

**Atelier GDR EMiE : Spectroscopies d'intérêt astrophysique  
et observations à l'Observatoire de Haute-Provence**

20-23 mai 2025  
Saint Michel l'Observatoire

## Comité d'organisation

Pierre Çarçabal (LCAR - GDR EMIE), Emmanuel Dartois (ISMO), Eric Josselin (LUPM), Valentine Wakelam (LAB)

## Partenaires



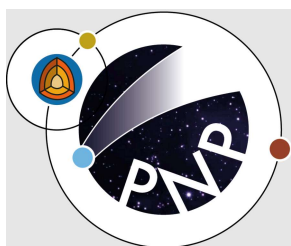
Graduate School PHOM



Laboratoire Univers et Particules Montpellier



Programme National "Physique et Chimie du Milieu Interstellaire"



Programme National de Planétologie



Fédération de Chimie Physique de Paris Saclay

## Programme

### mardi 20 mai 2025

---

| HEURES | ÉVÈNEMENT |
|--------|-----------|
|--------|-----------|

|               |                                                                                                            |
|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 13:00 - 14:30 | Navette Avignon TGV > OHP - Navette Avignon TGV > OHP                                                      |
| 15:00 - 15:45 | Ouverture, présentation scientifique (Salle de séminaires) - Eric Josselin                                 |
| 15:45 - 16:30 | Observations avec JWST et liens avec les expériences en laboratoire (Salle de séminaires) - Jennifer Noble |
| 16:30 - 17:00 | Pause café                                                                                                 |
| 17:00 - 17:30 | Flash presentation des posters (Salle de séminaires)                                                       |
| 17:30 - 18:30 | Préparation des observations et visite de l'OHP - Eric Josselin                                            |
| 19:00 - 20:00 | Dîner                                                                                                      |
| 22:00 - 23:55 | Observations jusqu'à 2h du matin (Télescope)                                                               |

### mercredi 21 mai 2025

---

| HEURES | ÉVÈNEMENT |
|--------|-----------|
|--------|-----------|

|               |                                                                                                               |
|---------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 10:00 - 10:45 | Réactions à basse température pour des espèces d'intérêt astrophysique (Salle de séminaires) - Astrid Bergeat |
| 10:45 - 11:30 | Modèles de chimie du milieu interstellaire (Salle de séminaires) - Valentine Wakelam                          |
| 12:00 - 14:00 | Déjeuner (Salle de restauration)                                                                              |
| 14:00 - 14:45 | Réactivité hétérogène sur des glaces d'intérêt astrophysique (Salle de séminaires) - Céline Toubin            |
| 14:45 - 15:30 | Propriétés des poussières interstellaires et modèles de grains (Salle de séminaires) - Karine Demyk           |
| 15:30 - 16:00 | Pause café                                                                                                    |
| 16:00 - 17:00 | Table ronde (Salle de séminaires)                                                                             |
| 19:00 - 20:00 | Dîner (Salle de restauration)                                                                                 |
| 22:00 - 23:55 | Observations jusqu'à 2h du matin (Télescope)                                                                  |

### jeudi 22 mai 2025

---

| HEURES | ÉVÈNEMENT |
|--------|-----------|
|--------|-----------|

|               |                                                                                                                    |
|---------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 10:00 - 10:45 | Collisions inélastiques et réactives des molécules d'intérêt astrophysique (Salle de séminaires) - Alexandre Faure |
| 10:45 - 11:30 | Radicaux interstellaires dans les environnements excités en UV (Salle de séminaires) - Marion Zannesse             |
| 12:00 - 14:00 | Déjeuner (Salle de restauration)                                                                                   |
| 14:00 - 14:45 | Collecte et analyses de météorites, micrométéorites, missions spatiales (Salle de séminaires) - Cécile Engrand     |
| 14:45 - 15:30 | Effet du rayonnement cosmique sur les glaces (Salle de séminaires) - Philippe Boduch                               |
| 15:30 - 16:00 | Pause café                                                                                                         |
| 16:00 - 17:00 | Table ronde                                                                                                        |
| 17:00 - 18:30 | Analyse des observations (Salle de séminaires)                                                                     |
| 19:00 - 20:00 | Dîner                                                                                                              |

### vendredi 23 mai 2025

---

| HEURES | ÉVÈNEMENT |
|--------|-----------|
|--------|-----------|

|               |                                                                                                           |
|---------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 09:00 - 09:45 | Bandes diffuses interstellaires et expériences en laboratoire. (Salle de séminaires) - Ugo Jacovella      |
| 09:45 - 10:30 | Chocs circumstellaires et interstellaires étudiés en laboratoire (Salle de séminaires) - Ludovic Biennier |
| 10:30 - 11:00 | Pause café                                                                                                |
| 11:30 - 13:00 | Navette OHP > Gare Avignon TGV - Navette OHP > Gare Avignon TGV                                           |
| 12:00 - 13:00 | Déjeuner (Salle de restauration)                                                                          |

# Résumés des présentations orales

## **Présentation orale**

### **Observations of interstellar ices with JWST and links with the laboratory**

Jennifer Noble (PIIM)

Laboratory astrophysicists and astrochemists have long studied ice analogues in order to interpret astronomical data, dating back to the first observations of solid water in the interstellar medium half a century ago. Ices are observed in the coldest and densest regions of the interstellar medium, starting in molecular clouds where icy mantles begin to form on dust grains, which then grow and evolve on their journey through cores and protostars, to disks and, eventually, planets. At each stage of the star and planet formation process, observations of solid phase material, through photometry and spectroscopy in the near to far infrared spectral range, allow astronomers to constrain the physical and chemical nature of the environment by referencing a wealth of laboratory measurements of ices and refractory material. The study of icy analogues in the laboratory provides first and foremost optical characterisation of molecular solids in the form of spectra and optical constants that can be used to analyse astronomical observations and determine abundances of molecular species along the lines of sight observed. Just as importantly, study of the molecular physics or physical chemistry of solid phase material, for example analysing how an ice and its optical properties are modified upon processing by heating or by photon or particle irradiation, is invaluable in interpreting observational data.

Ices are observed via vibrational spectroscopy in the near to far infrared, primarily from space-based IR observatories. With each new IR spectroscopic instrument launched, new laboratory measurements have been required to interpret its data. Progress in the field is made thanks to the close collaboration between observers, experimentalists, theoreticians and modellers. In the JWST era, the community has access to an IR observatory with the highest ever sensitivity and spatial resolution, as well as a spectral resolution high enough to fully resolve absorption bands, even in the case of narrow or weak vibrational modes of molecular solids. In this context, the study of interstellar ices is currently undergoing a revolution, both due to the new detections of molecular species in ices, as well as the ever greater constraints being placed on the chemical and physical nature of ices on dust grains in star forming regions. Here, I will review the interplay between laboratory astrophysics and astronomical observations in driving our understanding of ices in the interstellar medium. In particular, I will concentrate on the role of laboratory astrophysics in disentangling the effects on IR spectra of the local chemical environment from those of the physical structure of the ices and the grains upon which they grow, using examples from JWST programs IceAge and Cheerio.

## Présentation orale

### Réactions à basse température pour des espèces d'intérêt astrophysique Low temperature reactions of species of astrophysical interest

Astrid Bergeat, Université de Bordeaux

Depuis la détection du radical CH et de l'ion CH<sup>+</sup> dans le milieu interstellaire en 1937, de nombreuses molécules, et très variées, ont été détectées (plus de 330 mi-avril mais ce chiffre est peut-être déjà obsolète). Comment, dans des environnements aussi peu propices du fait de leur pressions et températures, ont-elles pu être formées ? Il n'existe que peu de processus élémentaires (c'est-à-dire comme ils se passent à l'échelle moléculaire) possibles en phase gazeuse mais beaucoup de réactions à étudier (je vous laisse le calcul combinatoire entre le nombre de molécules et les processus élémentaires). Quelles sont les techniques instrumentales qui permettent d'étudier en laboratoire (échelle macroscopique) la cinétique de ces processus (sans avoir à attendre plus ou moins 10<sup>5</sup> années !) ? Comment suivre la cinétique, exploiter les données obtenues et fournir des coefficients de vitesse ou des sections efficaces sont des questions qui seront abordées et conduiront aussi aux limites expérimentales. La synergie entre expérience et théorie s'avère essentielle à tous les stades pour mieux comprendre les observations astrophysiques.

