

## Réunion du 9 mai 2001

Le développement des instruments dans le domaine millimétrique et submillimétrique, mais aussi à d'autres longueurs d'ondes renouvelle l'intérêt de collaborations entre physiciens, chimistes et astrophysiciens. Des possibilités nombreuses de découvertes de nouvelles molécules, et d'une meilleure exploitation des espèces déjà connues, existent pour les années à venir.

Plus précisément, pour assurer l'exploitation optimale des instruments actuels comme l'IRAM, et préparer le travail sur les instruments du futur, comme ALMA et Herschel Space Observatory, il est important de mieux tisser les liens entre la communauté de la physique fondamentale et l'astrophysique. L'exploitation des données issues de ces instruments demande en effet la connaissance de nombreux paramètres physiques fondamentaux. Les paramètres spectroscopiques des espèces détectées figurent bien évidemment parmi les besoins, ainsi que les taux d'excitation collisionnelle et les constantes de vitesse de réactions chimiques par exemple. Mais les besoins sont bien plus vastes, comme le décrit plus finement le document de prospective du programme PCMI, que l'on peut consulter sur son site :

<http://www.ias.fr/pcmi/>

La réunion du 9 mai était organisée pour aller dans cette direction. Voici un résumé des discussions et des principales actions issues de cette journée.

### **Spectroscopie :**

Un laboratoire européen (LEA) est en cours de constitution, auquel deux laboratoires français (Lille et Orsay) participent, pour des applications de la spectroscopie à l'astrophysique et la physique de l'atmosphère (contact : J. Demaison)

Parmi les projets se trouvent la spectroscopie de certains hydrures, ainsi que les modes basses fréquences de grosses molécules carbonées (Chaînes, PAHs, etc.)

Un dialogue s'est engagé autour des bases de données existantes et en projet : fiabilité, facilité d'utilisation, degré de complétude, etc. Les experts ont souligné que ces bases ne peuvent être totalement fiables et qu'une collaboration étroite avec une équipe expérimentée est préférable.

A très haute fréquence, au delà du THz, les données de laboratoire manquent souvent de précision. Un gros effort est à faire de ce côté pour la mission Herschel Space Observatory.

Pour le calcul des modes de vibration des agrégats dans l'infrarouge moyen et lointain, la nécessité de prendre en compte l'anharmonicité du potentiel a été soulignée.

La question des spectres dans les domaines visible, UV et IR proche a été abordée brièvement. Ce thème pourrait faire l'objet d'une autre journée de réflexion, centrée autour de questions comme :

- Comment améliorer la connaissance des bandes visibles et UV des radicaux interstellaires ?
- Les cations PAHS et les bandes diffuses interstellaires larges
- Les raies non identifiées dans l'UV (spectres FUSE par exemple)

### **Chimie quantique et Modélisation des taux de collision et de réaction:**

Les progrès des méthodes de chimie quantique ont rendu obsolètes une partie des données sur lesquelles s'appuient les modèles astrophysiques. Plusieurs groupes ont proposé de calculer les taux d'excitation rotationnelle et ro-vibrationnelle par l'hydrogène de molécules interstellaires. Là aussi, l'intérêt de pouvoir disposer d'une base de données regroupant les surfaces de potentiel avec les méthodes de calcul employées, les sections efficaces et constantes de vitesse, et des programmes de calcul, a été évoqué.

La question du rôle des électrons pour l'excitation a été posée. Il faudrait aussi évaluer ce besoin.

De nouveaux développements méthodologiques ont été présentés, qui ouvrent des voies prometteuses pour les calculs de gros systèmes.

Les travaux de chimie théorique, calculs de chemins de réactions chimiques, mesures de taux de réactions sont très actifs dans PCMI.

Les réactions faisant intervenir des radicaux et même des atomes paraissent possibles au niveau expérimental. L'étude de réactions voisines fait apparaître des comportements semblables dans certains cas mais l'obtention de constantes de vitesse précise demande une étude individuelle de chaque réaction. Des mesures dans une large gamme de température sont nécessaires pour la modélisation de la chimie interstellaire. Est-il possible d'extrapoler les résultats obtenus sur certaines réactions "modèles" pour toute une classe de réactions? (ensemble des réactions C + chaîne carbonée par exemple?). Il apparaît important d'identifier des réactions critiques pour la chimie interstellaire, soit parce qu'elles jouent un rôle dominant, soit comme modèle d'une classe de réactions.

### **Bases de données et priorités de la discipline :**

⇒ Un projet d'outil de base de données (gestion et accès), étudié par le CNES en collaboration avec le CESR a été présenté. De nombreux laboratoires pourraient y contribuer, pour préciser les fonctions que remplirait cet outil, et aussi apporter des données. Un premier prototype pourrait être prêt en 2003 (C. Joblin).

L'intérêt d'une base de données regroupant les surfaces de potentiel avec les méthodes de calcul employées, les sections efficaces et constantes de vitesse, et des programmes de calcul, a été évoqué (M.L. Dubernet).

