La spectroscopie infrarouge et radio des comètes : du diagnostic de leurs propriétés physico-chimiques à la recherche de leurs origines

Jacques Crovisier

Observatoire de Paris-Meudon
F-92195 Meudon, France

crovisie@obspm.fr

L'intérêt de l'étude des comètes est double :

– pour le physicien et le chimiste, le noyau cométaire et son environnement constituent un laboratoire exceptionnel où règnent des conditions extrêmes et une incroyable diversité de processus moléculaires ;

– pour l'astronome, les comètes sont des fossiles, témoins priviégiés de la formation du Système Solaire et pierres de touche de toute théorie cosmogonique.

Nous présentons ici les principaux mécanismes physico-chimiques dont les atmosphères cométaires sont le théatre. Nous montrons comment les observations spectroscopiques permettent de mieux les cerner, en nous restreignant volontairement (mais arbitrairement) aux domaines infrarouge et radio[1 2].

Ce texte a été écrit au moment où deux comètes exceptionnelles — C/1996 B2 (Hyakutake) et C/1995 O1 (Hale-Bopp) — viennent ou sont en train de bouleverser nos connaissances sur ces objets et alors que deux instruments spectroscopiques, l'un radio (MIRO[3]), l'autre infrarouge (VIRTIS[4]), sont en chantier pour voler sur la sonde spatiale ROSETTA vers la comète P/Wirtanen.

1 Survol des processus physico-chimiques dans les atmosphères cométaires.

Les comètes sont des petits corps composés en grande partie de glaces. Près du Soleil, ces glaces se subliment, et les gaz ainsi relachés forment une atmosphère non captive, la

1. Une bibliographie thématique détaillée est donnée à la fin de cet article. Elle permet d'approfondir les sujets traités ici et d'aborder ceux qui ne le sont pas. Les articles plus spécifiques auxquels le texte se réfère ont été indiqués en notes de bas de page.
2. Certains des documents — tables ou figures — présentés ci-après proviennent de publications en langue anglaise et ont été reproduits ici tels-quels. Nous demandons au lecteur de nous en excuser.
3. Microwave Instrument for Rosetta Orbiter.
4. Visible and InfraRed Thermal Imaging Spectrometer.

faible gravité de ces corps ne suffisant pas à la retenir. Les poussières mêlées aux glaces sont entraînées par le gaz ; accélérées par la pression de radiation du Soleil, elles vont former la queue.

Les molécules provenant directement de la sublimation des glaces cométaires, ou *molécules mères*, sont plus ou moins rapidement dissociées par le rayonnement ultraviolet solaire en *molécules filles* (en fait, des radicaux, atomes, ions atomiques ou moléculaires) (Fig. 1).

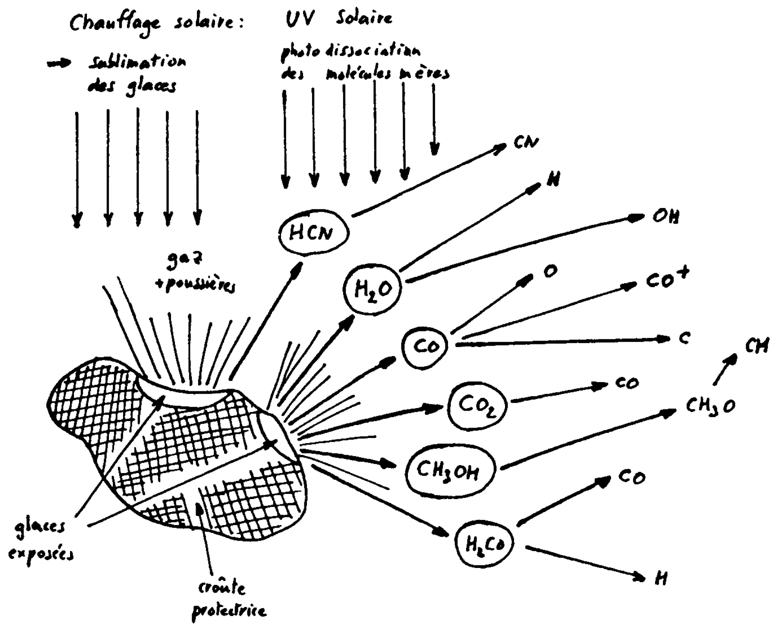

FIG. 1 – *Les processus de l'activité cométaire.*

Pendant longtemps, nous n'avons connu, à l'aide de la spectroscopie visible, que ces molécules filles, et étions réduits à *imaginer* la nature des molécules mères dont elles provenaient. Ce n'est que récemment, avec l'avènement des techniques ultraviolettes, radio et infrarouges, que nous avons eu directement connaissance de la nature de certaines de ces molécules.

2 La sublimation-condensation des glaces cométaires.

Le processus de sublimation-condensation des glaces cométaires est au cœur des mécanismes de formation des noyaux cométaires — ou plutôt, des grains glacés qui les constituent — et du mécanisme moteur de l'activité cométaire.

La Table 1 donne, à titre indicatif, les températures d'équilibre de sublimation pour un certain nombre de molécules, dans des conditions supposées proches de celles de la formation des glaces cométaires. Ces températures correspondent à celles d'un corps pur en équilibre avec sa propre vapeur, et peuvent être fort différentes pour la sublimation de mélanges que sont les glaces cométaires. Cette table cache en fait tout le mystère de la sublimation frationnée, qui ne peut être dévoilé que par des mesures et simulations en laboratoire.

Il n'est pas dans notre propos de détailler ici de telles simulations ni les modèles d'évolution des noyaux cométaires: voir par exemple Schmitt (1992) ou Klinger et al. (1996).

TAB. 1 – *Les températures d'équilibre de sublimation des glaces cométaires. Ces températures sont données pour un corps pur en équilibre avec sa propre vapeur, la densité totale du gaz étant 10^{13} cm^{-1} et le rapport de mélange du corps donné étant [X]/[H]. Ces températures sont soit reprises de (*YAMAMOTO T. *1985, A&A* **142**, *31) (Y), soit extrapolées de l'équation de Clausius-Clapeyron en utilisant les données du Handbook of Chemistry and Physics (HCP).*

Species		log [X]/[H]	T_{subl}	Reference
anthracene	$C_{14}H_{10}$	-8	200	HCP(S)
phenanthrene	$C_{14}H_{10}$	-8	160	HCP(S)
naphtalene	$C_{10}H_8$	-8	160	HCP(S)
water	H_2O	-4	152	Y
hydrogen peroxide	H_2O_2	-7	128	HCP(S)
formic acid	HCOOH	-7	112	Y
acetic acid	CH_3COOH	-8	106	HCP(S)
ethanol	C_2H_5OH	-8	105	HCP(L)
benzene	C_6H_6	-8	104	HCP(S)
methanol	CH_3OH	-8	99	Y
hydrogen cyanide	HCN	-7	95	Y
methyl formate	CH_3OHCO	-8	95	HCP(L)
methyl cyanide	CH_3CN	-8	93	HCP
sulphur dioxide	SO_2	-8	83	Y
ammonia	NH_3	-7	78	Y
carbon disulphide	CS_2	-8	78	HCP(L)
cyanoacetylene	HC_3N	-8	74	Y
carbon suboxide	C_3O_2	-8	73	HCP(L)
acetaldehyde	CH_3CHO	-8	73	HCP(L)
carbon dioxide	CO_2	-5	72	Y
propyne	CH_3CCH	-8	65	Y
formaldehyde	H_2CO	-8	64	Y
dimethyl ether	CH_3OCH_3	-8	60	HCP(L)
nitrous oxide	N_2O	-7	59	HCP(S)
hydrogen sulphide	H_2S	-7	57	Y
carbonyl sulphide	OCS	-8	57	HCP(L)
acetylene	C_2H_2	-8	54	HCP(S)
ethane	C_2H_6	-8	44	HCP
ethylene	C_2H_4	-8	38	HCP(L)
methane	CH_4	-4.5	31	Y
krypton	Kr	-8	27	HCP(S)
carbon monoxide	CO	-5	24	Y
dinitrogen	N_2	-4	22	Y
argon	Ar	-8	20	HCP(S)
neon	Ne	-8	5	HCP(S)
dihydrogen	H_2	0	5	Y
helium	He		4	HCP(L)

3 La photolyse des molécules mères cométaires.

Les molécules mères sont à plus ou moins brève échéance photodissociées par le rayonnement solaire. Leurs durées de vie à 1 UA du Soleil s'échelonnent de 5000 s pour des molécules comme NH_3 ou H_2CO à environ 10^6 s pour CO (Tableau 2).

