



Une vue étendue de la nébuleuse moléculaire tête de cheval, obtenue en combinant des images du télescope au sol VISTA et de Hubble.

# L'UNIVERS MOLÉCULAIRE

Observations et modélisations en laboratoire

## L'ESSENTIEL

Superposer l'observation des nuages moléculaires et leur modélisation devrait permettre d'aider à répondre aux questions suivantes : Comment les étoiles se forment-elles ? Quelle est l'influence de la composition chimique des nuages dans ce processus de formation ? Comment les molécules organiques présentes dans ces nuages se forment-elles ?

À partir de la connaissance des processus physico-chimiques mis en jeu dans les nuages moléculaires interstellaires, il est possible d'identifier les espèces interstellaires, de mesurer leurs abondances et de comprendre comment évolue la matière interstellaire. Les travaux de physique moléculaire sont donc d'une importance cruciale afin de modéliser les conditions physiques des nuages moléculaires. En particulier, les derniers résultats montrent l'importance de disposer rapidement des coefficients de vitesse d'excitation collisionnelle et de réaction précis, pour une grande partie des molécules interstellaires, afin d'exploiter pleinement les observations qui nous arrivent.

L'auteur est le lauréat 2014 du prix du Jeune Enseignant-Chercheur de la Société française d'astronomie et d'astrophysique (SFZA).

Le télescope *Herschel* et l'interféromètre ALMA ouvrent de nouvelles fenêtres d'observation pour des longueurs d'onde allant de l'infrarouge lointain au submillimétrique, et ceci avec des résolutions spatiales et spectrales jusque-là inégalées. Afin de tirer le meilleur parti de ces observations, une bonne connaissance des processus physico-chimiques pouvant se produire dans le milieu interstellaire s'avère indispensable.

**N**ous commencerons par une phrase que l'on retrouve dans un grand nombre de thèses dans le domaine de l'astrophysique moléculaire : « l'espace entre les étoiles n'est pas vide ». Nous savons maintenant que le milieu interstellaire (MIS) contient une part importante de la masse d'une galaxie telle que la nôtre (environ  $\sim 10\%$ ) sous forme de structures plus ou moins étendues : les nuages interstellaires. Bien que sa densité soit très faible, la matière interstellaire joue un rôle central dans l'évolution de l'Univers. C'est à partir de celle-ci que se forment les étoiles par effondrement gravitationnel. Au cours de leur vie et surtout pendant la phase finale de leur évolution, les étoiles rejettent une partie de leur matière dans le milieu interstellaire. Cette matière est enrichie en éléments lourds (espèces chimiques autres que l'hydrogène et l'hélium) par les réactions thermonucléaires qui ont lieu au sein des étoiles. De nouvelles étoiles se forment dans ce milieu interstellaire enrichi et ainsi de suite. La matière interstellaire se compose de gaz atomique, moléculaire et ionisé à diverses températures, ainsi que de poussières. La phy-

sique et la chimie interstellaires revêtent un grand intérêt car les conditions qui règnent dans le MIS sont très différentes de celles des laboratoires terrestres. Ainsi, les processus élémentaires sont souvent plus visibles en raison de la faiblesse des den-



sités et des températures. Le gaz interstellaire est essentiellement constitué d'hydrogène et d'hélium (respectivement 90 et 10 % en nombre de particules), mais d'autres atomes plus lourds sont aussi présents, le plus souvent à l'état de traces. Les nuages interstellaires les plus denses,

qui sont chimiquement les plus complexes, sont constitués d'un mélange de poussières et de gaz. Les poussières sont des grains très fins, dont la taille est de l'ordre d'un micromètre. Elles sont constituées d'un noyau de silicates et de graphites, enrobé de molécules et/ou de glaces d'eau ou d'ammoniac. Le gaz interstellaire présent dans les nuages denses est, lui, majoritairement constitué de molécules relativement simples (assemblage de quelques atomes). Les nuages plus diffus sont quant à eux majoritairement constitués d'espèces atomiques. On dénombre aujourd'hui près de 200 molécules différentes dans le MIS. Les nuages interstellaires ont des densités moyennes typiques de quelques dizaines à quelques millions de particules/cm<sup>3</sup> et leur température varie généralement entre 5 et 300 K.

