A. Domaracka¹,
A. Méry¹, J. Rangama¹, B. Manil³, L. Adoui¹, H. Cederquist² et B. A. Huber¹.

¹ CIMAP, CEA/CNRS/ENSICAEN/Université de Caen Basse-Normandie,
boulevard Henri Becquerel, BP 5133, 14070 Caen cedex 5, France

²Department of Physics, Stockholm University, S-106 91 Stockholm, Suède

³ LPL, Université Paris 13-Université Sorbonne Paris,
avenue J.-B. Clément, 93340 Villetaneuse

La présence d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) dans le milieu interstellaire jouerait un grand rôle dans sa physico-chimie [1]. En plus des molécules isolées, la présence d'agrégats est aussi envisagée [2]. Nous avons étudié la stabilité de molécules de HAP isolées et en agrégats à l'aide de collisions avec des ions lents [3-5]. Les ions lents permettent de varier l'énergie et la charge déposées dans le système en changeant de projectile.

Le caractère aromatique des HAP permet une forte mobilité de la charge favorisant la survie de la molécule à l'ionisation, ainsi le pentacation de coronène a été observé après des multiples captures électroniques lors de collisions avec des ions Xe²⁰⁺ [4]. Au contraire des ions Xe²⁰⁺, les ions He²⁺ capturent peu d'électrons et déposent plus d'énergie dans le système, ainsi la perte d'hydrogène ainsi que la perte d'acétylène sont des voies de fragmentation importantes.

L'étude des agrégats a montré que les agrégats de HAP survivent peu à l'ionisation multiple. De plus lors de la répulsion coulombienne, une partie de l'énergie coulombienne est transférée dans les niveaux vibrationnels menant à un chauffage important des molécules de l'agrégat [3]. Enfin, en raison de la faible énergie de liaison des monomères dans l'agrégat, l'évaporation d'un monomère n'est pas une voie de dissociation permettant de dissiper beaucoup d'énergie. Ainsi la dissociation complète des agrégats est observée après interaction avec des ions He²⁺ même pour des tailles de quelques dizaines de molécules [3,5].

Références

- [1] Tielens A. G. G. M., Ann. Rev. Astronom. Astrophys., 46, 289 (2008)
- [2] Berné O. et collaborateurs, A&A, 479, L41 (2008)
- [3] Holm A. I. S. et collaborateurs, Phys. Rev. Lett., 105, 213401 (2010)
- [4] Ławicki A. et collaborateurs, Phys. Rev. A, 83, 022704 (2011)
- [5] Johansson, H. A. B. et collaborateurs, Phys. Rev. A, 84, 043201 (2011)

Recent advances in the simulation of the absorption and emission spectroscopy of polycyclic aromatic hydrocarbons

C. Falvo¹, G. Mulas², M. Basire³, F. Calvo⁴, C. Joblin⁵ et P. Parneix¹

¹ISMO, UMR CNRS 8214, Université Paris Sud, Orsay, France

²INAF–Osservatorio Astronomico di Cagliari, Capoterra, Italy

³PASTEUR, UMR CNRS 8640, Ecole Normale Supérieure, Paris, France

⁴LASIM, UMR CNRS 5579, Université Claude Bernard Lyon 1, Villeurbanne, France

⁵IRAP, UMR CNRS 5277, Université Paul Sabatier, 31028 Toulouse, France

The presence of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in the interstellar medium (ISM) was suggested nearly 30 years ago after the observation of the so-called unidentified infrared bands (UIB) in the emission spectra of a large variety of astronomical objects [1,2]. These bands located between 3.3 and 11.3 μm correspond to the typical CC and CH stretching modes of aromatic hydrocarbons. The main process responsible for the IR emission in the ISM corresponds to UV/visible excitation of a PAH followed by non-adiabatic intramolecular processes that leave the molecule in a vibrationally excited state. The molecule then cools down by radiation of photons in the infrared range.

Obtaining accurate chemical and physical knowledge of these molecules directly from observations in the IR spectral range remains a challenging task, mostly because the emitted photons originate from multiple molecules with various possible structures, in different ionic, protonation, or vibronic states. To disentangle the contributions from different individual molecules in different configurations, quantitative simulations of IR emission spectra is necessary [3]. Most early theoretical investigations of PAH spectra were based on the harmonic approximation. More realistic simulations should include anharmonic vibrational couplings, high lying vibrational states and long relaxation time scales. Including all these factors is challenging, but significant advances have been made in the recent years to address these issues for medium-size molecules, including PAHs [4,5,6].

A review of our recent advances and future work on the simulation of the absorption and emission spectroscopy of PAHs will be presented. Focus will be placed on anharmonicity, overtones, and combination bands. The naphthalene molecule is used as a model PAH and the simulated absorption spectrum will be compared with laboratory measurements [7].

References

- [1] Léger A. and Puget J. L., *A&A* 137, L5 (1984).
- [2] Allamandola L. J., Tielens A. G. G. M., and Barker J. R., *Astrophys. J.* 290, L25 (1985).
- [3] Pauzat F., *PAHs and the Universe*, EAS Publications Series, 46, 75 (2011)
- [4] Pirali O., Vervloet M., Mulas G., Mallocci G., and Joblin C., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 11, 3443, (2009).
- [5] Calvo F., Basire M., and Parneix P., *J. Phys. Chem. A*, 115, 8845, (2011).
- [6] Falvo C., Calvo F., and Parneix P., *J. Chem. Phys.*, 137, 064303 (2012).
- [7] Joblin C., Boissel P., Léger A., d'Hendecourt L., and Défourneau D., *A&A* 299, 835 (1995).

Emission infrarouge de molécules aromatiques mesurée avec le spectromètre FIREFLY

G. Féraud¹, T.Pino¹, P. Parneix¹, C. Falvo¹ et Ph. Bréchnignac¹

¹ ISMO, UMR 8214, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, Université Paris
Sud 11, 91405, Orsay Cedex – France

Depuis 28 ans, les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (PAHs) en phase gazeuse ont été associés aux bandes d'émission dans l'infrarouge moyen (Aromatic Infrared Bands, AIBs) de différents objets interstellaires soumis aux rayonnements UV des étoiles environnantes [1,2].

Un spectromètre, FIREFLY (Fluorescence in the InfraRed from Excited FLYing molecules) [3], a été mis au point et caractérisé à l'ISMO, dans le but de mesurer l'émission (fluorescence) infrarouge des molécules aromatiques en phase gazeuse, après absorption d'un photon UV. Le spectromètre contient une réplique des filtres circulaires variables à bord de l'instrument ISOCAM du satellite ISO, ce qui permet des comparaisons entre spectres de laboratoire et observations astrophysiques.

La désexcitation infrarouge mesurée dans la région des modes d'élongations CH (3000 cm⁻¹, soit 3.3 μm) des dérivés du benzène et du naphthalène à température ambiante sera présentée. Ceci montre, avec l'appui de la modélisation [4,5], que la spectroscopie d'émission IR est un outil puissant permettant de comprendre les effets d'anharmonicité liés à l'énergie interne, l'isomérisation voire même la dynamique intramoléculaire non-adiabatique.

Ce sont des travaux préliminaires à la mesure de la fluorescence infrarouge des nanoparticules aromatiques en phase gazeuse et à basse température produites par une flamme basse pression (combustion d'hydrocarbures) [6].

Ce travail est en partie financé par le programme national PCMI et par l'ANR GASPARIM (ANR-10-BLAN-0501-GASPARIM).

Références

- [1] Léger A. & Puget J.-L., A&A 137(1) :L5-L8 (1984)
- [2] Allamandola L.J., Tielens A.G.G.M. & Barker J.R., ApJ 290 :L25-L28 (1985)
- [3] Féraud G., Carpentier Y., Pino T., Longval Y., Dartois E., Chamaillé T., Vasquez R., Vincent J., Parneix P., Falvo C. & Bréchnignac Ph., proceeding of the European Conference on Laboratory Astrophysics (sous presse)
- [4] Basire M., Parneix P. & Calvo F., JCP, 129, 8, 081101 (2008)
- [5] Parneix P., Basire M. & Calvo F., Comput. Theor. Chem., 990, 112 - 118 (2012)
- [6] Pino T., Dartois E., Cao A.-T., Carpentier Y., Chamaillé Th., Vasquez R., Jones A. P., d'Hendecourt L. & Bréchnignac Ph., 490, 2, 665-672 (2008)

From PAHs to carbon clusters in photodissociation regions

J. Montillaud¹ et C. Joblin^{2,3}

¹ *Department of Physics, P.O. Box 64, FI-00014, University of Helsinki, Finland*

² *Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse, France*

³ *CNRS, IRAP, 9 Av. colonel Roche, BP 44346, 31028, Toulouse Cedex 4, France*

Astronomical observations have revealed an active chemistry of carbon species in photodissociation regions, involving polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), small hydrocarbons, and carbonaceous nanoparticles. Recently, carbon clusters like C₆₀ et C₇₀ fullerenes were detected in regions where PAHs are thought to be destroyed by intense UV photon fluxes [1]. It was suggested that PAHs are precursors of these species [2].

We have developed a model to compute the time evolution of the charge and hydrogenation states of PAHs in given astrophysical conditions (n_H , T, flux of UV-visible photons). This model enables to consider the successive absorptions of several photons before the complete cooling of species (hereafter multiphoton processes). It takes benefit from molecular data that have been recently obtained in particular with the experimental set-up PIRENEA in Toulouse.

The model was applied to compact PAHs of sizes between $N_C=24$ and 96, in the conditions of the reflection nebula NGC 7023. We found that in regions where the PAH emission peaks, species smaller than 50-60 C-atoms are completely dehydrogenated, giving birth to carbon clusters. In regions of more intense radiation fields where C₆₀ is detected, all PAHs are destroyed. In the conditions of the diffuse interstellar medium, PAHs smaller than ~30-40 C-atoms are destroyed, indicating that spectroscopic identifications, for instance by matching some diffuse interstellar bands, should target larger species.

We will show that the combination of new molecular data and multiphoton processes leads to significantly different results compared to previous studies, and in some cases, to evolution timescales close to dynamical timescales. In addition, we will discuss to which extent our results can support a scenario in which the presence of C₆₀ is related to PAH evolution.

Références

[1] Sellgren K., Werner M. W., Ingalls J. G., Smith J. D. T., Carleton T. M., Joblin C., *ApJ*, 722, L54 (2010)

[2] Berné O. & Tielens A.G.G.M., *PNAS*, 109, 401 (2012)

VO-Theory & Services théoriques pour le Milieu Interstellaire

Franck Le Petit¹, Benoît Commerçon², Antoine Gusdorf², Benjamin Godard¹, Patrick Hennebelle², David Languignon¹, François Levrier², Nicolas Moreau², Carlo-Maria Zwölf²

¹ *LUTH, UMR8102 du CNRS, Observatoire de Paris*

² *LERMA, UMR8112, Observatoire de Paris*

Les nouveaux instruments nous donnent accès à des niveaux de détail sans précédent sur la composition et la structure des objets interstellaires voire extragalactique. Pour interpréter ces observations, il est de plus en plus nécessaire que la communauté ait accès aux codes de modélisation ou aux résultats de simulations numériques les plus performants au monde. Le groupe VO-Theory de l'IVOA développe un jeu de standards et une architecture informatique pour permettre aux théoriciens de diffuser leurs codes et résultats de simulations. La communauté PCMI participe activement à cet effort que ce soit par le développement des standards et de l'architecture mais également via le développement des prototypes permettant de valider ces derniers. Les services autour du code PDR et la base de données STARFORMAT (simulations MHD du gaz interstellaire) sont les 2 cas servant à valider les standards internationaux.

Dans cet exposé, nous ferons le bilan de l'état de standards afin de présenter ce qu'il est aujourd'hui possible de diffuser via VO-Theory (codes en ligne et bases de données) et vers où tend ce domaine de l'OV. Nous présenterons l'état des services pour l'interprétation des observations du milieu interstellaire, PDR et STARFORMAT. Nous présenterons enfin le projet de plateforme de services théoriques pour le milieu interstellaire qui regroupe pour l'instant des équipes du LERMA, LUTH et de l'IAS et qui vise à déployer une infrastructure informatique, interopérable avec l'OV et VAMDC, permettant la diffusion de la majorité des services théoriques et outils nécessaires à l'interprétation des observations du milieu interstellaire (simulations MHD, PDR, code de choc, physique des grains, turbulence, transfert de rayonnement, ...).

Liens :

Services PDR : <http://pdr.obspm.fr>

STARFORMAT : <http://starformat.obspm.fr>

Présentations par Affiches

Détection de molécules organiques complexes dans les cœurs pré-stellaires

Aurore Bacmann¹, Vianney Taquet¹, Alexandre Faure¹, Claudine Kahane¹, Cecilia Ceccarelli¹

¹UJF-Grenoble 1 / CNRS-INSU, Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG) UMR 5274, F-38041 Grenoble - France

Les molécules organiques complexes sont détectées depuis de nombreuses années dans les cœurs chauds (« hot cores ») des protoétoiles massives, et plus récemment également dans les cœurs chauds (« hot corinos ») des protoétoiles de faible masse. Les espèces détectées, des petites molécules saturées stables sous conditions terrestres (par ex. formiate de méthyle, acétaldéhyde, etc.) ont été souvent considérées comme caractéristiques du gaz chaud. Plusieurs types de scénarios ont été invoqués pour expliquer la synthèse de ces molécules dans les régions de formation d'étoiles. Dans le premier scénario, les molécules complexes sont formées dans le gaz chaud (~ 100 K) après l'évaporation des constituants (tels que le méthanol par exemple) des manteaux de glace des grains chauffés par la protoétoile [1]. Ce scénario est cependant remis en question par des mesures de laboratoire montrant que les processus en phase gazeuse ne sont pas suffisamment efficaces pour former des molécules organiques complexes [2]. Alternativement, des radicaux précurseurs des molécules organiques complexes peuvent être formés dans les glaces des grains (e.g. par irradiation UV de molécules plus simples comme le méthanol et le formaldéhyde) pendant la phase protostellaire [3,4]. Lorsque la protoétoile se forme et commence à réchauffer le gaz de l'enveloppe, ces radicaux deviennent mobiles à la surface des grains et réagissent entre eux pour former des molécules organiques qui désorbent ensuite lorsque la température est suffisamment élevée. Dans les 2 cas, une phase tiède/chaude (30-100 K) est nécessaire pour expliquer la présence de ces espèces dans les protoétoiles. Pour cette raison, très peu d'études ont été faites en direction du milieu interstellaire froid.

Nous présentons ici des observations de molécules organiques complexes dans un cœur pré-stellaire. Plusieurs molécules organiques complexes typiques des régions chaudes, comme le formiate de méthyle ou le diméthylether sont détectées dans la phase gazeuse à 10 K, pour la première fois à une température aussi basse [5]. Les scénarios mentionnés précédemment pour expliquer la formation de ces molécules organiques ne peuvent pas s'appliquer ici du fait que la température dans le cœur n'est pas suffisamment élevée pour fournir la mobilité nécessaire aux radicaux dans les manteaux de glace. Puisque les cœurs pré-stellaires sont censés être les précurseurs des protoétoiles de faible masse, la présence de molécules organiques complexes au stade préstellaire nécessite de réviser les scénarios de formation des molécules complexes dans les régions froides du milieu interstellaire comme les cœurs pré-stellaires. Nous discuterons des mécanismes possibles de formation et des implications de notre résultat sur la chimie des molécules organiques complexes dans les régions de formation stellaire.

Références

- [1] Charnley, S.B., Tielens, A.G.G.M., & Millar, T.J., *ApJ*, 399, L71 (1992)
- [2] Horn, A., Møllendal, H., Sekiguchi, O., et al. *ApJ*, 611, 605 (2004)
- [3] Taquet, V., Ceccarelli, C., & Kahane, C., *A&A*, 538, A42 (2012)
- [4] Garrod, R.T., & Herbst, E., *A&A*, 457, 927 (2006)
- [5] Bacmann, A., Taquet, V., Faure, A., et al., *A&A*, 541, L12 (2012)

Anion production and relaxation in high velocity C_n^+ -He collisions; astrochemical implications

K.Béroff¹, M.Chabot², G.Martinet², T.Pino¹, S.Bouneau², A.Le Padellec³, G.Féraud¹, N.Do Thi⁴, F.Calvo⁵, C.Bordas⁵, F.Lépine⁵

¹ISMO, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91405 Orsay cedex

²IPNO, Institut de Physique Nucléaire d'Orsay, 91406 Orsay cedex

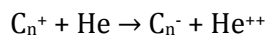
³IRAP, Institut de recherche en astrophysique et planétologie, F-31028 Toulouse cedex

⁴CSNSM Centre de spectrométrie nucléaire et spectrométrie de masse, 91405 Orsay cedex

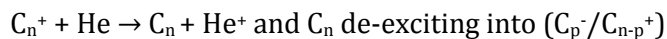
⁵LASIM, Laboratoire de spectrométrie ionique et moléculaire 69622 Villeurbanne cedex

Anion production has been studied in collisions between C_n^+ clusters and Helium atoms ($n \leq 5$, $v = 2.25$ a.u) using the AGAT set-up at the Tandem accelerator in Orsay. It was found to arise, in a single collision, from two processes:

(i) Double electron capture (DEC):



(ii) Ion-pair relaxation (IPR) following single electron capture onto C_n^+ projectiles (SEC):



Concerning the first one, we measured dissociative and non dissociative cross sections and all dissociative branching ratios. The analysis of the collision within the IAE (Independent Atom and Electron) model allowed to point out a loss of the loosely bound electron in anionic C_n^- species after the collision by thermionic emission, in competition with fragmentation. The branching ratio between dissociation and thermionic emission was semi empirically estimated between 1% and 10% depending on the cluster size. Values are of the same order of magnitude than theoretical calculations within the Weisskopf formalism.

The fact that fragmentation is not negligible may have consequences in astrochemistry. We note in particular that in astrochemical databases the electron emission is supposed to be the only exit channel in $C + C_n^-$ reactions (associative detachment) whereas fragmentation is not considered.

In addition to relaxation of C_n^- species, we will present also branching ratios of relaxation of excited C_n clusters by ion pair relaxation C_p^-/C_{n-p}^+ . As in the case of the relaxation of C_n^- species, the C_2^- fragment was found magical.

A Herschel view of gas photoevaporation in the interstellar medium and protoplanetary disks

O. Berné^{1,2}, C. Joblin^{1,2}, S. Vicente³, and the OT Herschel programs «A Herschel survey of PDRs in proplyds» and « Physics of gas evaporation at PDR edges»

¹ Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse, France

² CNRS, IRAP, 9 Av. colonel Roche, BP 44346, 31028, Toulouse Cedex 4, France

³ Kapteyn Astronomical Institute, Postbus 800, 9700 AV, Groningen, The Netherlands

The surface layers of molecular clouds and protoplanetary disks harbor photodissociation regions (PDRs) where neutral gas is heated by the ultraviolet photons (UV) of nearby stars. The overpressure resulting from the heat-up of gas in these regions, creates photo-evaporation flows, which are widely observed in the interstellar medium and in protoplanetary disks (e.g. the famous Orion proplyds). These flows accelerate the surface of molecular clouds ("rocket acceleration") and in this sense they shape the interstellar medium. In protoplanetary disks, they control the mass loss and hence the timescale for the formation of gaseous giant planet.

The micro-physical mechanism at the origin of photoevaporation is photo-electric heating on small dust grains and polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) [1]. The cooling, on the other hand, occurs mainly through the far-IR fine structure lines ([OI] and [CII]). In this contribution we present the mid-infrared (VLT/Spitzer) data of galactic PDRs and proplyds which give access to the properties of PAHs (charge state, abundance etc.). We combine this data with spectroscopic observations of the far-IR fine lines observed with Herschel as part of two open time programs (PI C. Joblin and O. Berné). The combination of these two datasets allows for the first time to study the energetic balance and dynamics of photo-evaporation in a complete and self consistent way.

We discuss the preliminary results we have obtained. At this stage, it clearly appears that the current vision of photoevaporation and gas heating in models is extremely simplified and that it absolutely needs to take into account the photochemical evolution of PAHs to be realistic as also proposed by detailed analysis (see Joblin et al., this conference).

Références

[1] Joblin, Pilleri, Montillaud, 2010, A&A, 521, 25

[2] Vicente, Berné, Tielens et al. ApJL Submitted

Adsorption des molécules organiques complexes sur les glaces interstellaires

M. Bertin¹, M. Lattelais², H. Mokrane³, F. Pauzat², J. Pilmé²,
Y. Ellinger², C. Romanzin¹, X. Michaut¹, P. Jeseck¹, J-H. Fillion¹,
H. Chaabouni³, E. Congiu³, F. Dulieu³, S. Baouche³ et J-L. Lemaire³

¹ LPMAA, UMR7092 du CNRS, Université P. & M. Curie, 75005 Paris – France

² LCT, UMR7616 du CNRS, Université P. & M. Curie, 75321 Paris Cedex 05- France

³ LERMA/LAMAp, UMR8112 du CNRS, Observatoire de Paris et Université de
Cergy Pontoise, 95000 Cergy Pontoise - France

Le rôle des processus solide-gaz à la surface des grains interstellaires est fondamental pour la formation des molécules organiques complexes (COMs) observées dans le milieu interstellaire (MIS). Le grain intervient dans la première étape en permettant l'adsorption des réactifs, puis dans une seconde étape en fournissant un support facilitant la réaction, enfin dans la dernière étape en retenant les produits avant une possible désorption. Selon la nature de la surface (glace, matière carbonée, silice/silicates) et des produits formés, cette désorption peut être égalitaire ou sélective. La détermination des énergies d'adsorption est donc un objectif majeur pour le développement des modélisations astrochimiques.

Dans ce but nous avons formalisé une approche interdisciplinaire cohérente théorie/expérience pour l'étude des phénomènes d'adsorption. La partie théorique est faite au LCT au moyen de traitements DFT des systèmes périodiques décrivant les solides organisés ; la partie expérimentale est réalisée par les deux groupes du LPMAA et du LERMA/LAMAp sur les montages SPICES et FORMOLISM utilisant la technique de TPD (désorption programmée en température) sous ultraviolette entre 70 et 200 K.

A titre d'exemple, nous présentons les résultats sur deux couples de COM isomères, $\text{CH}_3\text{COOH}/\text{HCOOCH}_3$ et $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}/\text{CH}_3\text{OCH}_3$ dont on suppose la formation sur les manteaux glacés des grains interstellaires. Pour chaque paire d'isomères, théorie et expériences présentent un accord remarquable, montrant que l'isomère le plus stable (acide acétique ou éthanol) s'adsorbe plus fortement que l'isomère de plus haute énergie (formiate de méthyle ou diméthyl-éther). Ce phénomène d'adsorption différentielle qui conduit à des températures de désorption différentes [1] n'est pas limité à la glace. Le solide pourrait alors influencer sur les abondances que l'on observe en phase gazeuse

Perspective : construction d'une base de données des énergies d'adsorption ouverte à la communauté pour la modélisation des processus chimiques à l'interface solide gaz. En dehors de molécules "consensuelles", déjà étudiées ou en cours d'étude, une liste complémentaire est ouverte pour recueillir les suggestions.

Références

[1] M. Lattelais, M. Bertin, H. Mokrane, et al., *A&A*, **532**, A12 (2011)

Croissance des anions dans les enveloppes circumstellaires : apports expérimentaux

Ludovic Biennier¹, Sophie Carles¹, Jean-Claude Guillemin², Sébastien Le Picard¹, Alexandre Faure³, Daniel Cordier⁴

¹ Institut de Physique de Rennes UMR CNRS 6251, Rennes

² Sciences Chimiques de Rennes. UMR CNRS 6226. ENSCR, Rennes

³ Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble UMR CNRS 5274, Grenoble

⁴ Observatoire de Besançon - Institut UTINAM UMR CNRS 6213, Besançon

L'inventaire des anions moléculaires circumstellaires s'est récemment enrichi avec la détection de l'ion CN^- dans l'enveloppe de IRC +10216 [1]. Les observations astronomiques suggèrent que l'anion CN^- est produit dans la partie externe de l'enveloppe et que des mécanismes autres que l'association radiative ($\text{CN} + e^- \rightarrow \text{CN}^- + h\nu$) sont impliqués. Les voies réactionnelles conduisant à la croissance des anions sont également mal connues. Les études expérimentales de la cinétique, des produits et des rapports de branchement s'avèrent ainsi essentielles pour établir les mécanismes clés de destruction et formation de ces espèces et reproduire les observations. A l'heure actuelle, il y a une absence quasi-totale de données cinétiques pour les ions négatifs à basse température.

