

**ECOLE DOCTORALE DES SCIENCES DE L'ENVIRONNEMENT
D'ILE DE France N° 129**

Proposition de sujet de thèse pour la rentrée 2018

Nom du Laboratoire d'accueil : **Laboratoire Interuniversitaire des systèmes atmosphériques (LISA)**

N° UMR : **CNRS 7583**

Nom du Directeur du laboratoire : **Patrice COLL**

Adresse complète du laboratoire :

Laboratoire Interuniversitaire des systèmes atmosphériques (LISA)

CNRS UMR 7583, Universités Paris Est Créteil et Paris Diderot

61 av. Général de Gaulle 94010 Créteil

Nom de l'Equipe d'accueil et adresse si différente de celle du laboratoire : /

Nom du Directeur de thèse **HDR** : **KLEINER Isabelle**

Nom du co-directeur de thèse non **HDR** :

Dr Lam NGUYEN

Téléphone : 0145176553

Téléphone : 0145176553

Mail : isabelle.kleiner@lisa.u-pec.fr

Mail : lam.nguyen@lisa.u-pec.fr

• **Titre de la thèse en Français :**

Spectroscopie de petites molécules organiques pour des applications atmosphériques et astrophysiques

• **Titre de la thèse en Anglais :**

Spectroscopy of small organic molecules for astrophysical and atmospheric applications

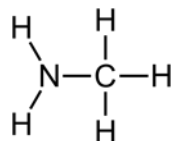
• **Résumé Sujet en Français (1 page maximum) :**

Le sujet de cette thèse est la spectroscopie de molécules d'intérêt pour l'astrophysique ou la physico-chimie de l'atmosphère. La spectroscopie rotationnelle dans le domaine microonde est une technique très performante qui nous permet de fournir des paramètres d'énergie et d'intensité très précis, de déterminer des structures moléculaires et d'identifier des molécules à distance. Les molécules sont d'excellents outils pour étudier différents environnements comme le milieu interstellaire (MIS) et les atmosphères terrestre ou planétaires.

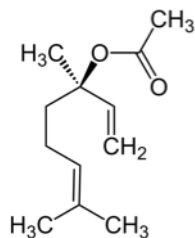
Pour les applications astrophysiques près de 200 molécules ont été détectées dans le MIS et 1/3 d'entre elles contiennent plus que 6 atomes¹. La plupart des identifications ont été accomplies en enregistrant d'abord le spectre des espèces pures au laboratoire et en comparant ensuite les données spectroscopiques avec des spectres interstellaires avec des télescopes dans le domaine microonde, millimétrique ou sub-millimétrique. A l'heure actuelle des télescopes terrestres comme ceux de l'*Atacama Large Millimeter Array* (ALMA, Chili) ou placés à bord d'avion comme le *Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy* (SOFIA) sont opérationnels et hormis les isotopes des molécules connues et leurs états excités, on s'attend à détecter des molécules de plus en plus complexes, ainsi que des molécules prébiotiques (précurseurs des biomolécules).

Pour les applications atmosphériques, la spectroscopie est également une approche essentielle pour déterminer et quantifier la présence des espèces moléculaires. Les missions spatiales présentes ou futures comme IASI (*Infrared Atmospheric Sounding Interferometer*) et sa nouvelle génération *IASI-NG* à bord du satellite MetOp détectent et mesurent l'abondance de différentes molécules organiques dans le domaine infrarouge, à partir notamment de feux de biomasse². Ce type de détection est tributaire de données spectroscopiques précises qui sont obtenues au préalable au laboratoire.

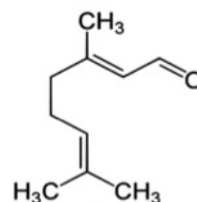
Durant cette thèse nous étudierons trois composés qui présentent différents défis expérimentaux et théoriques. Le premier est la molécule de **méthylamine** CH_3NH_2 . Cette molécule est une importante espèce qui a été détectée dans le MIS mais seulement dans son état de torsion fondamentale. Le projet est de d'effectuer la spectroscopie des états de torsion excités de manière complète. La récente identification de la méthylamine et de l'éthylamine dans la comète Tchouri grâce à la sonde spatiale *Rosetta* en même temps que la glycine³ démontrent que ces molécules sont des substances primaires nécessaires à la formation d'acides aminés dans la glace.



méthylamine



acétate de linalyle



citral

Les deux autres composés appartiennent à la famille des terpènes. Les terpènes sont produits par les plantes et émis en grande quantité dans l'atmosphère terrestre où ils réagissent rapidement. La production importante de composés volatiles biogéniques par les plantes contribue à la capacité oxydante de l'atmosphère, à la production de particule et au cycle du carbone. Les terpènes sont donc considérés comme des polluants et jouent un rôle dans la chimie de l'atmosphère. Cependant ils sont encore très peu étudiés au niveau spectroscopique. La thèse portera sur la spectroscopie rotationnelle de deux de ces terpènes relativement simples, **l'acétate de linalyle** (composante de l'huile de lavande) et le **citral** (odorant de l'huile de citron et phéromone d'alarme des insectes).

