

RAPPORT DE STAGE

Laboratoire d'Études du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique et Atmosphères . <u>Etude de la formation des molécules d'eau en milieu interstellaire avec analyse Infra-Rouge</u>

Rapport de stage de la période du 9 Mai au 5 juin 2022 / fin de stage prévue le 1 Juillet 2022 Nanterre, le 5 Juin 2022

STAGIAIRE : WISSEM GHARIANI L3-PHYSIQUE,CHIMIE PROFESSEUR REFERENT : PHILIPPE BANET

TUTEUR DE STAGE : FRANCOIS DULIEU







<u>Remerci</u>ement

Je remercie mon directeur de stage, Francois Dulieu, pour m'avoir donné une chance de travailler dans son laboratoire. Il m'a aider a comprendre le fonctionnement du monde de la recherche. Je le remercie de m'avoir proposé un sujet de stage aussi passionnant que la formation de glace dans l'espace. Je le remercie aussi pour son invitation a participer a un séminaire a l'Institut Astrophysique de Paris que j'ai trouvé riche en connaissances. Ceci m'a permis de comprendre que la vie de chercheur ne se limite pas uniquement a la recherche pure et dure mais en réalité à un corpus de pratique telle que la vie en laboratoire, l'échange de connaissance durant les séminaires, le partage du savoir par l'éducation ou encore la lecture d'étude faites par d'autres équipes de recherche .

Je remercie Saoud Baouch et Laurent Nussbaum pour leur precieuses explications des équipements expérimentaux du LERMA tel que VENUS ou encore FORMOLISM.

Je remercie Abdi-Salam Mohamed-Ibrahim et Henda Chaabouni pour les explications complémentaires apportées durant le stage .

Je remercie Julie Vitorino et Basile Husquinet pour leur aide précieuse et le partage des connaissances de leurs expériences

La qualité des explications et la connaissance scientifique de chacun fait de ce laboratoire un endroit de partage. La polyvalence de ce laboratoire est surprenante et elle m'a prouvé que l'échange des connaissances de chacun est la clef d'un épanouissement scientifique.

Je remercie mes professeurs de licence pour m'avoir apporté les connaissances nécessaire et le savoir indispensable pour travailler dans un laboratoire.

Table des matières

Table des matières	Ι
Table des figures	II
Le laboratoire	III
Introduction	2
I. Milieu interstellaire	
1 Le cosmos	3
1.1 Nucléosynthèse stellaire	
1.2 Nébuleuse	
1.3 Milieux interstellaire	4
2 Eau dans le cosmos	5
2.1 Formation	5
2.2 Mécanisme réactionnel sur les grains et substrats	5
II. Condition en laboratoire	
3 VENUS	6
3.1 Element du dispositif	6
3.1.1 Jet moléculaire	6
3.1.2 Chambre secondaire	7
3.1.3 Chambre principale	7
3.1.4 Surface froid	7
3.2 Difficulté rencontré	8
4 Spectrometre Infra-Rouge	8
4.1 Description et fonctionnement	8
III. Analyse de H2O	
5 Protocole expérimental	10
5.1 Méthode de dépôt	10
5.2 Type de glace formée	10

6 Logiciel IR	11
6.1 Analyse et comparaison des spectres IR	12

Conclusion	13
Bibliographie	
Annexe et complement	IV

I

TABLE DES FIGURES

Table des figures

1.1 - Nucleosynthese formant les elements H, He, C, N, O - Lelivrescolaire	3
1.2 - Solar elemental abundances - semantic scholar	3
1.3 - Nuage de Magellan - logiciel Aladin/Vizier	4
1.4 - Grain de graphite trouvé dans la météorite Murchison - Bernatowicz et al. 1996	4
1.5 - Spectre IR de la protoetoile HH46 pris par spitzer - NASA/ESA/A. Noriego-Crespo	4
2.1 - Schéma de la molécule d'eau - Wikipedia	5
2.2 - Schéma du processus d'adsorption et de désorption - wikipedia	5
3.1 - Schéma descriptif de l'expérience VENUS - Thèse de T.Nguyen	6
3.2 - Photo du surfratron microonde transformant le H2 en H*	6
3.3 - Photo du moniteur de pression de VENUS	7
3.4 - Photo de VENUS	7
3.5 - Photo du suivie de temperature via le Lakeshore	8
4.1 - Caractéristique du détecteur MCT - Wikipedia	8
4.2 - Schema de la partie émettrice Bruker Vertex 70 FT-IR - Research gate	9
5.1 - Photo du moniteur du logiciel de suivie IR de VENUS	10
5.2 - Modèle de glace d'eau amorphe - C.F. Mejía et al. 2015 / IAP	11
6.1 - Capture d'écran du feat fait sur le pic spectral de OH de l'eau unique	12
6.2- Capture d'écran du feat fait sur le pic spectral de OH de l'eau avec CO2	12

ORGANISATION

En France, les laboratoires de recherche sont affiliés à un ou plusieurs établissements d'enseignement supérieur (tutelles), et un organisme de recherche comme le CNRS, l'INSERM, l'INRAE, l'CNES...