Dans le laboratoire, nous avons ainsi exploré la réaction de CN^- avec le cyanoacétylène (HC_3N) sur la gamme de température 50-300 K en écoulement supersonique uniforme à l'aide de la technique CRESU. Les cyanopolyynes tels que HC_3N sont très abondants dans les enveloppes circumstellaires des étoiles carbonées [2]. La cinétique de cette réaction avait été mesurée récemment à température ambiante par le groupe rennais à l'aide de la méthode d'écoulement en post décharge couplée à la spectrométrie de masse [3]. Nos résultats montrent que la cinétique est peu dépendante de la température et confirment que $\text{C}_3\text{N}^- + \text{HCN}$ représente la voie de sortie dominante et contribue ainsi à la croissance des anions [4]. Cette étude est actuellement étendue à des réactions impliquant des ions plus lourds tels que C_3N^- . En parallèle nous discuterons les résultats préliminaires de mesure de cinétique de la réaction de CN^- avec NH_3 .

Le mode de production d'ions actuellement utilisé au laboratoire est limité aux espèces dont les précurseurs attachent facilement des électrons de faible énergie et disponibles ou synthétisables en quantité suffisante. Nous discuterons de la poursuite de l'exploration des réactions impliquant des anions à l'aide de l'incorporation au dispositif actuel d'une source d'ions sélective.

References

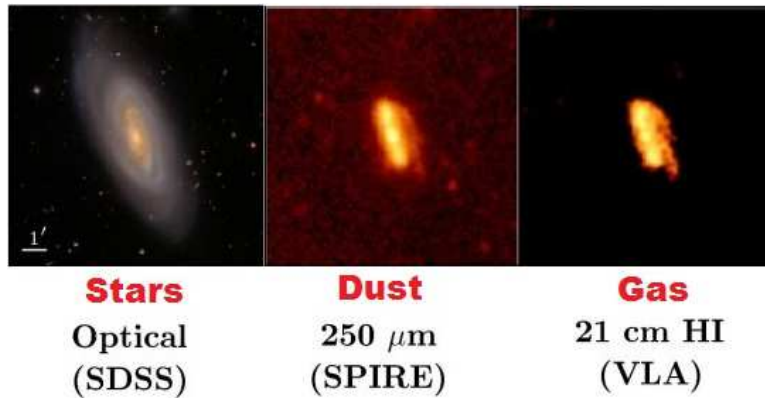
- [1] M. Agundez, J. Cernicharo, M. Guélin, C. Kahane, E. Roueff, J. Klos, F.J. Aoiz, F. Lique, N. Marcelino, J.R. Goicoechea, M. Gonzalez Garcia, C.A. Gottlieb, M.C. McCarthy, P. Thaddeus, *A&A*, 517 (2010) L2.
- [2] L. Decin *et al.*, *Nature*, 467 (2010) 64-67.
- [3] S. Carles, F. Adjali, C. Monnerie, J.-C. Guillemin, J.-L. Le Garrec, *Icarus*, 211 (2011) 901-905.
- [4] J. Žabka, C. Romanzin, C. Alcaraz, M. Polášek, *Icarus*, 219 (2012) 161-167.

Dust destruction and heating in the IGM

Marco Bocchio, Anthony Jones

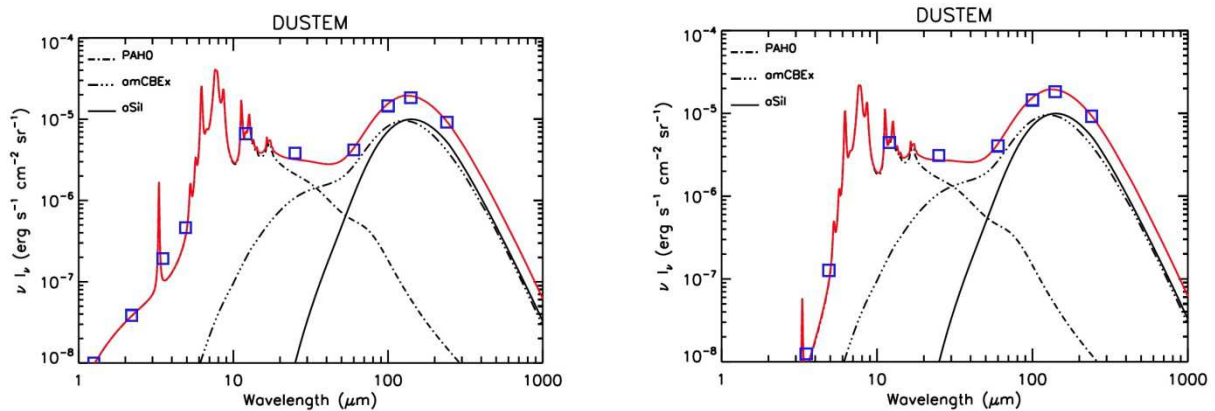
*Institute d'Astrophysique Spatiale (IAS), UMR 8617, CNRS / Université Paris-Sud,
 91405 Orsay, France*

Herschel Space Observatory data shows clear evidence for extraplanar galactic dust, in the intergalactic medium (IGM) [1], but what heats this dust and how long can it survive?



Cortese et al. (2010).

Dust is destroyed on short time-scales [2] by sputtering in a hot gas, affecting the SED. [3].



Dust SEDs without (left) and with (right) destruction processes taken into account [3].

This poster investigates the processes that need to be taken into account both in terms of the destruction and heating of dust and how these affect the SED.

Références

- [1] Cortese, L., Davies, J. I., Pohlen, M., et al. 2010, A&A, 518, L49
- [2] Bocchio, M., Micelotta, E. R., Gautier, A.-L., & Jones, A. P. 2012, A&A, 545, A124
- [3] Bocchio, M., Jones, A. P., Verstraete, L., et al. 2012 (in preparation)

Etude des isotopologues ^{13}C de l'éthanol : Spectres millimétriques et applications à la Radioastronomie

Aurélia Bouchez-Giret¹, Adam Walters¹, Sandrine Bottinilli¹, Holger S.P. Müller², Matthias H. Ordu², Frank Lewen², Monica Koerber², Christian P. Endres², Stehphan Schlemmer².

¹ IRAP, Université de Toulouse, UPS-OMP, CNRS; 9 Av. colonel Roche, BP 44346, 31028 Toulouse Cedex 4, France;

² I. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Zulpicher Str. 77, 50937 Köln, Germany.

Les spectres rotationnels des deux isotopologues monosubstitués de l'anti- conformer ^{13}C de l'éthanol ont été mesurés entre 80 et 800 GHz en utilisant trois différents spectromètres du laboratoire spectroscopique de Cologne en Allemagne. L'ensemble des données a été ajusté avec une réduction Watson-S, en ne tenant pas compte des transitions des états hauts ayant une perturbation significative avec les états gauches de la molécule. Cette étude a pour objectif une première détection astrophysique dans plusieurs cœurs chauds où la molécule mère a déjà été clairement identifiée [1][2][3]. Des observations ont été effectuées en direction de G34.3+0.15 avec le télescope 30M de l'IRAM. Je présenterai les détails de notre étude spectroscopique ainsi que les résultats des observations.

Références

[1] Zuckerman B, Turner BE, Johnson DR, Clark FO, Lovas FJ, Fourikis N, et al. *Astrophys J* 1975; 196: L99–L102.

[2] Millar TJ, Olofsson H, Hjalmarsen A, Brown PD. *Astron. Astrophys* 1988; 205: L5–7.

[3] Millar TJ, MacDonald GH, Habing RJ *Mon Not R Astron Soc* 1995; 273: 25-9.

Formation de H₂ : Influence des fluctuations de la température des grains.

E. Bron¹, J. Le Bourlot¹ et F. Le Petit¹

¹ LUTH - Observatoire de Paris, CNRS UMR 8102, Université Paris Diderot

La formation de H₂ dans le milieu interstellaire est un problème dont de nombreux aspects restent à éclaircir. Grâce aux satellites Planck et Copernicus, le taux de formation de H₂ sur les poussières du gaz interstellaire diffus a pu être mesuré (Jura 1974[1], Gry et al. 2002[2]).

Mais alors que les études expérimentales montrent que le mécanisme de Langmuir-Hinshelwood n'est efficace que dans une étroite gamme de températures (moins de 20K), des observations de H₂ en émission dans les PDR ont révélé une formation efficace sur des grains chauds (Habart et al., 2004[3]). Le mécanisme d'Eley-Rideal, qui met en jeu la chimisorption d'atomes d'hydrogène, pourrait expliquer cette efficacité dans les PDR (Le Bourlot et al. 2012[4]).

Cependant, sous de forts champs de rayonnement comme dans les PDR, les plus petits grains présentent des fluctuations de température importantes. Or les distributions de tailles de grains usuelles (Mathis et al. 1977 [5]) sont telles que les plus petits grains possèdent la majorité de la surface disponible. Un calcul supposant une température du grain constante ne suffit donc pas.

Nous présentons ici une étude détaillée de cet effet stochastique sur la formation de H₂ par les mécanismes de Langmuir-Hinshelwood et d'Eley-Rideal, utilisant une approche par les équations maîtresses pour calculer la statistique des fluctuations couplées de la température et de la population d'atomes d'hydrogène adsorbés. Nous sommes ainsi capable de calculer le taux de formation en fonction du champ de rayonnement.

L'intégration de ce calcul dans le code PDR de Meudon nous permet alors d'observer l'effet sur la formation de H₂ aux différentes profondeurs optiques dans le nuage. Nous comparons les nouveaux résultats avec les estimations classiques du taux de formation et présentons les différences en terme de structure chimique du nuage et d'intensités de raies observables.

[1] Jura, M., ApJ, 191, 375 (1974)

[2] Gry, C., Boulanger, F., Nehmé, C., Pineau des Forêts, G., Habart, E., Falgarone, E., A&A, 391, 675 (2002)

[3] Habart, E., Boulanger, F., Verstraete, L., Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., A&A, 414, 531 (2004)

[4] Le Bourlot, J., Le Petit, F., Pinto, C., Roueff, E., Roy, F., A&A, 541, id.A76 (2012)

[5] Mathis, J. S., Rumpl, W., Nordsieck, K. H., ApJ, 217, 425 (1977)

Photoionization / Mass Spectrometry Detection for Kinetic Studies of Neutral – Neutral Reactions at low Temperature: Development of a new apparatus

M. Capron¹, A. Benidar¹, L. Biennier¹, J. Courbe¹, G. Garcia², V. Roussel, I. Sims¹, D. Travers, L. Nahon² and S. Le Picard¹.

¹ Université Rennes 1, Institut de Physique de Rennes, UMR CNRS 6251 - Bât. 11 C

Campus de Beaulieu, Université de Rennes 1 35042 Rennes cedex France

² Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin - BP 48, 91192 GIF-sur-YVETTE CEDEX

Le projet CRESUSOL consiste en la mise au point et la réalisation d'un nouveau réacteur chimique transportable basé sur le principe CRESU^[1] et sa version pulsée^[2]. Associé au rayonnement synchrotron SOLEIL, il permettra la quantification des produits de réactions chimiques à ultra basses températures (< 20 K). Ce type de mesures apportera des informations clés pour mieux comprendre les mécanismes de réactions élémentaires. Il fournira également des données, encore inexistantes, nécessaires à une amélioration très significative des modèles photochimiques des environnements froids de l'Univers (nuages interstellaires, atmosphères froide des planètes ou de leurs satellites).

La réalisation d'un tel projet passe néanmoins par la levée d'un certain nombre de verrous scientifiques et techniques qu'il convient de considérer dès la conception. Le poster présenté ici s'intéresse en particulier à l'un des aspects de cette conception : la détection. Cette dernière est fondée sur un spectromètre de masse par temps de vol fonctionnant en mode continu ^[3,4] qui devra s'adapter au mieux aux exigences du projet. Une géométrie réaliste, l'ionisation après l'écorçage de l'écoulement supersonique ou encore le risque de saturation du détecteur constituent autant d'exemples de problèmes à résoudre sans limiter la résolution en masse du dispositif.

Références

- [1] I. R. Sims et al, Journal of Chemical Physics, **100**, 4229 (1994)
- [2] S. B. Morales, Thèse de Doctorat, Université de Rennes 1 (2009)
- [3] W. C. Wiley and I. H. McLaren, Rev. Sci. Instrum. **26**, 1150 (1955)
- [4] G. A. Garcia et al, Rev. Sci. Instrum. **76**, 053302 (2005)

Water formation through O₂+D pathway on cold silicates and amorphous water surfaces of interstellar interest

H. Chaabouni¹, M. Minissale¹, E. Congiu¹, G. Manico², J. A. Noble³,
S. Baouche¹, J. L. Lemaire¹, V. Pirronello⁴ and F. Dulieu¹

¹LERMA, UMR 8112 du CNRS, de l'Observatoire de Paris et de l'Université de Cergy Pontoise,
mail Gay Lussac, 95000 Cergy Pontoise Cedex, France.

²Dipartimento di Fisica ed Astronomia Università degli Studi di Catania Via Santa
Sofia, 64 95123 Catania, Italy.

³Aix-Marseille Université, PIIM UMR 7345, 13397, Marseille, France

⁴Dipartimento di Metodologie Fisiche e Chimiche, Università di Catania, Viale A. Doria 6, 95125
Catania, Sicily, Italy

Interstellar water formation has been intensively investigated in the past decade. Many studies from different groups have shown an efficient formation through the hydrogenation of O/O₂/O₃ ices [1-4] and mostly in the multilayer regime [1,2]. This work focuses on the deuteration of solid O₂ in the sub-and monolayer regimes on bare amorphous silicate grain analogs and (porous and non-porous) amorphous water ice surfaces [5].

The experiments are performed with the FORMOLISM setup located at Cergy Pontoise using atomic deuterium and molecular oxygen triply differential pumping beam-lines. We covered the surface of the sample (amorphous silicate or amorphous water ices) with one monolayer of solid O₂ at 10 K and we irradiated the film with D-atoms at the same surface temperature until the destruction of the oxygen species. The gas surface reactions are analyzed with Reflection Absorption Infra-Red Spectroscopy (RAIRS) and Temperature-Programmed Desorption (TPD) techniques.

Results showed that the formation of D₂O water molecules is very efficient through the O₂+D pathway, but one fraction of the newly formed water stays on the dust, and the other fraction is released into the gas phase. The fraction of water molecules desorbing into the gas phase upon formation depends strongly on the substrate (silicate or water ice layers). About 18 % of the newly formed D₂O water molecules remain in solid phase on the silicate surface, while more than 60 % of D₂O molecules stay on the amorphous water ice substrate at 10 K [5].

More than 85 % of D₂O water molecules desorb into the gas phase upon formation through the exothermic and barrier-less OD+D → D₂O reaction on the silicate surface held at 10 K [6]. Such a desorption process, called chemical desorption is induced by the excess energy of formation released from the OD+D reaction. A kinetic chemical model taking into account the high desorption rate of water products supported our conclusions.

References

- [1] Miyauchi. N, Hidaka. H, Chigai. A, Nagaoka. A, et al., Chem. Phys. Lett, 456, 27 (2008)
- [2] Cuppen. H. M, Ioppolo. S, Romanzin. C, Linnartz. H., Phys. Chem. Chem. Phys, 12, 12079 (2010)
- [3] Dulieu. F, Amiaud. L et al., Astron. Astrophys. 512, A 30 (2010)
- [4] Jing. D, He. J, Brucato. J, Sio. A. D, Tozzetti. L, and Vidali. J., Astrophys. Lett, 741, L9, (2011)
- [5] Chaabouni. H et al., accepted by J. Chem. Phys 2012
- [6] Cazaux. S, Cobut. V, Marseille. M, Spaans. M, and Caselli. P., Astron. Astrophys. 522, A74 (2010).

Rapports de branchements semi-empiriques pour la chimie des petits hydrocarbures très insaturés.

M. Chabot¹, K. Béroff², A.Jallat¹, V. Wakelam³ et P. Gratier³

¹ IPNO, Institut de Physique Nucléaire d'Orsay, 91406 Orsay cedex

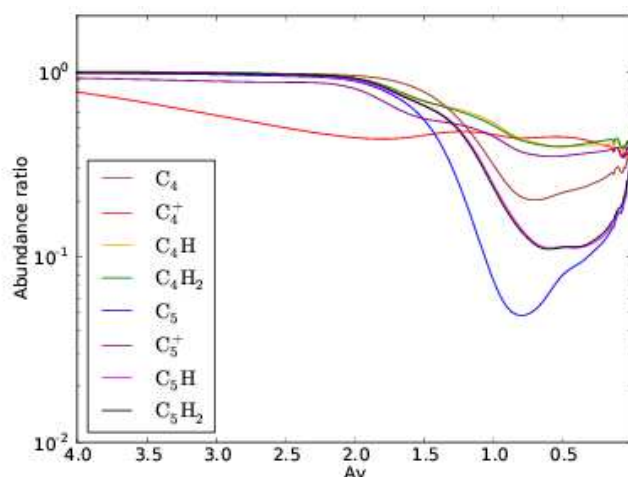
² ISMO, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91404 Orsay cedex

³ LAB, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, BP89, 33270 Floirac

Les petits hydrocarbures très insaturés sont observés dans de très nombreuses régions du milieu interstellaire. Ils ont été vus dans des régions proto et circumstellaires, dans des nuages froids et denses ainsi que dans des régions de photodissociation. Les petites chaînes carbonées peuvent être des outils observationnels efficaces pour l'étude de la composition chimique de la matière carbonée extraterrestre (PAH, A-CH, suies,...) à condition que leur synthèse et leur destruction dans la phase gazeuse soit bien maîtrisées.

La modélisation de la synthèse non catalysée des petits hydrocarbures dans la phase gazeuse est un objectif ambitieux mais réaliste à long moyen terme. Elle repose sur la détermination d'un nombre fini de réactions, au contraire des réactions catalysées par les poussières et/ou glaces où la complexité est beaucoup plus grande.

Dans le cadre des travaux de physico - chimie coordonnés par la base KIDA, nous proposons une méthode pour prédire de façon semi empirique les rapports d'embranchement (RB) des produits de sortie d'une réaction. Cette méthode se base sur l'hypothèse d'une fragmentation statistique et utilise le concept de « breakdown curve » issu de la spectrométrie de masse. Pour l'application aux petits hydrocarbures insaturés nous avons utilisé les mesures de fragmentation obtenues avec le multi détecteur AGAT sur l'accélérateur Tandem de l'IPN d'Orsay. Avec l'ensemble des données acquises ($C_n^{0,+}$ ($n=1,10$), $C_nH^{0,+}$ ($n=1,4$), $CH_2^{0,+}$, $C_3H_2^{0,+}$) nous prédisons les RB pour plus de 70 réactions de type ion-neutre, neutre-neutre, recombinaison anion-cation ou recombinaison électronique dissociative. Outre la description du modèle, nous présenterons l'effet de l'injection de ces nouveaux RB dans deux benchmarks de calcul en PDR et en nuage dense et froid.



Rapport d'abondances calculées (code de Meudon) avec les nouveaux et les anciens RB en fonction de la profondeur dans la PDR dites de la tête de cheval.

Extractions automatisées des bandes diffuses des spectres d'étoiles froides

Chen Hui-Chen¹, Lallement R¹, Puspitarini L., Babusiaux C¹,
Bonifacio P¹, Hill V.²

¹ *GEPI (UMR9111), Observatoire de Paris, Université Paris-Diderot, 5 Place Jules Janssen, 92190, Meudon France*

² *Laboratoire Lagrange (UMR7293), Université de Nice Sophia Antipolis, CNRS, Observatoire de la Côte d'Azur, BP 4229, 06304, Nice Cedex 4*

Les programmes ou relevés spectroscopiques stellaires, en particulier ceux des spectrographes multi-objets, contiennent une vaste quantité d'informations sur les absorptions par le MIS, raies et bandes interstellaires diffuses (DIBs). Il s'agit pour la grande majorité de spectres d'étoiles froides aux multiples raies stellaires, pour lesquelles les méthodes traditionnelles d'extraction sont inapplicables. Nous montrerons des résultats de méthodes nouvellement développées pour ajuster aux observations de ces étoiles une combinaison de spectres stellaires synthétiques, modèles de raies ou bandes diffuses, et, pour les régions concernées, modèles de transmissions atmosphériques. L'évolution des DIBs avec la distance pour une direction donnée permet la localisation des complexes nuageux, et peut contribuer à la construction d'une distribution 3D du MIS galactique. Les comparaisons entre les extinctions déduites des DIBs au moyen de relations établies dans le milieu local, et celles déterminées par d'autres méthodes, photométriques et spectro-photométriques, montrent de plus que ces extractions automatiques permettent d'obtenir des estimations de l'extinction. Ces mesures peuvent également servir à étudier les propriétés des DIBs dans toutes les régions, en particulier là où aucun rayonnement UV d'étoiles jeunes ne les influence.

Références

- [1] Chen Hui-Chen , et al, 201x, A&A, submitted
- [2] Raimond S., et al, 2012, A&A, 544, 136

NH₂OH formation through NO hydrogenation on interstellar relevant substrates.

E. Congiu,¹ H. Chaabouni,¹ C. Laffon,² P. Parent,² S. Baouche,¹
and F. Dulieu¹

¹*LERMA-LAMAp, Université de Cergy-Pontoise, Observatoire de Paris, ENS, UPMC, UMR 8112 du CNRS, 5 mail Gay Lussac, 95000 Cergy Pontoise Cedex, France*

²*Laboratoire de Chimie-Physique, Matière et Rayonnement, Université Pierre-et-Marie Curie (Paris 06)- CNRS (UMR 7614), 11 rue Pierre-et-Marie-Curie, 75231 Paris*

In surface reactions and solid state chemistry nitric oxide, NO, is thought to be the main precursor species of the NO bonded molecules [1, 2] and one of the precursor molecules of nitrogen-containing organics [3, 4]. Interstellar nitrogen chemistry, however, is rather poorly understood as well as the mechanisms leading to the inclusion of nitrogen into (still) unknown reservoirs of interstellar nitrogen. Charnley et al. [2] proposed that accreted NO might be converted to HNO and NH₂OH via hydrogenation surface reactions in quiescent dense clouds.

In the present laboratory study, temperature-programmed desorption (TPD) and reflection-absorption infrared spectroscopy (RAIRS) techniques are used to investigate hydrogenation reactions of NO molecules under interstellar dark cloud conditions. In this contribution, I will focus on the reactivity of NO and H (D) atoms and present a study of hydroxylamine formation on crystalline H₂O and amorphous silicate – two very realistic analogs of grain surface materials in the interstellar medium – at low temperature (10 K) and in a low-coverage regime (< 1 monolayer) [5, 6]. The solid state NO + H reaction channel proves to be a very efficient pathway to NH₂OH formation in space and may be a potential starting point for prebiotic species in dark interstellar clouds since hydroxylamine was suggested as a key reactant precursor in the formation of interstellar amino acids [4, 7, 8].

References

- [1] D. T. Halfen, A. J. Apponi, and L. M. Ziurys, *Astrophys. J.* 561, 244 (2001).
- [2] S. B. Charnley, S. D. Rodgers, and P. Ehrenfreund, *Astron. Astrophys.* 378, 1024 (2001).
- [3] R. T. Garrod, S. L. Widicus Weaver, and E. Herbst, *Astrophys. J.* 682, 283 (2008).
- [4] V. Blagojevic, S. Petrie, and D. K. Bohme, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 339, L7-11 (2003).
- [5] E. Congiu, G. Fedoseev, S. Ioppolo, F. Dulieu, H. Chaabouni, S. Baouche, J. L. Lemaire, C. Laffon, P. Parent, T. Lamberts, H. M. Cuppen, and H. Linnartz, *Astrophys. J. Lett.* 750, L12 (2012).
- [6] E. Congiu, H. Chaabouni, C. Laffon, P. Parent, S. Baouche, and F. Dulieu, *J. Chem. Phys.* 137, 054713 (2012).
- [7] J. L. Snow, G. Orlova, V. Blagojevic, and D. K. Bohme, *J. Am. Chem. Soc.* 129, 9910 (2007).
- [8] G. Fedoseev, S. Ioppolo, T. Lamberts, J. Zhen, H. M. Cuppen, and H. Linnartz, *J. Chem. Phys.* 137, 054714 (2012).

