

# Caractérisation et réactivité de systèmes moléculaires d'intérêt atmosphérique, planétologique et astrophysique : projets

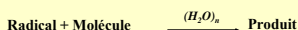
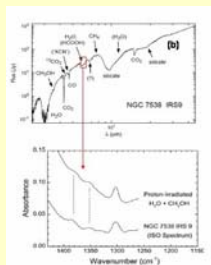
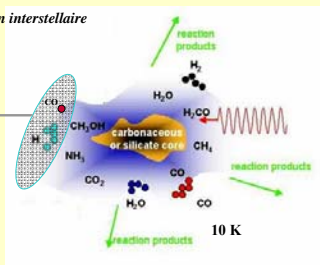
Lahouari Krim, David Jacquemart, Nelly Lacome

## Astrochimie radicalaire: des milieux dilués à la phase condensée\*.

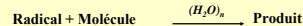
\* En collaboration avec Ph. Parent et C. Laffon LCPMR, F. Pauzat et M. Lattalais LCT

### Isoler une réaction chimique

gain interstellaire



### Réaction radical-molécule neutre. De la matrice de gaz rares à la matrice de glace

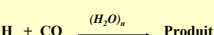
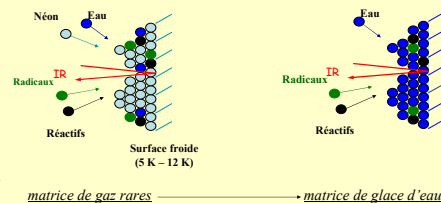


### Cadre du projet: Source radicalaire

Décharge  $\mu$ -onde 2.45 GHz / 100W

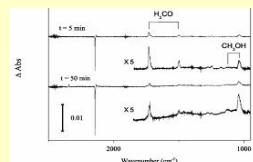
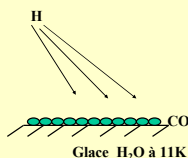
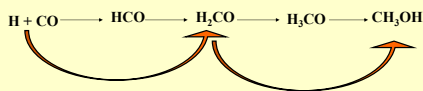


M = H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>....



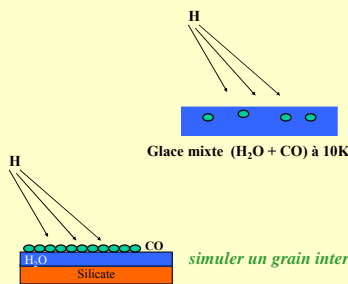
E. Herbst, J. Phys. Chem. A, 109 (2005) 4017.

### Hydrogénation de CO catalysée par H<sub>2</sub>O



N. Watanabe, A. Nagata, H. Hidaka, A. Kouchi, Planet. Space. Sci. 54 (2006) 1107.

### Réactions radicalaires à la surface de la glace



### Projets à plus long terme

#### Réaction radical-molécule neutre:

Rôle de l'hydrogénation de CO<sub>2</sub>: Formation de HOOC

Origine de la fonction acide dans le milieu interstellaire

#### Réaction radical-radical :

Besoin d'une double sources radicalaires

Formation in situ de la glace H<sub>2</sub>O : H + O + H

### Modélisation des élargissements collisionnels de H<sub>2</sub>CO à partir d'une surface d'énergie potentielle calculée ab initio

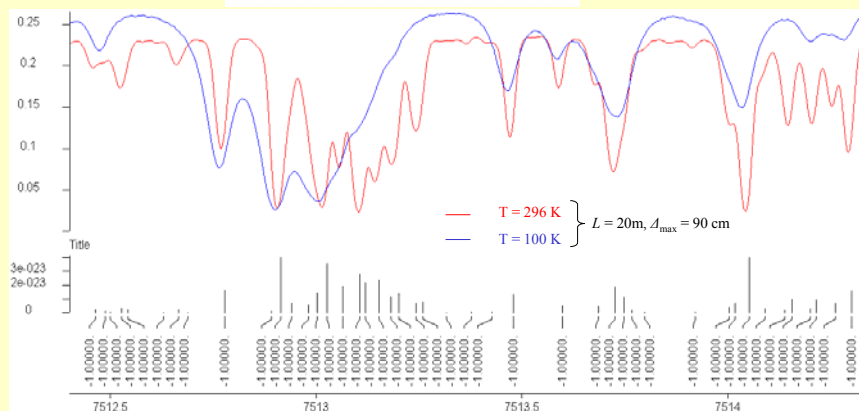
- Nécessité pour les applications atmosphériques de connaître les élargissements collisionnels de H<sub>2</sub>CO par N<sub>2</sub> et O<sub>2</sub> dans la gamme 300 – 200 K
- Impossibilité de faire des mesures expérimentales : tension de vapeur trop faible, polymérisation ...
- Seul recours : calcul théorique par méthode Robert – Bonamy. Actuellement méthode utilisant une modélisation simple des interactions moléculaires
- Développement théorique nouveau : calcul puis utilisation de surfaces d'énergie potentielle calculées ab initio

en collaboration avec R.R. Gamache (Université du Massachussets) et E. Alikhani.

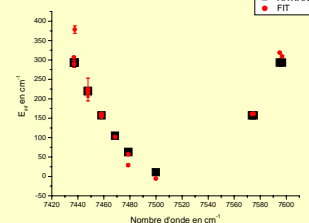
### Modélisation de la dépendance en température des spectres du méthane entre 1 et 2 $\mu$ m

- **Objectif:** Estimation des niveaux d'énergie inférieurs des transitions entre 1 et 2  $\mu$ m (seules 205 transitions sont actuellement attribuées sur 29000).
- **Intérêt:** L'estimation des niveaux d'énergie inférieurs rendra possible l'utilisation des bases de données obtenues à température ambiante pour des applications à basse température.

$$k_{\sigma}^N(T) = k_{\sigma}^N(T') \frac{Z_{tot}(T')}{Z_{tot}(T)} e^{\frac{hcE_k}{k_B} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T'} \right)}$$

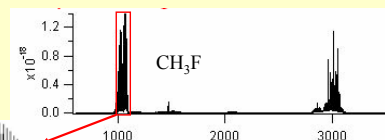
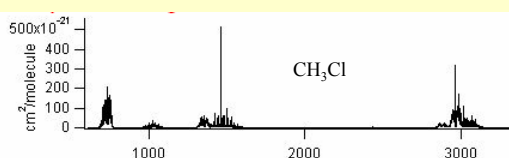


### Résultats préliminaires à partir de raies connues



en collaboration avec E. Lellouch et C. de Bergh (Observatoire de Paris-Meudon)

### Modélisation des signatures IR de molécules atmosphériques du type CH<sub>3</sub>X



en collaboration avec I. Kleiner (LISA, Creteil)