Since the discovery of the CH radical and the CH<sup>+</sup> ion in the interstellar medium in 1937, a large number of molecules have been detected (over 330 by mid-April, but this figure may already be out of date). How did they form in such an unfavourable environment in terms of density and temperature? In the gas phase, only a few elementary processes are possible (i.e. as they occur on the molecular scale), but there are many reactions to study (I leave the combination calculation between the number of molecules and the elementary processes to you). What are the instrumental techniques that allow us to study the kinetics of these processes (without having to wait more or less 10<sup>5</sup> years!) in the laboratory (macroscopic scale)? How can we follow the kinetics, exploit the data obtained and provide rate coefficients or cross-sections are questions that will be addressed and will also lead to present experimental limits. The synergy between experiment and theory is essential at every stage in this process to be able to contribute to our understanding of astrophysical observations.

## **Présentation orale**

### **Modèles de chimie du milieu interstellaire.**

Valentine Wakelam

Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux

Le milieu interstellaire présente des caractéristiques de températures, de densités et d'irradiations différentes des conditions Terrestre. Les physico-chimistes étudient les processus potentiellement efficaces dans ces environnements afin de comprendre comment les molécules interstellaires se forment dans le gaz et à la surface des grains de poussière. En parallèle, les astrophysiciens observent les régions du milieu interstellaire riches en molécules afin d'en faire l'inventaire et de quantifier leur présence. A la frontière entre les deux disciplines, les astrochimistes développent des modèles numériques pour simuler et mettre en compétition les différents processus physico-chimiques pour prédire les molécules et leurs abondances à partir des éléments chimiques. Ceux-ci utilisent les résultats quantitatifs des expériences de laboratoire ou des calculs quantiques et comparent les résultats de leurs simulations avec les observations.

Dans ce cours, je décrirai les bases de ces modèles astrochimiques et leur utilisation.

## Présentation orale

### Réactivité hétérogène sur glaces d'intérêt astrophysique

D. Duflot, C. Toubin

Univ. Lille, CNRS, UMR 8523 - PhLAM - Physique des Lasers Atomes et Molécules, F-59000 Lille, France

Dans le contexte du milieu interstellaire, la complexité moléculaire ne peut pas être expliquée uniquement par les processus en phase gazeuse. Il est largement reconnu que le manteau de glace, composé non seulement d'eau mais aussi de diverses autres molécules (CO, N<sub>2</sub>,...), joue un rôle crucial dans la génération de petites molécules, qui servent de briques de base pour des composés plus complexes, notamment les molécules prébiotiques comme les acides aminés. La modélisation à l'échelle moléculaire apparaît comme un outil précieux pour relever ce défi, en fournissant des données moléculaires qui peuvent enrichir les bases de données et affiner les modèles astrophysiques, en particulier ceux intégrant les interactions gaz/grains. De plus, les simulations offrent une description détaillée de la chimie hétérogène, permettant de mieux comprendre les mécanismes fondamentaux qui peuvent être observables dans des expériences de laboratoire.

Cet exposé montrera à travers des exemples les apports de différents types de simulations dans la modélisation des processus aux interfaces.

Les approches statistiques de type dynamique moléculaire classique (DM) permettent d'accéder à des grandeurs statistiques et modéliser des systèmes nanoscopiques. Selon les cas, la précision des méthodes de dynamique moléculaire classique et *ab initio* peut ne pas être suffisante, et une image statique peut fournir des informations sur l'énergétique et les intermédiaires. Idéalement, les méthodes quantiques de haut niveau couramment employées en phase gazeuse devraient être utilisées, mais le coût computationnel les limite à de petits systèmes. Une façon possible de contourner ces difficultés est de combiner les meilleurs aspects des deux mondes (classique et quantique), via des méthodes hybrides QM/MM ou DFTB/MM.

Les limitations et perspectives des différentes approches seront finalement discutées.

1) Michoulier, E.; Noble, J.A.; Simon, A.; Mascetti, J.; Toubin, C. Adsorption of PAHs on interstellar ice viewed by classical molecular dynamics, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2018, 20, 8753-8764. DOI: 10.1039/C8CP00593A

2) Michoulier, E.; Ben Amor, N.; Rapacioli, M.; Noble, J.A.; Mascetti, J.; Toubin, C.; Simon, A. Theoretical determination of adsorption and ionisation energies of polycyclic aromatic hydrocarbons on water ice, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2018, 20, 11941-11953. DOI: 10.1039/C8CP01175C.

3) Toubin, C.; Duflot, D.; Monnerville, M. Theoretical determination of binding energies of small molecules on interstellar ice surfaces, *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*, section Astrochemistry, 2021 <https://doi.org/10.3389/fspas.2021.645243>

4) Kerkeni, B.; Boukallaba, M.; Hechmi, M.; Duflot, D.; Toubin, C. QM/MM study of the H<sub>2</sub> formation on the surface of a water ice grain doped with formaldehyde: Molecular dynamics and reaction kinetics, *Front. Astron. Space Sci. – Astrochemistry* 2022, <https://doi.org/10.3389/fspas.2022.807649>.

5) Minissale, M.; Aikawa, Y.; Bergin, E.; Bertin, M.; Brown, W.A.; Cazaux, S.; Charnley, S.B.; Coutens, A.; Cuppen, H.M.; Guzman, V.; Linnartz, H.; McCoustra, M. R. S.; Rimola, A.;



Schrauwen, J. G.M. ; Toubin, C.; Ugliengo, P.; Watanabe, N.; Wakelam, V.; Dulieu, F. Thermal desorption of interstellar ices: A review on the controlling parameters and their implications from snowlines to chemical complexity, ACS Earth Space Chem. 2022, 6, 3, 597–630. <https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.1c00357>

6) Kerkeni, B.; Boukallaba, M.; Hechmi, M; Duflot, D.; Toubin, C. QM/MM study of the H<sub>2</sub> formation on the surface of a water ice grain doped with formaldehyde: Molecular dynamics and reaction kinetics, Front. Astron. Space Sci. – Astrochemistry Volume 9 - 2022 | <https://doi.org/10.3389/fspas.2022.807649>

## **Présentation orale**

### **Propriétés des poussières interstellaires et modèles de grains**

Karine Demyk - IRAP

La poussière interstellaire est omniprésente dans l'univers. Elle joue un rôle clé dans l'évolution du milieu interstellaire et des galaxies, dans la formation stellaire et planétaire. Elle est utilisée comme sonde des milieux observés mais elle représente également un avant-plan qu'il faut soustraire pour accéder aux observations extra-galactiques et cosmologiques. La connaissance des propriétés de la poussière et de son évolution au cours de son cycle de vie est donc essentielle.

Je présenterai dans cet exposé les contraintes observationnelles sur lesquelles repose notre connaissance des différentes composantes de la poussière interstellaire, les propriétés des différents types de poussière ainsi que les modèles de grains les plus récents. J'illustrerai à l'aide d'exemples comment les expériences menées sur des analogues de grain, qui permettent de caractériser les poussières interstellaires et de simuler et comprendre leur évolution, sont essentielles pour l'interprétation des observations.

## **Présentation orale**

### **Collisions inélastiques et réactives des molécules d'intérêt astrophysique**

Alexandre Faure

L'astrochimie est un champ de recherche en plein essor. Des molécules de plus en plus complexes sont identifiées partout dans l'Univers, depuis notre Système Solaire jusqu'aux galaxies lointaines, grâce à la spectroscopie moléculaire. L'analyse des spectres fournit des informations cruciales sur la composition chimique, la température, la pression, etc. à condition de disposer de données de laboratoire (expérimentales et/ou théoriques) adaptées et fiables. Durant la dernière décennie, des progrès importants ont été accomplis dans les calculs d'excitation collisionnelle des molécules interstellaires et cométaires. Nous proposons dans cet exposé une revue des méthodes théoriques qui sont utilisées pour calculer les coefficients de collision état-à-état des molécules d'intérêt astrophysique. Une étude de cas sera présentée concernant l'excitation rotationnelle de petites molécules (CO, H<sub>2</sub>O, etc.) par des projectiles neutres (H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O) ou chargés (les électrons). Le rôle crucial des surfaces d'énergie potentielle sera souligné. La précision des calculs actuels sera illustrée par comparaison avec des mesures de laboratoire résolues en état. Des applications illustreront l'impact des collisions dans l'établissement de populations fortement hors-équilibre, par exemple à l'origine de raies masers. Enfin, les avancées récentes dans le champ de la chimie état-à-état seront discutées. Des exemples seront présentés, qui mettront en avant l'importance du pompage chimique dans le cas des espèces « réactives » (e.g. CH<sup>+</sup>). Les directions futures de la discipline seront finalement esquissées.