La deutération de l'eau dans les proto-étoiles de faible masse

Audrey Coutens^{1,2}, Charlotte Vastel^{1,2} et Emmanuel Caux^{1,2}

¹ Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse, France

² CNRS, IRAP, 9 Av. Colonel Roche, BP 44346, 31028 Toulouse Cedex 4, France

L'eau est une des molécules les plus abondantes du milieu interstellaire. En plus d'être un ingrédient nécessaire à l'apparition de la Vie, elle joue également un rôle important dans le processus de formation stellaire à travers le refroidissement du gaz chaud et contrôle aussi la chimie de nombreuses autres espèces, que ce soit en phase gazeuse ou à la surface des grains. Etudier sa forme deutérée HDO constitue un moyen unique, à travers l'estimation du rapport HDO/H₂O, de contraindre les mécanismes de formation de l'eau ainsi que de mieux comprendre l'origine de l'eau des océans terrestres. Des résultats récents obtenus avec le satellite Herschel montrent en effet que le rapport HDO/H₂O observé dans les comètes est similaire à celui mesuré dans les océans ($\sim 1.5 \times 10^{-4}$), suggérant que l'eau pourrait avoir été apportée sur Terre par les comètes lors de grands bombardements ([1]).

Pour comprendre l'origine de l'eau cométaire, nous avons étudié l'eau deutérée dans plusieurs proto-étoiles de faible masse au stade de Classe 0, une des premières étapes de la formation stellaire qui précèdent la formation du disque proto-planétaire menant à la naissance des planètes et des comètes. En modélisant avec le code 1D de transfert radiatif hors-Equilibre Thermodynamique Local RATRAN ([2]) les profils des nombreuses raies de HDO et H₂¹⁸O observées avec l'instrument HIFI (Heterodyne Instrument for Far-Infrared) de l'Observatoire Spatial Herschel (programme CHESS) ainsi que les télescopes au sol IRAM-30m et JCMT, nous avons déterminé les rapports HDO/H₂O de la proto-étoile de type solaire IRAS 16293-2422. Grâce à ce travail ([3]), la présence en avant-plan d'une couche d'absorption riche en eau a été mise en évidence observationnellement pour la première fois. Elle pourrait être due à des processus de photo-désorption des molécules d'eau piégées dans les manteaux de glace des grains, en bordure de nuage moléculaire, par le champ interstellaire UV. Dans le cadre d'une collaboration entre trois programmes Herschel CHESS, WISH et HEXOS, cette étude a ensuite été étendue à deux autres proto-étoiles de type solaire NGC 1333 IRAS 4A et NGC 1333 IRAS 4B dont les résultats seront également présentés.

Références

- [1] P. Hartogh, D. C. Lis, D. Bockelée-Morvan et al., *Nature*, 478, 218 (2011)
- [2] M. R. Hogerheijde & F. F. S. van der Tak, *A&A*, 362, 697 (2000)
- [3] A. Coutens, C. Vastel, E. Caux et al., *A&A*, 539, A132 (2012)

Analyses des composés organiques volatiles et des résidus organiques réfractaires provenant du réchauffement d'analogues de glace cométaire/interstellaire

G. Danger¹, F-R. Orthous-Daunay², P. de Marcellus³, P. Modica³, V. Vuitton², F. Duvernay¹, L. Le Sergeant d'Hendecourt^{3,4}, R. Thissen², and T. Chiavassa¹

¹ Groupe Astrochimie de l'équipe "Spectrométries et Dynamique Moléculaire", laboratoire "Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires", UMR CNRS 7345, Université d'Aix-marseille, Centre Saint-Jérôme, case 252, Marseille, France.

<http://sites.univ-provence.fr/piim/spip.php?rubrique93>

² Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble IPAG/PLANETO, Bâtiment D de physique - BP 53

38041 Grenoble cedex 9 France.

³ Univ Paris-Sud, "Astrochimie et Origines", Institut d'Astrophysique Spatiale, UMR 8617, F-91405 Orsay, France.

⁴ CNRS, F-91405 Orsay, France.

* Corresponding author: gregoire.danger@univ-amu.fr

Cette contribution se concentre sur deux aspects de nos travaux, qui concernent pour l'un l'analyse des résidus réfractaires formés à partir de l'irradiation UV d'analogues de glaces, le projet RAHIIA ; et pour l'autre un nouveau projet qui sera développé courant 2013 et qui a pour objectif l'analyse des composés organiques volatiles provenant du réchauffement de ces mêmes analogues, le projet VAHIIA (ANR 2013-2016). La compréhension de la formation et de la constitution des résidus réfractaires, généralement appelés "Yellow Stuff", est une étape importante pour établir quelle sorte de matière organique pourrait être disponible au sein d'objets interplanétaires tels que les comètes ou astéroïdes, et donc disponible pour le développement d'une chimie prébiotique à la surface de planètes telluriques. Nous présenterons ici les premiers résultats obtenus par analyse en spectrométrie de haute résolution spectrométrie (LTQ-Orbitrap) de ces résidus. Ces analyses montrent que ces résidus sont composés de molécules de hauts poids moléculaires ($m/z > 4000$), et de compositions élémentaires moyennes $H/C=1.6$; $N/C=0.4$; $O/C=0.4$. En outre, ce type d'analyse permet la recherche de molécules spécifiques. Nous avons ainsi identifié différents dérivés de l'hexaméthylènetétramine (HMT) qui confirme les observations antérieures. Dans une seconde partie, nous présenterons le concept du projet VAHIIA qui permettra d'apporter de plus amples informations sur les molécules susceptibles de sublimer lors du réchauffement des glaces interstellaires et cométaires, ainsi qu'une meilleure compréhension des processus chimiques à l'origine de la formation des résidus réfractaires.

Clathrate hydrates FTIR spectroscopy

E. Dartois¹, M. Bouzit¹, Ph. Duret¹ et B. Schmitt²

¹ Institut d'Astrophysique Spatiale, UMR 8617, Université Paris-Sud, bâtiment 121, 91405 Orsay - France

² Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble, UMR 5274, Bâtiment D de Physique, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9 - France

Clathrate hydrates, ice inclusion compounds, are of major importance for the Earth's permafrost regions and may control the stability of gases in many astrophysical bodies such as the planets, comets and possibly interstellar grains. Their physical behavior may provide a trapping mechanism to modify the absolute and relative composition of icy bodies that could be the source of late-time injection of gaseous species in planetary atmospheres or hot cores. In this study, we provide and discuss laboratory-recorded infrared signatures of clathrate hydrates in the near to mid-infrared and the implications for space-based astrophysical tele-detection in order to constrain their possible presence. Clathrate hydrates are made of a water molecules connected network paving the three dimensional space, linked via hydrogen bonds. Guest molecules are encapsulated in the network cavities. Small molecules can be trapped in two crystallographic clathrate hydrate structures names type I and type II.

Many laboratory studies examined clathrate hydrates thermodynamic behavior, but one way to confirm their presence in astrophysical bodies will come from remote infrared spectroscopy observations by telescopes or space probes. Methane, carbon dioxide, carbon monoxide and hydrogen sulfide clathrate crystals were produced in the laboratory, and the specific fingerprints betraying these clathrate hydrates presence recorded by infrared spectroscopy at relevant astrophysical temperatures. Because these vibrational spectra recorded are unique, they represent an identification pattern for low temperature astrophysical icy bodies, such as planets, comets and/or interstellar grains.

In addition to the fundamental research aspect of a better understanding of molecular interactions within an ice network, as many physical interactions are possible with ice, and not necessarily involving the formation of a crystallographic system such as clathrate hydrates, it is of importance to be able to constrain their occurrence in astrophysical media.

Références

- [1] Dartois, E., Duret, P., Marboeuf, U., Schmitt, B., Hydrogen sulfide clathrate hydrate FTIR spectroscopy. *Icarus* 220, 427-434 (2012)
- [2] Dartois E., *CO clathrate hydrate: Near to mid-IR spectroscopic signatures*. *Icarus* 212(2): 950-956 (2011)
- [3] Dartois E, Deboffle D, Bouzit M., Methane clathrate hydrate infrared spectrum. II. Near infrared overtones, combination modes and cages assignments. *Astron. Astrophys.* 514: id.A49 (2010)
- [4] Dartois E, Schmitt B., *Carbon dioxide clathrate hydrate FTIR spectrum. Near infrared combination modes for astrophysical remote detection*. *Astron. Astrophys.* 2009;504:869-873 (2009)
- [5] Dartois E, Deboffle D., Methane clathrate hydrate FTIR spectrum. Implications for its cometary and planetary detection. *Astron. Astrophys.* 490:L19-L22 (2008)

Rotational Excitation of CS in Collision with H₂: Ab-initio Potential Energy Surface, Bound States and Inelastic Cross Section.

Otoniel Denis-Alpizar^{1,2}, Thierry Stoecklin¹, Philippe Halvick¹ and Marie-Lise Dubernet^{3,4}.

¹ Université de Bordeaux, ISM, UMR CNRS 5255, 33405 Talence, France

² Departamento de Física, Universidad de Matanzas, Matanzas 40100, Cuba

³ Université Pierre et Marie Curie, LPMAA, UMR CNRS 7092, 75252 Paris, France

⁴ Observatoire de Paris, LUTH, UMR CNRS 8102, 92195 Meudon, France

A new four-dimensional intermolecular potential energy surface for the CS – H₂ complex is presented. *Ab-initio* potential energy calculations were carried out at the coupled-cluster level with single and double excitations and a perturbative treatment of triple excitations, using a quadruple- zeta basis set and midbond functions. An analytical form of the PES is then obtained by fitting the ab initio grid of points. The equilibrium structure of the CS – H₂ complex is found to be linear with the carbon pointing towards H₂ at the intermolecular separation of 8.6a₀. The corresponding well depth is -173cm⁻¹. The potential was used to calculate the rovibrational energy levels of the para-H₂ – CS and CS - ortho-H₂ complexes. The ground states of the para-H₂ - CS and ortho-H₂ - CS are found to be bound by -35.87cm⁻¹ and -43.51cm⁻¹ respectively. Close Coupling calculations of the inelastic integral cross sections of CS in collisions with para-H₂ and ortho-H₂ were also calculated at low and moderate energies. The rotational cross sections of CS with para-H₂ are found to be stronger than those for He which would be predicted when using a simple reduced mass factor. The rotational quenching cross sections of CS in collisions with para- and ortho-H₂ show also noticeable differences which are discussed.

Molécules complexes dans la nébuleuse d' Orion Kleinmann-Low

D.Despois, N.Brouillet, Tzu-Cheng Peng, A. Baudry¹, C.Favre², et
collaborateurs

¹ OASU/LAB – France ² University of Michigan - USA

Nous avons entrepris depuis plusieurs années une étude spectroscopique à haute résolution spatiale (1-2", ~ 400 UA) de la nébuleuse Kleinmann-Low (KL) au coeur de la nébuleuse d'Orion, avec l'interféromètre de l'IRAM au Plateau de Bure. Orion KL est l'une des régions les plus riches en molécules interstellaires. L'étude de la distribution spatiale des molécules donne des contraintes sur leur origine et leur mécanisme de formation. En particulier, ces molécules proviennent-elles de réactions en phase gazeuse, sont elles formées sur les grains dans les manteaux de glace, ou une combinaison des deux ? L'événement explosif récent (< 1000 ans) a-t-il joué un rôle ?

Nous avons étudié le formiate de méthyle HCOOCH₃ (Favre et al 2011), le méthanol deutéré (CH₃OD et CH₂DOH; Peng et al 2012), le dimethyl ether CH₃OCH₃ (Brouillet et al, submitted) et travaillons actuellement sur l'acétone CH₃COCH₃.

L'étude de HCOOCH₃ a entre autres montré une association de la distribution spatiale de cette molécule avec l'image à 2.12 μm du H₂ excité, qui trace les chocs.

L'étude du methanol deutéré a montré une constance du rapport CH₂DOH/CH₃OD; cette constance, qui contraste avec la variété des conditions physiques actuelles, suggère une formation dans les manteaux de glace, à une époque antérieure où la nébuleuse était plus homogène. La valeur trouvée, <1, confirme la forte différence entre Orion KL et l'environnement d'étoiles de faible masse trouvée par Rataczack et al 2011.

La comparaison de CH₃OCH₃ avec HCOOCH₃ a montré une remarquable corrélation de la distribution spatiale des deux espèces, qui n'est pas retrouvée avec l'éthanol CH₃CH₂OH, ni avec l'acide formique HCOOH (lequel au contraire semble anticorrélé). L'interprétation la plus simple semble un précurseur commun aux deux espèces. Deux principaux modèles sont proposés pour la formation de ces espèces, sur les grains (e.g. Bisschop et al 2007, Oberg et al 2010) ou en phase gazeuse (e.g. Neill et al 2010) - le précurseur serait respectivement CHO• ou CH₃OH₂⁺.

Dans ce dernier cas HCOOCH₃ est formé à partir de HCOOH. Une autre réaction produisant HCOOCH₃ à partir d'H₂CO a été envisagée (Blake et al 1988), mais présente une barrière trop élevée (128 kJ/mol ~ 15000 K ~ 1.2 eV). L'énergie cinétique supplémentaire des ions dans un choc (v_c ~ 30-40 km/s) pourrait-elle la rendre possible ?

Des molécules d'intérêt prébiotique, le présucre CH₂OHCHO (glycolaldéhyde), l'aminocétonitrile NH₂CH₂CN (précurseur de la glycine) et la glycine elle-même NH₂CH₂COOH ont été recherchées également mais seulement des limites supérieures ont été obtenues (Guélin et al. 2008; Favre et al 2011).

Modélisation d'agrégats de pyrène cationiques : Structure, thermodynamique et spectroscopie

Léo Dontot^{1,2}, Mathias Rapacioli^{1,2}, Aude Simon^{1,2} et Fernand Spiegelman^{1,2}

¹ CNRS (UMR5626), LCPQ (Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques), IRSAMC.

² Université de Toulouse, UPS, LCPQ, IRSAMC, 118 route de Narbonne, 31062, Toulouse Cedex 09 – France

Les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (PAH) sont responsables de bandes infrarouges (3-10 μm) observées dans de nombreuses régions du milieu interstellaire (MIS) [1]. De plus, dans les régions proches des étoiles, ces molécules sont soumises à un flux UV susceptible de les ioniser ce qui favoriserait la formation d'agrégats.

Les simulations impliquant un grand nombre d'atomes sont difficiles à réaliser à partir de méthodes traditionnelles telles que la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le modèle DFTB (Density Functionnal based on Tight-Binding) a été développé afin de réduire le coût numérique de telles simulations [2]. Plusieurs modifications ont dues être apportées à ce modèle afin de corriger les effets des forces de dispersion (agrégats neutres), des forces de polarisation et de la résonance de charge (agrégats ionisés).

Ce modèle, appelé DFTB-VBCI [3], est utilisé pour l'étude des agrégats cationiques de pyrène (C₁₆H₁₀). Un algorithme de Monte-Carlo avec échange à différentes températures [4] permet d'accéder à de nombreuses observables statistiques. La corrélation entre la géométrie de l'agrégat et la délocalisation de la charge ainsi que l'évolution en température et en taille du spectre d'absorption limité aux états à transfert de charge seront abordés.

Remerciements : CALMIP-CICT (ressources informatiques), ANR Gasparim, GDR Agrégats (GDR 2758).

Références

- [1] A. Léger et J.-L. Puget, *A&A*, 137, L5 (1984)
- [2] D. Porezag et al., *Phys. Rev. B*, 51, pp. 12947–12957 (1995)
- [3] M. Rapacioli et al., *J. Chem. Theory Comput.*, 7, pp. 44–55 (2011)
- [4] F. Calvo, *J. Chem. Phys.*, 123, pp. 124106 (2005)

Virtual Atomic and Molecular Data Centre: An interoperable infrastructure

M.L. Dubernet¹ on behalf of VAMDC Collaboration²

¹LPMAA, UMR7092, Université Pierre et Marie Curie, Case 76, 4 Place Jussieu, 75252 Paris, France and Observatoire de Paris, 5 Place Janssen, 92192 Meudon, France

² see reference [1, 2, 3]

The Virtual Atomic and Molecular Data Centre (VAMDC, <http://www.vamdc.eu>) is an international Consortium that combines the expertise of existing Atomic and Molecular (A&M) databases, data producers and service providers with the specific aim of creating an interoperable e-science infrastructure that is easily tuned to the requirements of a wide variety of users in academic, governmental, industrial or public communities. It has started thanks to a major European initiative (FP7 ERA funding) with the aim to build a unified, secure, documented, flexible and interoperable e-science environment-based interface to existing A&M data. The VAMDC defines standards for the exchange of atomic and molecular data, develop reference implementation of those standards, deploys registries of internet resources ("yellow pages"), designs user applications in order to meet the user needs, builds data access layers above databases to provide unified outputs from these databases, cares about asynchronous queries with workflows and connects its infrastructure to the grid.

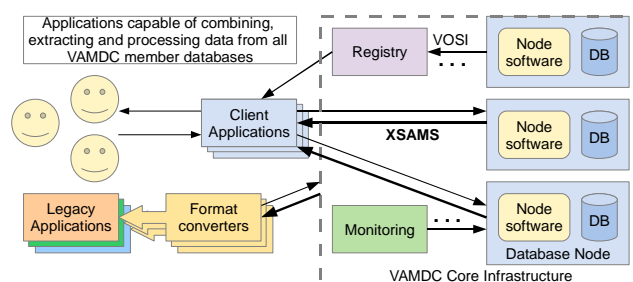
The paper describes the current service deployment of the VAMDC data infrastructure across our 20 databases.

Acknowledgements

VAMDC is funded under the "Combination of Collaborative Projects and Coordination and Support Actions" Funding Scheme of EU-FP7 Program, call topic INFRA-2008-1.2.2 Scientific Data Infrastructure and Grant Agreement number 239108.

References

1. M.L. Dubernet, V. Boudon, J.L. Culhane, et al. 2010, J. Quant. Spec. Radiat. Transf., 111, 2151
2. G. Rixon, M.L. Dubernet and VAMDC Consortium, in American Institute of Physics Conference Series, Vol. 1344, ed. A. Bernotas, R. Karazija, & Z. Rudzikas, 107–115
3. Doronin, M.L. Dubernet and VAMDC Consortium, "Virtual Atomic and Molecular Centre" and Astrophysics: Level 2 release ,ADASS XXI, Novembre 2011, Paris, ASP Conf. Ser., ed. P. Ballester & D. Egret (2012)



BASECOL2012: A Collisional Database Repository and Web Service within VAMDC

M.L. Dubernet¹ and Basecol Collaboration²

¹LPMAA, UMR7092, Université Pierre et Marie Curie, Case 76, 4 Place Jussieu, 75252 Paris, France and Observatoire de Paris, 5 Place Janssen, 92192 Meudon, France

² see reference [1]

The BASECOL2012 [1] database (<http://basecol.obspm.fr>) is a repository of collisional data and a web service within the Virtual Atomic and Molecular Data Centre [2, 3] (VAMDC, <http://www.vamdc.eu>). Basecol contains rate coefficients for the collisional excitation of rotational, ro-vibrational, vibrational, fine and hyperfine levels of molecules by atoms, molecules and electrons, as well as fine structure excitation of some atoms, which are relevant to interstellar and circumstellar astrophysical applications. Additional features are provided such as information on and critical evaluation of the rate coefficient calculations, fitted functions for many available rate coefficients and a section for community information.

In addition BASECOL2012 provides spectroscopic data queried from the Cologne Database for Molecular Spectroscopy database (CDMS <http://www.astro.uni-koeln.de/cdms>) [4], the Jet Propulsion Laboratory catalogue (JPL, <http://spec.jpl.nasa.gov/>) [5], the High-resolution TRANsmiSSion molecular absorption database (HITRAN, <http://www.cfa.harvard.edu/hitran/>) [6] using the VAMDC technology. These spectroscopic data are conveniently matched to the in-house collisional excitation rate coefficients using the SPECTCOL software package [7,8] (<http://vamdc.eu/software>) and the combined sets of data can be downloaded from the BASECOL2012 website. Being a partner of the VAMDC, BASECOL2012 is accessible from the general VAMDC portal (<http://portal.vamdc.eu>) and from user tools such as SPECTCOL.

Acknowledgements BASECOL is a collaborative project supported by CNRS with “Programme National PCMI (Physique Chimie du Milieu Interstellaire)” and VO France, The scientific council of Paris Observatory, ASTRONET/INSU, LERMA. We thank all the scientists who have made their results available to us. For the implementation of BASECOL within VAMDC we acknowledge VAMDC. VAMDC is funded under the "Combination of Collaborative Projects and Coordination and Support Actions" Funding Scheme of EU-FP7 Program, call topic INFRA-2008-1.2.2 Scientific Data Infrastructure and Grant Agreement number 239108.

References

1. M.L. Dubernet, M. Alexander, Y. A. Ba, N. Balakrishnan¹, C. Balança, C. Ceccarelli, J. Cernicharo, F. Daniel, F. Dayou, M. Doronin, F. Dumouchel, A. Faure, N. Feautrier, D. R. Flower, F. Lique, A. Grosjean, P. Halvick, J. Klos, G. McBane, S. Marinakis, N. Moreau, R. Moszynski, D. A. Neufeld, E. Roueff, P. Schilke, A. Spielfiedel, P. C. Stancil, T. Stoecklin, J. Tennyson, B. Yang, A.-M. Vasserot, and L. Wiesenfeld, to be submitted to *A. & A.*, 2012.
2. M.L. Dubernet, V. Boudon, J.L. Culhane, et al. 2010, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 111, 2151
3. G. Rixon, M.L. Dubernet and VAMDC Consortium, in *American Institute of Physics Conference Series*, Vol. 1344, ed. A. Bernotas, R. Karazija, & Z. Rudzikas, 107–115
4. H. S. P. Müller, S. Thorwirth, D.A. Roth, and G. Winnewisser, 2001, *A&A*, 370, L49
5. Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, *J. Quant. Spectrosc. & Rad. Transfer*, 60, 883
6. Rothman, L. S., Gordon, I. E., Barbe, A., et al. 2009, *JQSRT*, 110, 533
7. Dubernet, M.-L. & Nenadovic, L. 2011, in *Astrophysics Source Code Library*, record ascl:1111.005, 11005
8. Dubernet, M. L., Nenadovic, L., & Doronin, M. 2012, in *ASP Conf. Ser.*, Vol. TBD, ADASS XXI, ed. P. Ballester & D. Egret (San Francisco: ASP), TBD

The rotational excitation of AlCN and AlNC by He

Hernández^{1,2}, F. Dumouchel¹, J. Klos³, M. L. Senent⁴, J. Rubayo
Soneira², F. Lique¹

¹ Laboratoire Ondes et Milieux Complexes, CNRS-Université du Havre, Le Havre, France

² Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Aplicadas, MES, La Habana, Cuba

³ Department of Chemistry and Biochemistry, University of Maryland, College Park,
Maryland, USA

⁴ Departamento de Química y Física Teórica, IEM-CSIC, Madrid, Spain

Modelling molecular abundances in the interstellar medium requires accurate molecular data. Hence, accurate determination of collisional rate coefficients is an essential step in order to estimate molecular abundances in interstellar clouds. Cyanide/isocyanide species are the most common metal-containing molecules in circumstellar gas [1]. It is crucial to provide collisional data for the cyanide/isocyanide molecules.

In this work, we have carried out calculations of rate coefficients for the rotational excitation of aluminum cyanide (AlCN) and aluminum isocyanide (AlNC) molecules in their ground vibrational state in collision with He. The calculations are based on new two-dimensional potential energy surfaces obtained from highly correlated *ab initio* calculations. Coupled states quantum approximation was used to obtain pure rotational (de-)excitation cross-sections of AlCN and AlNC by He. Cross-sections for transitions among the 25 first rotational levels of AlCN and AlNC were calculated for kinetic energies up to 1000 cm⁻¹. These cross-sections were used to determine collisional rate constants for temperatures ranging from 5 to 100 K. Significant differences between the rate coefficients of both isomers were detected despite they show similar propensity rules for odd Δj transitions.

These differences show that specific calculations have to be done for the different isomers of one molecule. The new rate coefficients should help to discover the AlCN molecule in molecular clouds. The results obtained in this work could also be useful for later estimations of AlCN/AlNC abundances ratio in cold clouds in the Interstellar Medium.

Références

[1] Pullian R. L., Savage C., Agúndez M., Cernicharo J., Guélin M., Ziurys L. M., 2010, ApJ, 725, L181

Mécanismes self assistés de reconstruction de la glace

Y. Ellinger¹, F. Pauzat¹, A. Markovits¹ & P.Redondo^{1,2}

¹ Laboratoire de Chimie Théorique, UMR7616 du CNRS, Université P. & M. Curie, 4, place Jussieu, 75252, Paris Cedex 05 – France

² Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid, Spain

Nous présentons ici, dans le cadre du projet *Molécules et Glaces Interstellaires*, l'étude théorique de mécanismes de reconstruction du manteau de glace des grains interstellaires, constamment soumis à l'effet du champ de rayonnement environnant.