Le laboratoire de recherche d'Astrochimie LERMA du site de neuville est affilié au l'université de Cergy Paris Université et au CNRS.

Le LERMA un laboratoire d'Astrochimie situé dans le bâtiment D du site de Neuville du Cergy Paris Université.

Ce laboratoire est spécialisé dans la recherche sur la formation de molécules dans l'espace.

Pour compléter les recherches, le LERMA étant un laboratoire du CNRS (UMR8112), il bénéficie de partenariat avec tous les laboratoires d'Astrochimie notamment le LERMA de La Sorbonne et de l'Observatoire de Paris.

FINANCEMENTS

Le financement du LERMA repose sur les subventions de la faculté de CY-Cergy Paris Université, mais à également des projets de recherche ou de thèse avec l'Agence Nationale de Recherche (ANR) ou les bourses de l'école doctorale, qui finance une partie des recherches.

COMPOSITION

Le LERMA se compose de 12 personnes:

Francois Dulieu (Responsable scientifique) Saoud Baouche (Ingénieur, Chercheur) Abdi-Salam Mohamed-Ibrahim (MCF) Henda Chaabouni (MCF) Emanuele Congiu (MCF) Audrey Moudens (MCF) Stéphane Diana (Ingénieur Informatique) Laurent Nussbaum (Technicien) Julie Vitorino (Doctorante) Francesco Grieco (Doctorant) Shreya Kakkenpara Suresh (Doctorante) Sébastien Crispeels (Secretaire)

Introduction

Depuis la nuit des temps, l'homme s'intéresse au ciel nocturne. Il a puisé dans son imagination pour structurer les histoires des comptes et légendes en reliant point à point les étoiles du ciel pour dessiner les constellations.

Depuis les premiers écrits relatés, très tôt dans notre civilisation, l'existence des constellations a été pour l'homme une évidence. La compréhension du ciel durant l'Antiquité et le Moyen-âge a permis de développer les bases de la recherche scientifique en Astrophysique. Aujourd'hui, l'existence des constellations divise le ciel en 88 parties non-égale dans l'hémisphère nord et sud.

Durant ces 500 dernières années, la connaissance en Astronomie, c'est accéléré et les premières galaxies et nébuleuses ont pu être répertoriées.

L'étude de ces objets est aujourd'hui primordiale pour comprendre l'apparition de la vie sur Terre et les conditions de son apparition.

C'est pour répondre à ces problématiques que le LERMA étudie, dans les conditions le plus proche possible de l'espace interstellaire, la formation de radicaux et de molécules pré-biotique, molécule indispensable à l'apparition de la vie sur Terre tel que l'eau, l'ammoniac, le monoxyde de carbone ou même les acides carboxylique.

La compréhension des processus de formation de ces molécules pourrait répondre aux questions :

"D'où vient la vie ? D'où venons-nous ? Pourquoi l'eau, élément de la vie sur Terre et pas l'ammoniac ?".

Cependant, la recherche au LERMA nécessite une équipe de chercheurs et de technicien permettant la réalisation de ces expériences simulant le milieu interstellaire, soit, E-10 Bar à 10 K (VENUS). C'est avec cette équipe que je passerais le mois de Mai et Juin pour comprendre comment fonctionne ce laboratoire de recherche en étudiant la formation de l'eau sur les grains de poussière interstellaire.

<u>I - Milieu interstellaire</u>

1 - Le Cosmos

Dans notre univers, toutes les molécules et les atomes que nous observons sont issus de la fusion des étoiles (nucléosynthèse). En effet, c'est dans ces étoiles, que sont produits les atomes des molécules d'eau que nous buvons ou de l'air que nous respirons.

1.1 - Nucléosynthèse stellaire

Depuis la découverte de la nucléosynthèse stellaire par l'apparition d'un l'article en 1939 (Hans Bethe and al. 1939) confirmant la formation des atomes d'hydrogène, de carbone, d'azote et d'oxygène, nous ne savons que l'intérieur d'une étoile et un environnement propice à la formation d'atome.



Proton Neutron Positon γ Rayon gamma ν Neutrino
FIG 1.1 – NUCLEOSYNTHESE FORMANT LES ELEMENTS H, HE, C, N, O ; <u>LELIVRESCOLAIRE</u>

<u>1.2 - Nébuleuse</u>

La fin de vie d'une étoile est souvent cataclysmique (supernovae). C'est à la suite de ce cataclysme sur une longue ou une courte période que se forment les nébuleuses. L'observation de nébuleuse nous permet de retrouver des éléments produits par l'étoile à l'origine (cf figure 1.2). La présence dans ces nuages interstellaires de molécules issues de la nucléosynthèse stellaire est aujourd'hui connue et beaucoup étudiée.

Les études et les expériences du LERMA, impliquent des conditions similaires au milieu interstellaire présentes dans ces nébuleuses et plus précisément dans les grains de poussière interstellaire. Les conditions thermodynamiques extrêmes sont de l'ordre de E-10 mbar et dépassant rarement la dizaine de °K.

