

## Questions et commentaires pour Dahbia Talbi

### Commentaire de Valentine Wakelam (n°13) :

De nouveaux taux de collision d'excitation pour HNC/HCN par François Lique ramènent le rapport d'abondance observé dans les nuages à 1.

### Question de Thierry Stoecklin (n°14) :

Tu n'as pas mentionné la méthode des trajectoires classiques mais elle constitue je crois toujours une alternative très satisfaisante tant en termes de temps de calcul que de niveau d'exactitude même pour des réactions comprenant des molécules relativement grosses.

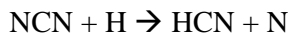
Tout à fait, mais pour un peu limiter le sujet qui est très vaste en raison du grand nombre d'approches qui existent pour traiter de la dynamique des noyaux, j'ai choisi de ne parler que des approches qui ont été le plus utilisées pour calculer les taux des réactions des bases de données astrochimiques (OSU, UMIST et KIDA). Mais dans la version écrite du cours je donne la référence d'une revue très exhaustive sur les méthodes de dynamique quantique et des trajectoires classiques revue qui liste toutes les références nécessaires.

D'autre part, tu semblais faire une différence importante de complexité entre la capture adiabatique et la méthode PST. Pourtant ce sont des méthodes qui requièrent des temps de calcul très similaires et elles offrent le même niveau d'exactitude. Elles utilisent toutes les deux seulement la longue portée du potentiel intermoléculaire tant au niveau de leur version la plus simple et la plus utilisée.

La PST est une approche certes de capture mais pour moi plus rigoureuse puisque l'on y considère la conservation des énergies ( $E$ ) et des moments angulaires ( $J$ ) qui sont alors traités rigoureusement. On peut faire un traitement d'état à état. Ça me semble plus rigoureux qu'un simple traitement de capture où l'on ne tient compte que du potentiel attractif à longue distance et de la formation du complexe stable sans considérer les produits. La théorie de capture ne permet d'ailleurs pas de calculer des rapports de branchement alors que la PST si.

### Question de Pascale Desgroux (n°15) :

La chimie théorique a montré que  $\text{CH} + \text{N}_2$  conduisait au radical  $\text{NCN}$  à haute température (en combustion) puis à  $\text{HCN}$  selon les réactions :



Est-ce que le radical  $\text{NCN}$  pourrait être une espèce probable en astrochimie ?

Il s'agit ici d'une chimie à très haute température comme on pourrait rencontrer dans les chocs ou dans les régions internes des disques protoplanétaires. Pourquoi pas. Ceci dit si cette molécule devait exister on ne pourrait la détecter dans le domaine radio car elle ne possède pas de moment dipolaire.

### Commentaire de Françoise Pauzat (n°17) :

Même si les méthodes ab initio restent incontournables pour les cas difficiles, les méthodes de la fonctionnelle de la densité sont utilisables et utilisées dans une majorité de cas de réactions astrochimiques. Même s'il faut rester vigilant, elles ne peuvent être ni stigmatisées ni rejetées.

Là aussi j'ai dû faire un choix sur les méthodes de calcul électronique à présenter et comme par ailleurs je pense que les fonctionnelles de la densité les plus couramment implémentées dans les programmes de chimie théoriques et donc les plus utilisées pour faire de la réactivité chimique ne sont pas adaptées pour décrire les états de transition (en réactivité astrochimique on est souvent confronté à des barrières très faibles), j'ai choisi de ne pas parler des méthodes de la fonctionnelle de la densité.

Les densités de HCN/HNC observées dans divers environnements sont celles de la phase gazeuse. Celles calculées ne tiennent compte que des mécanismes de phase gazeuse. Entre les deux, pourrait-il y avoir des mécanismes de collage/piégeage par les glaces/grains qui inversent les populations de cette phase gazeuse ou les magnifient suivant l'environnement (par exemple glacé ou non) ?

Oui tout à fait. Je précise bien dans ma conclusion que le modèle astrochimique utilisé pour expliquer la formation en phase gazeuse de HCN et HNC ne peut que rendre compte d'un rapport d'abondance HCN/HNC de l'ordre de l'unité. Donc soit il y a un problème observationnelle, soit il faut trouver des explications du côté d'une chimie sur grains/glaces. Maintenant si l'on se refait un commentaire de Valentine et bien il semble que le problème venait plutôt des observations et que le rapport d'abondance HCN/HNC observé a été mal évalué. Il n'y a peut-être plus de problème de rapport d'abondance HCN/HNC anormal à élucider et le modèle astrochimique dans ce cas la reproduit bien les observations.

**Commentaire de Jean-Christophe Loison (n°18) :**

Il faut se méfier de l'effet subjectif de la précision des chiffres significatifs données par le calcul.