Il est admis que, dans le milieu interstellaire (MIS), la croissance du manteau de glace est assurée par la recombinaison radicalaire $O + H + H$ plutôt que par condensation directe sur le grain. Du fait de la très faible probabilité de trouver simultanément ces trois partenaires sur un même site, un mécanisme en deux temps est privilégié :



Un autre mécanisme est apparu récemment dans les expériences en environnement cryogénique de matrices de gaz rares [2] : $OH_{ads} + OH_{ads} \rightarrow H_2O_{ads} + O_{ads}$ (2b) et le complexe $O:H_2O$ a été caractérisé par spectroscopie FTIR. Cette réaction (2b) apporte un *nouveau scénario* qui pourrait se révéler particulièrement efficace dans la *reconstruction* de la glace en utilisant pour ce faire les radicaux OH issus de la *destruction par irradiation* de cette même glace.

Nous avons réalisé une étude théorique de la réaction (2b) dans un environnement modélisant les glaces interstellaires de la façon suivante:

- en présence d'un nombre croissant de molécules d'eau (DFT ; MP2 ; CCSD ; CCSD(T))
- en présence d'une surface de glace extraite d'une glace cristalline (DFT)
- en présence d'une surface cristalline ordonnée périodique (DFT périodique/VASP).

La première étude, effectuée *en phase gazeuse*, montre que la réaction est exothermique ($\Delta H \sim 16$ kcal/mole) avec une barrière d'activation ($\Delta E^\# \sim 2$ kcal/mole).

Dans une seconde étape, la réaction est étudiée en tenant compte de l'interaction des espèces avec la surface de glace tout le long du chemin de réaction. Les points caractéristiques de la surface d'énergie potentielle, dont les sites d'adsorption et les états de transition, ont été déterminés pour chaque situation. Nous avons montré qu'outre une formation de H_2O sans barrière d'activation (hidden barrier), la réaction (2b) fournit aussi de l'oxygène atomique prêt à se recombinaison avec un atome H pour former un nouveau radical OH et recommencer le processus.

Par ailleurs, si l'on considère les quantités de H_2 présentes dans la phase gaz, percutant régulièrement la surface et selon toute probabilité réagissant avec les radicaux OH formés par irradiation, il peut être intéressant d'étudier dans les mêmes conditions, un autre processus de restitution de la glace : $OH_{ads} + H_2 \rightarrow H_2O_{ads} + H$ (2c)

Les conséquences pour la reconstruction de la glace irradiée seront discutées.

Ortho-para conversion of molecular hydrogen by proton and hydrogen exchange

Alexandre Faure¹, Pascal Honvault², François Lique³

¹ Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble, France

² Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, Dijon, France

³ Laboratoire Ondes et Milieux Complexes, Le Havre, France

In the interstellar medium, H₂ forms efficiently via the recombination of hydrogen atoms on the surface of dust grains. The internal energy of the newly formed H₂ molecules is not known but it is generally assumed that, whatever the formation mechanism, H₂ is initially highly excited. The initial ortho-to-para ratio of H₂ is therefore usually taken as its limiting (high temperature) statistical value of 3, which is the ratio of the degeneracies of the ortho ($I=1$) and para ($I=0$) nuclear spin states.

The ortho-to-para ratio of H₂ is expected to vary with kinetic temperature and to play a crucial role in both the physical and chemical evolution of astronomical environments. Radiative transitions between the ortho and para forms of H₂ being very slow (with an interconversion lifetime greater than the age of the Universe for the $j=1 \rightarrow 0$ transition) ortho-para transitions may occur only through reactive collisions with H⁺, H₃⁺, H and H₂. Although the reactions with H⁺ and H are among the most elementary ones, there have been so far only approximate estimates for the ortho-para conversion rate coefficients.

We have recently computed the first accurate rate coefficients for the ortho-para conversion of H₂ by proton and hydrogen exchange at temperatures below 100K and 1500K, respectively [1, 2]. We have employed fully quantum, time-independent approaches combined with high accuracy ab initio potential energy surfaces. We will show that hydrogen exchange is significant above ~300K where it competes with proton exchange reactions as soon as $[H]/[H^+] > 10^6$. Our rate coefficients will be also compared to both previous theoretical results and available measurements. Our data should greatly help in the modelling of various astrophysical plasmas, from the early Universe to molecular clouds where cooling by molecular hydrogen is a crucial process.

Références

[1] Honvault P., Jorfi M., González-Lezana T., Faure A., Pagani L., Phys. Rev. Lett. 107 023201 (2011);
ibid 108 109903 (2012)

[2] Lique F., Honvault P., Faure A., J. Chem. Phys., in press

Les grains interstellaires froids couverts de molécules sont-ils des catalyseurs efficaces pour la formation de H₂?

L. Gavilan¹, J.L. Lemaire¹, G. Vidal²

¹ LERMA, UMR 8112 du CNRS, de l'Observatoire de Paris et de l'Université de Cergy Pontoise, 5 mail Gay Lussac, 95000 Cergy

² Syracuse University, Physics Department, Syracuse, NY 13244-1320, USA

La formation de H₂ dans le MIS met en jeu des processus complexes dont certains ne sont pas encore bien connus. Dans les régions froides, la formation de H₂ est supposée obéir à une cinétique de type Langmuir, c'est-à-dire qui entraîne la désorption immédiate des atomes ou molécules arrivant sur une surface déjà saturée en molécules. Nos expériences ont pour but d'étudier la formation de H₂ sur une surface, simulant un grain, préalablement couverte de molécules H₂ avant d'être exposée à un jet d'atomes. Nous simulons les conditions d'un milieu interstellaire avec des températures de grains et de gaz ($T_{\text{grains}} < 10$ K, $T_{\text{gaz}} < 90$ K), les grains étant formés d'un film de silicate amorphe synthétisé en laboratoire. En couplant les diagnostics spectroscopiques par désorption thermique (TPD) et par détection laser (REMPI) nous pouvons confirmer que, dans ces conditions, la recombinaison de l'hydrogène s'en trouve immédiatement augmentée. Nous interprétons ce résultat comme dû à l'augmentation de la diffusion atomique (par effet thermique et/ou quantique). En outre, puisque la formation de H₂ est, par unité de masse, la plus exothermique des réactions chimiques, nous prouvons son importance comme mécanisme de désorption non-thermique. Nous pouvons appliquer ces résultats aux régions denses du MIS où la formation de H₂ et sa désorption induite sont ralenties par une abondance en phase gaz déclinante. De plus nous proposons ce mécanisme comme une voie possible pour expliquer le fractionnement isotopique (deutération) dans les cœurs pré-stellaires. Enfin, tout aussi important, nous montrons que la poussière demeure un catalyseur actif, même dans les régions froides du MIS.

The ortho-to-para ratio of newly formed H₂ And D₂ on amorphous solid water*

Gavilan L.¹, Vidali G.¹, Lemaire, J.L.¹, Chehrouri, M.¹, Dulieu¹, F., Fillion², J-H, Congiu, E.¹, Chaabouni, H.¹

¹*Observatoire de Paris & *Université de Cergy Pontoise*

²*LPMAA-UPMC*

Several observations have shown that the ortho/para ratio (OPR) of H₂ in the interstellar medium can differ from the expected statistical value of 3 or the local thermodynamic equilibrium (LTE) value at the gas or dust temperature. It is thus important to know the OPR of H₂ newly formed on dust grain surfaces, in order to clarify the dependence of the observed OPR in space on the formation process. Using an experimental setup that mimics ISM environments, we measured the OPR of H₂ and D₂ formed on the surface of porous amorphous water ice held at 10 K. We report for the first time the OPR value for newly formed D₂, consistent with the expected LTE value at the high-temperature limit found by previous theoretical (Takahashi 2001) and experimental (Watanabe et al. 2010) studies on the determination of the OPR upon H₂ formation on surfaces at low temperature.

Références

*Gavilan L., et al. 2012 *ApJ* **760** 35

Etude théorique des réactions $C_6H_6^+ + C_2H_2$, $C_6H_6^+ + C_2H$ et $C_6H_6 + C_4H_3^+$ pour la formation du naphthalène cation

Ghesquiere P., Talbi D.

*Laboratoire Univers et Particules de Montpellier, Université de Montpellier II,
Place E. Bataillon, CC 072, 34000 Montpellier*

La croissance des Hydrocarbures Polycycliques Aromatiques (PAH) est une étape clé de la formation des grains carbonés dans les enveloppes d'étoiles AGB. Pour comprendre cette croissance, un protocole expérimental a été mis en place par Contreras et al. [1]. Dans cette expérience la formation d'un cation de masse $C_{10}H_8^+$, à partir de benzène et de petits hydrocarbures dérivés de l'acétylène, a été mise en évidence mais les techniques d'analyses du dispositif expérimental ne permettent pas de déterminer le(les) isomère(s) formé(s) ni de comprendre le (les) mécanisme(s) réactionnel(s) mis en jeu.

Cette étude théorique a pour objectif d'aider à interpréter la réaction de Contreras et al. Nous avons identifié les chemins de réaction qui ont pu donner lieu à la formation du cation $C_{10}H_8^+$ et confirmé que le naphthalène cation est un des isomères qui se forme. Pour cela les méthodes de la chimie quantique (méthodes de la fonctionnelle de la densité, et méthodes de la fonction d'onde) ont été employées pour étudier trois scénarios possibles de formation du cation $C_{10}H_8^+$: l'addition successive de deux molécules d'acétylène ou de deux radicaux ethynyl sur le cation benzène, et l'addition du diacétylène protonné sur le benzène neutre.

[1] Contreras CS, Ricketts CL, Salama F, *EAS Publications Series*, 46, 201-207, **2011**

Le milieu interstellaire diffus en direction de l'amas IRAS 18511+0146 : une bande à 3.4 μm particulièrement profonde

Marie Godard^{1,2}, Thomas R. Geballe³, Emmanuel Dartois¹ et
Guillermo M. Muñoz Caro⁴

¹ IAS, UMR 8617, Institut d'Astrophysique Spatiale, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay
– France

² NASA GSFC, Goddard Space Flight Center, Astrochemistry Laboratory code
691, 8800 Greenbelt Road, Greenbelt MD 20771 – USA

³ Gemini Observatory, 670 N. A'ohoku Place, Hilo HI 96720 – USA

⁴ CAB, Centro de Astrobiología, Ctra. de Ajalvir, 28850 Madrid – Spain

La bande d'absorption à 3.4 μm , largement observée dans le milieu interstellaire diffus, est produite par les poussières de carbones amorphes hydrogénés (a-C:H). Dans le milieu interstellaire local de notre Galaxie, on observe habituellement une corrélation linéaire entre la profondeur optique de cette bande $\tau_{3.4}$ et l'extinction visuelle A_V [1]. En revanche, en direction de l'étoile en formation IRAS 18511+0146, une bande à 3.4 μm a été observée [2] avec une profondeur optique trois fois plus forte que celle attendue par la corrélation $\tau_{3.4}$ - A_V , compte-tenu de la distance la plus probable à cette étoile et de l'extinction moyenne par unité de distance du milieu diffus Galactique.

Afin de vérifier la profondeur optique à 3.4 μm particulièrement forte en direction de cette source et de tester une éventuelle inhomogénéité du milieu interstellaire diffus en avant-plan, nous avons observé trois sources de l'amas associé à IRAS 18511+0146. Les spectres entre 3 et 4 μm ont été obtenus avec l'instrument NIRI du télescope Gemini North. Après le retrait des contributions du nuage dense associé à l'amas, comme celle de la bande à 3.47 μm , nous avons obtenu des profondeurs optiques de 0.07 à 3.4 μm , similaires en direction des trois sources. Les spectres obtenus fournissent une bande à 3.4 μm dont la sous-structure est clairement identifiable à celle des a-C:H, et dont la profondeur optique est la plus forte observée dans la Voie Lactée en dehors des lignes de visée vers le centre galactique. Plusieurs arguments concernant la distance et l'extinction vers l'amas IRAS 18511+0146, ainsi que l'interprétation de la profonde bande à 3.4 μm le long de cette ligne de visée sont discutées [3].

Références

- [1] Sandford S. A., Pendleton Y. J., Allamandola L. J., The Astrophysical Journal, 440, 697 (1995)
- [2] Ishii M., Nagata T., Chrysostomou A., Hough J. H., The Astronomical Journal, 124, 2790 (2002)
- [3] Godard M., Geballe T. R., Dartois E., Muñoz Caro G. M., Astronomy & Astrophysics, 537, A27 (2012)

Détection du spectre THz du cation HN_2^+ par FTIR sur la ligne AILES du synchrotron SOLEIL.

S. Gruet^{1,2}, A. Morvan² et O. Pirali^{1,2}

¹ Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, ISMO, UMR 8214 CNRS-Université Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex - France

² Ligne AILES, Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers Saint-Aubin, 91192 Gif sur Yvette Cedex – France

Nous avons développé, sur l'interféromètre par transformation de Fourier de la ligne AILES du synchrotron SOLEIL, une cellule multi-passage à décharge en cathode creuse refroidie par un système cryogénique à l'azote liquide favorisant la production d'ions moléculaires. Nos premiers tests ont permis d'observer les transitions de ro-vibration de trois cations moléculaires d'intérêt astrophysique (H_3^+ , HN_2^+ , et HCO^+) dans l'IR moyen. Récemment, l'utilisation du continuum d'émission synchrotron THz extrait par la ligne AILES a permis l'enregistrement du premier spectre haute résolution de rotation pure de HN_2^+ par spectroscopie à transformée de Fourier dans l'infrarouge lointain. L'accord en fréquence entre nos mesures et les données sub-millimétriques compilées par Amano[1] est très bon. Nous présenterons dans le poster les détails techniques de la cellule à décharge, la dépendance de la densité d'ions avec la température de la cathode, les analyses de nos différents spectres et les perspectives d'études spectroscopiques sur ce nouveau dispositif.

Références

[1] Amano T. et al., J. Mol. Spectrosc. 234, 170 (2005)

The Horsehead WHISPER line survey

V. Guzmán¹, J. Pety¹, P. Gratier¹, M. Gerin², J.R. Goicoechea³,
E. Roueff⁴, S. Bardeau¹, A. Sievers⁵, F. Le Petit⁴, J. Le Boulrot⁴, A. Belloche⁶,
D. Talbi⁷, D. Teyssier⁸, A. Faure⁹, J. Gauss¹⁰

¹IRAM, 300 rue de la Piscine, 38406 Saint Martin d'Hères, France

²LERMA, UMR 8112, CNRS and Observatoire de Paris, 61 avenue de l'Observatoire, 75014 Paris, France

³Centro de Astrobiología. CSIC-INTA. Carretera de Ajalvir, Km 4. Torrejo'n de Ardoz, 28850 Madrid, Spain.

⁴LUTH UMR 8102, CNRS and Observatoire de Paris, Place J. Janssen, 92195 Meudon Cedex, France.

⁵IRAM, 7 Avenida Pastora, Granada, Spain

⁶Max-Planck Institut für Radioastronomie, Auf dem Hügel 69, 53121 Bonn, Germany

⁷LUPM, UMR 5299, Université Montpellier 2, Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier cedex 05, France

⁸European Space Astronomy Centre, ESA, PO Box 78, 28691 Villanueva de la Cañada, Madrid, Spain

⁹UJF-Grenoble 1/CNRS-INSU, Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG) UMR 5274,
Grenoble F-38041, France

¹⁰Institut für Physikalische Chemie, Universität Mainz, D-55099 Mainz, Germany

The Horsehead WHISPER project (Wideband High-resolution Iram-30m Surveys at two Positions with Emir Receivers, PI: J. Pety) is a complete unbiased line survey of the 3, 2 and 1 mm bands, currently under completion at the IRAM-30m telescope. Two positions are observed in the Horsehead nebula ($G_0=60$, $n_H=10^4-10^5$): 1) the HCO peak which is characteristic of the warm ($T_{kin}=60K$) photo-dissociation region (PDR) at the surface of the Horsehead[1], and 2) the DCO⁺ peak that belongs to a cold ($T_{kin}=20K$) condensation located less than 40'' away from the PDR edge, where HCO⁺ is highly deuterated[2]. The combination of the new EMIR receivers at the IRAM-30m telescope and the Fourier Transform Spectrometers (FTS) yields a spectral survey with unprecedented combination of bandwidth (36 GHz at 3mm, 19GHz at 2mm and 76GHz at 1mm), spectral resolution (49 kHz at 3 and 2mm; and 195 kHz at 1mm), and sensitivity (median noise 8.1 mK, 18.5 mK and 8.3 mK, respectively). More than 30 species + their isotopologues are detected within the survey. The first results are the following:

- 1) The detection of CF⁺ toward the PDR[3] and its resolved hyperfine structure[4].
- 2) The high abundance of CH₃CN toward the PDR, and the first firm detection of its isomer CH₃NC at millimeter wavelengths[5].
- 3) The first detection of the l-C₃H⁺ hydrocarbon cation in the ISM[6].
- 4) The high CH₃OH abundances in the PDR and dense core: the need for photo-desorption of ice mantles from dust grains[7].

References:

- [1] Gerin, M., Goicoechea, J. R., Pety, J., et al., 2009, A&A, 494, 977
- [2] Pety, J., Goicoechea, J. R., Hily-Blant, P., et al., 2007, A&A, 464, 41
- [3] Guzmán, V., Pety, J., Gratier, et al., 2012, A&A, 543, 1.
- [4] Guzmán, V., Roueff, E., Gauss, et al., 2012, submitted to A&A.
- [5] Gratier, P., Pety, J., Guzmán, V., et al., to be submitted.
- [6] Pety, J., Gratier, P., Guzmán, V., et al., 2012, submitted to A&A
- [7] Guzmán, V., Goicoechea, J. R., Pety, J., et al. in prep.

Effet des calculs électroniques pour la génération des surfaces de potentiel multi dimensionnelles sur les taux de collisions non réactives

M. Hochlaf

Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR
8208 CNRS, 5 bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée, France.

electronic mail: hochlaf@univ-mlv.fr

Je présenterai des études systématiques sur les méthodes de calculs électroniques et leur utilisation pour la génération des surfaces de potentiel multidimensionnelles. Je montrerai que les méthodes explicitement corrélées ((R)CCSD(T)-F12) associées à une base atomique de qualité Valence Triple Zeta, représentent un bon compromis entre corrélation électronique et coût des calculs. En effet, ces méthodes donnent des résultats aussi précis que les méthodes clusters couplés classiques avec une base beaucoup plus grande (au moins aug-cc-pV5Z) alors que le temps de calcul et l'occupation de l'espace disc sont réduits d'un facteur ~ 30 [1,2]. Ceci est valable pour les systèmes possédant une fonction d'onde mono configurationnelle. Pour les systèmes multi configurationnels et les états électroniques excités, les méthodes d'interaction de configuration (MCSCF, MRCI) beaucoup plus coûteuses doivent désormais être utilisées. Ces surfaces de potentiel sont incorporées dans des calculs de dynamique quantique pour déduire les taux de collisions réactives. Le traitement dynamique étant exacte, les résultats reflètent la précision que l'on pourra avoir avec une méthode de calcul ab initio bien déterminée.

Je traiterai les exemples suivants : O₂-He, [1] C₄-He [1], HCl-He

1. F. Lique, J. Klos et M. Hochlaf. Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 15672 (2010).

Impact of PAH evolution on the energetics of photon-dominated regions

C. Joblin, O. Berné, D. Kokkin, A. Bonnamy ¹,
C. Pinto, E. Bron, F. Le Petit, J. Le Bourlot ²,
M. Gerin ³, P. Pilleri ^{4,5}, J. Montillaud ⁶, E. Habart ⁷
M. Rapacioli, A. Simon, L. Dontot, A. Gamboa, F. Spiegelman ⁸
P. Parneix, T. Pino, O. Pirali, C. Falvo, P. Bréchnignac ⁹
G. Garcia, L. Nahon ¹⁰, G. Mulas ¹¹, J. Goicoechea ⁴, A. Fuente ⁵,
Y. Okada¹², V. Ossenkopf¹² and E. Bergin¹³

¹ IRAP, Université de Toulouse, UPS/CNRS; ² LUTH, Observatoire de Paris/
Université Denis Diderot, Meudon; ³ LERMA, Observatoire de Paris et ENS, Paris
⁴ CAB (INTA-CSIC), Madrid, Spain; ⁵ OAN, Alcalá de Henares, Spain; ⁶ Dept of
Physics, University of Helsinki, Finland; ⁷ IAS, Université Paris Sud/CNRS, Orsay; ⁸ LCPQ,
Université de Toulouse, UPS/CNRS; ⁹ ISMO, Université Paris Sud/CNRS, Orsay;
¹⁰ Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Gif sur Yvette;
¹¹ INAF, OAC, Cagliari, Italy; ¹² I. Physikalisches Institut, Universität zu Köln,
Germany; ¹³ University of Michigan, Ann Arbor; USA

Emission in the aromatic infrared bands (AIBs) is a major feature of photon-dominated regions (PDRs) in which physical and chemical processes are driven by UV photons. We have shown that the spatial variation of the AIB spectrum is related to changes in the composition of the emitting populations. The later consist in polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), neutrals and cations, as well as evaporating very small grains (eVSGs) that produce free PAHs upon UV irradiation [1].

In the external layers of PDRs, photoelectric effect on grains dominates the heating of the gas, whereas emission in the [OI] and [CII] lines dominates its cooling. Using Herschel, we investigated the thermal structure of two template PDRs, NGC7023 NW and the Orion Bar. We show that the emission observed in the high-J levels of CO can be modelled with the Meudon PDR model [2] if the spatial variation of the photoelectric heating rate associated to the transformation of eVSGs into PAHs is taken into account. The photoelectric heating efficiency was also found to decrease with increasing positive charge on PAHs [3]. All this suggests that PAHs and eVSGs are the main contributors to the photoelectric heating in PDRs.

As part of the GASPARIM ANR project, we investigate the properties of PAH clusters, which are models for eVSGs. We have used the molecular beam chamber SAPHIRS and the photoelectron-photoion coincidence spectrometer DELICIOUS II at SOLEIL to characterize the electronic properties of C₂₄H₁₂ clusters. These results are analysed thanks to electronic structure calculations using a Density Functional Tight Binding + Configuration Interaction scheme [4]. Emphasis will be put on the evolution of the ionization potential with cluster size.

References

- [1] P Pilleri, J. Montillaud, O. Berné, and C. Joblin, A&A 542, id.A69 (2012)
- [2] J. Le Bourlot, F. Le Petit, C. Pinto, E. Roueff, F. Roy, A&A 541, id.A76 (2012)
- [3] Y. Okada, P. Pilleri, O. Berné, et al., A&A, submitted
- [4] M. Rapacioli, A. Simon, L. Dontot and F. Spiegelman Phys. Status Solidi B 249 (2), 245-258 (2012)

(De-)excitation rate coefficients for collisions of O₂ with H₂.

Yulia N. Kalugina^{1,2}, François Lique¹.

¹LOMC - UMR 6294, CNRS-Université du Havre, 25 rue Philippe Lebon, BP 540,
76058, Le Havre, France

²Department of Optics and Spectroscopy, Tomsk State University, 36 Lenin av.,
Tomsk 634050, Russia

Oxygen molecule is a central molecule in the physical chemistry of many media. It is an important constituent of the earth atmosphere and interstellar gas. O₂ participates in many key reactions in interstellar media (ISM). Correct estimation of O₂ abundances in ISM from spectral data requires accurate collisional rate coefficients with the most abundant species such as H, He and H₂. Determination of these rate coefficients will be an essential support in resolution of so-called “interstellar O₂ problem”: recent measurements from the ODIN [1] satellite suggest that the abundance of O₂ in the cores of interstellar clouds is significantly lower than predicted by latest astrochemical models [2].

We report (de-)excitation cross sections and rate coefficients for the oxygen molecule ($X^3\Sigma_g^-$) in collisions with H₂. Comparison of rate coefficients and cross sections for the first 7 rotational levels of O₂ in collisions with para- and ortho-H₂ have shown no significant difference between the collisions with the two species. Scattering calculations were performed for the first 36 fine levels ($N, N' \leq 17$) of O₂ molecule in collisions with H₂ ($j = 0$). The quantum dynamical calculations are based on a new 4D potential energy surface calculated at a partially spin-restricted coupled cluster with single, double and perturbative triple excitations [RCCSD(T)] method in a rigid-rotor approximation. *Ab initio* calculations were performed in aug-cc-pVQZ basis set with bond functions placed at mid-distance between the O₂ center of mass and the center of mass of H₂ for a faster convergence to the Complete Basis Set Limit. Close Coupling calculations of the fine-structure resolved inelastic integral cross sections of O₂ in collisions with para-H₂ were carried out for energies up to 1500 cm⁻¹. After Boltzmann thermal averaging, rate coefficients were obtained for temperatures ranging from 5 to 150 K

Obtained rate coefficients can serve as good basis for analysis of O₂ observations obtained by the HERSCHEL satellite.