Des études comme celle menées par (E. V. van Dishoeck and al. 2014) explique bien que la proportion des molécules dans les nébuleuses correspond à la proportion d'atome formé dans l'étoile mourante (cf figure 1.2).

Element	Abundance	Element	Abundance
Н	1.00	Mg	4.0×10^{-5}
He	0.085	Al	2.8×10^{-6}
С	2.7×10^{-4}	Si	3.2×10^{-5}
Ν	6.8×10^{-5}	S	1.3×10^{-5}
0	$4.9 imes 10^{-4}$	Р	2.6×10^{-7}
Na	1.7×10^{-6}	Fe	3.2×10^{-5}

Sur la figure 1.2 est indiqué la proportion d'atome formé durant la vie d'une étoile.

Hydrogène, Hélium, Carbone, Oxygène sont les principaux éléments produits.

Par conséquent, les plus abondante dans les nuages interstellaire seront majoritairement composé de ces atomes cité plus haut.

FIG 1.2 SOLAR ELEMENTAL ABUNDANCES - SEMANTIC SCHOLAR

PAGE |4

1.3 - Millieu interstellaire

Le milieu interstellaire est bien visible sur la photo du grand nuage de Magellan ci-dessous. Les zones sombres signalent la présence des poussières qui absorbent la lumière des étoiles dans le visibles et l'IR. Les poussières et le gaz sont concentrés dans un disque étroit autour du plan moyen de la galaxie.



FIG 1.3 – NUAGE DE MAGELLAN EN DIFFERENT LONGUEUR D'ONDE EN NM SOIT - PRIS SUR LE LOGICIEL ALADIN/VIZIER

Sur la figure 1.3 est montré : - en bas visible(400-600) - en haut gauche UV (170) - haut droite IRradio (8500 - 12500)

Le gaz est principalement constitué d'hydrogène, l'élément le plus abondant de l'univers. Ce dernier existe sous forme atomique ou moléculaire. Le gaz interstellaire contient aussi des traces d'éléments plus lourds, également sous la forme d'atomes ou de molécules comme l'Oxygène , le Carbone ou l'Azote . La présence des ces éléments en milieux interstellaire favorise la formation de molécules et de grain couvert de ces molécules .La figure 1.4 montre bien la structure du grain.



FIG 1.4 - À GAUCHE - GRAIN DE GRAPHITE TROUVÉ DANS LA MÉTÉORITE MURCHISON. LA COMPOSITION INDIQUE QUE LE GRAIN S'EST FORMÉ LORS D'UNE EXPLOSION SUPERNOVAE AVANT DÊTRE INJECTÉ DANS LE MILIEU INTERSTELLAIRE. LE CENTRE DU GRAIN EST UN PETIT COEUR DE TITANIUM-CARBIDE. - BERNATOWICZ ET AL, 1996 /APJ V.472, P.760

C'est à la formation d'eau autour de ces grains de poussière interstellaire que l'on va nous interessé durant ce stage. La glace d'eau est visible en IR au alentour de 3200 cm-1. Sur la figure 1.5 on distingue un bande large OH à 3200-3400 cm-1



FIG 1.5 - SPECTRE IR HH46 .DETECTION DES GLACES AUX ALENTOURS DE LA PROTOETOILE HH46 IRS PRIS PAR SPITZER NASA/ESA/A. NORIEGO-CRESPO

2 - Eau dans le cosmos

2.1 - Formation

L'eau est une molécules très abondante dans l'univers. Elle est composé de 2 constituants extrêmement abondant dans l'univers. Nous savons que la formation d'eau solide est possible à la surface des grains de poussière interstellaire. La molécule d'H2O est polarisé. Par conséquent sont moment dipolaire non-nul permet sa detection en IR.



FIG 2.1 – SCHEMA DE LA MOLECULE D'EAU AVEC SONT L'ANGLE FORMÉ ET LA DISTANCE DES LIAISON OH -WIKIPEDIA

En chimie nous savons que l'eau est composé d'un atome principal qui est l'oxygène .

L'oxygène possède 2 doublets soit 2 nuages électronique non liant.

Quand on étudie la répartition de ce nuage électronique, on comprend que les liaison O-H sont repoussé par ce doublet d'électron car le nuage repousse les orbitales sigma O-H. Ainsi la molécule d'eau est plane coudé. Les liaisons faites entre les molécules de H2O permet d'obtenir des structure de glace très divers tel la glace poreuse, compact ou une glace cristalline. On sait que la masse de l'eau est de 18 car on additionne la masse de l'Oxygène 16 et des deux Hydrogènes 1. 16+2=18 La géométrie de la molécule d'eau est responsable de la forme de la glace amorphe.

2.2 - Mecanisme réactionnel sur les grains et substrats

Sur surface froide, il y a de l'adsorption. Ce processus se décompose en deux.

La physisorption et chimisorption.

Les sites physisorbés à faibles interaction de Van der Waals avec des profondeurs de puits dans la gamme 10-400 meV à une distance de quelques angströms et des sites chimisorbés liaison covalente avec une force de \approx 1-10 eV près de la surface. (Minimale et al. 2014)

Dans une thèse publiée en 2014 (M.Minissale et al. 2014), on sait que la surface de substrat est soumise à des effets quantiques. En effet, la migration de surface des molécules n'est possible que si la barrière de potentiel est franchie par effet tunnel (Ehop).