TAB. 2 – *Les taux de photodissociation de molécules cométaires à 1 UA du Soleil. D'après* HUEBNER *et al. (1992) et* CROVISIER *(1994).*

Molecule		rate [s^{-1}]	reference
water group			
water	H_2O	1.3×10^{-5}	Crovisier 1989
hydrogen peroxide	H_2O_2	1.3×10^{-4}	Crovisier 1994
hydrocarbons			
methane	CH_4	8.0×10^{-6}	Allen et al. 1987
acetylene	C_2H_2	1.4×10^{-5}	Huebner et al. 1992
ethylene	C_2H_4	4.8×10^{-5}	Huebner et al. 1992
ethane	C_2H_6	1.1×10^{-5}	Huebner et al. 1992
benzene	C_6H_6	1.1×10^{-3}	Crovisier 1994
CO group			
carbon monoxide	CO	7.5×10^{-7}	Huebner et al. 1992
carbon dioxide	CO_2	2.0×10^{-6}	Huebner et al. 1992
carbon suboxide	C_3O_2	1.1×10^{-4}	Crovisier 1994
CHO species			
formaldehyde	H_2CO	2.0×10^{-4}	Bockelée-Morvan and Crovisier 1992
methanol	CH_3OH	1.3×10^{-5}	Bockelée-Morvan et al. 1991
formic acid	HCOOH	3.2×10^{-5}	Crovisier 1994
ketene	CH_2CO	4.4×10^{-4}	Crovisier 1994
ethanol	C_2H_5OH	1.8×10^{-5}	Crovisier 1994
dimethyl ether	$(CH_3)_2O$	3.1×10^{-5}	Crovisier 1994
acetic acid	CH_3COOH	5.1×10^{-5}	Crovisier 1994
nitrogen compounds			
ammonia	NH_3	1.5×10^{-4}	Allen et al. 1987
hydrogen cyanide	HCN	1.5×10^{-5}	Bockelée-Morvan and Crovisier 1985
cyanoacetylene	HC_3N	6.6×10^{-5}	Crovisier 1994
methyl cyanide	CH_3CN	6.7×10^{-6}	Bockelée-Morvan and Crovisier 1985
methanimine	CH_2NH	?	
isocyanic acid	HNCO	2.9×10^{-5}	Huebner et al. 1992
sulphur compounds			
hydrogen sulphide	H_2S	2.5×10^{-4}	Crovisier et al. 1991
carbon disulphide	CS_2	1.7×10^{-3}	Jackson et al. 1986
sulphur monoxide	SO	1.5×10^{-4}	Kim and A'Hearn 1991
sulphur dioxide	SO_2	2.1×10^{-4}	Kim and A'Hearn 1991
carbonyl sulphide	OCS	9.4×10^{-5}	Crovisier 1994
thioformaldehyde	H_2CS	?	

Le taux de photodissociation β se calcule simplement par :

$$\beta = \int_{\lambda_{min}} \sigma(\lambda)\Phi(\lambda)d\lambda, \tag{1}$$

où $\sigma(\lambda)$ est la section d'absorption de la molécule, $\Phi(\lambda)$ le flux de rayonnement solaire, et λ_{min} le seuil en longueur d'onde en dessous duquel l'absorption d'un photon est dissociative. Si $\sigma(\lambda)$ est bien connue pour la plupart des molécules simples, ce n'est pas le cas pour la plupart des molécules instables, les radicaux et les ions, plus difficiles à étudier au laboratoire. Le flux solaire $\Phi(\lambda)$ est en principe bien connu, mais il est variable, surtout dans l'ultraviolet lointain (et en particulier pour la raie Lyman α, qui est responsable d'une importante fraction des photodissociations). Enfin, il faut connaître quelle est la proportion des photons absorbés qui aboutissent à la photodissociation ou à la fluorescence (*facteur de branchement*).

Le photon qui dissocie une molécule ayant le plus souvent une énergie bien supérieure à celle strictement nécesaire à la dissociation, l'énergie excédentaire se partage en énergies électronique, de vibration, de rotation et de translation, qui sont communiquées aux fragments. Ceux-ci peuvent ainsi avoir des *vitesses d'éjection* importantes : de l'ordre de 10 km s^{-1} pour le léger atome d'hydrogène, du km s^{-1} pour des radicaux tels que OH ou CN. Ces vitesses d'éjection, qui s'ajoutent vectoriellement aux vitesses d'expansion des molécules dissociées, influent profondément sur la distribution spatiale des radicaux cométaires. Lorsque les fragments sont thermalisés, ils conduisent au chauffage de l'atmosphère cométaire (voir Section 4). Lorsque les fragments sont créés dans un état d'énergie élevé, ils vont émettre un (ou plusieurs) photon(s) en se désexcitant. Ce phénomène [5] est un mécanisme d'émission important pour certaines raies cométaires : il donne naissance aux *raies interdites* de l'oxygène suite à la photodissociation de H_2O, aux *bandes de Cameron* de CO suite à la photodissociation de CO_2...

Dans l'hypothèse d'une symétrie sphérique avec une vitesse d'expansion constante v_{exp}, la densité d'une molécule mère à la distance r du noyau est :

$$n_m(r) = \frac{Q}{4\pi r^2 v_{exp}} \exp(-\frac{r}{l_m}), \tag{2}$$

où Q est le taux de production de la molécule. Pour une molécule fille :

$$n_f(r) = \frac{Q}{4\pi r^2 v_{exp}} \frac{l_f}{l_m - l_f} \Big[\exp(-\frac{r}{l_m}) - \exp(-\frac{r}{l_f})\Big]. \tag{3}$$

Ce sont les formules du *modèle de Haser* [6]. Les indices m et f se rapportent aux molécules mères et filles, et l est la longueur d'échelle $l = \frac{v_{exp}}{\beta}$.

5. appelé *prompt emission* en anglais.

6. Exercice : Montrer que les densités de colonne d'une molécule mère ou fille en fonction du paramètre d'impact ρ (par rapport au noyau) sont :

$$< N_m(\rho) > = \frac{Q}{4\pi v_{exp}} \frac{2}{\rho} \int_{\rho/l_m}^{\infty} \mathsf{K}_0(y)dy, \tag{4}$$

$$< N_f(\rho) > = \frac{Q}{4\pi v_{exp}} \frac{2}{\rho} \frac{l_f}{l_m - l_f} \int_{\rho/l_m}^{\rho/l_f} \mathsf{K}_0(y)dy, \tag{5}$$

où K_0 est la fonction de Bessel modifiée d'ordre 0.

4 La thermodynamique de l'atmosphère cométaire.

Une atmosphère cométaire est en expansion quasi adiabatique et s'apparente à un jet supersonique tel que l'on peut en réaliser au laboratoire. La température chute vite. A quelques milliers de kilomètres du noyau, les collisions deviennent rares et le jet devient un *jet moléculaire libre*.

L'expansion de l'atmosphère n'est cependant pas totalement adiabatique. D'une part, la photolyse des molécules conduit à l'injection d'atomes ou de radicaux à grande vitesse qui, s'ils peuvent se thermaliser par collision, vont chauffer l'atmosphère et en accroître la vitesse d'expansion (Fig. 2). D'autre part, le gaz cométaire se refroidit radiativement. Le mécanisme le plus efficace est l'émission des raies de rotation de l'eau. Mais il est contrecarré par la forte épaisseur optique de ces raies. La résolution de ce problème, où il y a couplage entre la thermodynamique de la coma interne, l'état d'excitation de la molécule d'eau, et le transfert radiatif de ses raies, est encore à trouver[7].

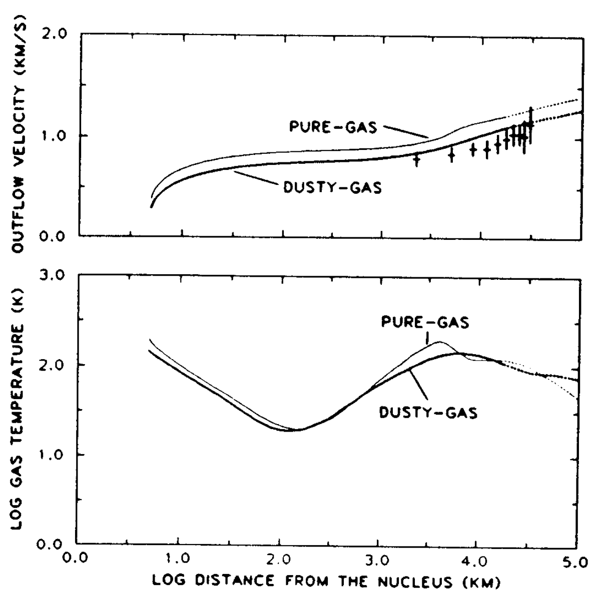

FIG. 2 – *Vitesse et température en fonction de la distance au noyau. Selon un modèle appliqué à la comète 1P/Halley (*COMBI M.R.*, 1989, Icarus* **81***, 41–50).*

Vitesses et temperatures du gaz cométaire ont bien sûr été mesurées *in situ* par la sonde Giotto dans la comète de Halley. Mais des déterminations peuvent être faites par des observations au sol : de la vitesse, par l'analyse des profils des raies radio des molécules cométaires (Fig. 3) ; de la température, par l'étude de la distribution de population de rotation des molécules à partir de leurs raies radio ou de leurs raies de ro-vibration (Figs 6 et 7).

