



HAL
open science

Diversité des sources distribuées dans les comètes : les cas du formaldéhyde et de la glycine

Katia Hadraoui

► **To cite this version:**

Katia Hadraoui. Diversité des sources distribuées dans les comètes : les cas du formaldéhyde et de la glycine. Astrophysique galactique [astro-ph.GA]. Université Paris-Est, 2020. Français. NNT : 2020PESC2061 . tel-03261749

HAL Id: tel-03261749

<https://theses.hal.science/tel-03261749>

Submitted on 16 Jun 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Est (UPE)

Ecole doctorale Sciences, Ingénierie et Environnement (SIE)

Diversité des sources distribuées dans les comètes : les cas du formaldéhyde et de la glycine

Présentée par : **Katia Hadraoui**

Sciences de l'Univers et Environnement

Composition du jury :

Grégoire DANGER	Maître de Conférences	Rapporteur
Didier DESPOIS	Chargé de Recherche	Rapporteur
Cécile ENGRAND	Directrice de Recherche	Examinatrice
Dominique BOCKELEEE-MORVAN	Directrice de Recherche	Examinatrice
Marie-Claire GAZEAU	Professeure	Présidente
Hervé COTTIN	Professeur	Directeur de thèse
Nicolas BIVER	Chargé de Recherche	Co-directeur de thèse



Remerciements

Tout a commencé lors de ma licence 2, période durant laquelle on nous prépare à se trouver un stage de recherche pour l'année suivante. J'ai alors discuté avec Hervé Cottin, et je lui ai demandé s'il était possible d'effectuer un stage d'observation dans un lycée ou collège, car je vouais une affection particulière à l'enseignement, et je ne m'étais encore jamais intéressée à la recherche. Si vous lisez ces remerciements, vous vous doutez donc de sa réponse !!! Cette année-là, je découvrais également l'astrochimie à travers des enseignements menés par Hervé Cottin, et Antoine Jolly. Inutile de vous préciser dans quel domaine, et avec qui, j'ai mené mon stage de 3^{ème} année. Si ? Bon d'accord, avec Hervé ! Bref c'est là que tout a commencé.

C'est donc tout naturellement que je remercie Hervé de m'avoir donné cette chance il y a maintenant 6 ans, et d'avoir cru en moi toutes ces années. Merci pour la confiance qu'il m'a toujours témoignée, la patience et la compréhension dont il a toujours fait preuve, et surtout tous le temps qu'il m'a accordé. J'ai beaucoup douté de moi tout au long de ces années, et il a toujours été là pour me rappeler que j'avais ma place.

Cette thèse n'aurait pas pu se faire non plus sans Nicolas Biver. Merci d'avoir accepté ce challenge, et de m'avoir laissé ma chance. Merci d'avoir toujours répondu présent à toute heure pour me venir en aide. Il est clair que sans lui, je n'aurais pas pu avancer.

Merci à Nicolas Fray, toujours disponible pour m'expliquer ce qui me paraissait insurmontable, il a l'art et la manière de faire comprendre l'incompréhensible plus facilement.

Je remercie également Pascal Zapf qui m'a appris le maniement de LabView. Si un jour vous rencontrez un problème avec ce logiciel, n'hésitez pas, foncez le voir !

Enfin, j'ai eu la chance de rencontrer Stavro Ivanoski qui n'a pas hésité à participer à ce projet de recherche, et qui m'a été d'une aide précieuse. Merci à lui, et à toute son équipe.

Je remercie également les membres de mon jury, Marie-Claire Gazeau qui en a accepté la présidence, Didier Despois et Grégoire Danger qui en ont été les rapporteurs, ainsi que Dominique Bockelée-Morvan et Cecile Engrand d'avoir accepté d'évaluer mon travail. Merci à vous tous d'avoir suscité de l'intérêt pour mon travail.

Autour de tout ce travail se cachent tout un tas d'acteurs qui ont rendu ces années plus agréables. Merci à tous les membres du GPCOS, Marie-Claire, Olivia, Yves, Nicolas, Antoine, Fabien, François, et Robert. Merci pour votre gentillesse, et votre bienveillance tout au long de ces années. Merci à Stefane Alfaro et Adrianna Coman d'avoir toujours pris le temps de discuter avec moi lorsque ça n'allait pas. Je remercie également Christophe Morin pour m'avoir ouvert les portes de l'enseignement il y a quelques années lors des cordées de la réussite, et d'avoir toujours pensé à moi pour des présentations.

Mention spéciale aux doctorants que j'ai vu passer, être diplômés, ou encore que je laisse derrière moi, avec qui nous nous sommes toujours serrés les coudes : Anaïs, Robin, Naïla (ou

Nella Chaouche), Thomas, Mathilde, Inès ; merci pour tous les déjeuners et goûters partagés, tous ces bons moments passés ensemble, et tous le soutien que vous m'avez apporté, merci d'avoir écouté mes plaintes encore et encore. Sachez que vous êtes bien plus que de simples collègues.

J'ai également fais une rencontre assez spéciale entre les murs du laboratoire il y'a maintenant 6 ans, et sans pouvoir expliquer comment j'ai suivi ses pas... jusqu'à la salle d'opération ! Laura, d'abord la best des collègues, maintenant une vraie amie. Merci de m'avoir écoutée me plaindre, merci pour tous ces fous rires, nos séances de sports, nos commérages, et nos conversations interminables sur whatsapp. Merci d'avoir pris le temps de faire la mise en page avec moi, je m'en souviens comme si c'était hier, seule j'aurai cassé mon ordinateur plus d'une fois. Bref, merci d'être là (même si toutes mes amendes me lient avec toi !).

Je n'oublie pas Melvin, l'homme qui a toujours tort (oui, oui), d'avoir pris le temps de corriger les fautes avec moi, et qui a appris un nouveau mot le polyxotmthylène, euh le poloxomtilène, mince, je voulais dire le polyméthylène, bon tant pis !

Je remercie également mes amis, qui ont toujours su trouver les mots pour me remotiver, me soutenir, et me redonner confiance en moi : Léa, Mikaël, Misak, Guillaume, Fanny, Rony, Natacha. Merci pour toutes ces fois où vous avez répondu présents lorsque j'ai eu besoin de me changer les idées, de me confier, de me plaindre. Merci pour tous ces bons moments passés ensemble. Vous êtes des amis en or.

Merci à mon meilleur ami, mon binôme, ma moitié, Yassine, qui a dû me supporter jours après jours. La rédaction, et ces trois ans de thèse, auraient été bien plus compliquées sans toi, tu m'as permis de tenir, et de me rappeler pourquoi j'en suis là aujourd'hui et ceux à chaque moment de doutes. Merci d'avoir toujours été là pour me changer les idées (vive les escapes, le wake, les promenades à la plage et j'en passe), même quand tu étais encore plus fatigué que moi, merci de m'avoir toujours poussé à donner le meilleur de moi-même, encore aujourd'hui. Merci tout simplement d'être là et de faire partie de ma vie. Je ne te remercierai jamais assez pour tout. Mais saches je n'oublie pas que tu dois un jour lire cette thèse !!

Enfin, merci à ma famille sans qui je ne serais jamais arrivée là aujourd'hui, et à qui je dois tout. Merci à mes parents, à mes sœurs Nadia et Sarah, et à mon frère Jawad, de m'avoir permis de suivre en toute sérénité les études que je désirais (même la prépa médecine, désolée pour les sous, mais ce n'était vraiment pas fait pour moi !!), merci d'avoir accepté mes choix sans jamais m'en vouloir, de m'avoir toujours soutenue, et de m'avoir toujours poussée à aller le plus loin possible. Merci de m'avoir appris la valeur des choses, et à relativiser quoi qu'il arrive. Je n'aurai jamais assez de mots pour vous exprimer ma gratitude.

Finalement, je remercie toutes les personnes qui se sont intéressées de près ou de loin à mon travail, tous ceux qui étaient présents derrière leur ordinateur le jour J, ou qui ont eu une pensée pour moi.

Résumé

Présentes depuis la formation du Système Solaire, les comètes suscitent un intérêt particulier. Elles ont pu apporter sur la Terre primitive des composés organiques, et ainsi favoriser l'apparition de la vie. Des observations depuis la Terre et des missions spatiales ont permis de mesurer la composition de ces petits corps, et en particulier celle de leur atmosphère. Un grand nombre des molécules observées dans l'environnement cométaire provient directement de la sublimation des glaces du noyau, mais la distribution de certaines d'entre elles est plus complexe.

Ce travail de thèse entre dans le cadre de l'étude des sources distribuées dans les comètes. Deux molécules ont été étudiées au cours de cette thèse. D'une part, le formaldéhyde qui présente un comportement atypique dans la plupart des comètes dans lesquelles il a été détecté. Le cas de six comètes est discuté : C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/1996 B2 (Hyakutake), C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon). D'autre part la glycine, pour laquelle un profil de densité en fonction de la distance au noyau a été mesuré dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko lors de la mission Rosetta. Ce profil de densité présente un comportement particulier.

Afin d'interpréter ces observations, j'ai développé un modèle numérique appliqué dans un premier temps à la production de formaldéhyde dans les atmosphères cométaires, puis étendu au cas de la glycine. Deux cas ont été considérés pour l'étude du formaldéhyde : a. celui-ci est formé à partir de sublimation des glaces du noyau, b. celui-ci est produit à partir d'une source distribuée impliquant la dégradation thermique et photochimique du polyoxyméthylène présent sur les particules éjectées du noyau. Concernant la glycine, trois cas ont été pris en compte : a. celle-ci est émise directement et uniquement à partir de la sublimation des glaces du noyau, b. celle-ci est produite à partir de la sublimation de glycine solide présente sur les particules de poussière éjectées du noyau, c. celle-ci serait incluse dans la matrice de glace d'eau présente sur les particules de poussière éjectées du noyau et serait émise en phase gazeuse en même temps que la glace d'eau sublimerait. Ces deux derniers cas s'apparentent à une source distribuée.

Une source unique à partir du noyau n'explique pas les profils de densité mesurés de formaldéhyde dans les comètes C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/1996 B2 (Hyakutake), C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon). Ce cas ne permet pas non plus d'expliquer les observations de glycine faites dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. La meilleure hypothèse concernant le formaldéhyde correspond donc, d'une part, à une faible production à partir du noyau, soit entre 0 et 0,2% par rapport à la production de gaz total. Et d'autre part à une majorité de formaldéhyde provenant d'une source distribuée à partir de la dégradation de son polymère, le polyoxyméthylène pour des quantités qui varient, d'une comète à l'autre, entre 0,25 et 2,7 % de polyoxyméthylène en masse dans les particules. En ce qui concerne la glycine, les observations peuvent être ajustées si l'on considère la sublimation de glace d'eau à partir des particules de poussière dans l'atmosphère avec une abondance de glycine d'environ 170 ppb en masse au sein de la glace d'eau, soit $4,1 \cdot 10^{-6}$ % en nombre par rapport à l'eau.

Abstract

Formed since the creation of the Solar System, comets are of particular interest. They could have brought organic compounds to the primitive Earth that contributed to the chemical evolution that led to the origin of life on Earth. Thanks to ground based observations and space missions, it is possible to measure the composition of these small bodies. Although most of the gaseous molecules detected in cometary atmospheres are produced from the sublimation of nucleus ices, but the distribution of some of them is more complex.

This thesis work is part of the study of distributed sources in comets. Two molecules were studied. On the one hand, formaldehyde which presents an atypical behavior in most of the comets in which it has been detected. The case of six comets is discussed: C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/1996 B2 (Hyakutake), C/2012 S1 (ISON) and C/2012 F6 (Lemmon). On the other hand, glycine, for which a profile of the density as a function of the distance of the nucleus has been measured in comet 67P/Churyumov-Gerasimenko during the Rosetta mission. This density profile shows a particular behavior.

In order to interpret these observations, I have developed a numerical model applied first to the production of formaldehyde in cometary atmospheres, and then extended to the case of glycine. Two cases have been considered for the study of formaldehyde: a. it is produced from the sublimation of nucleus ices, b. it is produced from a distributed source involving thermal and photochemical degradation of polyoxymethylene on particles ejected from the nucleus. Concerning glycine, three cases have been considered: a. it is emitted directly and only from the sublimation of nucleus ice, b. it is produced from the sublimation of solid glycine on dust particles ejected from the nucleus, c. glycine is embedded in water ice and emitted from the sublimation of this ice from the particles ejected from the nucleus. These last two cases being distributed sources.

A parent source from the nucleus does not explain the density profiles of formaldehyde measured in comets C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/1996 B2 (Hyakutake), C/2012 S1 (ISON) and C/2012 F6 (Lemmon). This case also does not explain the glycine observations in comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. Concerning formaldehyde, the best solution proposed corresponds to a low production from the nucleus, i.e. between 0 and 0.2% in relation to the total gas production, and a majority of formaldehyde coming from a distributed source from the degradation of its polymer, polyoxymethylene. The abundance, from one comet to another, varies between 0.25 and 2.7% of polyoxymethylene by mass in particles. Regarding glycine, the observations can be adjusted if the sublimation of water ice from dust particles in the atmosphere is considered with an abundance of glycine of about 170 ppb by mass in water ice, $4,1 \cdot 10^{-6}$ % in number compared to water.

Table des matières

Remerciements	6
Résumé	9
Abstract	11
Index des notations employées dans les équations du modèle	17
Chapitre 1 : Les comètes	21
1. Généralités sur les comètes	21
1.1. Historique des comètes.....	21
1.2. Définition et classification	24
1.2.1. Définition d'une comète	24
1.2.2. Nomenclature	25
1.2.3. Orbites cométaires.....	25
1.2.4. Réservoirs cométaires.....	27
1.2.5. Différentes familles de comètes	29
1.3. Structure d'une comète.....	30
1.3.1. Noyau.....	31
1.3.2. Coma.....	32
1.3.3. La queue d'ions, la queue de poussières et le nuage d'hydrogène.....	32
1.4. Intérêt des études cométaires	33
1.4.1. La formation des comètes.....	33
1.4.2. Intérêt planétologique et exobiologique	34
2. Outils d'étude de la composition des comètes.....	34
2.1. Moyens d'étude	34
2.1.1. Observation à distance.....	35
2.1.1.1. Observation de la phase gazeuse.....	35
2.1.1.2. La coma de poussières.....	36
2.1.2. Missions spatiales.....	36
2.1.2.1. Mission Giotto vers la comète 1P/Halley	37
2.1.2.2. Mission Giotto vers 26P/Grigg-Skjellerup	39
2.1.2.3. Mission Deep Space 1 vers la comète 19P/Borrelly.....	39
2.1.2.4. Missions Deep Impact et Stardust-NeXT vers la comète 9P/Tempel 1..	40
2.1.2.5. Mission EPOXI vers la comète 103P/Hartley 2.....	42

2.1.2.6. Mission ROSETTA vers la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko.....	43
2.1.3. Retour d'échantillon : Stardust et la comète 81P/Wild 2	49
2.1.4. Particules de poussières interplanétaires, et micrométéorites.....	50
2.1.5. Simulation en laboratoire.....	51
2.2. La composition des comètes.....	52
2.2.1. Composition de la phase solide.....	53
2.2.2. Composition de la phase gazeuse	57
2.2.3. Rapport D/H.....	61
3. Source distribuée dans les comètes	62
3.1. Définition et historique des sources distribuées	62
3.2. Sources distribuées de formaldéhyde	65
3.3. Source distribuée de glycine	68
4. Conclusions et objectifs.....	69
Chapitre 2 : Matériels et méthodes : Observations et modélisation.....	71
1. Observations.....	72
1.1. Cas du formaldéhyde.....	72
1.1.1. Observations depuis la Terre	72
1.1.2. Traitement des observations radio.....	75
1.1.2.1. Conversion des intensités des raies en densité colonne.....	75
1.1.2.2. L'incertitude totale.....	77
1.1.2.3. De la densité radiale à la densité colonne.....	78
1.1.3. Comètes C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon)	79
1.1.4. C/1996 B2 (Hyakutake).....	84
1.1.5. C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle.....	90
1.2. Cas de la glycine dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko	97
2. Présentation du modèle	100
2.1. Généralité	100
2.1.1. Logiciel de programmation.....	100
2.1.2. Méthode d'Euler	101
2.2. Le modèle de Haser.....	103
2.2.1. Cas d'une molécule mère.....	105
2.2.2. Cas d'une molécule fille	106
2.2.3. Evolution de la densité du formaldéhyde dans une atmosphère cométaire.....	109

2.2.3.1. Cas d'une molécule mère.....	110
2.2.3.2. Cas d'une source distribuée de formaldéhyde	110
2.2.4. Evolution de la densité de la glycine	114
2.2.4.1. Cas d'une molécule mère.....	115
2.2.4.2. Cas d'une source distribuée de glycine	116
2.2.5. Les limites du modèle de Haser.....	120
2.3. Paramètres d'entrée	120
2.3.4. Distribution des particules cométaires.....	121
2.3.5. Température des particules.....	123
2.3.6. Vitesses des particules.....	124
2.3.6.1. Cas du formaldéhyde.....	124
2.3.6.2. Cas de la glycine.....	126
3. Conclusion.....	127
Chapitre 3 : Sources distribuées de formaldéhyde	129
1. Le formaldéhyde	129
1.1. Généralités.....	129
1.2. Processus de formation du formaldéhyde.....	129
2. Le polyoxyméthylène.....	130
2.1. Le POM dans les comètes	130
2.2. Dégradation du polyoxyméthylène	133
3. Modélisation de la distribution du formaldéhyde.....	134
3.1. Définition de χ^2 et de χ^2 réduit (χ^2).....	135
3.1.1. Incertitudes sur les pourcentages de POM et H ₂ CO.....	136
3.2. Source unique	136
3.2.1. C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz) et 8P/Tuttle.....	136
3.2.2. C/2012 F6 (Lemmon) et C/2012 S1 (ISON).....	140
3.3. Source distribuée.....	142
3.3.1. C/2001 Q4 (NEAT).....	142
3.3.2. 8P/Tuttle	145
3.3.3. C/2004 Q2 (Machholz)	146
3.3.4. C/1996 B2 (Hyakutake).....	151
3.3.5. C/2012 S1 (ISON).....	158
3.3.6. C/2012 F6 (Lemmon).....	163

4. Conclusion	168
Chapitre 4 : Source distribuée de la glycine dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko ..	171
1. Chimie de la glycine.....	171
1.1. Historique	171
1.2. Mécanismes de formation de la glycine	172
2. Modélisation de la distribution radiale autour du noyau.....	174
2.1. Cas d'une source unique de glycine à partir des glaces du noyau.....	176
2.2. Cas d'une source distribuée de glycine à partir de glycine solide sur les particules éjectées du noyau	177
2.3. Cas d'une source distribuée de glycine à partir de la glace d'eau sur les particules éjectées du noyau	178
3. Discussion	181
4. Conclusion.....	182
Conclusions générales et perspectives.....	185
Annexe 1 – Programme de sources distribuées de formaldéhyde et de glycine	189
Annexe 2 – Article sur la source distribuée de glycine	201
Bibliographie.....	211

Index des notations employées dans les équations du modèle

On considère ici les particules distribuées en classe de tailles.

A : constante d'Arrhenius liée à la dégradation thermique du polyoxyméthylène ($A = 8,7 \cdot 10^8 \text{ mol.kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)

A_p : aire d'une particule sphérique (m^2)

C : taux de dégradation d'une particule par photolyse du polyoxyméthylène, ($\text{kg.m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

C' : taux de production de H_2CO à partir d'une particule via la photolyse du polyoxyméthylène ($\text{molécule.m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

E_a : énergie d'activation liée à la dégradation thermique du polyoxyméthylène ($E_a = 74,2 \text{ kJ.mol}^{-1}$)

f_λ : irradiance solaire ($\text{photons.m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{nm}^{-1}$)

J_X : constante de photolyse d'une molécule X (s^{-1})

k_{POM} : constante cinétique liée à la dégradation thermique du polyoxyméthylène ($\text{mol.kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)

L_X : enthalpie de sublimation d'une molécule X (J.mol^{-1})

M_X : Masse molaire d'une molécule X (kg.mol^{-1})

m_X : masse d'une molécule X (kg)

m_p : masse d'une particule de classe p (kg)

N_A : nombre d'Avogadro ($N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$)

$n_{\text{H}_2\text{CO}}$: densité volumique de formaldéhyde en phase gazeuse (molec.m^{-3})

$n_{\text{gly}}^{\text{gaz}}$: densité volumique de glycine en phase gazeuse (molec.m^{-3})

n_p : densité volumique de particules de classe p (m^{-3})

$n_{\text{gly}}^{\text{p}}$: nombre de molécules de glycine dans une particule (molec)

P_{eq} : pression de vapeur d'une molécule X (Pa)

P_{ref} : pression de référence d'une molécule X (Pa)

Q_p : taux de productions de particules de classe p (s^{-1})

r : distance au noyau (m)

R : constante des gaz parfaits ($R = 8,314 \text{ J.mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)

$R_{p,0}$: rayon initial d'une particule (m)

$R_{p,e}$: rayon équivalent d'une particule (m)

T : température d'une particule (K)

T_{ref} : température de référence d'une molécule X (K)

T_{eq} : température d'équilibre d'une particule (K)

V_p : volume d'une particule de classe p (m^3)

v_g : vitesse d'expansion des gaz (m.s^{-1})

v_p : vitesse d'une particules de classe p (m.s^{-1})

α : coefficient d'adhésion d'une molécule

σ_p : section d'une particule de classe p exposée au UV solaires (m^{-2})

Φ_λ^X : rendement quantique de production de l'espèce X considérée

ρ_p : masse volumique d'une particule (kg.m^{-3})

ρ_X : masse volumique d'une molécule X en phase solide (kg.m^{-3})

*Beaucoup veulent être une star,
Moi je voulais être une comète.*

Disiz La Peste

Chapitre 1 : Les comètes

1. Généralités sur les comètes

1.1. Historique des comètes



Figure 1.1: L'adoration des mages, peinte par Giotto, présente sur les murs de la chapelle Scrovegni (Italie) vers 1305. La comète correspondrait probablement à la comète de Halley de passage en 1301. Crédits : Olson and Pasachoff (2002).

Depuis des milliers d'années, les comètes effraient et fascinent. Elles ont été au cœur de superstitions et de légendes. Surpris par leur comportement imprévisible et variable, c'est environ 2000 ans avant Jésus-Christ que les premiers astronomes ont commencé à relater l'observation de ces objets mystérieux. Les « comètes », ou encore les « astres chevelus », sont les noms qui leur ont été donnés. En ces temps, toute chose inconnue ne pouvait avoir une origine autre que divine, et les comètes n'ont pas échappé à ce principe. Durant des siècles, elles ont été le signe de mauvais présages. L'incompréhension vis-à-vis de ces objets s'illustre particulièrement par les théories d'Aristote (IV^e siècle av. JC) et Ptolémée (II^e siècle) : celles-ci plaçaient non seulement la Terre au centre de l'Univers mais donnaient en plus une origine atmosphérique aux comètes. Aristote traite d'ailleurs des comètes dans son ouvrage consacré à la météorologie et non dans celui au sujet de l'astronomie. Pline l'Ancien (77 av J.C) appuie ces théories avec l'ouvrage *Histoire Naturelle*, dans lequel il consacre le livre II à la description mathématique et physique du monde. On y retrouve un récit liant les comètes au destin

des humains : «Ce sont des astres pleins de présages funestes, et qui ne se contentent pas de légères expiations, témoin les troubles civils sous le consul Octavius (an de Rome 678; 76 avant J. C.), et derechef la guerre de Pompée et de César (49 avant J. C.); témoin encore, de notre temps, l'empoisonnement qui fit succéder Néron à l'empereur Claude (an de Rome 707, 54 après J.C.); témoin enfin le règne de ce prince, durant lequel l'influence en fut presque continuelle et funeste. ». Les comètes sont également associées à des catastrophes telles que des déluges, des épidémies ou encore des tremblements de Terre. Pline l'Ancien ajoute que « la diversité des effets qu'elles produisent dépend des parties vers lesquelles elles s'élancent, de l'étoile dont elles ressentent l'action, des formes qu'elles imitent, et des lieux où elles font éruption », ainsi l'apparition de ces astres mystérieux engendre un climat de terreur. Malgré tout, cette comète a suscité le présage de bonnes nouvelles telle que le montre la toile *L'adoration des mages* de Giotto sur la **Figure 1.1**, en effet l'étoile dite de la Nativité (étoile qui aurait guidé les rois mages) est représentée sous la forme d'une comète, une forme qui aura été probablement inspirée à l'artiste par le passage de la comète de Halley en 1301.

C'est à partir du XV^e siècle qu'on relève une avancée notable dans la connaissance scientifique des comètes. Les premières mesures astronomiques faites en Allemagne et en Italie ont permis d'en savoir plus sur l'orientation des queues cométaires et sur le mouvement des comètes, par exemple les queues sont toujours de sens opposé à la direction au Soleil. De plus, les mouvements observés de la comète de 1577 (**Figure 1.2**) par Tycho Brahe montrent que les comètes se trouvent hors de l'atmosphère terrestre. A cette période, l'évolution des méthodes d'observation se fait également ressentir, il devient possible de mesurer la distance d'une comète brillante par rapport à la Terre, et ce grâce à des observations simultanées à partir de deux observatoires situés à une distance de 600 kilomètres l'un de l'autre.



Figure 1.2 : La grande comète de 1577 observée à Prague, gravée par Jiri Daschitzky. Crédits : Zentralbibliothek Zürich.

Il en découle que les comètes seraient des objets du ciel lointain, encore plus éloignées de la Terre que ne l'est la Lune, ainsi la théorie atmosphérique des comètes portée par Aristote est contredite. Le système de Ptolémée pour lequel la Terre se trouvait au centre de l'Univers disparaît à son tour, au profit du modèle que l'on connaît aujourd'hui : les planètes sont en fait en orbite autour du Soleil. C'est Nicolas Copernic, au cours du XVI^e siècle, qui a fait entrer dans les mœurs les bases du modèle héliocentrique. Il affirme dans son ouvrage « *De Revolutionibus orbium caelestium* » (1543) que la Terre n'est pas le centre de l'Univers, mais aussi que celle-ci n'est pas immobile. Cependant, il faudra encore près d'un siècle durant lequel Tycho Brahe, Johannes Kepler, et Galileo Galilei (Galilée) mèneront études et observations supplémentaires, afin que la révolution copernicienne prenne réellement place. Grâce aux observations de Tycho Brahe sont nées les lois de Kepler, celles-ci régissent la trajectoire des planètes en orbite autour du Soleil. Ces lois ne seront acceptées que suite aux travaux décisifs d'Isaac Newton qui établissent la loi universelle de la gravitation. En effet, Newton affirme que les mouvements planétaires décrits par les lois de Kepler ne sont autres que la conséquence d'une seule et unique force : la gravité. Les lois de Newton ont finalement résolu les questions qui se posaient sur le géocentrisme, et sur les orbites planétaires pendant des centaines d'années.

Mais qu'en est-il de la nature des comètes ? Un astronome du nom d'Edmond Halley observe, en 1682, une comète brillante qui sera nommée par la suite en son honneur : la comète de Halley. En s'appuyant sur les études et observations passées mais aussi sur les lois de la gravitation universelle de Newton, il est devenu possible pour Edmond Halley d'affirmer que les comètes suivent une trajectoire elliptique autour du Soleil et reviennent périodiquement à sa proximité. Ainsi, ce serait donc la même comète qui aurait été observée en 1456, 1531, et 1607. Ces intervalles de 76 ans lui permettent de prédire un nouveau passage de la comète en 1758. Edmond Halley n'a pas vécu suffisamment longtemps pour assister à la réalisation de sa prédiction, mais cet évènement se produisit bel et bien, apportant une confirmation ultime à la théorie de la gravité de Newton. Cependant, les ignorances sur la taille et nature des comètes demeurent toujours, il se développe une peur de collision avec la Terre, et d'un empoisonnement de notre atmosphère par des vapeurs toxiques qui pourraient composer l'atmosphère et la queue cométaire.

Ce n'est qu'au XX^e siècle, et à la suite des premières missions spatiales, que la crainte et les superstitions inspirées par les comètes laissent place à un élan de fascination et de curiosité scientifique. Certes, toujours pleines de mystères, les comètes ne sont plus terrifiantes et ne sont désormais plus qualifiées de mauvais présages. De nombreuses comètes ont été étudiées scientifiquement durant le XIX^e siècle jusqu'à aujourd'hui avec l'apparition de la comète C/2020 F3 NEOWISE qui a été visible à l'œil nu au cours de l'été 2020 (**Figure 1.3**). Les travaux de Fred Whipple marquent le début d'une nouvelle ère dans l'étude des comètes. Il propose le modèle de la « boule de neige sale » (Whipple, 1950) : les comètes seraient composées d'un noyau solide, de quelques kilomètres de diamètre, composé d'un mélange de glaces dominées par l'eau et de poussières. Aujourd'hui, ce modèle est bel et bien confirmé par de nombreuses observations.



Figure 1.3 : Photographie de la comète NEOWISE au sud de Tours, le 12 Juillet 2020. Crédits : Nicolas Biver.

1.2. Définition et classification

1.2.1. Définition d'une comète

L'Union Astronomique Internationale (UAI) définit les petits corps du système solaire comme des objets qui orbitent autour du Soleil - autres que des planètes, planètes naines, et satellite - dont la masse n'est pas suffisante pour les avoir amenés à présenter une forme sphérique ou presque sphérique et qui n'ont pas fait le vide dans leur voisinage.

Les comètes sont donc considérées comme des petits corps du système solaire. Ce sont des petits corps glacés de quelques kilomètres de diamètre constitués d'un mélange de poussières et de glaces dominées par l'eau. Lorsqu'une comète se rapproche du Soleil, celle-ci voit sa température de surface augmenter, et devient active. Les glaces qui la constituent se subliment, entraînant ainsi des particules de poussières. C'est ainsi que se forment la chevelure cométaire (coma) et les queues d'ions et de poussières.

Ces objets se distinguent des astéroïdes de par leur composition, et de leur activité. En effet, les astéroïdes sont également des petits corps du système solaire de quelques mètres à plusieurs kilomètres de diamètre. Cependant, lorsqu'ils s'approchent du Soleil, les astéroïdes ne présentent aucune activité. Certains astéroïdes seraient des comètes dites « éteintes ».

1.2.2. Nomenclature

La dénomination des comètes est un paramètre qui a été modifié plusieurs fois. Depuis 1995, l'Union Astronomique Internationale (IAU) a fixé des règles de nomenclature.

Un préfixe est utilisé pour différencier les types de comètes :

- ✚ C/ pour les comètes nouvelles ou qui présentent une période supérieure à 200 ans.
- ✚ P/ pour les comètes qui présentent des périodes plus courtes et dont on a observé plus d'un passage près du Soleil.
- ✚ I/ pour les comètes interstellaires.
- ✚ X/ pour les comètes dont l'orbite n'est pas déterminée
- ✚ D/ pour les comètes « mortes » ou disparues

Pour les comètes nouvelles ou à longue période, l'année de découverte est ajoutée, suivie d'une lettre majuscule qui correspond au demi-mois de la découverte, A pour les deux premières semaines de Janvier, B pour les deux suivantes et ainsi de suite, les lettres I et Z ne sont pas utilisées. Un chiffre indique le classement de la découverte de la comète dans le demi-mois en question. On retrouve ensuite, mais de manière non systématique le nom du découvreur, ou de l'instrument qui a permis l'observation (par exemple SOHO, LINEAR), et éventuellement un numéro désignant l'ordre de la découverte. Ainsi, si on se réfère à la comète C/2004 Q2 (Machholz), il est possible de déduire que c'est une comète à longue période découverte en 2004 par l'astronome Don Machholz, lors des deux dernières semaines du mois d'Août 2004, et que c'est la deuxième comète qui a été découverte durant cette période.

Pour les comètes périodiques à courte période, la nomenclature est différente. Un nombre séquentiel est ajouté avant le préfixe P/ indiquant l'ordre dans lequel elles ont été observées lors d'un second passage autour du Soleil, ou après leur passage à l'aphélie. On retrouve ensuite généralement le nom du ou des découvreurs. Par exemple 21P/Giacobini-Zinner, 26P/Grigg-Skjellerup, 29P/Schwassmann-Wachmann et de nombreuses autres comètes. Il est également possible de trouver un nombre séquentiel si plusieurs comètes ont été découvertes par le même observateur ou instrument, par exemple 100P/Hartley 1, 103P/Hartley 2 et 110P/Hartley 3.

Comme pour toutes règles, il existe quelques exceptions, quelques comètes historiques ne se sont pas vu attribuer de noms, et certaines comètes très brillantes remarquées par de nombreux observateurs de manières simultanées sont simplement appelées « Grandes comètes ».

A ce jour (Octobre 2020), 4070 comètes ont été découvertes. (<http://minorplanetcenter.net>)

1.2.3. Orbites cométaires

Les comètes se trouvent en orbite autour du Soleil avec des trajectoires variées. La forme de leur orbite est définie par six paramètres différents dont l'excentricité (e) et l'inclinaison (i) (**Figure 1.4**). En

plus de l'excentricité et l'inclinaison, l'orbite est caractérisée de façon complète avec l'argument du périhélie, la longitude du nœud ascendant, le demi grand axe a , et le passage au périhélie.

Les planètes se trouvent dans le plan de l'écliptique (soit $i=0^\circ$), alors que les comètes peuvent être inclinées par rapport à ce plan. Ce paramètre est défini par l'inclinaison de l'orbite qui désigne l'angle que fait le plan orbital avec le plan de l'écliptique, celui-ci peut varier entre 0 et 180 degrés, et donne des informations sur la provenance probable d'une comète.

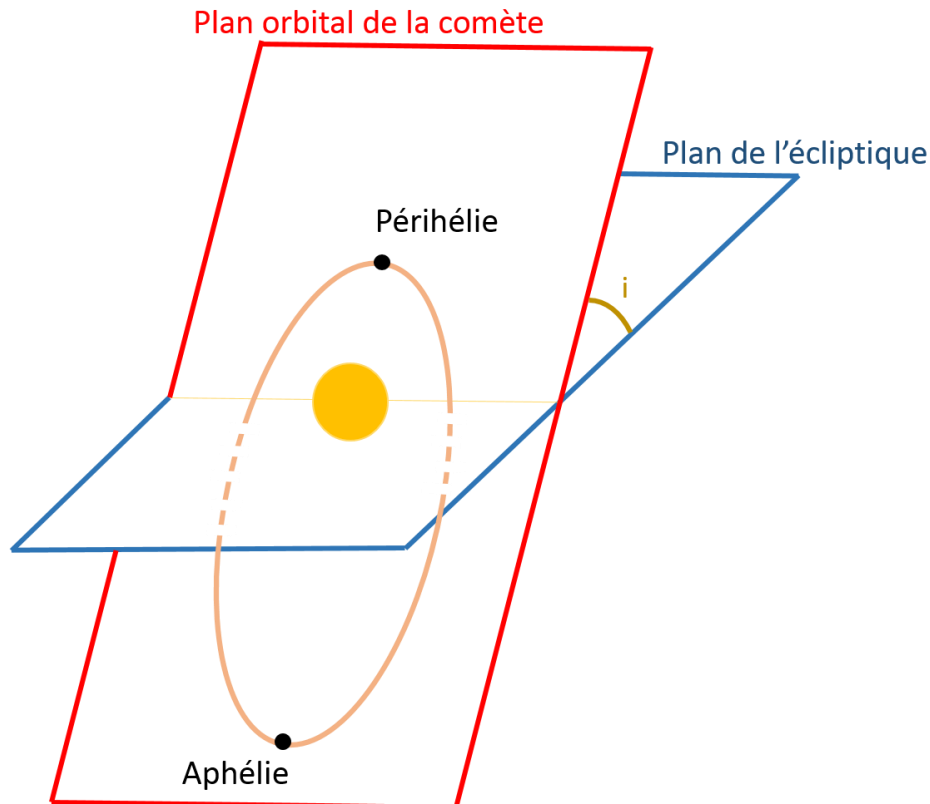


Figure 1.4: Schéma illustrant les différents paramètres décrivant la trajectoire d'une comète.

L'excentricité (e) désigne la forme de l'orbite. Les planètes et astéroïdes présentent une orbite quasiment circulaire ($e=0$), alors que les comètes ont plutôt une orbite de forte excentricité telle que représentée sur la **Figure 1.5** :

- ✚ Elliptique lorsque $0 < e < 1$
- ✚ Parabolique lorsque $e=1$
- ✚ Hyperbolique lorsque $e > 1$

Les comètes dont l'excentricité vaut 1 ou est supérieure à 1 ne sont pas périodiques, et sortent du Système Solaire après leur passage au périhélie.

Deux paramètres permettent également de situer la comète, le périhélie qui correspond au point de la trajectoire le plus proche du Soleil, et l'aphélie le point le plus éloigné du Soleil (**Figure 1.4**).