## Présentation orale

### Interstellar radicals in UV-excited environments

Marion Zannese

Institut d'Astrophysique Spatiale

Interstellar radicals such as CH<sup>+</sup>, CH<sub>3</sub><sup>+</sup> and OH, are key molecules to study physico-chemical processes in strongly irradiated environments. Their emission reveals out-of-equilibrium excitation processes that are only possible in dense, warm and irradiated regions. The study of these processes allows us to put strong constraints on those environments, either on temperature, density and on our understanding of warm chemistry.

In this contribution, I will present several UV-induced processes emitting in the infrared in irradiated regions, such as chemical pumping (via the formation reaction  $X + H_2^* = XH^* + H$ ) and prompt emission following the photodissociation of water ( $H_2O + h\nu = OH^* + H$ ). I will show how to use the Orion Bar, a prototypical highly irradiated dense PDR, as an interstellar laboratory to study these processes. I will present the first NIRSpec and MIRI-MRS detection of highly excited radicals (OH, CH<sup>+</sup>, CH<sub>3</sub><sup>+</sup>) in the Orion Bar in the recent imaging and spectroscopic observations of the ERS 1288 program "PDRs4All" (Berné et al. 2022-2024, Habart et al. 2024, Peeters et al. 2024).

In particular, I will show how to leverage the high spatial and good spectral resolution of these instruments to resolve the distribution of these excited species and conduct detailed analysis of their excitation. I will present the spatial correlation of their emission with excited H<sub>2</sub>, unveiling the very active gas phase chemistry and show the agreement between quantum dynamical models of excitation at formation processes (chemical pumping, prompt emission) and observations (Zannese et al. 2024-2025). I will present how excitation at formation processes can be used as robust diagnostics of the physical and chemical conditions of irradiated regions (estimation of local density, formation rate, water abundance...). As these processes can be seen in the excitation of various species and are particularly handy, I will highlight the need for new quantum calculations to build state-to-state astrochemical models in the JWST era.

Berné, O., Habart, E., Peeter, E. et al., PDRs4All: A JWST Early Release Science Program on Radiative Feedback from Massive Stars. *PASP*, 134, 054301 (2022)

Berné, O. et al. A far-ultraviolet-driven photoevaporation flow observed in a protoplanetary disk, *Science*, 383, 988 (2024)

Habart, E. et al. PDRs4All II: JWST's NIR and MIR imaging view of the Orion Nebula. *A&A*, 685, A73 (2024)

Peeters, E. et al. PDRs4All III: JWST's NIR spectroscopic view of the Orion Bar. *A&A*, 685, A74 (2024)

Zannese, M. et al., OH as a probe of the warm-water cycle in planet-forming disks, *Nature Astronomy*, 8, 577 (2024)

Zannese et al., PDRs4All: XI. Detection of infrared CH<sup>+</sup> and CH<sub>3</sub><sup>+</sup> rovibrational emission in the Orion Bar and disk d203-506: Evidence of chemical pumping, *A&A*, 699, A99 (2025)

## **Présentation orale**

### **Collecte et analyses de météorites, micrométéorites, missions spatiales**

Cécile Engrand

Pour une meilleure compréhension de la formation du système solaire, et de l'importance d'un apport de matière prébiotique sur la Terre primitive, nous avons maintenant accès à plusieurs types de ressources : i) les observations astronomiques, en particulier de disques protoplanétaires qui permettent d'observer des analogues du système solaire jeune ; ii) les échantillons de petits corps rapportés par les missions spatiales, qui représentent une opportunité unique d'analyser en laboratoire des échantillons d'origine connue ; iii) la matière extraterrestre récoltée sur Terre sous forme de roches et de poussières (météorites et micrométéorites). L'acquisition de données expérimentales de laboratoire est également cruciale pour une interprétation correcte des observations et des analyses.

Les petits corps (astéroïdes et comètes) ont échappé à la formation planétaire. Les météorites sont issues majoritairement des astéroïdes, et ont été les premiers objets donnant des informations sur la matière ayant servi à la formation des planètes. Les météorites peuvent être collectées dans les déserts froids ou chaud (ce sont alors des « trouvailles »), ou lors d'événements détectés à l'œil nu ou grâce aux réseaux d'observation du ciel, comme FRIPON – Vigie Ciel (on parle alors de « chutes »). Elles se classent en plusieurs familles, les chondrites ordinaires étant les plus abondantes (~80% des météorites), mais montrant des signes d'évolution thermique sur l'astéroïde parent. Les météorites ayant le mieux préservé la composition primitive (d'après celle mesurée dans l'atmosphère du soleil) sont les chondrites carbonées, qui contiennent quelques pourcents de carbone, et de l'eau sous forme de minéraux hydratés. Elles ne représentent que quelques pourcents des météorites, mais contiennent des composés organiques ayant pu jouer un rôle dans l'apport de matière prébiotique sur la Terre primitive.

Les poussières extraterrestres constituent actuellement l'essentiel de l'apport de matière extraterrestre sur Terre. D'après les modèles, elles sont majoritairement d'origine cométaire, mais montrent des similarités avec la classe rare des chondrites carbonées. Elles sont collectées principalement dans la stratosphère par la NASA (elles prennent le nom d'IDPs – interplanetary dust particles), ou dans les régions polaires (micrométéorites).

Les observations astronomiques, les missions spatiales vers les petits corps ont permis de réaliser de grandes avancées dans l'analyse d'un corps astéroïdal ou cométaire. Une demi-douzaine de comètes a pu être étudiée *in situ* de façon plus ou moins détaillées, avec les analyses de Rosetta en 2014-2016, en complément des analyses des comètes Halley, Grigg-Skjellerup, Borelly, Wild 2, Tempel 1. La mission Stardust a également rapporté des échantillons de la comète Wild 2 en 2006. Plusieurs astéroïdes ont également été visités par des missions spatiales, et des échantillons ont été rapportés de trois astéroïdes par les missions Hayabusa en 2010 (astéroïde de type S Itokawa), Hayabusa2 en 2020 (astéroïde de type C Ryugu) et OSIRIS-REx en 2023 (astéroïde de type C Bennu).

Les analyses des échantillons de la comète Wild 2 ont mis en évidence la présence de composés typiquement trouvés dans les chondrites carbonées, ce qui a introduit le concept d'un continuum astéroïde-comète. Les échantillons d'Itokawa ont permis de confirmer la relation

génétiq ue entre astéroïde de type S et chondrites ordinaire, alors que les échantillons des astéroïdes Ryugu et Bennu montrent des similarités avec la famille la plus primitive des chondrites carbonées, les chondrites de type CI.

La complémentarité de ces approches sera présentée dans le contexte de la formation du système solaire, et de l'apport de matière prébiotique sur Terre.

## **Présentation orale**

### **Des ions et des glaces pour l'astrophysique.**

**Philippe BODUCH**

Université de Caen Normandie – CIMAP/GANIL

Depuis 2008, une équipe du CIMAP-GANIL se concentre sur l'irradiation de glaces d'intérêt astrophysique avec des ions lourds. Ces glaces sont principalement composées de molécules simples telles que  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ... Elles sont présentes sur les comètes, les satellites de certaines planètes (lunes joviennes par ex.) et sur les grains composant les nuages moléculaires denses, berceaux des systèmes stellaires. Ces glaces sont continuellement soumises à différentes radiations présentes dans l'espace : UV, vents stellaires, rayons cosmiques... Les irradiations aux protons et aux UV ont fait l'objet de nombreuses études. Avec les ions lourds, seules quelques études avaient été réalisées à basse énergie. Il nous a donc paru important de simuler en laboratoire les interactions entre des ions lourds rapides et les glaces présentes dans l'espace afin de comprendre le rôle des rayons cosmiques dans l'évolution de ces glaces. Ces ions déposent localement une très grande quantité d'énergie. Ils peuvent alors générer des effets non observables avec des particules plus légères. Dans ce cadre, je présenterai l'étude de glaces simples et des mélanges par des ions lourds produits par le GANIL (Grand Accélérateur National d'Ions Lourds, Caen, France). Les effets d'irradiations sont analysés in situ par spectroscopie photonique infra-rouge. Les résultats présentés lors de cet exposé porteront sur les effets induits sur la structure de la glace, sur les modifications chimiques et sur le rôle de l'implantation. Les travaux sur des molécules plus complexes seront aussi abordés.

## Présentation orale

### Ion spectroscopy in the context of the diffuse interstellar bands

Ugo Jacovella (ISMO)

The nature of the diffuse interstellar bands (DIBs), a series of absorption features observed through diffuse molecular clouds, remains one of the longest-standing mysteries in astrophysics. The carriers of these visible and near-IR signatures are present in interstellar gas clouds and may account for a significant inventory of complex organic molecules in space. While their carriers are still unidentified, except for  $C_{60}^+$  contributing to five DIBs, growing evidence suggests that large, complex molecular ions play a significant role, especially in their cationic form.

