

Discussion session « Experimental and theoretical developments and perspectives »

Chairman : Thierry Chiavassa

Following the last session of this workshop, a round table have been performed and the scientific exchanges are mostly reproduced here, in french.

T. Chiavassa : Les développements expérimentaux et théoriques doivent aider les observateurs à mieux connaître les environnements ou objets astrophysiques. Ainsi un des enjeux réside dans les mesures de taux de réaction, de constantes de réaction, de sections efficaces de photodissociation de molécules... Au cours de cet atelier, on a vu que les anions tenaient une place particulière. Quels types de systèmes seraient-ils intéressant d'étudier à l'avenir ? Quelles difficultés présentent leurs études ?

V. Vuitton : Il y a très peu de données concernant la détection des ions négatifs or ils sont à la base de la croissance moléculaire. Sur Titan, les espèces les plus lourdes sont des espèces négatives.

A. Canosa : Nous avons débuté une campagne sur l'étude de CN^- à T_{ambiante} , avec différents réactifs (HC_3N) mais dans le futur il faudra mesurer cette réaction à basse température.

K. Béroff : Le taux a t'il été mesuré pour cette réaction ?

A. Canosa : Effectivement de mémoire, le taux de réaction était de $\sim 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

A. Bergeat : Cela prend du temps de faire ne serait-ce qu'une seule mesure de réaction ! Aussi il serait intéressant d'orienter nos recherches vers des réactions ciblées.

F. Pauzat : Les calculs prennent aussi du temps aussi, surtout pour les anions !

F. Spiegelman : Les problèmes d'attachement/détachement électronique rendent difficiles le traitement théorique des anions.

D. Teillet-Billy : CN a une forte affinité électronique.

T. Chiavassa : Les expériences en labo pourraient-elles permettre de connaître l'âge des objets astrophysiques ? Quels travaux pour quels systèmes peut-on envisager ? (exemple : $HNCO$ ou OCN^- comme traceur d'objet).

Dartois : Les modélisateurs ont également des horloges chimiques.

LeBourlot : Le problème des modèles dépendant du temps c'est qu'il faut des conditions initiales, et elles sont arbitraires !

E. Dartois : Le problème se pose en particulier pour les atmosphères car le réseau chimique n'atteint pas l'équilibre en raison des temps trop courts ; quid si on a une évolution cyclique (genre Mars) ?

J. LeBourlot : Alors c'est plus facile !

M. Gérin : Il existe des développements théoriques sur l'évolution des objets avec des modèles de dynamique des fluides (code magnéto-hydrodynamique) qui pourrait avec un couplage à des codes de chimie théorique permettre dans le futur d'aboutir aux conditions initiales. Il faudrait tester des approches sur des objets où on connaît l'âge (étalonnage par rapport à d'autres méthodes de datation).

A. Dutrey : Les méthodes de datation ne sont pas fiables ; on mesure la durée mais pas le temps zéro.

T. Chiavassa : Si on regarde maintenant l'évolution de la matière ; comment et où se forment les grosses molécules ?

M. Gérin : On pense qu'elles se forment sur les grains, sous l'effet d'un réchauffement de ces derniers. Cela dit on a des problèmes d'identification de ces molécules quand la taille augmente (croissance énorme du nombre de raies), ALMA fournira plein de raies, il faudra mener les études d'identification en laboratoire pour pouvoir identifier ces raies et les molécules auxquelles elles sont associées.

C. Engrand : On ne sait pas encore comment s'est formée la matière organique dans les météorites, est-ce à partir de composés organiques observés dans le milieu interstellaire, ou est-ce que la chimie s'est faite totalement dans le système solaire ? Pourquoi la matière organique est-elle très deutérée, est-ce justement la preuve d'un héritage interstellaire ? Si elle se forme dans les régions externes du système solaire, quelles sont les conditions physiques et chimiques ? En particulier pour l'IOM (matière organique insoluble), est-ce le résultat d'une interaction avec le rayonnement cosmique ? Il reste encore beaucoup de questions ouvertes.

F. Puzat : Il y a possibilité de formation dans la météorite ; quelle preuve avons-nous de cela ? si elles étaient formées à la surface elles seraient fragilisées par le rayonnement.

C. Engrand : Non, la matière organique insoluble n'est pas fragile.

L. Remusat : Pour répondre à Françoise Puzat, la formation in situ dans les grains micrométriques apparaît improbable. Pour l'IOM, les choses ne sont pas claires..

J. Mascetti : Pour information, on a fait des expériences avec des PAH sur la glace. On observe qu'on a une meilleure réactivité quand le PAH est *dans* la glace. On observe une espèce de solvation/complexation qui augmente le taux de réactivité par photochimie ($\lambda > 230\text{nm}$) et permet la production de PAHs oxygénés.

L. Remusat : Pour obtenir de la Matière organique insoluble, il ne faut pas partir de PAH trop gros ou alors il faut les casser (maximum 4 cycles).

The discussion had to stop here because of the schedule.