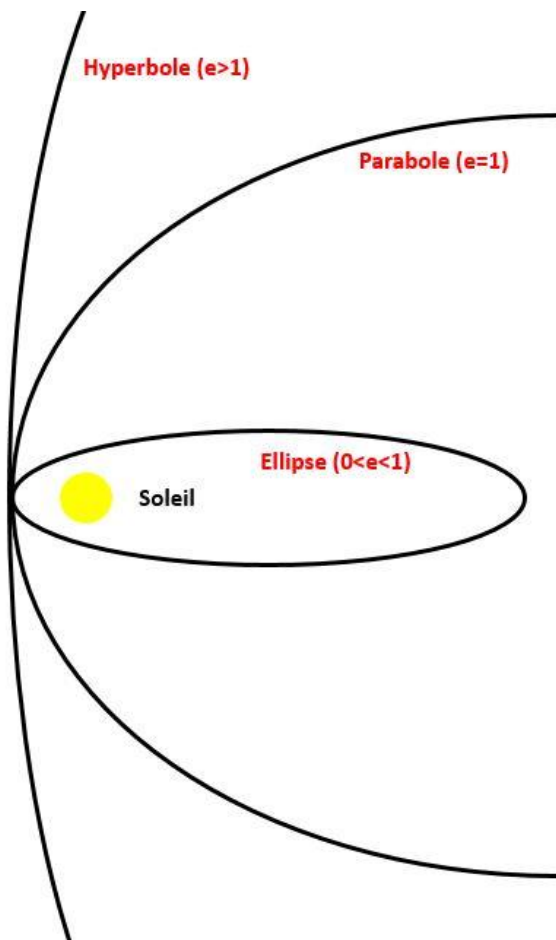


Figure 1.5: Illustration des différentes formes d'une orbite cométaire.

1.2.4. Réservoirs cométaires

Les comètes sont stockées principalement dans deux zones aux confins du Système Solaire (Dones et al., 2015) (**Figure 1.6**): la région Trans-Neptunienne, le nuage d'Oort. Certaines comètes sont aussi en orbite au sein de la ceinture principale d'astéroïdes.

Il est possible de déduire le réservoir dont provient une comète en calculant le paramètre de Tisserand (T_J) (Levison, 1996) (Gladman et al., 2008). Celui-ci définit l'influence de Jupiter sur l'orbite de la comète étudiée (Horner et al., 2003). Il est caractérisé par la relation suivante :

$$T_J = \frac{a_J}{a} + 2\cos(i) \sqrt{\frac{a}{a_J}(1 - e^2)}$$

Avec a le demi-axe de l'orbite de la comète et a_J le demi grand axe de Jupiter (celui-ci vaut 5,2 UA), c'est-à-dire la moitié du plus grand diamètre de l'ellipse représentant sa trajectoire. e et i représentent respectivement l'excentricité et l'inclinaison de la comète.

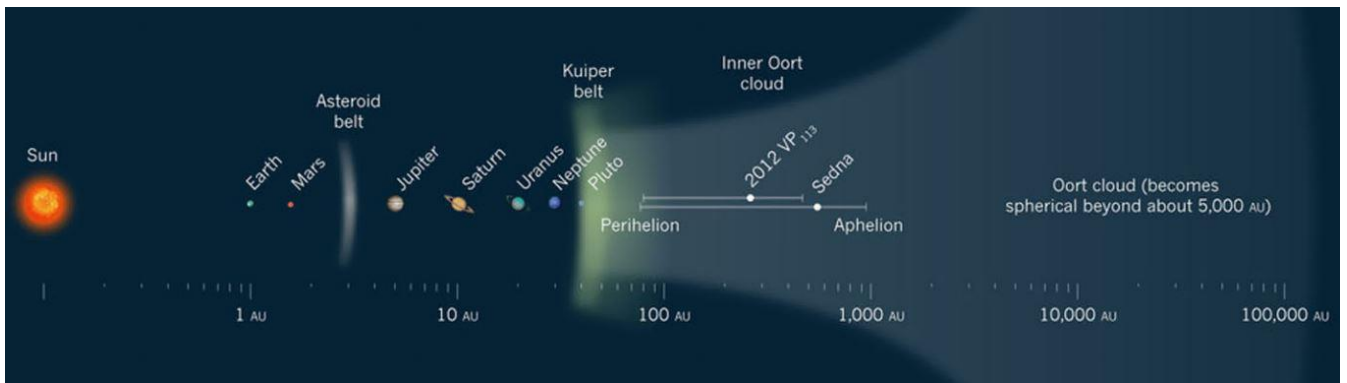


Figure 1.6 : Représentation des principaux réservoirs cométaires. Crédits : Dones et al. (2015).

✚ $2 < T_J < 3$: La région Trans-Neptunienne

La région Trans-Neptunienne se trouve au-delà de l'orbite de Neptune. Ce réservoir s'étend à une distance entre 30 et 100 unités astronomiques (UA) du Soleil. Elle comprend en réalité la ceinture de Kuiper, entre 30 et 55 UA, et le disque épars (Morbidelli, 2008). Bien que la ceinture de Kuiper présente des similarités avec la ceinture d'astéroïdes, sa masse est environ 20 à 200 fois plus importante, soit autour de 10^{23} kg, c'est-à-dire 0.1 fois la masse de la Terre (Jewitt, 1996). En plus des planètes naines, telles que Pluton et Eris, elle abrite une centaine de milliers de petits corps glacés de plus de 100 kilomètres, et plusieurs milliards de comètes (Dones et al., 2015; Jewitt et al., 1998). Ces objets se situent essentiellement dans le plan de l'écliptique ($\pm 10^\circ$ pour la ceinture de Kuiper).

✚ $-2 < T_J < 2$: Le nuage d'Oort

Le nuage d'Oort est une zone encore plus lointaine qui se situe à l'extrême limite du Système Solaire. Il s'étend entre 30 000 et 100 000 UA, et sa masse vaut 1 à 50 fois la masse de la Terre (Stern, 2003). Contrairement à la ceinture de Kuiper, il n'est pas possible de faire des observations directes des petits corps dans cette zone, mais son existence a été prédite à partir de l'orbite de comète à longue période. Le nuage d'Oort héberge des centaines de milliards de petits corps glacés (Kaib and Quinn, 2009). En revanche, il est peu probable que les comètes se soient formées à une telle distance, la matière y est trop éparse pour qu'elle puisse se condenser. Elles seraient nées dans la ceinture de Kuiper avant de se faire éjecter par les géantes gazeuses lors de la formation du Système Solaire (Fernández, 1997). Le nuage d'Oort a la forme d'une sphère qui entoure le Système Solaire.

✚ $T_J > 3$: La ceinture principale d'astéroïdes

Située entre l'orbite de Mars et de Jupiter, la ceinture principale d'astéroïdes est le réservoir de plusieurs centaines de milliers d'objets allant de particules de poussières jusqu'à des planétoïdes de quelques centaines de kilomètres. La masse de la ceinture d'astéroïde vaut environ 10^{21} kg. Depuis quelques années, des observations ont montré que certains objets considérés comme des astéroïdes présentent des caractéristiques typiques de comètes car on observe autour de leur noyau une

chevelure de gaz (ou coma) et des queues (Hsieh and Jewitt, 2006). Le nom « d'astéroïdes actifs » a été proposé (Jewitt, 2012). C'est, par exemple, le cas de la comète 288P (première comète binaire connue des scientifiques), qui initialement été cataloguée comme l'astéroïde 2006 VW139 découvert en 2006, et définit comme une comète en 2016 à partir des images capturées par le télescope spatial Hubble (Agarwal et al., 2017). Le rapport comètes/« astéroïdes actifs » s'élèverait à 140 (Hsieh et al., 2015). Ces « astéroïdes actifs » mettent en évidence un possible continuum entre les astéroïdes et les comètes.

1.2.5. Différentes familles de comètes

Tous ces paramètres permettent de regrouper les comètes dans des familles bien distinctes. Dans un premier temps, il est possible de différencier les comètes qui reviennent au moins une fois au voisinage du Soleil des comètes à apparition unique.

Les comètes observables plus d'une fois, c'est-à-dire les comètes périodiques, ont des orbites elliptiques ($0 < e < 1$). Parmi celles-ci, on y retrouve les comètes à courte période (soit $P < 200$ ans), dans lesquelles deux types de familles principales sont notables : les comètes de la famille de Jupiter, et les comètes du type de Halley.

La famille de Jupiter regroupe les comètes qui possèdent des périodes inférieures à 20 ans. Leur trajectoire semble être influencée par Jupiter. Ces comètes suivent des orbites peu inclinées par rapport au plan de l'écliptique ($i < 30^\circ$), et ne s'éloignent pas plus loin que 7 UA du Soleil.

Les comètes de type Halley décrivent des périodes entre 20 et 200 ans. Leur orbite est plus inclinée, elles peuvent provenir de n'importe quel point de l'espace et leur aphélie se trouve en général au-delà de Neptune. Ainsi, le réservoir de ces comètes serait le Nuage d'Oort. Le nom de cette famille a été donné à partir de la célèbre comète Halley qui orbite autour du Soleil en environ 76 ans.

D'autres familles de comètes sont répertoriées parmi les comètes à courte période, elles sont classées selon leur paramètre de Tisserand et leur demi-grand axe :

- ✚ Comètes de type Encke, $T_J > 3$ et $a < a_J$, cela implique que leur orbite se trouve à l'intérieur de Jupiter
- ✚ Comètes de la ceinture principale (ou encore « Main Belt Comets »), $T_J > 3$ et $2 < a < 3,2$, famille dans laquelle on retrouve des astéroïdes qui présentent une activité cométaire.
- ✚ Comètes de types Chiron (ou Centaure), $T_J > 3$ et $a_J < a$

Dans la famille des comètes périodiques sont également répertoriées les comètes à plus longue période (soit $P > 200$ ans). Leur orbite est très excentrique, et elles possèdent un demi-grand axe supérieur à 34,2 UA ainsi qu'une excentricité proche de 1 ($0,9 < e < 1$). De la même manière que pour la comète de Halley, elles peuvent provenir de n'importe quel point de l'espace, et leur source correspond au Nuage d'Oort.

Les autres comètes font parties des comètes à apparition unique. Elles présentent des orbites paraboliques ($e=1$) ou hyperboliques ($e > 1$). C'est le cas des comètes interstellaires, celles-ci ne sont pas gravitationnellement liées à une étoile, et ne peuvent être détectées que si elles traversent le Système Solaire. A ce jour, uniquement deux objets interstellaires ont été observés, le deuxième étant, la comète 2I/Borisov découverte en Août 2019. Cette comète a fait l'objet d'études à partir de mesures obtenues par l'Atacama Large Millimeter/Submillimeter Array (ALMA) (Cordiner et al., 2020).

1.3. Structure d'une comète

Lorsqu'une comète se rapproche du Soleil, son activité commence et le processus de sublimation des glaces du noyau a lieu. Différentes structures deviennent ainsi observables (**Figure 1.7**) : la chevelure du noyau (ou coma), la queue de poussière et la queue d'ions, et le nuage d'hydrogène.



Figure 1.7: Structure de la comète C/2020 F2 NEOWISE, prise en Juillet 2020 en République-Tchèque. Crédits : Vaclav Paveza.

1.3.1. Noyau

C'est en 1986, lors de la mission spatiale européenne Giotto à destination de la comète 1P/Halley, que le premier noyau cométaire fût photographié. En effet, les noyaux cométaires sont trop petits pour être observés directement depuis la Terre, ils sont aussi entourés par la chevelure de gaz et de poussières qu'il faut pénétrer pour distinguer nettement le noyau. La taille des noyaux peut varier d'une centaine de mètres à plusieurs kilomètres. Ces objets sont un agglomérat de glaces et de poussières. Leur forme irrégulière est particulièrement bien illustrée par la photographie de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko sur la **Figure 1.8**, elle est due à leur petite taille qui fait que ces objets ne se sont pas différenciés suite à leur formation.

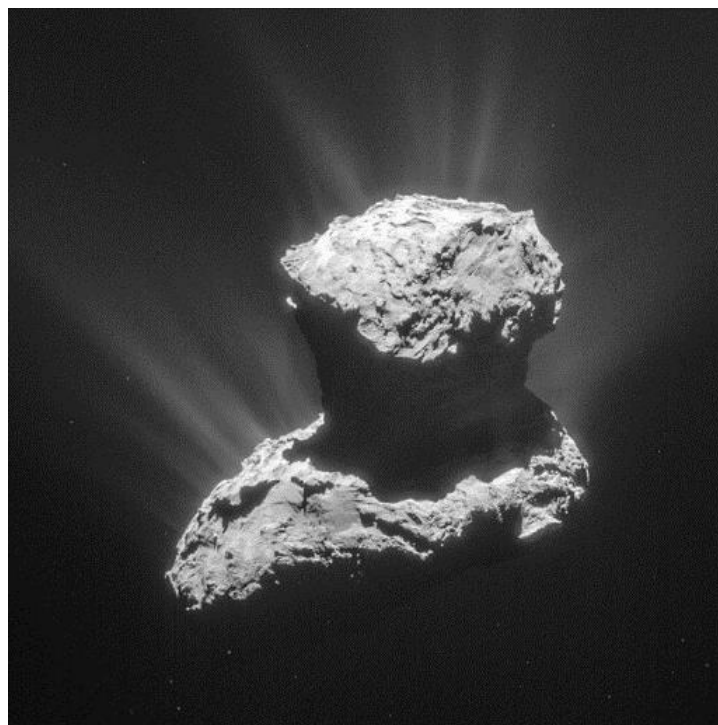


Figure 1.8: Vue de la comète 67P/Churyumov-Gersaimenko par la sonde ROSETTA, sonde de l'agence spatiale européenne (ESA). Crédits : ESA/Rosetta/NavCam – CC BY-SA IGO 3.0.

Différents paramètres permettent de caractériser les noyaux cométaires. L'albédo d'un corps correspond à la capacité de celui-ci à réfléchir la lumière d'une source lumineuse, lorsque le corps est parfaitement noir, son albédo est nul, au contraire lorsque l'objet est parfaitement réfléchissant, son albédo vaut 1. Ainsi, l'albédo d'une comète est comprise entre 0,05 et à 0,15 (Kamoun et al., 2014) (Lamy et al., 2015), ces valeurs sont faibles comparées à d'autres objets du système solaire tel que le satellite glacé Encelade pour lequel l'albédo vaut 0,81 (Ostro et al., 2006). En revanche, elles sont légèrement plus élevées comparé à l'albédo des astéroïdes Bennu qui vaut entre 0,03 et 0,06 (Lauretta et al., 2019) et Ryugu dont l'albedo est compris entre 0,04 et 0,05 (Müller et al., 2017). Lamy et al. (2015) ont démontré que la porosité et la masse volumique de sub-surface sont également des

paramètres qui peuvent varier d'un noyau cométaire à l'autre : respectivement entre 35 à 75% pour l'un et entre 500 et 2000 kg.m⁻³ pour l'autre. Ces paramètres permettent de mettre en évidence les contrastes qui existent au sein de différents noyaux cométaires.

Comme évoqué précédemment, en 1950, l'américain Fred Whipple a marqué le début de l'ère moderne de l'étude des comètes avec son modèle de « boule de neige sale ». Grâce à l'observation de la comète Encke, il émit l'hypothèse que celle-ci était composée d'un agglomérat de glaces et de poussières (Whipple, 1950). Plus tard, synthétisant les connaissances accumulées depuis Whipple, et notamment lors des missions spatiales à destination de la comètes de Halley, Greenberg (1998) proposa que le noyau cométaire serait constitué d'un mélange de 42% de glaces d'éléments volatils (principalement de la glace d'eau), 26% de silicates, 23% de composés organiques, et 9% de particules carbonées. De récentes missions spatiales ont permis de développer les connaissances dans la caractérisation de la composition cométaire. Celle-ci sera davantage discutée dans la section 2.2.

1.3.2. Coma

Lorsqu'une comète se rapproche du Soleil, sa température de surface augmente ce qui implique la sublimation des glaces du noyau entraînant la formation d'une atmosphère de gaz et de particules de poussières, également appelé chevelure ou coma. Celle-ci peut atteindre un rayon allant de 10 000 à 100 000 kilomètres selon la taille et l'activité de la comète. Les glaces sont composées, en majorité, d'eau, de monoxyde de carbone et de dioxyde de carbone (Bockelée-Morvan, 2011; Mumma and Charnley, 2011). La production d'eau au périhélie varie le plus souvent entre 10²⁶ et 10³¹ molécules éjectées du noyau par seconde. La coma est également constituée de particules de poussières qui sont, elles aussi, éjectées du noyau lorsque les glaces subliment. Des simulations numériques et expérimentales menées par (Levasseur-Regourd et al., 2008), et les observations lors de la mission Rosetta ont montré que ces poussières sont composées de particules compactes et d'agrégats floconneux (Bentley et al., 2016; Langevin et al., 2016; Levasseur-Regourd et al., 2018).

Les molécules provenant directement du noyau sont nommées des molécules mères ou composés parents. Lorsqu'elles sont éjectées du noyau, elles peuvent être impliquées dans des réactions chimiques, et sont soumises à la photodissociation ou encore à la photoionisation par les UV solaires donnant ainsi naissance à des molécules filles, des atomes, des ions ou des radicaux. Certaines de ces molécules présentes en phase gazeuse ne seraient pas émises uniquement à partir de la sublimation des glaces du noyau, et proviendraient d'une source distribuée. Ce phénomène sera détaillé dans les prochains chapitres.

1.3.3. La queue d'ions, la queue de poussières et le nuage d'hydrogène

La queue de poussière et la queue d'ions apparaissent à une grande distance au noyau.

La queue de poussières peut s'étendre sur plus de 10 millions de kilomètres, elle est de couleur blanche, et de forme courbée avec une direction opposée au Soleil. C'est souvent la queue la plus

brillante, et de ce fait elle peut être visible à l'œil nu depuis la Terre. Elle doit cette particularité aux particules de poussières, éjectées du noyau, qui la compose et qui diffusent la lumière solaire.

La queue d'ions peut atteindre une taille dépassant 100 millions de kilomètres. Celle-ci est de couleur bleutée et présente une forme rectiligne avec une direction approximativement opposée au Soleil suite à l'interaction avec le vent solaire (environ 400 km/s). Elle est composée de molécules ionisées par l'action des rayonnements UV solaires, et elle doit sa luminosité à la désexcitation des ions moléculaires. Sa couleur bleutée est issue de l'ion CO^+ .

Le nuage d'hydrogène est en grande partie dû à la dissociation des molécules d'eau présentes de manière abondante dans la coma. Ce nuage forme une enveloppe ténue d'atomes d'hydrogène et peut atteindre 100 millions de kilomètres.

1.4. Intérêt des études cométaires

1.4.1. La formation des comètes

La nature d'une comète est assez bien décrite par le modèle de « boule de neige sale » proposé par Fred Whipple. Mais au-delà de cette description il est intéressant de comprendre comment ces petits corps se sont formés.

Avant la formation du système solaire, la matière qui l'a finalement constitué était dispersée dans un environnement froid (10 à 20 K) et relativement dense, qui formait un nuage moléculaire dont la composition était dominée par des atomes d'hydrogène et d'hélium. Lorsque ce type de nuage rencontre une onde de choc suffisamment intense, telle que celle causée par une supernova qui explose à proximité, c'est le début d'une longue mécanique cosmique. D'abord la densité dans le nuage va augmenter puis enclencher sa contraction sous l'action de sa propre gravité. Au centre de cette structure naît la protoétoile, autour de laquelle une partie du nuage va s'aplatir, et former un disque d'accrétion protoplanétaire. Ce sont les réactions de fusion des atomes d'hydrogène, rendues possibles par l'augmentation de la température au centre de la protoétoile, qui vont mettre un terme à l'effondrement gravitationnel de cette dernière et donner naissance au Soleil. Autour de ce dernier, la matière va s'agglomérer pour former des corps kilométriques appelés planétésimaux. Ils vont s'accréter les uns aux autres et aboutir à la formation des planètes. Mais certains planétésimaux n'ont pas participé à la formation des planètes du système solaire et restent au stade de petit corps c'est le cas des comètes.

Lorsqu'un objet céleste devient suffisamment massif, il subit un processus de différenciation. Celui-ci résulte du réchauffement interne de l'objet qui va provoquer une réorganisation des éléments chimiques qui se trouvent au sein même du corps : les matériaux les plus denses vont s'enfoncer vers le centre alors que les plus légers vont migrer à la surface. Les planètes, les planètes naines, les plus gros satellites et les plus gros astéroïdes sont des corps différenciés. Ce n'est pas le cas pour les comètes qui ont échappé à ce phénomène du fait de leur petite taille (quelques kilomètres). De plus,

leur particularité réside dans le fait qu'elles ont été formées, et qu'elles ont passé la majorité de leur temps, dans les régions externes, et donc plus froides, du disque protoplanétaire (Willacy et al., 2015). Elles auraient ainsi gardé leur composition d'origine depuis leur formation, et pourraient présenter une composition similaire aux grains des poussières interstellaires présents initialement dans la nébuleuse solaire primitive (Bockelée-Morvan et al., 2000; Ehrenfreund et al., 2004; Greenberg, 1998). Cependant, les comètes pourraient avoir des histoires et donc des compositions différentes suivant leur lieu de formation dans le système solaire.

1.4.2. Intérêt planétologique et exobiologique

Comme il a déjà été souligné précédemment les comètes sont parmi les corps les plus primitifs de notre Système Solaire. Du fait de leur petite taille, elles n'ont pas subi de processus de différenciation. De plus, leur localisation dans les régions les plus éloignées du Soleil et donc les plus froides impliquent qu'elles n'ont pas été soumises, ou peu, à des altérations thermiques. Décrites comme des « capsules temporelles », elles revêtent un grand intérêt planétologique puisqu'elles ont été gardées intactes. Leur étude permet de remonter à la composition moléculaire et minéralogique de la nébuleuse protosolaire et apporte donc des informations sur les processus physico-chimiques à l'œuvre lors de la formation du système solaire (Caselli and Ceccarelli, 2012).

D'autre part, les comètes présentent également un grand intérêt exobiologique. Elles sont les réservoirs de grande quantité de glace d'eau et de matière organique (Cottin et al., 2017) (Oró, 1961). 600 millions d'années après la formation du Système Solaire, les planètes telluriques ont subi des bombardements de corps célestes qui ont été formés à des distances suffisamment éloignés pour que la glace soit stable. Ces objets correspondraient à des astéroïdes et à des comètes. Ainsi, les comètes auraient pu apporter une grande partie des océans terrestres, le rapport deutérium sur hydrogène (D/H) représente un bon traceur à la source des océans et sera discuté dans la partie 2.2.3 de ce chapitre. Mais l'apparition de la vie sur Terre ne peut pas s'expliquer à partir de ce seul ingrédient, une chimie organique complexe est indispensable. Lors des bombardements sur la Terre primitive, les comètes auraient pu avoir été la source d'une grande variété de matière organique extraterrestre (Chyba and Sagan, 1992) (Anders, 1989). Cet apport aurait favorisé les processus de formation et d'évolution de la vie sur Terre (Cottin et al., 2017; Despois and Cottin, 2005; Oró, 1961).

2. Outils d'étude de la composition des comètes

2.1. Moyens d'étude

Il est possible d'étudier les comètes par différentes approches complémentaires : les observations à distance, les missions spatiales d'analyses *in situ*, les retours d'échantillons, et l'étude d'analogues synthétisés en laboratoire.

2.1.1. Observation à distance

Les observations à distance représentent l'ensemble des techniques permettant d'étudier les corps célestes depuis la Terre ou avec des satellites en orbite terrestre ou solaire. En effet, lorsqu'une comète se rapproche du Soleil, il devient possible d'obtenir des informations sur la composition de la phase gazeuse et des particules solides qui la compose. Cela grâce à des observations en infrarouge, visible, ultraviolet et radio.

2.1.1.1. Observation de la phase gazeuse

Analyser la phase gazeuse renseigne indirectement sur la composition des glaces du noyau, qui elle, ne peut pas être mesurée depuis la Terre car le noyau est dissimulé par la coma. Différentes comètes ont pu être sondées depuis la Terre jusqu'à aujourd'hui rendant possible la détection de nombreuses molécules dans la coma (Cochran et al., 2015) (**Figure 1.10**). La majorité des composés gazeux présents, que ce soient des molécules, des ions ou encore des radicaux sont excités par le flux solaire et par les collisions au sein de la coma. Cela va impliquer une fluorescence, les rendant donc observables dans les domaines infrarouge, visible et ultraviolet (Bockelée-Morvan et al., 2004). Certains composés émettent spontanément puisqu'ils se retrouvent à l'état excité du fait de la photodissociation d'une molécule mère. En radio on observe l'émission spontanée ou stimulée des molécules excitées par collision. De manière plus précise :

- ✚ Dans le domaine radio, on observe les transitions rotationnelles, et il est possible de détecter les molécules qui présentent un moment dipolaire permanent non nul (HCN, CO, CH₃OH, H₂CO, ...).
- ✚ Dans le domaine infrarouge, on observe les transitions vibrationnelles, pour lesquelles il est possible de détecter, en plus, des molécules symétriques avec un moment permanent dipolaire nul (CO₂, CH₄, CH₂H₂ ...).
- ✚ Dans le domaine ultraviolet, et visible, on observe les transitions électroniques, pour lesquelles il est possible de détecter plus particulièrement les composés produits par la photodissociation ou ionisation d'une molécule mère (OH, CN, CO⁺, ...).

Les profils de raies observées dans le domaine radio sont généralement bien résolus, et il est possible de remonter à la vitesse des gaz autour du noyau grâce à la largeur à mi-hauteur de ces raies (Biver et al., 2002). Le radical OH est le premier composé à avoir été observé depuis la Terre, celui-ci a été mesuré dans la comète C/1973 E1 (Kohoutek) grâce au radiotélescope de Nançay (Biraud et al., 1974). A ce jour, une trentaine de molécules ont été détectées depuis la Terre, la liste sera donnée dans la partie 2.2.2 de ce chapitre.

Les observations des molécules organiques spécifiques sont difficiles du fait des problèmes de superposition à basse résolution spectrale des raies des molécules et à cause de la signature spectrale des minéraux. Une bande d'émission de la composante organique est cependant mesurée, dans de

nombreuses comètes, autour de 3,4 micromètres. Cette bande correspond aux vibrations d'élongations de la liaison C-H des molécules organiques

2.1.1.2. La coma de poussières

Il est également possible d'étudier les particules solides présentes dans la coma dans pratiquement tout le spectre électromagnétique. Les particules microniques et submicroniques sont observables dans le domaine visible et ultraviolet en diffusant le flux solaire, elles émettent aussi dans l'infrarouge thermique (Grün et al., 2001). Les particules de tailles millimétriques et centimétriques sont détectées dans le domaine submillimétrique (Jewitt and Matthews, 1997).

Les méthodes d'observation dans le domaine de l'infrarouge ont mis en évidence, entre autres dans la comète de Hale-Bopp, la composition minérale des particules solides. Celles-ci étaient principalement constituées de silicates sous forme amorphe et cristalline (Crovisier et al., 1997). Ces observations ont permis d'émettre des hypothèses sur les processus à l'œuvre pour leur formation. Les silicates amorphes sont formés dans les régions froides ou encore ils peuvent être les produits de l'irradiation de silicates cristallins (Borg et al., 1980) qui ont plutôt besoin de températures très élevées pour cristalliser (plus de 800 K). Un modèle a été proposé en 2002 (Bockelée–Morvan et al., 2002) dans lequel les grains cristallins seraient transportés de la région interne et chaude vers les régions externes et plus froide (zone de formation des comètes) suite à des turbulences au sein du disque protoplanétaire.

2.1.2. Missions spatiales

Depuis 1986, sept comètes ont été survolées par des sondes spatiales qui ont pu y effectuer des analyses *in situ* (**Tableau 1.1**). Ces missions se sont avérées être un tournant important dans l'histoire de la science cométaire puisqu'elles ont permis de récolter une quantité d'informations considérable. Les premières images de noyaux cométaires datent des survols de la comète 1P/Halley en 1986 et de nombreuses mesures impossibles à obtenir depuis la Terre peuvent être collectées à ces occasions. Ainsi, au total sept comètes ont été visitées par des sondes : 1P/Halley, 26P/Grigg-Skjellerup, 19P/Borrelly, 81P/Wild 2, 9P/Tempel 1, 103P/Hartley 2, et 67P/Churyumov-Gerasimenko. Le cas de la comète 81P/Wild 2 est particulier car il s'agit d'un retour d'échantillon, elle sera traitée dans la partie 2.1.3.

Comètes	Missions spatiales	Date de lancement	Date de survol	Agence spatiale
1P/Halley	Vega 1	15/12/1984	06/03/1986	IKI
	Vega 2	21/12/1984	09/03/1986	IKI
	Giotto	02/07/1985	14/03/1986	ESA
26P/Grigg-Skjellerup	Giotto	02/07/1985	10/07/1992	ESA
19P/Borrelly	Deep Space 1	24/10/1998	22/09/2001	NASA
9P/Tempel 1	Deep Impact	12/01/2005	04/07/2005	NASA
	Stardust NeXT	07/02/1999	14/02/2011	NASA
103P/Hartley 2	EPOXI	12/01/2005	04/11/2010	NASA
67P/Churyumov-Gerasimenko	Rosetta	02/03/2004	2014/2016	ESA
81P/Wild 2	Stardust	07/02/1999	02/01/2004	NASA

Tableau 1.1: Récapitulatif des différentes missions spatiales.

2.1.2.1. Mission Giotto vers la comète 1P/Halley

La comète Halley (**Figure 1.9**), qui tient son nom de l'astronome qui a reconnu son caractère périodique, Edmond Halley, est la première comète dont la période a été déterminée avec précision, soit une période de 76 ans. Son dernier passage dans le système solaire interne date de 1986, et elle sera de nouveau attendue en 2061. Cette comète est également la première à avoir été étudiée *in situ* par 6 missions spatiales dont les missions Giotto (Europe), Sakigake et Suisei (Japon), Vega 1 et Vega 2 (URSS). Les dimensions du noyau valent $15,8 \times 7,4 \times 7,4 \text{ km} \pm 0,25 \text{ km}$ et son albedo est égal à $0,04_{-0,01}^{+0,02}$ (Thomas, 2009).

La sonde Giotto est la toute première mission lointaine de l'Agence Spatiale Européenne (ESA). En réalité, c'est également la première mission à avoir obtenu des images d'un noyau cométaire à une faible distance, la première à avoir croisé deux comètes, la seconde comète étant la comète 26P/Grigg-Skjellerup, et à avoir identifié de la matière organique dans un noyau cométaire (Kissel et al., 1986). C'est enfin c'est la première sonde interplanétaire qui a été remise en fonction après une période de sommeil.

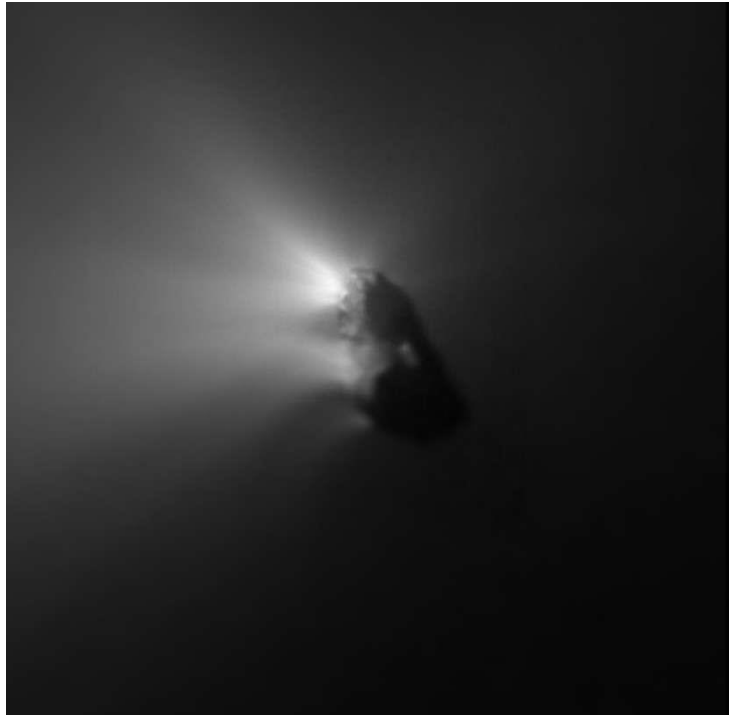


Figure 1.9: Photographie du noyau de la comète de Halley par la sonde Giotto, en mars 1986. Crédit : ESA/MPIfA.

Conçue en 1981 par l'ESA, la sonde Giotto a été lancée, en Juillet 1985, par une fusée Ariane. C'est en mars 1986 qu'elle atteint sa destination, Halley, avec une vitesse relative de 68 kilomètres par secondes. Durant le survol de la comète 1P/Halley, Giotto s'approchera jusqu'à une distance du noyau de 596 kilomètres. Les objectifs principaux de cette mission ont été les suivants :

- ✚ Obtenir des images et informations du noyau cométaire.
- ✚ Etudier la composition des particules de poussières.
- ✚ Identifier les composés présents dans la phase gazeuse au sein de la coma, ainsi que les processus physico-chimiques qui s'y développent.
- ✚ Déterminer l'interaction de la comète avec le vent solaire.

En effet, 10 expériences ont été embarquées à bord de la sonde Giotto, et peuvent être réparties en quatre catégories d'études : l'imagerie, la spectroscopie de masse, les expériences sur les poussières et enfin les expériences sur le plasma. Parmi les spectromètres de masse, l'un était consacré à l'étude de la composition chimique des particules de poussière qui sont éjectées du noyau (Particulate Impact Analyser, PIA), et l'autre à l'identification des gaz présents dans la chevelure de la comète (Neutral Mass Spectrometer, NMS).

Les sondes Vega 1 et Vega 2 ont également obtenu des images du noyau cométaire, ainsi que des résultats sur la caractérisation de la composition de la comète, en effet, comme nous le verrons plus tard, les spectromètres de masse à bord des sondes Giotto et Vega ont révélés la présence de matière organique en abondance.

2.1.2.2. Mission Giotto vers 26P/Grigg-Skjellerup

En 1808, cette comète a été découverte par l'astronome français Jean-Louis Pons. Elle fût redécouverte par la suite en 1902 l'astronome néo-zélandais John Grigg, puis en 1922 par l'astronome australien John Francis Skjellerup. Ainsi, les noms de ses deux derniers découvreurs lui ont été attribués.

À la suite de l'étude de la comète 1P/Halley, la sonde Giotto a été placée en hibernation. Elle a été réveillée en 1990, et a visité, en 1992, sa deuxième comète : 26P/Grigg-Skjellerup. Giotto l'a survolé à une distance de 200 kilomètres, soit encore plus proche que la comète 1P/Halley, avec une vitesse d'environ 14 kilomètres par secondes. Cependant, aucune image n'a pu être obtenue suite à un endommagement de l'objectif de la caméra de sonde suite à l'impact de particules de poussières lors de la rencontre de Giotto avec la comète 1P/Halley quelques années plus tôt.

2.1.2.3. Mission Deep Space 1 vers la comète 19P/Borrelly

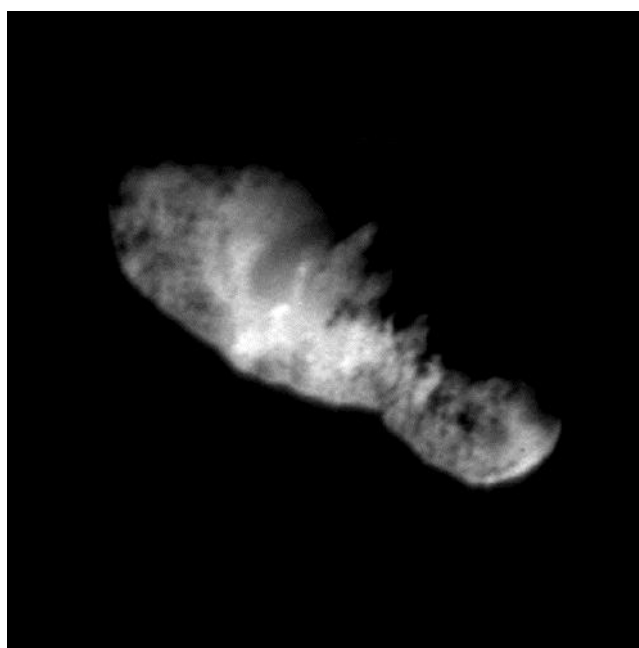


Figure 1.10: Photographie du noyau de la comète Borrelly par la sonde Deep Space 1, en Septembre 2001. Crédits : NASA/JPL.

Découverte en 1904 par l'astronome français Alphonse Louis Nicolas Borrelly, cette comète (**Figure 1.10**) a été survolée par la sonde spatiale américaine Deep Space 1. Les dimensions du noyau valent $8,0 \times 3,2 \times 3,2 \text{ km} \pm 0,1 \text{ km}$ et l'albédo est égal à 0,072 (Thomas, 2009).

