

## PROPOSITION DE STAGE EN LABORATOIRE

### Spécialité Chimie Physique et Théorique

### Niveau L3

#### SUJET PROPOSÉ :

Quel isomère rechercher de formule  $C_3H_2N_2$  ?

#### Nom et coordonnées du/des responsable(s)

Isabelle Fourré ; Yves Ellinger

Laboratoire de Chimie Théorique (LCT), CNRS - UMR 7616,  
Localisation : 4 Place Jussieu, Barre 12-13, 4<sup>e</sup> étage  
75005 Paris, France

Tél : 01 44 27 96 59 ; 01 44 27 96 60

Fax : 01 44 27 74 17

Courriel : [isabelle.fourre@upmc.fr](mailto:isabelle.fourre@upmc.fr) ; [ellinger@lct.jussieu.fr](mailto:ellinger@lct.jussieu.fr)

#### Présentation du sujet

De nombreux hydrocarbures azotés ont été identifiés dans le milieu interstellaire (MIS). La famille des nitriles/iso-nitriles est de loin la plus représentée. C'est dans cette famille que l'on trouve la molécule la plus grande, à savoir un enchaînement linéaire de 13 atomes  $HC_{11}N$  [1]. Cependant, en dépit de cette profusion de molécules, la chimie interstellaire de l'azote reste mal connue. En particulier, dans les espèces comportant 2 atomes d'azote, on a pu identifier au moins une molécule dans les familles  $CH_2N_2$ ,  $C_2H_2N_2$ ,  $C_2H_4N_2$ . En revanche, aucune espèce de formule  $C_3H_2N_2$  n'est détectée à ce jour. Peut-être le "bon" isomère n'a-t-il jamais été recherché ?

Pour aider cette recherche, on s'appuiera sur le principe d'énergie minimale qui dit que l'isomère le plus abondant, *a priori*, pour une formule chimique donnée correspond au composé le plus stable [2]. Dans ce travail, on recherchera les isomères plausibles de formule  $C_3H_2N_2$  dont on calculera les énergies relatives, les moments dipolaires, les spectres infra-rouge et les constantes rotationnelles en vue d'une étude spectroscopique au laboratoire ; ce type d'étude, orientée par les calculs théoriques effectués au cours du stage, est un préalable à toute demande de temps d'observation sur les télescopes de la communauté astrophysique.

On utilisera les méthodes de simulations numériques *ab initio* ainsi que celles relevant de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), afin d'obtenir les résultats les plus précis possibles. Ce travail, proche de celui réalisé dans un stage précédent [3] au LCT, sera aussi une première initiation à l'astrochimie.

#### **Références :**

1. Detection of  $HC_{11}N$  in the cold dust cloud TMC-1: Bell, M. B., Feldman, P. A., Travers, M. J., McCarthy, M. C., Gottlieb, C. A., and Thaddeus, P.: *Ap.J.Letters*, **483**, L61 (1997)
2. Interstellar complex organic molecules and the minimum energy principle: Lattelais, M., Pauzat, F., Ellinger, Y., Ceccarelli, C.; *Ap.J.Letters*, **696**, L133 (2009)
3. About the detection of urea in the interstellar medium: the energetic aspect: Fourré, I., Rosset, L., Chevreau, H., Ellinger, Y.: *Astron. Astrophys.*, **589**, A18 (2016)