FIG 2.2 – SCHEMA DU PROCESSUS D'ADSORPTION ET DE DESORPTION - WIKIPEDIA

<u>II - Condition en laboratoire</u> 3 - VENUS

3.1 - Elements du dispositif

Le dispositif VENUS a été conçu en 2011 par Saoud Baouche. Ce dispositif permet d'étudier les réactions chimiques formées dans le cosmos (nébuleuses, disque proto-planétaire, comète) en étudiant leurs interactions sur des surfaces condensées. Ces réactions sont à très basses pressions et aux températures. Par conséquent, les expériences menées avec VENUS sont dans l'ultravide et proche du 0 absolu. Pour rester à ces conditions extrêmes, l'enceint de VENUS est fabriqué sur mesure en Acier Inox 304 et 316 qui sont des métaux résistant à la rouille. Pour garantir un ultravide plus stable, les joints sont en Cuivre.

Ainsi, VENUS est capable de reproduire ces conditions dites, extrêmes.

Pour ce faire, ce dispositif est équipé de différents appareillages.



VENUS = VErs de NoUvelles Synthèse QMS = Spectrometre a quadrupole de masse IR = Infrarouge Cracking Pattern = Brisure de molecule ML = MonoLayer (Monocouche) LB = Left Beam (Jet Gauche) CB = Center Beam (Jet Centre) RB = Right Beam (Jet Droite)

FIGURE 3.1 – SCHÉMA DESCRIPTIF DE L'EXPÉRIENCE VENUS ; THÈSE DE T.NGUYEN 9

3.1.1 Jet moléculaire

Vénus est équipée de 3 jets LB, CB et RB . Ces 3 jets sont dirigés vers la surface du substrat. C'est sur ce substrat que les réactions seront fait. Ces jets sont aussi capables d'envoyé des noyaux d'atome en convertissant un gaz moléculaire en plasma atomique. Cette réaction est possible grâce à un surfatron à haute fréquence (MicroOndes). On observe sur la figure ci-dessous le plasma d'hydrogéné. La couleur provient des raies HI et HII (Lyman et Balmer). Le mélange bleu et rouge donne cette couleur rosâtre.



FIGURE 3.2 – PHOTO DU SURFRATRON MICROONDE TRANSFORMANT LE H2 EN H*

PAGE |7

3.1.2 Chambre secondaire

La chambre secondaire est composée de deux enceintes (Ch1 et Ch2) séparées par un diaphragme. Ces deux chambres sont respectivement à E-8 et E-9 mBar. Ce gradient de pression permet d'accélérer les molécules provenant du jet tout en gardant un flux de section très fine. Ces chambres sont notées sur le moniteur grâce à des capteurs barométrique très précis.

BC-F	2,972E-2	ChP	3,198E-10	Ch1	7,809E-9
Manifold	1.919E-2	Ch2	8,855E-11	BT	1,415E-5
InfraRoug	1.058E-1	BR	1,748E-6	BC	1,451E-6
DT E	1 820F-2	BR-F	5,506E-2	Roots	4,996E-9
BI-F	I, OLOL L				Inc. and

FIG 3.3 - PHOTO DU MONITEUR DE PRESSION EN MBAR DES DIFFERENT COMPARTIMENT ET JETS DE VENUS Il est important de vérifier la pression au sein des différentes chambres et jets de VENUS afin de ne pas endommager les capteurs.

Sur ma figure ci-dessus, on constate plusieurs pressions différentes.

F = Forward (en sortie) donc BC-F est la pression en sortie de Beam Center (Jet central)

cf annexe pour "conversion des pressions"

3.1.3 Chambre principale

Le compartiment principal est la chambre où se trouvent le substrat et le cryostat. C'est la chambre principale qui a la pression la plus basse E-10 à E-11 mBar. C'est dans cette chambre que l'expérience est faite avec l'IR et le QMS.



3.1.4 Surface froide

C'est un substrat en Or d'un rayon de 9 millimètres qui reproduit la surface du grain de poussière interstellaire. Ce substrat est refroidi avec un cryostat type Gifford McMahon fonctionnant par une détente de joule-Gay Lussac de l'hélium permettant d'arriver à atteindre une température d'helium à 4 K. Les molécules en provenance des jets convergent vers la surface du substrat ultra froid. Dès lors on utilisera des dispositifs tels que le QMS ou le spectromètre IR pour étudier les réactions chimiques qui se déroulent à la surface du substrat. C'est sur le substrat que se déposeront les molécules en formant des multicouches ou Mono Layer. On sait que 1 ML possède E+15 sites.

$1 \ ML = 10^{15} molecule/cm^2$

Pourquoi utiliser l'Or tandis que les grains de poussière sont constitués de silicium et d'autres métaux ?

