

Compte-rendu de l'atelier : Les glaces astrophysiques : observations, modèles, expériences de laboratoires

L'atelier conjoint Groupement de Recherche 3533 Edifices Moléculaires Isolés et Environnés (EMIE; INP) et PN PCMI 2019 " Les glaces astrophysiques: observations, modèles, expériences de laboratoires" s'est déroulé les 03-04 OCTOBRE 2019 au CNES à PARIS (<https://atelier-glaces.sciencesconf.org>)

L'objectif de l'atelier était de réunir, sur deux jours, les chercheurs s'intéressant aux glaces astrophysiques ou désireux de s'y intéresser. La qualité des oraux a été soulignée, ainsi que l'effort de contextualisation astrophysique des résultats présentés.

Orateurs invités :

M. Bertin (LERMA, Paris)
P. Boduch (CIMAP, Caen)
E. Dartois (ISMO, Orsay)
F. Dulieu (LERMA, Cergy-Pontoise)
F. Duvernay (PIIM, Marseille)
J. Noble (PIIM, Marseille)
F. Pauzat (LCT, Paris)
A. Simon (LCPQ, Toulouse)
V. Taquet (Arcetri Astrophysical Observatory, Florence)
C. Toubin (PhLAM, Lille)
V. Wakelam (LAB, Bordeaux)
S. Zamith (LCAR Toulouse)

Orateurs sélectionnés :

F. Calvo (LiPhy, Grenoble)
H. Chaabouni (LERMA, Cergy-Pontoise)
G. Danger (PIIM, Marseille)
P. Ghesquière (The Open University, GB)
S. Indrajith (CIMAP, Caen)
O. Poch (IPAG, Grenoble)

Le programme était diversifié, avec présentations orales invitées ou sélectionnées, deux sessions posters incluant une présentation flash en 2 minutes, et une table ronde en deux temps.

69 personnes se sont inscrites à l'atelier, incluant doctorant(e)s et postdoctorant(e)s. Les participant(e)s avaient des profils variés, théoriciens, modélisateurs, expérimentateurs et observateurs, émergeant à PCMI et au GDR EMIE.

Cet atelier a été soutenu par le CNRS et par le CNES à travers le GDR EMIE, le PN PCMI ainsi que par l'Institut des Sciences Moléculaires (ISM Bordeaux). Il a été organisé par Alicja Domaracka (CIMAP, Caen) (domaracka@ganil.fr)
Géraldine Féraud (LERMA, Paris) (geraldine.feraud@sorbonne-universite.fr)
Alexis Markovits (LCT, Paris) (alexis.markovits@sorbonne-universite.fr)
Joëlle Mascetti (ISM, Bordeaux) (joelle.mascetti@u-bordeaux.fr)
Céline Toubin (PhLAM, Lille) (celine.toubin@univ-lille.fr)
La gestion financière a été assurée par Salem TACINE (laboratoire LCT).

Les fichiers pdf des présentations sont mis à la disposition de toute la communauté, sur le site internet de l'atelier : <https://atelier-glaces.sciencesconf.org/program>

Résumé des exposés et des discussions des tables rondes :

Les tables rondes ont inclus trois grands thèmes :

1. Structure et composition des glaces
2. Evolution des glaces
3. Modèles astrochimiques

Pour chacun de ces thèmes, les organisateurs ont défini une liste de questions soumises à la réflexion des participants avant l'atelier. Les tables rondes se sont déroulées en deux temps. Dans un premier temps, les participants se sont inscrits au thème de leur choix, et une discussion de 45 minutes s'est tenue sur chacun de ces 3 thèmes, en parallèle. Une organisatrice de l'atelier a animé chacun des thèmes. Dans un deuxième temps, les conclusions associées à chaque thème ont été restituées à l'ensemble des participants, et des discussions ont suivi. Ce format de table ronde a rencontré un franc succès, favorisant de nombreux échanges entre les participants.

Voici les principales conclusions, incluant une partie des thèmes exposés par les orateurs :

Thème 1 : Structure et composition des glaces

Les observations astrophysiques ont permis d'identifier six molécules composant les manteaux glacés, autour d'étoiles jeunes. Des difficultés persistent quant à l'interprétation des observations, par exemple sur le profil des bandes IR. La haute résolution spectrale et la haute sensibilité de la mission spatiale JWST sont attendues pour la détection des molécules minoritaires comme les COMs (Complex Organic Molecules).