Deep Space 1 est une mission de l'agence spatiale américaine (NASA). Lancée en Octobre 1998, son objectif premier a été de tester un nouveau type de propulsion principale. En effet, c'est la première sonde à avoir été conçue avec un moteur ionique. Cette expérience a montré que ce type de propulsion fonctionne pour une mission interplanétaire de longue durée, et ce, sans endommager le fonctionnement des instruments à bord. La mission ne s'arrête pas là, la sonde a également eu pour objectif secondaire de collecter des mesures relatives à plusieurs petits corps du système solaire. Elle a eu comme premier d'objet d'étude l'astéroïde Braille (9969) qu'elle survola en 1999 à une distance de 27 km. Suite à un prolongement de la mission de deux ans par la NASA, la sonde est partie à la rencontre de la comète 19P/Borrelly en 2001 et a atteint une distance au noyau d'environ 2171 kilomètres. Cette distance au noyau, qui peut sembler importante, avait été murement réfléchi par les opérateurs de la mission, puisqu'elle n'avait pas été conçue pour résister aux impacts des particules de poussière éjectées par le noyau cométaire, ainsi, si elle avait été plus proche, la sonde aurait risqué des dommages importants. Cette comète présente une périodicité de 6,9 ans. Deep Space 1 est donc la deuxième mission à avoir photographié un noyau cométaire de près, 13 ans après celui de 1P/Halley. Grâce à sa caméra haute résolution (47 à 58 mètres par pixels), MICAS, 97 images du noyau cométaire ont été obtenues dans le domaine du visible et de l'infrarouge (Soderblom et al., 2002). Les photos ont révélé de nombreuses irrégularités à la surface du noyau qui peuvent être le résultat de processus de sublimation des glaces. Les analyses en infrarouges ont montré une absence de trace de glace d'eau, et de minéraux hydratés en surface (Soderblom et al., 2002). Les données spectrales ont également permis de déterminer des températures en surface allant de 300 à 345 kelvin, soit une surface relativement chaude (Soderblom et al., 2002). Cette mission s'acheva en Décembre 2001.

2.1.2.4. Missions Deep Impact et Stardust-NeXT vers la comète 9P/Tempel 1



Figure 1.11: Photographie du noyau de la comète Tempel 1 par la sonde Deep Impact, en Juillet 2005. Crédits : NASA/JPL-Caltech/UMD.

En 1967, l'astronome allemand Ernst Wilhelm Tempel découvre la comète 9P/Tempel 1 (**Figure 1.11**), qui sera la première à être survolée par deux sondes spatiales au cours de deux orbites successives.

Deep Impact (NASA), croisa l'orbite de la comète en 2005. Son objectif principal a été d'étudier la composition interne de la comète à l'aide d'un impacteur de 372 kilogrammes. Celui-ci forma un cratère d'impact en arrivant sur la surface cométaire avec une vitesse relative de 10,3 kilomètres par seconde. Ayant à son bord pour seul instrument une caméra, des images du noyau ont été obtenues jusqu'à 4 secondes avant son impact. Cependant, cette collision a provoqué la libération d'une grande quantité de particules de poussières et de glace d'eau empêchant les caméras d'apercevoir le cratère formé (A'Hearn et al., 2005).

C'est en 2011, grâce à la mission Stardust NeXT (New Exploration of Tempel) que les premières images du site d'impact sont apparues (**Figure 1.12**). Cette mission avait pour but de photographier le cratère causé par l'impacteur de Deep Impact (Wellnitz et al., 2013) (Schultz et al., 2013), et d'étudier les variations cométaires après le passage de la première sonde 6 ans plus tôt. Celle-ci survola la comète à une distance de 178 kilomètres avec une vitesse de 10,9 kilomètres par secondes. Des études menées par modélisation ont montré que cet impact aurait déclenché l'éjection d'une masse totale de $1,2 \times 10^6$ kilogrammes (Veveřka et al., 2013) (Schultz et al., 2013). Le spectromètre de masse CIDA (Cometary and Interstellar Dust Analyzer), à bord de la sonde Stardust NeXT a également permis l'analyse de la composition chimique des particules impactant les cibles de collecte. La présence de molécules organiques complexes a été mise en évidence (Veveřka et al., 2013).

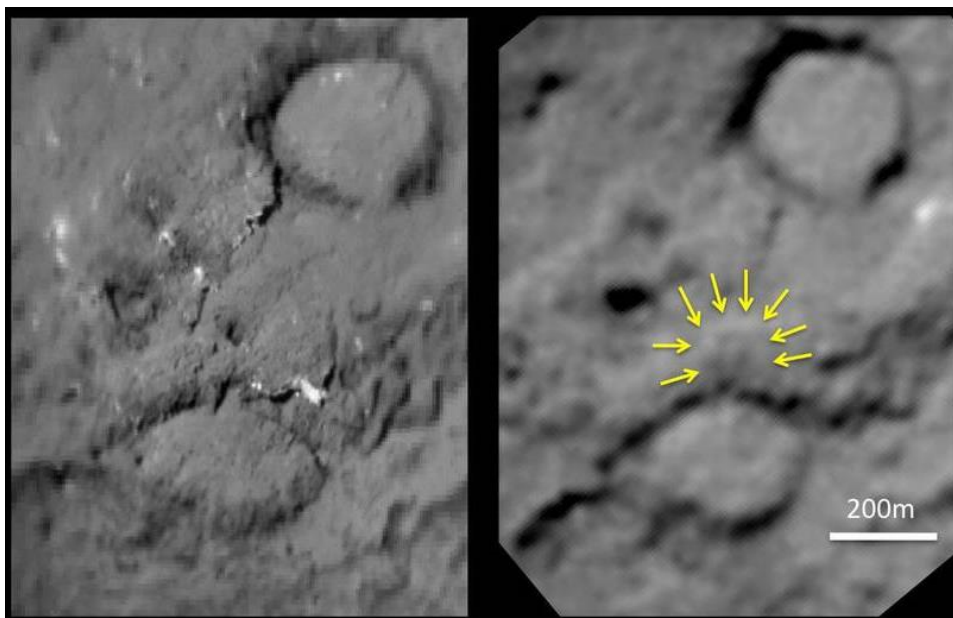


Figure 1.12: Photographie du site d'impact sur comète Tempel 1 par l'impacteur de Deep Impact et par stardust-NexT 6 ans après l'impact. Crédits : NASA/JPL-Caltech/University of Maryland/Cornell

Des analyses avant l'impact en 2005, ont été menées par un spectromètre infrarouge à bord de la sonde Deep Impact. Celles-ci ont permis d'estimer la température de surface cométaire entre 272 ± 7 et 336 ± 7 K sur l'hémisphère ensoleillé (Groussin et al., 2007). De la glace d'eau à la surface du noyau cométaire a également été observée pour la première fois, il a été proposé que les particules de glace d'eau détectée en surface soient d'une taille de 30 ± 20 micromètres (Sunshine et al., 2006).

Les deux sondes ne sont pas les seules à avoir obtenu des informations sur cette comète. En effet, la sonde Rosetta en direction de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko était à une distance de 0,53 UA de la comète 9P/Tempel 1 au moment de l'impact. Ainsi, la caméra OSIRIS présente à son bord, a pu capturer des images avant et après l'impact. Les 40 premières minutes après l'impact sont marquées d'une augmentation de la luminosité cométaire d'un facteur 4,5 (Küppers et al., 2005). Ce phénomène peut être expliqué par la fragmentation de particules de poussières en plus petits fragments due à la sublimation de la glace d'eau qui aurait assuré leur cohésion. Ainsi, leur pouvoir de diffusion aurait été plus important après l'impact (Küppers et al., 2005). Des télescopes sur Terre ont également pu suivre l'impact depuis la Terre. C'est notamment le cas du spectrographe imageur MICHELLE sur le télescope Fredrick C. Gillette (Gemini-N) de 8 m à Hawaii. Celui-ci a observé une signature correspondant à la présence de carbone amorphe, de silicates amorphes, et d'olivine cristalline riche en magnésium (Harker et al., 2005).

2.1.2.5. Mission EPOXI vers la comète 103P/Hartley 2



Figure 1.13: Photographie du noyau de la comète Hartley 2 par la sonde EPOXI, en Novembre 2010. Crédits : NASA/JPL-Caltech/UMD.

5 années plus tard, en 2010, la mission EPOXI (Extrasolar Planet Observation and Deep Impact Extended Investigation) survole le noyau de la comète 103P/Hartley 2 (**Figure 1.13**). Cette mission est en fait la prolongation de la trajectoire de la sonde Deep Impact à destination d'un nouveau corps. La

comète a été découverte en 1986 par l'astronome australien Malcolm Hartley. Elle a été suivie pendant trois mois et survolée au plus près à une distance de 700 kilomètres. Les images acquises révèlent deux lobes, un noyau d'une dimension entre 0,69 et 2,33 km, et un albédo de 0,04 (A'Hearn et al., 2011). Une surface hétérogène est observée, une partie rugueuse recouverte de gros blocs (les plus gros mesurant une dizaine de mètres) aux extrémités, et une surface bien plus lisse et sans relief apparent au niveau de la zone centrale (A'Hearn et al., 2011). Des jets de gaz et de poussières sont également été observés, témoignant de l'activité cométaire. Des molécules d'eau (H₂O) et de dioxyde de carbone (CO₂) y ont été détectées. De manière plus précise, des particules de glace soufflées par le gaz carbonique sont émises à partir des zones rugueuses, et la vapeur d'eau s'échappe de la zone lisse, au centre du noyau (A'Hearn et al., 2011).

2.1.2.6. Mission ROSETTA vers la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko

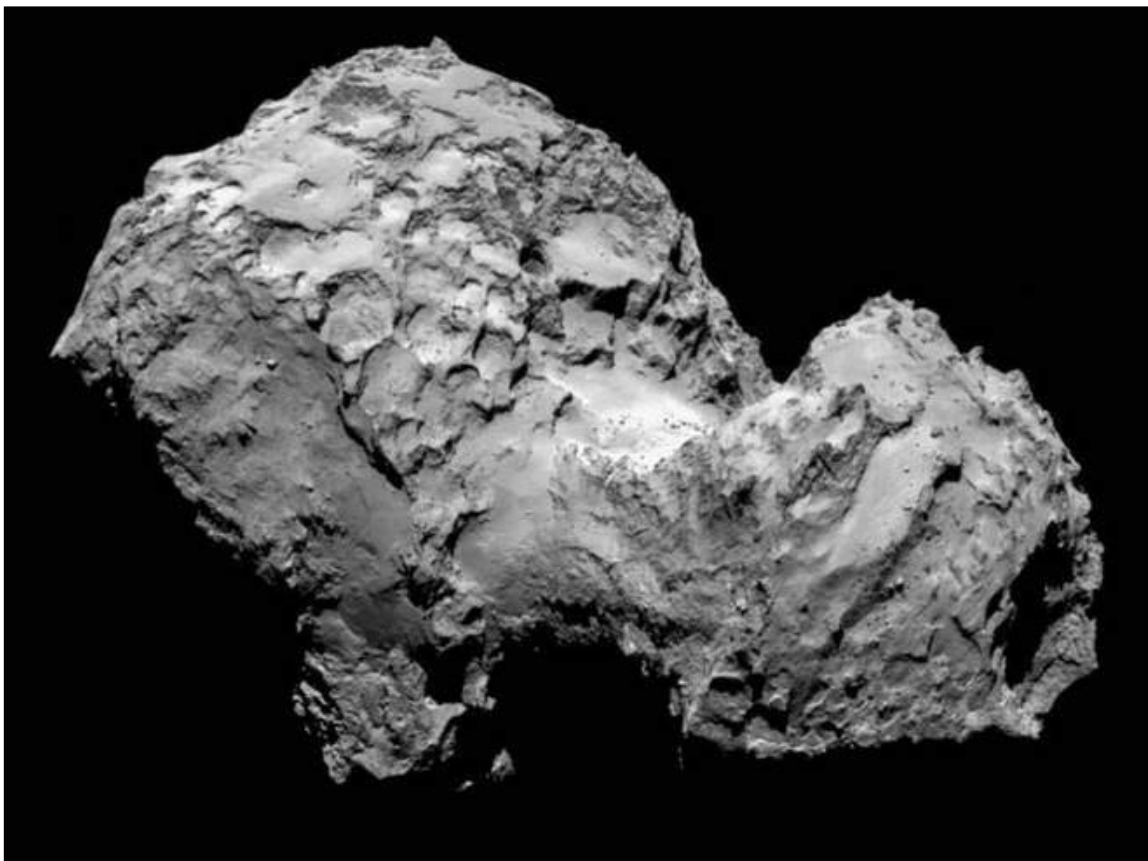


Figure 1.14: Photographie du noyau de la comète Churyumov-Gerasimenko par la sonde Rosetta, en 2014. Crédits : ESA.

La comète 67P/Churyumov-Gerasimenko (**Figure 1.14**), également surnommée « Tchoury » a très récemment été analysée *in situ*. Son noyau est formé de deux lobes, le plus petit ayant une dimension de 2,5 x 2,5 x 2,0 km et le plus grand de 4,1 x 3,2 x 1,3 km (<http://sci.esa.int/rosetta/14615-comet-67p/>). L'albedo de son noyau est égal $0,065 \pm 0,02$ (Fornasier et al., 2015). Elle a été découverte par

les astronomes ukrainiens Klim Ivanovitch Tchourioumov et Svetlana Ivanovna Guérassimenko en 1969. Elle a été la cible de la mission européenne Rosetta. Cette mission a connu une histoire très mouvementée. Imaginée en 1993, cette mission était prévue pour un prélèvement d'échantillons cométaires à ramener sur Terre. Mais ceci paru technologiquement risqué et trop coûteux, l'ESA opta pour un nouvel objectif : « apporter le laboratoire » à la comète. Cette mission tient son nom de la pierre de Rosette, qui permit à Champollion de déchiffrer les hiéroglyphes. C'est la première mission qui a pu analyser une comète pendant une durée de deux ans, et ce lors de son parcours vers le Soleil puis s'en éloignant. C'est également la première mission avec un atterrisseur, Philae, destiné à se poser sur le noyau afin d'y effectuer des analyses de la surface. Les principaux objectifs ont été d'étudier :

- ✚ Les principales caractéristiques du noyau tant sa composition de surface, que sa morphologie et sa dynamique.
- ✚ La composition chimique, isotopique et minéralogiques des éléments présents au sein de la phase et gazeuse et de la phase particulaire.
- ✚ Les interactions entre les éléments volatils et solides du noyau, ainsi que leur caractéristique physique.
- ✚ L'évolution de la dynamique de la comète, et les processus ayant lieu à la surface du noyau et dans la coma.

Cette mission avait pour destination initiale la comète 46P/Wirtanen (Schwehm and Schulz, 1999), mais suite à un échec d'une fusée Ariane 5 en 2002, le lancement a été repoussé d'un an et il a fallu choisir une nouvelle cible. C'est ainsi que la comète 67P fut sélectionnée. Le lancement a eu lieu en 2004, pour une arrivée près de la comète 10 ans plus tard, soit en 2014. La sonde avait à son bord 21 instruments présentés sur le **Tableau 1.2**, afin d'analyser au mieux toutes les composantes de la comète. Sa trajectoire a nécessité plusieurs passages près des planètes telles que la Terre et Mars afin de lui fournir une assistance gravitationnelle. Elle survole au cours de son voyage, deux astéroïdes : Steins (2867) en Septembre 2008 à une distance de 803 kilomètres (Keller et al., 2010), et Lutetia (21) en Juillet 2010 à une distance plus éloignée, soit 3170 kilomètres (Sierks et al., 2011). Les images des astéroïdes prises par la sonde sont représentées sur la **Figure 1.15**.

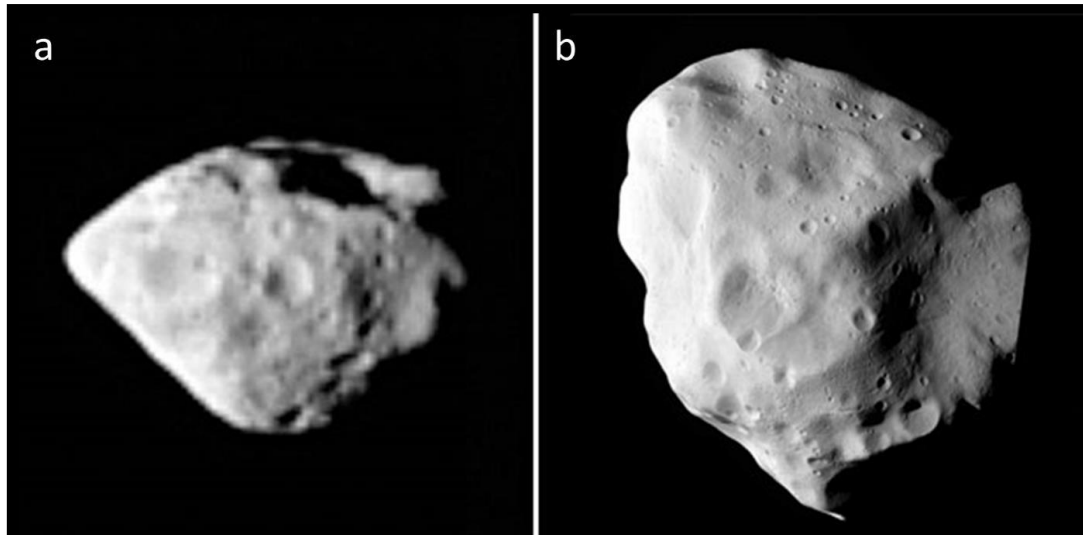


Figure 1.15: Photographies des astéroïdes par la sonde Rosetta : a. l'astéroïde Steins en Septembre 2008 à une distance de 803 km, et b. l'astéroïde Lutetia en Juillet 2010, à une distance de 3170 km. Crédits : ESA.

La sonde entra en hibernation le 8 Juin 2011, pour une durée de 31 mois avant d'être réactivée en en Janvier 2014. Elle effectue alors d'ultimes manœuvres orbitales pour rattraper la comète. Lors de son trajet, à l'aide de la caméra qui se trouve à bord, la sonde fut capable d'étudier avec précision l'approche de la comète et de réaliser sa caractérisation. La **Figure 1.16** montre l'approche de la comète par la sonde. Les premières formes du noyau sont apparues le 14 Juillet 2014, lorsque la sonde se trouvait à une distance de 12 000 kilomètres. C'est le 6 Août que la comète effectua sa dernière manœuvre et se retrouva enfin sur l'orbite tant attendue de la comète et à proximité de cette dernière. Finalement, la sonde descendit à moins de 20 kilomètres du noyau, afin de sélectionner la zone la plus propice à l'atterrissage de Philae. Le 12 Novembre, et après quelques rebonds, Philae envoyait ses premières images de la surface du noyau.

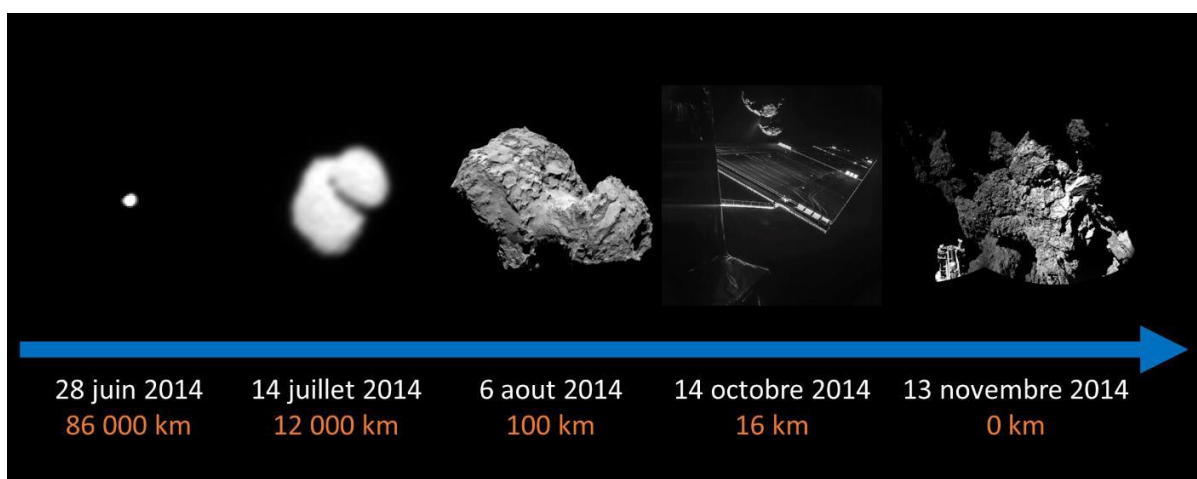



Figure 1.16: Photographies du noyau de la comète Churyumov-Gerasimenko par la sonde Rosetta pour différentes distances. Crédits montage : Anaïs Bardyn (images du 28/06/2014, 14/07/2014 et 06/08/2014 : ESA/Rosetta/MPS for OSIRIS Team MPS/UPD/LAM/IAA/SSO/INTA/UPM/DASP/IDA ; Image du 14/10/2014 : ESA/Rosetta/Philae/CIVA et image du 13/11/2014 : Bibring et al. (2015)

ORBITEUR ROSETTA		
	ALICE Ultraviolet Imaging Spectrometer	Etude de la composition des gaz de la coma et de la queue.
	CONSERT COmet Nucleus Sounding Experiment by Radiowave Transmission	Etude de la structure interne du noyau. Transmission d'ondes radio de Philae.
	COSIMA COmetary Secondary Ion Mass Analyzer	Etude de la structure et de la composition des particules de poussière.
	GIADA Grain Impact Analyzer and Dust Accumulator	Etude du nombre, de la masse, de la vitesse et de la direction des particules de poussière.
	MIDAS Micro-Imaging Dust Analysis System	Etude 3D des particules de poussière.
	MIRO Microwave Instrument for the Rosetta Orbiter	Mesure de la température de surface et étude de l'abondance des gaz.
	OSIRIS Optical, Spectroscopic and Infrared Remote Imaging System	Etude du noyau à partir de deux caméras optiques à haute résolution.
	ROSINA Rosetta Orbiter Spectrometer for Ion and Neutral Analysis	Etude moléculaire et isotopique des gaz nobles, et mesures de la densité, de la vitesse et de la température des gaz.
	RPC Rosetta Plasma Consortium	Etude de l'environnement plasma des électrons et ions autour de la comète.
	RSI Radio Science Investigation	Communication entre la sonde et les stations terrestres : mesure du champ de gravitation.
	VIRTIS Visible and Infrared Thermal Imaging Spectrometer	Etude de la surface du noyau et du gaz et des poussières qui s'en échappent.
PHILAE		
	APXS Alpha Proton X-ray Spectrometer	Etude de la surface de la comète.
	CIVA Comet Infrared and Visible Analyzer	Etude du noyau à partir de trois systèmes de caméras.
	CONSERT Comet Nucleus Sounding Experiment by Radio wave Transmission	Etude de la structure interne du noyau. Transmission d'ondes radio à l'orbiteur.
	COSAC COmetary SAmping and Composition experiment	Etude de la composition de la surface de la comète.
	MUPUS MUlTi-PURpose Sensors for surface and sub-surface science	Etude des propriétés thermiques et mécaniques du sol de la comète jusqu'à 30 cm de profondeur






	PTOLEMY Evolved gas analyzer	Etude de la composition de la surface de la comète, quantification des isotopes d'un élément donné.
	ROLIS ROsetta Lander Imaging System	Etude du noyau à partir d'imagerie lors de la descente de Philae vers la comète.
	ROMAP ROsetta lander Magnetometer and Plasma monitor	Etude du champ magnétique du noyau, de la densité, l'intensité et la direction des électrons et des particules chargées au niveau du sol de la comète.
	SD2 Sampling, Drilling and Distribution	Prélèvements du sol jusqu'à 20 cm de profondeur.
	SESAME Surface Electric Sounding and Acoustic Monitoring Experiment	Etude acoustique et électrique de la comète.

Tableau 1.2: Brève description des 21 instruments à bord de la sonde Rosetta. 11 instruments sont à bord de l'orbiteur Rosetta, et 10 instruments sont sur l'atterrisseur Philae. Les instruments sont détaillés dans l'issue de *Space Science Review* de Février 2007 (volume 128, issue 1-4).

La caméra OSIRIS, à bord de la sonde Rosetta, captura de nombreuses images de la descente de l'atterrisseur. Après 7 heures de descente, Philae arriva à 120 mètres du point d'atterrissage envisagé sur la surface du noyau cométaire, avec une vitesse de 1 mètre par seconde. Malheureusement, les harpons supposés ancrer l'atterrisseur à la surface ne se déployèrent pas. Philae fit donc un rebond sur plus d'un kilomètre, pendant une durée d'environ 2 heures. Il finit par se stabiliser après un second rebond. Des images capturées par l'instrument CIVA, à bord de l'atterrisseur, ont laissé penser que Philae se trouvait dans une position presque verticale (Bibring et al., 2015), contre une falaise. Ces déductions furent confirmées, comme on peut le voir sur la **Figure 1.17**, par une image prise en Septembre 2016 par la caméra OSIRIS à bord de la sonde Rosetta, lorsque celle-ci se trouvait à une distance de 2,7 kilomètres du noyau. Philae était doté d'une pile de 1300 Wh (pour un fonctionnement d'environ 2,5 jours), et de batteries rechargeables grâce à des panneaux solaires. Le site d'atterrissage initial avait été choisi afin que l'atterrisseur soit suffisamment ensoleillé pour la charge des batteries. Malheureusement, ce ne fut pas le cas du nouvel emplacement (**Figure 1.17**). 60 heures d'analyses ont tout de même pu être effectuées, ce qui n'est pas négligeable, puisque cela représente une première dans l'histoire de l'exploration cométaire. Philae resta définitivement silencieux à partir du 9 Juillet 2015.

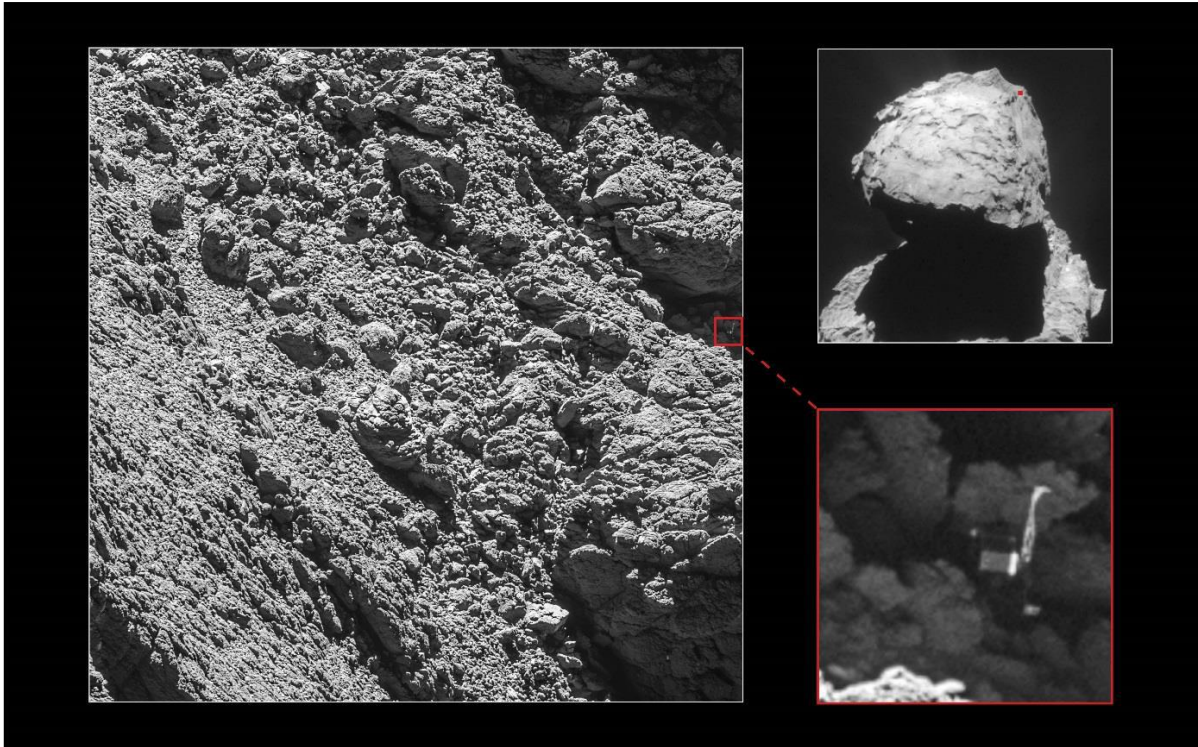


Figure 1.17: Photographie de l'atterrisseur Philae par la caméra OSIRIS à bord de la sonde Rosetta, en Septembre 2016. La sonde se trouvait à une distance de 2,7 kilomètres du noyau. Crédits : ESA/Rosetta/MPS for OSIRIS Team MPS/UPD/LAM/IAA/SSO/INTA/UPM/DASP/IDA; context: ESA/Rosetta/NavCam – CC BY-SA IGO 3.0.

La sonde Rosetta continua ses investigations à l'aide de ses 11 instruments à bord. Parmi eux, plusieurs instruments étaient prévus pour l'étude des particules, d'autres pour l'étude de la phase gazeuse, mais aussi pour l'étude des plasmas ou encore de la surface du noyau cométaire. Finalement, les analyses ont été faites pour une grande plage de distances au noyau, de 10 kilomètres jusqu'à 1500 kilomètres. Le point le plus proche du Soleil, le périhélie, fut atteint le 13 Août 2015. La caméra OSIRIS a capturé plusieurs images, à une distance d'environ 330 km, sur lesquelles l'activité est visible (**Figure 1.18**). Cette mission eut un tel succès que sa fin initialement prévue le 31 Décembre 2015 fût reportée de neuf mois. Ainsi, c'est le 30 Septembre 2016 que s'acheva ce long périple, l'orbiteur s'écrase à faible vitesse à la surface de la comète 67P. Cette mission s'est avérée être une grande réussite, les instruments ont fonctionné dix années après le lancement de la sonde, un atterrisseur s'est posé sur le noyau de la comète, et enfin un nombre important de résultats ont été publiés.



Figure 1.18: Photographie du noyau de la comète par l'instrument OSIRIS à bord de la sonde Rosetta, avant son passage au périhélie le 12 Août 2015. Crédits : ESA/Rosetta/MPS for OSIRIS Team MPS/UPD/LAM/IAA/SSO/INTA/UPM/DASP/IDA.

2.1.3. Retour d'échantillon : Stardust et la comète 81P/Wild 2

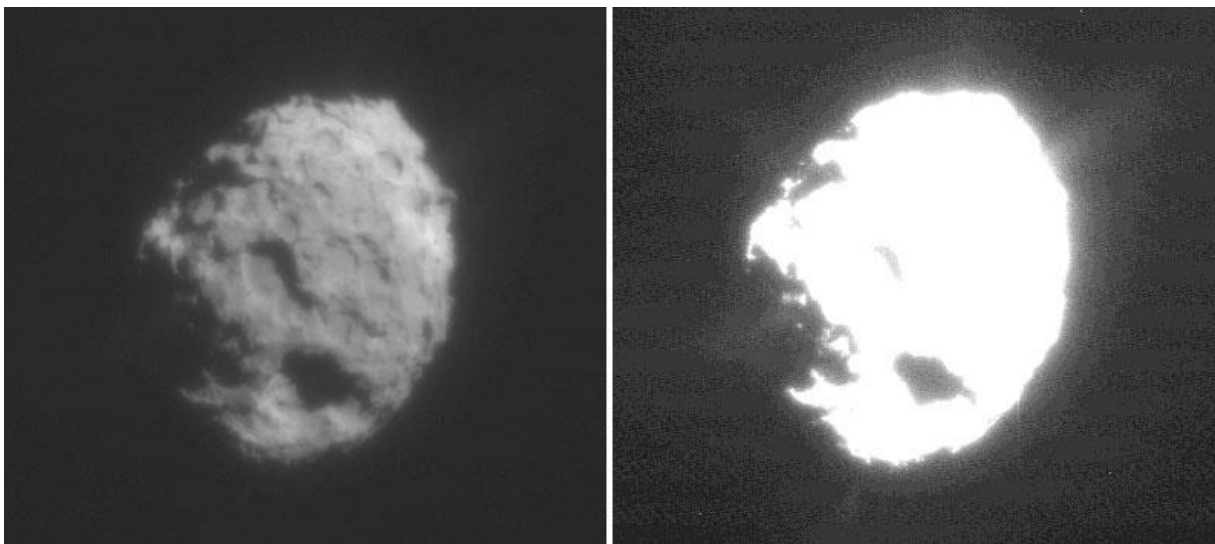


Figure 1.19: Photographie du noyau de la comète Wild 2 par la sonde Stardust, en Janvier 2004. Crédits : NASA/JPL.

Citée précédemment, la mission Stardust est la première et unique mission à avoir procédé à un retour d'échantillons de particules de poussières cométaires sur Terre afin de les étudier. La sonde spatiale, envoyée en 1999, arriva à destination de la comète 81P/Wild2 (**Figure 1.19**) en Janvier 2004, soit 5 années plus tard, et survola le noyau à une distance de 234 kilomètres. Les dimensions du noyau sont

5,50 x 4,00 x 3,30 km \pm 0,05 km, et son albédo est égal à 0,061 (Thomas, 2009). La sonde avait à son bord, un collecteur de particules, une capsule de retour d'échantillons, une caméra de navigation, un compteur de particules et enfin un spectromètre de masse (Brownlee et al., 2003). Le collecteur, représenté sur la **Figure 1.20**, était composé de 132 compartiments remplis d'un aérogel à base de silicium. Cet aérogel avait pour but principal de ralentir la vitesse d'impact des particules de poussières de manière à les garder intactes du mieux qu'il soit (Brownlee et al., 2006).

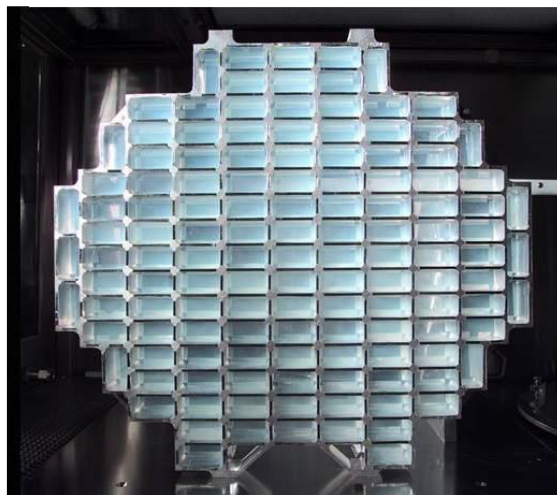


Figure 1.20: Photographie du collecteur utilisé pour la capture des particules éjectées de la comète Wild 2. Crédits : NASA.

Plus de 10 000 particules cométaires, mesurant entre 1 et 300 micromètres ont été collectées et étudiées sur Terre par des chercheurs du monde entier (Brownlee et al., 2006). Lors de la mission, les particules se sont impactées dans l'aérogel avec une vitesse de 6,1 km/s (Brownlee, 2014) provoquant ainsi une onde de choc, et donc des compressions et chauffages importants (choc thermique entre 10 000 et 20 000 K) au sein des échantillons. Comme nous le verrons plus loin, l'analyse de la matière organique a été rendue difficile par la présence d'une contamination organique au sein de l'aérogel.

2.1.4. Particules de poussières interplanétaires, et micrométéorites

Il existe d'autres échantillons extraterrestres qui ont pu être analysés sur Terre, mais cette fois on ne parle pas de retour d'échantillons. En effet, chaque année, plus de 40 000 tonnes de matériaux extraterrestres sont accrétés par la Terre (Love and Brownlee, 1993). Les échantillons sont analysés en laboratoire afin de déterminer leur provenance. Des particules de poussières interplanétaires (IDPs) sont collectées dans la stratosphère terrestre, à environ 20 km d'altitude par des avions de la NASA depuis 1970 (Brownlee, 1985). D'autres poussières sont ramassées sur la Terre, ce sont des micrométéorites (MM), certaines sont dites ultracarbonnées et sont collectées en Antarctique (UCAMMs). La plupart de ces poussières seraient issues de la fragmentation d'astéroïdes ou auraient une origine cométaire (Rietmeijer, 2002).

Les IDPs sont séparés en deux familles, selon leur nature chimique, les IDPs chondritiques qui auraient subi peu d'altération depuis leur formation, et les IDPs non-chondritiques. Parmi les IDPs chondritiques, on retrouve les Chondritic Porous IDPs (CP-IDPs). Celles-ci possèdent une structure poreuse, soit entre 0,2 et 0,9 g.cm⁻³ (Flynn and Sutton, 1991), et anhydre. Leur composition en carbone, jusqu'à 45% en masse (Schramm et al., 1989) reflète le fait qu'elles se soient formées dans des zones suffisamment froides pour condenser des éléments volatils, et n'ont jamais subi de chauffage assez important pour appauvrir ces éléments (Flynn et al., 2003). Ces CP-IDPs auraient une origine cométaire (Bradley, 2003; Ishii et al., 2008). En effet, Messenger (2002) a mis en lien le passage de la comète 26P/Grigg-Skjellerup avec des collectes de particules de poussières sur Terre.

Les micrométéorites sont collectées dans des régions spécifiques telles que dans les sédiments marins de grandes profondeurs et dans les régions polaires du Groenland et de l'Antarctique. Ces zones ont comme particularité le fait que l'activité humaine y est très faible, les côtes sont éloignées, et le temps est sec et froid. Les micrométéorites sont ainsi conservées dans la neige, et ne subissent pas d'altération aqueuse, biologique ou mécanique (Maurette et al., 1991). Des micrométéorites, chondritiques et poreuses (CP-MM) ont été assimilées aux CP-IDPs (Noguchi et al., 2015).

