



Etude d'une des clés de la détermination de l'abondance du carbone dans les étoiles

Encadrant : Yohann Scribano

email: yohann.scribano@umontpellier.fr

Collaborateur : Bertrand Plez

LUPM, Equipe Astrophysique Stellaire, Université de Montpellier

Contexte du stage :

Le contexte de ce stage concerne la réactivité chimique (collisions bimoléculaires réactives) en phase gaz et la détermination de données cinétiques élémentaires (ex : probabilité de réaction, section efficace) associées à un des processus élémentaires responsable la destruction de la molécule CH dans les atmosphères stellaires ($T \sim 6000$ K). Cette molécule est en effet l'unique traceur, dans les spectres des étoiles du halo galactique, de la nucléosynthèse du carbone des étoiles primordiales, aux tous premiers temps de l'évolution de la galaxie.

Objectifs du stage : On s'intéressera à la dynamique réactionnelle du processus $\text{CH} + \text{H} \rightarrow \text{C} + \text{H}_2$ au moyen de la méthode des trajectoires quasi-classiques (méthode QCT). Cet outil de simulation de la réaction chimique est en effet bien adapté à ce processus exothermique et au domaine des hautes températures caractéristique des atmosphères stellaires. Les simulations seront effectuées au moyen du code XQCT développé dans notre groupe [2,3] et utiliseront la surface de potentiel *ab initio* calculée récemment par Meng et collaborateurs [4,5]. L'objectif de cette étude sera de produire des sections efficaces de réaction résolues ; c'est à dire spécifiques à chaque état rovibrationnel initial (v, j) de CH depuis son état électronique fondamental. Une attention particulière sera apportée à l'effet de la rotation-et-vibration sur la réactivité. Ces résultats permettront à terme de modéliser les spectres hors-ETL des étoiles du halo pauvres en métaux, afin de retracer l'émergence du carbone dans la Galaxie.

L'étudiant(e) effectuera son stage au LUPM dans l'équipe AS (Astrophysique Stellaire) sous la direction de Y. Scribano. Il(elle) sera amené(e) à collaborer également avec Bertrand Plez (AS, LUPM) pour les aspects liés aux applications astrophysiques ainsi qu'avec Duncan Bossion (IPR), co-développeur du code de dynamique XQCT utilisé dans ce projet.

Nature du travail : Simulations numériques, développement numérique, analyse et interprétation des résultats.

Pré-requis et/ou intérêts : astrophysique moléculaire, physique et chimie quantique, transfert radiatif des atmosphères stellaires, simulations numériques, langage de programmation Fortran 90/95, Python, système d'exploitation Linux/Unix.

Financement : acquis pour une durée de 4 mois.

Références :

1. S. A. Popa, R. Hoppe, M. Bergemann, C.J. Hansen, B. Plez, T.C. Beers, *A&A*, 670, A25 (2023).
2. D. Bossion, Y. Scribano and G. Parlant, *J. Chem. Phys.*, **150**, 084301 (2019).
3. D. Bossion, S. Ndengue, H.-D. Meyer, F. Gatti and Y. Scribano., *J. Chem. Phys.* **153**, 081102 (2020).
4. L. Zhang, D. Liu, D. Yue, Y. Song and Q. Meng, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53**, 095202 (2020).
5. J. Zhao, L. Zhang, D. Yue, D. Liu, S. Gao, L. Wang and Q. Meng, *Chem. Phys.* **562**, 111677 (2022).