Ce choix de matériau a l'avantage principal de ne pas s'oxyder au cours du temps, il ne réagit quasiment pas, en effet l'Or est un métal qui ne crée pas de liaison avec les molécules déposée. Les atomes d'Or ne peuvent donc pas être arrachés de l'échantillon lors des réactions chimiques. Le substrat est en général choisi selon son intérêt astrophysique et son intérêt expérimental. Les grains de poussière interstellaire sont des surfaces qui ne s'oxyde pas. Par conséquent, il semble évident que le choix du matériau du substrat doit respecter ces conditions. On utilise ainsi l'Or, mais on peut utiliser le Coronene (C24H15) ou le graphite (FORMOLISM).

Il est possible de connaître la température en direct du substrat grâce au Lakeshore qui est un thermomètre ultrasensible.



3.2 - Difficultés rencontrées

Durant les expériences, il arrive parfois qu'un jet se brise. Les fuites elles arrivent plus souvent. On peut détecter la fuite via une analyse avec le QMS. Concrètement, si le QMS affiche une quantité de masse non envoyé, on sait que c'est du a une infiltration d'air. Ainsi, on observe sur l'écran de suivi temporel du QMS les masses d'eau 18, diazote 28 ou dioxygène 32 anormalement élevées. Le nombre important de composants de VENUS multiplie les sources de problème et retarde ainsi les manipulations.

4 - Spectromètre InfraRouge

4.1 - Description et fonctionnement

Pendant ce stage, j'ai dû comprendre le fonctionnement de VENUS, mais aussi du Spectromètre IR. Le substrat étants en Or, il réfléchit parfaitement la lumière tel un miroir ainsi l'usage d'un spectromètre optique convient parfaitement.

Le spectromètre Infrarouge Vertex est décomposé en 2 dispositifs. La partie émettrice et la partie détectrice situées de chaque côté de la chambre principale. La partie émettrice émet un laser rouge dirigé vers le substrat. Le rayon est par la suite réfléchi sur la surface et dirigé vers le détecteur IR qui est un détecteur MCT (alliage Tellure-Cadmium-Mercure).

	type	gamme spectrale (µm)	nombre d'onde (cm ⁻¹)
Tellurure de mercure-cadmium (MCT, HgCdTe)	photoconducteur	0,8-25	12500-400

FIG 4.1 - CARACTERISTIQUE DU DETECTEUR MCT - WIKIPEDIA

Ce détecteur est régulièrement refroidi à l'azote liquide afin de diminuer le bruit infrarouge ambiant. Ce processus de refroidissement permet d'être plus précis dans les mesures cependant, le bruit ne disparaît pas complètement.

Le choix d'un détecteur MCT permet d'avoir un large intervalle de mesure et de couvrir un continuum spectral important.

La partie émettrice développée par Bruker est très complexe et est composée d'interféromètres et de séparatrices.

En 2014, Bruker a introduit le premier spectromètre IR-TF du monde avec une technologie capable de couvrir la gamme spectrale MIR(MiddleInfraRed) et FIR/THz (FarInfraRed/Terahertz) en un seul scan. L'obtention des données depuis le FIR/THz jusqu'au MIR ne nécessite aucun changement de composants optiques ou d'assemblage de spectres. Ce développement unique et innovant permet de réaliser le rêve de bon nombre de spectroscopistes depuis l'introduction de la technique FT-IR au début des années 70.

La technologie unique Bruker FM du Vertex 70 offre la possibilité d'acquérir un spectre IR complet de 6 000 cm-1 à 50 cm-1 en une seule étape de mesure sans avoir besoin de ne modifier aucun composant optique.



FIG 4.2 - SCHEMA DE LA PARTIE EMETTRICE BRUKER VERTEX 70 FT-IR - RESEARCH GATE /THESE ARNE M VANDENBROUCKE 2015

Une fois émis le faisceau arrive sur la molécule et est absorbé. Dès lors la molécule va subir un apport en énergie radiative qui va se traduire par une agitation des liaisons au sein de la molécule.

Pour redevenir stable la molécule réémet à son tour un type de rayonnement très précis en fonction de la liaison désexcité. Chaque liaison a une énergie de désexcitation normée. Il en résulte un spectre d'absorption IR, sur lequel les bandes d'absorption visibles indiquent un nombre d'ondes correspondant aux liaisons présentes sur le miroir d'or.

En effectuant les mesures de spectroscopie infrarouge pendant le dépôt de molécules, on peut observer l'évolution du nombre de molécules formées sur la surface en fonction du temps de dépôt.

<u>III - Analyse de H2O</u> <u>5 - Protocole expérimental</u>

Durant ce stage, j'ai suivi pleinement 1 expérience. L'expérience était un dépôt par jet de H20 pendant 3 h sur un substrat en Or à une température de 10 Kelvin, soit -263 °C.

5.1 - Methode de dépôt

Il existe plusieurs manières de déposer de l'eau sur le substrat :

- Il y a la méthode du jet moléculaire où les molécules proviennent directement des jets et frappe la surface du substrat avec une vitesse importante.

- Il y a la méthode du dépôt par Background qui consiste à repartir dans la chambre principale des molécules d'eau de manière aléatoire. On parle de pulvérisation.

