CONTRACTS DOCTORAUX 2023

Titre du projet de thèse : **Caractérisation de molécules réactives d'intérêt astrophysique par spectroscopie rotationnelle et calculs de chimie quantique.**

Directeur de thèse : **Manuel Goubet**

Co-directeur et co-encadrants (le cas échéant) : **Laurent Margulès**

Laboratoire(s) d'accueil : **PhLAM**

Résumé du projet de thèse :

Les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) sont des molécules importantes en planétologie et en astrophysique : les HAP et leurs dérivés (nitro, radicaux, ions, ...) sont fortement suspectés d'être à l'origine des signaux non identifiés observés dans le milieu interstellaire. Outre les HAP, certains radicaux clés, tels que le méthoxy (CH_3O), et des molécules organiques complexes (COM) telles que CH_3OCH_3, CH_3OCHO, $HOCH_2CH_2OH$ ont été observées dans des régions très froides. La façon dont les processus énergétiques en jeu peuvent conduire à la production de ces radicaux et molécules organiques dans des nuages moléculaires sombres et froids reste à clarifier. L'identification des signaux spectraux enregistrés lors des campagnes d'observation repose sur la connaissance précise de la signature des molécules candidates préalablement enregistrée au laboratoire. A ce jour, cette méthode a déjà permis la détection d'environ 250 espèces dans le milieu interstellaire. Cependant, le nombre extrêmement élevé de transitions non attribuées dans des observations de haute qualité et à haute résolution révèle plus que jamais le manque d'études en laboratoire pour de nombreuses molécules candidates à la détection.

Le projet se concentre sur le développement et l'utilisation de dispositifs pour la production d'espèces réactives telles que les radicaux, les HAP et COM déshydrogénés ou protonés. Ces espèces seront principalement observées grâce aux spectromètres microondes (spectroscopie à rotation pure) couplé à une injection combinant vaporisation et décharge haute tension. Une phase de test sera d'abord réalisée sur des chaînes carbonées, dont certaines ont déjà été étudiés. Ensuite, les espèces cibles prioritaires seront les dérivés du naphtalène (PAH) et du propionitrile (COM). A terme, ce dispositif pourrait être utilisé pour caractériser les processus de réaction et/ou d'agrégation de ces radicaux.

PhD GRANTS 2023

PhD project title: **Characterization of astrophysically relevant open-shell molecules by rotational spectroscopy and quantum chemistry calculations.**

PhD Supervisor: **Manuel Goubet**

Co-supervisor(s) (if any): **Laurent Margulès**

Laboratory/ies: **PhLAM**

PhD project summary:

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are important molecules in planetology and astrophysics: PAHs and their derivatives (nitro, radicals, ions, ...) are strongly suspected to be at the origin of unidentified signals observed in the interstellar medium. Besides PAHs, some key radicals, such as methoxy (CH_3O), and complex organic molecules (COMs) such as CH_3OCH_3, CH_3OCHO, $HOCH_2CH_2OH$ have been found in very cold regions. How secondary photons or other energetic processes can lead to the production of these organic radicals and organic molecules in dark, cold clouds is not clear. Moreover, if these radicals can also be produced in hot molecular clouds, COMs chemistry should happen as well. The identification of spectral signals recorded during observational campaigns is based on the precise knowledge of the signature of candidate molecules previously recorded in the laboratory. To date, this method has already allowed the detection of about 250 species in the interstellar medium. The resolution and sensitivity of the radio astronomical observatories have been increasing in recent years, thanks to instrumental developments in astrophysics. The extremely high number of unassigned transitions in high quality and high-resolution data reveals more than ever the lack of laboratory studies for many candidate molecules for detection.
The project focuses on the development and use of devices for the production of open shell species such as radicals, dehydrogenated or protonated PAHs and COMs. These species will be mainly observed thanks to a pulsed microwave spectrometer (pure rotation spectroscopy) coupled to a pulsed nozzle combining vaporization and high voltage discharge. A test phase will first be performed on radicals and ions of carbon chains, some of which have already been studied. Then, the priority target species will be the protonated and dehydrogenated naphthalene (PAH) and ethyl cyanide (COM). Eventually, this device could be used to characterize the reaction and/or aggregation processes of these radicals.