⇒ Le besoin d'une présentation claire des objectifs astrophysiques, des méthodes de diagnostic des conditions physiques et donc des priorités pour les besoins en données fondamentales, s'est fait ressentir. Un groupe de travail, animé par A. Dutrey, a été mis en place, pour rédiger un avant-projet d'ici un an, qui sera présenté lors du prochain colloque du programme national PCMI. Les membres sont A. Dutrey, J. Cernicharo, J. Crovisier, A. Faure, N. Feautrier, M. Gerin, E. Roueff et P. Valiron.

### **Programme :**

F. Boulanger	Introduction
J. Cernicharo	Spectroscopie et astrophysique
J. Demaison/G. Wlodarczak	Spectroscopie dans le domaine THz
C. Joblin	Projet de base de données du CESR
C. Joblin	Raies d'émission des PAHs dans le submm
Y. Bénilan	Etudes en laboratoire de chaînes carbonées
J. Crovisier	La base de données BASMOL
A. Dutrey	ALMA
P. Parneix	Prédictions des modes de vibration des agrégats carbonés

#### *Discussion sur la spectroscopie*

P. Valiron	Point sur les calculs théoriques pour l'astrophysique
M.L. Dubernet	Taux de collisions : méthodes et projets
G. Jolicard	Développements à l'observatoire de Besançon
A. Canosa	Etudes expérimentales de réactions chimiques
N. Feautrier	Développements au Damap. Théorie et expérience

#### *Discussion sur la chimie et les collisions*

## Liste des participants :

Nom	Institut	courriel
Yves Bénilan	LISA (Créteil)	benilan@lisa.univ-paris12.fr
Dominique Bockelée-Morvan	Arpeges (Obs. Meudon)	dominique.boclelee@obspm.fr
Nathalie Boudin	LPPM (Orsay)	nathalie.boudin@ppm.u-psud.fr
François Boulanger	IAS (Orsay)	boulanger@ias.fr
Philippe Bréchnignac	LPPM (Orsay)	philippe.brechignac@ppm.u-psud.fr
André Canosa	PALMS Rennes	andre.canosa@univ-rennes1.fr
José Cernicharo	CSIC (Madrid)	cerni@astro.iem.csic.es
Frikia Cheikh	LETMEX (Nice)	Djazair@rigel.letmex.fr
Jean-Maurice Coanga	LPMA	jean-maurice.coanga@lpma.jussieu.fr
Jacques Crovisier	Arpeges, Obs. Meudon	jacques.crovisier@obspm.fr
Emmanuel Dartois	IAS (Orsay)	emmanuel.dartois@ias.u-psud.fr
Jean Demaison	PhLAM (Lille)	demaison@pop.univ-lille1.fr
Marie-Lise Dubernet	Obs. Besançon	mld@obs-besancon.fr
Anne Dutrey	LAOG, Obs. Grenoble	anne.dutrey@obs.ujf-grenoble.fr
Yves Ellinger	LETMEX (Nice)	ellinger@letmex.unice.fr
Pierre Encrenaz	DEMIRM, Obs. Paris	pierre.encrenaz@Obspm.fr
Nicole Feautrier	Damap, Obs. Meudon	nicole.feautrier@obspm.fr
David Fossé	Radioastronomie, ENS	david.fosse@lra.ens.fr
Shindo François	LISA (Créteil)	shindo@lisa.univ-paris12.fr
Dolorès Gauyacq	LPPM (Orsay)	dolores.gauyacq@ppm.u-psud.fr
Maryvonne Gerin	Radioastronomie, ENS	gerin@lra.ens.fr
Christine Joblin	CESR (Toulouse)	christine.joblin@cesr.fr
Georges Jolicard	Obs. Besançon	georges.jolicard@obs-besancon.fr
Azzedine Lakhlifi	Obs. Besançon	azzedine.lakhlifi@obs-besancon.fr
Jean-Louis Lemaire	Damap, Obs. Meudon	jean-louis.lemaire@obspm.fr
Van Oanh Nguyen Thi	LPPM (Orsay)	van-oanh.nguyenthi@ppm.u-psud.fr
Laurent Pagani	DEMIRM, Obs. Paris	laurent.pagani@obspm.fr
Pascal Parneix	LPPM (Orsay)	pascal.parneix@ppm.u-psud.fr
Michel Pérault	Radioastronomie, ENS	michel.perault@ens.fr
Evelyne Roueff	DAEC, Obs. Meudon	evelyne.roueff@obspm.fr
André Schriver	LPMA	andre.schriver@lpma.jussieu.fr
Annie Spielfiedel	Damap, Obs. Meudon	annie.spielfiedel@obspm.fr
Lydia Tchang-Brillet	Damap, Obs. Meudon	lydia.tchang-brillet@obspm.fr
Pierre Valiron	LAOG, Obs. Grenoble	pierre.valiron@obs.ujf-grenoble.fr
Georges Wlodarczak	PhLAM (Lille)	gwlodarc@phlam.univ-lille1.fr