En fonction du type de dépôt, les réactions à la surface seront différente. En effet, en jet, les molécules ont une énergie cinétique bien plus importante qu'en Background. La conséquence du jet de molécule sera une barrière de potentiel plus facilement franchie et permettra des réactions plus importantes.

En Background, les molécules se déposent plus lentement et forme dans le cas de l'eau des structures différentes.

La faible énergie cinétique des molécules en dépôt Background forme des structures d'eau dite amorphe poreuse. Quand l'eau est envoyé en jet, des glaces cristallines et des glaces amorphes compactes se forment. Au LERMA, on ecrit la procédure de jet ainsi:

${\{H_2O\}}_{10K}^{3h}$

Dépot en jet de H2O pendant 3h à 10 Kelvin.

Pic de l'eau

A la fin de notre experience de 3h on obtient un superposition de spectre infrarouge. Ils sont superposé afin de mieux distinguer l'évolution des pics des bande d'absorption. Sur le logiciel de suivie IR de la salle de manipulation, s'affichent les spectres infrarouges de la bande d'absorption correspondant à une vibration de la liaison entre l'atome d'Oxygène et d'Hydrogène dans la molécule d'eau condensée sous forme de glace.

L' intervalle de temps entre deux mesures de 5 minutes. Ainsi, il y a 36 spectres infrarouges en 180 s soit 3 h.

Ces graphiques montrent bien que plus le temps passe plus il y a un pic entre 3000-3600 cm-1.

Ainsi, il y a une augmentation de la présence des liaisons OH. Par conséquent, l'eau se dépose bien sur la surface du substrat et elle s'accumule .



FIG 5.1 - PHOTO DU MONITEUR DU LOGICIEL DE SUIVIE IR DE VENUS

5.2 - Glace formée

La glace amorphe est probablement la forme la plus abondante d'eau dans l'univers en raison de sa capacité à se déposer molécule par molécule sur toute poussière interstellaire.

Pour cette raison, la glace amorphe est omniprésente dans les nébuleuses, les météorites et les disques protoplanétaires.

L'idée que la glace puisse exister sous une forme amorphe, c'est-à-dire non-cristalline, a été avancée pour la première fois dès 1935 lorsqu'on observa que de l'eau déposée sur des plaques froides ne présentait aucun pic de diffraction de Bragg en diffraction des rayons X.

(Burton and al. 1935).

Pour bien imaginer la notion de glace poreuse et compacte, on peut faire la distinction avec la neige poreuse et a de la banquise compacte. Pour ainsi dire, la glace poreuse est une glace amorphe basse densité et la glace compacte est une glace amorphe haute densité.



Glace amorphe poreuse FIG 5.2- MODÈLE DE GLACE D'EAU AMORPHE - C.F. MEJÍA ET AL. 2015 / IAP

Sur la figure 5.2, on voit que la glace poreuse a une structure bien plus chaotique . En revanche la glace compact a une structure bien plus régulière et ordonné . L'arrivé par jet des molécules d'eau en vert crée de la désorption direct.

6 - Logiciel IR

L'ingénieur informatique du LERMA S.Diana a développé un logiciel de traitement de donnée de spectre infrarouge.

Ce logiciel permet de faire correspondre la somme de l'aire de N gaussienne a l'aire du spectre d'OH. Ainsi, on étudie l'aire des gaussiennes dans le temps. Cette méthode va nous permettre de comprendre qualitativement quelle glace se forme et l'évolution de la quantité de glace formée.

Pour mon étude, j'ai comparé le spectre de l'eau de 2 expériences :

$$\begin{split} & \left\{ H_2 O \right\}_{10K}^{3h} \\ & \left\{ H_2 O \right\}_{10K}^{3h} + \left\{ C O_2 \right\}_{10K}^{1h} \end{split}$$

Pour mon étude futur, j'étudierais le spectres IR de H2O de l'éxpériences :

$$\begin{split} & \left\{ H_2 O \right\}_{10K}^{3h} + \left\{ CO \right\}_{10K}^{1h30^{\text{background}}} \\ & \left\{ H_2 O \right\}_{10K}^{3h \text{ background}} + \left\{ CO \right\}_{10K}^{1h30} \end{split}$$

6.1 - Analyse et comparaison des spectres IR

Pour utiliser le logiciel d'analyse mathématique IR, je dois trouver les gaussiennes le plus adaptées à la forme du pic spectral. Je fixe les paramètres de barycentre de chaque gaussienne afin de trouver le meilleur "feat" possible. On utilise dans ces conditions le verbe "feater" pour parler d'adapter le plus exactement possible les gaussiennes et le pic spectral.

Toute la difficulté réside dans le "feat".



Sur l'expérience eau et dioxyde de carbone faits par Franciele (doctorante), on constate qu'il y a de la glace cristalline qui c'est formé et de la glace compacte.

La glace cristalline n'apparaît pas quand on envoie sur le substrat uniquement de l'eau ainsi, on peut avancer l'hypothèse de la glace cristalline se forme en présence de dioxyde de carbone. Il se pourrait que les atomes de carbone structurent la glace d'eau.