Les micrométéorites ultracarbonnées (UCAMMs) se démarquent par leur forte composition en carbone, soit de 50 à 85% en masse, ces teneurs en carbone sont beaucoup plus élevées que ce qui peut être mesuré dans la plupart des chondrites carbonées (Dartois et al., 2013; Dobrică et al., 2009; Duprat et al., 2010). Les UCAMMs présentent des abondances de deutérium 10 à 30 fois plus élevée que la valeur terrestre (Duprat et al., 2010). Cela reflète une chimie froide (T < 50K) dans les régions les plus éloignées du nuage moléculaire ou du disque protoplanétaire (Noguchi et al., 2015). Ainsi, les UCAMMs pourraient avoir une origine cométaire.

2.1.5. Simulation en laboratoire

Les simulations en laboratoire représentent un autre moyen d'étudier les comètes. Grâce à des données observationnelles, il est possible de simuler en laboratoire certains des processus subis par la matière cométaire au sein du noyau ou bien de la coma. Le but est de caractériser certaines propriétés au sein des comètes (vitesses de sublimation des glaces, structure des glaces (Muñoz Caro and Dartois, 2013)) mais aussi de comprendre les différents mécanismes et processus physico-chimiques ayant eu lieu lors de la formation et l'évolution des comètes (Colangeli et al., 2004; Cottin et al., 1999). Les résultats obtenus peuvent être comparés et confirmés avec des observations par télédétection ou par des mesures *in situ*, ils peuvent également préparer une future mission en prédisant de nouvelles molécules à détecter, ou encore, suggérer de nouveaux mécanismes réactionnels.

Pour ce qui concerne les simulations concernant la chimie organique cométaire, les expériences ont pour principe l'irradiation par des particules, la photolyse ou bien le simple réchauffement d'un mélange de glace simple (tel que de l'eau, du méthanol et de l'ammoniac). Ce genre de dispositif, imaginé par Mayo Greenberg à la fin des années 1970 (Hagen et al., 1979), simule

les conditions que peuvent rencontrer au sein du milieu interstellaire des particules glacées avant d'être incorporées au sein d'un noyau cométaire (voir par exemple (Muñoz Caro and Dartois, 2013)). Ce mélange de glace est placé dans une enceinte cryogénique (10 à 20 K) sous vide, afin de se rapprocher des conditions des nuages moléculaires. Il est, par la suite, irradié par un flux de photons, d'ions ou d'électrons avant d'être ramené à température ambiante. Le résidu organique obtenu peut finalement être analysé par différents moyens analytiques (spectroscopie infrarouge, la spectrométrie de masse ou encore la chromatographie liquide haute performance...) (Bernstein et al., 1995; Muñoz Caro et al., 2004).

Ces analyses en laboratoire mettent en évidence la formation de diverses familles de molécules telles que des hydrocarbures, des alcools, des aldéhydes, des composés aromatiques, des amines, ou encore des acides aminés (Despois and Cottin, 2005). Des études, récemment menées par Danger et al. (2016), ont montré une similarité entre le résidu organique obtenu et la fraction soluble de la matière organique de la météorite Murchison. De telles simulations ont également mis en évidence la synthèse de molécules telles que le polyoxyméthylène (POM) (Le Roy et al., 2012; Schutte et al., 1993), et l'héxaméthylènetétramine (HMT) (Muñoz Caro et al., 2004) (Le Roy, 2011) (Danger et al., 2013) (Bernstein et al., 1995; Vinogradoff et al., 2013). Mais, à ce jour, aucune détection certaine n'a été réalisée pour ces deux composés dans les comètes. De la même manière, des molécules d'intérêt exobiologiques tels que les sucres ou les acides aminés ont été détectés au cours de ce genre de simulations. C'est par exemple le cas du ribose, synthétisé pour la première fois en 2016 par Meinert et al. (2016), suite à l'irradiation ultraviolet d'un mélange d'eau, de méthanol et d'ammoniac placé dans des conditions de basses pressions et températures. Cependant, cette molécule, qui est un élément primordial dans le matériel génétique des organismes vivants, n'a pas encore été observé dans les environnements cométaires. Des acides aminés sont aussi détectés lors de ce type d'expériences (Bernstein et al., 2002; Muñoz Caro et al., 2002). Ces derniers (à part la glycine) sont cependant toujours détectés après une procédure analytique qui implique soit un passage simple de l'échantillon en phase aqueuse, soit même une hydrolyse acide (1M HCl) à haute température (115°C). L'hydrolyse augmente notablement la concentration des acides aminés détectés (Nuevo et al., 2008). Pour ce qui concerne la glycine, il a été démontré expérimentalement qu'il est possible de la former sous forme de sel (methylamonium glycinate) au sein même de la glace, en l'absence de tout passage en phase aqueuse (Bossa et al., 2008).

2.2. La composition des comètes

Les missions spatiales et la télédétection, soutenues par les simulations en laboratoire, représentent donc des moyens d'étudier la composition chimique des comètes, tant la phase gazeuse que la phase particulaire. Ce chapitre propose une synthèse de ce que nous savons désormais de la composition des comètes.

2.2.1. Composition de la phase solide

La composante organique réfractaire des particules cométaires a été mise en évidence pour la première fois dans la comète 1P/Halley par le spectromètre de masse PIA (Dust Mass Spectrometer), à bord de la sonde Giotto. Celui-ci a détecté des éléments tels que l'hydrogène, le carbone, l'azote et l'oxygène (Kissel et al., 1986). Les spectres de masses obtenus pour ces particules de poussières (**Figure 1.21**) ont permis de différencier 3 types de grains :

- ✚ Les grains mixtes (**Figure 1.21.a**), composés d'un mélange d'éléments organiques et inorganiques. Le spectre présente des pics pour les composés H ($m/z=1$), C ($m/z=12$), O ($m/z=16$), Na ($m/z=23$), Mg ($m/z=24$), Si ($m/z=28$), S ($m/z=32$), et Fe ($m/z=56$). Les signaux observés pour $m/z=107$ et 109 sont associés à l'argent qui provient de la cible en argent sur laquelle les grains ont impacté.
- ✚ Les grains organiques (**Figure 1.21.b**), dominés par les 4 éléments organiques C, H, O et N.
- ✚ Les grains silicatés (**Figure 1.21.c**), constitués d'éléments associés à la présence de silicates tels que O, Mg, Si, et Fe.

Les particules riches en matière organiques (carbone hydrogène, oxygène et azote) sont finalement décrites par le terme « CHON » (Clark et al., 1988; Langevin et al., 1988). En 1992, Lawler and Brownlee (1992) démontrèrent que ces « CHON » sont, en réalité, constituées d'un mélange de composés organiques et de composés silicatés. Ainsi, des particules purement organiques n'existeraient pas. Mais ces éléments n'ont, en revanche, pas été correctement quantifiés dans les particules cométaires de la comète 81P/Wild 2. Cela est dû à la composition de l'aérogel qui était constitué de silice mais aussi de composés organiques azotés (Stephan, 2008). Les particules de poussières ont subi des désagréments physiques et des modifications thermiques telles que la fusion (Leroux, 2012). Pour ce qui concerne les minéraux, la plupart a résisté aux conditions de collecte. En revanche, la matière organique plus fragile, a été fortement altérée lors de la collecte d'autant plus que l'aérogel était préalablement contaminé par de la matière organique terrestre. Cette contamination a rendu difficile la caractérisation et la quantification de composés organiques au sein des particules de la comète 81P/Wild 2 (Sandford et al., 2010).

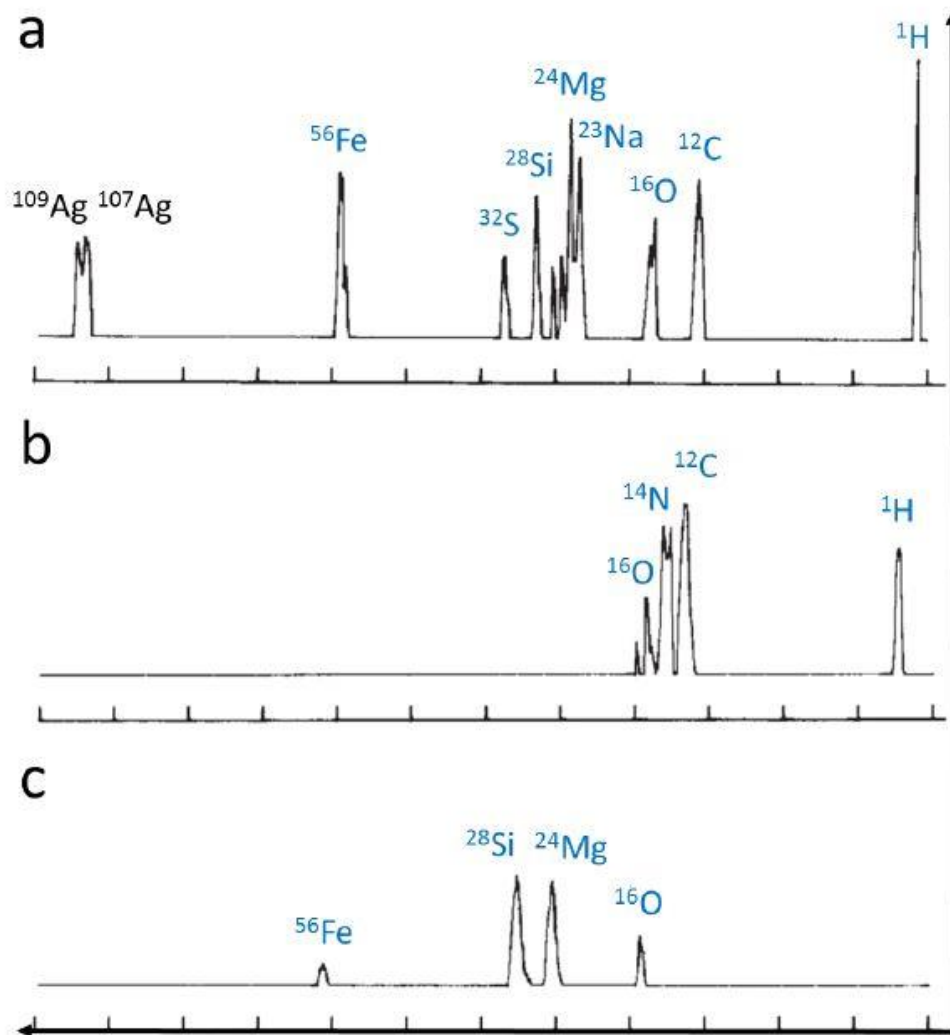


Figure 1.21: Spectres de masse de particules de poussières de la comète 1P/Halley mesurés par le spectromètre de masse PIA à bord de la sonde Giotto. Le spectre a. correspond aux grains mixtes, le b. aux grains organiques et le c. aux grains silicatés. Crédits : Anaïs Bardyn (section 2.1), spectres adaptés de Kissel et al. (1986).

Malgré tout, l'ensemble des mesures effectuées permet de retracer l'histoire de cette comète. Par exemple, une grande diversité minéralogique des particules a été observée, celle-ci révèle des températures de formation très élevée allant au-delà de 2000 K. La coexistence de ces composés avec des glaces formées à moins de 50 K montre qu'il y a pu avoir un transport de matière de la zone intérieure et chaude du disque protoplanétaire vers les zones extérieures qui sont les plus froides et dans lesquelles la comète s'est formée (Brownlee, 2014). L'étude de la composition globale des particules souligne trois variétés de matières organiques (Levasseur-Regourd et al., 2018) : l'une similaire à la matière organique insoluble (IOM) détectée dans les météorites carbonées, une autre correspondant à de la matière réfractaire hautement aromatique (De Gregorio et al., 2011), et enfin une dernière qui est de la matière organique aliphatique volatile (Sandford et al., 2006). Sandford et al. (2006) émettent l'hypothèse que ces variations peuvent être dues à une hétérogénéité du matériau analysé. Une altération aqueuse des minéraux par des processus aqueux à basse température a été

mise en évidence par la détection de minéraux tels que la cubanite, et la pyrrhotite (Berger et al., 2011). Enfin, des analyses ont montré une similarité avec les chondrites et tend ainsi à se rapprocher de la composition de la photosphère solaire.

Le spectromètre de masse à temps de vol PUMA-1, à bord de la sonde VEGA 1, a détecté plusieurs molécules organiques appartenant à différentes familles chimiques (Kissel and Krueger, 1987). Mais la faible résolution de l'instrument (soit entre 50 et 200) a rendu l'attribution des molécules incertaine (Lawler, 1989). A partir des résultats obtenus grâce aux spectromètres de masse PUMA-1 et PUMA-2, Fomenkova (1999) et Fomenkova et al. (1994) ont proposé de séparer la matière organique en plusieurs catégories présentées sur la **Figure 1.22**. On y retrouve du carbone élémentaire, des hydrocarbures aromatiques et aliphatiques, des polymères, et des carbonates. Tout comme dans la comète Wild 2, de la matière organique complexe similaire à celle détectée dans les météorites a également été mise en avant et domine le bilan du carbone.

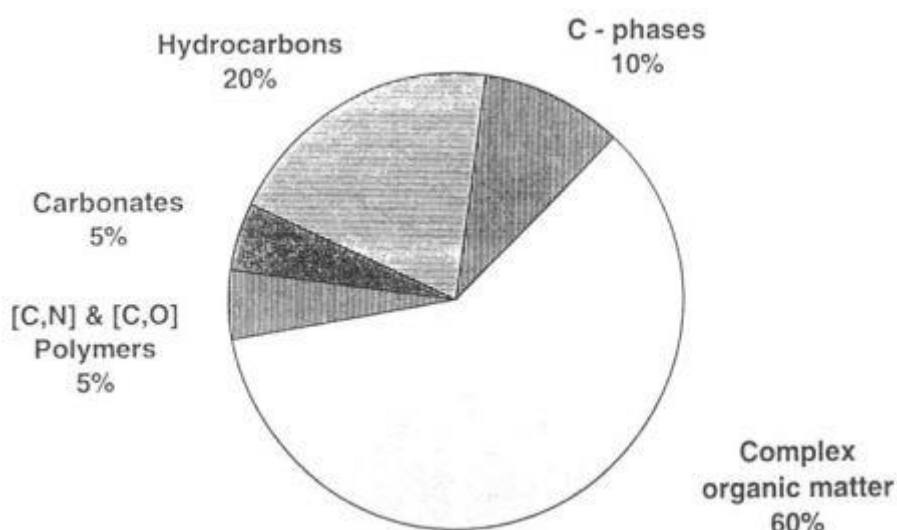


Figure 1.22: Répartition du carbone dans les particules de poussières de la comète Halley. Crédits : Fomenkova (1999).

COSIMA, spectromètre de masse, pour l'analyse en phase solide, à bord de la sonde Rosetta, a étudié la composition chimique des particules cométaires éjectées du noyau de la comète 67P. Plusieurs éléments inorganiques tels que le fer ou le silicium ont été détectés à partir d'analyses in situ. La signature organique observée se retrouve notamment dans les fragments C^+ , CH^+ , CH_2^+ , CH_3^+ et $C_2H_3^+$ dans les spectres d'ions positifs, et les ions organiques les plus intenses correspondent à l'ion C^+ et l'ion $C_2H_3^+$. Ainsi, elle semblerait correspondre à une matière organique de haut poids moléculaire, similaire à celle déjà observée dans les météorites (Le Roy, Altwegg et al. 2015; Fray, Bardyn et al. 2016).

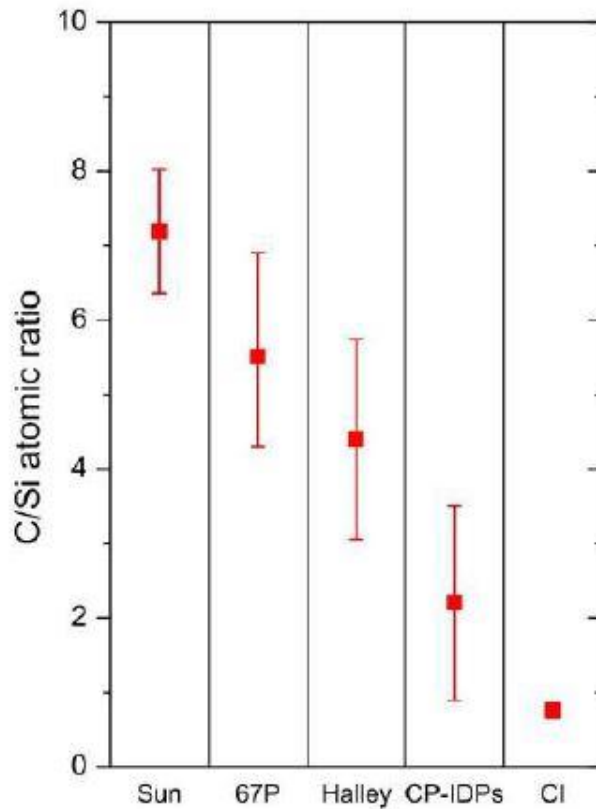


Figure 1.23: Comparaison des rapports C/Si pour différents corps du système solaire. Crédits : Bardyn et al. (2017)

Bardyn et al. (2017) ont étudié la composition élémentaire des particules cométaires issues de la comète 67P. L'abondance élémentaire peut renseigner sur l'histoire du corps étudié, en effet si celle-ci se rapproche de l'abondance solaire, il s'agit d'un signe du caractère primitif de l'objet. Ici, l'abondance relative du carbone par rapport au silicium a été comparée à d'autres objets du système solaire, tels que le Soleil et la comète de Halley (**Figure 1.23**). Les résultats montrent que ce rapport C/Si est supérieur à celui trouvé dans les météorites. Ainsi les comètes seraient des corps plus primitifs que les météorites. Enfin, la comète 67P semblerait être l'un des objets les plus carbonés et les plus riches en matière organique du système solaire, avec une proportion de carbone au sein des particules de 30% (en nombre), et une fraction organique de 45% de la masse totale (**Figure 1.24**) (Bardyn et al., 2017).

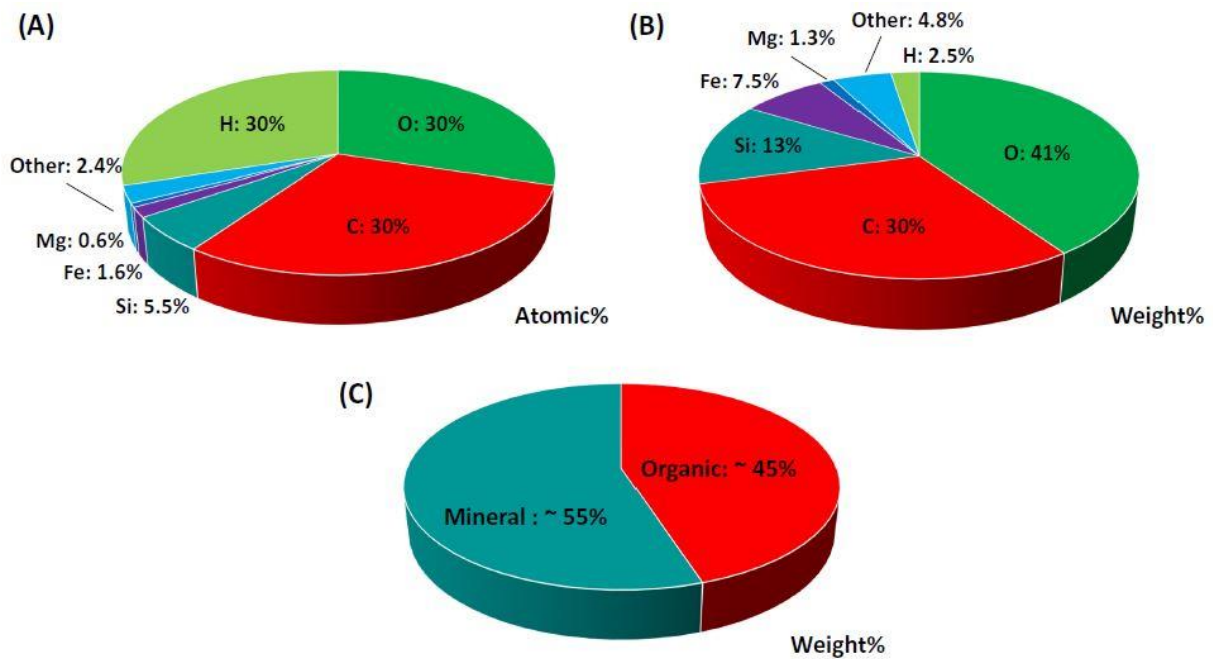


Figure 1.24: Composition moyenne des particules de poussières analysées dans la comète 67P. Elle est donnée a. par fraction atomique et b. par fraction de masse atomique. La figure c correspond à la fraction de masse minérale et organique estimée. Crédits : Bardyn et al. (2017).

2.2.2. Composition de la phase gazeuse

A ce jour, un grand nombre de molécules a été détecté dans les atmosphères cométaires. Les abondances des molécules sont généralement données par rapport à celle de l'eau dont la production varie entre 10^{26} et 10^{31} molécules par seconde (A'Hearn et al., 2012)(A'Hearn et al., 2012)(A'Hearn et al., 2012)(A'Hearn et al., 2012)(A'Hearn et al., 2012)(A'Hearn et al., 2012)(A'Hearn et al., 2012). Il a été montré, par Crovisier et al. (2009) et Ootsubo et al. (2012), que les abondances moléculaires données par rapport à l'eau peuvent varier d'une comète à une autre, et cela souligne leur différents scénarios de formation dans la nébuleuse protosolaire (A'Hearn et al., 1995) (Bockelée-Morvan, 2011) (Mumma and Charnley, 2011). Mais ces abondances sont également variables au sein de l'atmosphère d'une même comète pour des positions orbitales différentes (Bodewits et al., 2014) (Russo et al., 2016). La composition des glaces cométaires est en partie constituée d'eau, soit 80% en nombre, suivi de CO_2 , mais aussi de CO , CH_3OH , CH_4 , H_2S et de NH_3 (Bockelée-Morvan and Biver, 2017).

Plus d'une trentaine de molécules ont été détectées dans les atmosphères cométaires grâce à des observations radio (20-600 GHz), ou encore par spectroscopie infrarouge et ultraviolette. La plupart des observations a été réalisée pour des comètes très actives et passant relativement près de la Terre, telles que les comètes C/1995 01 (Hale Bopp) et C/1996 B2 (Hyakutake). L'abondance des molécules par rapport à l'eau est donnée sur la **Figure 1.25** avec le nombre de comètes dans lesquelles ces molécules ont été détectées (Bockelée-Morvan and Biver, 2017). Par exemple, le

monoxyde de carbone CO a été détecté dans plus de dix comètes alors que le dioxyde de soufre n'a été détecté que dans une seule comète. Des éléments tels que des radicaux, atomes ou ions ont été observés dans le domaine de l'ultraviolet, et ont été caractérisés comme étant des molécules filles issues des glaces cométaires (Bockelée-Morvan and Biver, 2017).

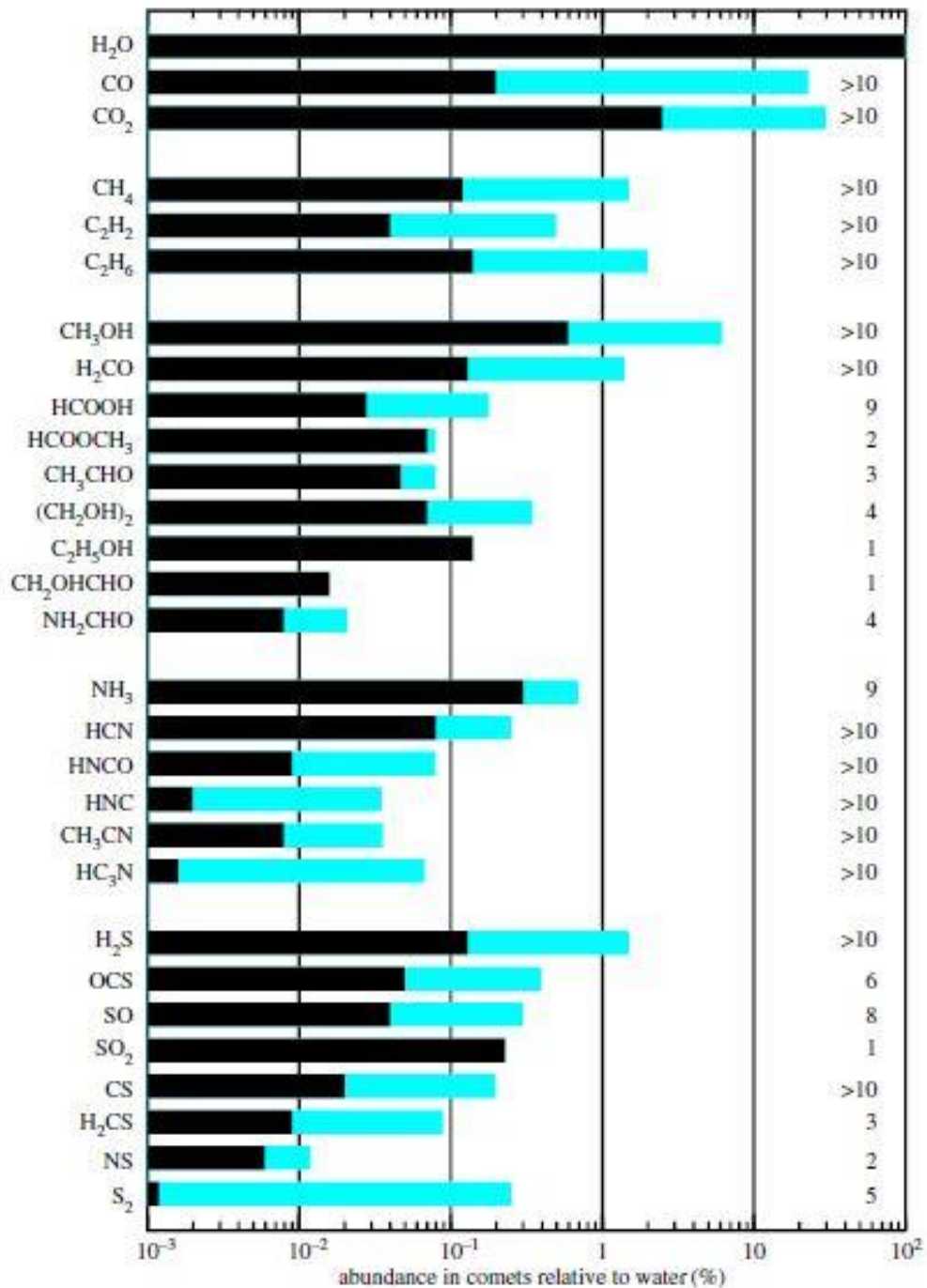


Figure 1.25: Molécules détectées dans l'atmosphère de différentes comètes. Les abondances sont données par rapport à l'eau. Les barres bleues correspondent représentent les limites supérieures des abondances reflétant ainsi la diversité entre les comètes. A droite est noté le nombre de comètes pour lesquelles la molécule a été détectée. Crédits: Bockelée-Morvan and Biver (2017).

Lors de la mission Rosetta, de nouvelles molécules ont été détectées dans l'atmosphère de la comète 67P. Ce « zoo » cométaire est représenté sur la **Figure 1.26**. Le spectromètre de masse DFMS (résolution¹ de 3000) de ROSINA, à bord de la sonde Rosetta, avait pour but principal l'analyse des gaz éjectés du noyau de la comète. Les abondances de molécules tels que des hydrocarbures, des espèces oxygénées, azotées, et soufrées ont été mesurées. La présence de molécules porteuses de CHO a également été révélée sous forme d'aldéhyde, d'alcools et d'acides carboxyliques (Schuhmann et al., 2019b). Parmi ces molécules, le formaldéhyde et le méthanol ont été définis comme étant les plus abondants, suivies de l'acétaldéhyde et de l'éthanol, les autres molécules étant moins abondantes (<0,01% par rapport à l'eau). Cependant, en comparaison avec des mesures depuis la Terre d'autres comètes, 67P/Churyumov-Gerasimenko est classée comme étant relativement pauvre en molécules porteuses de CHO (Schuhmann et al., 2019b). L'instrument DFMS a également mis en évidence la présence de nombreux alcanes, du méthane jusqu'à l'hexane, mais aussi la présence de composés aromatiques tels que le benzène et le toluène. Ainsi, ces détections posent la question de l'existence d'hydrocarbures aliphatiques et aromatiques au sein de la comète (Schuhmann et al., 2019a). D'autres gaz, composés d'espèces non organiques ont également été observés, par exemple : Ar, Kr, Xe, HBr, HCl, HF et S₂ (Le Roy et al., 2015a) (Marty et al., 2017). Deux ingrédients essentiels à la vie ont également été détectés : le phosphore et la glycine (Altwegg et al., 2016). La détection de la glycine sera discutée dans la partie 3.2.2.

¹ La résolution en masse correspond à la capacité d'un instrument à séparer des ions dont les rapports m/s sont proches. Celle-ci dépend de la masse m située à la mi-hauteur au centre du pic étudié, et de l'écart de masse Δm qui correspond, en général à la largeur à mi-hauteur (définition IUPAC)

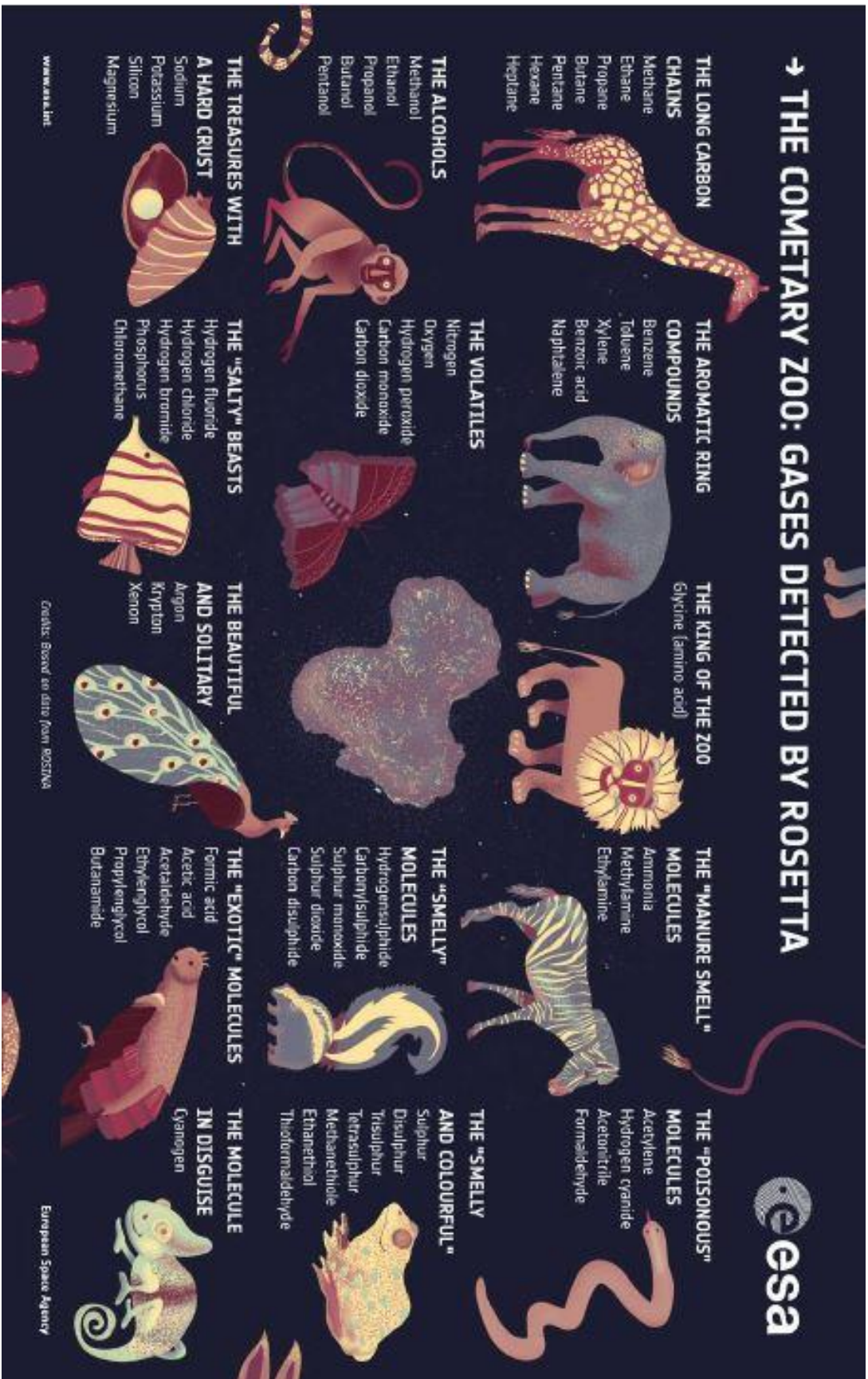


Figure 1.26: Illustration représentant la diversité des molécules détectées dans l'atmosphère de la comète 67/Churyumov-Gerasimenko par l'instrument ROSINA. Crédits : ESA

2.2.3. Rapport D/H

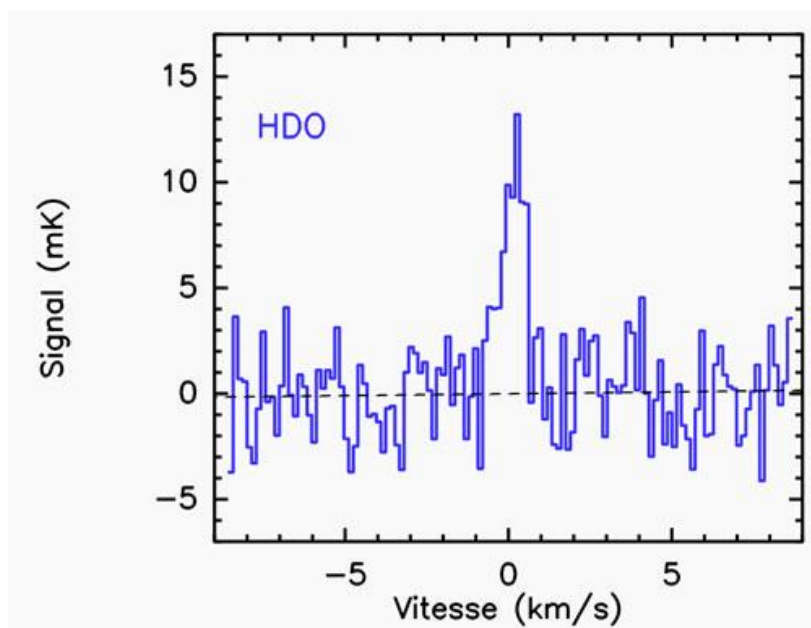


Figure 1.27: Spectre de HDO détectée dans la comète Hartley 2 par l'instrument HIFI de l'observatoire spatial Herschel, en Novembre 2010. Crédits : Hartogh et al. (2011).

Des études menées à partir du télescope submillimétrique Herschel de l'Agence Européenne Spatiale (ESA) ont mis en évidence la présence de HDO dans l'atmosphère de la comète Hartley 2. Le spectre est représenté sur la **Figure 1.27**. La particularité de HDO réside dans le fait qu'un atome de deutérium (deux fois plus lourd) remplace un atome d'hydrogène. Le rapport isotopique deutérium sur hydrogène (D/H) représente un bon traceur pour comprendre la formation des océans sur la Terre. Quatre comètes issues de la famille de Jupiter ont été examinées, parmi celles-ci, la comète Hartley 2, la comète 45P/Honda-Mrkos-Pajdušáková et la comète 46P/Wirtanen, présentent une valeur similaire à celle mesurée pour les océans terrestres (Hartogh et al., 2011; Lis et al., 2019), contrairement aux comètes provenant du nuage d'Oort (**Figure 1.28**). Cependant, le D/H mesuré dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, qui fait partie de la famille de Jupiter, vaut plus de trois fois la valeur terrestre $(5,3 \pm 0,7) \times 10^{-4}$ (Altwegg et al., 2015). Cela implique que les valeurs du D/H dans les comètes issues de la famille de Jupiter sont variables. A ce jour, aucune réponse claire n'a été apportée à l'origine de l'eau terrestre. Lis et al. (2019) proposent que les comètes partagent toutes initialement le même rapport D/H que la Terre, et que les différences entre les D/H sont dues aux processus de sublimation. De plus, les comètes ayant une fraction active du noyau supérieure à 0,5 présentent des valeurs similaires à la valeur terrestre. Ces comètes sont dites hyperactives, et produiraient une partie de leur vapeur d'eau à partir de grains glacés éjectés du noyau, et qui subliment dans la coma (Lis et al., 2019).

