

# Spectroscopie Rotationnelle des Isomères du Cyanocyclopentadiène et du Diazocyclopentadiène pour la Recherche Astronomique dans les Milieux Interstellaires Chauds et Froids

Noé Gallifa<sup>1\*</sup>, Brett A. McGuire<sup>2,3</sup>, Jérôme Loreau<sup>4</sup>, Roman Motiyenko<sup>1</sup>, J.-C. Guillemin<sup>5</sup>, et Laurent Margulès<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Univ. Lille, CNRS, UMR 8523 - PhLAM, Physique des Lasers Atomes et Molécules, F-59000 Lille, France

<sup>2</sup> Department of Chemistry, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139, USA

<sup>3</sup> National Radio Astronomy Observatory, Charlottesville, VA 22903, USA

<sup>4</sup> Katholieke Universiteit Leuven, Department of Chemistry, Belgium

<sup>5</sup> Univ Rennes, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes, CNRS, ISCR UMR6226, F-35000 Rennes, France

La détection de molécules cycliques dans le milieu interstellaire a considérablement progressé au cours de la dernière décennie, TMC-1 s'imposant comme la source de référence pour les espèces azotées [1]. Parmi celles-ci, les deux isomères du cyanocyclopentadiène (1- et 2-cyano-CPD), détectés dans le cadre du programme GOTHAM ([2-3]), représentent des espèces d'intérêt astrochimique majeur. Les composés diazotés associés, notamment le diazocyclopentadiène (diazo-CPD, analogue des cyclopentadiényles détectés), et le diazométhane ( $\text{CH}_2\text{N}_2$ , la plus simple molécule de ce groupe), constituent quant à eux une famille chimique complémentaire tout aussi intéressante. Cependant, les données spectroscopiques de laboratoire de ces espèces sont jusqu'ici limitées au domaine des ondes centimétriques, rendant les extrapolations vers les domaines (sub)millimétriques peu fiables. Ce manque de données à plus haute fréquence est critique pour les cœurs chauds, où les températures plus élevées peuplent des niveaux rotationnels supérieurs. En effet, les prévisions fondées seulement sur les données centimétriques présentent des écarts allant de quelques kHz à plusieurs dizaines de MHz en raison de la distorsion centrifuge (DC).

Nous présentons donc une extension de l'analyse rotationnelle du 1- et 2-cyano-CPD dans la gamme 75-500 GHz, et du diazo-CPD dans la gamme 150-400 GHz. Les spectres ont été enregistrés avec le spectromètre FLASH de l'Université de Lille [4]. Leur analyse comprend plusieurs milliers de transitions simulées à la précision instrumentale (50 kHz). Les ajustements réalisés avec le programme ASFIT ont permis de déterminer 12 nouveaux paramètres DC (sextiques et octiques) pour les isomères du cyano-CPD, et 6 nouveaux paramètres (quartiques et sextiques) pour le diazo-CPD, améliorant la précision de toutes les constantes rotationnelles par rapport aux travaux antérieurs. Les fonctions de partition ont été calculées pour chacune des molécules en intégrant les contributions vibrationnelles, fournissant ainsi une correction indispensable à l'estimation des densités de colonne dans les milieux chauds. Ces nouvelles données ont permis d'engager des recherches pour le diazo-CPD vers TMC-1, NGC 6334I, ainsi que dans les relevés PILS et EMoCA, sans détection à ce stade. En revanche, la recherche préliminaire des isomères cyano-CPD vers NGC 6334I révèle quelques coïncidences spectrales prometteuses. Les travaux futurs cibleront les états vibrationnels excités de ces molécules et d'autres sources de type cœur chaud.

[1] M. C. McCarthy and B. A. McGuire. Aromatics and Cyclic Molecules in Molecular Clouds: A New Dimension of Interstellar Organic Chemistry. *J. Phys. Chem. A*, **125**, 3231–3243, doi: 10.1021/acs.jpca.1c00129 (2021).

[2] M. C. McCarthy, K. L. K. Lee, et al. Interstellar detection of the highly polar five-membered ring cyanocyclopentadiene. *Nature Astron.*, **5**, 176–180, doi: 10.1038/s41550-020-01213-y (2020).

[3] K. L. K. Lee. Interstellar Detection of 2-cyanocyclopentadiene, C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>CN, a Second Five-membered Ring toward TMC-1. *ApJ Lett.*, **910**, L2, doi: 10.3847/2041-8213/abe764 (2021).

[4] L., R. A. Motiyenko, et al. Millimeter- wave emission spectrometer based on direct digital synthesis. *Rev. Sci. Instrum.*, **91**, 063104, doi: 10.1063/5.0004461 (2020).

\* correspondant : noe.gallifa@univ-lille.fr