Globalement, l'étude du barycentre montre que le pic tend vers 3320 cm-1. Ce pic correspond à la glace compacte.

Ainsi, au début de l'expérience, l'eau va former des sites cristallins en contact avec le CO2. Mais très vite, la glace va former des sites compacts, car le CO2 ne sera plus en contact avec l'eau. En effet, le CO2 n'est plus envoyé au bout de 1 h ainsi les monocouche formé après 1 h seront de la glace compacte. Durant l'expérience du jet moléculaire d'eau d'une durée de 3 h sur substrat à 10 °K fait par Basile et moi, on constate que la présence de glace amorphe est l'unique glace. Plus le dépôt dure dans le temps plus le barycentre se déplace vers la gauche confirmant l'hypothèse que la glace en jet sera du type amorphe compacte. On constate une asymptote a 3350cm-1 correspondant à un nombre d'ondes d'émission de la liaison OH majoritaire. Ainsi, on peut dire que la glace amorphe compacte à un barycentre du même ordre.







PAGE |12

<u>Conclusion</u>

Ce stage d'observation m'a permis de me faire une idée du métier de chercheur en Astrophysique. J'ai participé à l'organisation d'une journée Astronomie sur le site de Neuville, j'ai participé à un séminaire sur l'Univers ultra froid à l'Institut Astrophysique de Paris, j'ai côtoyé des chercheurs et des doctorants et j'ai manipulé et observé des appareillages de haute précision reproduisant les conditions du cosmos.

J'ai pu mobiliser mes connaissances acquises durant mes années de licence et j'ai énormément appris. J'ai pu découvrir l'importance de la physique statistique dans le domaine expérimentale et la place importante qu'occupe la simulation informatique et l'analyse mathématique.

La physique expérimentale est un domaine qui m'attire énormément et ce stage a confirmé mes attentes.

L'étude de la glace d'eau est un sujet passionnant. J'ai beaucoup appris sur les états de la glace d'eau en milieu ultra froid. J'ai pu analyser des spectres IR en partage une partie d'interprétation dans ce rapport. J'espère vivement continuer dans ce domaine.

Bibliographie

<u>Site</u>

 $http://www.acgrenoble.fr/loubet.valence/userfiles/file/Disciplines/Sciences/SPC/1S/Cours/cohesion_solide/co/liaison_hydrogene.html$

https://plasimo.phys.tue.nl/applications/microwave/surfatron.php

https://www.ias.u-psud.fr/fr/content/de-la-glace-interstellaire-sous-rayonnements-cosmiques-lourds

https://www.aanda.org/component/toc/?task=topic&id=1326

<u>Thèse</u>

Formation d'hydrogène moléculaire sur des surfaces d'intérêt astrophysique : premiers résultats sur des glaces d'eau à très basse température et sur le graphite à haute température - **Saoud Baouche. 2004**

Experimental study of desorption and reactivity of nitrogen bearing species on interstellar dust grains - Thanh Nguyen. 2018

Physics and chemistry at the surface of interstellar dust grains: the influence of O-atom difusion and chemical desorption on a H-N-C-O reaction network - Marco Minissale. 2014

Etude infrarouge et isotopique de l'eau adsorbée et confinée - Thierry Richard. 2006

Publication de recherche

Infrared resonant vibrationally induced restructuring of amorphous solid water - A. Noble et al. 2020

Breaking Orion's Veil with fossil outflows - Ü. Kavak et al. 2022

Dust as interstellar catalyst - M. Minissale et al. 2016

Mobility of D atoms on porous amorphous water ice surfaces under interstellar conditions - **E.Matar et al. 2008** Quantification of O2 formation during UV photolysis of water ice:H2O & H2O:CO2ices - **M. Bulak et al.2022**

Annexe et complement



ANNEXE 1 : ORGANIGRAMME DU LERMA CYU

$$10^{-10}_{\text{mBar}} = 10^{-9}_{\text{Pa}}$$

ANNEXE 2 : CONVERSION DES PRESSIONS

La loi Gaussienne avec μ l'espérance ; σ l'écart type.

$$G(x) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$$

ANNEXE 3 : LOI GAUSSIENNE UTILISÉ DANS LE LOGICIEL IR DE S.DIANA

Données expérimentales 1

# Nom_du_spectre	Numero	Aire_totale	Barycentre_raie_(cm-1)
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0000.dpt	0	4.055539	3333.75
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0001.dpt	1	4.045504	3333.06
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0002.dpt	2	3.929302	3331.79
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0003.dpt	3	4.020079	3332.06
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0004.dpt	4	4.067486	3330.93
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0005.dpt	5	3.944897	3328.94
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0006.dpt	6	4.019902	3331.14
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0007.dpt	7	4.065719	3330.60
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0008.dpt	8	4.029699	3331.32
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0009.dpt	9	4.066292	3330.44
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0010.dpt	10	4.008262	3331.02
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0011.dpt	11	4.011322	3330.95
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0012.dpt	12	4.000192	3330.98
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0013.dpt	13	4.018205	3331.20
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0014.dpt	14	4.000540	3330.85
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0015.dpt	15	4.005099	3330.94
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0016.dpt	16	4.012081	3330.75
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0017.dpt	17	4.006944	3331.01
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0018.dpt	18	4.015413	3331.34
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0019.dpt	19	3.979266	3330.40
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0020.dpt	20	4.009209	3331.10
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0021.dpt	21	4.008970	3330.76
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0022.dpt	22	4.013572	3331.08
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0023.dpt	23	4.002311	3330.29
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0024.dpt	24	4.013808	3330.85
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0025.dpt	25	3.982987	3329.74
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0026.dpt	26	4.008815	3329.99
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0027.dpt	27	4.018731	3330.03
{H2O}10K_+_{CO2}10K_1h.0028.dpt	28	4.021160	3330.64