Ion spectroscopy of large carbon-rich molecules typically presents challenges; however, recent advancements in laboratory techniques, such as ion spectroscopy in ion traps and cryogenic methods, have enabled precise measurements of the absorption spectra of charged polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), fullerenes, and other carbonaceous species. These results, combined with astronomical observations and quantum chemical calculations, provide new insights into the electronic transitions and environmental dependencies of potential DIB carriers. Additionally, ion mobility and mass spectrometry tools can help narrow down suitable candidates before undertaking the effort of obtaining the spectral signatures of molecular ions.

This lecture will explore the role of ion spectroscopy in identifying DIB carriers, discussing experimental methodologies, recent findings, and future directions in the field from my perspective.



## Présentation orale

### Investigation of shock-induced processing of dust analogues

Ludovic Biennier (IPR)

Shock waves are ubiquitous in space, driven by events such as supernova explosions, outflows from forming stars, cloud-cloud collisions or stellar winds. Their propagation causes a sudden compression, heating and acceleration of particles. Shocks have been recognized to actively participate in the physical and chemical evolution of the interstellar medium. They are thought to strongly modify dust grains and lead to the release of new molecular species in the gas phase.

So far, there have been a limited number of studies of the shock processing of cosmic dust analogues. Past targets include mostly carbonaceous species such as fullerenes, silicon carbide, amorphous carbon, and polycyclic aromatic hydrocarbons<sup>1-3</sup>. This contrasts with the extensive research on photon irradiation and ion, electron and atom bombardment of similar materials.

Shock-induced processing of dust components can be investigated using a shock tube, a tool commonly employed for fast thermal processing of gases and materials.

The destruction of the exposed samples can be studied in situ and in real-time by optical emission diagnostics. Some further insights can be provided by molecular dynamics simulations. The analysis of volatiles collected after the shock can bring some additional support in the outlined scenario.

To get a more complete picture, the solid residues can be examined as well by a variety of analytical techniques including X-ray diffraction, transmission electron microscopy, and infrared spectroscopy, to help decipher the physical and chemical nature of the products.

These experiments provide some insights into the lifecycle of carbon in space. Our work illustrates the potential of shock tubes for laboratory astrophysics.

## References

- (1) Biennier, L.; Jayaram, V.; Suas-David, N.; Georges, R.; Singh, M. K.; Arunan, E.; Kass, S.; Dartois, E.; Reddy, K. P. J. Shock-Wave Processing of C<sub>60</sub> in Hydrogen. *A&A* **2017**, 599, A42. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201629067>.
- (2) Roy, A.; Singh, S. V.; Ambresh, M.; Sahu, D.; Meka, J. K.; Ramachandran, R.; Samarth, P.; Pavithra, S.; Jayaram, V.; Hill, H.; Cami, J.; Rajasekhar, B. N.; Janardhan, P.; Bhardwaj, A.; Mason, N. J.; Sivaraman, B. Shock Processing of Amorphous Carbon Nanodust. *Advances in Space Research* **2022**, 70 (8), 2571–2581. <https://doi.org/10.1016/j.asr.2022.06.068>.
- (3) Chakraborty, S.; Yurchenko, S. N.; Georges, R.; Simon, A.; Lacinbala, O.; Chandrasekaran, V.; Jayaram, V.; Dartois, E.; Kass, S.; Gusdorf, A.; Lesaffre, P.; Jagadeesh, G.; Arunan, E.; Biennier, L. Laboratory Investigation of Shock-Induced Dissociation of Buckminsterfullerene and Astrophysical Insights. *A&A* **2024**, 681, A39. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202347035>.

# Résumés des posters

## POSTER 1

### Studying radical species of astrochemical interest through VUV photoionisation

M. DRISSI<sup>1</sup>, B. GANS<sup>2</sup>, S. BOYE-PERONNE<sup>2</sup>, G.A. GARCIA<sup>1</sup>, L. NAHON<sup>1</sup> and J.-C. LOISON<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin, France

<sup>2</sup>ISMO, CNRS, Université Paris-Saclay, 91405 Orsay, France

<sup>3</sup>ISM, CNRS, Univ. Bordeaux, 351 cours de la Libération, Talence, 33400, France

Radicals and ions are known to be important drivers of the rich chemistry in astronomical media. The identification and characterisation of such reactive species are therefore necessary to gain knowledge on the gas-phase processes occurring in such environments. Vacuum-ultraviolet (VUV) photoionisation can be used, not only to characterize the electronic structure of molecules through photoelectron spectroscopy, but also to study their photochemistry under VUV irradiation. Additionally, in the past decade, synchrotron-based photoelectron spectroscopy has been coupled to mass spectrometry in search of a universal detection method able to probe the presence of products and intermediates in complex chemical reactions.

This work will present the current experimental setup installed at the DESIRS VUV beamline (Synchrotron SOLEIL) allowing the production of radicals inside a flow tube reactor with a microwave discharge and coupled to a i<sup>2</sup>PEPICO (double imaging photoelectron photoion coincidence) spectrometer to measure their mass-selected photoelectron spectra with vibrational resolution. I will present the different applications of this experiment including the spectroscopy of radical species, such as SiS, and the study of radical-atom reactions which are both essential to improve astrochemical models. In addition, I will also discuss short-term critical improvements to the existing set-up to improve our detection limit for trace species, needed to broaden our scientific scope from astrophysical to atmospheric/combustion media.

## POSTER 2

### Modélisation de spectres infrarouges de molécules cométaires

Pierre Hardy<sup>1,2</sup>, Cyril Richard<sup>1</sup> et Philippe Rousselot<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Université Bourgogne Europe, CNRS, Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne ICB UMR 6303, F-21000 Dijon, France

<sup>2</sup> Université Marie et Louis Pasteur, CNRS, Institut UTINAM (UMR 6213), OSU THETA, F-25000 Besançon, France

Les comètes sont de petits corps du système solaire, principalement constitués de glace et de poussière. Situées dans des régions très éloignées du Soleil, elles sont à l'abri de son rayonnement. Leur composition est ainsi restée presque intacte depuis leur formation. Véritables fossiles, elles renferment des informations précieuses sur les conditions qui régnaient à l'origine de notre Système solaire, il y a près de cinq milliards d'années. Lorsqu'une comète s'approche du Soleil, ses glaces se subliment, libérant des gaz qui forment une enveloppe appelée coma. Ces gaz émettent de la lumière par résonance-fluorescence, un phénomène qui permet d'en déterminer la composition grâce à des observations réalisées depuis le sol ou l'espace.

Bien que peu nombreuses, les missions spatiales dédiées aux comètes ont grandement amélioré notre compréhension de ces objets. C'est notamment le cas de la sonde Rosetta, lancée en 2004, qui a accompagné la comète 67P/Tchourioumov-Guérassimenko entre 2014 et 2016. L'un de ses instruments, le spectromètre de masse ROSINA, y a détecté de nombreuses molécules directement dans la coma, dont certaines n'avaient encore jamais été observées dans des comètes.<sup>1</sup> Pour approfondir notre connaissance de la chimie cométaire et de la composition primordiale du système solaire, il est essentiel de rechercher ces molécules dans d'autres comètes observées à distance. Cela nécessite une analyse spectroscopique infrarouge des bandes vibrationnelles, ainsi que le développement de modèles de fluorescence adaptés.

Dans ce contexte, nous avons analysé des spectres à haute résolution obtenus à la ligne AILES du synchrotron SOLEIL et au LISA, afin de caractériser les raies d'émission de deux bandes vibrationnelles du chlorométhane (CH<sub>3</sub>Cl) et d'une bande du cyanogène (C<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) — deux molécules identifiées par ROSINA, mais encore jamais détectées à distance dans des comètes.

Nous présentons l'analyse spectroscopique de ces bandes, ainsi que le développement d'un modèle de fluorescence pour le cyanogène. Ce modèle nous a permis d'estimer une limite supérieure de son abondance dans la comète C/2022 E3 (ZTF), observée en 2023 par le télescope spatial James Webb (JWST). Ces travaux constituent une étape importante vers la détection à distance de nouvelles molécules cométaires et contribuent à mieux comprendre l'inventaire chimique du système solaire primitif.

<sup>1</sup> Altwegg, K. (2017). Chemical highlights from the Rosetta mission. *Proceedings of the International Astronomical Union*, 13(S332), 153–162.