References

- [1] B. Larsson et al., *Astron. Astrophys.* 466, 999 (2007).
- [2] F. Lique, M. Jorfi, P. Honvault, P. Halvick, S. Y. Lin, H. Guo, D. Q. Xie, P. J. Dagdigan, J. Kłos, and M. H. Alexander, *J. Chem. Phys.* 131, 221104 (2009).

Acknowledgments. This research was supported by the CNRS national program “Physique et Chimie du Milieu Interstellaire”. We also thank the CPER Haute-Normandie/CNRT/Energie, Electronique, Matériaux..

A New Approach to the Detection and Characterization of PAH Cations and PAH Photo-Products.

D. L. Kokkin^{1,2}, C. Marshall¹, A. Bonnamy², A. Simon³ and C. Joblin^{1,2}

¹ Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse, France

² CNRS, IRAP, 9 Av. Colonel Roche, BP 44346, 31028, Toulouse Cedex 4, France

³ LCPQ, Université de Toulouse, UPS, CNRS, 118 Route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 09, France

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and their cations are considered as attractive candidates for the Diffuse Interstellar Bands, discrete absorption features observed throughout the visible and near-infrared spectral range whose origin is still investigated. So far, not a single PAH species has been identified on the basis of a spectral agreement. This indicates either that the molecular diversity is very large or that the candidates that have been considered are not the good ones. In particular, small/medium sized PAHs ($N_C < 40$) are submitted to photo dissociation under UV photons from stars. It is therefore of interest to characterize the spectroscopy of key breakdown products in addition to the original PAH.

Furthermore, polycyclic aromatic hydrocarbons and their associated photo breakdown products are becoming increasingly important in the chemistry of carbon in circumstellar and interstellar environments. These spectroscopic studies should be performed in conditions that mimic those found in interstellar space, which leads to additional experimental difficulties. The PIRENEA experimental setup at IRAP in Toulouse was designed and built to achieve these requirements.[1,2] In this talk we will outline recent improvements of and results from use the PIRENEA setup. Particular attention will be paid to the spectroscopy of 1-Methylpyrene cation and its photo-breakdown products in the visible region. Where possible the breakdown scheme of 1-Methylpyrene cation will be compared to that of Pyrene cation with key differences discussed.

One breakdown product C_3H^+ , recently detected in the photo-dominated region of Horsehead Nebula,[3] was then isolated and reacted with H_2 under conditions similar to does found in these environments, temperature and density, producing $C_3H_2^+$ and $C_3H_3^+$. Our determined reaction coefficient will be compared to those previously determined.

Références

[1] F. Useli-Bacchitta, A. Bonnamy, G. Mallocci, G. Mulas, D. Toubanc, and C. Joblin, Chem. Phys. 371, 16-23, 2010

[2] Joint ANR project GASPARIM, ANR-10-BLAN-501

[3] J. Pety, A&A, in press.

Nouvelle méthodologie pour l'étude de réactions photo-induite : Application à la photochimie de l'ammoniac

Emilie-Laure Zins^{1,2}, Lahouari Krim^{1,2}

¹ *Laboratoire de Dynamique, Interactions et Réactivité, LADIR, Université Pierre et Marie Curie, 4 place Jussieu, 75 252 Paris cedex 05, France*

² *CNRS, UMR 7075, LADIR, 4 place Jussieu, 75 252 Paris cedex 05, France*

Dans le cadre de l'étude de réactions d'intérêt exobiologique, la compréhension des mécanismes réactionnels pouvant conduire à la formation de petites molécules organiques de type $C_xH_yO_zN$ est fondamentale. Dans ce contexte, la formation du radical NH_2 par photolyse de l'ammoniac présent dans les milieux interstellaires, pourrait constituer une première étape vers la formation de composés organo-azotés. De nombreuses expériences de photolyse de l'ammoniac dans différents environnements modélisant des poussières interstellaires, ont été réalisées. [1-8] Le protocole expérimental utilisé pour la plupart de ces études peut être décomposé en différentes étapes :

- des glaces contenant NH_3 dans un environnement donné sont préparées par condensation de mélanges de gaz,
- les échantillons ainsi obtenus sont irradiés,
- la spectroscopie IR est utilisée pour caractériser les espèces chimiques présentes avant et après irradiation.

Les études réalisées jusqu'à présent, en phase solide comme en matrice de gaz rare, ont permis de mettre en évidence la formation du radical NH_2 . Dans l'ensemble de ces travaux :

- la pénétration des photons, dans les glaces comme dans les matrices, est limitée à quelques monocouches. La concentration des photoproduits est donc faible, ce qui limite les possibilités d'études de réactions radical NH_2 avec d'autres composés présents dans les milieux interstellaires,
- un déplacement et un élargissement importants sont observés entre la signature spectroscopique du radical NH_2 en phase gazeuse et ceux reportés dans le cas de glaces solides contenant le radical NH_2 . Par ailleurs, plusieurs attributions ont été proposées dans la littérature pour les différentes bandes observées en phase solide.

Pour comprendre les signatures spectroscopiques observées en phase solide et en phase gazeuse, nous avons réalisé des expériences en matrice de néon et en phase solide, en irradiant les échantillons pendant leur condensation. Cette nouvelle approche, que l'on peut appeler co-irradiation, permet d'augmenter la quantité de photoproduits obtenus, ce qui permet d'envisager d'étudier leur réactivité après ajout de réactifs.

Références

- [1] Donnelly V.M., Baranavski A.P. & McDonald J.R., *Chem. Phys.*, 43, 271 (1979)
- [2] Zheng W. & Kaiser R.I., *J. Phys. Chem. A*, 114, 5251 (2010)
- [3] Burkholder J.B. & Howard C. J., *J. Mol. Spectrosc.*, 127,4 15 (1988)
- [4] Ikeda T., Danno M. & Makihara H., *J. Appl. Phys.*, 65, 1373 (1989)
- [5] Bonhommeau D., Valero R., Truhlar D.G. & Jasper A.W., *J. Chem. Phys.*, 130, 234303 (2009)
- [6] Milligan D.E. & Jacox M.E., *J. Chem. Phys.*, 43, 4487 (1965)
- [7] Bossa J.B., Duvernay F., Theulé P., Borget F. & Chiavassa T., *Chem. Phys.*, 354, 211 (2008)
- [8] Washida N., Inoue G., Suzuki M. & Kajimoto O., *Chem. Phys. Letters*, 114, 3 (1985)

Nouvelles surfaces d'énergie potentielle pour l'excitation rotationnelle de HCl par He et par H₂

Lanza Mathieu¹, Kalugina Yulia¹ et Lique François¹

¹LOMC UMR du CNRS 6294, Laboratoire Ondes et Milieux Complexes 53, Rue Prony, BP540,76058 Le Havre Cedex France

Des données collisionnelles précises sont requises par les astronomes pour interpréter les nouvelles observations du satellite HERSCHEL. Parmi toutes les collisions possibles celles impliquant des hydrures, en particulier la molécule HCl, présentent un fort intérêt. Cette dernière pouvant servir de traceur pour les régions denses du milieu interstellaire [1,2].

Afin d'étudier l'excitation rotationnelle de HCl par He, une surface d'énergie potentielle 3D a été calculée par la méthode de chimie quantique CCSD(T) [3]. Cette surface tient compte de la vibration de HCl. Ces calculs ont été effectués avec les bases aug-cc-pVXZ (où X=T,Q,5), dans le but d'extrapoler à la limite de la base complète. La géométrie du minimum du complexe de van der Waals est linéaire, avec He du côté de Cl, comme trouvé précédemment par Murdachaew *et al* [4] et Cagide Fajín *et al* [5]. Les sections efficaces inélastiques pour l'excitation des niveaux de structure hyperfine de HCl par He ont été calculées en utilisant la méthode des équations couplées. Ces nouvelles données collisionnelles sont comparées avec celles publiées par Neufeld & Green [6]. Des différences significatives sont observées entre les deux jeux de données. Ces nouvelles données devrait donc avoir un impact important sur les modèles astrophysiques.

Dans le milieu interstellaire, le partenaire de collision majoritaire est H₂. Le système HCl-He peut servir de modèle pour l'étude de HCl-H₂, qui comporte deux degrés de liberté supplémentaires pour la rotation de H₂, mais il parait important de disposer aussi de données de collisions de cet hydrures avec H₂. Une surface d'énergie potentielle a été récemment obtenue par un calcul CCSD(T) à l'aide base aug-cc-pVQZ et de fonctions de liaison. Cette dernière permettra alors de calculer les taux de collisions pour l'excitation collisionnelle pour HCl-H₂.

Références :

- [1] Codella C., Ceccarelli C., Bottinelli S., Salez M., Viti S., Lefloch B., Cabrit S., Caux E., Faure A., Vasta M., Wiesenfeld L., *Astrophys. J.*, 744, 164 (2012)
- [2] Cernicharo J., Goicoechea J. R., Daniel F., Agúndez M., Caux E., de Graauw T., de Jonge A., Kester D., Leduc H. G., Steinmetz E., Stutzki J., Ward J. S., *Astron. Astrophys.*, 518, L115 (2010)
- [3] Lanza M., Lique F., *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 424, 1261 (2012)
- [4] Murdachaew G., Szalewicz K., Jiang H., Bačić Z., *J. Chem. Phys.*, 121, 11839 (2004)
- [5] Cagide Fajín J.L., Fernández B., *Chem. Phys. Lett.*, 419, 55 (2006)
- [6] Neufeld D. A., Green S., *Astrophys. J.*, 432, 158 (1994)

Grains, molécules et adsorption : de l'hydrogène aux COMs

M. Lattelais, F. Pauzat et Y. Ellinger,

¹ *Laboratoire de Chimie Théorique, UMR7616 du CNRS, Université P. & M. Curie, 4, place Jussieu, 75252, Paris Cedex 05 – France*

De nombreux modèles de grains ont été proposés parmi lesquels on peut citer les composés réfractaires tels les silicates et les oxydes métalliques (mêlangés avec du carbone graphitique [1]) et des glaces ou des revêtements carbonés recouvrant des particules minérales [2]. Selon les régions et l'évolution de la température, des nuages denses et froids au régions de photo dissociation, tous les types de surface doivent donc être considérés. Le cas des glaces, jugé plus intéressant pour la synthèse des COMs, est aujourd'hui le plus étudié [3]. Cependant, lorsque la température s'élève, la glace est vaporisée et la sous-couche (carbonée ou silicatée) mise à nu, ouvrant la possibilité de ré-adsorption des molécules de la phase gazeuse, voire d'un nouveau type de catalyse. Dans ces circonstances, trois modèles de surface ont été étudiés, i.e. la glace d'eau, le graphène et la silice hydroxylée.

Le caractère infini des surfaces a été pris en compte par un modèle périodique reposant sur un développement en ondes planes permettant d'éviter les artéfacts dus à l'utilisation de bases de dimensions finies [4].

Les énergies d'adsorption de molécules simples, à commencer par H₂, ont été calculées et l'accent porté sur celles qui comportent les groupements fonctionnels les plus répandus dans le MIS (-COOH, -OH, -NH₂, ...). Quelle que soit la surface, ces énergies dépendent du nombre et de la force des liaisons hydrogène formées. Les conséquences de ce phénomène peuvent être importantes pour l'astrochimie, jusqu'à intervenir dans l'enrichissement chiral des molécules retrouvées dans les météorites. L'accord observé entre les valeurs théoriques et les expériences réalisées au LPMAA et au LERMA-LAMAp (cf. Affiche M. Bertin et al. [5]) nous amène à la construction d'une base de données des énergies d'adsorption ouverte à la communauté pour la modélisation des processus chimiques à l'interface solide gaz.

Ce projet soutenu par une thèse débutée en Octobre 2012 est ouvert à toute suggestion de nouvelle molécule à considérer dans cette démarche pluridisciplinaire.

Références

- [1] J. S. Mathis, W. Rumpl and K.H. Nordsieck, *ApJ*, **217**, 4251 (1977)
- [2] J.M. Greenberg, *Astrophys. Space Sci*, **39**, 9 (1976)
- [3] N. Watanabe and A. Kouchi, *Progress in Surface Science*, **83**, 439 (2008)
- [4] F. Pauzat, M. Lattelais, Y. Ellinger and C. Minot, *MNRAS*, **412**, 2729 (2011)
- [5] M. Lattelais, M. Bertin, H. Mokrane, et al., *A&A*, **532**, A12 (2011)

The large scale environment of Betelgeuse from radio observations.

Le Bertre¹, Gérard² et Matthews³.

¹ *LERMA, UMR8112 du CNRS, Observatoire de Paris, 61 av. de l'Observatoire, 75014, Paris – France ;*

² *GEPI, UMR8111 du CNRS, Observatoire de Paris, 5 place Jules Janssen, 92195, Meudon Cedex – France ;*

³ *MIT Haystack Observatory, Off Route 40, Westford, MA 01886, USA*

We present HI data obtained with the Nançay Radiotelescope and with the Very Large Array (VLA) on the red supergiant alpha Ori (Betelgeuse). The high spectral resolution allows us to identify three components emitting in narrow spectral lines (FWHM \sim 3 km/s).

By selecting different ranges of baselines from the VLA data, it is possible to obtain images revealing different structures in the environment of alpha Ori. The confusion arising from the emission by the interstellar medium on the same line of sight can also be identified and thus be mitigated by filtering short spacings.

The HI data reveal a quasi-stationary detached shell of neutral atomic hydrogen \sim 4 arcmin in diameter (\sim 0.24 pc at 200 pc), and also atomic hydrogen emission associated with the 6 arcmin radius far-infrared arc discovered by IRAS and with a newly discovered far-ultraviolet emitting arc.

An updated network for nitrogen chemistry

Romane Le Gal¹, Pierre Hily-Blant¹, Alexandre Faure¹, Claire Rist¹,
Guillaume Pineau des Forêts²

¹ *Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble, France*

² *Institut d'Astrophysique Spatiale, Orsay, France*

Nitrogen-bearing species are common tracers of the physical conditions in dark clouds. The nitrogen-containing species observed in prestellar cores are mainly N_2H^+ and NH_3 . However, the reservoir of gaseous nitrogen is expected to be mainly in the form of N and N_2 , but none of the two species is observable in the dark gas. Their abundances therefore derive indirectly from those of N-bearing species through chemical modelling. To tackle our incomplete understanding of the nitrogen chemistry in cold gas, we have revised the formation of nitrogen hydrides, since they are daughter molecules of N_2 .

N_2 is formed from N through neutral-neutral reactions via NO and CN [1], which rates have been revisited by Daranlot et al. [2]. Then subsequent reactions of N_2 with H_3^+ and with He^+ yield, respectively N_2H^+ and N^+ . Once N^+ has been formed, the key reaction initiating the nitrogen hydrides formation can occur: N^+ reacts with H_2 . Dislaire et al. [3] have shown that the formation of nitrogen hydrides via the latter reaction depends critically on the ortho-to-ratio of H_2 . This motivated the present work [4] in which we have updated the chemical network of Flower et al. [5]. It consists in a revised ortho/para chemistry of H_2 and of nitrogen hydrides, as well as updated rates for the conversion from N to N_2 . Our new model extends the work by [3], confirming the crucial role of o/p- H_2 , and we show that our results reproduce (by a few factors) the observed abundances of nitrogen hydrides towards a solar-type protostar [6], provided that the elemental C/O abundance ratio is lower than about 0.7.

Références

- [1] Pineau des Forêts G. et al., MNRAS, 244, 668 (1990)
- [2] Daranlot et al., PNAS, 109, 10233 (2012)
- [3] Dislaire et al., A&A, 537, A20 (2012)
- [4] Le Gal R. et al., in preparation
- [5] Flower et al., A&A, 449, 621 (2006)
- [6] Hily-Blant P. et al., A&A, 521, L52 (2010)

Spectroscopie de la molécule CO dans le VUV

Eidelsberg M¹, Lemaire JL^{1*}, Gavilan L^{1 *}, Federman S²,
Stark G³ & Fillion J-H⁴

¹Observatoire de Paris & ^{1*}Université de Cergy Pontoise

²Toledo University USA; ³Wellesley College; ⁴LPMAA-UPMC

Le monoxyde de carbone (CO) est la molécule la plus abondante détectée dans le milieu interstellaire, après l'hydrogène (H₂). Du fait de l'asymétrie de la molécule, CO est beaucoup plus facile à détecter, en émission (ou en absorption) que H₂. Son observation, dans le domaine ultra-violet comme dans celui de la radioastronomie est donc à la base de la grande majorité des informations obtenues sur les différents milieux interstellaires. Dans tous les cas, sous l'effet du rayonnement UV produit au cours du cycle stellaire, CO est l'objet d'une riche photochimie. Il est donc indispensable, afin d'interpréter les observations, d'avoir la connaissance spectroscopique la plus précise possible, par des mesures de laboratoire, de l'interaction entre le rayonnement UV et la molécule CO. Les données de laboratoire permettent alors de modéliser les milieux observés et d'en déduire leurs caractéristiques physico-chimiques. En outre, l'abondance de la variété isotopique la plus commune, ¹²C¹⁶O, est parfois telle que ses raies spectrales sont saturées et que la connaissance des autres variétés isotopiques de CO beaucoup moins abondantes (¹³C¹⁶O, ¹²C¹⁸O, ¹³C¹⁸O ...), est également indispensable.

Une campagne d'étude exhaustive sur la spectroscopie de CO et de ses isotopes dans des gammes de longueur d'onde (90 à 150nm) d'intérêt astrophysique est menée depuis quelques années grâce aux caractéristiques de résolution spectrale uniques au monde du spectromètre VUV par TF installé sur la ligne de lumière DESIRS du synchrotron SOLEIL. Différents exemples des résultats obtenus, ou en cours, seront présentés:

- a) la région entre 92.97 et 93.35 nm où les bandes W-X ainsi que 6 bandes d'un complexe de Rydberg qui se chevauchent ont pu être résolues grâce à la résolution instrumentale de 350000 et une simulation numérique de chacune des bandes. Ce travail, publié pour ¹²C¹⁶O [1] donne les forces d'oscillateurs et les taux de prédissociation. Il se poursuit avec une analyse similaire, en cours, pour les autres isotopes.
- b) Nos résultats aident à la mise au point de modèles théoriques traitant de l'interaction entre états de Rydberg et états de valence [2].
- c) Des résultats préliminaires du travail en cours [3] sur les bandes A-X de ¹³C¹⁶O ($v''=0-9$) seront présentés.

Références

- [1] Eidelsberg M, Lemaire JL, Federman SR, Stark G, Heays AN, Sheffer Y, Gavilan L, Fillion JH, Rostas F, Lyons JR, Smith PL, de Oliveira N, Joyeux D, Roudjane M and Nahon L. *Astronomy & Astrophysics*, 543, A69 (2012).
- [2] Lefebvre-Brion H, Eidelsberg M, *Journal of Molecular Spectroscopy* 271 (2012) 59
- [3] Gavilan L, Lemaire JL, Eidelsberg M, Federman SR, Stark G, Heays AN, Fillion JH, Lyons JR, and de Oliveira N, (2012) en préparation

Anions chemistry in the interstellar medium

F. Lique¹, J. Klos², M. Hochlaf³, T. Stoecklin⁴ and P. Halvick⁴

¹ LOMC - UMR 6294, CNRS-Université du Havre, 25 rue Philippe Lebon, BP 540, 76058, Le Havre, France

² Department of Chemistry, Université du Maryland, College Park, MD 20742

³ LMSME - UMR 8208, CNRS-Université Paris Est, 5 bd Descartes, 77454 Marne la Vallée, France

⁴ Institut des Sciences Moléculaires, Université de Bordeaux, CNRS UMR 5255, 33405 Talence Cedex, France

During the last decade, several anions [1] have been detected in the interstellar and circumstellar media. The detections of anions have led to interesting research on chemistry of negative molecular ions. In this talk, we present some examples of what can be the contribution of physical chemistry to the anions chemistry in the interstellar medium

Accurate modeling of anion microwave emission spectra requires the calculation of rates for rotational excitation by collisions with the most abundant species. We report the first collisional data for an interstellar anion, the rate coefficients for the rotational excitation of CN⁻ by H₂ [2]. State-to-state rate coefficients between the 11 lowest rotational levels of CN⁻ were calculated for temperatures ranging from 5 to 100K. Collisions with para- and ortho-H₂ are taken into account. The CN⁻ rate coefficients are compared with those of the neutral CO molecule and, as expected, it is found that the rate coefficients for the anion are significantly larger than the ones of the neutral species.

We also show how first principles calculations can predict the existence of new molecular anions. We predict the existence of the N₂H⁻ anion [3]. We present the global potential energy surface and the bound states of the N₂H⁻ van der Waals anion. The electronic calculations were performed using state-of-the-art *ab initio* methods and the nuclear motions were solved using a quantum close-coupling scattering theory. A T-shaped equilibrium structure was found, with a well depth of 349.1 cm⁻¹, where 18 bound states have been located for N₂H⁻ for total angular momentum $J=0$. We also present the absorption spectra of the N₂H⁻ complex. This anion could be formed after low energy collisions between N₂ and H⁻ through radiative association. The importance of this prediction in astrophysics and the possible use of N₂H⁻ as a tracer of N₂ and H⁻ in the interstellar medium is discussed.

Références

- [1] M. Agundez et al. *Astronomy and Astrophysics Letters* **517**, L2 (2010)
- [2] J. Klos and F. Lique, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **418**, 271 (2011)
- [3] F. Lique, P. Halvick, T. Stoecklin and M. Hochlaf, *J. Chem. Phys.*, submitted (2012)

***Herschel* CHESS view of the intermediate-mass protocluster OMC-2 FIR 4**

A. López-Sepulcre¹, M. Kama², C. Ceccarelli¹, C. Dominik^{2,3}, E.
Caux^{4,5}, A. Fuente⁶, T. Alonso-Albi⁶

¹ *UJF-Grenoble 1 / CNRS-INSU, Institut de Planétologie et d'Astrophysique de
Grenoble, UMR 5274, Grenoble, F-38041 – France*

² *Astronomical Institute 'Anton Pannekoek', University of Amsterdam,
Amsterdam – The Netherlands*

³ *Department of Astrophysics/IMAPP, Radboud University Nijmegen, Nijmegen –
The Netherlands*

⁴ *Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse – France*

⁵ *CNRS, IRAP, 9 Av. colonel Roche, BP 44346, 31028 Toulouse Cedex 4 – France*

⁶ *Observatorio Astronómico Nacional, P.O. Box 112, 28803 Alcalá de Henares,
Madrid – Spain*

Broadband spectral surveys of star-forming regions offer a rich view of their physical, chemical and dynamical structure and evolution. As part of the *Herschel* guaranteed time key programme CHESS [1], we obtained a line-rich spectrum of the intermediate-mass protostar OMC-2 FIR 4 [2] with the HIFI spectrograph on-board the *Herschel* satellite, covering most of the frequencies between 480 and 1900 GHz.

I will present an overview of the spectral survey, as well as complementary observations performed at millimetre wavelengths with the IRAM 30-m telescope and the Plateau de Bure Interferometer [3]. The ensemble of spectral data evidences the complex and clumpy nature of this region, where multiple cores, chemical differentiation, interactions with external molecular outflows, and ionised regions coexist within an area of only 0.05 pc.

Références

- [1] Ceccarelli, C., Bacmann, A., Boogert, A. et al. *A&A* 521, L22 (2010)
- [2] Kama, M., López-Sepulcre, A., Dominik, C. et al. (2012), *submitted*
- [3] López-Sepulcre, A., Taquet, V., Sánchez-Monge, Á. et al. (2012), *submitted*

Integral wide-field spectroscopy of the interstellar medium Sitelle: an imaging FTS on the CFH telescope

Jean-Pierre MAILLARD

Institut d'Astrophysique de Paris, 98 bis boulevard Arago, 75014 Paris

In collaboration with Canadian partners a new Imaging Fourier Transform Spectrometer (IFTS) for the Canada-France-Hawaii Telescope, SITELLE, is currently under construction in Québec City to be tested on the sky in the second semester of 2013 on projects in a shared-risk mode, and in operation from the following semester. It derived from the experience gained with BEAR on the same telescope and more directly from SpIOMM first wide-field IFTS, in operation on Mt Megantic telescope. The main characteristic of the spectrometer is a wide field of 11'x11' at seeing-limited resolution ($\approx 0.6''$ FWHM) on which integral spectroscopy will be possible. The main targets are the intergalactic medium in galaxy clusters, HII regions, SN remnants, envelopes of nearby planetary nebula, comets near perihelion... The new instrument, with a spectral coverage from 350 to 970 nm, is optimized for the blue and the near UV to efficiently access the [OII] 372.7 nm line in ionized nebulae. The spectral resolution, as for a FTS, can take any value up to $\approx 20,000$. A workshop in May 2013 in Québec City will help to prepare the programs to propose on this new facility.