Les vitesses ainsi mesurées s'étalent de 0,5 à plus de 1 km s^{-1}, et les températures, d'environ 10 K à plusieurs dizaines de kelvins, lorsque les comètes s'approchent, en gros, de 5 à 1 UA du Soleil. Les modèles thermodynamiques des atmosphères cométaires rendent bien compte de ces valeurs.

7. BOCKELÉE-MORVAN D. & CROVISIER J. 1987, **ESA SP-278**, 235.

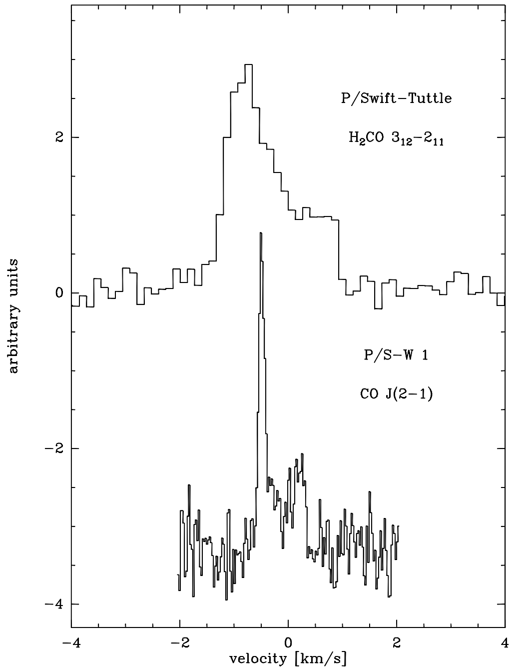

FIG. 3 – *Exemples de profils de raies moléculaires radio observées dans des comètes: la raie* $J(2-1)$ *de CO dans 29P/Schwassmann-Wachmann 1 à 6 UA du Soleil et celle de* H_2CO *dans 109P/Swift-Tuttle à 1 UA du Soleil. Observations IRAM (*CROVISIER J. *et al. 1995, Icarus* **115**, *213–216;* DESPOIS D. *et al. 1996, Planet. Space Sci.* **44**, *529–539).*

La symétrie sphérique n'est qu'une approximation grossière pour les atmosphères cométaires. Il suffit pour s'en convaincre de contempler certaines images de comètes à haute résolution spatiale, montrant souvent des jets spectaculaires[8]. Ces jets sont dus au fait que seule une fraction de la surface du noyau cométaire est active[9]. Ces jets ont essentiellement pour origine l'hémisphère du noyau illuminé, donc chauffé, par le Soleil. Il s'en suit une direction préférentielle des jets, qui se traduit par un profil assymétrique des raies observées (Fig. 3). Ces jets sont responsables d'un effet de réaction sur le noyau qui engendre des *forces non-gravitationnelles* qui perturbent l'orbite képlerienne de la comète. La mesure de ces perturbations orbitales et la modélisation de ces jets (à partir de leurs observations) reste encore la seule méthode permettant de remonter à la masse des noyaux cométaires (et par suite, à leur densité)[10].

8. qu'il faut se garder de confondre avec l'ammorce de la queue, qui est un phénomène à grande échelle.

9. ce qu'ont révélé de manière spectaculaire les caméras des sondes spatiales qui ont survolé P/Halley: seuls 10 % environ de sa surface étaient actifs.

10. RICKMAN H., 1992. In *Interrelations between Physics and Dynamics for Minor Bodies in the Solar System*, D. Benest & C. Froeschlé (edts), Éditions Frontières, p. 197–263.

5 La fluorescence des molécules.

Un mécanisme fondamental de l'émission des bandes et raies moléculaires dans les comètes est la fluorescence.

Le taux d'excitation par fluorescence résonante d'une raie ou d'une bande est le nombre de photons absorbés, puis réémis, par seconde et par molécule. Il est couramment appelé *g-factor* :

$$g_{lu} = \frac{1}{8\pi h\sigma_{lu}^3} \frac{\omega_u}{\omega_l} A_{ul} \mathcal{J}(\sigma_{ul}), \tag{6}$$

où A_{ul} est le coefficient d'Einstein d'émission spontanée, $\mathcal{J}(\sigma_{ul})$ est la densité de rayonnement à la fréquence (nombre d'onde) σ_{ul} de la raie, et ω_u et ω_l sont les poids statistiques des niveaux supérieurs et inférieurs. Si le champ de rayonnement est celui d'un corps noir de température T_{bb} et d'angle solide Ω_{bb} (pour le Soleil à 1 UA, $T_{bb} \simeq 5700$ K et $\Omega_{bb}/4\pi = 5.42 \times 10^{-6}$) :

$$g_{lu} = \frac{\Omega_{bb}}{4\pi} \frac{\omega_u}{\omega_l} A_{ul} \Big[\exp \frac{hc\sigma_{ul}}{kT_{bb}} - 1 \Big]^{-1}. \tag{7}$$

La figure 4 représente, pour une "molécule typique", les taux d'excitation radiative pour des transitions électroniques (force d'oscillateur $\simeq 0.1$), des bandes fondamentales de vibration (coefficient d'Einstein d'émission spontanée $A_{ij} \simeq 100$ s^{-1} et des raies de rotation (moment dipolaire $\simeq 1$ debye) lorsque le champ de rayonnement est celui du Soleil à $r = 1$ UA.

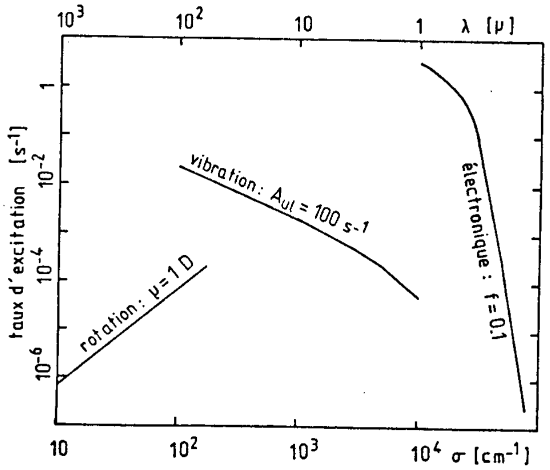

FIG. 4 – *Taux d'excitation radiative, par le Soleil à 1 UA, des transitions moléculaires électronique, de vibration et de rotation. Des valeurs typiques ont été adoptées pour les forces des transitions.*

Lorsque des transitions électroniques existent dans le domaine visible ou proche UV — c'est le cas pour des radicaux tels que CH, CN, CS, OH... — leurs taux d'excitation sont élevés (10^{-3} à 10^{-1} s^{-1}). Les molécules polyatomiques n'ont généralement pas de transition électronique dans ce domaine, mais dans l'UV plus lointain : leur taux d'excitation est alors bien plus faible en raison de la chute du flux solaire à ces longueurs d'onde. De plus, cette excitation conduit généralement à une dissociation de la molécule plutôt qu'à de la fluorescence. Ceci explique l'impossibilité d'identifier les composants volatils des comètes à partir de leur spectre visible.