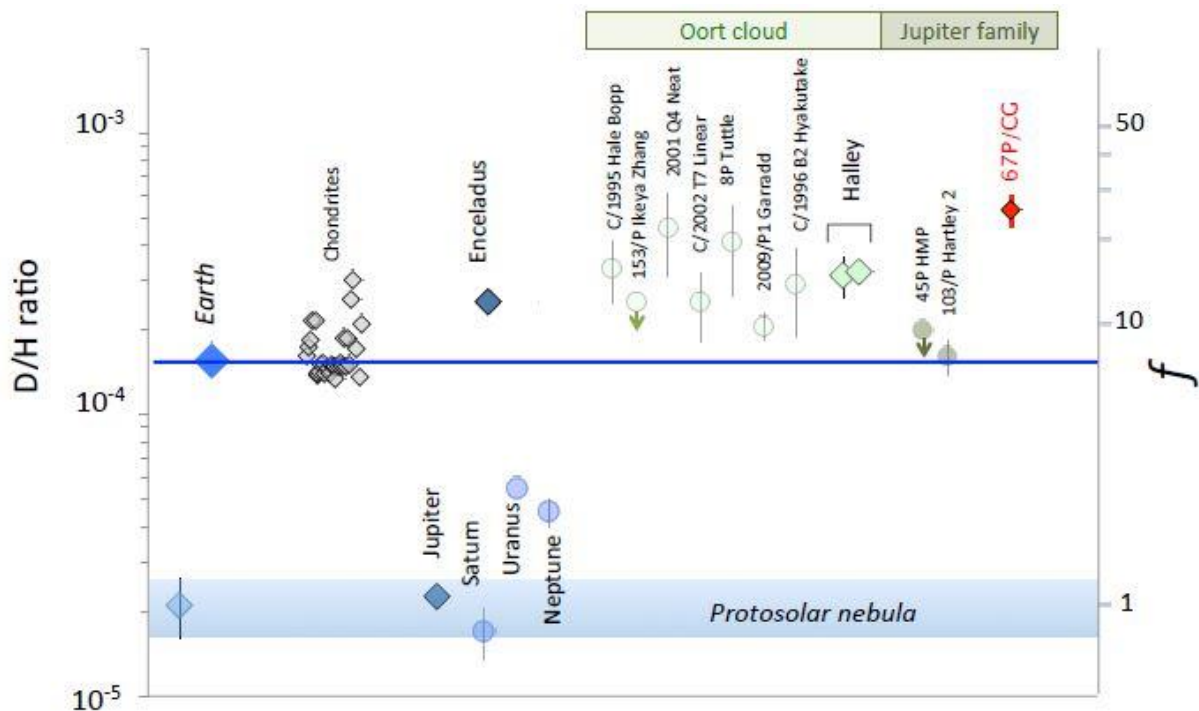


Figure 1.28 : Rapport D/H mesurés dans différents corps du système solaire. Crédits : Altwegg et al. (2015). (Altwegg et al., 2015)(Altwegg et al., 2015)(Altwegg et al., 2015)(Altwegg et al., 2015)(Altwegg et al., 2015)(Altwegg et al., 2015)(Altwegg et al., 2015)

3. Source distribuée dans les comètes

3.1. Définition et historique des sources distribuées

La majorité des molécules gazeuses détectée dans la chevelure des comètes provient directement de la sublimation des glaces du noyau. Mais la distribution de certaines d'entre elles ne s'explique pas par ce processus aussi direct. En effet, Eberhardt et al. (1988) et Meier et al. (1993) ont montré, grâce à des mesures *in situ* effectuées dans la comète Halley, qu'une partie au moins des molécules CO et H₂CO ont été directement produites dans la chevelure de la comète, et non à la surface du noyau. Le terme de « source distribuée », initialement appelé « source étendue » est alors employé (Cottin and Fray, 2008). La définition suivante est proposée dans le livre Comets II (Festou et al., 2004) :

« Extended source – Most stable molecular species (as opposed to radicals, atoms and ions) appear to be emitted directly from the nucleus. Some stable molecular species appear to have at least one component that is produced in the coma from another source. Processes that have been suggested are sublimation from grains or large polymerized molecules, photon-induced desorption or photo-sputtering from grains or large molecules, gas-phase chemistry in the coma, or photodissociation of other parent molecules. Well known examples in comets are extended source components of H₂CO and CO. The term “distributed source” is also often used. »

Cette définition a été discutée par Cottin and Fray (2008) du fait qu'elle exclut les radicaux bien qu'ils soient souvent également associés à la présence d'une source distribuée (par exemple CN, C₂, et C₃). Thomas et al. (1988) décrivent des phénomènes de production de gaz et de poussières à partir de certaines surfaces du noyau en particulier comme des sources étendues. L'utilisation de ce terme reflète donc une ambiguïté qui a été corrigée par le mot « distribuée ». Finalement, une source distribuée correspond à une source supplémentaire d'une espèce gazeuse dans la chevelure, mais ce terme n'est valable qu'à condition qu'il y ait un transfert dans le bilan massique entre les particules de poussières et la phase gazeuse dans la coma. C'est-à-dire que les composés gazeux dans la coma sont produits à partir d'éléments solides (**Figure 1.29**) (Cottin and Fray, 2008).

Déterminer la distribution radiale d'une espèce détectée dans l'atmosphère de la comète est le meilleur moyen d'étude de l'origine de sa production. En effet, il permet de déterminer si l'espèce provient directement du noyau, si elle a été produite à partir d'une chimie en phase gazeuse ou encore si elle provient d'une source distribuée. Différentes techniques permettent d'obtenir des informations sur la distribution spatiale d'une espèce gazeuse: des mesures *in situ* à partir d'un spectromètre de masse (Meier et al., 1993), ou des techniques d'observations depuis la Terre telles que de la spectroscopie infrarouge, visible et ultraviolette ou encore de l'interférométrie aux longueurs d'ondes millimétriques (Bockelée-Morvan et al., 2004). Ainsi, diverses sources distribuées ont été détectées, c'est le cas, par exemple, du formaldéhyde (H₂CO), du monoxyde de carbone (CO) (Eberhardt, 1999; Eberhardt et al., 1988), de l'isocyanure d'hydrogène (HNC) (Biver et al., 2002; Biver et al., 2006; Irvine et al., 2003), du cyanure (CN) (Festou, 1999; Fray et al., 2005), et certains composés soufrés. Enfin, bien qu'historique, le formaldéhyde présente une source distribuée dans la majorité des comètes dans lesquelles il a été détecté, étant l'un des sujets principaux de cette thèse, ce cas sera donc détaillé dans la partie 3.2.1.

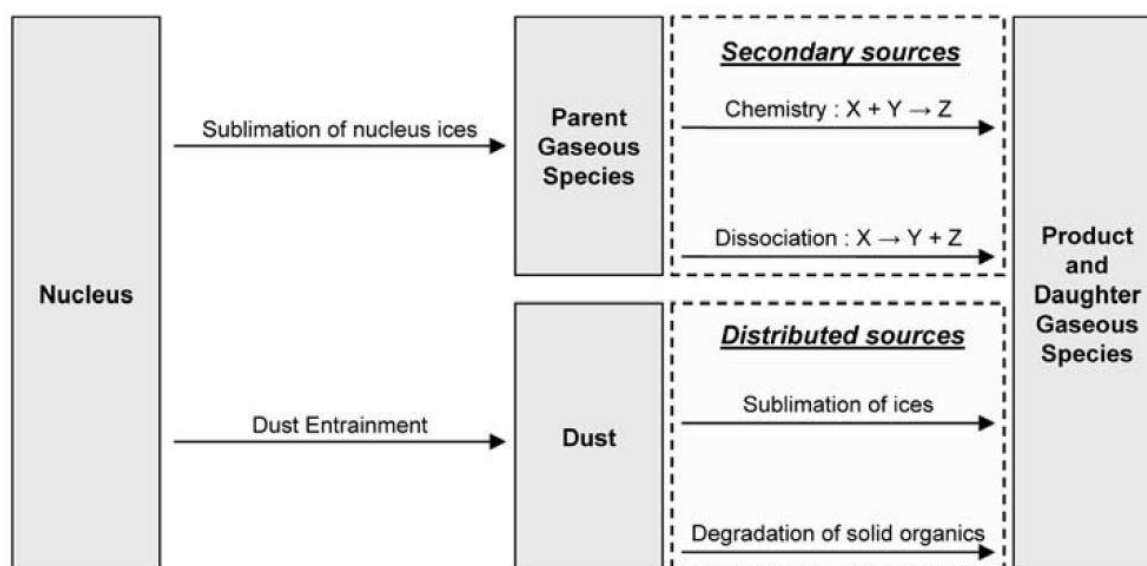


Figure 1.29 : Schéma représentant les mécanismes chimiques de production des espèces en phase gazeuse dans l'environnement cométaire. Les sources dites « secondaires » et distribuées sont précisées. Crédits: Cottin and Fray (2008).

Des mesures par spectrométrie de masse ont mis en évidence une source distribuée de CO dans la comète 1P/Halley (Eberhardt, 1999; Eberhardt et al., 1988). Seulement un tiers du CO total détecté dans la comète proviendrait de la sublimation des glaces du noyau, le reste étant produit à partir d'une source distribuée (Eberhardt, 1999). Dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake), CO a été détecté à partir de mesures par spectrométrie en infrarouge, et cette fois 80% du CO total observée dans la coma proviendrait directement du noyau dans les 1000 premiers kilomètres. Biver et al. (1999) confirment ces observations grâce à des mesures obtenues dans le domaine de longueur d'onde millimétrique. D'autres auteurs (Brooke et al., 2003; DiSanti et al., 2001; DiSanti et al., 1999; Weaver et al., 1997) ont observé du CO qui pourrait venir d'une source distribuée dans la comète C/1995 O1 Hale-Bopp. Cela est également valable pour le CO détecté dans la coma de la comète 29P/Schwassmann-Wachmann 1 (Gunnarsson et al., 2003). Boice et al. (1990) ont émis l'hypothèse qu'une partie du CO proviendrait de la décomposition du polyoxyméthylène, mais des mesures expérimentales menées par Cottin et al. (2004) ont montré que ce n'est pas le cas, la production de CO à partir de ce composé étant très faible. De plus, Gunnarsson et al. (2008) et Bockelée-Morvan et al. (2010) ont montré que les sources distribuées de CO observées en IR ou radio sont susceptibles d'être des biais observationnels, ainsi leur existence a été remise en cause. Le cas de source distribuée du CO semble donc assez complexe.

La photodissociation de sous-oxyde (ou suboxyde) de carbone, C_3O_2 , en phase gazeuse a également été proposée (Huntress et al., 1991), celui-ci serait photodissocié en CO et C_2O , puis le C_2O en CO et C (Crovisier et al., 1991). Cependant, sa limite supérieure d'abondance n'est pas suffisante pour expliquer l'origine de CO (Crovisier et al., 1991). Meier et al. (1993) proposent une autre molécule mère, le H_2CO , en effet celui-ci serait un précurseur de deux tiers de CO. En revanche, son polymère se décompose en CO_2 et CO lorsqu'il est pyrolysé. Des analyses ont montré que le H_2CO produit par la dégradation du polyoxyméthylène serait une bonne explication à la source distribuée de CO, sous certaines conditions de cinétique de la dégradation du POM (Eberhardt, 1999). Finalement, aucune explication n'est certaine pour la source distribuée de CO, cela est probablement dû à la différence de composition entre les comètes et à la diversité des méthodes de mesures utilisées pour sonder les comae.

C'est dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake) que l'isocyanure d'hydrogène (HNC), qui est l'isomère du cyanure d'hydrogène (HCN), a été détecté pour la première fois (Irvine et al., 1998b). Celui-ci a été observé à des longueurs d'onde millimétriques (Irvine et al., 1998b). Sa distribution spatiale dans la coma a, par la suite, été mesurée dans la comète C/1995 O1 Hale-Bopp (Biver et al., 2002) (Irvine et al., 1998b) à partir d'observations interférométriques (Wink et al., 1997). Le HCN étant une molécule mère ne présentant pas source distribuée, le rapport HNC/HCN est un bon traceur d'une source distribuée de HNC. En effet, les espèces produites à partir d'une source distribuée présente une évolution du taux de production héliocentrique plus rapide que celle d'une molécule mère (Biver et al., 2002) (Irvine et al., 1998b). Une source distribuée de HNC a donc été mise en évidence par l'augmentation du rapport HNC/HCN pour les comètes C/1995 O1 Hale-Bopp (Biver et al., 2002), C/2002 C1 (Irvine et al., 2003) ainsi que pour d'autres comètes (Biver et al., 2006). Rodgers and

Charnley (1998), Irvine et al. (1998a) et Irvine et al. (1998b) ont développé un modèle chimique, impliquant l'isomérisation de HCN ($\text{HCN} + \text{H} \leftrightarrow \text{HNC} + \text{H}$), afin d'expliquer la distribution de HNC dans la comète C/1995 O1 Hale-Bopp. Cependant, ce mécanisme ne permet pas une production efficace de HNC dans les comètes donc l'activité est moins importante (Irvine et al., 2003; Rodgers and Charnley, 2001, 2005). Finalement, ces auteurs proposent un autre mécanisme dans lequel le HNC proviendrait de la dégradation d'un composé parent organique.

Bien que les radicaux soient produits à partir de la photodissociation de molécules mères dans la coma de la comète, certains d'entre eux présentent, en plus, une source distribuée. C'est par exemple le cas du radical cyanure (CN). L'idée que celui-ci soit produit à partir d'une source distribuée a émergé grâce aux observations de jets de CN dans la comète 1P/Halley (A'Hearn et al., 1986). De plus, des études sur l'existence d'une source additionnelle de CN ont déjà été publiées par Festou (1999) et Fray et al. (2005). Une partie des radicaux serait produite par la dissociation d'une molécule mère, mais ce mécanisme ne serait pas suffisamment efficace pour expliquer les abondances qui ont été observées. A'Hearn et al. (1986) et Lamy and Perrin (1988) émettent l'hypothèse que le radical CN est produit à partir de la dégradation de composés organiques réfractaires complexes présents sur les particules de poussières. L'hexaméthylènetétramine (HMT) aurait pu être un candidat parfait s'il n'avait pas été démontré que ce composé est relativement stable lorsqu'il est photolysé (Cottin et al., 2002), de plus, lorsqu'il est chauffé, le HMT sublime et ne subit pas de dégradation (Fray et al., 2004b). D'autres composés dont la dégradation thermique donnerait du CN ont été proposés : les polymères de HCN (Fray et al., 2004b) , le polyacrylonitrile (PAN) (Xue, 1997)(Xue, 1997)(Xue, 1997)(Xue, 1997)(Xue, 1997)(Xue, 1997)(Xue, 1997)(Xue, 1997) ou d'autres polymères azotés (Xue, 1997).

D'autres espèces présentent des sources distribuées dans les comètes, c'est par exemple le cas pour l'oxysulfure de carbone (OCS) (Russo et al., 1998), le monoxyde de soufre (SO) (Bockelée-Morvan and Rickman, 1997), le monosulfure de carbone (CS) (Biver et al., 2006), le monosulfure de monoazote (NS) (Irvine et al., 2000) et très récemment pour la glycine ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$) (Altwegg et al., 2016). Le cas de la glycine sera développé dans cette thèse.

3.2. Sources distribuées de formaldéhyde

Le formaldéhyde a été détecté pour la première fois en 1986 dans la comète 1P/Halley à partir du spectromètre infrarouge IKS, à bord de la sonde Vega 1. Suite à ces analyses, Combes et al. (1988) proposent une abondance de 4% par rapport à l'eau, alors que des observations dans le domaine radio ont conduit Snyder et al. (1989) à une abondance de 1.5%.

Les mesures du spectromètre de masse NMS (neutral mass spectrometer), à bord de la sonde Giotto, ont conduit à établir un profil de distribution radiale de H_2CO dans la comète 1P/Halley (Meier et al., 1993) (Eberhardt, 1999). Tel qu'on peut le voir sur la **Figure 1.30**, un modèle représentant la sublimation directe des glaces du noyau, c'est-à-dire sans source distribuée, ne permet pas de s'ajuster aux observations. Il existerait donc une source distribuée de H_2CO . Cette conclusion a été

appuyée par des observations effectuées dans le domaine radio dans les comètes C/1990 K1 (Levy), C/1989 X1 (Austin) (Colom et al., 1992) et C/1996 B2 (Hyakutake) (Biver et al., 1999), et par des observations interférométriques dans la comète C/1995 O1 Hale-Bopp ((Bockelée-Morvan et al., 2000; Wink et al., 1997) (Milam et al., 2006). Les observations de la comète de C/1995 O1 Hale-Bopp ont permis d'obtenir un taux de production en fonction de la distance héliocentrique. L'évolution héliocentrique des taux étant très rapide, il a été suggéré qu'une partie du H₂CO proviendrait d'une source distribuée (Biver et al., 2002; Bockelée-Morvan and Rickman, 1997).

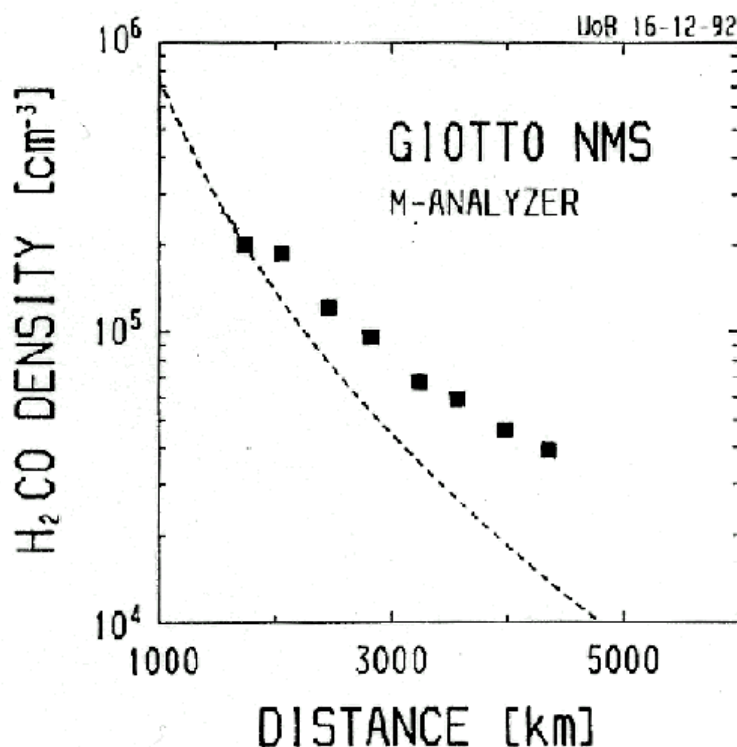


Figure 1.30: Profil de la densité de formaldéhyde en fonction de la distance au noyau dans la comète Halley. Les carrés représentent les mesures de la sonde spatiale, et les pointillées à un modèle sans source distribuée. Crédits : Meier et al. (1993).

Il a été proposé que le méthanol soit le précurseur du H₂CO distribué dans les comètes, mais dans le cas de la comète 1P/Halley, l'ajustement des observations nécessiterait une abondance de 16% du méthanol par rapport à l'eau (Cottin et al., 2004), alors celui-ci n'est produit qu'à un niveau de l'ordre de quelques pourcents dans les comètes (Bockelée-Morvan et al., 2004). De plus le H₂CO n'est pas le principal produit de la photodissociation du méthanol (Bockelée-Morvan et al., 1994), et donc des molécules comme CO, H₂O, CH₃O, devraient aussi présenter une source distribuée. Le H₂CO pouvant se polymériser en une longue chaîne linéaire (-CH₂O-n), appelée le polyoxyméthylène (POM), il a été proposé que celui-ci soit un bon candidat aux sources distribuées de H₂CO (Boice et al., 1990; Boice et al., 1989) (Meier et al., 1993) (Eberhardt, 1999). Bien qu'aucune détection claire de POM n'ait été faite à ce jour dans les comètes, Schutte et al. (1993) a montré que sa production est possible en laboratoire dans des certaines conditions simulant les glaces précométaires. L'historique des études

faites sur le POM sera discuté dans le chapitre 3. Cottin et al. (2000) et Fray et al. (2004b) proposent les premières données quantitatives concernant la production de H_2CO , à partir de la photodégradation et de la thermodégradation du POM solide. Ainsi, ils démontrent que le H_2CO et le CO sont les principaux produits de la photodégradation du POM, et que le H_2CO est la seule espèce produite à partir de thermodégradation du POM.

La production du H_2CO à partir de la dégradation thermique et photochimique du POM présent sur les particules de poussières éjectées du noyau a finalement été modélisée pour la distribution radiale de la comète 1P/Halley, et la distribution héliocentrique de la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) (Cottin et al., 2004; Fray et al., 2006) (**Figure 1.31**). Les observations sont assez bien reproduites par ces modèles et permettent une quantification de l'abondance de POM (en masse) dans les particules : 4% pour la comète 1P/Halley (Cottin et al., 2004) et 3% dans la comète de C/1995 O1 Hale-Bopp (Fray et al., 2006). Ainsi, à ce jour, la présence de POM à l'état solide sur les particules de poussières éjectées du noyau cométaire est la meilleure interprétation aux sources distribuées de formaldéhyde pour ces deux comètes.

Le formaldéhyde semblerait présenter ce comportement dans la plupart des comètes dans lesquelles il a été détecté. Des observations effectuées dans différentes comètes nous ont permis de continuer cette étude qui sera développée dans la suite de cette thèse.

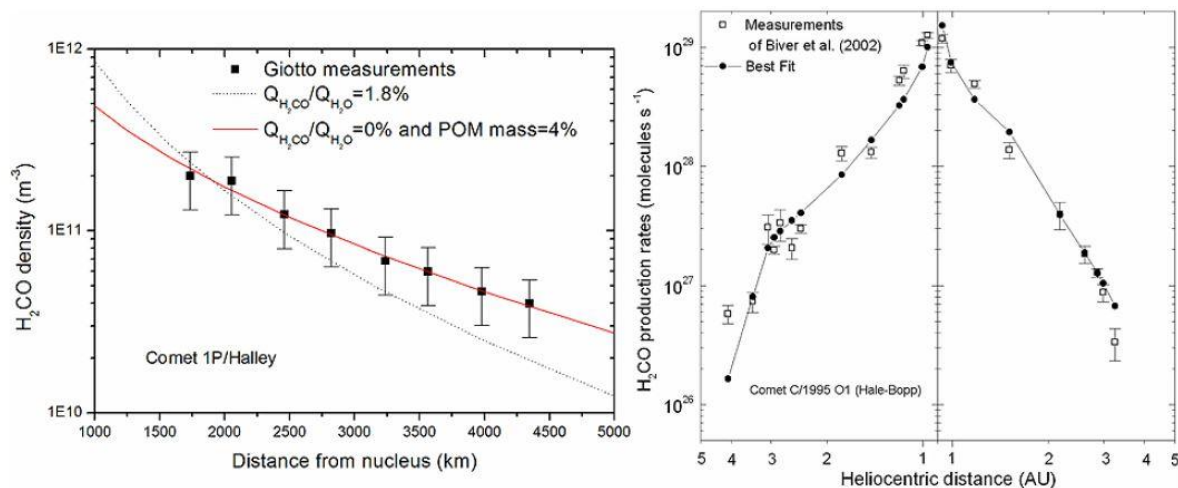


Figure 1.31: A gauche, le profil de densité radiale du H_2CO dans la comète de Halley. Les carrés représentent les mesures obtenues par la sonde Giotto, et la ligne continue le meilleur ajustement en considérant une source distribuée de formaldéhyde avec 4% de POM en masse sur les particules de poussières, et sans formaldéhyde éjecté du noyau. Les pointillés correspondent au meilleur ajustement sans source distribuée, avec 1,8% de H_2CO . Crédits : Cottin and Fray (2008). A droite, le profil de densité héliocentrique du H_2CO dans la comète de Hale-Bopp. Les carrés correspondent aux mesures d'observation, et les cercles pleins représentent le meilleur ajustement en utilisant une fraction massique de POM d'environ 3%. Crédits : Fray et al. (2006). (Fray et al., 2006)(Fray et al., 2006)(Fray et al., 2006)(Fray et al., 2006)(Fray et al., 2006)(Fray et al., 2006)(Fray et al., 2006)

3.3. Source distribuée de glycine

La glycine ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$), l'acide aminé le plus simple, et constituant du vivant par sa présence dans protéines, a été détectée en phase gazeuse par le spectromètre de masse ROSINA à bord de la sonde Rosetta dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko (Altwegg et al., 2016). En plus de la détection, le 28 Mars 2015, la sonde a mesuré un profil de distribution de la glycine en fonction de la distance au noyau, entre 15 et 26 kilomètres (**Figure 1.32**).

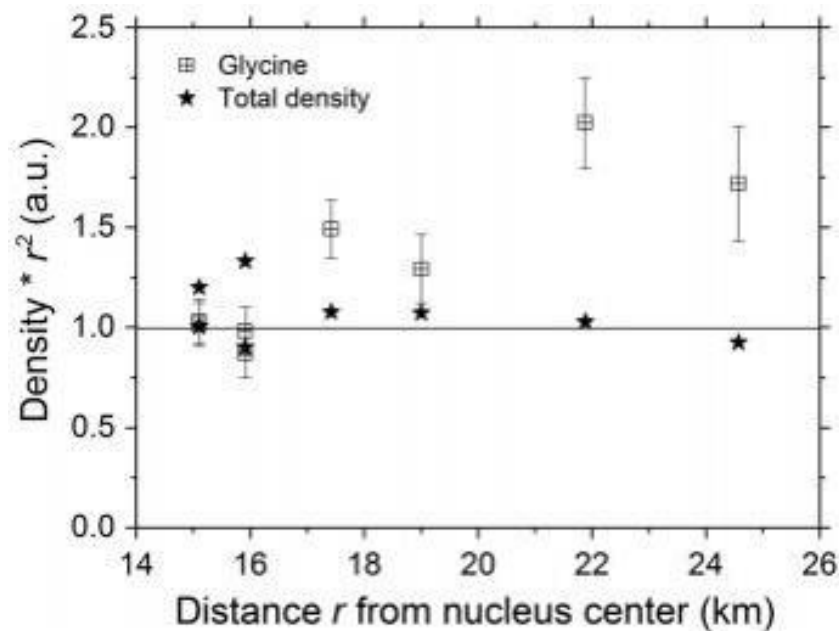


Figure 1.32: Profil de densité de la glycine multipliée par la distance au noyau au carré en fonction de la distance au noyau, mesuré dans l'atmosphère de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, par l'instrument ROSINA à bord de la sonde Rosetta, en Mars 2015. Les étoiles correspondent à la densité de gaz neutre totale, et les carrés représentent la densité de la glycine. Crédits : Altwegg et al. (2016).

La densité totale de gaz multipliée par la distance au noyau au carré est représentée par les étoiles sur la **Figure 1.32**. Dans le cadre d'une expansion radiale au sein de la coma, et d'une production à partir du noyau, ce profil de densité est relativement horizontal comme attendu. La glycine, représentée par les carrés, ne présente pas un profil similaire, mais une pente positive. On peut noter que la valeur de la densité. r^2 est multipliée par un facteur 2. Il peut ainsi être déduit de ces mesures que les observations de glycine ne peuvent pas être expliquées à partir de l'unique sublimation des glaces du noyau, une source distribuée serait à l'origine de la production additionnelle de la glycine dans la comète 67P (Altwegg et al., 2016). A ce jour, la meilleure explication aux observations correspond à une source distribuée de glycine à partir de la sublimation de glace d'eau présente sur les particules éjectées du noyau (Hadraoui et al., 2019). Ce travail auquel j'ai consacré une partie de ma thèse, sera détaillé dans le chapitre 4.

4. Conclusions et objectifs

Les comètes sont des petits corps célestes qui ont suscité bien des curiosités. Elles font parties des objets les plus primitifs du Système Solaire. Ainsi, l'intérêt de leur étude est double : planétologique d'une part et exobiologique d'autre part. En effet, la caractérisation de la composition des noyaux cométaires nous apporte des informations sur les conditions et processus physico-chimiques de formation et d'évolution de notre Système Solaire. De plus, il est possible que les comètes aient délivré sur la Terre primitive une partie de l'eau constituant les océans terrestres, et de la matière organique contribuant ainsi à l'émergence de la vie.

Les moyens d'étude cométaires sont divers et n'ont cessé d'évoluer depuis des siècles. Les connaissances scientifiques ont considérablement progressé, cependant il reste encore de nombreuses informations à découvrir. La composante organique de la phase gazeuse peut être analysée à partir d'observations depuis la Terre, mais ce n'est pas le cas pour la phase particulaire. L'étude des particules solides éjectées du noyau est rendu possible par des observations *in situ* lors de missions spatiales. En laboratoire, l'étude de l'évolution de résidus organiques synthétisés représente un apport d'informations complémentaire aux résultats des missions *in situ*.

De nombreuses molécules ont été détectées dans la phase gazeuse des comètes. Un grand nombre de celles-ci provient directement de la sublimation des glaces du noyau, cependant la distribution de certaines d'entre elles ne s'explique pas uniquement par ce processus. On parle alors de source distribuée. C'est notamment le cas pour deux molécules : le formaldéhyde et la glycine. Le formaldéhyde présente un comportement atypique dans la plupart des comètes dans lesquelles il a été détecté. Des profils de densité ont été obtenus pour les comètes C/2004 Q2 (Machholz), C/2001 Q4 (NEAT), 8P/Tuttle, C/1996 B2 (Hyakutake), C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon). La glycine présente également un profil de distribution particulier dans la comète 67P. Le but de ma thèse a été d'interpréter les observations qui ont été faites dans ces comètes, de définir s'il existe ou non une source distribuée dans chacune d'entre elles, et de proposer un mécanisme qui pourrait être à l'origine de ces comportements atypiques.

Le chapitre 2 décrit les observations des molécules de formaldéhyde et de glycine ainsi que le modèle numérique qui a été développé afin d'interpréter les observations. Le chapitre 3 détaille le cas de source distribuée de formaldéhyde, les mécanismes de formation de cette molécule et de son polymère, le polyoxyméthylène (POM), y sont précisés, et les résultats de modélisation seront présentés pour les six comètes. Enfin, le chapitre 4 porte sur la source distribuée de glycine dans la comète 67P, les différents mécanismes de formation seront d'abord discutés avant d'analyser les résultats de modélisation.

Chapitre 2 : Matériels et méthodes :

Observations et modélisation

Le formaldéhyde a été détecté pour la première fois dans la comète 1P/Halley à partir d'études radio (Snyder et al., 1989), infrarouge (Combes et al., 1988), (Combes et al. 1988) et par spectrométrie de masse (Eberhardt, 1999; Eberhardt et al., 1988; Huebner, 1987; Mitchell et al., 1987). Les premières détections dans le domaine millimétrique ont été obtenues par l'équipe du LESIA (observatoire de Meudon) dans laquelle j'ai travaillé au cours de ma thèse (Bockelée-Morvan and Crovisier, 1992; Colom et al., 1992). Depuis le formaldéhyde a été détecté dans des dizaines de comètes avec une abondance de 0.13 à 1.4% par rapport à l'eau (Bockelée-Morvan and Biver, 2017). Dans le cadre de ce travail, je me suis intéressée particulièrement aux comètes C/1996 B2 (Hyakutake), C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon), pour lesquelles la distribution spatiale a été observée. Quant à la glycine, elle a été récemment détectée dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko (Altwegg et al., 2016). Ces deux molécules présentent des profils d'abondance atypiques. Ceux-ci sont probablement causés par des sources distribuées que j'ai cherché à modéliser.

Dans un premier temps, je décrirai comment a été effectué le traitement de données afin de comprendre les profils de densité spatiale obtenus par la suite, puis je détaillerai les observations du formaldéhyde dans les comètes concernées, avant de traiter le cas de la glycine dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Les mécanismes et les équations différentielles pris en compte pour modéliser les sources distribuées de formaldéhyde et de glycine seront par la suite détaillés. Enfin, pour tenir compte de la diversité des particules cométaires impliquées dans la production des molécules observées, le modèle prend en compte des paramètres qui reflètent les propriétés physico-chimiques de l'environnement cométaire, telles que la distribution en taille des particules éjectées du noyau, des températures et des vitesses des particules. Ces différents paramètres d'entrée seront discutés dans la dernière partie.

1. Observations

1.1. Cas du formaldéhyde

Les mesures et les études menées notamment au sein des comètes 1P/Halley et C/1995 O1 (Hale-Bopp) ont mis en avant la présence de source distribuée de formaldéhyde. Ce phénomène semble être commun aux comètes C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon) pour lesquelles la présence d'une source distribuée a été mentionnée par Cordiner et al. (2014). Un premier travail a été de modéliser le cas d'une source distribuée de formaldéhyde à partir du même mécanisme qui a été proposé pour les comètes 1P/Halley et C/1995 O1 (Hale-Bopp) (Cottin et al., 2004; Fray et al., 2006), pour des données déjà traitées préalablement par Jérémie Boissier, chercheur à l'Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM). Par ailleurs, il est intéressant d'étudier le comportement de formaldéhyde au sein d'autres comètes. Un second travail a donc été de modéliser ce phénomène de sources distribuées dans d'autres comètes après avoir exploité les données de mesures brutes pour les rendre exploitables et compatibles avec mon modèle.

1.1.1. Observations depuis la Terre

De nombreuses détections de molécules dans les comètes ont été faites par le biais d'observations à distance. Tout corps émettant un rayonnement est détectable par le biais d'observations depuis la Terre, qu'il s'agisse d'un atome, d'une étoile, d'une galaxie, ou encore d'une comète. C'est pourquoi de nombreuses installations ont vu le jour dans différents domaines de longueur d'ondes détaillés dans le **Tableau 2.1**.

Rayonnement	Domaine de longueur d'onde (λ)
Gamma	$0,00001 \leq \lambda \leq 0,001$ nm
X durs	$0,001 \leq \lambda \leq 0,1$ nm
X mous (XUV)	$0,1 \leq \lambda \leq 10$ nm
Ultraviolets (UV)	$10 \leq \lambda \leq 400$ nm
Visible (VIS)	$380 \leq \lambda \leq 760$ nm
Infrarouge (IR)	$760 \text{ nm} \leq \lambda \leq 200 \text{ }\mu\text{m}$
Radio submillimétrique	$0.2\text{mm} \leq \lambda \leq 1\text{mm}$
Radio millimétrique	$1\text{mm} \leq \lambda \leq 1\text{cm}$
Radio centimétrique	$1\text{cm} \leq \lambda \leq 30\text{cm}$
Radio	$0.2\text{mm} \leq \lambda \leq 10\text{m}$

Tableau 2.1 : Domaines de longueurs d'ondes des différentes catégories spectrales.

Il existe deux types principaux de radiotélescopes : avec une antenne unique composée d'un réflecteur ou encore constitué de plusieurs antennes (interférométrie).

Les radiotélescopes à base de réflecteurs possèdent des caractéristiques communes avec les télescopes réfléchissants dans le principe du système réflecteur. Un rayon incident arrive sur un

réflecteur primaire qui va le diriger vers un miroir secondaire permettant ainsi la concentration du rayonnement vers un récepteur. Celui-ci permet de transformer le rayon incident émis par le corps observé en une onde numérisable et manipulable par les observateurs. Les sources astronomiques émettant de faibles signaux, il est nécessaire de collecter une grande quantité de flux, de ce fait les radiotélescopes présentent généralement des tailles importantes. De plus, la résolution spatiale est fonction de la taille du radiotélescope, en effet plus celui-ci est grand plus il est possible de sonder les zones les plus petites du ciel. Les tailles des radiotélescopes (sub-)millimétriques sont de l'ordre de la dizaine de mètres en général. Le **Tableau 2.2** présente les principaux radiotélescopes dans le domaine du (sub-)millimétrique.

Télescope	Diamètre	Domaine de fréquences	Lieu	Altitude
IRAM 30 m	30 m	80–290 GHz	Pico Veleta, Espagne	2920 m
JCMT	15 m	211–710 GHz	Mauna Kea, Hawaii	4092 m
CSO	10,4 m	200–920 GHz	Mauna Kea, Hawaii	4080 m
APEX	12 m	210–1400 GHz	Plateau de Chajnantor, Chili	5105 m
FCRAO	14 m	85–115 GHz	Massachusetts	150 m
NRAO	12 m	68–180 GHz	Kitt Peak, Arizona	1895 m
HHT	10 m	210–480 GHz	Mont Graham, Arizona	3186 m

Tableau 2.2 : Liste des principaux radiotélescopes observant dans le domaine du (sub-)millimétrique. Crédit : (Boissier, 2007)

L'interférométrie permet une meilleure résolution angulaire des observations, celle-ci est déterminée par la taille de l'ensemble du réseau de télescopes. Cette technique discerne des détails sur les corps observés. Le principe consiste à combiner des signaux collectés par des antennes individuelles, C'est une technique basée sur le fait de pouvoir faire interférer des ondes électromagnétiques.

Les données traitées dans cette thèse ont été obtenues à partir de trois radiotélescopes (**Figure 2.1**) : l'Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA), le télescope de 30m de l'Institut de Radio astronomie Millimétrique (IRAM) et le télescope James Clerk Maxwell. Le site d'ALMA se situe près du village de San Pedro de Atacama au Nord du Chili, dans une zone aride à 5000 mètres d'altitudes. Ce télescope est en fait un interféromètre puisqu'il est composé de 66 antennes réparties à des distances allant jusqu'à 16 kilomètres. Le radiotélescope de l'IRAM de 30m est situé sur la Sierra Nevada, en Espagne, près du Pico Veleta. Celui-ci a été construit à une altitude de 2850 mètres. Enfin, le télescope James Clerk Maxwell se trouve près du sommet de Mauna-Kea à Hawaï, à 4092 mètres d'altitude.