Depletion and ionization fraction in the L1498 and L1517B prestellar cores

Sébastien Maret¹, Edwin Bergin² et Mario Tafalla¹

¹ *UJF-Grenoble 1 / CNRS-INSU, Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG) UMR 5274, Grenoble, F-38041, France*

² *Department of Astronomy, University of Michigan, 500 Church Street, Ann Arbor MI-48104, USA*

³ *Observatorio Astronómico Nacional, Alfonso XII 3, ES 28014 Madrid, Spain*

Prestellar cores represent the earliest stage of the formation of star. Constraining their physical and chemical properties is therefore important to better understand the star formation process as a whole. In this contribution, we present a detailed model of the chemistry in two prestellar cores, L1498 and L1517B. Both cores are located in the Taurus-Auriga molecular complex, and were chosen because of their simple spherical shape and well constrained density and temperature profiles. We have mapped the C18O (1-0) and H13CO+ (1-0) line emission with the IRAM-30m telescope, and we have modeled this observations with a detailed gas-phase chemistry network (that also includes depletion and desorption) coupled with a non-LTE radiative transfer code. Our model reproduces successfully the observed emission, and allows to place stringent constraints on the age of the core, as well as their ionization fraction. Implications on the formation scenario for these objects are discussed.

Equilibration des états de spins nucléaires dans l'espace : apports des études en laboratoire

X. Michaut¹, J.-H. Fillion¹, P. Jeseck¹, M. Bertin¹, L. Philippe¹, C. Boursier¹, A. Moudens², P. Čermák³, P. Cacciani³, J. Cosleou³, J. Hovorka³, M. Khelkhal³, C. Pardanaud⁴, S. Coussan⁴ et C. Martin⁴

¹ LPMAA - UMR CNRS 7092, Université Pierre et Marie Curie, 75252 Paris, France

² LERMA - UMR CNRS 8112, Université de Cergy-Pontoise, 95031 Cergy-Pontoise, France

³ PhLAM - UMR CNRS 8523, Université de Lille 1, 59655 Villeneuve d'Ascq, France

⁴ PIIM - UMR CNRS 7345, Aix-Marseille Université, 13397 Marseille, France

H₂O, tout comme d'autres molécules hydrogénées d'intérêt astrophysique (H₂, H₂CO, H₂C₃, NH₃, CH₃OH, CH₄ ou C₂H₄), joue un rôle crucial pour la chimie dans le milieu interstellaire et est observée dans les atmosphères cométaires. Les protons ayant un spin 1/2, ces molécules existent au plus dans trois configurations ou « isomères de spin » différents l'un de l'autre par la valeur du spin nucléaire total : $I=0$ (*para*), $I=1$ (*ortho*), ou $I=2$ (*meta*). Du fait du principe d'exclusion de Pauli et des propriétés de symétrie des fonctions d'onde ro-vibrationnelles de la molécule, chaque espèce *para*, *ortho*, et *meta* est respectivement associée aux espèces de symétrie du groupe de recouvrement de la molécule considérée et peut être identifiée dans le spectre de vibration-rotation. Dans le cas limite des hautes températures (>50 K pour la plupart des molécules), on sait que les fractions de populations dans les états *para*, *ortho* (ou *meta*) correspondent aux rapports des dégénérescences de spin nucléaire. En dessous des 50 K, les rapports OPR (Ortho/Para) ou OMR (Ortho/Meta) dépendent fortement de la température. Dans les *comae* des comètes [1,2] et dans les régions de formation d'étoile [3,4], il a été observé des déséquilibres entre les populations des différentes espèces de spin. Il est communément admis qu'en phase gazeuse, la conversion d'une espèce de spin nucléaire vers une autre est un phénomène peu probable au cours de collisions non réactives. Dans le même temps, la conservation du moment angulaire total dans des réactions chimiques impose des mécanismes réactionnels sélectifs en fonction des états de spin. Le rapport des populations de chaque espèce de spin est donc envisagé comme un traceur de l'histoire chimique des molécules depuis leur formation jusqu'à leur observation. Nous proposons de faire un bilan des études qui mettent en jeu des processus physiques (collisions non réactives, interactions gaz-surface, interaction avec des impuretés paramagnétiques, milieu solide) pouvant concourir à un rééquilibrage plus ou moins rapide des espèces de spin nucléaire dans le contexte astrophysique.

Références

- [1] J. E. Dickens, and W. M. Irvine, *Astrophys. J.* 518, 733 (1999)
- [2] R. M. Hogerheijde *et al*, *Science* 334, 334 (2011)
- [3] J. Crovisier, *Faraday Discussions* 109, 437 (1998)
- [4] H. Kawakita *et al*, *Astrophys. J.* 623, L49 (2005)

Diffusion and reactivity of O and O₂

Marco Minissale¹, Emanuele Congiu¹, Stephanie Cazaux², Mario Accolla^{1,3}, Saoud Baouche¹, Henda Chaabouni¹, Giulio Manico⁴, Audrey Moudens¹, Valerio Pirronello⁴ and Francois Dulieu¹

¹ *LERMA Université de Cergy-Pontoise, Observatoire de Paris, ENS, UPMC, UMR 8112 du CNRS, 5 mail Gay Lussac, 95000 Cergy Pontoise Cedex, France*

² *Kapteyn Astronomical Institute, PO box 800, 9700AV Groningen, The Netherlands*

³ *Present address Dipartimento di Scienze Applicate, Università degli Studi di Napoli Parthenope, Centro Direzionale Isola C4, 80143 Napoli, Italy*

⁴ *Dipartimento di Fisica e Astronomia, Università di Catania, Via Santa Sofia 64, 95123 Catania, Sicily, Italy*

O Diffusion

The solid state astrochemistry at low temperature is governed by the possibility of reactants to meet each others. Hydrogenation of numerous species such as H, CO, NO, O₂, O₃ ... as been the subject of recent intense experimental investigations. We propose now to focus for the first time on oxidation.

The experiments presented have been performed with the FORMOLIM device, set in Université de Cergy Pontoise, Observatoire de Paris. Via a triply differentially pumped beam, O atoms (and O₂ molecules) are aimed at a cold (6-25K) sample held in UHV chamber. The products are probed using Thermally Programmed Desorption or Reflexion Absorption Infrared Spectroscopy.

We have varied the following parameters:

- 1) Substrate morphology (Amorphous water ice, porous and compact, crystalline ice, amorphous silicates, graphite)
- 2) Coverage, from 0.1 to 1 ML
- 3) Substrate temperature, from 6.3 to 25 K
- 4) Dissociation rate (from 35% to 80 %)

From all this set of experimental parameters, we have found that the O+O reaction and the O+O₂ reaction are limited by diffusion of O atoms on the substrate. We derive the diffusion temperature law and observe, like in quantum physics handbooks, the dramatic transition from quantum to classical diffusion. Despite of the high mass of O, quantum tunneling is efficient even at 6K. As a consequence, the solid-state astrochemistry of cold regions should be reconsidered and should include larger organic molecules than previously expected.

O₂ reactivity

We focus on the oxidation of NO molecules through O₂ molecules.

All the experiments suggest formation of NO₃ and NO₂, with no dependence on the surface morphology and composition. The amount of NO₂ formed, however, is dependent on the order of deposition of NO and O₂ on the surface. Experimental data are modelled using a set of rate equations. The model suggests that the NO+O₂ reaction occurs mainly through the Eley Rideal mechanism (independently of the coverage), and that the intermediate species NO₃ reacts with NO molecules to yield nitrogen dioxide.

Sensitivity analysis of gas-grain models for dense cloud chemistry

Hakima Mokrane, Ugo Hincelin & Valentine Wakelam

University of Bordeaux, LAB, UMR 5804, F-33270 Floirac, France

CNRS, LAB, UMR 5804, F-33270 Floirac, France

To study the chemical composition and its evolution in dense clouds, astrochemists have developed chemical models that takes into account the reactions in the gas-phase, the interactions with the grains and the reactions at the surface of the grains. Current models include more than 6000 different processes. Most of these processes have not been studied theoretically with quantum calculations or by laboratory experiments. Understanding the robustness of the predictions of these models is however mandatory to trust any comparison with observations in astrophysical environments.

Following what was already done with pure gas-phase models (Wakelam et al. 2006), we have applied sensitivity methods to our gas-grain code Nautilus (Hersant et al. 2009). We studied the propagation of the model parameter uncertainties to the computed abundances. The method is based on monte-carlo simulations, in which the parameters are randomly varied with a defined interval. Different types of parameters have been studied: gas-phase rate coefficients, surface binding energies etc. We present in this poster the method and preliminary results of this study.

[1] Wakelam et al. A&A 451, 551–562, 2006

[2] Hersant et al. 2009

Le programme 'Galactic Cold Cores' : les propriétés des cœurs froids révélées par Herschel

J. Montillaud¹, M. Juvela¹, V.M. Pelkonen², I. Ristorcelli^{3,4}

& Collaboration KP-Galactic Cold cores

¹ *Department of Physics, P.O. Box 64, FI-00014, University of Helsinki, Finland*

² *Finnish Center for Astronomy with ESO (FINCA)*

³ *Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse, France*

⁴ *CNRS, IRAP, 9 Av. colonel Roche, BP 44346, 31028, Toulouse Cedex 4, France*

Notre connaissance actuelle de la formation stellaire repose essentiellement sur l'observation des régions de formation stellaire les plus proches. En observant l'émission des poussières froides dans le domaine submillimétrique (bandes photométriques à 100, 160, 250, 350 et 500 microns) à l'aide de l'observatoire Herschel dans plus d'une centaine de nouvelles régions, le programme Galactic Cold Cores (GCC) a permis d'enrichir cette vue d'un nouvel ensemble de cœurs froids à différents stades d'évolutions, et dans des environnements galactiques de morphologie et d'activités variées.

Nous avons évalué les propriétés physiques (masse, température, luminosité, densité) de plus d'un millier de cœurs froids détectés sur les images Herschel. Nos observations ont été comparées aux données du télescope spatial WISE à 22 microns afin d'évaluer le stade d'évolution des cœurs.

Nous discuterons les variations de ces propriétés avec les caractéristiques des nuages hôtes, ainsi que les différences observées avec les résultats disponibles obtenus par d'autres groupes pour d'autres régions de formation stellaire.

La cohérence optique en astrophysique.

Jacques Moret-Bailly.

Professeur d'Université retraité.

A la suite de Menzel, la cohérence des interactions entre lumière et gaz des nébuleuses reste ignorée, alors que le fonctionnement des lasers à gaz et l'observation de la stratosphère montrent que les interactions de la lumière avec les gaz à basse pression sont *exclusivement* cohérentes.

La cohérence se manifeste par :

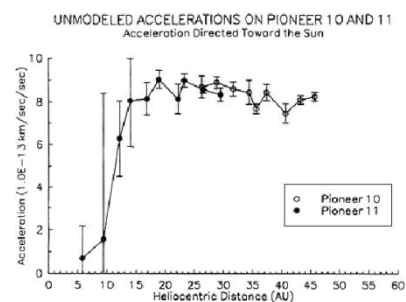
- La superradiance qui explique que les limbes des sphères de Strömngren sont des cercles fins et lumineux éventuellement divisés en un nombre pair de taches de diffraction. Ces sphères peuvent générer des figures comme la croix d'Einstein, attribuées à l'influence de lentilles gravitationnelles. Déformées en forme de sablier, elles expliquent les anneaux de SNR1987A.
- Des processus multiphotoniques susceptibles d'absorber l'essentiel du rayonnement continu d'une étoile très chaude pour exciter quelques niveaux d'énergie. Ainsi, une fraction importante du rayonnement continu de SN1987A peut être absorbée et immédiatement réémise en amplifiant la radiance des anneaux de SNR1987A: L'étoile a disparu quand les anneaux se sont allumés.

- Échange d'énergie entre des rayons de lasers formés d'impulsions femtoseconde, glissant progressivement leurs fréquences par un ensemble de diffusions Raman cohérentes (Impulsive Stimulated Raman Scattering: ISRS) [1,2]. L'effet, inversement proportionnel au cube de la durée des impulsions, ne peut être observé, à l'échelle terrestre, avec les impulsions nanoseconde de la lumière incohérente. Les glissements anormaux des fréquences des porteuses de signaux échangés avec les sondes Pioneer 10 et 11 sont habituellement attribués à un effet Doppler dû à une accélération anormale des sondes. La variation rapide de l'«accélération» entre 10 et 15 UA (figure 7 de Anderson et al. [3]), est expliquable par la détente du vent solaire qui forme dans cette seule région des atomes d'hydrogène 2S et 2P permettant, par ISRS, un transfert d'énergie du rayonnement solaire aux microondes portant les signaux.

L'ISRS explique aussi la loi de Hubble, l'aspect spongieux des cartes des galaxies, les spectres UV-X du Soleil, les forêts Lyman des quasars, etc.

Références.

- [1] Lamb G. L. Jr. Rev. Mod. Phys. 43, 99 (1971).
- [2] Yan Y-X, Gamble E. B. Jr, Nelson K. A. J. Chem. Phys. 83, 5391 (1985).
- [3] Anderson J. D., Laign P. A., Lau E. L. et al. arXiv: gr-qc/0104064 (2005).



La réaction thermique de HCN et NH₃ dans les glaces interstellaires.

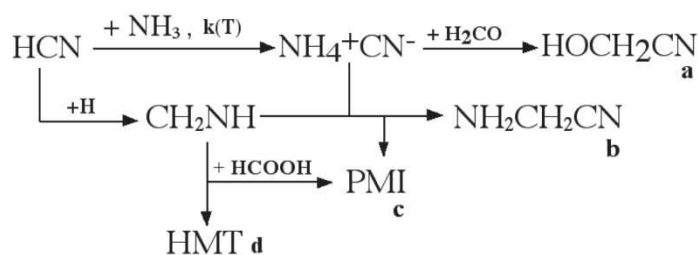
J. A. Noble¹, P. Theulé¹, G. Danger¹, F. Borget¹, M. Chomat¹, F. Duvernay¹, F. Mispelaer¹, et T. Chiavassa¹.

¹ PIIM, UMR 7345 du CNRS, Aix-Marseille Université, Centre de St-Jérôme, Avenue Escadrille Normandie-Niémen, 13397, Marseille cedex 20 – France

La molécule HCN joue un rôle central dans la chimie interstellaire, car c'est la molécule la moins complexe contenant une liaison carbone-azote, et ces réactions peuvent produire des espèces clés dans la voie de formation des acides aminés.^[1] La molécule NH₃ est présente dans les glaces interstellaires en quantité très importante, de 2–15 % par rapport à H₂O.^[2] Nous présentons ici un travail expérimental sur la réaction thermique HCN + NH₃ → NH₄⁺CN⁻. Une série d'expériences a été réalisées sur le dispositif RING^[3] avec des glaces composées de HCN, NH₃, et H₂O. Les espèces ont été déposées sur une surface en or à 15 K, et puis chauffées avec une rampe de 2 K.min⁻¹. L'évolution des glaces a été suivie par spectroscopie IR et par spectrométrie de masse.

Le produit de la réaction, le sel NH₄⁺CN⁻, a été identifié grâce à ses bandes caractéristiques dans l'IR et son spectre de masse lors de sa désorption. La dépendance en température de la constante de désorption est $k_{des}=10^{13} \text{ s}^{-1} \cdot \exp(-37.7 \pm 1.3 \text{ kJ.mol}^{-1}/RT)$. La force de bande de CN⁻ est estimée à $A_{CN^-} = 1.8 \pm 1.5 \times 10^{-17} \text{ cm.molec}^{-1}$. La cinétique de la réaction a été étudiée grâce à des isothermes; le taux de la réaction est mesuré à $k(T) = 0.016 \text{ s}^{-1} \cdot \exp(-2.7 \pm 0.4 \text{ kJ.mol}^{-1}/RT)$ dans les mélanges de HCN + NH₃. Quand les réactifs sont dilués dans l'eau, la réaction est ralentie.

Les conséquences pour la chimie interstellaire sont diverses. La combinaison d'un taux de la bande assez bas et une abondance estimée basse suggère que CN⁻ ne peut pas être observable dans les glaces par les télescopes IR actuels. La réaction HCN + NH₃ est du même ordre de grandeur que la réaction thermique HNCO + NH₃ → NH₄⁺OCN⁻,^[4] et les réactions de formation d'espèces plus complexes, telle que l'aminométhanol.^[5] Dans un réseau chimique simplifié (voir Figure) les produits complexes formés à partir de HCN sont les espèces comme a) l'hydroxyacétonitrile,^[6] b) l'aminoacétonitrile,^[1] c) le poly(méthylène-imine),^[1] et d) l'hexaméthylentetramine.^[7] Ces espèces peuvent être impliquées dans la formation des acides aminés, et des résidus trouvés sur les comètes et les météorites.



Références

- [1] Danger, G., et al., A&A, 535, A47 (2011)
- [2] Bottinelli, S., et al., ApJ, 718, L53 (2010)
- [3] Theule, P., et al., A&A, 530, A96 (2011)
- [4] Mispelaer, F., et al., A&A, 540, A40 (2012)
- [5] Bossa, J. B., et al., ApJ, 707, 1524 (2009)
- [6] Danger, G., et al., ApJ, 756, 11 (2012)
- [7] Vinogradoff, V., et al., A&A, 530, A128 (2011)

Les glaces interstellaires : catalyseur de l'hydrogénation de CO vers le méthanol ?

A. Pernet¹, J. Pilmé¹, F. Pauzat¹, Y. Ellinger¹

¹ Laboratoire de Chimie Théorique, UMR 7616, UPMC, Paris

Dans l'environnement extrême du milieu interstellaire, les glaces, constituant omniprésent, sont le siège de nombreuses réactions chimiques et notamment de réactions qui se produisent à leur surface. En effet, elles peuvent interagir avec les diverses molécules provenant de la phase gazeuse et en particulier avec l'hydrogène atomique. La formation du méthanol (CH₃OH) considéré comme point de départ pour la genèse de la plupart des molécules organiques oxygénées est un des mécanismes pour lequel l'intervention de la surface glacée pourrait être déterminant. Malgré son apparente simplicité, le mécanisme menant au méthanol par une chaîne d'hydrogénation successive (CO → HCO → H₂CO → CH₃O → CH₃OH) est loin d'être trivial, bien que quatre molécules sur cinq impliquées dans ce processus aient été observées dans le MIS. L'objet de ce travail est de clarifier le rôle essentiel que peuvent jouer les glaces dans ce mécanisme.

De nombreuses expériences dont celles de Watanabe et al [1], ont montré que l'hydrogénation directe de CO menait à la formation du méthanol ainsi qu'à des composés intermédiaires comme le formaldéhyde (H₂CO), mais que ces formations étaient largement dépendantes de la température et de la présence de glaces d'eau. Par ailleurs des calculs théoriques effectués par Woon [2], montrent que des barrières d'activation existent dans la phase gaz, comme en présence de molécules d'eau, pour former certains des composés de la chaîne d'hydrogénation (1^{ère} et 3^{ème} étape). Dans ce contexte, une étude multidisciplinaire alliant expériences en matrice au LADIR (C. Pirim et L. Krim) et expériences numériques au Laboratoire de Chimie Théorique ont été entreprises ces dernières années.

Les expériences menées au LADIR ont montré que l'injection simultanée de CO et d'un mélange H/H₂ sur un miroir refroidi à une température entre 3K et 20K conduisait à la formation de HCO, puis jusqu'à CH₃OH, avec de fortes variations relatives liées à la présence ou non de glaces d'eau [3], en accord avec les résultats de Watanabe. Les calculs de chimie quantique (DFT et MP2) que nous avons effectués concernent principalement la première étape du mécanisme réactionnel, c'est à dire la formation de HCO sur la glace. Nous avons proposé un mécanisme original en deux étapes successives: la première étape est la formation de complexes stables par le piégeage d'un hydrogène sur la surface (2 façons différentes). La seconde étape correspond à l'approche de la molécule de CO de la surface pour former HCO. Ces calculs montrent que les barrières présentes pour chaque étape tendent à diminuer, voire à disparaître. Ce mécanisme pourrait donc permettre d'interpréter les expériences effectuées et de comprendre, à l'échelle moléculaire, le rôle essentiel que la glace joue dans la formation du méthanol.

Références

- [1] Watanabe et al, Planet. Space. Sci. 2006, 54, 1107
- [2] Woon, D. E. Astrophys. J. 2002, 569, 541
- [3] Pirim C. & Krim L., Chem. Phys. 2011, 380, 67

Chimie sous irradiation dans les glaces interstellaires : une étude théorique

J. Pilmé¹, M. Lattelais¹, G. Marloie¹, A. Pernet¹, F. Pauzat¹, Y. Ellinger¹

¹ Laboratoire de Chimie Théorique, UMR7616 du CNRS, Université P. & M. Curie, 4, place Jussieu, 75252, Paris Cedex 05 – France

Collaboration expérimentale : C. Laffon², Ph. Parent²

² Laboratoire de Chimie Physique, Matière et Rayonnement, UMR7614 du CNRS, Université P. & M. Curie, 11, rue Pierre et Marie Curie, 75321 Paris Cedex 05- France

Les réactions à l'intérieur des manteaux glacés recouvrant les grains sont reconnues pour être à l'origine de la diversité des molécules organiques complexes (COMs) observées dans le milieu interstellaire (MIS). De tels processus sont initiés principalement par le champ de radiation (UV, Rayons cosmiques, ...), mais ce même champ de radiation peut également, directement ou indirectement, être la cause de la destruction des espèces qu'il a aidés à créer. La question de la survie de ces espèces a été abordée par une démarche interdisciplinaire [1], théorique (LCT) et expérimentale (LCPMR) en utilisant le rayonnement synchrotron SOLEIL.

Sur l'exemple de la glycine, $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$, Parent et Laffon ont identifié, à l'aide de spectres NAXAFS, que CH_3NH_2 et CO_2 se formaient sous l'irradiation mais que CH_2NH et HCN étaient produits par des réactions secondaires. Les différents processus de fragmentation ont été étudiés théoriquement du point de vue énergétique à l'aide de méthodes DFT ; les processus secondaires de déshydrogénation par les radicaux OH résultant de la fragmentation de la glace ont fait l'objet d'un traitement Coupled Cluster. L'environnement de glace a été modélisé par un continuum polarisable (PCM) utilisant une constante diélectrique de l'eau caractéristique de la glace à 10-50 K.

Dans la glace, la glycine est un zwitterion $^+\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-$; la fragmentation peut se produire soit directement (faiblement endothermique) soit indirectement après éjection d'un photoélectron (rupture spontanée). Dans les deux cas les fragments sont CH_3NH_2 et CO_2 . Les réactions de fragmentations secondaires conduisant à CH_2NH et HCN sont endothermiques et demandent une poursuite de l'irradiation ; en revanche, en présence du radical OH, ces réactions sont exothermiques et sans barrière d'activation [2]. Le rôle de OH apparaît donc primordial pour l'évolution des molécules dans la glace.

Une étude parallèle de l'alanine, $\text{NH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{COOH}$, premier acide aminé chiral, montre que le radical zwitterionique $^+\text{NH}_3\text{C}^*(\text{CH}_3)\text{COO}^-$ est plan, ce qui conduit à la perte de la chiralité par épimérisation. Cependant, si la cage de glace autour du zwitterion est suffisamment forte pour maintenir le H éjecté au voisinage, la recombinaison pourrait s'effectuer préférentiellement du côté de la liaison brisée ; la chiralité serait alors préservée.

Références

[1] M. Lattelais, O. Risset, J. Pilmé, et al., *Int. J. Quantum Chem.*, **111**, 1163 (2011)

[2] A. Pernet, J. Pilmé, F. Pauzat et al., (soumis 2012)

Spectroscopic study of the rotational structure of small PAHs IR/FIR bands. Experiments and calculations.