TAB. 3 – *Les bandes fondamentales de vibration de molécules cométaires identifiées ou potentielles. On s'est limité ici au domaine 2,5–5 μm. Le taux de fluorescence résonante est donné à 1 UA du Soleil.*

σ cm^{-1}	λ μm	band	g-factor s^{-1}	molecule	
2062.2	4.849	ν_3	2.5×10^{-3}	OCS	Carbonyl Sulphide
2077.0	4.815	ν_3	2.0×10^{-5}	HC_3N	Cyanoacetylene
2138.0	4.677	ν_3	2.3×10^{-5}	CH_3CCH	Propyne
2143.2	4.666	1-0	2.6×10^{-4}	CO	Carbon Monoxide
2157.8	4.634	ν_3	2.2×10^{-5}	C_2N_2	Dicyanogen
2200.0	4.545	ν_2	2.2×10^{-5}	CH_3D	d-Methane
2272.0	4.401	ν_2	1.1×10^{-4}	HC_3N	Cyanoacetylene
2289.9	4.367	ν_3	1.0×10^{-2}	OC_3O	Carbon Suboxide
2349.1	4.257	ν_3	2.6×10^{-3}	CO_2	Carbon Dioxide
2727.0	3.667	ν_1	6.5×10^{-5}	HDO	d-Water
2782.5	3.594	ν_1	3.9×10^{-4}	H_2CO	Formaldehyde
2843.3	3.517	ν_5	4.6×10^{-4}	H_2CO	Formaldehyde
2844.0	3.516	ν_3	1.5×10^{-4}	CH_3OH	Methanol
2901.0	3.447	ν_3	4.7×10^{-4}	CH_3CH_2OH	Ethanol
2941.0	3.400	ν_2	1.0×10^{-4}	CH_3CCH	Propyne
2942.0	3.399	ν_2	1.9×10^{-4}	HCOOH	Formic Acid
2945.0	3.396	ν_1	3.3×10^{-5}	CH_3D	d-Methane
2954.0	3.385	ν_1	1.5×10^{-5}	CH_3CN	Methyl Cyanide
2970.0	3.367	ν_9	3.5×10^{-4}	CH_3OH	Methanol
2971.0	3.366	ν_2	3.9×10^{-4}	CH_3CH_2OH	Ethanol
2980.9	3.355	ν_6	8.5×10^{-5}	CH_3CCH	Propyne
2988.6	3.346	ν_{11}	7.3×10^{-5}	CH_2CH_2	Ethylene
2999.0	3.334	ν_2	1.9×10^{-4}	CH_3OH	Methanol
3017.0	3.315	ν_4	5.5×10^{-4}	CH_3D	d-Methane
3019.5	3.312	ν_3	4.0×10^{-4}	CH_4	Methane
3047.9	3.281	ν_{12}	2.0×10^{-4}	C_6H_6	Benzene
3105.3	3.220	ν_9	1.4×10^{-4}	CH_2CH_2	Ethylene
3212.9	3.112	ν_1	6.2×10^{-4}	H_2O^+	Water Ion
3259.0	3.068	ν_3	2.4×10^{-3}	H_2O^+	Water Ion
3294.8	3.035	ν_3	1.7×10^{-4}	CHCH	Acetylene
3311.5	3.020	ν_3	3.5×10^{-4}	HCN	Hydrogen Cyanide
3327.0	3.006	ν_1	8.6×10^{-4}	HC_3N	Cyanoacetylene
3333.7	3.000	ν_4	1.5×10^{-4}	HCCCCH	Diacetylene
3335.1	2.998	ν_1	2.5×10^{-4}	CH_3CCH	Propyne
3337.0	2.997	ν_1	3.4×10^{-5}	NH_3	Ammonia
3444.0	2.904	ν_3	2.0×10^{-5}	NH_3	Ammonia
3519.4	2.841	ν_3	5.8×10^{-3}	H_3O^+	Hydronium Ion
3568.0	2.803	1-0	6.0×10^{-5}	OH	Hydroxyl Radical
3569.0	2.802	ν_1	3.6×10^{-4}	HCOOH	Formic Acid
3607.0	2.772	ν_1	1.0×10^{-4}	H_2O_2	Hydrogen Peroxide
3608.0	2.772	ν_5	6.0×10^{-4}	H_2O_2	Hydrogen Peroxide
3657.0	2.734	ν_1	1.8×10^{-5}	H_2O	Water
3660.0	2.732	ν_1	1.0×10^{-4}	CH_3CH_2OH	Ethanol
3681.0	2.717	ν_1	1.3×10^{-4}	CH_3OH	Methanol
3707.0	2.698	ν_3	1.9×10^{-4}	HDO	d-Water
3755.9	2.662	ν_3	2.6×10^{-4}	H_2O	Water

On trouve rarement directement dans la littérature les coefficients d'Einstein A_{ul} des bandes de vibration, mais plutôt les *forces de bande* en absorption S, directement mesurées au laboratoire. Une formule de conversion pour une bande de vibration fondamentale est :

$$A_{ul} = 3,080 \times 10^{-8} \sigma_{ul}^2 S Z_{vib} / \omega, \tag{8}$$

où Z_{vib} est la fonction de partition en vibration de la molécule, ω est la dégénérescence de la bande, σ est en cm^{-1}, et S est exprimée en cm^{-2} atm^{-1} aux conditions normales de température et de pression[11].

Les taux d'excitation des bandes fondamentales de vibration les plus intenses dans l'infrarouge moyen sont de l'ordre de 10^{-5} à 10^{-3} s^{-1} (Table 3). Les taux d'excitation des bandes harmoniques ou de combinaison sont bien plus faibles. C'est également le cas des raies de rotation.

Le mécanisme prépondérant d'excitation des molécules polyatomiques est donc l'excitation radiative des bandes fondamentales de vibration par le Soleil. Une confirmation en a été donnée récemment par l'observation d'un spectre cométaire par ISO (voir Section 7.1). En fait, il faut, dans la coma interne, tenir compte du champ de rayonnement de la poussière cométaire qui peut également contribuer significativement à l'excitation des raies de rotation et des bandes de vibration de grande longueur d'onde. Mais ces phénomènes n'ont qu'une importance marginale pour les observations à distance.

6 L'excitation collisionnelle et l'évolution des populations.

La fluorescence influe directement sur la distribution de population des niveaux de rotation de l'état fondamental : l'excitation vibrationnelle infrarouge (ou électronique visible ou UV si elle existe) tend à peupler les niveaux supérieurs, alors que la désexcitation spontanée tend à faire redescendre les molécules sur les niveaux inférieurs de rotation. Au bout d'un certain nombre de cycles de fluorescence, un équilibre peut être atteint : c'est l'*équilibre de fluorescence*. La figure 5 montre la distribution de population à l'équilibre de fluorescence pour certaines molécules linéaires. On peut montrer[12], avec certaines approximations, que cet équilibre ne dépend, pour les molécules linéaires, que du rapport

$$R = \frac{A_{10}}{[\Sigma g_{||} + \frac{1}{2}\Sigma g_{\perp}]}, \tag{9}$$

où A_{10} est le coefficient d'Einstein de la première raie de rotation et $g_{||}$ et $g_{\perp}$ les taux d'excitation respectifs des bandes de vibration "parallèles" et "perpendiculaire" [13].

Un cas particulier est celui des molécules symétriques, sans moment dipolaire, dont les transitions de rotation sont interdites. Les cycles de fluorescence successifs peuvent ainsi peupler un grand nombre de niveaux de rotation : c'est par exemple le cas de la molécule CO_2.

11. On trouve en fait dans la littérature une extraordinaire profusion d'unités diverses pour exprimer S, ce qui peut déconcerter le néophyte. Des listes de formules de conversion importantes, mais cependant non exhaustives, ont été publiées par PUGH & RAO (1976, in *Molecular spectroscopy: Modern research, Vol. II*, Edt. K.N. Rao, Academic Press, p. 165) et SMITH *et al.* (1985, in *Molecular spectroscopy: Modern research, Vol. III*, Edt. K.N. Rao, Academic Press, p. 111).

12. BOCKELÉE-MORVAN D. & CROVISIER J. 1985, *Astron. Astrophys.* **151**, 90.

13. Exercice : Montrer que pour une molécule linéaire, la distribution de population à l'équilibre de fluorescence "pique" sur le niveau J_{max} tel que $J_{max}^4 = \frac{2}{3}\frac{\Sigma g}{A_{10}}$.

