

Avis de Soutenance

Monsieur PIERRE HARDY

Physique

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Modélisation de spectres infrarouges de molécules cométaires

dirigés par Docteur Cyril Richard et Professeur Philippe Rousselot

Soutenance prévue le **vendredi 28 novembre 2025** à 13h30
Lieu : Université Bourgogne Europe - Ecole Polytech (ESIREM)
9 Avenue Alain Savary - 21000 DIJON - FRANCE
Salle MOOC

Composition du jury :

PROF. PATRICK SENET	Université Bourgogne Europe, France	Président
DR. MANUELA LIPPI	Osservatorio di Arcetri, Italia	Rapporteure
PROF. SERGEY YURCHENKO	University College London, United Kingdom	Rapporteur
PROF. EMMANUËL JEHIN	Université de Liège, Belgique	Examineur
DR. CYRIELLE OPITOM	University of Edinburgh, United Kingdom	Examinatrice
DR. AMANDA ROSS	Université de Lyon, France	Examinatrice
DR. CYRIL RICHARD	Université Bourgogne Europe, France	Directeur
PROF. PHILIPPE ROUSSELOT	Université Marie & Louis Pasteur, France	Directeur

Titre : Modélisation de spectres infrarouges de molécules cométaires

Mots clés : Spectroscopie, Infrarouge, Comètes, Modélisation

Résumé : Les comètes comptent parmi les corps les plus primitifs du Système solaire, et leur composition chimique fournit des informations clés sur sa formation. Grâce à la sonde Rosetta et à sa spectrométrie de masse in situ de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, de nombreuses nouvelles espèces moléculaires ont été identifiées. Cette thèse vise à prolonger ces résultats en fournissant les données moléculaires nécessaires à la détection de certaines de ces espèces dans d'autres comètes, à l'aide d'installations au sol et dans l'espace. Des données moléculaires précises sont essentielles pour une modélisation fiable des spectres infrarouges de ces espèces, et ouvriront la possibilité de les détecter avec les générations actuelles et futures de spectromètres dans le proche infrarouge, tels que le James Webb Space Telescope (JWST), le spectrograph CRIRES+ sur le Very Large Telescope de 8 m, ainsi que les futurs instruments de l'Extremely Large Telescope (ELT) de 39 m. A partir de nouveaux spectres à haute résolution de chlorométhane

et de cyanogène obtenus en collaboration avec des groupes expérimentaux (ligne AILES du synchrotron SOLEIL et laboratoire LISA), une analyse en positions et en intensité de bandes fondamentales est présentée. Grâce à des calculs de spectres précis, des longueurs d'onde et des intensités de raies en absorption et en émission ont été obtenus pour ces deux molécules, donnant lieu au développement de deux nouvelles bases de données. Ces bases de données sont ensuite utilisées dans le développement de modèles de fluorescence adaptés aux environnements cométaires. Appliqué à un récent spectre cométaire obtenu par le JWST, nous présentons une première limite supérieure de l'abondance de cyanogène dans les atmosphères cométaires, à partir d'observations à distance. Ce travail constitue une première étape du projet de recherche COSMIC ("COMputation and Spectroscopy of Molecules in the Infrared for Comet"), visant à développer des modèles spectroscopiques de molécules cométaires dans l'infrarouge.

Title : Modelling of infrared spectra of cometary molecules

Keywords : Spectroscopy, Infrared, Comets, Modelling

Abstract : Comets are among the most primitive bodies in the Solar System, and their chemical composition provides key information about its formation. Thanks to the Rosetta mission and its in situ mass spectrometry of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko, many new molecular species have been identified. This thesis aims to extend these results by providing the molecular data required to detect some of these species in other comets, using both ground-based and space facilities. Accurate molecular data are essential for the reliable modelling of the infrared spectra of these species, and will open the possibility of detecting them with current and future generations of near-infrared spectrometers, such as the James Webb Space Telescope (JWST), the CRIRES+ spectrograph on the 8-m Very Large Telescope, as well as the future instruments of the 39-m Extremely Large Telescope (ELT). Based on new high-resolution

spectra of chloromethane and cyanogen obtained in collaboration with experimental groups (the AILES beamline at the SOLEIL synchrotron and the LISA laboratory), an analysis of fundamental band positions and intensities is presented. Through accurate spectral calculations, wavelengths and line intensities in both absorption and emission were obtained for these two molecules, leading to the development of two new databases. These databases are then used in the development of fluorescence models adapted to cometary environments. Applied to a recent cometary spectrum obtained with JWST, we present a first upper limit on the abundance of cyanogen in cometary atmospheres, derived from remote observations. This work represents a first step in the COSMIC project ("COMputation and Spectroscopy of Molecules in the Infrared for Comet"), which aims to develop spectroscopic models of cometary molecules in the infrared.