

Proposition de sujet de thèse – 2018

Titre : Modélisation de l'absorption du méthane à haute température pour les applications astrophysiques.

Responsable : Vincent BOUDON

Axe(s) scientifique(s) : ICQ

Equipe(s) de recherche : SMPCA

Coreponsable(s) : Robert GEORGES, Institut de Physique de Rennes

Contexte scientifique général, caractère innovant et impact global du sujet :

Ce sujet s'inscrit dans le contexte nouveau et en pleine expansion de l'étude des propriétés des exoplanètes. Si la première planète extrasolaire a été découverte il y a à peine plus de 20 ans, ce sont les très récents développements instrumentaux qui permettent aujourd'hui d'en étudier la composition, que ce soit à l'aide de spectromètres (SPHERE, GPI) sur les grands télescopes terrestres (VLT, ...) ou à l'aide de missions spatiales en cours (Kepler, ...) ou à venir (Ariel, JWST, ...). Il est d'ores et déjà possible d'effectuer des mesures spectroscopiques sur certaines de ces atmosphères. C'est en particulier le cas de planètes géantes orbitant près de leur étoile ou bien d'étoiles jeunes encore en formation. Dans ces deux cas, il s'agit d'objets à haute température (500 à 2000 K), contenant beaucoup de méthane (CH_4).

Dans ce cadre, l'équipe SMPCA possède une expertise internationalement reconnue dans la modélisation des spectres de CH_4 . Elle bénéficie de collaborations fructueuses avec des groupes d'expérimentateurs innovants à Rennes (spectroscopie d'absorption et d'émission à haute température, en flux ou en jet hypersonique), à Bruxelles (mesures d'intensités), ainsi qu'avec des théoriciens à Reims et des planétologues à Meudon. Le travail sur les spectres à haute température a été amorcé récemment lors de stages de master et d'un stage post-doctoral en cours. Il s'intègre dans le contrat ANR e-PYTHEAS (2017-2020, voir : <http://e-pytheas.cnrs.fr>).

Ce sujet, enjeu d'une âpre compétition, est innovant dans le sens où il vise à effectuer une modélisation particulièrement complexe de spectres impliquant des états très excités de la molécule considérée, à l'aide de techniques expérimentales de pointe (spectroscopie d'émission avec mesures d'intensités, spectroscopie CRDS en jet hypersonique) et de méthodes théoriques avancées propres à l'équipe SMPCA (formalisme adapté à la symétrie, calculs de chimie quantique). En d'autres termes, le modèle théorique unique développé à Dijon sur la base de spectres expérimentaux produits à Rennes dans des conditions extrêmes de température, sans équivalent, constitue un outil d'une précision inégalée à ce jour. Notre ambition est d'étendre son domaine de validité à tous les domaines de l'infrarouge afin qu'il soit intégré dans les modèles d'atmosphère des exoplanètes chaudes pour mieux contraindre leur structure thermique.

Objectif du projet :

L'objectif du projet est d'obtenir une modélisation aussi précise que possible des spectres d'absorption et d'émission du méthane dans l'infrarouge moyen (entre 2 et 10 μm), pour une gamme de températures comprise entre 500 et 2000 K. Il s'agira en particulier de produire des listes de raies utilisables par les planétologues, et en forte interaction avec eux, pour les calculs de transfert radiatif dans les atmosphères exoplanétaires.

Travail proposé :

A partir des derniers travaux initiés récemment au sein de l'équipe SMPCA, il s'agira en premier lieu de d'analyser en détail (positions et intensités) les données d'émissions obtenues à Rennes pour la région autour de 2.1 μm (dite « Octade ») du méthane. Les bandes chaudes devront être attribuées et incluses dans un ajustement global des raies du méthane, sur le modèle du travail récent de B. Amyay (cf. B. Amyay *et al.*, *J. Chem. Phys.* **144**, 024312, 2016). Les données en intensité seront extraites en collaboration avec J. Vander Auwera à l'ULB (Bruxelles) où des séjours de l'étudiant sont envisagés, de nouveaux spectres devant être enregistrés.

Par ailleurs, la collaboration avec Rennes se poursuivra concernant la spectroscopie hors équilibre thermodynamique par CRDS dans un jet hypersonique (cf. M. Louviot *et al.*, *J. Chem. Phys.* **142**, 214305, 2015). Cette technique, permettant d'obtenir des spectres vibrationnellement très chauds,

mais avec une structure rotationnelle simplifiée et très prometteuse pour l'étude d'états très excités complexes. Elle est en cours d'amélioration à l'Institut de Physique de Rennes et des séjours de l'étudiant dans ce laboratoire sont prévus afin de participer également à ces expériences.

Le sujet bénéficiera également d'échanges importants avec les théoriciens du laboratoire GSMA à Reims et les planétologues du laboratoire LESIA à Meudon, dans le cadre de l'ANR e-PYTHEAS.

Le travail sera encadré par Vincent Boudon à Dijon et Robert Georges à Rennes. A noter qu'il bénéficiera de l'appui d'un ingénieur de recherche informatique récemment recruté à Dijon, en particulier pour ce qui est de la mise en ligne des données produites via la base de données MeCaSDa du consortium européen VAMDC (voit <http://vamdc.org>).

Connaissances requises :

Bases solides en mécanique quantique, spectroscopie moléculaire théorique, informatique. Des connaissances en mécanique des fluides raréfiés seraient appréciées.

Contact :

Vincent BOUDON (Vincent.Boudon@u-bourgogne.fr, 03 80 39 59 17, Bureau D106).