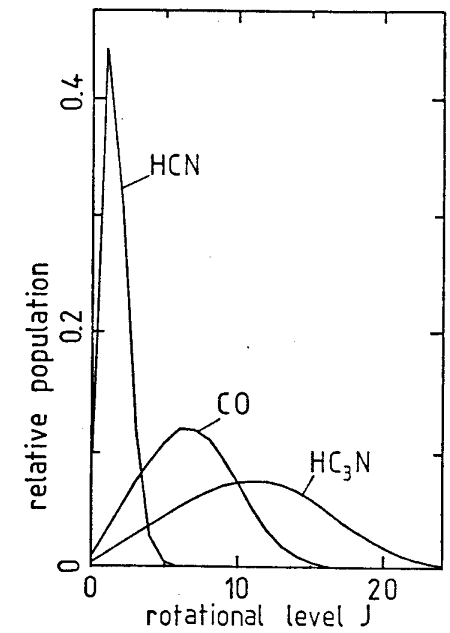

FIG. 5 – *La distribution de population sur les niveaux de rotation pour quelques molécules linéaires à l'équilibre de fluorescence. (*CROVISIER J. *1985, Astron. J.* **90***, 670.)*

Ce phénomène a également été observé dans le spectre visible du radical C_2. Mais pour une toupie totalement symétrique comme CH_4, les règles de sélection des bandes infrarouges sont telles qu'il n'y a pas de transfert de population entre les niveaux de rotation : la distribution de population reste celle imposée par les collisions.

Dans la coma interne, les collisions peuvent être assez fréquentes pour imposer l'équilibre thermodynamique local (ETL). La distribution des molécules suivant leurs niveaux de rotation est alors entièrement décrite par une distribution de Boltzmann de température T_{rot}. Le taux de collisions induisant des transitions de rotation est

$$\tau_{coll} = \sigma n v, \tag{10}$$

où n, la densité moléculaire, est proportionnelle à r^{-2} (Eq. 2), v est la vitesse relative des molécules et dépend de la température cinétique ; la section efficace de collision σ est souvent bien mal connue. La section efficace *totale* peut parfois être estimée par des mesures d'élargissement de raies en laboratoire. Pour des collisions entre molécules polaires, σ est de l'ordre de quelques 10^{-14} cm^2. Mais la dépendance de σ suivant les niveaux quantiques de rotation est généralement totalement inconnue. Des calculs *ab initio* ont été seulement faits pour des collisions avec H_2 ou He pour estimer les conditions d'excitation dans le milieu interstellaire[14]. Les collisions entre neutres et électrons ont des sections efficaces bien plus grandes et peuvent avoir un rôle important. Notons enfin que l'excitation vibrationnelle par les neutres dans la région collisionnelle de la coma est totalement inefficace en raison de la faible température

14. De tels calculs ont cependant été réalisés depuis peu pour les collisions CO–H_2O (GREEN S. 1993, *Astrophys. J.* **412**, 436).

cinétique de l'atmosphère cométaire. La désexcitation vibrationnelle par des collision neutre–neutre est également très faible en raison de la très petite section efficace pour ce genre de transition.

Au cours de sa vie, une molécule va évoluer de l'état d'ETL dans la coma interne à l'état d'équilibre de fluorescence. Ce dernier ne sera d'ailleurs pas forcément atteint, le temps caractéristique nécessaire pour l'atteindre pouvant être supérieur à la durée de vie de la molécule[15].

On peut calculer l'évolution de la distribution de population P_i d'une molécule en intégrant les équations différentielles qui régissent l'équilibre de ces populations :

$$\frac{dP_i}{dt} = \left[-P_i\tau_{coll} + P_i^t(T_{kin})\tau_{coll}\right] + \left[-\sum_k g_{ik}P_i + \sum_j\sum_k g_{jk}B_{ki}^r P_j\right] + [-A_{i,i-1}P_i + A_{i+1,i}P_{i+1}]\,; \tag{11}$$

$$\sum_i P_i = 1. \tag{12}$$

Dans ce système d'équations, les trois termes entre crochets représentent respectivement les effect des collisions, de l'excitation et de la désexcitation spontanée des niveaux de rotation. On a supposé ici que les collisions tendaient à thermaliser la distribution de population vers la distribution de Boltzmann $P_i^t(T_{kin})$. B_{ki}^r représente les facteurs de branchement du transfert de population dû à l'excitation radiative et les autres notations sont évidentes.

Il est facile d'intégrer ces équations lorsque les raies moléculaires sont optiquement minces[16]. Mais lorsque ces raies sont épaisses, le champ de rayonnement excitateur dépend lui-même de la distribution des populations. Pour la plupart des molécules cométaires, les raies sont heureusement optiquement minces. Mais ce n'est pas le cas pour les intenses raies de rotation de la molécule d'eau. Une solution approchée a été proposée dans ce cas dans le cadre de l'*approximation locale* et en utilisant le formalisme des *probabilités d'échappement*[17].

Lorsque l'on dispose de plusieurs raies de rotation observées simultanément, comme c'est le cas pour le méthanol, il est pratique d'utiliser la méthode du diagramme de rotation, couramment employée pour l'analyse de la température des molécules interstellaires[18]. Les aires des raies observées $\int T_B dv$ (en K km s^{-1}) sont liées aux densitées de colonne moyennes des molécules dans l'état supérieur de rotation $< N_u >$ (en cm^{-2}) selon :

$$\frac{< N_u >}{g_u} = \frac{< N_{tot} >}{Z(T_{rot})}\exp(-\frac{E_u}{kT_{rot}}) = \frac{1,67\times 10^{14}}{\nu\mu^2 S}\int T_B dv \tag{13}$$

où $< N_{tot} >$ est la densité de colonne totale, $Z(T_{rot})$ est la fonction de partition, E_u est l'énergie du niveau supérieur (en cm^{-1}), ν est la fréquence de la raie (en GHz), μ est le moment dipolaire (en debyes) et S est la force de la raie. Dans un diagramme représentant $\log(< N_u > /g_u)$ en fonction de E_u, les raies observées s'alignent sur une droite dont la pente est $-1/kT_{rot}$: c'est le *diagramme de rotation* (Figs 6 et 7).

Pouvoir remonter des spectres cométaires observés aux densités de colonne, puis aux taux de production et ensuite aux abondances moléculaires, demande un bonne compréhension de tous les phénomènes évoqués ci-dessus : les mécanismes d'excitétion des molécules et leurs distributions spatiales.

15. Exercice : Démontrer que ce temps caractéristique est de l'ordre de $N/\Sigma g$, où N est le nombre de niveaux de rotation significativement peuplés à l'équilibre de fluorescence.
16. Crovisier J. 1987, *Astron. Astrophys. Suppl.* **68**, 223.
17. Bockelée-Morvan D. 1987, *Astron. Astrophys.* **181**, 169.
18. Blake G.A. *et al.* 1987, *Astrophys. J.* **315**, 621.

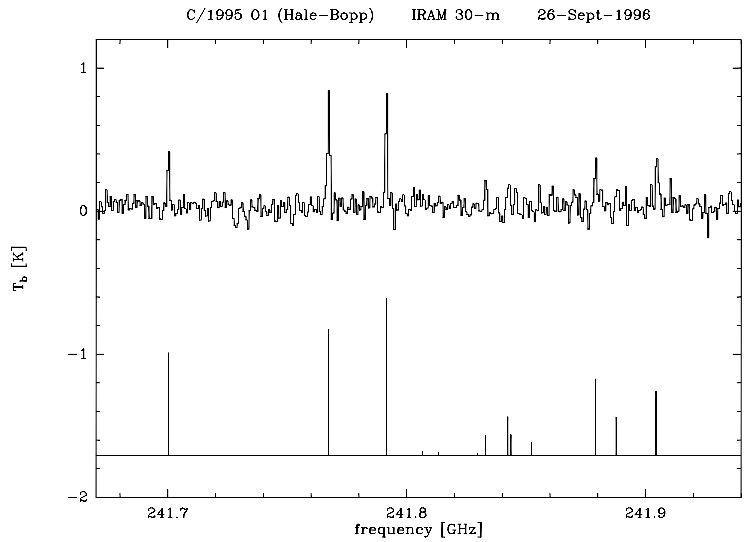

FIG. 6 – *Les raies vers 242 GHz du méthanol observées dans la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) alors qu'elle était à 2,9 UA du Soleil. Observations IRAM (*BIVER *et al. en préparation). Le bas de la figure montre pour comparaison un spectre synthétique du méthanol à une température de 30 K.*

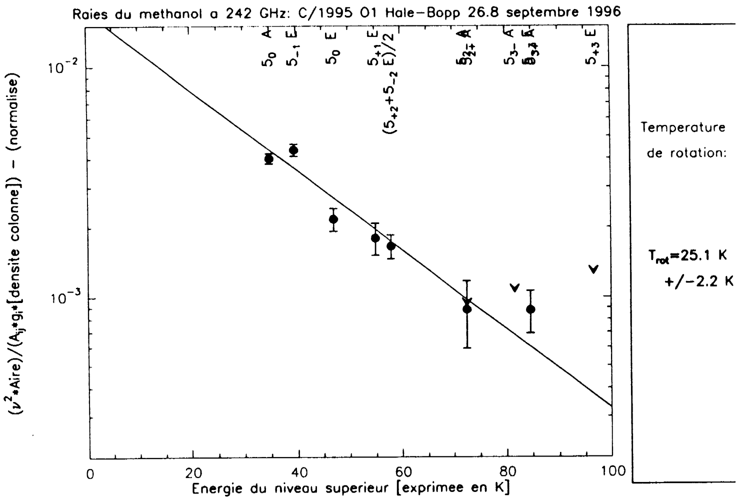

FIG. 7 – *Diagramme de rotation du méthanol correspondant aux raies représentées dans la figure précédente. La régression linéaire correspond à une température de rotation de 25 K. (D'après* BIVER *et al. en préparation).*

