

Simulation de la spectroscopie d'absorption et d'émission de systèmes moléculaires d'intérêt astrophysique

mercredi 4 juin 2014 09:45 (30 minutes)

La présence d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) dans le milieu interstellaire (ISM) a été proposée il y a une trentaine d'années suite à l'observation des bandes infrarouges non identifiées (UIB) dans le spectre d'émission d'une grande variété d'objets astronomiques. Ces bandes situées entre 3,3 et 11,3 μm , correspondent aux vibrations typiques CC et CH d'hydrocarbures aromatiques. Le mécanisme responsable de l'émission IR correspond à l'excitation visible/UV des HAP suivi par des processus intramoléculaires non-adiabatiques laissant la molécule dans un état vibrationnellement chaud. La molécule se refroidit alors par émission spontanée de photons infrarouges. L'obtention directe d'information physico-chimique sur ces molécules à partir d'observations reste une tâche très difficile, en particulier parce que les photons émis proviennent d'une famille de molécules plutôt que d'une molécule spécifique. Dans ce contexte, le développement d'outils théoriques pour d'une part prédire les structures des molécules responsables des UIB et d'autre part simuler leurs spectres d'émission IR est essentiel.

Au cours de cette présentation, nous allons présenter nos récents développements pour simuler les spectres IR des HAP notamment en décrivant explicitement les processus de dissociation, d'isomérisation, d'émission et en incluant les processus de couplages anharmoniques vibrationnels. Notre approche repose sur une description où la dynamique vibrationnelle est décrite par la théorie des perturbations et où la cascade d'émission IR est décrite par des simulations de type Monte-Carlo cinétique.

Orateur: FALVO, Cyril

Classification de Session: Session I