

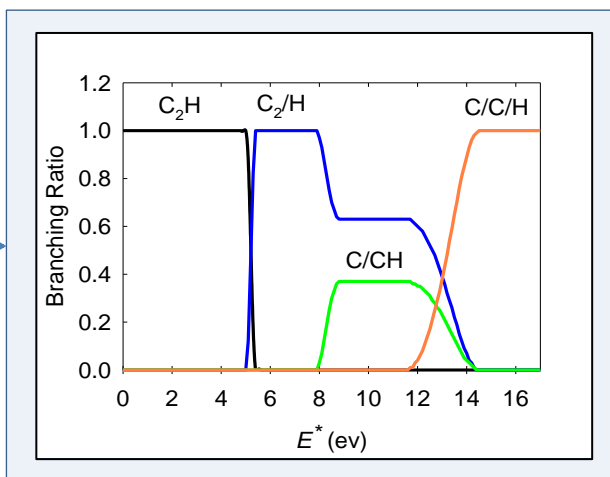
WP4- Gaz Phase

Octobre 2018

M.Chabot pour AGAT

Motivation

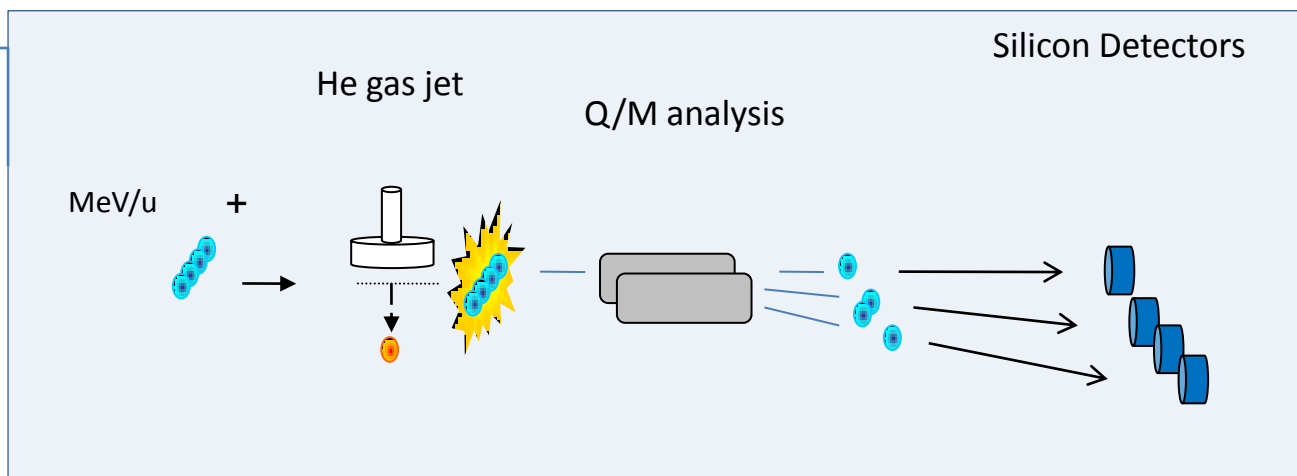
Fournir à la communauté (KIDA) des RB semi empiriques pour la chimie en phase gazeuse des espèces carbonées.



Chabot+2013

Exemple de BDC pour le complexe intermédiaire C_2H^* .

AGAT apparatus:



Reporting JWST – WP4 –octobre 2017

- C_nN-

Excitation and fragmentation of C_nN⁺ (n=1-3) molecules in collisions with He atoms at intermediate velocity; fundamental aspects and application to astrochemistry.