## POSTER 3

### CARACTÉRISATION SPECTROSCOPIQUE ROTATIONNELLE DU 2-ÉTHOXYÉTHANOL POUR L'OBSERVATION ASTRONOMIQUE

Agathe Maillard<sup>1</sup>, Laurent Margulès<sup>1</sup>, Manuel Goubet<sup>1</sup>, Brett McGuire<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Univ. Lille, CNRS, UMR 8523 - PhLAM - Physique des Lasers Atomes et Molécules, F-59000 Lille, France.

<sup>2</sup> Department of Chemistry, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, USA.

La présence de molécules organiques complexes (COM) dans le milieu interstellaire (ISM), en particulier dans les zones de formation d'étoiles, est désormais bien établie.

Parmi ces COMs, les composés contenant de l'oxygène, tels que les éthers et les alcools, présentent un intérêt particulier en raison de leur détection dans les environnements interstellaires et de leur rôle potentiel dans la chimie prébiotique. La ressemblance structurale de l'éthoxyéthanol avec des molécules détectées dans le milieu interstellaire, telles que l'éthylène glycol (dans Sgr B2(N – LMH<sup>a</sup>)) ou le 2-méthoxyéthanol (dans le proto – cluster NGC 6334I<sup>b</sup>) en fait un candidat prometteur pour une découverte astronomique. Les mesures en laboratoire sont essentielles pour permettre la détection potentielle du 2-éthoxyéthanol dans le ISM. Les caractéristiques spectrales les plus significatives des COMs comme le 2-éthoxyéthanol peuvent apparaître à différentes longueurs d'onde, influencées par les conditions d'excitation spécifiques. Pour garantir des mesures spectroscopiques rotationnelles précises qui correspondent bien aux observations, les spectres sont enregistrés à l'aide du spectromètre millimétrique/sub-millimétrique du laboratoire PhLAM (Université de Lille, France) et le spectromètre micro-ondes à transformée de Fourier du groupe de recherche McGuire au MIT (USA).

Les premiers résultats de l'étude spectroscopique et de sa recherche dans l'ISM seront présentés.

References :

<sup>a</sup> Khan, W.; et al., 2025, Life Sci. Space Res., 10.1086/341148

<sup>b</sup> Fried, Z. T.; et al., 2024, ApJ Lett. 965, L23, 10.3847/2041-8213/ad37ff

## POSTER 4

### Modélisation statistique de la relaxation électronique et vibrationnelle des hydrocarbures du milieu interstellaire

Damien Borjaa,<sup>b</sup> Florent Calvo<sup>a</sup>, Pascal Parneix<sup>b</sup> et Cyril Falvo<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire Interdisciplinaire de Physique, Université Grenoble Alpes, France

<sup>b</sup> Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, Université Paris Saclay, France

La présence d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (polycyclic aromatic hydrocarbons, PAH) dans le milieu interstellaire a été proposée il y a plus de 40 ans après l'observation de bandes d'émission infrarouges aromatiques (aromatic infrared bands, AIB) [1] et confirmée par la suite avec la détection du Buckminster fullerène C<sub>60</sub> [2]. Les AIB résultent du processus de chauffage stochastique durant lequel les molécules absorbent un photon UV ou visible, les plaçant dans un état électronique excité. Des processus non adiabatiques convertissent rapidement cette énergie sous forme vibrationnelle dans l'état électronique fondamental [3] et la molécule peut ensuite se relaxer par émission spontanée dans le domaine de l'infrarouge. Au-delà de ce schéma général, de nombreuses interrogations demeurent concernant le processus de chauffage stochastique et la nature, la cinétique et la stabilité des PAH alors qu'ils jouent un rôle essentiel dans la chimie du milieu interstellaire.

Plusieurs expériences ont été menées sur la cinétique de relaxation de PAH cationiques dans des anneaux de stockage [4,6] et des pièges à ions [5], dans des conditions de faible densité, permettant d'étudier la relaxation jusqu'à des échelles de temps de l'ordre de plusieurs dizaines de millisecondes. Elles montrent que la relaxation dépend de la compétition entre quatre processus : émission spontanée dans le domaine de l'infrarouge, dissociation (essentiellement par émission de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> et d'hydrogène atomique H), isomérisation et fluorescence récurrente. Ce dernier processus se manifeste lorsqu'il existe un ou plusieurs états électroniques excités proches du fondamental, pouvant être excités par conversion interne inverse depuis les états vibrationnels de l'état électronique fondamental.[4,5]

Dans cette contribution, nous présentons un modèle statistique de relaxation électronique et vibrationnelle et de spectroscopie d'émission incluant ces différents processus sur des échelles de temps allant de la nanoseconde à plusieurs secondes. Nous présentons des résultats préliminaires dans le cas du cation naphthalène. En particulier, nous discutons en détails de l'importance du processus de fluorescence récurrente pour la survie des ions naphthalène lorsque ceux-ci absorbent des photons portant une énergie de plusieurs électronvolts, comme cela peut se produire dans les régions les moins denses du milieu interstellaire.

- [1] A. Léger and J. L. Puget. *Astron. Astrophys.* 137, L5 (1984).
- [2] J. Cami, J. Bernard-Salas, E. Peeters, and S. E. Malek. *Science* 329, 1180 (2010).
- [3] K. Sellgren, M. W. Werner, and H. L. Dinerstein. *Astrophys. J.* 271, L13 (1983).
- [4] M. H. StockeY, J. N. Bull, H. Cederquist, S. Indrajith, M. Ji, J. Navarro Navarrete, H. T. Schmidt, H. Zetergren, and B. Zhu. *Nature Commun.* 14, 395 (2023).
- [5] M. Saito, H. Kubota, K. Yamasa, K. Suzuki, T. Majima, and H. Tsuchida. *Phys. Rev. A* 102, 012820 (2020).
- [6] J. Bernard, M. Ji, S. Indrajith, M. H. Stocket, J. E. Navarro Navarrete, N. Kono, H. Cederquist, S. Martin, H. T. Schmidt, and H. Zetergren. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25, 10726 (2023).

## POSTER 5

### Cosmic ray sputtering of ices in the ISM

Eddy Abdo, Emmanuel Dartois

Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), Université Paris-Saclay

Despite the cold environment in molecular clouds (with temperatures reaching 10 K) where we expect molecules to condense on dust grains, we observe a relatively high abundance of species in the gas phase. Because of the high density of these clouds, only cosmic rays are able to deeply penetrate them while the UV field is easily attenuated and cannot reach the center. These cosmic rays (which also induce a secondary UV field inside the cloud) not only contribute highly to the desorption of ices on dust grains and the replenishment of the gas phase, but also play a role in the chemical diversification of the medium as new species are formed. To quantify this effect, laboratory experiments are made where ices of different species deposited at 10K in a high vacuum chamber are irradiated with ions produced by accelerators simulating cosmic rays. Different parameters such as the sputtering yield, radiolysis effective cross section and formed products are then deduced. Molecules observed in space such as PAHs are interesting targets for such experiments. For instance indene, a PAH observed towards the cloud TMC-1 is one of the species studied in my work, where its expected abundances in gas and solid phase are discussed.

## POSTER 6

### The DADI model: A powerful tool to feed a database of spectral properties of molecules of astrophysical interest

N. Brosseau-Habert<sup>1,2</sup>, F. Miradji<sup>2</sup>, M. Devel<sup>2</sup>, S. Picaud<sup>1</sup>

1. Institut UTINAM

2. Institut FEMTO-ST

Astronomical observations of the interstellar medium in the infrared part of the spectrum suggest the existence of many carbon-carbon and carbon-hydrogen bonds through the “Aromatic Infrared Bands” (AIBs) [1]. For its part, the UV absorption spectrum shows a large bump centered at 217.5 nm characteristic of the class of conjugated  $\pi$ -electron systems [2]. These data support a complex carbon chemistry at work, involving large carbonaceous species, ranging from tens to thousands of atoms, on the boundary between big molecules (such as PAHs and fullerenes) and solid grains (such as soot-like particles) [3], some of them bearing oxygen and nitrogen atoms [4, 5].

In order to identify these carbonaceous compounds, a better estimation of their absorption properties, notably in the UV-visible part of the spectrum, is thus needed. That's why a specific method has been developed in our group, inspired by the well-known DDA [6] and PDI approaches [7], that has the distinctive advantage of considering the atomistic details to compute the optical properties. In particular, our model, named DADI (Dynamic Atomic Dipole Interaction) [8], requires the knowledge of the position and frequency-dependent atomic polarizabilities of each atom forming the species under study, to compute its optical properties.