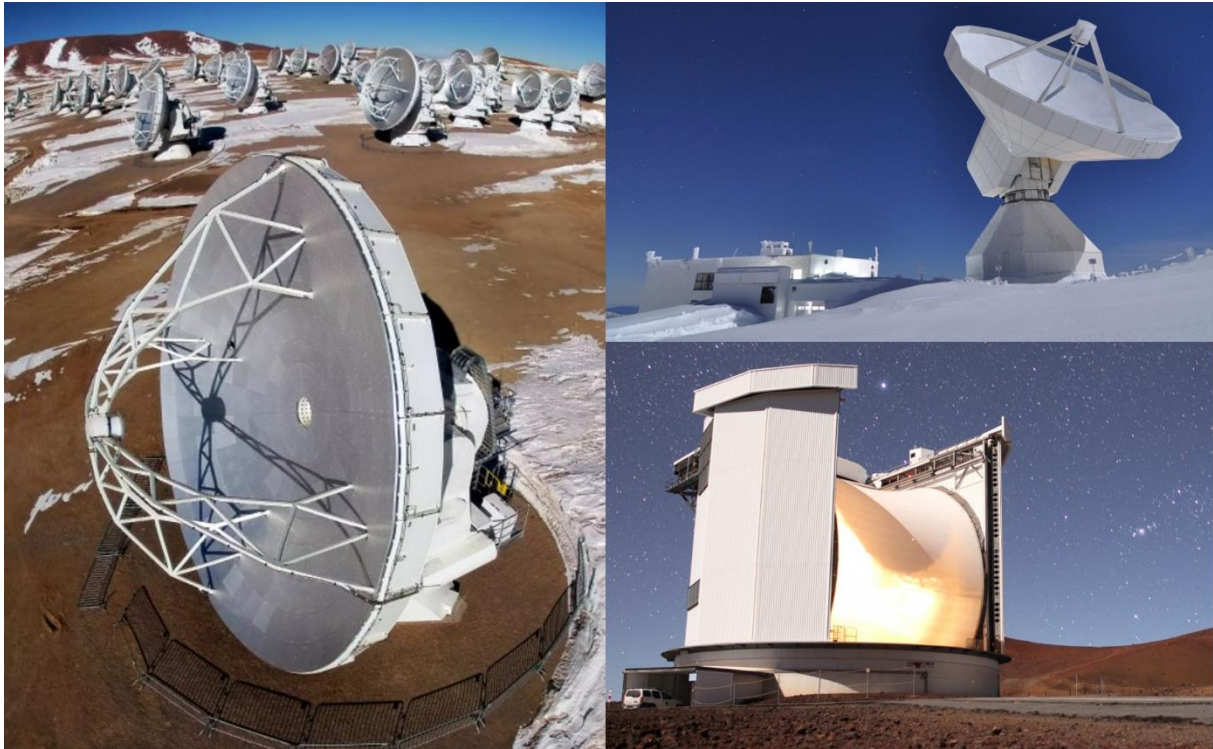


Figure 2.1: A gauche, vue de l'Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) prise depuis un hexaoptère télécommandé. Crédit : EFE/Ariel Marinkovic. En haut à droite, vue du télescope de 30m de l'Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM). Crédit : Nicolas Billot. En bas à droite, vue du télescope James Clerk Maxwell. Crédit : William Montgomerie.

Les molécules atmosphériques, telles que H_2O et O_2 sont des obstacles aux observations depuis le sol. Les rayonnements électromagnétiques provenant des corps lointains sont absorbés dans le domaine (sub-)millimétriques par ces molécules. Il est donc nécessaire d'effectuer les observations dans des fenêtres atmosphériques, c'est-à-dire dans les domaines de longueur d'ondes où l'absorption de ces molécules est faible, notamment à côté des raies atmosphériques de O_2 (à 118, 368, 425,... GHz) et de H_2O (183, 325, 380,... GHz) (**Figure 2.2**). La diminution de la transmission est d'autant plus importante dans les hautes fréquences lorsque la quantité d'eau précipitable dans l'atmosphère augmente. De manière générale, afin d'éviter les interférences liées aux molécules atmosphériques, les radiotélescopes millimétriques sont construits dans des zones sèches en haute altitude tel que c'est le cas pour l'Atacama Large Millimeter/submillimeter Array par exemple.

La méthode la plus précise afin de déterminer la production et l'évolution d'une espèce dans l'atmosphère cométaire consiste à mesurer sa distribution spatiale autour du noyau, soit son profil en fonction de la distance nucléocentrique (jusqu'à quelques milliers de kilomètres du noyau au moins).

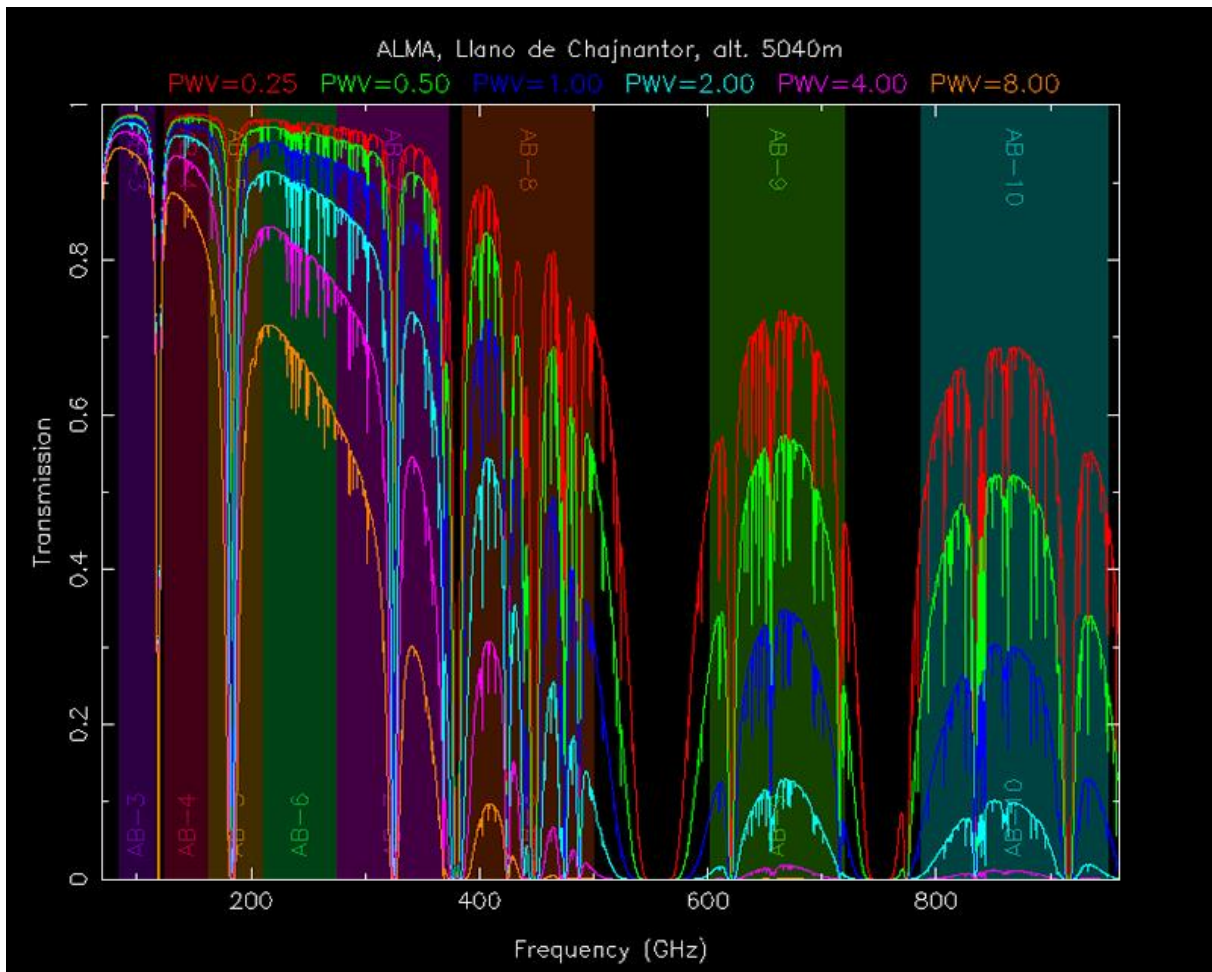


Figure 2.2 : Transmission atmosphérique sur le site d'ALMA en fonction de la fréquence et quantité de vapeur d'eau précipitable. Crédits ALMA : <https://almascience.eso.org/about-alma/atmosphere-model>)

1.1.2. Traitement des observations radio

1.1.2.1. Conversion des intensités des raies en densité colonne

A l'exception des comètes C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon) pour lesquelles les profils de densité colonne m'ont été fournis par J. Boissier, une étape de mon travail a été de convertir les intensités des raies mesurées lors des observations en taux de production de formaldéhyde puis en profils de densité colonne. Il a fallu dans un premier temps, pour les comètes C/1996 B2 (Hyakutake), C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), et 8P /Tuttle, calculer les taux de production à partir des aires de raies mesurées pour chaque observation. Les codes développés au LESIA (Bockelée-Morvan and Crovisier, 1992) et maintenus par Nicolas Biver (Biver et al., 1999), permettent de convertir les aires des raies mesurées sur les spectres qui m'intéressent en taux de production et densité colonne. Le processus se fait en deux étapes, la première consistant à calculer l'excitation des niveaux de rotation de la molécule de formaldéhyde, en utilisant les paramètres propres à chaque observation et chaque comète (fournis dans les tables ci-après). Le deuxième code calcule le transfert du rayonnement dans la coma pour la raie considérée et permet alors pour chaque observation (aire de

raie, distance géocentrique, taille du lobe de l'antenne, offset de pointage,...) de calculer une aire de raie et une densité colonne pour un taux de production donné.

Avant cela, il est important de moyennner les aires de raies sur différents offsets de pointage afin de travailler avec un bon rapport signal sur bruit. Un exemple est représenté sur la carte des raies obtenues pour la comète C/2004 Q2 (Machholz) (**Figure 2.3**).

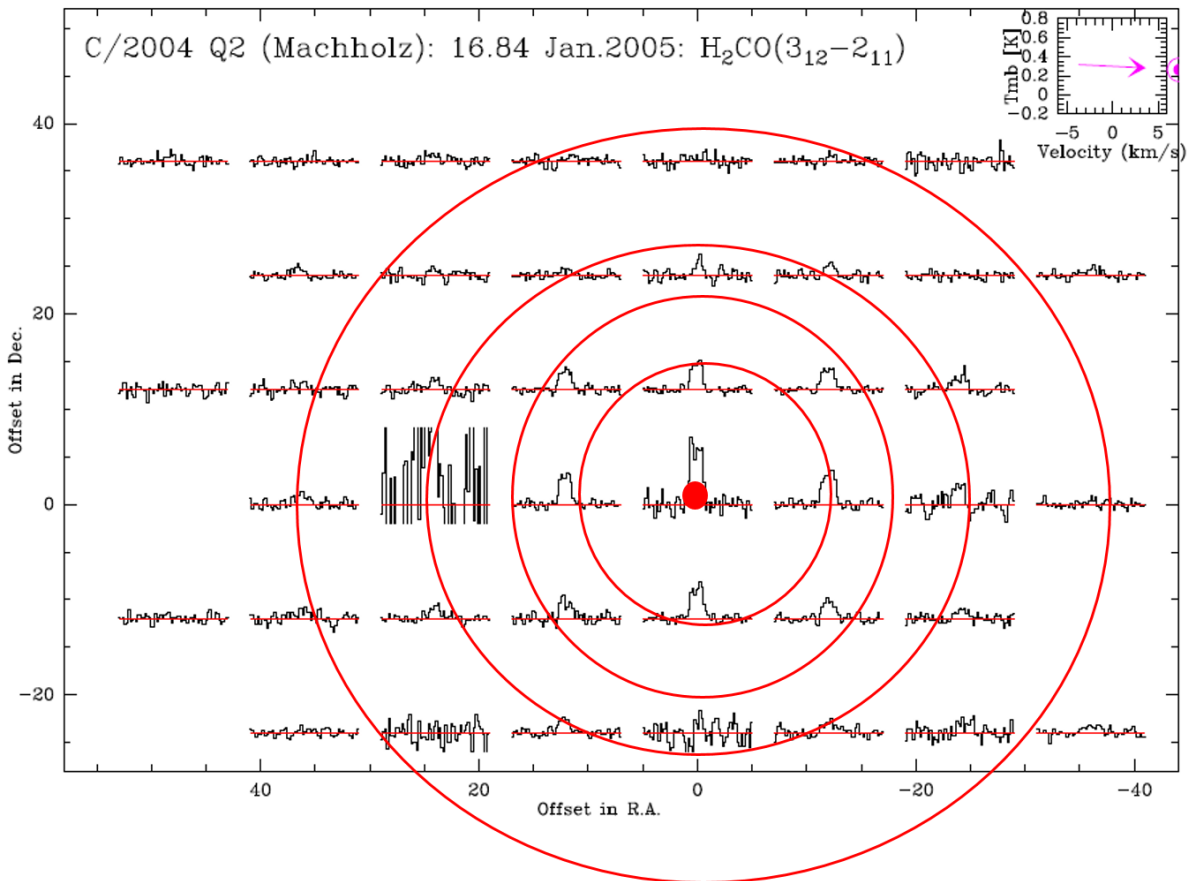


Figure 2.3 : Carte des aires de raie pour différents offsets de pointage dans la comète C/2004 Q2 (Machholz), le 16 mai. Les cercles rouges délimitent les régions où les spectres ont été moyennés les uns avec les autres. La flèche violette indique la direction du Soleil au moment de l'observation

La **Figure 2.4** est un schéma représentatif de la méthode utilisée pour remonter à la densité colonne. Dans les codes, il est important de fixer les paramètres propres à chaque comète, tels que le taux de production total d'eau, l'offset de pointage, la vitesse d'expansion des gaz, la distance héliocentrique, ou encore la distance géocentrique. Le principe est de partir d'un taux de production de formaldéhyde, afin d'obtenir une aire de raie et une densité colonne théorique. Si l'aire de raie théorique est similaire à celle calculée à partir des mesures d'observations, alors il est possible de remonter à la densité colonne observée. Si la densité de raie est différente, il suffit de recalculer avec un nouveau taux de production plus réaliste. Pour le calcul des aires de raies dans le code, il est possible d'émettre l'hypothèse que le formaldéhyde provienne à 100% (fraction étendue=0), en partie

ou pas (fraction étendue=1) du noyau. Ainsi, le travail a été fait pour ces deux cas différents extrêmes, l'un avec une fraction étendue nulle, et l'autre avec une fraction étendue égale à 1. Dans ce dernier cas la longueur d'échelle de Haser du parent de formaldéhyde (L_M , formule 6 partie 2.2.2) est supposée égale à 1.7 fois celle du formaldéhyde (Biver et al., 1999). Par la suite, les deux jeux de données de densité colonnes déduits sont moyennés et leur écart pris en compte dans les incertitudes.

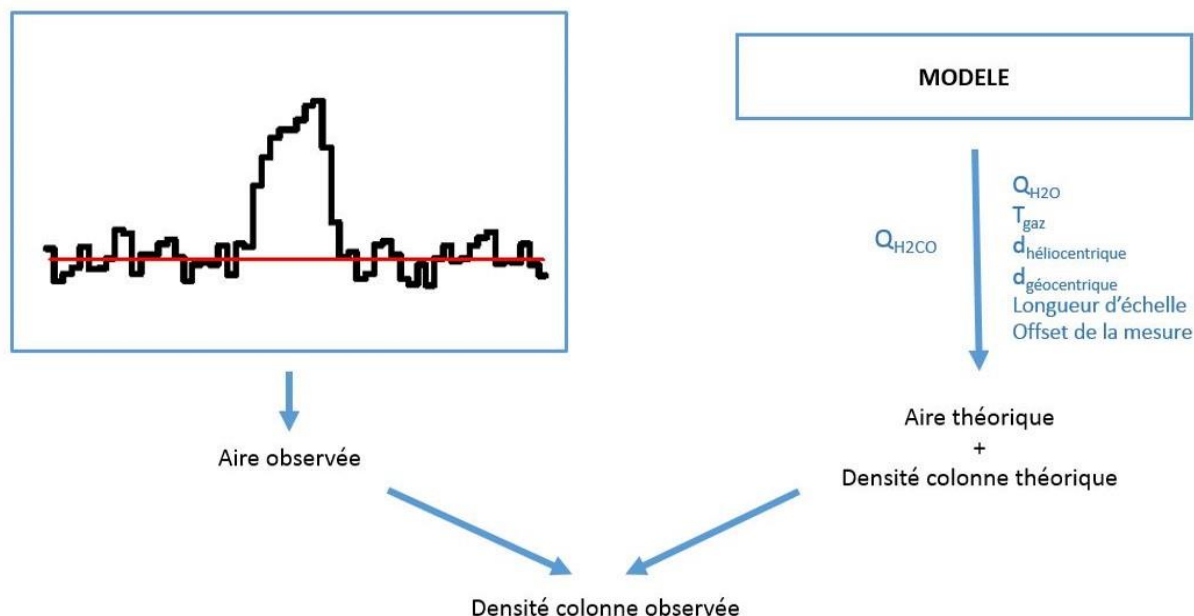


Figure 2.4 : Schéma explicatif du calcul de la densité colonne observée.

De plus, les observations ont été faites pour différents offsets angulaires de pointages estimés en seconde d'arc. Le modèle utilisé pour cette thèse me permet d'obtenir une distribution en fonction d'une distance au noyau en m. Il a donc également fallu estimer les deux en fonction de la distance au noyau projetée sur le ciel, qu'on appellera par la suite paramètre d'impact.

En partant des offsets de pointage angulaires, connaissant la distance géocentrique (à la terre) nous pouvons convertir les valeurs en distances métrique à partir des relations suivantes :

$$distance \text{ (radian)} = distance \text{ (offset)} \times \frac{\pi}{3600 \times 180}$$

$$distance \text{ (m)} = distance \text{ (radian)} \times distance \text{ géocentrique (m)}$$

1.1.2.2. L'incertitude totale

Plusieurs valeurs d'incertitudes ont été prises en compte :

- ✚ L'incertitude sur l'aire de raie mesurée lors des observations. Celle-ci est estimée lors du calcul de l'aire de raie de formaldéhyde observé. Les aires de raies ont été calculées à partir du logiciel CLASS, j'ai traité les jeux de données observations par observations. Pour chaque offset choisi,

j'ai défini la fenêtre de la raie (en général de -1.5 à +1.5 km/s, j'ai retiré une ligne de base ajustée en-dehors de cette fenêtre et calculé l'aire de la raie intégrée dans la fenêtre.

- ✚ Par la suite, l'incertitude sur l'aire de raie est recalculée comme incertitude sur la densité colonne à partir du code de conversion décrit ci-dessus. Ce n'est pas le cas pour les comètes C/1996 B2 Hyakutake, pour laquelle les erreurs sur les mesures sont déjà publiées dans Biver et al. (1999) , ni pour les comètes C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon) pour lesquelles les erreurs sur les mesures n'ont pas été trouvées dans la littérature.
- ✚ L'incertitude sur la moyenne entre les densités colonnes calculées pour une fraction étendue nulle et une fraction étendue égale à 1. Cette incertitude ne vaut pas pour les comètes C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon) pour lesquelles le modèle n'a pas été utilisé.
- ✚ L'incertitude de 10% sur le signal, celui-ci est dû à la calibration de l'instrument d'observation.

1.1.2.3. De la densité radiale à la densité colonne

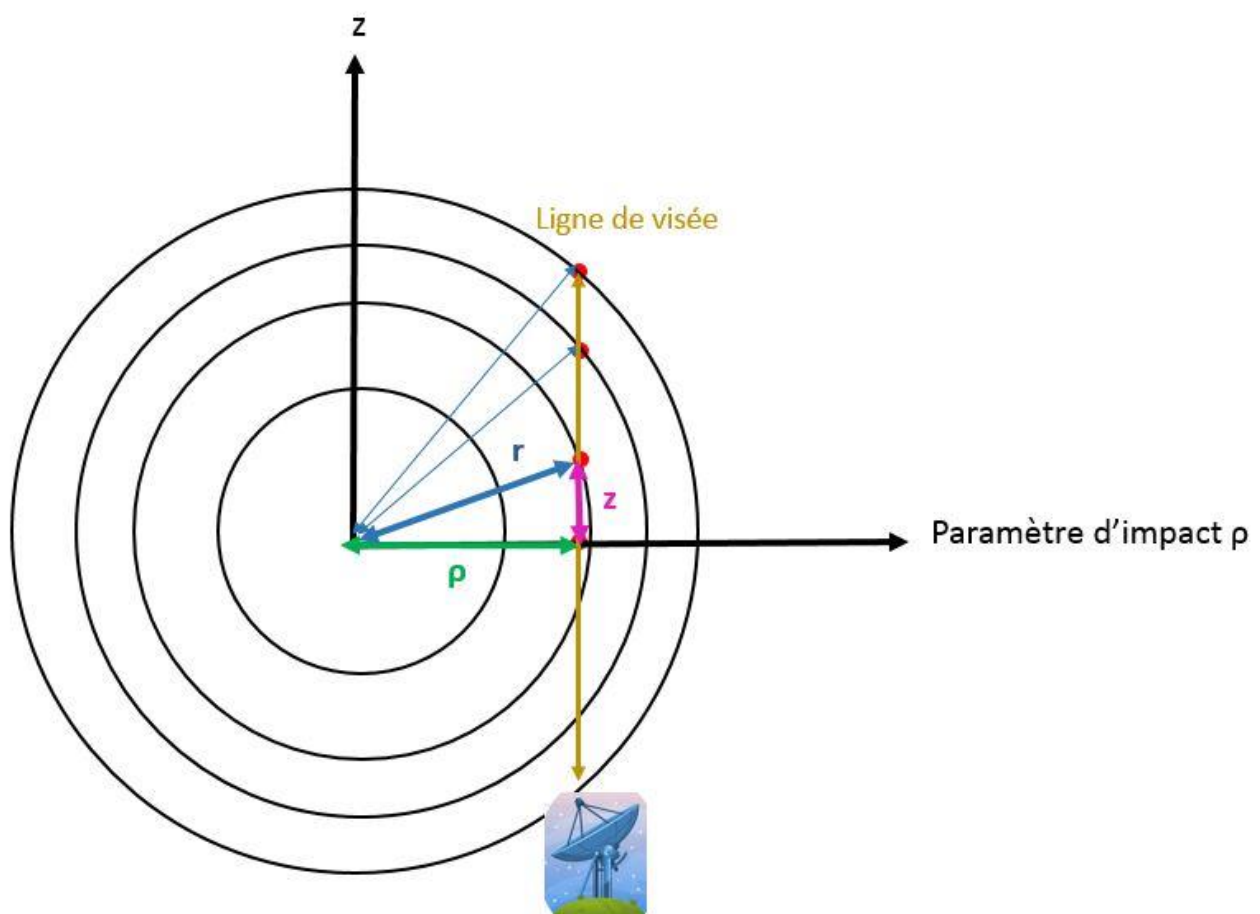


Figure 2.5 : Schéma illustrant les différents paramètres utiles pour calculer les densités colonnes. Les points rouges correspondent à des densités volumiques pour des distances r au noyau en m, ces valeurs sont calculées par mon modèle. ρ représente les paramètres d'impact, pour lesquels les densités colonnes ont été observées. z correspond à la ligne de visée.

Finalement, pour chaque comète nous avons obtenu un profil de densité colonne en fonction d'un paramètre d'impact. Or, le modèle que j'ai programmé calcule une densité volumique. Afin de pouvoir comparer mes résultats, calculés à partir de mon modèle, aux observations, il a été nécessaire de convertir les densités volumiques en densité colonne. La **Figure 2.5** illustre les différents paramètres nécessaires au calcul de la densité colonne.

Afin de remonter à la densité colonne, il faut calculer la somme des densités volumiques sur différentes parcelles de la ligne de visée z , le calcul n'étant fait que sur la moitié de la ligne de visée, il est nécessaire de multiplier le tout par deux :

$$\text{densité colonne} = 2 \times \sum \text{densités volumiques} * (z_2 - z_1)$$

Avec

$$z = \sqrt{r^2 - \rho^2}$$

1.1.3. Comètes C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon)

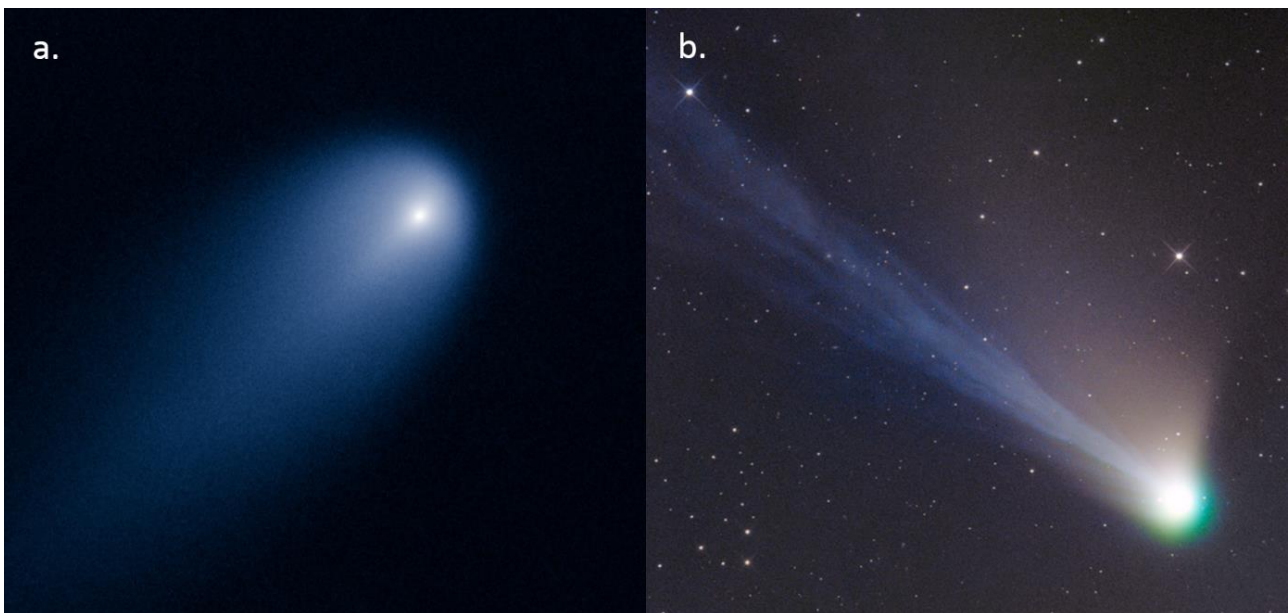


Figure 2.6: a. Photo de la comète C/2012 S1 (ISON) par le télescope spatial Hubble de la NASA le 10 Avril 2013. A cette période, la comète se trouvait proche de l'orbite de Jupiter. Crédit : NASA, ESA, J.-Y. Li (Planetary Science Institute), and the Hubble Comet ISON Imaging Science Team. b. Photo de la comète C/2012 F6 (Lemmon) prise par un astronome amateur mi-avril, dans le ciel de Namibie lorsque celle-ci se dirigeait vers le système solaire interne. La couleur verte de la coma est due à la présence du radical C_2 . Crédits : APOD NASA/Gerald Rhemann.

Originaires du nuage d'Oort, la comète C/2012 S1 (ISON) (**Figure 2.6.a**) a été découverte en Septembre 2012 à l'aide d'un télescope de l'International Scientific Optical Network (ISON) en Russie. Cette comète arrivait directement du Nuage de Oort avec une période supérieure à 1 million d'années. Elle a été qualifiée de comète de type « sungrazing » (comète rasante), c'est-à-dire qui passe très près du Soleil lors de son passage au périhélie. Elle est passée à une distance proche de 0.013 UA du Soleil, atteignant son périhélie le 28 Novembre 2013. C'est d'ailleurs au terme de son approche au Soleil, fin Novembre 2013 que la comète s'est désintégrée. La comète C/2012 F6 (Lemmon) (**Figure 2.6.b**) provient, elle aussi, du nuage d'Oort. Elle a été découverte en Mars 2012 à partir du télescope du Mount Lemmon Survey qui se situe au sommet du mont Lemmon en Arizona. Cette comète présente une longue période, d'environ 11 000 ans. Elle atteint son périhélie le 24 Mars 2013.

Ces comètes ont été observées le 17 Novembre 2013 pour la comète C/2012 S1 (ISON), et les 1^{er} et 2 juin pour la comète C/2012 F6 (Lemmon), en utilisant l'Atacama Large Millimeter/Submillimeter Array (ALMA) à des distances héliocentriques respectives de 0,54 UA et 1,5 UA. D'autres paramètres utiles correspondant à ces observations sont donnés dans le **Tableau 2.3**.

Le rapport poussières sur gaz a également été estimé pour ces deux comètes à partir du paramètre d'activité de la poussière A_{fp} et de la quantité totale de poussières. A'Hearn et al. (1995) donnent une formule de conversion approximative du paramètre A_{fp} en taux de production de poussières : 1cm correspond à 1kg/s. Il ne s'agit là que d'avoir un ordre de grandeur approximatif du rapport taux de production de poussières sur taux de production gazeuse d/g pour avoir une idée des valeurs plausibles. Mais sans mesure plus directe de la production des poussières incluant les grosses poussières, par exemple à partir d'observations dans les domaines millimétrique-centimétrique, on peut très bien avoir un écart d'un ordre de grandeur. Le paramètre A_{fp} a l'avantage d'être facilement mesuré, au moins à un facteur 2 près, et disponible dans des circulaires ou bases de données, notamment amateur (<http://www.observadores-cometas.com> ou <http://cara.uai.it>)

Concernant la comète C/2012 S1 ISON, il existe de nombreuses mesures: $A_{fp}=600$ cm le 11 novembre 2013 (Knight and Schleicher, 2014), $Q_{\text{poussières}}=1000$ à 10 000 kg/s à une distance de 0,5 UA (Moreno et al., 2014), $A_{fp}=2400$ cm le 14 novembre (Crovisier et al., 2013), $A_{fp}=5820$ cm le 21 Novembre (Lisse et al., 2013) et $A_{fp}=10\ 000$ cm le 17 novembre (base de données amateur). En considérant un $Q_{\text{H}_2\text{O}}$ entre 1 et 3.10^{29} , le rapport poussières sur gaz est estimé entre 0,5 et 1,5. Pour la comète C/2012 F6 (Lemmon), les mesures de A_{fp} prennent les valeurs de 3200 cm le 15 mai 2013 (Opitom et al., 2013) avec un $Q_{\text{H}_2\text{O}}=3.10^{29}\text{s}^{-1}$ (Combi et al., 2014), et de 2500 cm le 1^{er} Juin (base de données amateur) pour un $Q_{\text{H}_2\text{O}}=2.10^{29}\text{s}^{-1}$ (Combi et al., 2014), cela donne un rapport poussières sur gaz entre 0,4 et 1. Les observations ont été effectuées à l'aide du récepteur ALMA band 7, fourni par l'Institut de Radio Astronomie Millimétrique (IRAM). La bande 7 permet la détection pour des gammes de longueurs d'onde entre 0,8 à 1,1 mm, soit pour des fréquences entre 275 et 373 GHz. La résolution spatiale variait entre 0,4 et 0,9'' (Cordiner et al., 2014). La raie $5_{1,5}-4_{1,4}$ du formaldéhyde à la fréquence de 351,769 GHz a été détectée.

Les intensités de flux intégrés spectralement pour le formaldéhyde sont présentées sur la **Figure 2.7** (Cordiner et al., 2014). La comète C/2012 S1 (ISON) présente un pic central de forte intensité qui domine la distribution de formaldéhyde, et les contours sont relativement symétriques, ce qui n'est pas le cas de la comète C/2012 F6 (Lemmon) pour laquelle la distribution de formaldéhyde est relativement plate et étendue. De plus deux pics d'émission semblent présents. Les différences de distribution de formaldéhyde d'une comète à l'autre reflètent la complexité de cette molécule.

Comètes	C/2012 S1 ISON	C/2012 F6 LEMMON
Date	17 Novembre 2013	1, 2 Juin 2013
Distance héliocentrique (UA)	0.54	1.47
Constante de photolyse de H ₂ CO (/s)	6,86. 10 ⁻⁴	9,26.10 ⁻⁵
Distance géocentrique (UA)	0,88	1,75
Taux de production d'eau (molec/s)	3,60.10 ²⁹	9,00.10 ²⁹⁽²⁾
Vitesse du gaz (km/s)	1	0,7
Température des gaz (K)	90	55
Références	(Biver et al., 2014; Combi et al., 2014; Cordiner et al., 2014)	
Poussières/gaz	0.5-1.5	0.4-1

Tableau 2.3 : Paramètres des observations des comètes C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon).

La distribution du flux du formaldéhyde est rendue plus évidente à partir du profil de flux azimutal moyen en fonction de la distance à la comète. Plus précisément, c'est la moyenne azimutale du flux (moyenne sur l'angle polaire de 0 à 360°) en fonction du rayon ρ = distance au centre ou paramètre d'impact. Ce profil est représenté sur la **Figure 2.8** pour chaque comète, et est comparé avec les profils de HCN et HNC, ainsi que le continuum. Les profils représentés sont impactés par les pertes de flux dus à l'absence de ligne de base courte. Plus les distances cométocentriques sont grandes et plus les pertes de flux sont importantes. Pour chaque cas, le profil du HCN a été pris comme origine, sauf pour les cartes du continuum pour lesquelles le continuum est utilisé comme référence. C/2012 F6 (Lemmon) montre une distribution de formaldéhyde très étendue et relativement large comparée au profil du cyanure d'hydrogène (HCN), alors que C/2012 S1 (ISON) présente une courbe de formaldéhyde se trouvant à l'intérieur de celle du HCN, ce qui semble logique puisqu'à une distance de 0,54 UA, la durée de vie du formaldéhyde est plus courte que celle de HCN (Huebner et al., 1992).

² Au cours des ultimes étapes de rédaction du manuscrit j'ai trouvé une référence de vitesse de production plus appropriée pour la date des observations modélisées qui serait de 2.10^{29} s^{-1} Combi, M., Bertaux, J.-L., Quémerais, E., Ferron, S., Mäkinen, J., Aptekar, G., 2014. Water Production in Comets C/2011 I4 (PanSTARRS) and C/2012 f6 (Lemmon) from observations with SOHO/SWAN. The Astronomical Journal 147, 126..