Thèse Paris Sud, T. Mahajan (28/9/18) sous la direction de K. Béroff

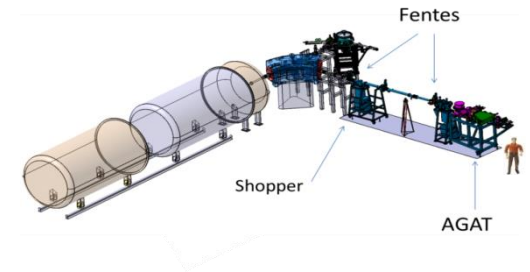
Semiempirical breakdown curves of C₂N(+) and C₃N(+) molecules - application to products branching ratios predictions of physical and chemical processes involving these adducts

IdBarkach, T., Mahajan, T., Chabot, M., et al. Molecular Astrophysics, 12, 25 (2018)

Reactants	Products	Model BR (abs.err)	KIDA BR	E _a (eV)	ΔE (eV)
C ₂ ⁺ + N	C ⁺ + CN	1	1	8.24	1.85
CN ⁺ + C	C ⁺ + CN*	0.72(+ 0.07/ -0.05)	1	8.86	2.47
	C ₂ ⁺ + N*	0.28(+ 0.05/ -0.07)			0.62
N ⁺ + C ₂	CN ⁺ + C*	0.40(0.05)		11.02	2.16
	C ⁺ + CN*	0.39(0.05)			4.63
	C ₂ ⁺ + N*	0.21(0.04)	1		2.78
C ₃ ⁺ + N	[C ₂ N ⁺] + C	1		5.45	0.93
C ₃ ⁺ + CN	[C ₂ N ⁺] + C	1		5.43	0.91
C ⁺ + CNC	[C ₂ N ⁺] + C	0.58(0.06)		6.02	1.5
	C ₂ ⁺ + CN	0.30(0.06)			0.59
	C ₃ ⁺ + N	0.12(0.04)			0.57
C ⁺ + CCN	[C ₂ N ⁺] + C	0.58(0.06)	0.7 [±]	6.1	1.58
	C ₂ ⁺ + CN	0.30(0.06)	0.3		0.67
	C ₃ ⁺ + N	0.12(0.04)			0.65
CN ⁺ + C ₂	[C ₂ N ⁺] + C ^f	0.35(+ 0.03/ -0.35)		7.4	2.88
	C ₂ ⁺ + CN ^f	0.28(+ 0.03/ -0.28)	1		1.97
	C ⁺ + [C ₂ N]*	0.23(+ 0.77/ -0.03)			1.38
	C ₃ ⁺ + N ^f	0.12(+ 0.02/ -0.12)			1.95
N ⁺ + C ₃	[C ₂ N ⁺] + C	0.33(+ 0.15/ -0.04)		8.28	3.76
	C ₂ ⁺ + CN	0.25[+ 0.15/ -0.03]			2.85
	C ⁺ + [C ₂ N]	0.22(+ 0.14/ -0.03)			2.26
	C ₃ ⁺ + N	0.11(+ 0.13/ -0.02)			2.83
	CN ⁺ + C ₂ ^f	0.09(+ 0.02/ -0.09)			0.88

-> ~ 50 rapports de branchement dans KIDA

Pas d'effet sur la chimie TMC1 - les C_nN sont le reflet des C_n ; mais, C₂N est prédit fort (comme CN et C₃N) alors qu' il n'y a pas de rapport d'observations, dans les nuages denses, pour C₂N a contrario des CN et C₃N.



Motivation :

La chimie bottom-up implique toujours les CH_y dans le MIS.

Dans le diffus : $\text{C}^+ + \text{H}_2$ puis ...

Dans les « nuages denses » : $\text{C}^+ + \text{H}_2$ (et on coupe la lumière) (chimie dépendante du temps)

Dans les PDR : photo érosion de la matière carbonée = injection en continu d'un flux de CH_4 dans le réseau chimique (e.g Alata 2015, Dartois 2017).

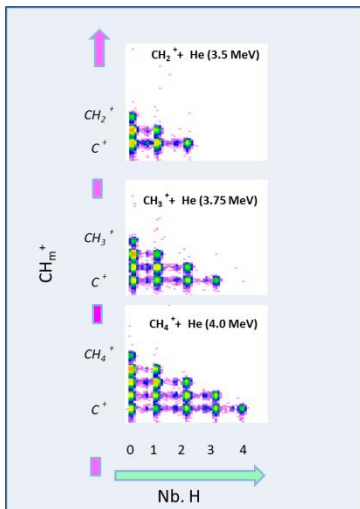
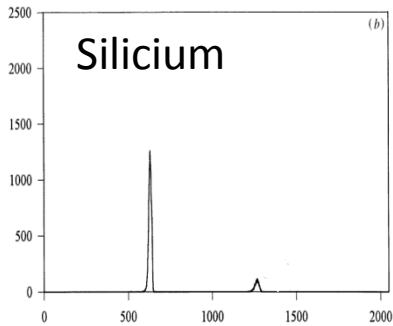


Nb: ceci est du spoil de la thèse de Tijani (soutenance programmée été 2019).