 $\left\{ H_2 O \right\}_{10K}^{3h} \ + \left\{ C O_2 \right\}_{10K}^{1h}$

Données expérimentales 2

# Nom_du_spectre	Numero	Aire_totale	Barycentre_raie_(cm-1)
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.3.dpt	0	0.003647	3367.33
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.4.dpt	1	0.095718	3399.94
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.6.dpt	2	0.296039	3369.92
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.7.dpt	3	0.353796	3352.03
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.8.dpt	4	0.422045	3354.11
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.9.dpt	5	0.507098	3344.58
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.10.dpt	6	0.569710	3352.07
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.11.dpt	7	0.656940	3342.75
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.12.dpt	8	0.710362	3347.75
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.13.dpt	9	0.794402	3345.37
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.14.dpt	10	0.859037	3344.35
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.15.dpt	11	0.942784	3344.23
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.16.dpt	12	1.015493	3342.05
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.17.dpt	13	1.075042	3346.20
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.18.dpt	14	1.156868	3340.73
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.19.dpt	15	1.229506	3344.10
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.20.dpt	16	1.317695	3339.77
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.21.dpt	17	1.379570	3342.89
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.22.dpt	18	1.465525	3339.00
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.23.dpt	19	1.528035	3342.24
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.24.dpt	20	1.613458	3336.98
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.25.dpt	21	1.674472	3339.87
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.26.dpt	22	1.745637	3341.11
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.27.dpt	23	1.824562	3340.17
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.28.dpt	24	1.898157	3340.92
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.29.dpt	25	1.981191	3338.32
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.30.dpt	26	2.043996	3339.09
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.31.dpt	27	2.114924	3339.15
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.32.dpt	28	2.174690	3340.49
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.33.dpt	29	2.232887	3342.46
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.34.dpt	30	2.298211	3341.09
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.35.dpt	31	2.392427	3337.89
{H2O}_3h_10K_1.45e-4mbar.36.dpt	32	2.407103	3340.42



 $\left\{ {{H_2}O} \right\}_{{10K}}^{{3h}}$

Tableau des cracking patterns

	A		1	В	C		D		E		F		G		Н			I.	J		H	<	L	M	ľ	N	0
1			1H		2D		12 C		13 C		14 N		15 N		16 O		180		19 0		40 Ar		Kr				
2	ıН			2		3		13		14		15		16		17		19		20		41		1 H2O			
3		1	H2		HD		HC		HC		HN		HN	6	он		он		ОН		AR			ОН		17	
4	%			100		50									radical					0		100		ОН		17	
5	2D			3		4		14		15		16		17		18		20		22		42		HH		2	
6		2	DH		D2		DC		DC		DN		DN		OD		OD		OD		AR			1	8	36	
7	%	_		50		100		_		_		_								0		100			_		
8	12 C			13		14		24		25		26		27		28		30		21		43		NH3		14	15
9		12					C+;C++		C+;C++												AR			NH		15	16
10	%							0		0	radical		radical			100				0		100		NH		15	16
11	13 C			14		15		25		26		27		28		29		31		32		53		NH		15	16
12		13					C+;C++		C+;C++												AR			нн		2	
13	%	-		_		_		0		0	radical	_	radical	_		1.2				0		100		нн		2	
14	14N	_		15		16		26		27		28		29		30		32		33		54		нн		2	
15		14					NC		NC		N2		N2		NO		ΝΟ		NO		AR			1	7	51	
16	%						radical		radical			100		0,75		100				0		100					
17	15N			16		17		27		28		29		30		31		33		34		55		CHO		12	13
18		15																			AR			со		28	29
19	%						radical		radical			0,75		0		0,4				0		100		СН		13	14
20	160			17		18		28		29		30		31		32		34		35		57		ОН		17	
21		16	он		OD		ос		ос		NO		NO		02		02		02		AR						
22	%		radica	ıl				100		1,2		100		0,4		100				0		100					
23	180			18		19		29		30		31		32		33		36		37		58		COOH			
24		18	OH		OD		oc		oc		NO		NO		02		02		02		AR				_		
25	%																			0		100					
26				_		_								_								_				_	
27					CN			0,50		26			СН			0,5		13			CNO						
28								0,25		27						0,5		14									
29								0,25		28																	
30					0	_		0 50		28																	
33								0,30		20																	
32		_						0,50		29																	