Observer ces nuages moléculaires et modéliser les observations devrait permettre de répondre aux questions simples suivantes :

- Comment les étoiles se forment-elles ?
- Quelle est l'influence de la composition chimique des nuages interstellaires dans les processus de formation d'étoiles ?

● Comment les molécules complexes et les molécules organiques (composés chimiques que l'on trouve dans les organismes vivants) se forment-elles ?

Afin de déterminer les conditions physiques et chimiques qui règnent dans les nuages moléculaires, les informations spectroscopiques sont bien souvent le seul moyen dont nous disposons. En effet, les spectres des rayonnements électromagnétiques que nous captions de ces nuages nous renseignent sur les processus physiques et chimiques qui se produisent dans ces régions de l'espace.

Ainsi, la spectroscopie fait aujourd'hui partie des outils de base de l'astrophysique. La plupart des observatoires possèdent des spectrographes qui permettent de mesurer le spectre des objets célestes. La plupart des télescopes sont ainsi couplés à des spectrographes.

De ce point de vue, l'astrophysique moléculaire vit une période extrêmement faste quant aux moyens d'observation et d'analyse spectroscopique. Le télescope spatial *Herschel* et l'interféromètre ALMA ont ouvert de nouvelles fenêtres d'observation en couvrant un domaine de longueurs d'onde allant de l'infrarouge lointain au domaine submillimétrique, et cela avec des résolutions spatiales et spectrales inégalées. Nous disposons donc actuellement de moyens extrêmement performants pour détecter le rayonnement lumineux provenant des nuages interstellaires.

La spectroscopie est l'étude des différentes longueurs d'onde qui composent la lumière. Ces différentes longueurs d'onde portent la trace des éléments chimiques traversés par la lumière ou qui l'émettent. Leur étude permet de décrire la constitution des nuages moléculaires. Afin de tirer le meilleur parti des observations astronomiques et des spectres interstellaires associés, une bonne connaissance des processus physico-chimiques mis en jeu dans ces milieux s'avère indispensable. On entend par processus physico-chimiques l'ensemble des processus (transferts d'énergie par collisions, réactions chimiques, interactions rayonnement-matière...) qui visent à transformer la matière interstellaire et/ou à apporter de l'énergie aux particules interstellaires.

Ces dernières années, la communauté scientifique a entrepris des efforts importants, tant sur le plan expérimental que théorique, afin d'obtenir ces données de physico-chimie moléculaire. Cela a permis des avancées significatives. Cependant, le nombre et surtout la complexité des processus à étudier rend le travail à effectuer encore immense.

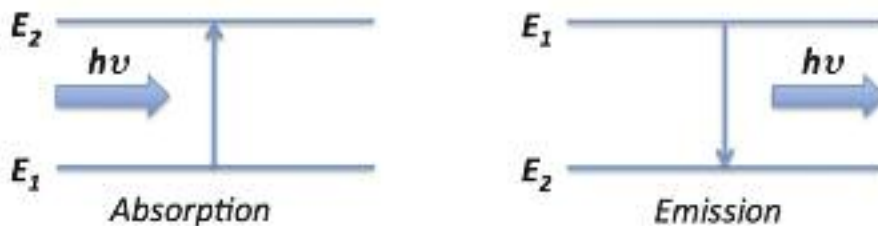
et décimétriques, particulièrement utile pour la détection des molécules dans le MIS, a ainsi autorisé de nombreux progrès sur la connaissance chimique de ce milieu.

L'identification d'une molécule à partir d'un spectre observationnel passe ainsi par l'étude en laboratoire de son spectre d'émission et d'absorption afin de pouvoir retrouver les raies de cette molécule dans le relevé spectral des nuages interstellaires. La précision demandée est ex-

## Spectroscopie

Ensemble des méthodes et techniques d'études générales des rayonnements émis, absorbés ou diffusés par la matière.

Une molécule ou un atome, passant d'un état énergétique (1) à l'état énergétique (2), peut absorber ou émettre un photon d'énergie définie :



Ainsi, l'analyse spectroscopique permet de relier la longueur d'onde du rayonnement émis ou absorbé aux propriétés de l'ensemble des atomes, molécules de la matière considérée.