On est à l'arrache à cause du problème de mise en place des crédits en début de programme (6 mois), vive l'administration ...

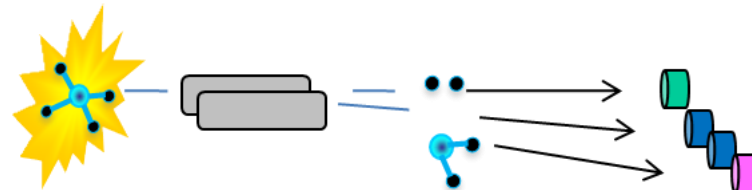
CH_y On en est ou ? :

Les données sont réduites.

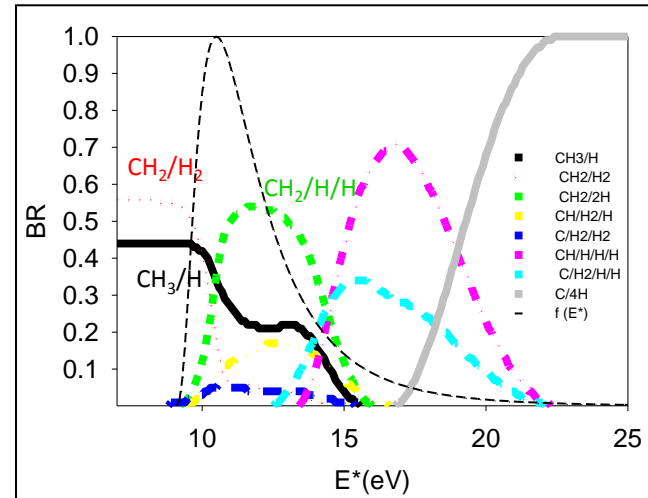
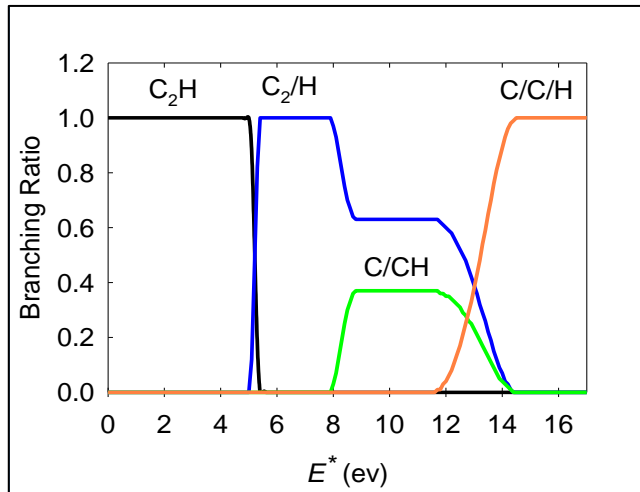


Espèces	Nb de RB	Espèces	Nb de RB	Espèces	Nb de RB
CH ₂	4	CH ₃	6	CH ₄	9
CH ₂ ⁺	6	CH ₃ ⁺	10	CH ₄ ⁺	14
CH ₂ ⁺⁺	7	CH ₃ ⁺⁺	11	CH ₄ ⁺⁺	17
CH ₂ ⁺⁺⁺	6	CH ₃ ⁺⁺⁺	11	CH ₄ ⁺⁺⁺	16
CH ₂ ⁺⁺⁺⁺	5	CH ₃ ⁺⁺⁺⁺	8	CH ₄ ⁺⁺⁺⁺	14