La thèse consistera en une partie expérimentale (enregistrement des spectres microondes au LISA) et une partie théorique (analyse et modélisation des spectres) afin de fournir des données spectroscopiques (positions et intensités des raies) utiles pour les sciences de l'environnement. Le travail sera fait au sein d'une équipe pluri-disciplinaire internationale (collaborations avec des astronomes et des atmosphériciens).

¹ The Cologne Data Base of Molecular Spectroscopy/Molecules in Space.

² Clarisse et al. Geophys. Res. Lett. 38, L10802, 2011;

³ Fray et al, Nature 538, 7623 (2016)

• **Résumé Sujet en Anglais (1 page maximum) :**

The subject of this thesis is to study spectroscopy of molecules chosen for their interest in astrophysical and atmospheric applications. Rotational spectroscopy in the microwave spectral range is a powerful gas phase technique allowing us to provide extremely accurate energy and intensity parameters, to determine molecular structures and to identify molecules. Molecules are excellent tools to study various environments such as the interstellar medium (ISM) and the planetary atmospheres.

For astrophysical applications rotational spectroscopy provides reliable predictions of line positions and intensities for molecules which have been detected in the interstellar medium or are suspected to be relevant for astrophysics. The predictions are essential to detect determine the relative abundance of the molecules in space. Today, around 200 different molecules have been detected and 1/3 of them contain more than 6 atoms¹. Most of the molecular identifications were accomplished by first recording their spectra at the laboratory, and comparing them to observations of interstellar surveys by means of microwave, millimeter- or submillimeter-wave telescopes. Today, telescopes like the the *Atacama Large Millimeter Array* (ALMA) and the *Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy* (SOFIA) are operational and, besides isotopologues of already known molecules, one can expect the detection of even more complex molecules in the future, especially prebiotic species (building blocks of biological molecules).

For atmospheric applications, rotational spectroscopy is an essential step in determining the ground state of various organic molecules present in the earth atmosphere. Most of the present and future spatial missions aiming at controlling the air quality such as IASI-NG (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer New Generation) on board on the MetOp satellite have detected and measured the abundance of a number of small organic molecules in the biomass fires using optical infrared teledetection methods². In order to be able to make this type of detection precise spectroscopic parameters such as line positions and intensities are needed.

During this PhD we will study three compounds which present different experimental and theoretical challenges. The first species is the **methylamine** molecule CH_3NH_2 . This molecule is very important and has been detected in the ISM but only on its ground torsional state. The project is to achieve a complete spectroscopy study of its excited torsional states. The recent identification of methylamine and ethylamine in the Tchouri comet with the spatial orbiter *Rosetta* at the same time as the amino acid glycine³ demonstrates that those molecules are primary substances needed for the formation of amino acids in the ice.

The two other compounds belong to a class of natural compounds, the terpenes which are produced by plants and emitted in the troposphere in large quantities. Terpenes are considered as atmospheric pollutants and therefore play an important role in atmospheric chemistry. The large production and emission of the biogenic volatile organic compounds (BVOCs) by plants are known to contribute to the oxidation capacity of the atmosphere, to the particle production, and to the carbon cycle. Our goal will be to record and analyze the rotational spectra of **linalyl acetate** (main component of *lavender oil*) and of **citral** (odorant of *lemon grass oil* and *alarm pheromone of leafcutter ant*).

The thesis will consist on an experimental part (record of microwave spectra at LISA) and an theoretical part (analysis and modeling of the spectra) to produce spectroscopic data useful for the science of environment. The context of this work will be an international pluri-disciplinary team (collaborations with astronomers and atmosphericists).

¹ The Cologne Data Base of Molecular Spectroscopy/Molecules in Space.

²Clarisse et al. Geophys. Rech. Lett. 38, L10802, 2011;

³Fray et al, Nature 538, 7623 (2016)

• **Type de financement autre que ED 129, précisez si envisageable ou acquis (CNES, CEA, ADEME etc...) : /**

• **Encadrement :**

. **Liste des autres doctorants que vous encadrez au 1^{er} janvier 2018 : *sans objet***