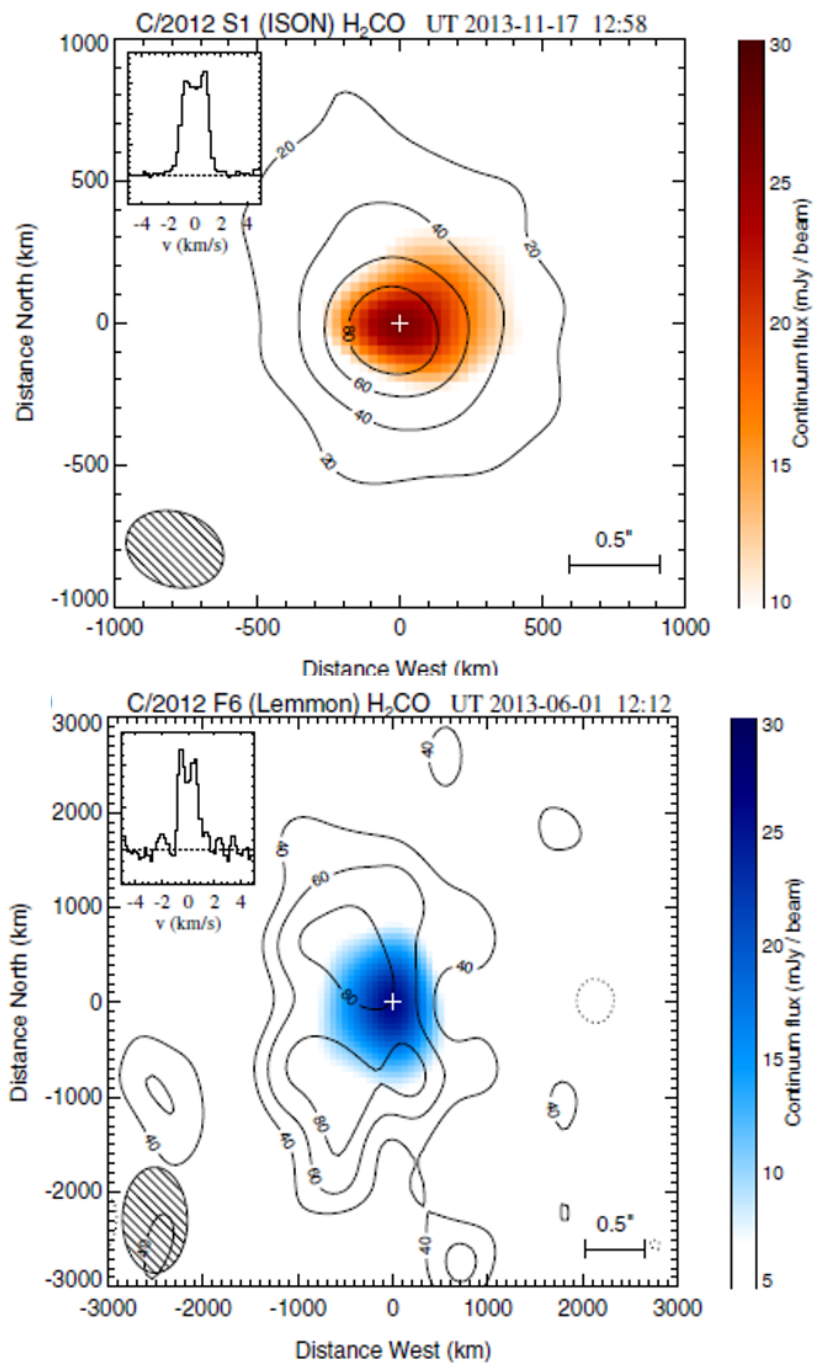


Figure 2.7 : Carte niveau d'intensité de H₂CO intégrés sur la raie pour la comète C/2012 S1 ISON, en orange, le 17 Novembre 2013 à 12h58, et pour la comète C/2012 F6 Lemmon, en bleu, le 1^{er} Juin 2013 à 12h12. Les intervalles entre chaque courbe correspondent à 20% de l'intensité du pic. Le nuage (orange ou bleu) représente le flux continuum observé, et les échelles de flux sont indiquées à droite. La croix blanche montre la position du pic du continuum. Le spectre en haut à gauche représente l'intensité du signal fonction de la vitesse de la comète pour la position centrale, la ligne horizontale en pointillé correspond au niveau zéro du flux. Les ellipses hachurées en bas à gauche correspondent au lobe synthétique (résolution spatiale) de l'interféromètre pour ces observations. Crédits : Cordiner et al. (2014)

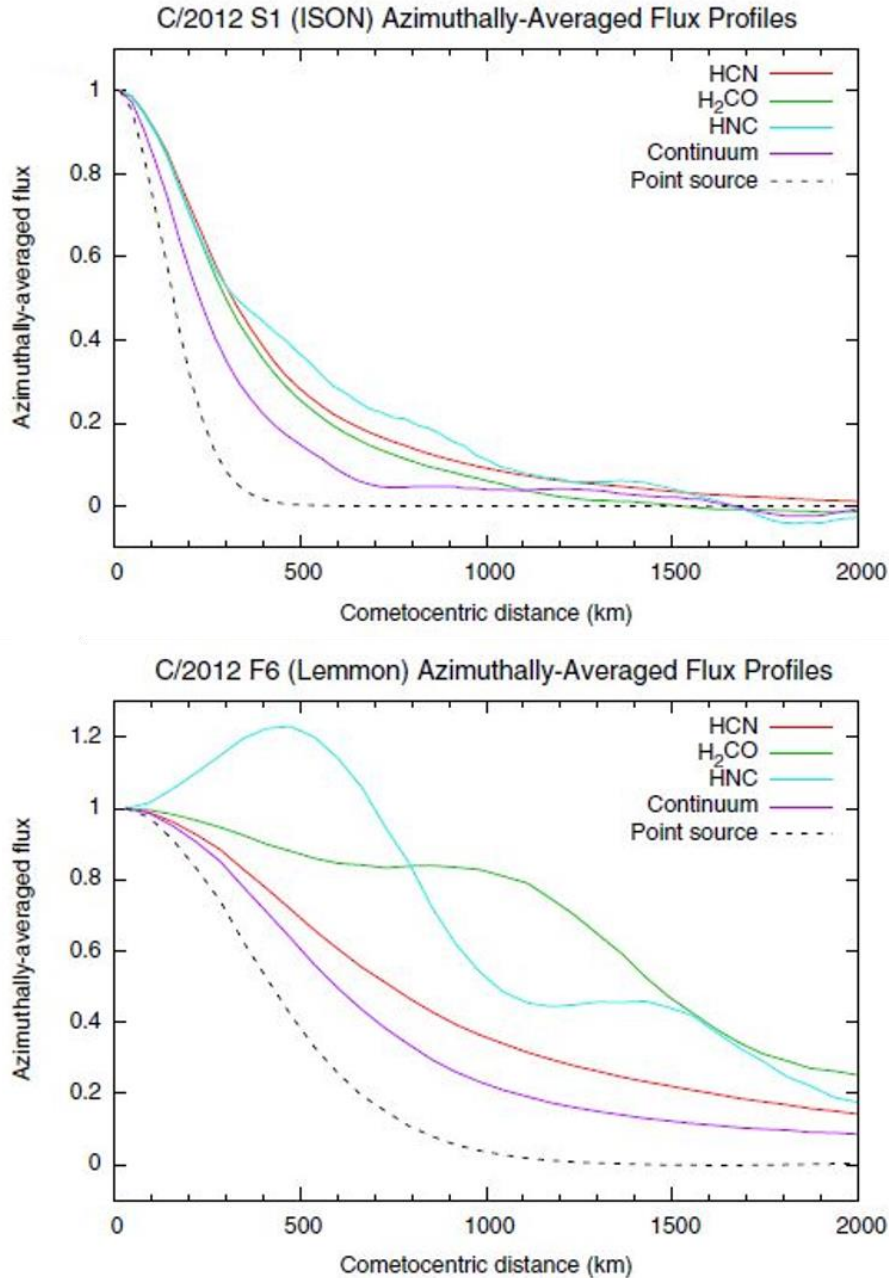


Figure 2.8 : Profils de flux azimuthal moyen pour la comète C/2012 S1 (ISON) (en haut), et la comète C/2012 F6 (Lemmon) (en bas). Les profils ont été normalisés. Les pointillés correspondent au profil d'une source ponctuelle, à 354 GHz. Crédits : Cordiner et al. (2014).

La comparaison des profils de HCN et du formaldéhyde soulignent la présence d'une source distribuée pour les deux comètes. La différence entre les allures des profils de formaldéhyde et de HCN est bien plus évidente au sein de la comète C/2012 F6 (Lemmon) que dans la comète C/2012 S1 (ISON). Cordiner et al. (2014) ont modélisé différents cas d'émission de formaldéhyde avec différentes longueurs d'échelles pour la molécule mère montrant ainsi que celui-ci pourrait être formé à partir de la destruction par photolyse ou par dégradation thermique d'une molécule organique inconnue ou d'un polymère de faible masse (Biver et al., 1999).

Ne pouvant pas traiter ces observations telles quelles, les densités colonnes de ces deux comètes m'ont été fournies par Jérémie Boissier. Les profils de densités colonnes en fonction de la distance au noyau projetée sur le ciel (paramètre d'impact, qui correspond à la distance minimum à laquelle le noyau a été visé) sont tracés sur la **Figure 2.9**.

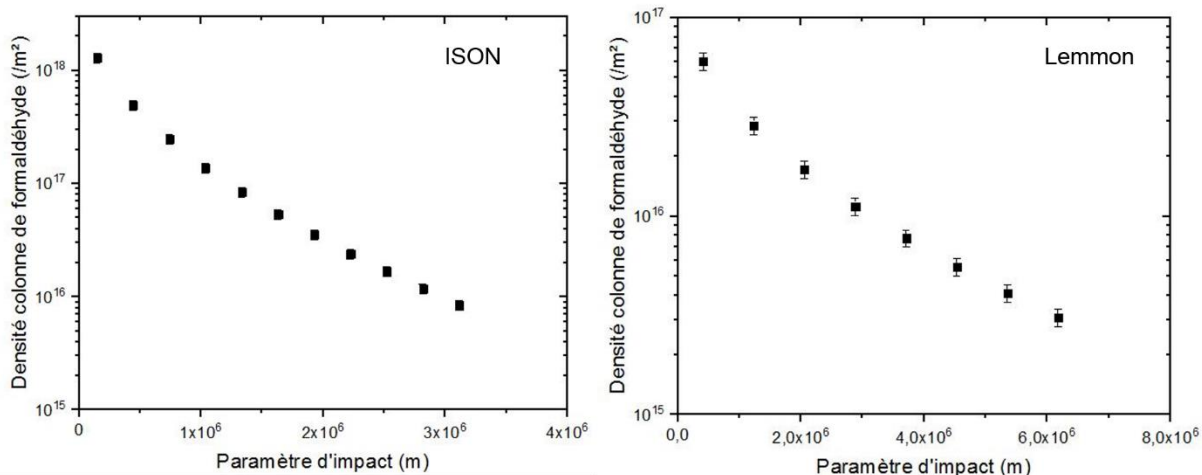


Figure 2.9 : Densité colonne de H_2CO en fonction du paramètre d'impact dans les comètes C/2012 S1 (ISON) (à gauche) et C/2012 F6 (Lemmon) (à droite) adaptés par Jérémie Boissier des données de Cordiner et al. (2014).

1.1.4. C/1996 B2 (Hyakutake)



Figure 2.10 : Photo de la comète C/1996 B2 (Hyakutake) le 26 Mars 1996 à son approche la plus proche de la Terre (soit un dixième de la distance Terre-Soleil). Crédits : APOD NASA/Doug Zubenel (TWAN).

HCN AND H₂CO MAPPING DATA
A. JCMT

MEAN UT DATE	INTEGRATION TIME (minutes)	MEAN OFFSET ^a (arcsec)	$\int T_b dv$ (K km s ⁻¹)	
			H ₂ CO (5 ₁₅ -4 ₁₄)	
Mar 16.50.....	22	2.9 ± 0.0	0.96 ± 0.07	
Mar 16.55.....	7	4.3 ± 0.3	1.12 ± 0.13	
Mar 16.58.....	10	7.6 ± 0.1	0.54 ± 0.11	
Mar 16.56.....	15	10.7 ± 0.6	0.60 ± 0.07	
Mar 16.53.....	20	14.3 ± 0.0	0.55 ± 0.07	
Mar 16.53.....	10	16.9 ± 0.0	0.41 ± 0.10	
Mar 16.56.....	10	25.1 ± 0.0	0.45 ± 0.10	
Mar 16.56.....	20	28.1 ± 0.1	0.28 ± 0.08	
Mar 16.56.....	10	30.9 ± 0.0	0.22 ± 0.10	
Average along Sunward (P.A. = 225°) Direction				
Mar 30.26.....	13	-46 ± 2	0.37 ± 0.10	
Mar 30.24.....	10	-36 ± 2	1.12 ± 0.13	
Mar 30.23.....	10	-26 ± 2	0.85 ± 0.12	
Mar 30.20.....	10	-16 ± 2	1.49 ± 0.17	
Mar 30.19.....	10	-6 ± 2	2.12 ± 0.16	
Mar 30.20.....	10	+6 ± 0	1.97 ± 0.13	
Mar 30.19.....	10	+15 ± 2	1.53 ± 0.17	
Mar 30.20.....	10	+25 ± 2	1.87 ± 0.16	
Mar 30.23.....	10	+35 ± 2	0.70 ± 0.13	
Mar 30.24.....	10	+45 ± 2	0.26 ± 0.14	
Mar 30.26.....	10	+55 ± 2	0.52 ± 0.12	
Average along Sunward (P.A. = 225°) Direction				
Mar 31.28.....	10	-38.7 ± 0.7	0.01 ± 0.36	
Mar 31.20.....	10	-26.7 ± 0.5	0.32 ± 0.13	
Mar 31.19.....	10	-17.4 ± 0.5	0.91 ± 0.15	
Mar 31.22.....	20	-8.5 ± 0.8	1.98 ± 0.13	
Mar 31.20.....	10	+2.1 ± 0.0	2.61 ± 0.17	
Mar 31.22.....	20	+11.9 ± 1.8	1.31 ± 0.14	
Mar 31.19.....	10	+23.0 ± 0.4	0.78 ± 0.12	
Mar 31.20.....	10	+33.8 ± 0.6	0.25 ± 0.13	
Mar 31.28.....	10	+41.4 ± 0.6	0.01 ± 0.37	
Apr 28.90.....	10	3.1 ± 0.0	...	
Apr 28.89.....	40	4.9 ± 1.7	...	
Apr 27.95.....	10	5.9 ± 0.1	...	
Apr 27.90.....	53	8.1 ± 0.1	...	
Apr 27.95.....	10	14.0 ± 0.3	...	
May 17.82.....	60	4.7 ± 1.2	0.17 ± 0.05	
May 17.81.....	60	10.2 ± 2.4	0.15 ± 0.05	

Tableau 2.4 : Mesures de l'intensité de H₂CO à partir du télescope James Clerk Maxwell, pour les dates du 16, 30, et 31 Mars, du 28 et 29 Avril, ainsi que du 17 Mai. Crédits : Biver et al. (1999).

La comète C/1996 B2 (Hyakutake) (**Figure 2.10**) a été détectée le 10 Février 1996, à partir du télescope James Clerk Maxwell (JCMT), dans le domaine de longueur d'ondes radio (Senay et al., 1996). Par la suite, des observations sur alerte ont été programmées avec l'interféromètre de l'IRAM (Institut de Radioastronomie Millimétrique) du plateau de Bure, et avec le radiotélescope de 30 m de l'IRAM à partir du 10 Avril 1996. Les observations à partir du radiotélescope de 30m ont été prolongées jusqu'au 1^{er} Juin 1996.

Comètes	C/1996 B2 (HYAKUTAKE)	
Date	30 Mars 1996	31 Mars 1996
Distance héliocentrique (UA)	0,94	0,91
Constante de photolyse de H ₂ CO (/s)	2,47. 10 ⁻⁴	
Distance géocentrique (UA)	0,19	0,22
Taux de production de gaz (molec/s)	3,00.10 ²⁹	
Vitesse des gaz (km/s)	0,83	0,84
Température des gaz (K)	75	
Référence	(Biver et al., 1999)	
Rayon du noyau (km)	1,5 (Harmon et al., 1997)	
Poussières/gaz	1-4	

Tableau 2.5 : Paramètres mesurés lors des observations de la comète C/1996 B2 (Hyakutake).

Le formaldéhyde a été observé entre le 22 et 29 Mars avec les 4 antennes de l'interféromètre utilisé en mode parabolique unique (Biver et al., 1999). Des cartographies ont été réalisées les 16, 30 et 31 Mars à partir du JCMT (**Tableau 2.4**). De plus, des données supplémentaires ont été obtenues le 15 Avril, le 28 Avril, le 29 Avril et le 17 Mai, celles-ci sont également présentées dans le **Tableau 2.4**, et permettent de remonter aux taux de production du formaldéhyde. Les intensités sont principalement des moyennes azimutales de 4 points. Les mesures du 30 et 31 Mars ont été effectuées pour des distances géocentriques plus faibles, les paramètres notables lors de ces observations sont résumés dans le **Tableau 2.5**, et les cartes de raies correspondantes sont présentées sur les **Figures 2.10** et **2.11**. A ce moment, la comète présentait une activité importante dans la direction antisolaire. Pour ces deux dates, les moyennes ont été réalisées à partir de points mesurés à 45° dans les directions vers le Soleil, et antisolaires. Enfin, le rapport poussières sur gaz a été estimé à partir de mesures de la quantité totale de poussières dans la comète. Celle-ci est estimée à 28 000 kg.s⁻¹ (Jewitt and Matthews, 1997) le 23 mars, et environ 10 000 kg.s⁻¹ autour du 31 mars (Fulle et al., 1997). Ces valeurs correspondent à un intervalle du rapport poussières sur gaz entre 1 et 4.

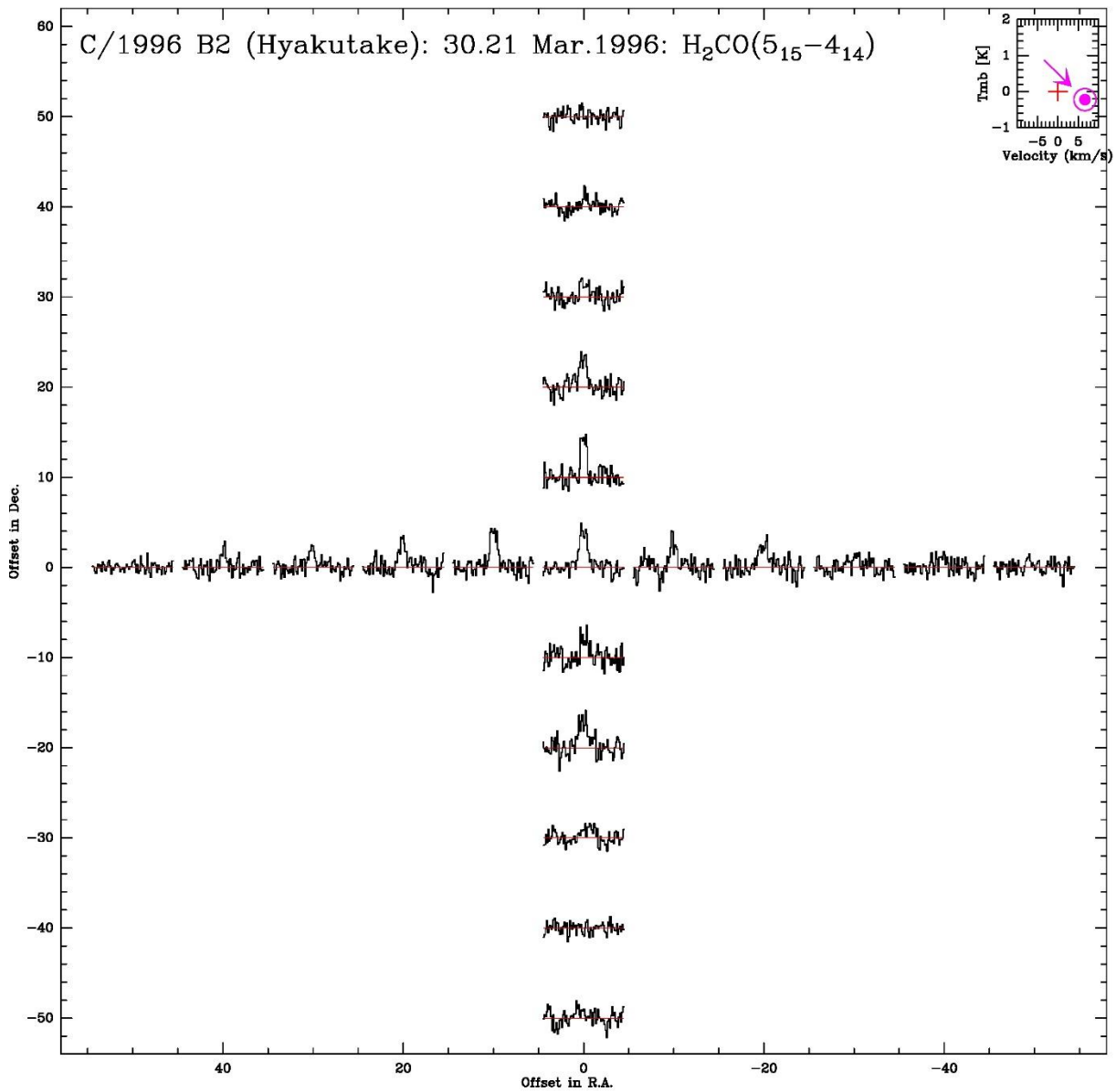


Figure 2.10 : Carte des aires de raie pour différents offsets de pointage dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake), le 30 mars. Les lignes rouges correspondent aux lignes de base. La flèche mauve en haut à droite indique la direction du Soleil. Le cadre en haut à droite donne les échelles en intensité et vitesse doppler relative au noyau pour chacun des spectres de la carte.

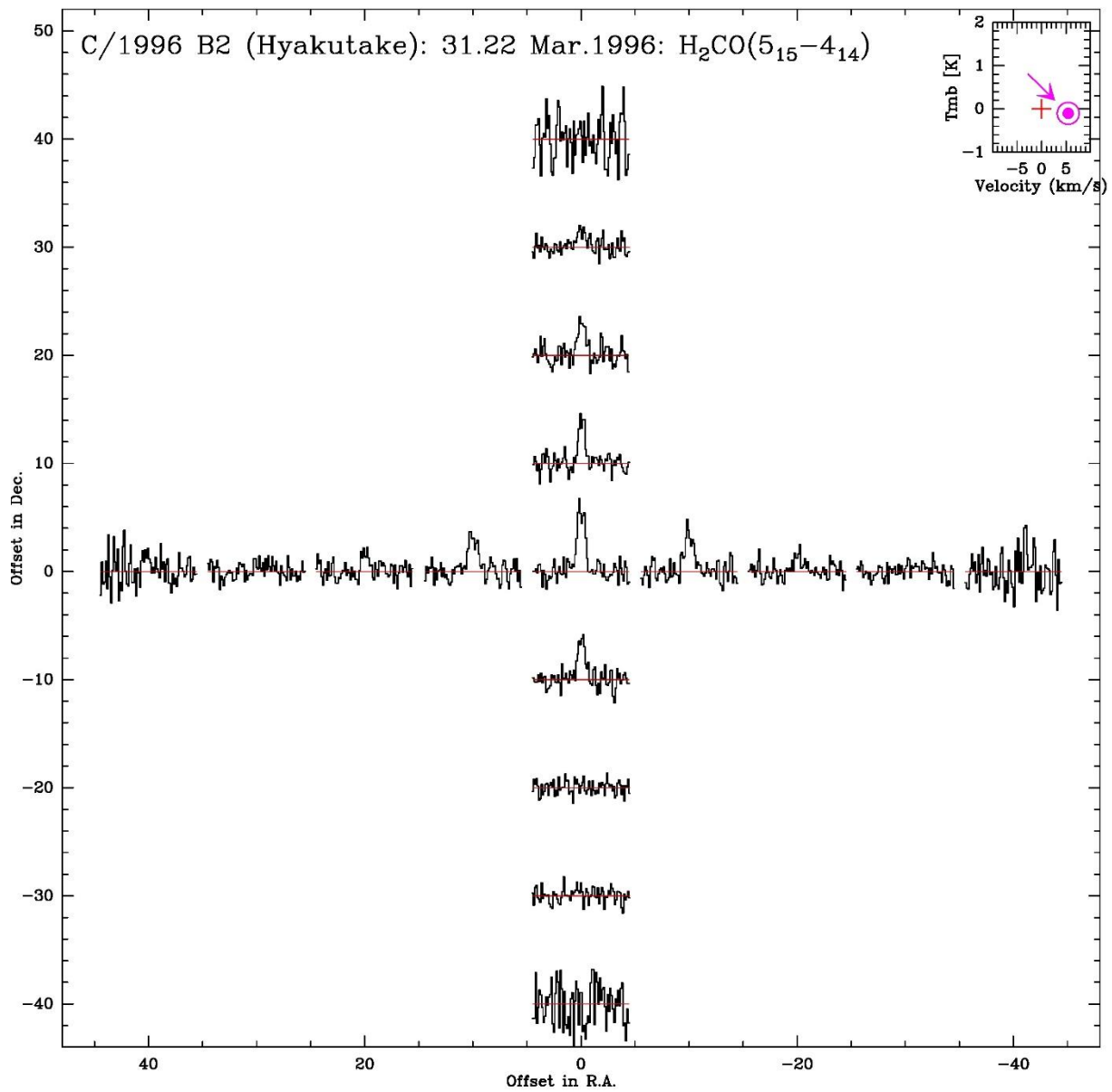


Figure 2.11 : Carte des aires de raie pour différents offsets de pointage dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake), le 31 mars. Les lignes rouges correspondent aux lignes de base La flèche mauve en haut à droite indique à la direction du Soleil. Le cadre en haut à droite donne les échelles en intensité et vitesse doppler relative au noyau pour chacun des spectres de la carte.

Enfin, le dernier point qui peut être considéré, et que nous allons étudier dans cette thèse concerne l'existence possible d'une source distribuée libérant ainsi du formaldéhyde.

Pour ce faire, j'ai uniquement traité les données du 30 et du 31 Mars présentées sur le **Tableau 2.4**. Il a fallu dans un premier temps effectuer une moyenne des mesures vers le Soleil et antisolaire, le **Tableau 2.6** correspond aux jeux de données utilisés après avoir effectué la moyenne des deux profils.

30 Mars 1996		
Moyenne des offsets	Moyenne des aires H ₂ CO	Moyenne des incertitudes sur les aires
55	0,52	0,12
45,5	0,33	0,081
35,5	0,91	0,092
25,5	1,22	0,10
15,5	1,51	0,12
6	2,03	0,10
31 Mars 1996		
Moyenne des offsets	Moyenne des aires H ₂ CO	Moyenne des incertitudes sur les aires
40,05	0,01	0,26
30,25	0,29	0,09
20,20	0,83	0,09
10,20	1,67	0,10
2,10	2,61	0,17

Tableau 2.6 : Mesures de l'intensité de H₂CO, les 30 et 31 Mars, à partir du télescope James Clerk Maxwell après avoir fait la moyenne des valeurs vers le Soleil et antisolaire. Les incertitudes ont été calculées pour chaque moyenne d'offsets et d'intensité du H₂CO.

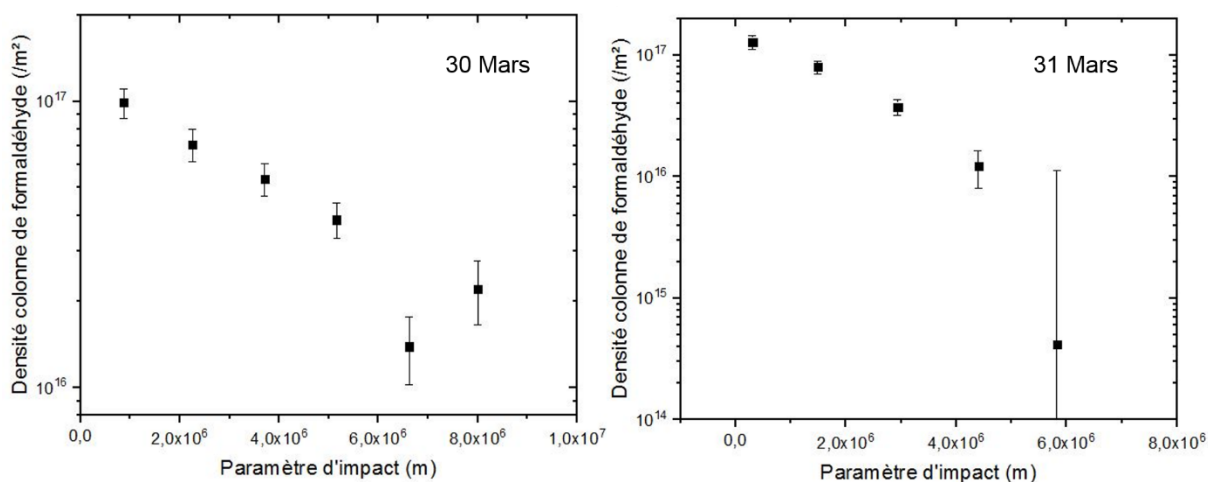


Figure 2.12 : Densité colonne de H₂CO en fonction du paramètre d'impact dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake), à gauche le 30 mars, et à droite le 31 mars.

Finalement, la densité de colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact est représentée sur la **Figure 2.12**. Le traitement de données permettant d'obtenir cette distribution est développée dans la partie 1.1.2.

1.1.5. C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle

Ces comètes font parties de celles pour lesquelles nous avons le moins d'informations. Cependant le formaldéhyde a bien été détecté dans chacune d'entre elles lors de campagnes d'observations effectuées à l'Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM). Les paramètres récoltés lors de la détection du formaldéhyde sont résumés dans le **Tableau 2.7**.

Comètes	C/2001 Q4 (NEAT)	C/2004 Q2 (MACHHOLZ)	8P/ TUTTLE
Date	10 Mai 2004	15 et 16 Janvier 2005	30 Décembre 2007
Distance héliocentrique (UA)	0,966	1,21	1,109
Constante de photolyse de H ₂ CO (/s)	2,14. 10 ⁻⁴	1,37.10 ⁻⁴	1,63. 10 ⁻⁴
Distance géocentrique (UA)	0,347	0,37	0,256
Taux de production d'eau (molec/s)	2,40.10 ²⁹	2,60.10 ²⁹	2,00.10 ²⁸
Vitesse des gaz (km/s)	0,75	0,75	0,85
Température des gaz (K)	65	65	45
Références (Taux de production d'eau)	(Biver et al., 2009)	(Biver et al., 2007)	(Biver et al., 2008)
Poussières/gaz	0.4-4	0.5-2.5	0.2-1.5

Tableau 2.7 : Paramètres mesurés lors des observations des comètes 8P/Tuttle, C/2001 Q4 (NEAT), et C/2004 Q2 (Machholz).

C/2001 Q4 (NEAT) (**Figure 2.13**) a été découverte le 24 août 2001 grâce au télescope Schmidt de 1,2 m par une équipe du Jet Propulsion Laboratory (JPL) dans le cadre du programme de surveillance Near Earth Asteroid Tracking (NEAT). Lors de sa découverte la comète se trouvait à une distance héliocentrique de 10,1 UA. Le formaldéhyde a été détecté lors des observations du 10 Mai 2004, avant que la comète arrive à son périhélie le 15 Mai 2004, soit à 0.96 UA du Soleil. La carte de l'émission de la raie $3_{12}-2_{11}$ à 225.7 GHz du formaldéhyde est représentée sur la **Figure 2.14**, et les valeurs des aires de raies sont notées sur le **Tableau 2.8** en fonction des offsets. Le rapport poussières sur gaz a été estimé à partir de mesures Afp dans la comète. Celui-ci vaut entre 1500 et 2800 cm à la fin du mois de mai (Schulz et al., 2005), ou encore 30 000 cm (base de données amateur), cela équivaut à un rapport poussières sur gaz entre 0,4 et 4.



Figure 2.13 : Photos de la comète C/2001 Q4 (NEAT) prises les 18 (à gauche) et 19 (à droite) Avril 2004 depuis un site près d'Alcohuaz au Chili par un astronome amateur. Des changements de structure au niveau de la queue sont observés entre les deux jours. Crédits : APOD NASA/Loke Kun Tan (StarryScapes)

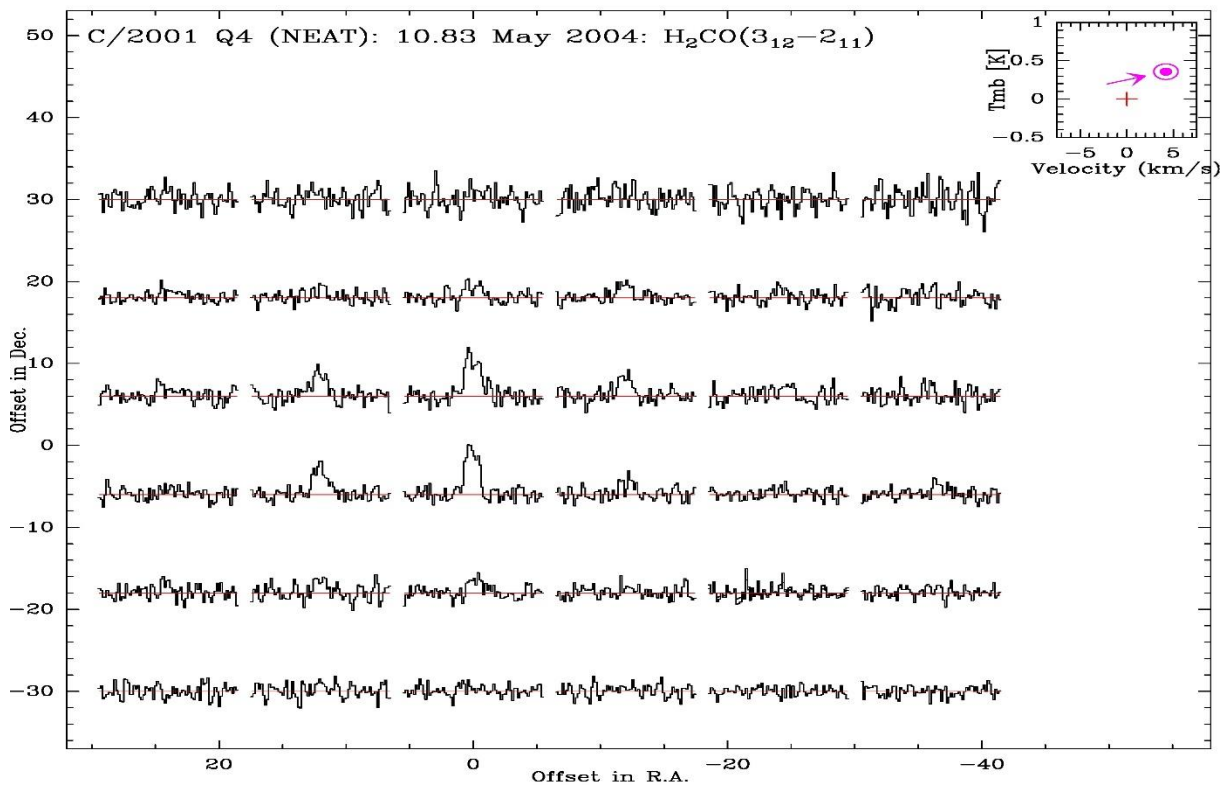


Figure 2.14 : Carte des aires de raie pour différents offsets de pointage dans la comète C/20011 Q4 (NEAT), le 10 mai. Les lignes rouges correspondent aux lignes de base. La flèche mauve en haut à droite indique la direction du Soleil. Le cadre en haut à droite donne les échelles en intensité et vitesse doppler relative au noyau pour chacun des spectres de la carte.

10 Mai 2004		
Moyenne des offsets	Moyenne des aires H ₂ CO	Moyenne des incertitudes sur les aires
6,00	0,88	0,029
13,42	0,46	0,021
20,42	0,24	0,018
27,90	0,17	0,014
37,87	0,07	0,013

Tableau 2.8 : Mesures de l'intensité de H₂CO, le 10 mai 2004. Les incertitudes ont été calculées pour chaque moyenne d'offsets et d'intensité du H₂CO.

La comète C/2004 Q2 (Machholz) (**Figure 2.15**) a été découverte le 27 Août 2004 par un amateur californien Donald. E. Machholz avec un télescope de 150 mm. Cette comète a été observée à l'IRAM les 15 et 16 Janvier 2005, son passage au périhélie ayant eu lieu le 24 Janvier 2005 à 1,20 UA. Ce sont lors des observations du 15 et 16 Janvier que des bandes de formaldéhyde ont été mesurées. Une carte des raies obtenues est représentée sur la **Figure 2.16**, et les valeurs des aires de raie sont précisées sur le **Tableau 2.9**. Le rapport poussières sur gaz utilisé vaut entre 0,5 et 2,5. Celui-ci a été calculé à partir de l'estimation du paramètre d'activité de poussière A_{fp} dans la comète, soit A_{fp}=4000 cm (Lin et al., 2007) ou encore A_{fp}=20 000 cm (base de données amateur).



Figure 2.15 : Photo de la comète C/2004 Q2 (Machholz) capturée au début du mois de Décembre. Crédits : APOD NASA/Adam Block (NOAO), AURA, NSF.

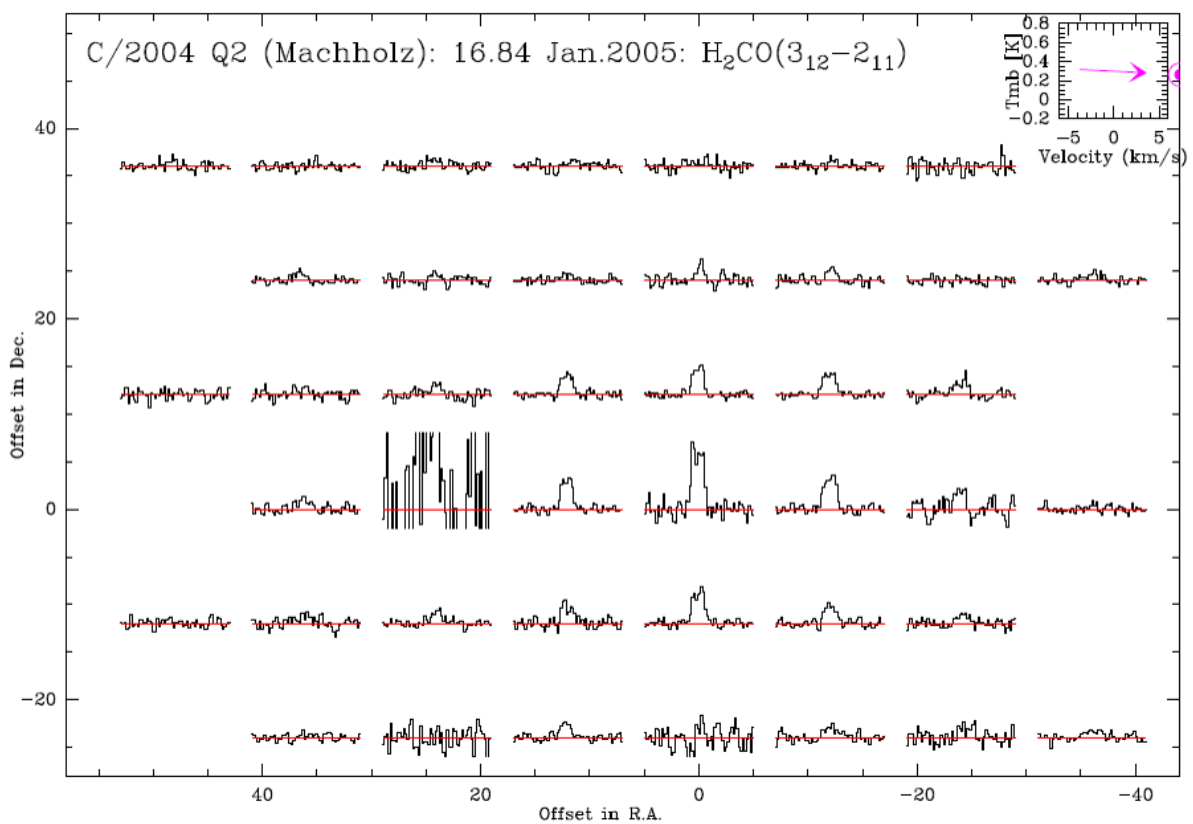


Figure 2.16 : Carte des raies pour différents offsets de pointage dans la comète C/2004 Q2 (Machholz), le 16 mai. Les lignes rouges correspondent aux lignes de base. La flèche mauve en haut à droite indique la direction du Soleil.