In this work, using frequency-dependent atomic polarizabilities of carbon, hydrogen and oxygen atoms involved in aromatic cycles or aliphatic chains as input parameters, it is shown that the DADI model is able to give an accurate estimation of the absorption cross-sections of molecules such as PAHs (and their oxygenated derivatives), alkanes, fullerenes and also primary soot-like nanoparticles. Moreover, the absorption cross-sections calculated with DADI show an excellent agreement with those resulting from TD-DFT calculations for the same molecules, with however the huge advantage of a very much shorter time of computations. These results open the door for the creation of a large database of optical properties for carbonaceous compounds for astrophysical applications.

[1] T. Chen, Y. Luo, A. Li, A&A, 632 A71 (2019)

[2] C. Dubosq et al., A&A, 634 A62 (2020)

[3] L. Gavilan et al., A&A, 586 A106 (2016)

[4] A.M. Nair et al., PCCP, 26 (2024)

[5] G. Wenzel, Nat. Astron., 9 (2025)

[6] B.T. Draine, ApJ, 333 848-872 (1988)

[7] J. Applequist, J.R. Carl, K.-K. Fung, J. Am. Chem. Soc., 94 2952-2960 (1972)

[8] C. Garcia Fernandez, S. Picaud, M. Devel, JQSRT, 164 69-81 (2015)



## POSTER 7

### Study of water vapor in CO<sub>2</sub>-rich atmospheres

É. Ducreux<sup>1,2,3</sup>, B. Grouiez<sup>1</sup>, B. Vispoel<sup>2</sup>, R.R. Gamache<sup>4</sup>, M. Lepère<sup>2</sup>, S. Robert<sup>3</sup>, L. Régalia<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université de Reims Champagne-Ardenne, CNRS, GSMA, Reims, France

<sup>2</sup> Institute of Life, Earth and Environment (ILEE), University of Namur (UNamur), 61 rue de Bruxelles, Namur, 5000, Belgium

<sup>3</sup> Planetary Atmospheres, Royal Belgian Institute for Space Aeronomy, 3 Avenue Circulaire, 1180 Brussels, Belgium

<sup>4</sup> Department of Environmental, Earth, and Atmospheric Sciences, University of Massachusetts Lowell, 1 University Avenue, Lowell, MA 01854, USA

Water vapor is present in trace amounts in the CO<sub>2</sub>-rich atmospheres of Venus and Mars. Accurate spectroscopic data are essential to retrieve water vapor profiles from atmospheric spectra and to better understand the solar system formation and evolution. However, most radiative transfer models currently rely on air-broadening parameters for H<sub>2</sub>O instead of CO<sub>2</sub>-specific ones, due to a lack of experimental data.

To address this and to follow up the work of Régalia et al. (2019), new measurements of H<sub>2</sub>O spectra broadened by CO<sub>2</sub> were performed at the GSMA laboratory using a high-resolution Fourier transform infrared spectrometer coupled to a 2-meter White cell. Spectra were recorded in several regions of atmospheric interest around 2.7, 2.34 and 1.18  $\mu\text{m}$ . Line parameters were retrieved using multispectrum fitting procedures (Plateaux et al., 2001; Lyulin, 2015). Voigt profile (Armstrong, 1967) was used, leading to W-shaped residuals. These were significantly reduced by using beyond-Voigt profiles (Ngo et al., 2012, 2013): Rautian, speed-dependent Voigt, and speed-dependent Rautian models, indicating the need to account for speed-dependent effects to improve the accuracy of the collisional parameters (Ducreux et al., 2024).

Using the Complex Robert-Bonamy-Ma formalism, a new linelist of CO<sub>2</sub>-collisional parameters was calculated for many H<sub>2</sub>O transitions (Ducreux et al. 2025, submitted). These were used to simulate Venus atmospheric spectra in several infrared transparency windows with the ASIMUT-ALVL radiative transfer model (Vandaele et al. 2006; Spurr, 2008), assessing the impact of using CO<sub>2</sub>-broadened versus air-broadened H<sub>2</sub>O parameters.

Results showed that using air-broadening parameters leads to overestimating the retrieved H<sub>2</sub>O concentrations in CO<sub>2</sub>-rich atmospheres and demonstrates the necessity of dedicated CO<sub>2</sub>-broadened spectroscopic data for accurate retrievals. Future work will extend this approach to the HDO isotopologue.

## POSTER 8

### Nuclear Spin chemistry in protoplanetary disks

M. Gaillard<sup>1</sup>, A. Faure<sup>1</sup>, R. Le Gal<sup>1,2</sup>, and P. Hily-Blant<sup>1</sup>

1. Université Grenoble Alpes, CNRS, IPAG, F-38000 Grenoble, France

2. IRAM, 300 rue de la piscine, F-38406 Saint-Martin d'Hères, France

Molecules with equivalent hydrogen atoms such as  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ , etc. exist in the form of distinct nuclear spin isomers (e.g. para and ortho). Astronomers commonly use the observed ortho-to-para ratios (OPRs) of such molecules to infer “spin” or “formation” temperatures. The actual meaning of these temperatures is, however, debated. It is unclear, in particular, if OPRs can serve as probes for the history and origin of molecules, similarly to isotopic ratios. The aim of this work is to investigate the potential diagnostic power of molecular OPRs in the context of protoplanetary disks. To this end, we have coupled the astrochemical ortho/para network UGAN [2] with a versatile parametric model for the disk structure, adapted from [3]. The chemistry of formaldehyde ( $\text{H}_2\text{CO}$ ) was implemented with the best available kinetics data from literature. We have applied our model to two prototypical disks, TW Hya and HD 163296, where the OPR of  $\text{H}_2\text{CO}$  was spatially resolved thanks to ALMA observations ([4], see Fig.1, and ([1], respectively). The probing capability and origin of  $\text{H}_2\text{CO}$  (icy or gaseous) will be discussed.

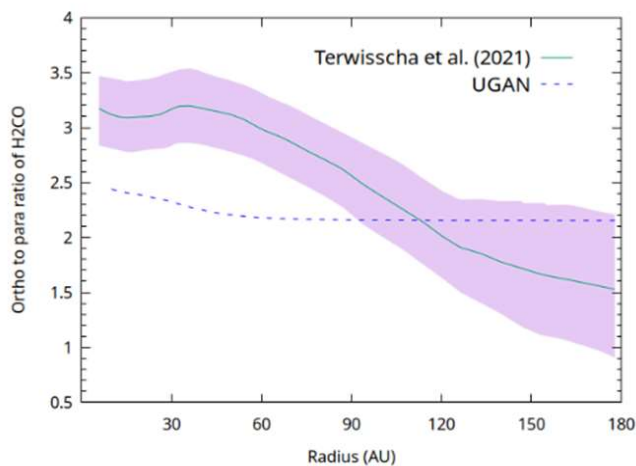


Figure 1: Ortho-to-para ratio of  $\text{H}_2\text{CO}$  in TW Hya as predicted by our model and measured with ALMA [4].

[1] Hernandez-Vera, C., Guzman, V. V., Artur De La Villarmois, E., et al. 2024, The Astrophysical Journal, 967, 68

[2] Hily-Blant, P., Faure, A., Rist, C., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R. 2018, 477, 4454

[3] Le Gal, R., Oberg, K. I., Loomis, R. A., Pegues, J., & Bergner, J. B. 2019, , 876, 72

[4] Scheltinga, J. T. v., Hogerheijde, M. R., Cleeves, L. I., et al. 2021, The Astrophysical Journal, 906, 111, publisher: The American Astronomical Society.

## POSTER 9

### **iSELECTION : An Instrument to Study the Kinetics of Isomer-Selected Gas-Phase Ion-Molecule Reactions**

Corentin Rossi, Anne P. Rasmussen, B  renger Gans, Juraj Jasik, Jan Zabka and Ugo Jacovella

Distinguishing the chemical reactivity of isomers is a fundamental challenge in chemistry, particularly in cluster chemistry, where the number of possible structures increases dramatically with cluster size. This study presents a novel approach for measuring the kinetics of ion-molecule reactions of laser-ablated species in an isomer-specific fashion. This is achieved by combining drift-tube ion mobility with mass spectrometry, enabling isomer characterization and selection prior to investigating the chemical reactivity of species of interest.

We show our ability to determine isomer-specific reaction rate coefficients using the C<sub>40</sub><sup>+</sup> cluster, where multiple isomers coexist. Additionally, we used this setup to characterize and isolate Endohedral metallofullerenes (EMFs—carbon cages encapsulating one metal atoms) structures, enabling further investigation of their gas-phase chemical properties. In particular, we present a comparative study of the reactivity of empty carbon cages and calcium EMFs in the nucleophilic addition of pyridine.