© F. Lique

## IDENTIFICATION DES ESPÈCES INTERSTELLAIRES

Le premier objectif, permis par l'analyse spectroscopique de la lumière émise ou absorbée, est de déterminer la composition chimique du MIS. Pour cela, on sait que chaque molécule a sa propre signature spectrale. Les premières espèces moléculaires identifiées dans le MIS furent les radicaux CN, CH et CH<sup>+</sup>. Leur détection fut possible grâce aux raies observées en absorption dans le domaine visible (les longueurs d'onde qui sont absorbées se présentent sous l'aspect de raies sombres dans le spectre de la lumière provenant d'une étoile). L'identification de ces raies, déjà connues en laboratoire, a permis de conclure à la présence de ces radicaux. Actuellement, la spectroscopie micro-onde est l'un des principaux moyens par lesquels les constituants de l'Univers sont déterminés depuis la Terre. L'avènement de la radioastronomie en ondes centimétriques

trêmement grande. Dans les relevés spectraux, les raies se comptent par centaines et même par milliers ; il est donc nécessaire d'avoir une précision « spectroscopique » pour pouvoir identifier, de façon certaine, les molécules interstellaires. Les approches théoriques ne sont actuellement pas en mesure de fournir ce type de précision. Les mesures expérimentales sont donc utilisées. Plusieurs laboratoires en France et dans le monde travaillent sur l'obtention de ces spectres. Les difficultés sont multiples. Tout d'abord, il est difficile, voire impossible, de reproduire les conditions physiques des nuages moléculaires en laboratoire et donc parfois tout simplement de créer en laboratoire certaines molécules interstellaires. Ensuite, il faut pouvoir mesurer le spectre avec une précision suffisante pour que les longueurs d'onde des raies puissent être connues avec une quasi-certitude. Actuellement, les spectres des molécules interstellaires sont

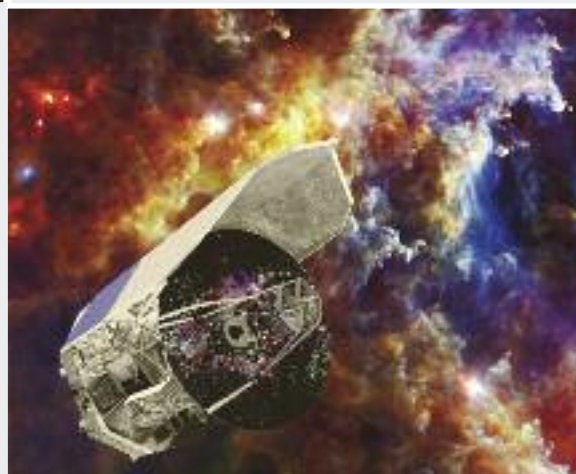


## HERSCHEL

*Herschel* est un satellite spatial développé par l'Agence spatiale européenne (Esa). Il avait pour but de réaliser des observations astronomiques dans les domaines de l'infrarouge lointain et du submillimétrique pour étudier entre autres la formation des étoiles ou la chimie du MIS. Le télescope à bord d'*Herschel* avait une taille de 3,5 m de diamètre, soit le plus grand jamais réalisé pour une application spatiale. Grâce à ce grand télescope, *Herschel* a pu voir des détails beaucoup plus fins que ses prédécesseurs et a ainsi fourni à la communauté d'astrophysique moléculaire des observations avec une résolution spatiale et spectrale jusque-là inégalée. *Herschel* a été lancé en mai 2009 et s'est arrêté comme prévu en juin 2013 après l'évaporation complète de l'hélium superfluide qui servait au refroidissement des instruments.

## ALMA

L'Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) est un radiotélescope observant les ondes millimétriques installé dans le désert d'Atacama au Chili. Il est composé de 66 antennes d'un diamètre compris entre 7 et 12 mètres qui peuvent être écartées de 16 km à 150 m, qui fonctionnent en interférométrie (méthode qui exploite les interférences intervenant entre plusieurs ondes électromagnétiques) et qui donnent à ALMA une formidable capacité de zoom. ALMA est actuellement l'instrument le plus performant existant pour l'observation des nuages moléculaires. ALMA a été inauguré en 2013, mais des observations scientifiques, avec un réseau partiel, ont commencé dès 2011.



connus avec précision, y compris ceux des molécules complexes composées d'un grand nombre d'atomes. Les études spectroscopiques en laboratoire permettent encore d'identifier chaque année de nouvelles molécules.

### ABONDANCE DES ESPÈCES INTERSTELLAIRES

Une fois les molécules interstellaires identifiées, la deuxième étape consiste à déterminer leur abondance. La détermination de l'abondance des espèces interstellaires se fait en même temps que la détermination des conditions physiques (température, densité, géométrie du nuage...) des nuages interstellaires (fig. 1).

