

Calculs de sections efficaces de photodissociation moléculaire pour les atmosphères stellaires et exoplanétaires

Responsable de stage : Yohann Scribano,
email: yohann.scribano@umontpellier.fr
LUPM, Equipe Astrophysique Stellaire, Université de Montpellier

Contexte et problématique :

La photochimie a un impact considérable sur la composition atmosphérique des étoiles, des planètes et exoplanètes, avec des conséquences sur les compositions chimiques, le transfert radiatif, la structure thermique et la dynamique des atmosphères. C'est particulièrement vrai pour les nombreuses exoplanètes qui ont été découvertes en orbite près de leur étoile hôte, car ces planètes existent dans des environnements riches en rayonnement UV[1-2]. L'état de l'art actuel pour le calcul des sections efficaces de photodissociation pour l'astrophysique utilise souvent une description simplifiée (fonction vibrationnelle fondamentale harmonique)[5] qui est appropriée pour les molécules froides telles que celles trouvées dans le milieu interstellaire (ISM) mais inadéquate pour les environnements chauds tels que les atmosphères des exoplanètes. Des mesures des sections efficaces de photodissociation des molécules à des températures plus élevées ont été réalisées[1] mais ces études peinent à atteindre les températures nécessaires pour les atmosphères chaudes ($T > 1000$ K). Ainsi, les conditions de température des atmosphères des étoiles et des planètes requièrent de considérer les molécules comme vibrationnellement et rotationnellement excitées. De plus, malgré le très grand nombre d'études théoriques sur la photodissociation[4], ce n'est que récemment que les calculs de sections efficaces ont commencé à prendre sérieusement en compte les effets de la température[7] et les effets de l'excitation rotationnelle semblent avoir été plus largement ignorés.

Objectif du stage :

L'objectif de ce stage est de calculer les sections efficaces de photodissociation de molécules d'intérêt pour les atmosphères stellaires et exoplanétaires et d'étudier l'effet de la température. Le/la stagiaire devra d'une part se former au formalisme quantique et aux approches numériques utiles pour l'étude de ce processus dissociatif de molécules diatomiques. Des simulations numériques seront effectuées au moyen de codes existants sur des systèmes moléculaires pour lesquels on dispose de données de référence dans la littérature. Une application à la molécule CH sera ensuite envisagée et se concentrera notamment sur l'évaluation de l'effet de la température pour application aux atmosphères stellaires. Une autre partie de ce stage pourra concerner le développement d'une approche computationnelle performante pour l'étude de la photodissociation de systèmes moléculaires polyatomiques d'intérêt majeur pour les atmosphères des exoplanètes.

Nature du travail : Simulations numériques et analyse des données.

Pré-requis/intérêts : Physique atomique et moléculaire, chimie quantique, physique numérique, langage de programmation Fortran 90/95, Python, système d'exploitation Linux/Unix.

Gratification : en cours de négociation

Références :

1. O. Venot et al., *Astrophys. J.*, 2016, 830, 77
2. N.K. Lewis et al., *Astrophys. J.*, 2020, 902, L19.
3. B. Fleury et al., *Astrophys. J.*, 2019, 871, 158.
4. R. Schinke, *Photodissociation Dynamics*, Cambridge University Press, 1993.
5. A. N. Heays et al., *Astronom. Astrophys.*, 2017, 602, A105.
6. A. Noelle et al., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2020, 253, 107056.
7. S. Y. Grebenshchikov, *J. CO₂ Util.*, 2016, 15, 32-40.