L'observation des glaces dans les disques protoplanétaires est actuellement naissante, et SPICA pourra apporter de nouvelles données sur l'émission des glaces dans l'IR lointain. JWST permettra d'aller vers la comparaison des propriétés des glaces des nuages moléculaires aux disques protoplanétaires.

La caractérisation de la structure des glaces d'intérêt astrophysique devient de plus en plus fine. En ce qui concerne la structure de la glace d'eau, l'apport des observations et expériences dans l'IR lointain a été souligné. Leur porosité est également estimée par des expériences de diffusion de neutrons, accompagnées de modélisations théoriques. L'interaction entre les PAH et la glace eau a été récemment caractérisée, expérimentalement et théoriquement. On note d'ailleurs la volonté des théoriciens d'étudier, au-delà de la glace d'eau pure, des glaces composites. La structure de la glace d'eau est un facteur important dans la réactivité des espèces dans les glaces.

Pour finir, la structure des grains de poussière est également primordiale, car la présence de défauts influence l'adsorption des molécules sur ces grains, comme démontré par une étude expérimentale et théorique.

Thème 2 : Evolution des glaces

Concernant l'évolution des glaces, la première question a porté sur l'évolution de leur structure avec la température et le temps, d'amorphe à cristalline. Si les glaces d'eau détectées jusqu'à présent ont des spectres IR caractéristiques de structures amorphes (avec un degré de porosité inconnu), il peut exister dans certaines régions chaudes ou sur des comètes des glaces cristallines, mais avec le temps, ces glaces s'amorphisent. Il y a donc un besoin de modèles/mesures cinétiques de l'évolution des glaces avec la température. On constate également expérimentalement que l'irradiation de glaces cristallines à 10K provoque leur amorphisation, mais aussi un enrichissement de la phase gazeuse. La façon dont les glaces sont modifiées par la température et par les rayonnements influe sur leur dynamique: effets

mécaniques (évolution des pores et défauts) et réarrangement du réseau de liaisons hydrogène auront un impact sur la diffusion (en surface ou dans le bulk) et la désorption, et donc sur la réactivité et l'équilibre phase solide/phase gaz.

Une première approche de compréhension de ces effets peut être abordée via des calculs sur gros clusters d'eau et des expériences en matrices cryogéniques ou sur des surfaces modèles.

Une deuxième question a soulevé les différents rôles que peut jouer la glace d'eau, comme solvant (stabilisation d'espèces réactives, effet d'écrantage), comme réactif (réactions d'oxydation) ou comme catalyseur de réactions (complexification moléculaire). Parmi les réactions les plus importantes, sont évoquées:

- les réactions d'hydrogénation (mesure des vitesses de diffusion de H en surface à 10K, irradiation avec H⁺: réactions dans le bulk à plus haute température)
- les réactions radicalaires (expériences RPE à associer à des mesures IR pour suivre à la fois la diffusion (largeur signal RPE) et la structure moléculaire).

Un couplage entre dynamique moléculaire classique et méthode quantique constitue un bon outil pour simuler la réactivité. Les composés inclus dans les glaces astrophysiques, notamment les radicaux, jouent un rôle clé dans l'évolution des glaces. La compréhension des mécanismes de formation des COMs, par l'expérience et la modélisation, reste une question majeure.

Les réseaux chimiques se complexifient donc, et incluent à présent de petites molécules organiques. La chimie de surface joue également un rôle clé dans l'interaction de molécules gazeuses avec la glace d'eau. Des expériences ont montré que la chimie de surface est plus rapide que la diffusion et seule la porosité permettait aux molécules d'accéder aux « sous-couches ». En plus des réseaux chimiques incluant le carbone, on note de nouveaux apports sur les réseaux chimiques incluant l'azote.

Les échanges se produisant de la glace vers la phase gazeuse ont été évoqués dans un troisième point. Les irradiations de glaces d'eau avec des photons X ou avec des analogues de rayons cosmiques enrichissent la phase gazeuse. La composition de la glace est un facteur important gouvernant ces enrichissements. La désorption des COMs a également été évoquée à plusieurs reprises, que ce soit comme molécule intacte ou fragmentée. Les produits d'irradiation des COMs sont d'ailleurs actuellement caractérisés plus finement, que ce soit bien sûr par leur masse (jusqu'aux macromolécules), mais aussi par leur isomérie.