## POSTER 10

### Electronic Spectroscopy of Protonated Phenanthroline Isomers

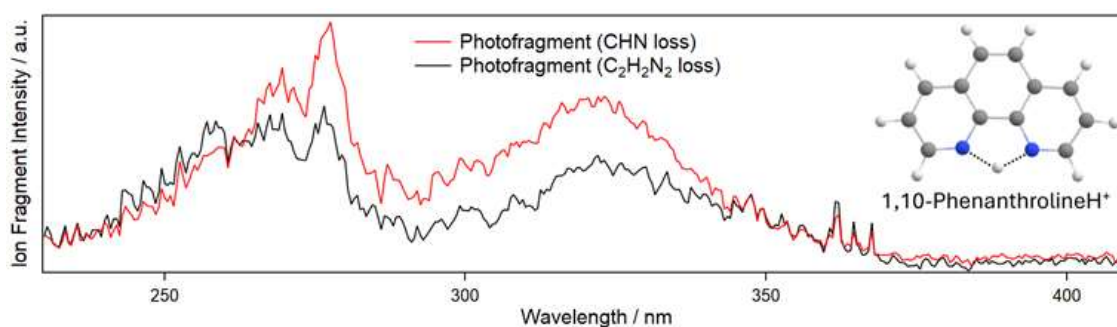
Jack E. Fulker<sup>1\*</sup>, Ana Niedojadlo<sup>1</sup>, Jordan Dezalay<sup>1</sup>, and Jennifer A. Noble<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires (PIIM): CNRS, Aix-Marseille Université, Marseille, France*

**Context:** Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are thought to play an important role in the formation of carbon nanostructures in space. Since the first detection of an aromatic species in the interstellar medium via radio astronomy (benzonitrile, 2018),<sup>[1]</sup> there has been a steady increase in observations of both PAHs and their nitrogen substituted analogues (PANHs).<sup>[2][3]</sup> These observations have renewed laboratory interest in their formation and destruction mechanisms, and particularly in their photostability.<sup>[4][5]</sup> Studying these species in different charge states is also important, as highlighted by a previous study of protonated benzonitrile showing that the main photofragmentation product ( $C_6H_5^+$ ) is predicted to be important precursor of PAHs.<sup>[6]</sup> As a PANH with two substituent nitrogen atoms, phenanthroline presents a good model of nitrogen-bearing PAHs to study their photophysics.

**Investigation:** Photofragmentation spectra of protonated phenanthroline produced under electrospray ionisation (ESI) conditions have been recorded in the 225–420 nm range. Three different isomers were studied to show how the relative nitrogen positions on the PANH influences the excited state energetics, vibronic substructure, and fragmentation pathways - as has previously been shown for another protonated PANH, azaindole.<sup>[7]</sup>

**Results:** High-resolution ( $\pm 0.04$  nm) scans showed clear 0-0 transitions for each phenanthroline isomer as well as the vibronic substructure of the S1 state. The spectra were assigned with the help of Franck-Condon factor PGOPHER simulations from theoretical studies at the CAM-B3LYP/aug-cc-pVDZ level of theory. These experiments are a step in understanding the role that small PANHs may play in the formation of larger aromatic species and towards predicting their detectability.



**Figure 1:** Photofragmentation spectra of protonated 1,10-phenanthroline measured between 225 and 420 nm.

- [1] Brett A. McGuire *et al.*, *Science*, 359, 202-205 (2018)
- [2] Andrew M. Burkhardt *et al.*, *Astrophys. J. Lett.*, 913, L18 (2021)
- [3] J. Cernicharo *et al.*, *Astron. Astrophys.*, 690, L13, (2024)
- [4] Domenik Schleier *et al.*, *ChemPhysChem*, 25, e202300915 (2024)
- [5] Mark H. Stockett *et al.*, *Nat. Commun.*, 14, 395 (2023)
- [6] Ugo Jacovella *et al.*, *Astron. Astrophys.*, 657, A85 (2022)
- [7] Jennifer A. Noble *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 22, 27280-27289 (2020)

## **POSTER 11**

### **The Science Explorer (SciX): The Next-Generation Digital Library for Interdisciplinary Astronomy**

Simon Anghel

The Science Explorer (SciX) is transforming how researchers in astronomy, astrophysics, planetary science, heliophysics, Earth science, and related fields discover, access, and synthesize scientific literature. Developed as the successor to the renowned Astrophysics Data System (ADS), SciX now unifies over 23 million records-including refereed publications and preprints-across all NASA Science Mission Directorate disciplines. Leveraging cutting-edge AI and machine learning, SciX streamlines literature searches, integrates publications with datasets and software, and offers advanced bibliometric tools for mapping research trends and fostering interdisciplinary collaboration. This presentation will introduce SciX's core features, demonstrate practical workflows for literature review and data integration, and showcase how SciX can enhance productivity and collaboration for the astronomy and broader scientific community.

## POSTER 12

### Action Spectroscopy setup to study IR spectra of PAH clusters in Extreme Conditions

F. Baterdouk<sup>a</sup>, A. Marciniak<sup>a,b</sup>, S. Zamith<sup>a</sup>, J.-M. L'Hermite<sup>a</sup>, P. Moretto-Capelle<sup>a</sup>, A. Bonnamy<sup>a,b</sup>, A. Simon<sup>c</sup>, and C. Joblin<sup>b</sup>

<sup>a</sup> LCAR/FeRMI, Université de Toulouse, CNRS, 118 Route de Narbonne, 31062 Toulouse

<sup>b</sup> IRAP, Université de Toulouse, CNRS, CNES, 9 Av. du Col. Roche 31028 Toulouse Cdx 4

<sup>c</sup> LCPQ/FeRMI, Université de Toulouse, CNRS, 118 Route de Narbonne, 31062 Toulouse

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are abundant molecules in the interstellar medium (ISM), particularly in photo-dissociation regions (PDRs) and protoplanetary disks and their infrared emission is currently observed in unprecedented details by the James Webb Space Telescope [1]. The observed aromatic infrared bands (AIBs) reveal broad and overlapping features, making the identification of specific PAH species challenging. Moreover, small molecules such as CO, OH [2], and H<sub>2</sub>O have been detected in various regions of the ISM. PAHs and small molecules may also exist as clusters or complexes in regions that are more shielded from ultraviolet radiation. In this context, comprehensive astrochemical datasets on PAHs and their derivatives are urgently needed to support their detection and evaluate their roles in astrophysical environments. Our laboratory work focuses on the interaction of astro-PAHs and their complexes with photons under cryogenic and collision-less conditions [2].

More specifically, the aim of my PhD thesis is to develop a setup to perform IR action spectroscopy on cationic PAH clusters and investigate their interactions with water molecules. This setup will permit exploring the chemical evolution of PAHs in cold molecular clouds, where temperatures can be as low as ~10 K. The molecular aggregation source that we use in the laboratory can produce PAH clusters up to 40 molecules and water molecules can be stucked to them during their growth or after their production [3]. Coming from the source, the molecular beam of ionized clusters is guided by a quadrupole ion guide into a cryogenic ion trap. The cryogenic ion trap is a unique instrument in which ions can be trapped and tagged with small molecules (such as water) and rare gas atoms. The tagging technique allows us to perform action spectroscopy at low temperatures due to the weak interaction of the rare gas atom (the tag) with the clusters. The vibrational transitions of the clusters can then be obtained by absorption of one or a few infrared photons by recording the mass of the clusters without tag using an orthogonal time-of-flight (TOF) mass spectrometer. We will first use an OPO laser in the range 2.5 - 4.5  $\mu$ m. Several masses from the trapped ions can be detected and measured at the same time with a good resolution. Our studies will also benefit from the use of the "Agrégats" setup in which the binding energies of PAH with small molecules, in particular water, can be measured by collision induced dissociation (CID). The dissociation pathways of the mixed PAH-water complexes have been shown to provide information on the structure and stability of these complexes [4]. Our studies will be complemented by theoretical calculations of IR spectra and minimum-energy structures to aid in the identification of isomeric species in collaboration with LCPQ.

[1] R. Chown et al., 'PDRs4All - IV. An embarrassment of riches: Aromatic infrared bands in the Orion Bar', *A&A*, vol. 685, p. A75, May 2024, doi: 10.1051/0004-6361/202346662.

[2] M. Zannese et al., 'OH as a probe of the warm-water cycle in planet-forming disks', *Nat Astron*, vol. 8, no. 5, pp. 577–586, May 2024, doi: 10.1038/s41550-024-02203-0.