7 Bilan des observations spectroscopiques récentes

Notre connaissance de la composition des glaces cométaires s'est bâtie peu à peu. D'abord, par le jeu des devinettes à partir des radicaux identifiés dans le spectre visible des comètes. Puis, progressivement, avec l'aide des techniques nouvellement développées : spectroscopie ultraviolette, radio et infrarouge. L'exploration spatiale de la comète de Halley et la campagne d'observations au sol qui l'a accompagnée — toutes techniques confondues — ont été une étape importante. Quelques comètes brillantes ont permis ensuite de parfaire nos connaissances :

Austin 1990 V, Levy 1990 XX, P/Swift-Tuttle 1992 XXVIII. Mais un nouveau pas vient juste d'être franchi avec la comète C/1996 B2 (Hyakutake), une comète passée à seulement 0,10 UA de la Terre fin mars 1996, et la comète exceptionnelle C/1995 O1 (Hale-Bopp), une comète au moins cent fois plus "grosse" que la comète de Halley, passant au périhélie à 0,9 UA du Soleil le premier avril 1997, et dont l'évolution de la production gazeuse a pu être suivie dès sa découverte, à 7 UA du Soleil.

7.1 Spectroscopie infrarouge

C'est avec la campagne d'observation de la comète de Halley qu'a réellement commencé la spectroscopie infrarouge cométaire (si l'on excepte la spectroscopie à basse résolution qui avait déjà révélé les bandes des silicates). L'eau y a été observée directement pour la première fois par ses bandes infrarouges, à l'aide d'un avion stratosphérique[19] et à bord des sondes Vega[20]. La bande d'émission à 3,2–3,5 μm y a été vue pour la première fois.

Depuis, cette bande à 3,2–3,5 μm a été observée dans de nombreuses comètes[21]. Le méthanol a été identifié comme l'un des principaux responsables de cette émission, mais la nature des autres est encore mal connue.

La comète C/1996 B2 (Hyakutake) a permis l'observation de raies de ro-vibration de plusieurs molécules déjà connues (Table 4) : HCN, CO, NH_2, mais surtout la détection de plusieurs hydrocarbures[22] : CH_4, C_2H_2, C_2H_6.

TAB. 4 – *Les raies infrarouges observées dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake) avec l'IRTF.*

molec.	band	sigma		ref.
OCS	nu_1	2062.	5 lines	IAUC 6366 Mumma et al.
CO	1-0	2143.	8 lines	Science Mumma et al.
HDO	nu_1	2727.	3 lines	IAUC 6366 Mumma et al.
H2CO	nu_1,5	2782.		Mumma et al.
CH3OH	nu_3	2844.	Q-branch	IAUC 6366 Mumma et al.
C2H6	nu_7	2983.	rQ0, rQ1	Science Mumma et al.
CH4	nu_3	3019.	R0, R1	Science Mumma et al.
NH2	nu_1	3089.	4 lines	DPS96 Brooke et al.
OH	1-0	3287.		Nature Brooke et al.
OH	2-1	3288.		Nature Brooke et al.
C2H2	nu_3	3295.	P3,4,5	Nature Brooke et al.
HCN	nu_3	3311.	7 lines	IAUC 6366 Mumma et al.
			2 lines	Nature Brooke et al.
H2O	111-100	5150.	13 lines	IAUC 6366 Mumma et al.

La comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) a pu être observée par ISO[23] (Fig. 8). Son spectre infrarouge a été mesuré de 2,4 à 195 μm, révélant les bandes de vibration des principaux constituants de la glace du noyau et les signatures des poussières cométaires (résultats actuellement en cours d'analyse).

19. MUMMA M.J. *et al.* 1986, *Science* **232**, 1523
20. COMBES M. *et al.* 1988, *Icarus* **76**, 44.
21. BOCKELÉE-MORVAN D., BROOKE T.Y. & CROVISIER J. 1995, *Icarus* **116**, 18.
22. MUMMA M.J. *et al.* 1996, *Science* **272**, 1310 ; BROOKE T.Y. *et al.* 1996, *Nature* **383**, 606.
23. CROVISIER J. *et al.* 1996, *Astron. Astrophys.* **315**, L385–L388 ; CROVISIER J. *et al.* 1997, *en préparation*.

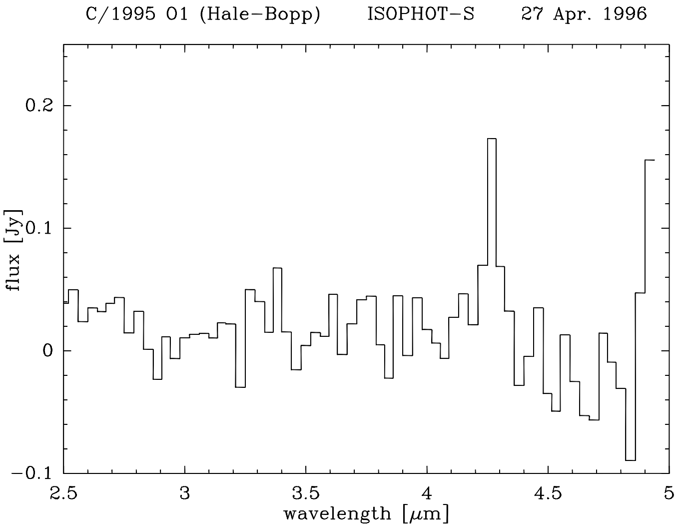

FIG. 8 – *Le spectre de la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) observé par ISO à 4,6 UA du Soleil avec l'instrument PHT-S (*CROVISIER J. *et al. 1996, Astron. Astrophys.* **315**, *L385). Ce spectre montre la bande ν_3 de CO_2 à 4,26 μm.*

7.2 Spectroscopie radio

Si la spectroscopie radio des comètes a débuté avec la détection du radical OH dans la comète Kohoutek 1973 XII avec le radiotélescope de Nançay, les premières détections de molécules mères n'ont commencé qu'avec le retour de la comète de Halley (avec HCN et peut-être H_2CO). H_2S et CH_3OH furent ensuite détectées dans Austin 1990 V et Levy 1990 XX. 109P/Swift-Tuttle a ouvert la voie en 1990 aux observations submillimétriques. La détection de CO dans 29P/Schwassmann-Wachmann 1 à 6,1 UA du Soleil en 1994[24] (Fig. 3) a ensuite montré que la radioastronomie pouvait être un puissant moyen d'étude des comètes lointaines.

Une moisson de détections de nouvelles molécules a été engrangée avec les observations radio de C/1996 B2 (Hyakutake) (Table 5) : les molécules OCS et CH_3CN ; NH_3, détectée pour la première fois de manière sure dans une comète; HNC, un isomère instable de HCN, dont l'abondance [HNC]/[HCN] a été trouvée similaire à certains nuages interstellaires[25] ; la molécule HDO enfin, conduisant à un rapport d'abondance [D]/[H] comparable à celui que les spectromètres de la sonde Giotto avaient trouvé dans P/Halley, supérieur de deux fois à celui de l'eau des océans terrestres.

La comète C/1995 O1 (Hale-Bopp), découverte à 7 UA du Soleil alors qu'elle était déjà brillante et très active, nous a donné l'occasion de pouvoir suivre les apparitions successives des diverses molécules volatiles qui composent les glaces de son noyau (Table 6). Ce qui est d'une grande aide pour comprendre le processus de sublimation des glaces cométaires. On a remarqué que la production d'eau — régulièrement observée par le suivi des raies de OH avec le radiotélescope de Nançay — a suivi une progression constante de 4,7 UA du Soleil jusqu'à 2,2 UA (au moment où ces lignes sont écrites). En revanche, la production de monoxyde de carbone — seule molécule mère détectée à plus de 5 UA — a augmenté dans une proportion bien moindre et montre une stagnation vers 3 UA.

