
L'absence de détection de HeH⁺ est-elle due à sa destruction par H₂ ?

Eléonore Zicler*¹ and Olivier Parisel¹

¹Laboratoire de chimie théorique (LCT) – CNRS : UMR7616, Université Pierre et Marie Curie (UPMC) - Paris VI, Université Pierre et Marie Curie [UPMC] - Paris VI – Tour 12-13, 4ème étage, 4 place Jussieu, Case Courrier 137, 75252 PARIS, France

Résumé

L'hélium a beau être omniprésent et être le deuxième élément le plus abondant de l'univers après l'hydrogène, avec une abondance relative de He/H \sim 1/10, il n'a jamais été observé sous une autre forme que celle d'un atome neutre. Puisque l'hélium est un gaz noble, les raisons de sa non-observation au sein d'un édifice moléculaire neutre sont compréhensibles, mais cela est plus surprenant pour des espèces chargées positivement comme HeH⁺ qui est un ion diatomique stable et dont la signature spectrale est bien connue en laboratoire. Cette étude a pour but de trouver une raison chimique à la non-observation de HeH⁺ dans le milieu interstellaire (MIS). Une des causes supposées de cette absence de détection, à savoir la destruction de HeH⁺ par l'hydrogène moléculaire, selon la réaction : HeH⁺ + H₂ → H₃⁺ + He, est donc présentée ici.

Le traitement théorique de ce problème a consisté en la réalisation de calculs d'interaction de configurations avec un espace actif complet suivis par un traitement de perturbation au second ordre (CASPT2)[1] afin d'obtenir une hypersurface de potentiel de haute précision. Les taux de réaction déduits permettent de montrer sans aucune ambiguïté qu'il est impossible d'observer HeH⁺ dans le MIS.

Nous suggérons cependant un endroit où il serait possible de détecter HeH⁺ dans l'espace, i.e. au sein d'une coquille formée de H₂ se trouvant à l'intérieur de la nébuleuse NGC 7027[2], espace privilégié où soit H₂ ne s'est pas encore formé soit H₂ a déjà été détruit.

Références :

. Molcas 7.4: F. Aquilante, L. De Vico, N. Ferré, G. Ghigo, P.-Å Malmqvist, P. Neogrády, T.B. Pedersen, M. Pitonak, M. Reiher, B.O. Roos, L. Serrano-Andrés, M. Urban, V. Veryazov, R. Lindh, J. Comput. Chem 2010, 31, 224

. P. Cox, P. J. Huggins, J.-P. Maillard et al. Astron. Astrophys. 2002, 384, 603

Mots-Clés: Helium, Astrochimie, Méthodes ab, initio, Réactivité

*Intervenant