Une quatrième question a soulevé le problème du rôle des charges (transferts d'électrons ou de protons, chimie ion/neutre) sur l'ensemble des processus physico chimiques se produisant à la surface ou dans la glace. Peu d'espèces chargées ont été détectées (HCOO⁻, NH₄⁺, OCN⁻) mais ce sont probablement des processus importants. La difficulté à inclure ces espèces chargées dans les analogues théoriques de glaces a été énoncée.

Enfin ont été rapidement évoqués les états de spin nucléaire ortho/para, toujours très mal compris malgré des efforts de modélisation et des expériences (modèle Meudon, expériences REMPI en phase gaz, et matrices cryogéniques).

En conclusion, à cause du manque de données d'observations sur les glaces (cf thème 1), la mission JWST (prévue pour 2021) devrait apporter beaucoup d'informations nouvelles pour nourrir les études expérimentales, théoriques et de modélisation astrochimique. En attendant, les mesures en laboratoire et les calculs devront essayer d'apporter des pièces au puzzle pour comprendre la diversité moléculaire du milieu interstellaire!

Thème 3 : Modèles astrochimiques

Tous les modélisateurs astrochimiques présents à l'atelier ont participé à cette table ronde, ainsi que plusieurs expérimentateurs.

Tout d'abord la question de la définition d'un bon analogue de glaces astrophysiques a été posée. La présence d'eau sous forme compacte amorphe a été unanimement soulignée, mais l'abondance et l'agencement des autres molécules sont plus incertains : par exemple, les difficultés observationnelles et expérimentales liées à la localisation du monoxyde de carbone dans la glace ont été soulignées. Il a été proposé que modélisateurs et expérimentateurs travaillent conjointement sur des glaces avec les mêmes propriétés.

Les modélisateurs astrochimistes ont exprimé plusieurs besoins en données théoriques et expérimentales sur la surface des glaces, comme par exemple les énergies d'adsorption sur différents substrats représentatifs (eau, CO₂, CO), les énergies de diffusion des molécules stables et des radicaux, et les préfacteurs exponentiels. Le problème de l'intrication des processus de diffusion et de désorption a émergé, ainsi que de nombreuses limitations expérimentales liées à ces mesures, c'est pourquoi l'aide de la modélisation théorique a été proposée. En ce qui concerne les processus en volume, les taux de photodissociation et rapports de branchement dans les glaces sont très mal contraints, alors qu'ils sont importants pour l'évolution astrochimique des glaces. Pour finir, les échanges de la phase solide vers la phase gazeuse sont une évolution clef des modèles astrochimiques.

Cette table ronde a par ailleurs mis en évidence la pluralité des données expérimentales face à l'inertie des implémentations dans les modèles, ce qui a fait émerger le besoin de faciliter le transfert de ces données expérimentales ou théoriques vers les modèles. Deux bases de données ont par ailleurs été présentées, Kida et Ghosst.

L'idée de contraindre les modèles avec des données expérimentales a été énoncée. La volonté de mettre à disposition de la communauté les modèles astrochimiques a transparu, comme illustré par le modèle NAUTILUS sur FRAMAGIT, le modèle GRAINOBLE sur github. Il est ainsi ressorti de cette table ronde l'importance de multiplier les discussions entre expérimentateurs, théoriciens, observateurs et modélisateurs, afin de créer ou d'entretenir les liens qui les unissent, pour assurer le rôle central que jouent les modèles astrochimiques.

Conclusion générale:

Les derniers résultats de la communauté française sur les glaces du milieu interstellaire et plus ponctuellement sur les glaces du système solaire, ont été présentés au cours de cet atelier. Cette manifestation commune entre le GDR EMIE et le PN PCMI s'est avérée très fructueuse, comme montré par les nombreux inscrits émargeant à l'une ou aux deux communautés, ainsi par les riches discussions qui en ont découlé. Les expertises des théoriciens, modélisateurs et expérimentateurs de ces 2 communautés, qu'elles se recouvrent ou soient complémentaires, qu'elles concernent les solides moléculaires ou de plus petits systèmes comme les agrégats, sont toutes nécessaires pour augmenter notre compréhension des glaces astrophysiques.