24. SENAY M.C. *et al.* 1994, *Nature* **371**, 229 ; CROVISIER J. *et al.* 1996, *Icarus* **115**, 213.
25. IRVINE W.M. *et al.* 1996, *Nature* **383**, 418.

TAB. 5 – *Les raies radio observées dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake).*

freq.	molec.	transition	telescope
1.612	OH	F 1-2	Nancay
1.665	OH	F 1-1	Nancay
1.667	OH	F 2-2	Nancay
1.721	OH	F 2-1	Nancay
23.694	NH3	1(1)-1(1)	NRAO/43m (IAUC 6362)
23.870	NH3	3(3)-3(3)	NRAO/43m (IAUC 6362)
88.632	HCN	1-0	IRAM/PdB (IAUC 6388), OSO, FCRAO, IRAM/30m
91.985	CH3CN	5(1)-4(1)	(IRAM/PdB IAUC 6364)
91.987	CH3CN	5(0)-4(0)	(IRAM/PdB IAUC 6364)
97.981	CS	2-1	OSO, IRAM/30m
115.271	CO	1-0	IRAM/PdB
145.000	CH3OH	3(K)-2(K) *	NRAO/KP (IAUC 6345)
145.947	OCS	12-11	NRAO/KP (IAUC 6344)
146.619	CH3OH	9(0)-8(1) A	IRAM/30m
146.969	CS	3-2	IRAM/30m
157.000	CH3OH	J(0)-J(-1) E *	IRAM/30m
168.763	H2S	110-101	IRAM/30m
211.211	H2CO	313-212	IRAM/PdB
218.222	H2CO	303-202	IRAM/PdB
218.440	CH3OH	4(2)-3(1) E	IRAM/PdB
218.476	H2CO	322-221	IRAM/PdB
225.698	H2CO	312-211	NRAO/KP (IAUC 6345),IRAM/30m
230.538	CO	2-1	NRAO/KP (IAUC 6345), CSO, IRAM/PdB, KOSMA IRAM/30m (IAUC 6388)
241.000	CH3OH	5(K)-4(K) *	IRAM/PdB, IRAM/30m
252.000	CH3OH	J(3)-J(2) A *	CSO
265.886	HCN	3-2	NRAO/KP (IAUC 6345), CSO, KOSMA, IRAM/30m
304.208	CH3OH	2(1)-2(0) A	JCMT (IAUC 6353)
307.166	CH3OH	4(1)-4(0) A	JCMT (IAUC 6353)
338.000	CH3OH	7(K)-6(K) *	JCMT
342.883	CS	7-6	JCMT (IAUC 6353), KOSMA
345.339	H(13)CN	4-3	CSO
345.796	CO	3-2	JCMT (IAUC 6335), KOSMA, CSO
351.769	H2CO	515-414	JCMT (IAUC 6353), CSO
354.505	HCN	4-3	JCMT (IAUC 6318), CSO, KOSMA
361.852	CH3OH	8(1)-7(2) E	CSO
362.630	HNC	4-3	JCMT (IAUC 6353), CSO
362.735	H2CO	505-404	JCMT (IAUC 6353), CSO
365.363	H2CO	523-422	CSO
461.041	CO	4-3	CSO
461.754	CH3OH	15(0)-14(1) A	CSO
464.835	CH3OH	9(2)-9(1) A+	CSO
464.925	HDO	101-000	CSO (IAUC 6362)
491.969	H2CO	717-616	CSO
492.279	CH3OH	4(1)-3(0) A+	CSO
495.173	CH3OH	7(0)-6(-1) E	CSO
691.473	CO	6-5	CSO
708.877	HCN	8-7	CSO

* raies multiples.

TAB. 6 – *Les molécules observées dans des comètes distantes et dans la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) au fur et à mesure de son approche du Soleil.*

Comète	r_h [AU]	molécule	Q 10^{28} s^{-1}	référence
C/1980 E1 (Bowell)	5.2	OH (UV)	7.	A'H84
	4.6	CN (vis.)	0.00002	A'H84
1P/Halley	4.8	CN (vis.)	0.0003	Wyc85
	2.8	OH (radio)		Ger87
	2.6	OH (UV)		Fel87
95P/Chiron	11.3	CN (vis.)	0.14	Bus91 (non confirmé)
29P/Schwassmann-Wachmann 1	5.8	CN (vis.)	0.0008	Coc91 (non confirmé)
	6.1	CO (radio)	4.	Sen94 Cro95
	6.0	CO^+ (vis.)		*several*
C/1995 O1 (Hale-Bopp)	6.7	CO (radio)	2.	Biv96a Jew96a
	6.8	CN (vis.)	0.006	Fit96
	4.9	CH_3OH (radio)	0.09	Biv96b Wom96
	4.8	OH (UV)	1.5	Wea96
	4.8	HCN (radio)	0.02	Jew96b
	4.7	OH (radio)	5.	Cro96a
	4.7	CO_2 (IR)	1.3	Cro96b
	4.6	C_2 (vis.)	0.05	Rau96a
	4.6	C_3 (vis.)		Rau96a
	4.3	H_2S (radio)	0.03	Woo96
	4.3	NH_2 (vis.)		Rau96b
	4.1	CS (radio)	0.014	Biv96c
	4.1	H_2CO (radio)	0.01	Biv96c
	3.4	CH_3CN (radio)	0.012	Biv96d
	3.4	CO^+ (vis.)		Joc96
	2.8	H_2O^+ (vis.)		Rau96b

Références:

A'H84: A'Hearn et al. 1984; Biv96a: Biver et al. 1996; Biv96b: Biver et al. 1996 *IAU Circ.* 6386; Biv96c: Biver et al. 1996 *IAU Circ.* 6421; Biv96d: Biver et al. 1996 *IAU Circ.* 6458; Bus91: Bus et al. 1991; Coc91: Cochran & Cochran 1991; Cro95: Crovisier et al. 1995; Cro96a: Crovisier et al. 1996a *IAU Circ.* 6394; Cro96b: Crovisier et al. 1996b *Astron. Astrophys.* in press; Fel87: Feldman et al. 1987; Fit96: Fitzsimmons & Cartwright 1996 *IAU Circ.* 6252; Ger87: Gérard et al. 1987; Jew96a: Jewitt et al. 1996; Jew96b: Jewitt et al. 1996 *IAU Circ.* 6377; Joc96: Jockers et al. 1996 *IAU Circ.* 6468; Rau96a: Rauer et al. 1996 *IAU Circ.* 6400; Rau96b: Rauer 1996, *private communication*; Sen94: Senay & Jewitt 1994; Wea96: Weaver et al. 1996 *IAU Circ.* 6376; Wom96: Womack et al. 1996 *IAU Circ.* 6382; Woo96: Woodney et al. 1996 *IAU Circ.* 6408; Wyc85: Wyckoff et al. 1985.

En pouvant observer des constituants mineurs d'abondances aussi faibles que 10^{-4}, la spectroscopie radio se révèle être un outil très sensible. Les molécules sans moment dipolaire — CO_2 et la plupart des hydrocarbures — lui échappent cependant. L'eau lui échappe encore: ses transitions de rotation les plus intenses sont dans les domaines submilimétrique et de linfrarouge lointain, là où l'absorption tellurique (en raison même de la présence d'eau atmosphérique) rend les observations au sol impossibles. L'observation des raies de l'eau cométaire par des techniques hétérodynes sera l'objet des prochaines missions spatiales: ODIN, ROSETTA/MIRO, FIRST.

8 La composition des glaces cométaires et l'origine des comètes.

La Table 7 résume notre connaissance actuelle des abondances des volatiles des noyaux cométaires.

TAB. 7 – *Les abondances des volatiles cométaires. Adapté des compilations de* BOCKELÉE-MORVAN *(1996) et* CROVISIER *(1994). Certaines des abondances données pour la comète Hyakutake diffèrent légèrement des premières valeurs publiées en raison de l'adoption de taux de production d'eau plus appropriés. Pour H_2CO, les valeurs basses et hautes se réfèrent à l'hypothèse d'une production directe par le noyau ou par une source étendue, respectivement.*

Molécule	C/Hyakutake à 1 UA	autres comètes vers 1 UA	C/Hale-Bopp à 4 UA
H_2O	100.	100.	100.
HDO	0.05		
CO	5.–30.	2.–20.	80.
CO_2	$\leq$ 7.	3.–6.	30. (à 4,6 AU)
CH_4	0.7	< 0.5–2.	
C_2H_2	0.3-0.9		
C_2H_6	0.4		
CH_3OH	2.	1.–7.	6.
H_2CO	0.2–1.	0.05–4.	0.1–0.2
NH_3	0.5	0.4–0.9	
N_2		0.02	
HCN	0.15	0.1–0.2	0.6
HNC	0.01		
CH_3CN	0.01		
HC_3N		< 0.02	
H_2S	0.6	0.3	6.
CS	0.1	0.1	0.1
OCS	0.3	< 0.5	
S_2	0.005	0.02–0.2	
SO_2		< 0.001	

La présence de molécules aussi volatiles que H_2S, CH_4 et surtout CO (voir Table 1 montre que les glaces cométaires se sont condensées à très basse température, et que les noyaux cométaires sont restés au cours des temps à des témpératures relativement basses, confirmant ainsi qu'ils ont conservé le caractère primordial de la matière qu'ils renferment.