On sait que deux grandes familles de processus physico-chimiques gouvernent l'excitation et la désexcitation des molécules en phase gazeuse : les collisions et le rayonnement. Le mouvement des parti-

cules lié à la température du milieu induit des collisions permettant le transfert d'énergie d'une particule à l'autre. Cette énergie permet aux molécules d'atteindre des niveaux d'énergie supérieurs. Il est donc crucial de bien modéliser l'effet des collisions afin de pouvoir connaître de façon précise les populations des niveaux d'énergie des molécules interstellaires. Plus la densité sera grande, plus l'effet de ces collisions sera important. En parallèle, l'absorption de rayonnement se propageant dans le milieu permet aussi d'exciter ces espèces. Une fois excitées, les espèces interstellaires peuvent se désexciter par émission d'un photon. L'ensemble des photons émis constitue le signal observable par les radiotélescopes.

La détermination des conditions physiques impose donc de modéliser en laboratoire les processus d'excitation collisionnelle et radiative des molécules interstellaires (passage à un niveau d'éner-

gie supérieur dû à un transfert d'énergie par collisions ou dû à l'absorption de rayonnement). Par chance, il existe des formules mathématiques relativement simples pour déterminer les coefficients d'Einstein qui permettent de décrire les phénomènes d'absorption, d'émission spontanée et stimulée de photons.

À l'inverse, les coefficients correspondant à l'excitation collisionnelle sont propres à chaque espèce interstellaire et dépendent de façon significative du partenaire de collisions provoquant l'excitation. Dans les nuages moléculaires, les principaux partenaires de collisions sont l'hydrogène moléculaire, l'hélium, l'hydrogène atomique et les électrons. Il y a donc un travail important à effectuer afin de déterminer les coefficients de vitesse d'excitation collisionnelle (coefficients de vitesse : mesure de la vitesse d'un processus physico-chimique) des espèces interstellaires par les différents partenaires de col-

lisions. Ainsi, les études théoriques portant sur les collisions entre molécules ont reçu une grande attention ces 40 dernières années. Cela a été motivé par les progrès informatiques permettant de traiter les collisions par des approches quantiques. On peut maintenant envisager d'étudier avec une grande précision les collisions d'une grande partie des systèmes collisionnels interstellaires. Plusieurs laboratoires en France sont à la pointe dans ce domaine et fournissent la majeure partie des données actuellement calculées. Du point de vue expérimental, très peu de données sont disponibles, car il est extrêmement difficile de recréer en laboratoire les conditions physiques existant dans les nuages moléculaires. Dans ce domaine, l'expérience sert donc principalement à valider les approches théoriques en comparant résultats théoriques et expérimentaux dans un domaine de température limité. En effet, une grande majorité des expériences en laboratoire sont faites à température ambiante ( $300\text{ K} \approx 25\text{ }^\circ\text{C}$ ), mais très rarement en

dessous alors que la température d'une grande partie des nuages moléculaires denses (où les collisions moléculaires ont un rôle crucial) est inférieure à  $150\text{ K}$ . Une autre difficulté de l'expérience est de pouvoir couvrir l'ensemble des niveaux d'énergie des molécules interstellaires car il est très difficile, en laboratoire, de pouvoir peupler de façon efficace l'ensemble de ces niveaux d'énergie.

Il faut noter que, malgré des efforts remarquables ces dernières années, une partie des données de collisions disponibles a été obtenue avec des méthodes très appro-