O. Pirali^{1,2}, M. Goubet³, R. Georges⁴, T. R. Huet³, J. Courbe⁴, P. Soulard⁵, P. Asselin⁵, P. Roy², M. Vervloet²

¹ *Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, ISMO, UMR 8214 CNRS-Université Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex - France*

² *Ligne AILES, Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers Saint-Aubin, 91192 Gif sur Yvette Cedex - France*

³ *Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules, UMR 8523 CNRS - Université Lille 1, Bâtiment P5, F-59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France*

⁴ *Université de Rennes 1, Institut de Physique de Rennes, CNRS, UMR 6251, F-35042 Rennes Cedex, France*

⁵ *UPMC Université Paris 06, UMR 7075 CNRS, Laboratoire de Dynamique, Interactions et Réactivité (LADIR), F-75005, Paris, France*

Aromatic compounds are believed to dominate the infrared spectra of a variety of astrophysical objects. Accurate spectroscopic measurements in the laboratory are required to better understand their excitation/relaxation processes which could be responsible for the Unidentified Infrared Bands observed in various objects in space. In particular very few is known concerning the rotationally structure of the IR/FIR bands of PAHs. We used the high resolution Fourier Transform interferometer of the AILES beamline of synchrotron SOLEIL to record the rotationally resolved spectra of several IR/FIR vibrational modes of naphthalene and its derivatives (quinoline, isoquinoline, azulene, quinoxaline). Firstly, the intense band associated with the ν_{46} CH bending out of plane mode of naphthalene recorded under jet conditions (Jet-AILES experiment developed on the AILES beamline by the IPR-LADIR-PhLAM consortium) revealed transitions involving low J and Ka rotational quantum numbers. These new data permitted to accurately fit the ground state rotational constants and to improve the ν_{46} band constants [1]. As a second step, thanks to the new GS rotational parameters we performed the rotational analysis of the low frequency ν_{47} and ν_{48} bands recorded at high resolution and at room-temperature in the long absorption pathlength cell from ISMO. As a last step, the high resolution spectra of several bands of azulene, quinoline, isoquinoline and quinoxaline were recorded at room temperature and analyzed using the same procedure. All the rotational constants fitted in the present work were compared to the results of anharmonic DFT calculations realized at various levels of accuracy. In the presentation, I will describe the different experimental set-ups, the results of the rotational analysis, and I will discuss the accuracy of anharmonic DFT calculations accounting for the rotation when modeling the IR/FIR PAHs band shapes.

[1] Albert S., et al.; Faraday Discussions, 150, 51 (2011)

Cartographie 3D du MIS galactique par inversion des mesures d'absorption

Puspitarini¹, Lallement R¹, Vergely J.L.², Eyer L.³

¹ *GEPI (UMR9111), Observatoire de Paris, Université Paris-Diderot, 5 Place Jules Janssen, 92190, Meudon France*

² *ACRI-ST, 260 rue du Pin Montard, 06904 Sofia-Antipolis*

³ *Observatoire de Genève, Université de Genève, Suisse*

L'inversion des mesures individuelles d'absorption ou de rougissement vers des étoiles distribuées en distance et direction est une des façons d'obtenir une tomographie du MIS. Nous présentons les travaux en cours sur les méthodes d'inversion Bayésienne. Nous testons tout d'abord au moyen de données 3D simulées l'impact des différents paramètres ainsi que les implémentations de nouvelles méthodes. Nous présentons ensuite une récente tomographie du MIS proche calculée par inversion de 22,000 mesures d'extinction ($d < 1500$ pc), et ses principales caractéristiques.

Références

[1] Puspitarini L., Lallement R., 2012, A&A, 545, 21

[2] Vergely J.L., et al, 2010, A&A, 518, 3 1

Nuclear spin selection rules in the chemistry of nitrogen hydrides

Claire Rist¹, Alexandre Faure¹, Pierre Hily-Blant¹, Romane Le Gal¹,
Guillaume Pineau des Forêts²

¹ *Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble, France*

² *Institut d'Astrophysique Spatiale, Orsay, France*

The chemistry of nitrogen hydrides in the cold gas is initiated by the key reaction $\text{N}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH}^+ + \text{H}$. This reaction is known to depend critically on the ortho-to-para ratio of H_2 which, in turn, is driven by a competition between the rate of H_2 formation and the rate for ortho/para H_2 conversion. This latter is expected to be dominated by (reactive) collisions with protons and H_3^+ . The ortho/para chemistry of nitrogen hydrides has been introduced in a time dependent chemical model [1] using updated rates for, in particular, proton exchange reactions and dissociative recombinations. Nuclear spin selection rules, assuming conservation of the total nuclear spin and complete scrambling [2, 3], have been derived for a number of key exothermic reactions. Our results will be discussed in the light of recent Herschel/HIFI observations [4, 5].

Références

- [1] Le Gal R. et al., in preparation
- [2] Quack M., Mol. Phys., 34, 477 (1977)
- [3] Oka T., J. Mol. Spec., 228, 635 (2004)
- [4] Hily-Blant P. et al., A&A, 521, L52 (2010)
- [5] Persson C. M. et al., A&A, 543 A145 (2012)

Expériences de laboratoire pour l'étude de la réactivité des ions et de leur spectroscopie

Claire Romanzin¹, Christian Alcaraz¹

¹ LCP, UMR8000 du CNRS, Laboratoire de Chimie Physique,
Université Paris Sud 11, 91405, Orsay Cedex – France

Les ions sont des espèces clés du milieu interstellaire. Il est en effet admis que les réactions ion-molécule sont, avec la chimie hétérogène en surface des grains, l'un des moteurs de la complexité chimique dans le milieu interstellaire. Ainsi, si les cations et leur réactivité sont depuis longtemps intégrés dans les modèles, la découverte récente de la présence d'anions dans le milieu interstellaire (essentiellement du type $C_{2p}H^-$ et $C_{2p+1}N^-$) [1] donne lieu à de nouveaux efforts de modélisation [2]. Les expériences de laboratoire sur ces systèmes sont donc nécessaires afin d'alimenter en données les différents modèles.

Nous présenterons ici, différents outils expérimentaux dédiés à l'étude de ces espèces et détaillerons les possibilités offertes en termes de :

- spectroscopie de cations
- étude de la réactivité de cations et d'anions
- photodétachement et photodissociation d'anions

sur la base de résultats récents [3-6].

Références

- [1] *e.g.* Agúndez M. *et al.*, *Astron. & Astrophys.* 478, L19 (2008) ; Thaddeus P. *et al.*, *Astrophys. J.* 677, 1132 (2008)
- [2] *e.g.* Millar T. J. *et al.*, *Astrophys. J.* 662, L87 (2007) ; Walsh C. *et al.*, *Astrophys. J.* 700, 752 (2009)
- [3] Cunha de Miranda B. K. *et al.*, *J. Phys. Chem. A*, 114, 4818 (2010)
- [4] Cunha de Miranda B. K. *et al.*, en préparation
- [5] Žabka J. *et al.*, *Icarus* 219, 161 (2012)
- [6] Žabka J. *et al.*, en préparation

Characterization of PAH Content and Distribution in Selected Meteorites Employing the PIRENEA Set-up

Hassan Sabbah¹, Christine Joblin¹

¹ *Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie - Université de Toulouse (UPS) & CNRS, 9 Av. du Colonel Roche, 31028 Toulouse Cedex 4, France*

The detailed examination of meteorites and products of simulated extraterrestrial chemical environments can significantly increase our understanding of interstellar chemistry and the origin of the organic matter found in primitive Solar System materials[1]. Thus, developing sensitive and powerful tools to detect organic carbon materials - especially polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) - in extraterrestrial and terrestrials samples is a crucial requirement for astrochemistry research. In order to explore the existence of PAHs in space, the two-step laser desorption laser ionization mass spectrometer technique (L2MS) implemented at Stanford University was applied to an array of extraterrestrial objects including interplanetary dust particles (IDPs), carbonaceous chondrites and comet coma particles [2]. This technique consists of desorbing with a pulsed infrared laser beam the solid materials into a gaseous phase with minimal fragmentation followed by resonance enhanced multiphoton ionization to analyze the PAH content in a time-of-flight mass spectrometer. Several characteristics of this technique make it very useful for microscale analysis of PAHs.

The PIRENEA set-up [3] (Piege à Ions pour la Recherche et l'Étude de Nouvelles Espèces Astrochimiques) is a home-built Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance (FT-ICR) mass spectrometer with the additional characteristics of a cold environment generated by a set of cryogenic shields that are of interest to approach the physical conditions of interstellar space. Currently, we are testing the ability of PIRENEA to detect PAH content in meteorites using a two-step laser desorption laser ionization mass spectrometry technique. Employing the capability of this set-up to trap ions for long time scale and study their photostability and spectroscopy [4], we will be able to identify the molecular structure of PAHs desorbed from the selected meteorites. We will present test results performed on Murchison meteorites. Once these experiment tests are achieved we will be analyzing the meteorites of the TC3 2008 asteroid. These meteorites have been studied employing the L2MS but the PAHs were only identified by their m/z ratio [5] with $m/\Delta m$ around 500 whereas values of 10^4 can be attained with PIRENEA.

Références

- [1] Kwok S., Nature, 430, 985 (2004).
- [2] Spencer M. K., & Zare R. N., Science, 317, (2007).
- [3] Joblin C., Pech C., Armengaud M., Frabel P., & Boissel P., EAS Publications Series, 4, 73 (2002).
- [4] Useli-Bacchitta F., Bonnamy A., Malloci G., Mulas G., Toubblanc D., & Joblin C., Chem. Phys. 371 , 16 (2010).
- [5] Sabbah H., Morrow A. L., Jenniskens P., Shaddad M. H., & Zare R. N., MAPS. 45, 1710 (2007).

The formation of cold atomic gas in the local interstellar medium

E. Saury^{1,2}, M.-A. Miville-deschênes^{1,2}, P. Hennebelle³, E. Audit⁴

¹ *Institut d'Astrophysique Spatiale, CNRS UMR 8617, Université Paris-Sud 11, Bâtiment 121, 91405, Orsay, France*

² *Canadian Institute for Theoretical Astrophysics, University of Toronto, 60 St. George St., Toronto, ON M5S 3H8, Canada*

³ *Laboratoire de Radioastronomie, CNRS UMR 8112, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris, France*

⁴ *Laboratoire AIM, CEA/DSM - CNRS - Université Paris Diderot, IRFU/SaP, 91191, Gif-sur-Yvette, France*

One of the main current questions in Astrophysics is the understanding of the star formation process, directly related to the processes involved in the cooling and the condensation of the gas yielding to intricate filamentary structures of molecular clouds. Magnetic field, thermal instability and turbulence are playing dominant roles in this complex dynamics.

The work presented here is focused on the evolution of the atomic and diffuse interstellar medium that provides the initial conditions to the formation of molecular clouds. To understand the roles of thermal instability and turbulence and describe the WNM to CNM transition, we use hydrodynamical numerical simulations of thermally bistable HI from which we compute synthetic 21 cm spectra that are compared to observations of high Galactic latitudes clouds.

With WNM initial conditions and stirring in of turbulent motions at large scales, the simulations reproduce basic observational statistics of the diffuse ISM. But some kind of compression is needed to create CNM, either with a majority of compressible modes of the injected turbulent velocity field or with a higher initial density than the WNM fiducial density. The pressure range obtained matches what is measured from atomic absorption lines and the mass in each thermal phase is compatible with 21 cm observations, including 1/3 of the mass in the thermally unstable regime. Moreover, the shapes of the synthetic 21cm spectra are morphologically very similar to the observed ones.

All these results were obtained with a sonic turbulence. They imply that, given the properties of the heating and cooling mechanisms, the formation of cold and dense structure in the diffuse ISM occurs naturally in the presence of sonic large scale turbulent motions and compression.

Références

- | | |
|---|---|
| [1] Audit E. & Hennebelle P., A&A, 433, 1 (2005) | [5] Hennebelle P. & Audit E., A&A, 465, 431 (2007) |
| [2] Audit E. & Hennebelle P., A&A, 511, A76+ (2010) | [6] Hennebelle P., Audit E. & Miville-Deschênes M.-A., |
| [3] Federrath C., Roman-Duval J., Klessen R. S., Schmidt W. & Mac Low M., A&A, 512, A81+ (2010) | [7] Schmidt W., Federrath C., Hupp M., Kern S. & Niemeyer J.-C., A&A, 494, 127 (2009)xs |
| [4] Gonzales M., Audit E., & Huynh P., A&A, 464, 429 (2007) | |

Resonant effects in photoionization and dissociative recombination of hydrogen species of astrochemical interest

J. Zs. Mezei^{1,2}, N. Pop³, F. O. Waffeu Tamo¹, O. Motapon⁴, A. Wolf⁵, E. Roueff⁶, Ch. Jungen² and I. F. Schneider¹

¹Laboratoire Ondes et Milieux Complexes, UMR6294, Université du Havre, 25 rue Philippe Lebon, 76058, Le Havre, France

²Laboratoire Aimé Cotton, UMR3321, Université Paris-Sud, Bâtiment 505, 91405, Orsay– France

³Department of Physical Foundations of Engineering Polytechnical University of Timisoara RO-300223, Timisoara, Romania

⁴LPF, UFD Physique et Sciences de l'Ingénieur, University of Douala, P.O. Box 24157, Douala, Cameroon

⁵Max-Planck-Institut für Kernphysik, Saupfercheckweg 1, D-69117 Heidelberg, Germany

⁶LUTH, Observatoire de Paris et Université Paris 7, F-92190 Meudon, France

In the present work we report theoretical photoionization cross sections for excitation from excited vibrational levels of the ground state of H_2 [1]. Our calculations are based on Multichannel Quantum Defect Theory (MQDT) [2] which allows us to take account of the full manifold of Rydberg states and their interactions with the electronic continuum. We show that the photoionization cross section is actually dominated by resonance effects, in the sense that autoionizing Rydberg resonances produce a major fraction of the averaged cross section. The present work deals with the Q transitions ($N'=N''$) which account for roughly one third of the total photoabsorption cross section and we choose $v''=1, N''=1$ to exemplify. The same Rydberg resonances are involved in the dissociative recombination of the molecular cations. A very accurate MQDT calculation on HD^+/HD , including rotational structure and interactions, agrees well with the most recent heavy ion storage ring experiment [3]. As for the triatomic species H_3^+/H_3 , an analytic predictive approach has been elaborated recently [4], resulting in an average rate coefficient in very good agreement with the measurements and with the most sophisticated MQDT computations [5].

Références

- [1] J. Zs. Mezei, I. F. Schneider, E. Roueff and Ch. Jungen, *Phys. Rev. A* **85**, 043411 (2012).
- [2] Ch. Jungen, "Elements of Quantum Defect Theory", in M. Quack and F. Merkt (editors), *Handbook of High Resolution Spectroscopy*, Wiley, Chichester, New York (2010).
- [3] F. O. Waffeu Tamo, H. Buhr, O. Motapon S. Altevogt, V. M. Andrianarijaona, M. Grieser, L. Lammich, M. Lestinsky, M. Motsch, I. Nevo, S. Novotny, D. A. Orlov, H. B. Pedersen, D. Schwalm, F. Sprenger, X. Urbain, U. Weigel, A. Wolf, and I. F. Schneider, *Phys. Rev. A* **84**, 022710 (2011).
- [4] I. F. Schneider, N. Pop and Ch. Jungen, submitted (2012).
- [5] S. F. dos Santos, V. Kokouline, and C. H. Greene, *J. Chem. Phys.* **127**, 124309 (2007).

The F + H₂ reaction at low temperatures.

Meryem Tizniti,¹ Sébastien D. Le Picard,¹ François Lique,² André Canosa¹
and Ian R. Sims¹.

¹*Institut de Physique de Rennes, UMR CNRS-UR1 6251, Université de Rennes 1, 263
Avenue du Général Leclerc, 35042, Rennes Cedex – France*

²*LOMC – Université du Havre, 25 Rue Philippe Lebon, BP 540 – 76 058 Le Havre Cedex –
France*

The reaction $F + H_2 \rightarrow HF + F$ is believed to be the primary production route for interstellar HF [1]. It has also long served as a benchmark for comparison between dynamics and kinetics experiments and quantum scattering calculations [2]. Recent observations by the Herschel space telescope [3] have indicated that HF is the dominant reservoir of interstellar fluorine under a wide range of conditions and has the potential to become an excellent tracer of molecular hydrogen, and provides a sensitive probe of small H₂ column density clouds. However, the F + H₂ reaction possesses a small energetic barrier (~7 kJ mol⁻¹), and around 300 K its rate coefficient falls quite steeply with decreasing temperature. Calculations show, however, that tunnelling plays an increasingly dominant role as the temperature falls, and the rate constant becomes essentially temperature-independent below 20–30 K. The tunnelling calculations are sensitive not only to the barrier height, but also its precise form, with resonances and non-adiabatic effects also playing a strong role [4].

In this contribution, we will present completely new experimental measurements of the rate coefficient for the F + H₂ reaction at temperatures between 10 K and 300 K, along with a detailed comparison with quantum reactive scattering calculations on the new hybrid Li-Werner-Alexander-Lique potential surface [5]. The experimental measurements of this rate coefficient, two orders of magnitude slower than typical barrierless reactions at 10 K, necessitated the use of new Laval nozzles operating with pure hydrogen buffer gas. The reaction was initiated by pulsed 248 nm excimer laser photolysis of F₂, and followed in real time by pulsed VUV LIF detection of H-atom products at 121.6 nm.

These are, to our knowledge, the first ever measurements of a gas-phase chemical reaction taking place over a potential energy surface with a substantial energetic barrier at temperatures significantly below 100 K.

References

- [1] Neufeld, D.A.; Wolfire, M. G., *Astrophys. J.*, 706, 1594 (2009)
- [2] Hu, W.F.; Schatz, G. C., *J. Chem. Phys.*, 125, 132301 (2006)
- [3] Neufeld, D.A. et al., *Astron. Astrophys.*, 518, L108 (2010)
- [4] Lique, F.; Li, G.; Werner, H.-J.; Alexander, M.H., *J. Chem. Phys.*, 134 (2011)
- [5] Li, G.; Werner, H.-J.; Lique, F.; Alexander, M.H., *J. Chem. Phys.*, 127, 174302 (2007)

Interaction d'atomes avec des surfaces de type graphénique et ses applications astrophysiques.

N. Rougeau¹, S. Morisset^{1,2}, T. Fischer¹, D. Teillet-Billy¹ et V. Sidis¹.

¹ ISMO, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, UMR 8214 CNRS/UPSud, Université Paris Sud, Bât. 351, 91405, Orsay Cedex – France

² PIIM, Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires, UMR 7345 CNRS/Univ Aix-Marseille, Campus de Saint Jérôme, 13397 Marseille Cedex 20, – France

Les grains de poussière jouent un rôle central dans la chimie du milieu interstellaire (MIS). La détermination des interactions d'atomes, tels que H, C, O, avec la surface des grains et entre atomes au voisinage de celle-ci, est une des informations clés pour interpréter, qualitativement et quantitativement, les processus réactifs impliquant les grains.

Nous avons calculé ces interactions (énergies et géométrie d'adsorption, surfaces d'énergie potentielle) par des approches «1^{er} principe» (fonctionnelle de la densité DFT/GGA) pour des systèmes moléculaires où les surfaces graphéniques sont modélisées par des molécules polycycliques aromatiques (PAH) et/ou pour le système périodique.

Dans ce contexte, l'étude de l'adsorption de l'hydrogène atomique, composant majoritaire du gaz dans les nuages interstellaires, sur des surfaces carbonées s'est révélée particulièrement intéressante (1). Ces études ont été récemment étendues aux cas d'atomes C (2) et O (3), dont l'interaction, dans leur état fondamental ³P, avec les surfaces graphéniques a été peu étudiée jusque-là. La présence de barrière à l'adsorption/abstraction est en particulier une propriété cruciale. Ces calculs de structure ouvrent la voie à des études de dynamique (dynamique moléculaire classique ou quasi-classique) suivant les cas ou étendant des études précédentes comme celle relative à la formation du radical hydroxyle(4) et de l'eau par des mécanismes de recombinaison type Eley-Rideal ou de Langmuir-Hinshelwood(4).

Les propriétés énergétiques et géométriques de ces systèmes sont déterminantes dans la dynamique réactionnelle : probabilité de réaction, partage énergétique entre les degrés de liberté de la molécule formée et le grain, interaction de la molécule formée avec le grain.

Références

[1] N. Rougeau, D. Teillet-Billy, V. Sidis, *Chem. Phys. Lett.* **431**, 135 (2006) ; *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**,17579-17587 (2011)

[2] N. Rougeau, V. Ivanovskaya, D. Teillet-Billy, V. Sidis, (2012), à soumettre

[3] N. Rougeau, S. Morisset, T. Fischer, D. Teillet-Billy, V. Sidis, (2012), à soumettre

[4] H. Bergeron, N. Rougeau, V. Sidis, M. Sizun, D. Teillet-Billy, F. Aguillon, *J. Phys. Chem. A*, **1**, 11921 (2008)

La chimie chaude dans les disques protoplanétaires vue par Herschel

Wing-Fai Thi¹, Christophe Pinte¹, François Ménard^{2,1}, Andrés Carmona¹, et le consortium GASPS

¹ UJF-Grenoble 1 / CNRS-INSU, Institut de Planétologie et d'Astrophysique (IPAG) UMR 5274, Grenoble, F-38041,

² UMI - LFCA Dept. De Astronomia y Obs. Astronomico Nacional, Universidad de Chile, Casilla 36-D, Correo Central, Santiago, Chile

Je vais présenter les résultats du grand programme d'observation GASPS (GaS in Protoplanetary disk Systems) sur les disques protoplanétaires avec l'instrument PACS à bord de l'observatoire spatial Herschel. Les raies de CO, OH, H₂O, et CH⁺ sont détectées. Les observations ont été modélisées avec le code de transfert radiatif *MCFOST* et le code *ProDiMo* qui tient compte à la fois du transfert de rayonnement dans le continuum et dans les raies, la chimie, et l'équilibre thermique en 2 dimensions. Les observations montrent qu'une photochimie chaude en phase gazeuse domine dans les régions internes des disques (jusqu'à ~30-50 AU) où les raies sont émises.

Les membres du consortium GASPS sont : W.R.F. Dent, W.-F. Thi, I. Kamp, J. Williams, F. Ménard, S. Andrews, D. Ardila, G. Aresu, J.-C. Augereau, D. Barrado y Navascues, S. Brittain, A. Carmona, D. Ciardi, W. Danchi, J. Donaldson, G. Duchêne, C. Eiroa, D. Fedele, C. Grady, I. de Gregorio-Molsalvo, C. Howard, N. Huelamo, A. Krivov, J. Lebreton, R. Liseau, C. Martin-Zaidi, G. Mathews, G. Meeus, I. Mendutia, B. Montesinos, A. Mora, M. Morales-Calderon, H. Nomura, E. Pantin, I. Pascucci, N. Phillips, C. Pinte, L. Podio, S. Ramsay-Howatt, B. Riaz, P. Rivière-Marichalar, A. Roberge, G. Sandell, E. Solano, I. Tilling, J.M. Torrelles, B. Vandenbusche, G. White, P. Woitke

Références

- [1] Rivière-Marichalar P. et al., A&A, 546, L8 (2012)
- [2] Podio L. et al., A&A, 545, 44 (2012)
- [3] Meeus G. et al., A&A, 544, 78 (2012)
- [4] Donaldson et al., ApJ, 753, 147 (2012)
- [5] Rivière-Marichalar P. et al., A&A, 538, L3 (2012)
- [6] Tilling I., et al., A&A, 538, 20 (2012)
- [7] Woitke P., et al., A&A, 534, 44 (2011)
- [8] Kamp I., et al., A&A, 532, 85 (2011)
- [9] Thi W.-F., et al., A&A, 503, L2 (2011)
- [10] Mathews G. S., et al., A&A, 518, L127 (2010)
- [11] Pinte C., et al., A&A, 518, L126 (2010)
- [12] Thi W.-F., et al., A&A, 518, L125 (2010)
- [13] Meeus G., et al., A&A, 518, 124 (2010)
- [14] Woitke P., et al., MNRAS, 405, L26 (2010)

Réactivité du formaldéhyde et méthylamine dans des analogues de glaces interstellaires, évolution chimique.

V. Vinogradoff, F. Duvernay, P. Theulé, G. Danger, F. Borget, et T. Chiavassa.

Laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires, Université Aix-Marseille, UMR7345 du CNRS, Centre Saint Jérôme, Avenue Escadrille Normandie-Niemen, 13397, Marseille, France.