Les résultats récemment obtenus par ISO nous ont permis de préciser nos connaissances sur la composition des glaces interstellaires. Un bilan en est donné dans la table 8 : la comparaison avec la table 7 est édifiante et montre une similitude frappante entre les compositions des glaces cométaires et interstellaires, toutes les deux dominées par H_2O, CO et CO_2.

TAB. 8 – *Abondances des glaces interstellaires observées par ISO dans deux sources (d'après* D'HENDECOURT L. *et al. 1996, Astron. Astrophys.* **315**, *L365–L368;* WHITTET D.C.B. *et al. 1996, Astron. Astrophys.* **315**, *L357–L360).*

	RAFGL 7009S	NGC 7538
H_2O	100	100
CO	16	12
CO_2	23	15
CH_4	4	2
CH_3OH		4–12
HCOOH		(3)
H_2CO	1	
X–CN		2

D'autres faits sont à rapprocher :

1. Un rapport d'abondance [HNC]/[HCN] de 6 % a été mesuré dans la comète Hyakutake. C'est incompatible avec un mécanisme de formation à l'équilibre thermodynamique, qui produirait un rapport de 10^{-15} au plus. Les enveloppes circumstellaires ont des rapports [HNC]/[HCN] inférieurs à 1 %, mais ceux observés dans certains nuages moléculaires interstellaires peuvent être très élevés et proches de 1. Dans le milieu interstelaire, la production de HCN et HNC passe par la recombinaison dissociative de lion $HNCH^+$ qui crée HCN et HNC en quantités égales.

2. Le rapport [D]/[H] de l'eau cométaire est 1,9–3,5 $\times 10^{-4}$. C'est bien supérieur à celui de la Nébuleuse solaire primitive ($\simeq 2,5 \times 10^{-5}$), du milieu interstellaire diffus ($\simeq 1,5 \times 10^{-5}$), ou même de l'eau des océans terrestres ($\simeq 1,5 \times 10^{-4}$) alors qu'il existe un enrichissement en deutérium dans l'eau interstellaire.

3. La forte abondance des molécules à deux carbones. Les rapports d'abondance des hydrocarbures $[C_2H_2]/[CH_4]$ et $[C_2H_6]/[CH_4]$ sont proches de 1, celui de $[CH_3CN]/[HCN]$ est proche de 0,01. C'est encore incompatible avec des mécanismes de formation à l'équilibre thermodynamique.

Tous ces points plaident fortement en faveur d'une formation des noyaux cométaires à partir de matière interstellaire pratiquement inaltérée[26]. Cette hypothèse est cependant à prendre avec précaution. Il semble maintenant avéré que les comètes se sont formées dans des régions froides de la Nébuleuse solaire primitive. Mais on ne peut exclure que les grains d'origine interstellaire aient subi une sublimation puis recondensation de leurs glaces avant leur incorporation dans les noyaux cométaires. Ni que des processus physico-chimiques très proches

26. Une hypothèse défendue par Greenberg et son école depuis 1980 (GREENBERG J.M. 1982, in *Comets*, L.L. Wilkening edt., Univ. Arizona Press, Tucson, pp. 383–395).

de ceux se produisant dans les nuages interstellaires aient abouti, dans la Nebuleuse solaire primitive, à la production de matériaux très similaires à ceux du milieu interstellaire.

9 Bibliographie thématique.

Généralités sur les comètes :

CROVISIER J., ENCRENAZ T., 1995. Les comètes, témoins de la naissance du Système Solaire, Belin-CNRS Éditions.

FESTOU M.C., RICKMAN H., WEST R.M., 1993. Comets, *Astron. Astrophys. Rev.* **4**, 363–447 et **5**, 37–163.

HUEBNER W.F. (edt.), 1990. Physics and Chemistry of Comets, Springer Verlag, Berlin.

MENDIS D.A., HOUPIS H.L.F., MARCONI M.L., 1985. The Physics of Comets, *Fundamental of Cosmic Physic* **10**, 1–380.

MUMMA M.J., WEISSMAN P.R., STERN S.A., 1993. Comets and the origin of the solar system: Reading the Rosetta stone, *Protostars and Planets III*, E.H. Levy & J.I. Lunine (edts), University of Arizona Press, Tucson, pp. 1177–1252.

NEWBURN, R.L., NEUGEBAUER, M., RAHE, J. (edts), 1991. Comets in the Post-Halley Era, Kluwer, Dordrecht.

Bases de données moléculaires :

CROVISIER J., 1996. Constants for molecules of astrophysical interest in the gas phase: photodissociation, microwave and infrared spectra.
Disponible par *anonymous ftp* à `mesiom.obspm.fr/pub/molecule`

Spectroscopie IR

GEISA: Gestion et Étude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques. HUSSON N., CHEDIN A., SCOTT N.A. *et al.* 1986. The GEISA spectroscopic line parameters data bank in 1984. *Annales Geophysicae* **4** A, 2, 185.

Spectroscopie radio

JPL data base : `http://spec.jpl.nasa.gov`

LOVAS F.J., 1992. Recommended rest frequencies for observed interstellar molecular microwave transitions - 1991 revision. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **21**, 181–272. Également `http://physics.nist.gov/restfreq`.

Photolyse

HUEBNER W.F., KEADY J.J., LYON S.P., 1992. Solar photorates for planetary atmospheres and atmospheric pollutants. *Astrophys. Space Science* **195**, 1–294.

CROVISIER J., 1994. Photodestruction rates for cometary parent molecules. *J. Geophys. Res. Planets* **99**, E4, 3777–3781.

Processus de sublimation et modèles de noyaux cométaires

Klinger J., Levasseur-Regourd A.-C., Bouziani N., Enzian A., 1996. Towards a model of cometary nuclei for engineering studies for future space missions to comets. *Planet. Space Sci.* **44**, 637–653.

Schmitt B., 1992. Thermal and physico-chemical processes in cometary nuclei. In *Interrelations between Physics and Dynamics for Minor Bodies in the Solar System*, D. Benest & C. Froeschlé (edts), Éditions Frontières, p. 265–307.

Spectres cométaires visible et UV

Arpigny C., 1994. Physical chemistry of comets: Models, uncertainties, data needs. *Molecules in grains and space*, I. Nenner (edt.), AIP Conf. Proc. Series **312**, p. 205–238.

Arpigny C., 1995. Spectra of comets: ultraviolet and optical regions. In *Laboratory and Astronomical High Resolution Spectra*, A.J. Sauval et al. (edts), ASP Conference Series **81**, p. 362–382.

Spectres cométaires IR

Crovisier J., 1992. The infrared spectrum of comets. In *Infrared Astronomy with ISO*, T. Encrenaz and M.F. Kessler (edts), Nova Science Publishers, Inc., p. 221–248.

Crovisier J., 1995. Spectra of comets: infrared and radio regions. In *Laboratory and Astronomical High Resolution Spectra*, A.J. Sauval et al. (edts), ASP Conference Series **81**, p. 383–395.

Spectres cométaires radio

Crovisier J., Schloerb F.P., 1991. The study of comets at radio wavelengths. In *Comets in the Post-Halley Era*, R.L. Newburn Jr., M. Neugebauer and J. Rahe (edts), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, p. 149–173.

Abondances dans les comètes

Bockelée-Morvan D., 1996. Cometary volatiles: the status after comet C/1996 B2 Hyakutake. In IAU Symposium 178, *Molecules in Astrophysics: Probes & Processes*, Kluwer, Dordrecht (sous presse).

Crovisier J., 1994. Molecular abundances in comets. *Asteroids, Comets, Meteors 1993*, A. Milani et al. (edts), Kluwer, Dordrecht, pp. 313–326.

Eberhardt P., 1996. Volatiles, isotopes and origin of comets. *Asteroids, Comets, Meteors 1996*, COSPAR Colloquium **10**, sous presse.