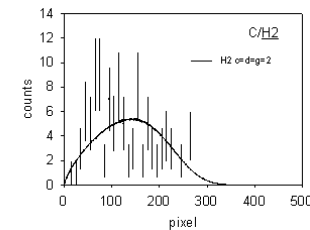
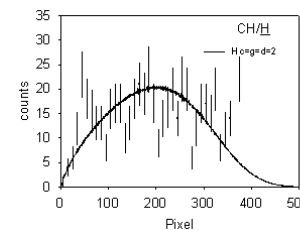
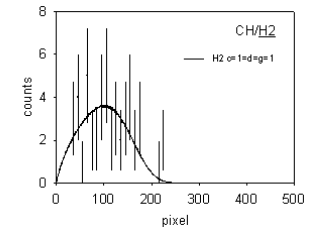
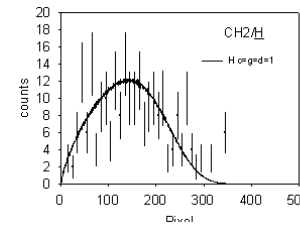
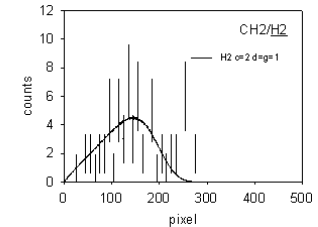
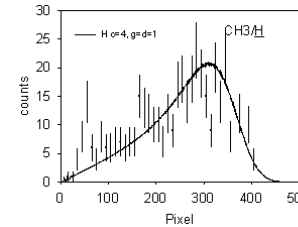
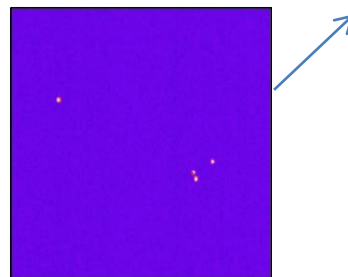
Les calculs de structure nécessaire pour construire les BDC sont presque fini (col Tijani et Univ Autonome Madrid). Il manque quelques barrières pour les chargés.



BDC du CH₄



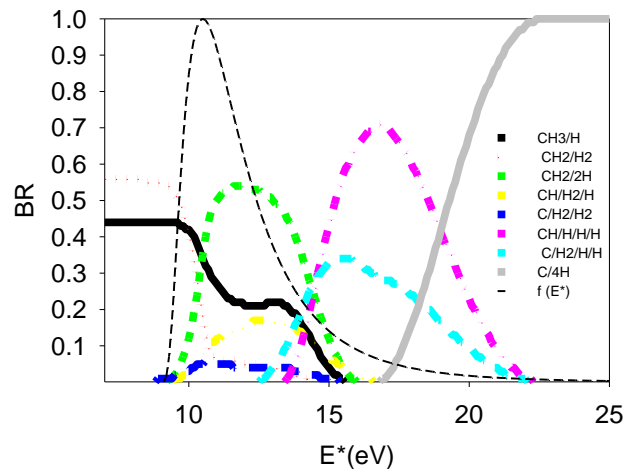
Le CH₄ est particulier en ce que la voie CH₃/H est peuplée même pour des énergies auxquelles les autres molécules carbonées produisent des voies à trois fragments.



Ca marche bien avec les photons et la DR

Sonde	γ^a (10.2eV)	Model	γ^a (10.5eV)	Model	DR ^b (12.8eV)	Model	HVC	Model
CH ₄	0	0	0	0	0	0	13 ± 2	13
CH ₃ /H	42 ± 5	40	26 ± 4	34	18 ± 3	22	33 ± 5	22
CH ₂ /H ₂	48 ± 5	32	17 ± 5	17	6 ± 1	4	7 ± 1	11
CH ₂ /H/H	3 ± 8	20	48 ± 3	35	51 ± 3	51	24 ± 4	31
C/H ₂ /H ₂	0	5	0	8	2 ± 1	4	2 ± 1	4
CH/H ₂ /H	7	4	9	5	23 ± 1	17	8 ± 1	9
CH/H/H/H	0	0	0	0	0	0	6 ± 2	5
C/H ₂ /H/H	0	0	0	0	0	2	4 ± 3	4
C/H/H/H/H	0	0	0	0	0	0	4 ± 4	2