- [3] A. Marciniak et al., 'Studying the Interaction Between VUV Photons and PAHs in Relevant Astrophysical Conditions', in European Conference on Laboratory Astrophysics ECLA2020, V. Mennella and C. Joblin, Eds., Cham: Springer International Publishing, 2023, pp. 237–243.
- [4] I. Braud, S. Zamith, and J.-M. L'Hermite, 'A gas aggregation source for the production of heterogeneous molecular clusters', *Review of Scientific Instruments*, vol. 88, no. 4, p. 043102, Apr. 2017, doi: 10.1063/1.4979639.
- [5] A. M. Nair et al., 'Diversity of protonated mixed pyrene–water clusters investigated by collision induced dissociation', *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 26, no. 7, pp. 5947–5961, 2024, doi:10.1039/D3CP05734H.



## POSTER 13

### **Disentangling the spectra of complex organic radicals using Faraday-rotation-based millimeter-wave instrumentation.**

R. CHAHBAZIAN, O. PIRALI

Université Paris-Saclay, CNRS, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91405 Orsay, France

Large radicals are involved in the formation and destruction processes leading to the formation of complex organic molecules (COMs) detected in the interstellar medium[1]. They are also important intermediates in atmospheric and combustion chemistry[2].

In this poster, a methodology to study specific dehydrogenated COMs in the gas phase will be described, illustrated by our recent results concerning the acetonyl ( $\text{CH}_3\text{COCH}_2$ ), the vinyloxy ( $\text{CH}_2\text{OCHO}$ ), and the methoxy-carbonyl ( $\text{CH}_3\text{OCO}$ ) radicals at millimeter and sub-millimeter wavelengths (160–450 GHz). The acquisition of the radical species spectra is performed using Faraday rotation modulation spectroscopy, allowing to detect paramagnetic species only and to discriminate the spin rotation components for each transition[3]. Thanks to the very broad spectral ranges covered in our recordings, we could rapidly identify series of lines using Loomis-Wood graphical representation[4], simplifying considerably the laboratory detection of these new species for which no rotational information was available in the literature.

We will present the instrumental developments and the methodology used to analyze these relatively large heavy radicals. This methodology will be applied to many other large radical species in the future.

Keywords — astronomy/atmospheres, radicals and ions, microwave/THz, (hyper)fine structure/tunneling

[1] Scibelli & Shirley, *The Astrophysical Journal* 891 (2020).

[2] Alam, Rickard, Camredon, et al., *The Journal of Physical Chemistry A* 12468 (2013).

[3] Viciani, De Natale, Gianfrani, et al. *Optical Society of America* 301 (1999)

[4] Bonah, Zingsheim, Müller, et al., *Journal of Molecular Spectroscopy*, 388 (2022)

## POSTER 14

### Low-Temperature Hydrogenation of Acetaldehyde: Surface Interactions and Reaction Pathways

Saoud BAOUCHE<sup>1</sup>, Abdellahi SOW<sup>1</sup>, Emanuele CONGIU<sup>1</sup>, François DULIEU<sup>1</sup>

<sup>1</sup>LIRA-CY, CY Cergy Paris Université, 5 Mail Gay Lussac, 95000 Neuville-sur-Oise, France

This study investigates the reactivity of acetaldehyde ( $\text{CH}_3\text{CHO}$ ) with hydrogen atoms under ultra-high vacuum (UHV) conditions at cryogenic temperatures. Experiments were conducted on both gold and amorphous solid water (ASW) substrates to simulate interstellar ice analogs. The primary objective was to elucidate the efficiency and mechanisms of acetaldehyde hydrogenation, with implications for both astrochemical processes and surface catalysis.

Acetaldehyde is a key intermediate in various chemical environments, including interstellar mediums and catalytic surfaces. Understanding its interaction with hydrogen atoms is crucial for modeling complex organic molecule (COM) formation in space and for designing efficient catalytic processes on Earth.

#### Methods:

- **Experimental Setup:** Utilized an UHV chamber equipped with a He cryostat to maintain substrate temperatures between 5 K and 300 K.
- **Substrates:** Employed both gold surface and ASW films to mimic catalytic and interstellar conditions, respectively.
- **Hydrogen Atom Generation:** Produced H atoms via microwave-discharged plasma, subsequently cooled to 100 K before exposure to the substrate.
- **Analysis Techniques:** Monitored reactions using Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and temperature-programmed desorption (TPD) coupled with quadrupole mass spectrometry (QMS)

## POSTER 15

### **Formation and study by Raman spectroscopy of nanometric carbon particles (PAH, Fullerene, soot) in conditions close to the interstellar medium.**

Gaëtan Clément and Thomas Pino

Université Paris-Saclay, CNRS, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), 91405 Orsay, France

My poster consists of an introduction, explaining the astrophysical interest of studying nanometric carbon particles, and 2 parts : one part explaining the experimental setup, and a second part dealing with the study of Raman spectra to characterise the species obtained.

The first part includes a sub-section on the production of nanometric carbonaceous species via a flat premixing flame, with an explanation of the phenomena present in the combustion allowing the formation of species and the different variables allowing the flame to be modified. In a second sub-section, I present an explanation of the cooling system, the objective of this system is to obtain conditions similar to those in the interstellar medium, as well as the optical setup present on the experimental device for carrying out various optical tests (mainly Raman spectroscopy, which is the main test carried out at the moment).

In the second part, I first describe the theory of Raman spectroscopy, then go into more detail for the study of carbonaceous molecules (explanation of the main peaks present in the spectra). Finally, I describe the variations observed in the Raman spectra when the flame characteristics are modified, and the importance of this study.

Finally, I explain in the poster the prospects for this project, which mainly involve the study of molecules using laser-induced fluorescence (LIF), laser-induced incandescence (LII) and time-of-flight mass spectrometry to obtain different information about the characteristics of the species present.

## Liste des participants

| Nom             | Prénom    | Adresse mail                                    |
|-----------------|-----------|-------------------------------------------------|
| Abdo            | Eddy      | eddy.abdo@universite-paris-saclay.fr            |
| Anghel          | Simon     | simonanghel@gmail.com                           |
| Baouche         | Saoud     | saoud.baouche@obspm.fr                          |
| Baterdouk       | Fatima    | baterdouk@irsamc.ups-tlse.fr                    |
| Bergeat         | Astrid    | astrid.bergeat@u-bordeaux.fr                    |
| Boduch          | Philippe  | boduch@ganil.fr                                 |
| Borja           | Damien    | damien.borja@cnrs.fr                            |
| Brosseau-Habert | Nicolas   | nicolas.bh@femto-st.fr                          |
| Çarçabal        | Pierre    | pierre.carcabal@cnrs.fr                         |
| Chahbazian      | Rosemonde | rosemonde.chahbazian@universite-paris-saclay.fr |
| Clement         | Gaetan    | gaetan.clement@universite-paris-saclay.fr       |
| Dartois         | Emmanuel  | emmanuel.dartois@universite-paris-saclay.fr     |
| Demyk           | Karine    | karine.demyk@irap.omp.eu                        |
| Drissi          | Myriam    | myriam.drissi@synchrotron-soleil.fr             |
| Ducieux         | Emile     | emile.ducieux@univ-reims.fr                     |
| Engrand         | Cecile    | cecile.engrand@ijclab.in2p3.fr                  |
| Faure           | Alexandre | alexandre.faure@univ-grenoble-alpes.fr          |
| Fulker          | Jack      | jack.fulker@univ-amu.fr                         |
| Gaillard        | Mathéo    | matheo.gaillard@univ-grenoble-alpes.fr          |
| Hardy           | Pierre    | pierre_hardy@etu.u-bourgogne.fr                 |
| Jacovella       | Ugo       | ugo.jacovella@universite-paris-saclay.fr        |
| Josselin        | Eric      | eric.josselin@umontpellier.fr                   |
| Maillard        | Agathe    | agathe.maillard@univ-lille.fr                   |
| Noble           | Jennifer  | jennifer.noble@univ-amu.fr                      |
| Rossi           | Corentin  | corentin.rossi@universite-paris-saclay.fr       |
| Teissonniere    | Romain    | romain.teissonniere@etu.umontpellier.fr         |
| Toubin          | Céline    | celine.toubin@univ-lille.fr                     |
| Tourrel         | Jade      | jade.tourrel@etu.umontpellier.fr                |
| Wakelam         | Valentine | valentine.wakelam@u-bordeaux.fr                 |
| Zannesse        | Marion    | marion.zannese@universite-paris-saclay.fr       |