**Il est important de disposer rapidement des taux de collisions précis pour de nombreuses molécules interstellaires.**

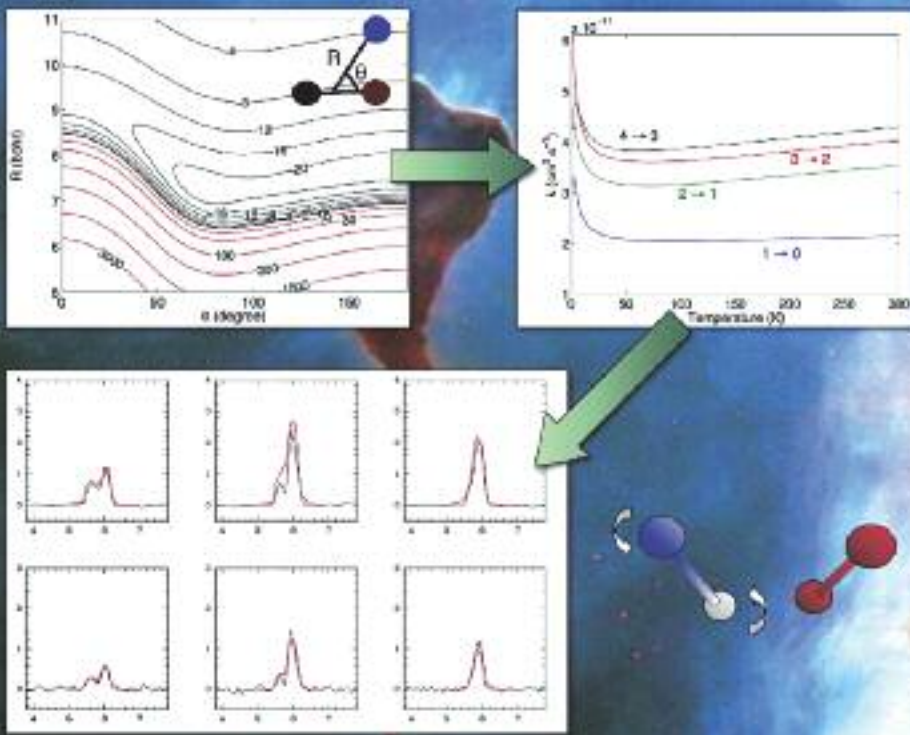
chées. Ces méthodes approchées peuvent conduire à des interprétations d'observations très approximatives. Par exemple, il a été récemment constaté que l'utilisation de nouvelles données de collisions pour la molécule d'isocyanure d'hydrogène (HNC) modifiait considérablement la détermination de l'abondance de cette molécule et proposait ainsi une solution au problème de la (sur)abondance de l'isocyanure d'hydrogène par rapport à celle du cyanure d'hydrogène (HCN) dans le milieu interstellaire. En effet, l'utilisation de données de collisions approximatives pour interpréter les observations de HNC avait conduit à estimer que l'abondance de la molécule HNC était supérieure à celle de la molécule HCN. Un tel résultat n'était pas compatible avec les modèles d'astrochimie qui prévoient une abondance de la molécule HNC inférieure à celle de HCN. Les nouvelles données de collisions de la molécule HNC, obtenues avec des méthodes quantiques extrêmement précises, ont conduit à une nouvelle détermination de l'abondance de HNC d'un facteur 3 à 5 inférieur à la précédente. La nouvelle valeur de l'abondance de HNC est donc maintenant compatible avec les modèles astrochimiques. De même, les nouveaux taux de collisions de la molécule HCl ont conduit à une diminution de l'abondance de cette molécule pouvant aller jusqu'à un facteur 10, remettant complètement en cause la chimie interstellaire du chlore. Ces travaux montrent donc bien l'importance de disposer rapidement de taux de collisions précis pour une grande partie des molécules interstellaires. L'urgence est d'autant plus grande que de nouvelles observations faites par des télescopes comme ALMA et *Herschel* sont actuellement disponibles et qu'il ne sera pas possible d'exploiter pleinement ces observations sans ces données.

## EVOLUTION DE LA MATIÈRE INTERSTELLAIRE

Une fois les conditions physiques clairement établies, la compréhension de l'évolution de la matière interstellaire passe par la confrontation des observations avec les prédictions de modèles de chimie interstellaire. Ces modèles sont construits autour de réseaux de réactions chimiques. Plusieurs milliers de réactions (ion-molécule, molécule-molécule, asso-

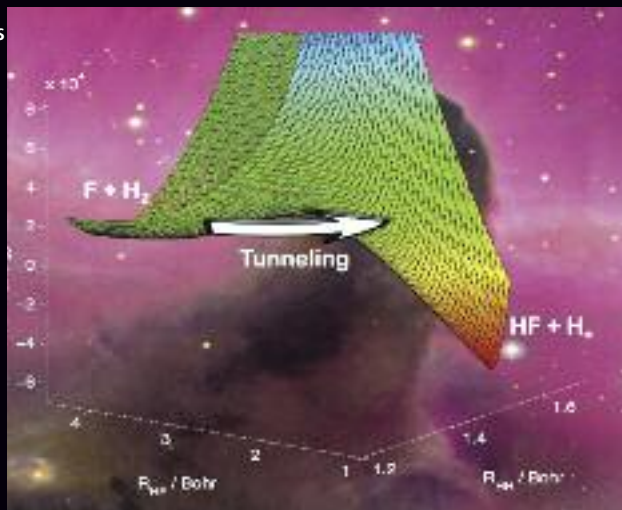


Une région de la nébuleuse d'Orion vue en IR lointain par *Herschel* (Esa).