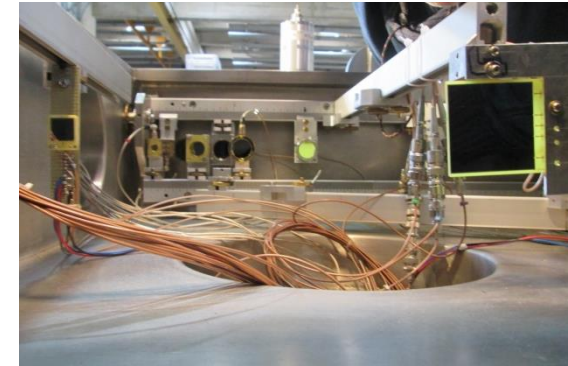
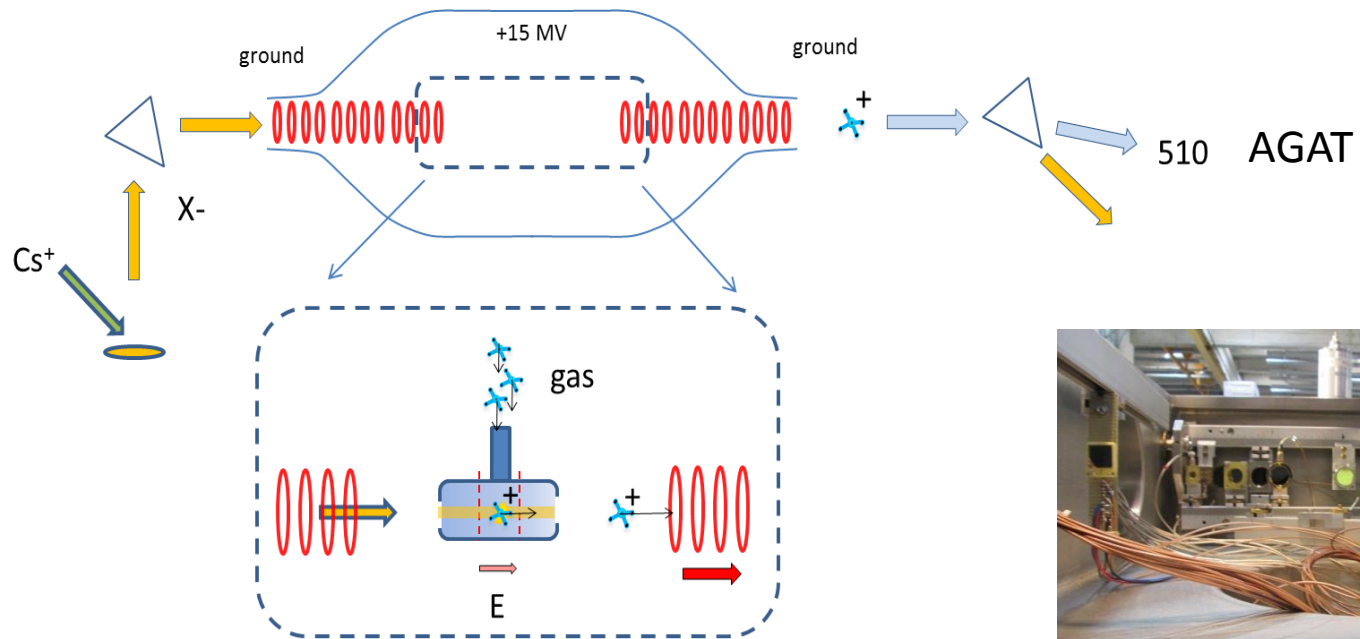
a : Gans, B et al PCCP 2011
b : Thomas, D et al J. Phys Chem 2013



Futur...

Andromède ne peut pas produire des molécules à une énergie suffisante au-delà des CHy mais le Tandem si !

Projet **SIMATT** (*Source d'Ion Moléculaire au Terminal d'un Tandem*)



2018/2019 études
2019/2020 construction
2020/2021 expériences (C₂H_y ?)
2020/2022 réduction

RB photodissociation MIS

Produit densité spectrale -section efficace Leiden