La réaction du formaldéhyde et de la méthylamine s'inscrit dans l'étude de la complexité moléculaire induite par des réactions thermiques dans des analogues de glaces interstellaires (IS) (présenté par F. Duvernay). En effet, l'évolution chimique des grains de poussières du milieu interstellaire (MIS) est régit par l'action des rayonnements et du réchauffement lors de la transformation du nuage moléculaire vers la formation d'un système planétaire. Nous montrons que parmi les molécules présentes sur les grains, certaines ont des propriétés chimiques plus réactives permettant des réactions thermiques vers des molécules complexes à basse température. La molécule du formaldéhyde est prise comme molécule phare, détectée en phase solide dans le milieu interstellaire. H_2CO a la propriété d'avoir une double liaison $\text{C}=\text{O}$, réagissant avec des espèces nucléophiles, telles l'eau, l'ammoniac, la méthylamine (CH_3NH_2). La réaction entre formaldéhyde et ammoniac a déjà été étudié dans le laboratoire et a montré la formation de l'aminométhanol ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{OH}$)¹, ($E_{\text{act}}=4.1 \text{ kJ mol}^{-1}$) à basse température, ainsi que la formation du HMT en présence de l'acide formique ².

Nous avons alors étudié la réaction du formaldéhyde avec la méthylamine CH_3NH_2 , qui a un pouvoir basique plus fort que l'ammoniac (pK_b 3.36 comparé à 4.75 pour NH_3) et ainsi une activité nucléophile accrue. La réaction entre le formaldéhyde et la méthylamine s'avère plus rapide qu'avec l'ammoniac dû à une énergie d'activation plus basse (1.1 kJ mol^{-1})³. Ce mélange en présence d'acide formique forme un nouveau trimer stable sous forme de sel (1,3,5-triméthyle 1,3,5-triazinane). La simulation de la formation du N-méthylaminométhanol en phase solide dans le MIS a été envisagé à basse température montrant que la détection de la méthylamine dans le MIS est compromise. Nous proposons également une contribution possible du N-méthylaminométhanol entre 5.5-7.7 μm sur le spectre ISO W33A. Par ailleurs, le ratio $\text{CH}_3\text{N}^{15}\text{H}_2/\text{CH}_3\text{N}^{14}\text{H}_2$ montre un enrichissement en N^{15} non négligeable à basse température ; enrichissement que l'on retrouve dans les comètes / météorites. Le N-méthylaminométhanol peut également former, par la réaction de Strecker l'acide aminé correspondant, la sarcosine, observé dans des météorites.

Références

- [1] Bossa J.B., Theulé P., Duvernay F., Chiavassa T., 2009, ApJ, 707, 1524.
- [2] Vinogradoff V., Rimola A., Duvernay F., Danger G., Theulé P., & Chiavassa T., Phys. Chem. Chem. Phys. 14,12309-12320 (2012)
- [3] Vinogradoff V., Duvernay F., Danger G., Theulé P., Borget F., Chiavassa T. A&A 2012, accepted.

Water emission lines as diagnostics of disk winds in young low-mass protostars.

Yvart W. ¹, Cabrit S.¹ Pineau des Forêts G. ^{2 1}.

¹ *LERMA, Observatoire de Paris, CNRS, ENS, UPMC, UCP, France;*

² *Institut d'Astrophysique Spatiale, Orsay, France.*

The exact launch region of protostellar jets, and their role in extracting angular momentum from the accreting system, remain as major open questions in star formation research. It has been argued that the molecular H₂ component of jets recently observed in young protostars might trace, at least in part, a magneto-hydrodynamic (MHD) wind centrifugally launched from the dusty disk surface, at radii beyond 0.2 AU (Panoglou et al. 2012). If true, this would have crucial implications for current models of star and planet formation.

As a test of this hypothesis, we have calculated synthetic H₂O line profile predictions for a prescribed MHD disk wind solution (Casse & Ferreira 2000, Pesenti et al. 2004). We follow the out-of-equilibrium evolution of the gas temperature and chemical abundances along the disk wind streamlines, taking into account the effect of irradiation by the stellar UV and X-ray radiation, heating by ambipolar diffusion, and cooling by expansion and collisional excitation. We integrate in parallel the level populations of H₂O, and the associated gas cooling term under the escape probability formalism (Flower & Pineau des Forêts 2010), including pumping by the dust diffuse radiation field. Finally, synthetic emission spectra are calculated taking into account the (non-isotropic) velocity gradient along the line of sight.

Our synthetic H₂O spectra are compared with recent Herschel/HIFI observations of the broad component of H₂O in low-mass protostars (Kristensen et al 2010, 2011 and 2012). We show that both the line profile shapes, and the relative strength among various H₂O lines, are surprisingly well reproduced by an MHD disk wind launched out to 6-25 AU. We briefly discuss further possible tests of this model using ALMA.

Références

- [1] Panoglou D., A&A, 538, A2 (2012)
- [2] Kristensen L. E., A&A, 521, L30 (2010)
- [3] Kristensen L. E., A&A, 531, L1+ (2011)
- [4] Kristensen L. E., A&A, 542, A8 (2012)
- [5] Casse F. & Ferreira J., A&A 353, 1115 (2000)
- [6] Pesenti et al 2004, A&A 416 L9-L12
- [7] Flower D. R. & Pineau des Forêts G., MNRAS, 406, 1745 (2000)

Turbulence and Star Formation in the Antennae Galaxies

Herrera, C. N.¹, Boulanger, F.¹, Nesvadba, N.¹, Falgarone, E.² et Pineau des Forêts, G.^{1,2}

¹ Institut d'Astrophysique Spatiale, UMR 8617 du CNRS, Université Paris-Sud 11, 91405 Orsay Cedex - France

² LERMA, UMR 8112 du CNRS, École Normale Supérieure and Observatoire de Paris, 61 Avenue de l'Observatoire, 75014 Paris - France

The Antennae galaxies are a spectacular example of a burst of star formation triggered by the encounter of two galaxies. Most of the newly formed stars are observed in massive clusters (up to 10^7 Msun), dubbed super star clusters, located in the region where the two galaxies collide. The Antennae is one of the best sources to understand how the dynamics of galaxies in mergers trigger the formation of stars.

We will present spectro-imaging observations of H₂ line emission in the near-IR, performed with the VLT, and of CO(3-2) with ALMA, which highlight the key role played by turbulence. The data show that the kinetic energy of the galaxies is not thermalized in large scale shocks. It is observed to drive turbulence in the molecular ISM at a much higher level than what is observed in the Milky Way. Near-IR spectral diagnostics show that, outside of embedded stellar clusters, the H₂ line emission is powered by the dissipation of the gas turbulent kinetic energy. We relate the H₂ emission to the loss of kinetic energy required to form gravitationally bound clouds. This interpretation is supported by the discovery of a compact, bright H₂ source located where the data show the largest velocity gradient in the interaction region. The characteristics of this source suggest that we are witnessing the formation, initiated by turbulent dissipation, of a cloud massive enough to form a super star cluster. We will detail our plans to pursue this work by observing with ALMA emission lines from molecules (SiO, HNC and CH₃OH) identified in the Milky Way to form in shocks.

Références

[1] Herrera C. N., Boulanger F. & Nesvadba N. *A&A*, 534, A138 (2011)

[2] Herrera C. N., Boulanger F., Nesvadba N. and Falgarone E., *A&A*, 538, L9 (2012)

CN excitation in cold molecular clouds and in circumstellar envelope.

Yulia N. Kalugina^{1,2}, François Lique¹

¹LOMC - UMR 6294, CNRS-Université du Havre, 25 rue Philippe Lebon, BP 540,
76058, Le Havre, France

²Department of Optics and Spectroscopy, Tomsk State University, 36 Lenin av.,
Tomsk 634050, Russia

The Cyano radical molecule is one of the most widely distributed in the interstellar medium (ISM). In diffuse molecular gas, CN plays a role as a tracer of high density gas. The CN thermal lines also probe dense regions in molecular clouds, circumstellar envelopes.

Modeling of molecular emission spectra from ISM requires the knowledge of accurate rate coefficients for excitation by collisions with the most abundant species.

At low temperatures, collisional energy transfer only affects the population of the pure rotational levels of CN. We present state-to-state rate coefficients between the first 25 fine and corresponding 76 hyperfine levels of CN($X^2\Sigma^+$), being in the ground vibrational state, in collisions with H₂($j = 0$), the most abundant collisional partner in cold molecular clouds. The calculations are based on a potential energy surface calculated from highly correlated *ab initio* “coupled-cluster” methods. The new rate coefficients are the first one obtained for the CN radical in collision with H₂.

In circumstellar envelope, the cyano radical was found not to be only in the ground but also in excited vibrational states. CN($v=1$) may be produced by the photodissociation of HCN. Then, it is crucial to study the vibrational de-excitation of CN by He and H₂, the most abundant collisional partners in these media. We present the study of vibrational relaxation of CN($v=1$) by He. The calculations are based on a potential energy surface obtained at the SAPT level of theory for open shell systems. Vibrationally elastic and inelastic cross sections were calculated for total energies up to 15 000 cm⁻¹ which give, after Boltzmann thermal average, corresponding rate coefficients up to 1500 K. In addition, we performed the same study for the vibrational de-excitation of CN by Ar, in order to interpret modeling of the chemistry of circumstellar envelope performed in the laboratory of Rennes. Indeed, they were interested in the reactivity of CN($v = 0$) with carbon chains in a bath of He and Ar. Relaxation rates are then crucial for understanding the kinetics observed in the experiments.

We expect that the use of obtained rate coefficients will help significantly in the interpretation of the CN emission lines observed with current and future telescopes and also in understanding the nitrile chemistry in circumstellar envelope.

Acknowledgments. This research was supported by the CNRS national program “Physique et Chimie du Milieu Interstellaire”. We also thank the CPER Haute-Normandie/CNRT/Energie, Electronique, Matériaux..

Liste des participants

AGUILLON	François	francois.aguillon@u-psud.fr	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
ALATA	Ivan	ialata@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
ALCARAZ	Christian	christian.alcaraz@u-psud.fr	LCP - Univ. Paris Sud 11
ALVES	Marta	malves@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
ANDRÉ	Philippe	pandre@cea.fr	CEA
BACHILLER	Rafael	r.bachiller@oan.es	Observatorio Astronomico Nacional - Madrid
BACMANN	Aurore	abacmann@ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
BAKLOUTI	Donia	donia.baklouti@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
BERNARD	Jean-philippe	jean-philippe.bernard@irap.omp.eu	IRAP - Univ. de Toulouse
BERNE	Olivier	olivier.berne@gmail.com	IRAP - Univ. de Toulouse
BEROFF	Karine	karine.beroff@u-psud.fr	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
BERTIN	Mathieu	mathieu.bertin@upmc.fr	LPMAA - UPMC Paris
BIENNIER	Ludovic	ludovic.biennier@univ-rennes1.fr	Institut de Physique de Rennes
BOCCHIO	Marco	marco.bocchio@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
BONAL	Lydie	lydie.bonal@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
BONTEMPS	Sylvain	bontemps@obs.u-bordeaux1.fr	LAB - Obs. de Bordeaux
BOUCHEZ GIRET	Aurelia	abouchez@irap.omp.eu	IRAP - Univ. de Toulouse
BOULANGER	Francois	francois.boulangier@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
BRACCO	Andrea	andrea.bracco@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
BRON	Emeric	emeric.bron@obspm.fr	LUTh - Obs. de Paris / Univ. Paris Diderot
BRUNETTO	Rosario	rosario.brunetto@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
CABRIT	Sylvie	sylvie.cabrit@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris
CANOSA	André	andre.canosa@univ-rennes1.fr	Institut de Physique de Rennes
CAPRON	Michael	michael.capron@univ-rennes1.fr	Institut de Physique de Rennes
CECCARELLI	Cecilia	cecilia.ceccarelli@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
CERNICHARO	Jose	jcernicharo@cab.inta-csic.es	Centro de Astrobiología - Madrid
CHAABOUNI	Henda	henda.chaabouni@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris/Univ. Cergy-Pontoise
CHABOT	Marin	chabot@ipno.in2p3.fr	Institut de Physique Nucléaire - Orsay
CHEN	Hui-chen	hui-chen.chen@obspm.fr	GEPI - Obs. de Paris
CHIAVASSA	Thierry	thierry.chiavassa@univ-amu.fr	PIIM - Univ. Aix-Marseille
COBUT	Vincent	vincent.cobut@u-cergy.fr	LERMA, Obs. de Paris/Univ. Cergy-Pontoise
COMMERCON	Benoit	benoit.commercon@lra.ens.fr	LERMA, Obs. de Paris
CONGIU	Emanuele	emanuele.congiu@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris/Univ. Cergy-Pontoise
COUTENS	Audrey	acoutens@irap.omp.eu	IRAP - Univ. de Toulouse
DANGER	Grégoire	gregoire.danger@univ-amu.fr	PIIM - Univ. Aix-Marseille
DANIEL	Fabien	fabien128@gmail.com	Centro de Astrobiología (CSIC/INTA) - Madrid
DARTOIS	Emmanuel	emmanuel.dartois@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
DEMYK	Karine	karine.demyk@irap.omp.eu	IRAP - Univ. de Toulouse
DENIS ALPIZAR	Otoniel	otonieldenisalpizar@gmail.com	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
DESPOIS	Didier	despois@obs.u-bordeaux1.fr	LAB - Obs. de Bordeaux

D'HENDECOURT	Louis	ldh@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
DONTOT	Léo	leo.dontot@irsamc.ups-tlse.fr	LCPQ - Univ. de Toulouse
DORONIN	Mikhail	misha@doronin.org	LPMAA - UPMC Paris
DUBERNET	Marie-lise	marie-lise.dubernet@obspm.fr	LPMAA - UPMC Paris
DULIEU	Francois	francois.dulieu@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris/Univ. Cergy-Pontoise
DUMOUCHEL	Fabien	fabien.dumouchel@univ-lehavre.fr	LOMC - Univ. Le Havre
DUVERNAY	Fabrice	fabrice.duvernay@univ-amu.fr	PIIM - Univ. Aix-Marseille
ELLINGER	Yves	ellinger@lct.jussieu.fr	LCT - UPMC Paris
FALGARONE	Edith	edith.falgarone@ens.fr	LERMA, Obs. de Paris/ENS
FALVO	Cyril	cyril.falvo@u-psud.fr	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
FAURE	Alexandre	afaure@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
FAYOLLE	Edith	fayolle@strw.leidenuniv.nl	Observatoire de Leiden
FEAUTRIER	Nicole	nicole.feautriier@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris
FERAUD	Géraldine	geraldine.feraud@u-psud.fr	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
FILLION	Jean-hugues	jean-hugues.fillion@upmc.fr	LPMAA - UPMC Paris
GAMBOA	Antonio	angasu@gmail.com	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
GARDEZ	Aline	aline.gardez@upmc.fr	LPMAA - UPMC Paris
GAVILAN	Liseth	liseth.gavilan@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris/Univ. Cergy-Pontoise
GERIN	Maryvonne	maryvonne.gerin@ens.fr	LERMA, Obs. de Paris
GHESEQUIERE	Pierre	pierre.ghesquiere@univ-montp2.fr	LUPM - Univ. Montpellier
GODARD	Benjamin	bgodard@cab.inta-csic.es	Centro de Astrobiología (CSIC/INTA) - Madrid
GODARD	Marie	marie.godard@nasa.gov	NASA Goddard Space Flight Center
GOUNELLE	Matthieu	gounelle@mnhn.fr	Muséum National d'Histoire Naturelle - Paris
GRATIER	Pierre	gratier@iram.fr	IRAM
GRENIER	Isabelle	isabelle.grenier@cea.fr	Université Paris Diderot
GRUET	Sébastien	sebastien.gruet@synchrotron-soleil.fr	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
GRY	Cecile	cecile.gry@oamp.fr	Laboratoire d'Astrophysique de Marseille
GUILLEMIN	Jean-claude	jean-claude.guillemin@ensc-rennes.fr	Institut des Sciences Chimiques de Rennes
GUILLOTEAU	Stephane	guilloteau@obs.u-bordeaux1.fr	LAB - Obs. de Bordeaux
GUSDORF	Antoine	antoine.gusdorf@googlemail.com	LERMA/LRA, Obs. de Paris/ENS
GUZMAN	Viviana	guzman@iram.fr	IRAM
HABART	Emilie	emilie.habart@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
HENNEBELLE	Patrick	patrick.hennebelle@ens.fr	CEA
HERRERA	Cinthya	cherrera@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
HILY-BLANT	Pierre	pierre.hilyblant@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
HINCELIN	Ugo	ugo.hincelin@obs.u-bordeaux1.fr	LAB - Obs. de Bordeaux
HOCHLAF	Majdi	hochlaf@univ-mlv.fr	MSME - Univ. Paris Est Marne-la-Vallée
HUET	Thérèse	therese.huet@univ-lille1.fr	PhLAM - Univ. Lille 1
IFTNER	Christophe	the_real_iftsurf@hotmail.com	IRSAMC - LCPQ - Univ. de Toulouse
JALLAT	Auréliie	jallat@ipno.in2p3.fr	Institut de Physique Nucléaire - Orsay
JOBLIN	Christine	christine.joblin@irap.omp.eu	IRAP - Univ. de Toulouse
KAHANE	Claudine	claudine.kahane@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
KALUGINA	Yulia	yulia.kalugina@univ-lehavre.fr	LOMC - Univ. Le Havre
KLEINER	Isabelle	isabelle.kleiner@lisa.u-pec.fr	LISA - Univ. Paris-Est-Créteil/Paris Diderot
KOEHLER	Melanie	mkoehler@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11

KOKKIN	Damian	damian.kokkin@irap.omp.eu	IRAP - Univ. de Toulouse
KOUTROUMPA	Dimitra	dimitra.koutroumpa@latmos.ipsl.fr	LATMOS - UPMC/UVSQ
KRIM	Lahouari	lahouari.krim@upmc.fr	LADIR - UPMC Paris
LALLEMENT	Rosine	rosine.lallement@obspm.fr	GEPI - Obs. de Paris
LANZA	Mathieu	mathieu.lanza@univ-lehavre.fr	LOMC - Univ. Le Havre
LATTELAIS	Marie	lattelais@lct.jussieu.fr	LCT - UPMC Paris
LE BERTRE	Thibaut	thibaut.lebertre@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris
LE GAL	Romane	romane.legal@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
LE PETIT	Franck	franck.lepetit@obspm.fr	LUTh - Obs. de Paris
LE PICARD	Sébastien	sebastien.le-picard@univ-rennes1.fr	Institut de Physique de Rennes
LEFLOCH	Bertrand	lefloch@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
LEMAIRE	Jean louis	jean-louis.lemaire@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris/Univ. Cergy-Pontoise
LESAFFRE	Pierre	pierre.lesaffre@lra.ens.fr	LERMA/LRA, Obs. de Paris/ENS
LIQUE	François	francois.lique@univ-lehavre.fr	LOMC - Univ. Le Havre
LOISON	Jean-christophe	jc.loison@ism.u-bordeaux1.fr	Institut des Sciences Moléculaires - Bordeaux
LOPEZ SEPULCRE	Ana	ana.sepulcre@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
MAILLARD	Jean-Pierre	maillard@iap.fr	Institut d'Astrophysique de Paris
MARGULES	Laurent	laurent.margules@univ-lille1.fr	PhLAM - Univ. Lille 1
MARTIN	Céline	celine.martin@univ-amu.fr	PIIM - Univ. Aix-Marseille
MASCETTI	Joëlle	j.mascetti@ism.u-bordeaux1.fr	Institut des Sciences Moléculaires - Bordeaux
MICHAUT	Xavier	xavier.michaut@upmc.fr	LPMAA - UPMC Paris
MINISSALE	Marco	marco.minissale@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris/Univ. Cergy-Pontoise
MIVILLE-DESCHENES	Marc-antoine	mamd@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
MOKRANE	Hakima	hakima.mokrane@obs.u-bordeaux1.fr	LAB - Obs. de Bordeaux
MOMFERRATOS	Georgios	giorgos@lra.ens.fr	LERMA/LRA, Obs. de Paris/ENS
MONTILLAUD	Julien	julien.montillaud@helsinki.fi	University of Helsinki
MONTMERLE	Thierry	montmerle@iap.fr	Institut d'Astrophysique de Paris
MORET-BAILLY	Jacques	jmo@laposte.net	Retraité Univ, de Bourgogne
MOTIYENKO	Roman	roman.motienko@univ-lille1.fr	PhLAM - Univ. Lille 1
MOUDENS	Audrey	audrey.moudens@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris/Univ. Cergy-Pontoise
NOBLE	Jennifer	jennifer.noble@univ-amu.fr	PIIM - Univ. Aix-Marseille
PADOVANI	Marco	marco.padovani@lra.ens.fr	LERMA/LRA, Obs. de Paris/ENS
PAGANI	Laurent	laurent.pagani@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris
PARDANAUD	Cédric	cedric.pardanaud@univ-amu.fr	PIIM - Univ. Aix-Marseille
PARISEL	Olivier	parisel@lct.jussieu.fr	LCT - UPMC Paris
PAUZAT	Francoise	pauzat@lct.jussieu.fr	LCT, UPMC Paris
PERNET	Amelie	pernet@lct.jussieu.fr	LCT - UPMC Paris
PETY	Jérôme	pety@iram.fr	IRAM
PHILIPPE	Laurent	laurent.philippe@upmc.fr	LPMAA - UPMC Paris
PIERGIORGIO	Casavecchia	piero@dyn.unipg.it	Università degli Studi di Perugia
PILME	Julien	pilme@lct.jussieu.fr	LCT - UPMC Paris
PINTO	Cecilia	cecilia.pinto@oamp.fr	Laboratoire d'Astrophysique de Marseille
PIRALI	Olivier	olivier.pirali@synchrotron-soleil.fr	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
PIRIM	Claire	claire.pirim@chemistry.gatech.edu	Georgia Institute of Technology
PUSPITARINI	Lucky	lucky.puspitarini@obspm.fr	GEPI - Obs. de Paris

RIST	Claire	clairenoelrist@gmail.com	IPAG - Grenoble
RISTORCELLI	Isabelle	isabelle.ristorcelli@irap.omp.eu	IRAP - Univ. de Toulouse
ROMANZIN	Claire	claire.romanzin@u-psud.fr	LCP - Univ. Paris Sud 11
ROUEFF	Evelyne	evelyne.roueff@obspm.fr	LUTH - Obs. de Paris
ROUSSEAU	Patrick	prousseau@ganil.fr	CIMAP - Caen
SABBAH	Hassan	hassan.sabbah@irap.omp.eu	IRAP - Univ. de Toulouse
SAURY	Eleonore	eleonore.saury@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
SCHNEIDER	Ioan	ioan.schneider@univ-lehavre.fr	LOMC - Univ. Le Havre
SCHWELL	Martin	martin.schwell@lisa.u-pec.fr	LISA - Univ. Paris-Est-Créteil/Paris Diderot
SIMS	Ian	ian.sims@univ-rennes1.fr	Institut de Physique de Rennes
SPIELFIEDEL	Annie	annie.spieliedell@obspm.fr	LERMA, Obs. de Paris
STOECKLIN	Thierry	t.stoecklin@ism.u-bordeaux1.fr	Institut des Sciences Moléculaires - Bordeaux
TALBI	Dahbia	dahbia.talbi@univ-montp2.fr	LUPM - Univ. Montpellier
TAQUET	Vianney	vianney.taquet@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
TEILLET-BILLY	Dominique	dominique.billy@u-psud.fr	ISMO - Univ. Paris-Sud 11
THEULE	Patrice	patrice.theule@univ-amu.fr	PIIM - Univ. Aix-Marseille
THI	Wing-fai	thiw@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
TROLEZ	Yann	yann.trolez@ensc-rennes.fr	Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes
VALDIVIA	Valeska	valeska.valdivia@obspm.fr	LERMA - Obs. de Paris
VAN DISHOECK	Ewine	ewine@strw.leidenuniv.nl	Leiden Observatory, Leiden University
VERSTRAETE	Laurent	laurent.verstraete@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
VINOGRADOFF	Vassilissa	vass_vino@yahoo.fr	PIIM - Univ. Aix-Marseille
WIESENFELD	Laurent	laurent.wiesefeld@obs.ujf-grenoble.fr	IPAG - Grenoble
YSARD	Nathalie	nathalie.ysard@ias.u-psud.fr	IAS - Univ. Paris Sud 11
YVART	Walter	walter.yvart@obspm.fr	LERMA - Obs. de Paris
ZICLER	Eléonore	zicler@lct.jussieu.fr	LCT - UPMC Paris