❶ - Illustration du cheminement de la modélisation aux observations. 1/ Détermination de l'énergie potentielle d'interaction entre les particules en collisions, dans le système de coordonnées de Jacobi ( $R$  et  $\theta$ ) ; 2/ Etude des collisions entre les particules afin d'obtenir la variation avec la température des vitesses  $k$  d'excitation collisionnelle et 3/ Comparaison des spectres simulés (en rouge, obtenus à partir des coefficients de vitesse d'excitation collisionnelle et des coefficients d'Einstein) aux observations des nuages moléculaires (en noir). © F. Lique

❷ - Représentation schématique de la réaction  $F+H_2$ . La réaction  $F + H_2 \rightarrow HF + H$  a lieu dans le MIS froid uniquement par effet tunnel (c.-à-d. franchissement de la barrière de potentiel malgré une énergie inférieure à l'énergie minimale requise pour franchir cette barrière). © F. Lique



ciation radiative, recombinaison dissociative...) peuvent et doivent bien souvent être incorporées. Malheureusement, une minorité de ces réactions a été étudiée et le travail à accomplir reste énorme.

L'étude des réactions chimiques est encore un véritable défi théorique. Si la détermination empirique des coefficients de vitesse des réactions est relativement accessible, l'étude quantique de collisions réactives aboutissant à la résolution d'état à état est quelque chose de complexe vers lequel il faut pourtant tendre. Ainsi, dans ce domaine, l'expérience est en avance sur

la théorie pour l'obtention de ces données. Si les études théoriques peuvent être menées de façon relativement précise sur des systèmes simples composés de 3 ou 4 atomes, nous disposons, en général, uniquement de résultats expérimentaux pour les systèmes plus complexes. Les développements instrumentaux réalisés ces dernières années ont permis d'étudier des réactions chimiques dans des conditions de basse température caractéristiques des milieux astrophysiques. Là encore, la France est à la pointe dans ce domaine grâce à des

montages expérimentaux de cinétique à basse température et à des montages de faisceaux moléculaires croisés fournissant des coefficients de vitesse des réactions pour des températures descendant jusqu'à 6 K.

Comme pour les collisions moléculaires, la précision des données est cruciale. Un exemple récent le montre de façon remarquable. En utilisant un traitement quantique extrêmement précis, des nouveaux coefficients de vitesse des réactions ont été calculés pour la réaction interstellaire  $F + H_2$  (fig. 2). L'accord entre les résultats théoriques et les expériences fut excellent puisque tous les résultats expérimentaux ont pu être reproduits avec une très grande précision. Les nouveaux résultats théoriques et expérimentaux, relativement différents de ceux utilisés précédemment dans les modèles chimiques, permettent d'améliorer la précision de la détermination des abondances d'hydrogène moléculaire et donc de la masse totale des nuages interstellaires. Les premiers calculs utilisant ces données ont montré que l'estimation de la masse des nuages diffus pourrait ainsi être diminuée d'un facteur deux au maximum !



**En conclusion**, on peut voir que la physique moléculaire est un partenaire essentiel de l'astrophysique. La détermination précise des conditions physiques et chimiques des nuages moléculaires passe donc par l'obtention de données de spectroscopie et de collisions précises. Sans celles-ci, il est quasiment impossible d'obtenir ces conditions physiques avec précision. Pire encore, l'utilisation de données peu précises peut conduire à des erreurs importantes dans la détermination de certains paramètres physiques. En astrophysique, l'utilisation de données de physique moléculaire ne se limite pas à l'étude du milieu interstellaire. Les étoiles ou les atmosphères planétaires sont aussi constituées d'espèces chimiques complexes pour lesquelles il faut connaître avec précision les processus microscopiques impliquant ces espèces. Il est donc crucial de continuer à soutenir ce type d'études sans lesquelles l'astrophysique moléculaire ne pourrait progresser rapidement. ■