15 Janvier 2004		
Moyenne des offsets	Moyenne des aires H ₂ CO	Moyenne des incertitudes sur les aires
0,00	0,69	0,011
24,00	0,18	0,009
33,94	0,13	0,010
51,78	0,08	0,023
16 Janvier 2004		
Moyenne des offsets	Moyenne des aires H ₂ CO	Moyenne des incertitudes sur les aires
2,00	0,78	0,034
12,00	0,45	0,008
16,97	0,30	0,009
24,00	0,18	0,016
26,83	0,14	0,007
35,31	0,09	0,009
37,95	0,08	0,010
43,27	0,08	0,007
50,62	0,04	0,008
60,00	0,11	0,009
68,58	0,02	0,006

Tableau 2.9 : Mesures de l'intensité de H₂CO, les 15 Janvier et 16 Janvier 2004. Les incertitudes ont été calculées pour chaque intensité de H₂CO.

Enfin, la comète 8P/Tuttle (**Figure 2.17**), qui tient son nom de son deuxième découvreur (en 1858) Horace Parnell Tuttle, a été observée le 9 Janvier 1790 par Pierre Méchain. C'est une comète périodique, dont la période a été calculée à 13,58 années. Elle a été étudiée en Décembre 2007, et atteint son périhélie le 27 Janvier 2008 à 1.03 UA du Soleil, et est passée à une distance de 0,25 UA de la terre le 2 Janvier 2008. La carte des raies correspondante est représentée sur la **Figure 2.18**, et les valeurs des aires de raies sont notées sur le **Tableau 2.10**. Le rapport poussières sur gaz a été estimé entre 0,2 et 1,5. Ces valeurs ont été calculées à partir du paramètre A_{fp} et du taux de production d'eau contemporain, soit A_{fp}=14 cm le 1^{er} novembre et A_{fp}=20 cm autour du 4 décembre (Schleicher and Woodney, 2007) ou encore A_{fp}=1000 cm le 30 décembre (base de données amateur).



Figure 2.17 : Image de la comète 8P/Tuttle et de la galaxie M33 du Triangle obtenue le 30 Décembre 2007 dans le ciel de Hoogeveen, aux Pays-Bas. L'image est une reconstitution d'une série de photos de 60x60 secondes, l'alignement de chaque image avec les étoiles fait ressortir la coma verte de la comète comme une strie qui se déplace. Crédits : APOD NASA/ Emiel Kempen.

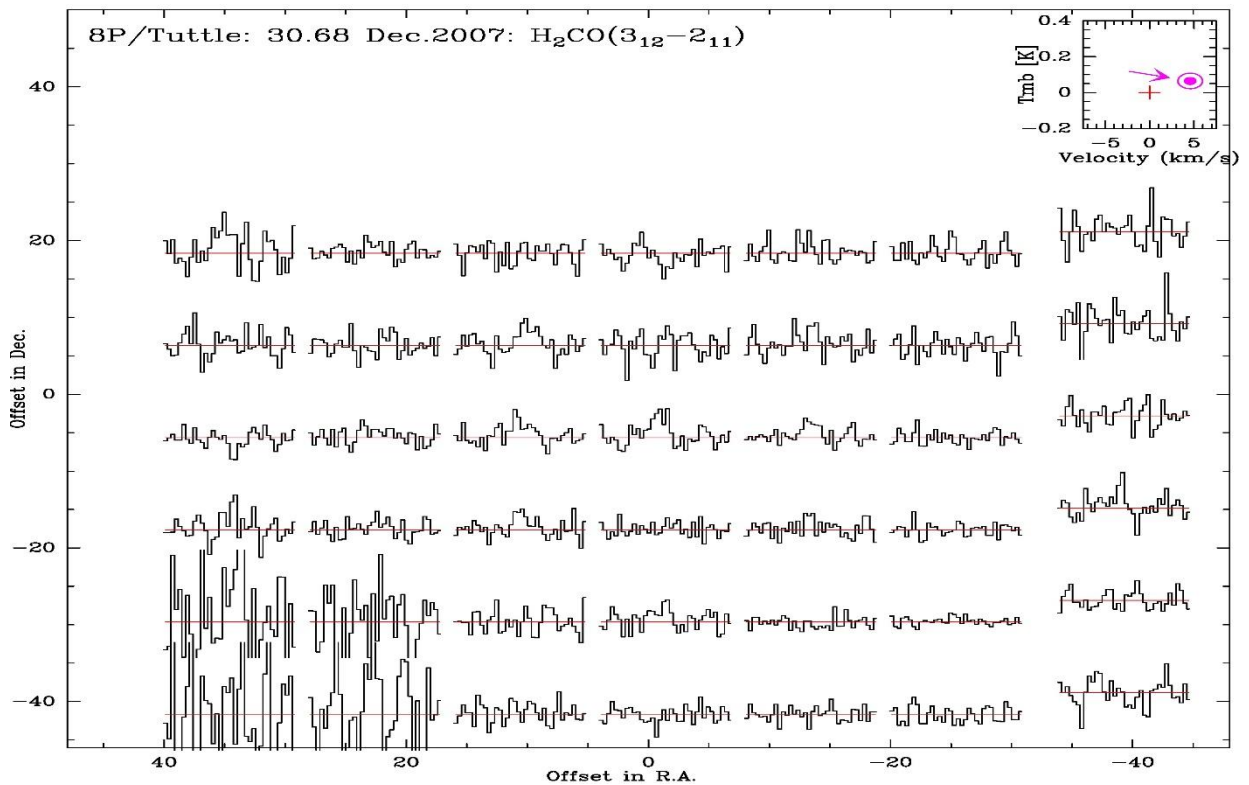


Figure 2.18 : Carte de la raie H_2CO ($3_{12}-2_{11}$) pour différents offsets de pointage dans la comète 8P/Tuttle, le 30 Décembre. Les lignes rouges correspondent aux lignes de base. La flèche mauve en haut à droite correspond à la direction du Soleil.

30 Décembre 2007		
Moyenne des offsets	Moyenne des aires H ₂ CO	Moyenne des incertitudes sur les aires
4,30	0,26	0,034
12,22	0,12	0,021
16,65	0,12	0,021
25,59	0,05	0,013
34,58	0,05	0,013
42,76	0,02	0,017

Tableau 2.10 : Mesures de l'intensité de H₂CO, le 30 Décembre 2007. Les incertitudes ont été calculées pour chaque intensité de H₂CO.

La distribution de formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact pour ces trois comètes est représentée dans la **Figure 2.19**. De la même manière que la comète Hyakutake, le traitement de données permettant d'obtenir ces distributions est développé dans la partie 1.1.2.

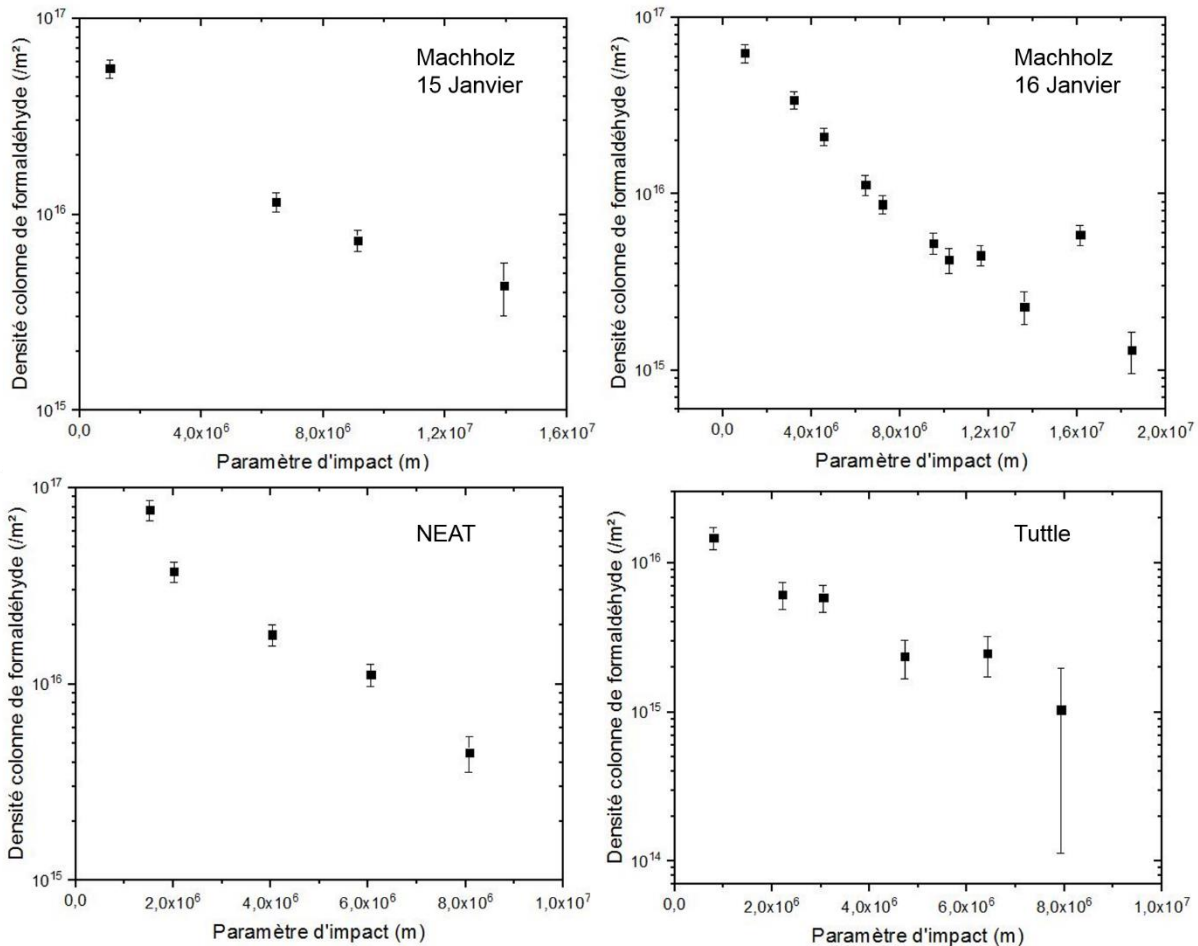


Figure 2.19 : Densité colonne de H₂CO en fonction du paramètre d'impact dans les comètes C/2004 Q2 (Machholz), C/2001 Q4 (NEAT) et 8P/Tuttle. Les deux jours d'observation ont été représentés pour la comète C/2004 Q2 (Machholz), soit le 15 Janvier en haut à gauche, et le 16 Janvier en haut à droite. Ces profils ont été construits à partir des aires des raies que j'ai calculées avec le logiciel CLASS.

1.2. Cas de la glycine dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko

La glycine ($C_2H_5NO_2$) a été détectée pour la première fois par des observations *in situ* dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko (Altwegg et al., 2016), avec une abondance relative à l'eau pouvant atteindre 0,25%. Celle-ci a été mesurée par le spectromètre de masse ROSINA, à bord de la sonde Rosetta (**Figure 2.20**). Deux détections ont été notables, la première en Octobre 2014 alors que la sonde se trouvait à une distance de 10 km du noyau et à 3 UA du Soleil, et une seconde le 28 Mars 2015 alors que la sonde effectuait un survol à 15 km de de la comète qui se trouvait à 2 UA du Soleil. La glycine n'a pu être observée que lorsque la sonde a effectué des survols proches du noyau, et lors de la présence de jets de poussières importants près de la sonde.

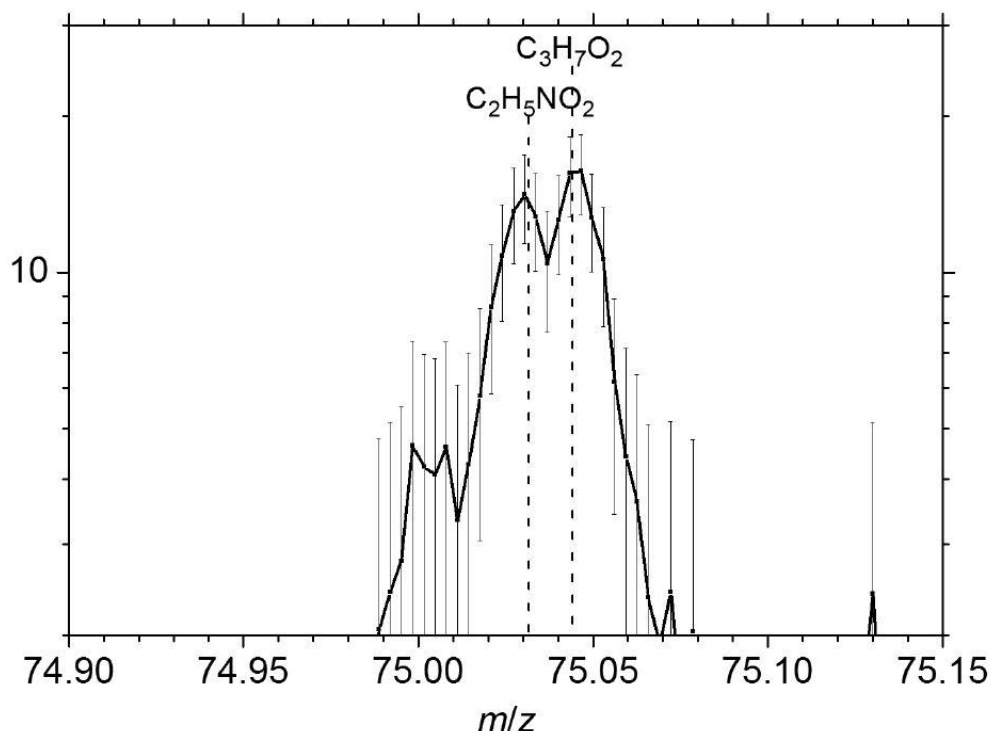


Figure 2.20 : Détection de la glycine par le spectre DFMS de ROSINA. Crédits : Altwegg et al. (2016).

L'instrument ROSINA est composé de trois instruments différents :

- ✚ COPS (COmet Pressure Sensor), celui-ci est dédié à l'étude des paramètres des gaz neutres présents autour de la comète 67P. Il est composé de deux capteurs. Le premier, Nude Gauge, correspond à une jauge de pression pour la mesure de la densité totale de gaz. En réalité ce dispositif joue un rôle préventif, en effet il a été programmé pour arrêter tous les autres capteurs, si la pression totale de gaz dépassait un certain seuil, afin d'éviter toute surtension. Le second capteur, Ram Gauge, a mesuré le flux moléculaire émis par la comète reflétant ainsi la dynamique des gaz cométaires. L'instrument COPS a mesuré la densité de gaz totale, telle qu'elle est représentée sur la **Figure 1.31**.

- ✚ DFMS (Double Focusing Mass Spectrometer) est spectromètre de masse à haute résolution, avec une résolution supérieure à 3000 ($m/\Delta m = 3000$ à 1% de la hauteur du pic à $m/z = 28$), et la possibilité d'analyser des masses de 12 unité de masse atomique (uma) jusqu'à 150 uma (Mattauch and Herzog, 1934). Celui-ci présente deux modes de fonctionnement : un mode gaz neutre et un mode ion. Une photo ainsi qu'une représentation sont données sur la **Figure 2.21**. C'est le DFMS qui a détecté la glycine dont le spectre est présenté sur la **Figure 2.20**.
- ✚ RTOF (Reflectron Time-Of-Flight), spectromètre de masse à temps de vol, a été conçu de manière à compléter le DFMS en étendant la gamme de masse accessible, mais pour une résolution plus faible. Il peut analyser des masses allant jusqu'à 300 unités uma, et avec une résolution en masse de 500 ($m/\Delta m > 500$ à 1% de la hauteur du pic à $m/z = 28$) (Balsiger et al., 2007). Le RTOF comprend deux systèmes de source/détecteur, l'un pour les gaz neutres, et l'autre pour les ions. Un double réflectron permet d'augmenter le temps de vol, et la précision sur la mesure de la masse.

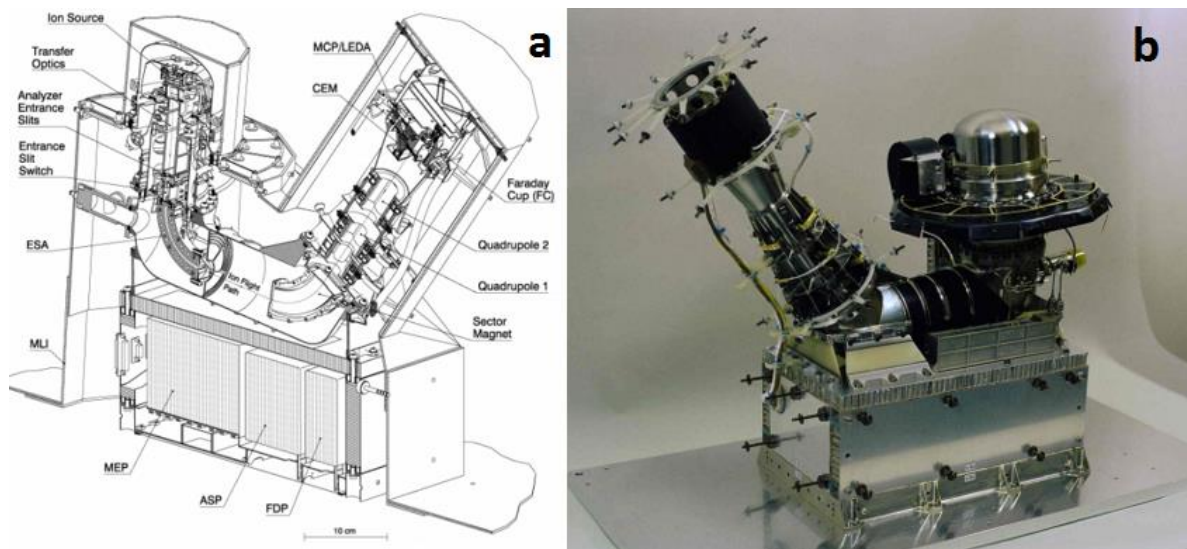


Figure 2.21 : a. Vue en coupe de l'instrument DFMS (Balsiger et al., 2007) – b. Photo de l'instrument DFMS. Crédits : ESA/Rosetta/ROSINA/UBern/BIRA/LATMOS/LMM/IRAP/MPS/SwRI/TUB/UMich.

Lors de la deuxième détection de glycine, soit le 28 Mars 2015, la sonde effectuait un survol à 15km du noyau. Cela a permis d'obtenir un profil de densité en fonction de la distance au noyau (15 à 30 km) pour la glycine, mais également pour la totalité du gaz neutre (par l'instrument COPS), qui est en réalité dominé par l'eau (**Figure 1.31**). Pour représenter ce profil, dans l'article original d'Altwegg et al. 2016, les densités ont été multipliées par la distance du noyau au carré, ce qui rend plus visible les différences de profil pour la distribution de la glycine et la distribution de gaz total. Une telle représentation permet aussi de se rendre compte plus facilement d'une source distribuée, en effet lorsque la source est uniquement nucléaire (parent) et en absence de puit sur les échelles de distance représentées, le profil de densité doit être horizontal. Ici, la densité totale de gaz est bien représentée par un profil horizontal, cependant le profil de densité de la glycine montre clairement

une pente positive. Cela est caractéristique d'une source distribuée. La température du noyau de la comète vaut au maximum et de manière ponctuelle autour de 320 K (Tosi et al., 2016), à titre d'exemple entre 25 et 50 K dans l'hémisphère d'hiver de la comète (Choukroun et al., 2015). De plus, la sublimation de la glycine prend effet de façon significative au-delà de 370 K (Gross and Grodsky, 1955). De ce fait, on considère qu'il y a peu de chances que la glycine parente provienne directement du noyau par sublimation directe. En revanche, les particules cométaires, qui sont chauffées par le rayonnement solaire dans la coma, peuvent atteindre des températures supérieures à celles mesurées dans le noyau (Lien, 1990). La sublimation directe de glycine du noyau ne semble pas correspondre au processus ayant lieu dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko pour cette molécule. En revanche, le cas de la glycine sublimée à partir de particules éjectées du noyau représente un mécanisme plus réaliste, bien que plus complexe. Ces processus seront développés dans la partie 2.2.4.

Le profil de densité mesurée par ROSINA, sur la **Figure 1.31**, est représenté en unité relative. Afin de pouvoir travailler avec ces données, un premier travail a consisté à calibrer la densité de la glycine à partir de la quantité de gaz totale Q_{H_2O} dans la comète. En négligeant la photolyse de l'eau à une distance de 15 km du noyau, il est possible de remonter à la densité de l'eau au sein de la comète à partir de la relation suivante :

$$n_{H_2O} (15 \text{ km}) = \frac{Q_{H_2O}}{4\pi v_g r^2}$$

En prenant une quantité de gaz totale de 5.10^{26} s^{-1} et une vitesse d'expansion des gaz de 750 m.s^{-1} , nous obtenons :

$$n_{H_2O} (15 \text{ km}) = \frac{5.0.10^{26}}{4\pi.750.(15.10^3)^2} = 2,4. 10^{14} \text{ m}^{-3}$$

Nous avons choisi de travailler avec la plus forte abondance de glycine par rapport l'eau détectée au moment des observations, soit 0,25% (Altwegg et al., 2016), cela implique une densité de glycine $n_{gly}=6.10^{11} \text{ m}^{-3}$ à une distance de 15 km du noyau. Finalement, en restant fidèle à la représentation de la densité multipliée par le carré distance publiée par Altwegg et al. (2016), nous obtenons un profil de densité de la glycine en cm^{-1} en fonction de la distance au noyau (**Figure 2.22**).

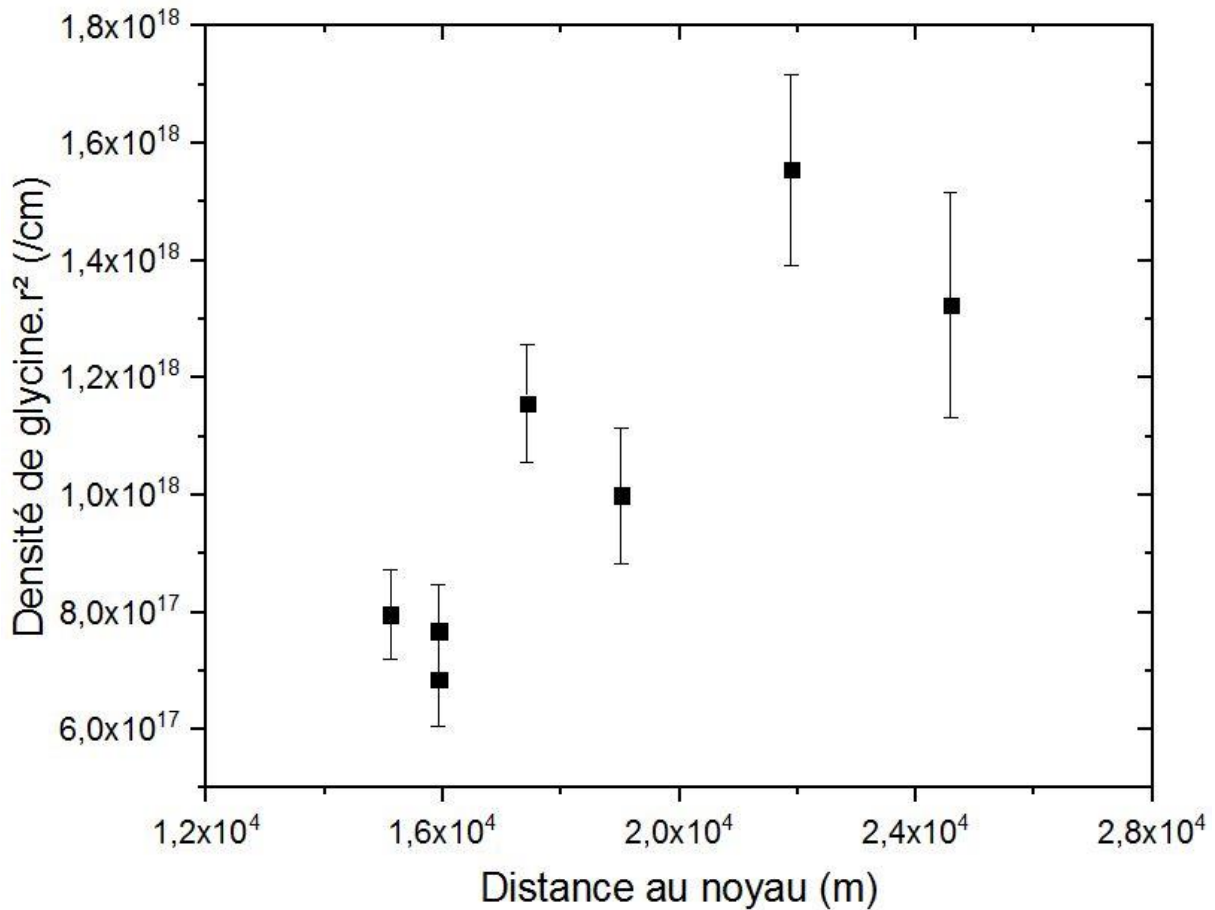


Figure 2.22 : Profil de la densité de la glycine dans la comète 67P en fonction de la distance au noyau. Le profil est une adaptation du profil publié par Altwegg et al. (2016).

2. Présentation du modèle

Afin d'interpréter les observations faites dans les différentes comètes pour le formaldéhyde, et pour la glycine, j'ai programmé un modèle de résolution numérique. Celui-ci a été validé, dans un premier temps, en l'appliquant au cas d'une source distribuée de formaldéhyde produit à partir de polyoxyméthylène dans la comète de Halley, cas déjà traité de manière algébrique par le passé par Cottin et al. (2004). Ce modèle a ensuite été appliqué au cas du formaldéhyde dans les différentes comètes, puis étendu au cas de la glycine dans la comète 67P.

2.1. Généralité

2.1.1. Logiciel de programmation

Le logiciel utilisé pour les différentes modélisations de ma thèse est le logiciel LabVIEW (Laboratory Virtual Instrument Engineering Workbench, édité par la société National Instruments). Bien que conçu principalement pour l'acquisition de données, et le contrôle d'instruments, il peut être utilisé pour d'autres applications. La programmation est basée sur un langage graphique, c'est-à-dire qu'il favorise

l'utilisation d'un schéma, appelé le diagramme, qui est le code source. C'est dans le diagramme que sont représentées les différentes fonctions sous formes d'icônes, reliées les unes aux autres par l'intermédiaire de fils propageant les variables du code. Le diagramme comprend des structures de contrôles (telles que des boucles, des conditions, des séquences...) pour fixer l'ordre d'exécution des opérations. En plus de l'interface de programmation, chaque programme dispose d'une « face avant » sur laquelle il est possible d'utiliser des commandes qui correspondent à des variables d'entrée, et d'afficher les résultats du modèle sous forme d'indicateurs. Les diagrammes de programmation sont présentés sur l'Annexe 1.

Pour la modélisation des sources distribuées et la résolution des équations différentielles, détaillées dans la section 2.1.4, j'ai utilisé la méthode d'Euler (section 2.1.2). Les différents paramètres d'entrée nécessaires aux modélisations sont présentés dans la partie 2.2.5.

2.1.2. Méthode d'Euler

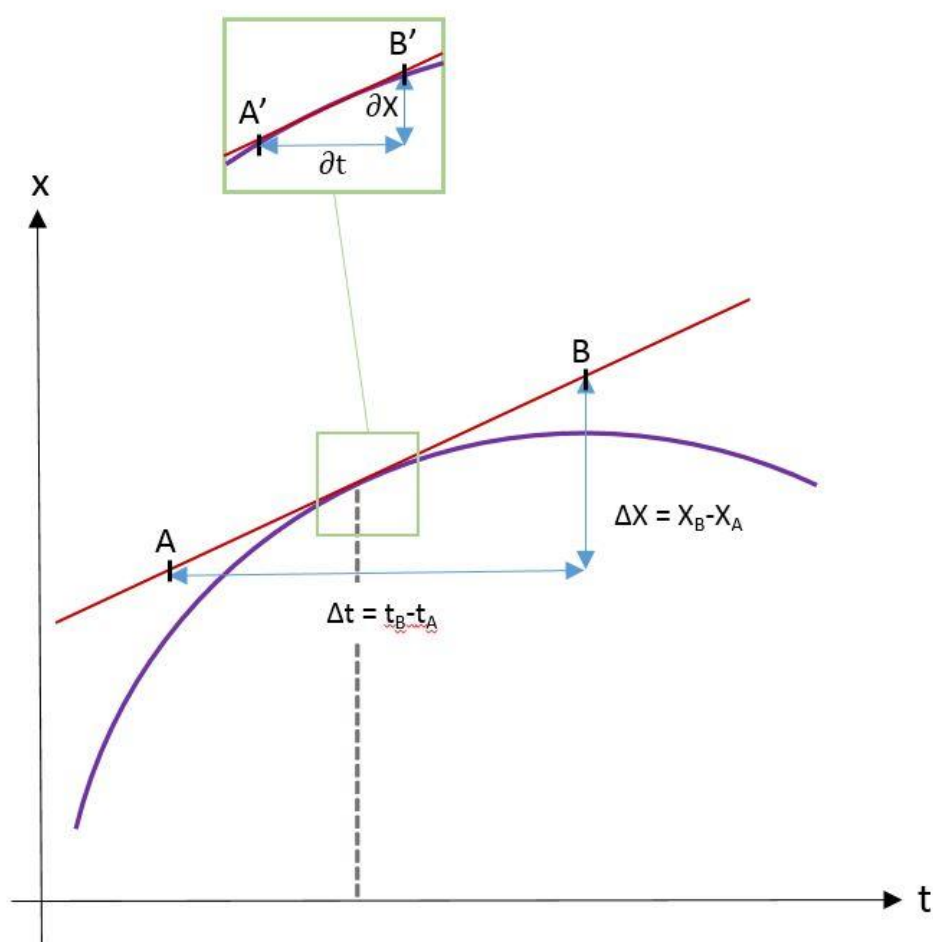


Figure 2.23 : Schéma explicatif de la méthode d'Euler. La courbe violette correspond à la fonction étudiée. La droite rouge représente la tangente en un point. Les points A et B ont été choisis de manière aléatoire afin de calculer le coefficient directeur de la tangente à la courbe à partir des variables t et X .

La méthode de résolution numérique d'équations différentielles utilisée dans mes modèles est la méthode d'Euler, parfois appelée la « méthode de la tangente ». La validité de l'utilisation de cette méthode a d'abord été testée dans les cas déjà publiés par Cottin et al. (2004) en comparant les solutions algébriques et numériques. La méthode d'Euler est une méthode dite d'ordre 1 avec une condition initiale. C'est une méthode approximative basée dans ce cas sur la discrétisation de la variable t. Il s'agit d'effectuer un calcul itératif, c'est-à-dire de calculer point par point les valeurs de la fonction étudiée à partir des conditions initiales.

La dérivée en un point d'une fonction correspond au coefficient directeur de la tangente à la courbe de la fonction en ce point. Par exemple, si l'on souhaite la dérivée d'une courbe à un temps t, il suffit de tracer la tangente au temps t, et de faire le rapport entre la différence des ordonnées de deux points A et B, et la différence des abscisses de ces mêmes points (**Figure 2.23**), ainsi :

$$\left(\frac{dX}{dt}\right)_t = \frac{\Delta X}{\Delta t}, 0 \leq t \leq N$$

Cela est uniquement valable sur un point de la courbe de la fonction donnée, en revanche, une partie de la tangente se voit être superposée à la courbe, et ceci est d'autant plus vrai lorsqu'on considère un intervalle de temps plus petit. Par conséquent, si Δt tend vers 0, il est possible d'écrire :

$$\left(\frac{dX}{dt}\right)_t = \frac{\partial X}{\partial t}$$

Cette relation peut également s'écrire avec une équation du type, avec A et B, les deux points de la tangente :

$$\left(\frac{dX}{dt}\right)_t = AX^2 + B = \frac{\partial X}{\partial t}$$

Alors, si ∂t tend vers 0 :

$$\partial X = (AX^2 + B) \times \partial t$$

Afin d'utiliser cette méthode, il faut connaître la condition initiale, soit $X(t=0)$ et fixer la valeur de ∂t qui correspond au pas de calcul.

Il devient alors possible d'effectuer les calculs suivants, avec N, l'intervalle supérieur dans les bornes de calcul que l'on considère (soit entre 0 et N) :

$$\begin{aligned}
 X_1 &= X_0 + \partial X = X_0 + (AX_0^2 + B) \times \partial t \\
 X_2 &= X_1 + \partial X = X_1 + (AX_1^2 + B) \times \partial t \\
 &\quad \cdot \\
 &\quad \cdot \\
 X_N &= X_{N-1} + \partial X = X_{N-1} + (AX_{N-1}^2 + B) \times \partial t
 \end{aligned}$$

Le choix du pas de calcul est important, en effet cette méthode présente des limites. L'erreur induite peut s'avérer très élevée si le pas choisi est trop grand. Si on considère le développement de Taylor qui approche une fonction dérivable, on constate que la précision perdue par la méthode d'Euler correspond à la partie encadrée dans l'équation ci-dessous :

$$[X]_{t+\Delta t} = [X]_t + \Delta t \frac{d[X]}{dt} + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \frac{d^2[X]}{dt^2} + \dots$$

Ainsi, bien que l'incertitude soit d'autant plus faible que $\frac{d[X]}{dt}$ et Δt sont faibles, les erreurs ont tendance à s'accumuler. En revanche, plus le Δt est faible, et plus la résolution devient couteuse en temps de calcul. Si on considère le développement de Taylor qui approche (ou approxime) une fonction dérivable, on constate que la précision est perdue.

2.2. Le modèle de Haser

L'atmosphère d'une comète étant un environnement complexe, il est nécessaire de formuler des hypothèses afin de modéliser l'évolution de la densité d'une molécule autour du noyau. Le modèle le plus utilisé pour l'étude de la distribution spatiale de molécules gazeuses dans les atmosphères cométaires est le modèle de Haser (Haser, 1957). Il permet de définir la longueur d'échelle caractéristique de production et de destruction d'une molécule fille, et de déterminer des taux de production des différentes espèces. Celui-ci stipule les points suivants :

- ✚ La forme du noyau est sphérique et il émet de manière homogène depuis toute la surface, ou alors les particules sont mélangées dans les premiers kilomètres (symétrie sphérique autour du noyau).
- ✚ La production du noyau est constante à l'échelle des observations à modéliser (état stationnaire).

- ✚ Les molécules et particules de poussières sont éjectées du noyau radialement et à une vitesse constante.
- ✚ La destruction des molécules et radicaux est due à la photochimie et les vitesses de photolyse sont maintenues constantes, toute réaction chimique entre deux composés est exclue.

Du fait que les molécules mères proviennent directement de la sublimation des glaces du noyau, et que les molécules filles soient issues de la photodissociation des molécules mères, les mécanismes de production mais aussi les distributions spatiales sont différents pour ces deux types d'espèces. Le modèle de Haser permet de calculer la distribution spatiale de ces deux espèces.

Le raisonnement pour obtenir les équations de base concernant les profils de densité des molécules mères et filles gazeuses sera rappelé dans un premier temps (Cottin et al., 2004). Par la suite, ces équations seront adaptées et étendues au cas des sources distribuées du formaldéhyde et au cas de la glycine.

Considérons l'équation de conservation de la matière pour le cas où des particules sont éjectées du noyau cométaire mais ne sont pas détruites dans la coma par photochimie. Elles seront diluées selon une symétrie sphérique autour du noyau :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(nv) = 0 \text{ (Eq 1)}$$

Avec n la densité de la particule considérée (nombre de particules émises par unité de volume), et v la vitesse d'expansion du gaz.

Le modèle de Haser stipule que la production de molécules à partir du noyau cométaire est constante, ainsi $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$, soit :

$$\text{div}(nv) = 0$$

Les abondances étant modélisées à partir de coordonnées sphériques autour du noyau, et en supposant une symétrie sphérique autour du noyau on peut écrire :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (nr^2v) = 0$$

R étant la distance au noyau, et v étant constant, l'équation précédente peut s'écrire :

$$\frac{v}{r^2} \frac{d}{dr} (nr^2) = 0$$

Il en ressort que nr^2 est constant, par conséquent :

$$n(r) = \frac{c}{r^2}$$

c correspond à une constante d'intégration. Il est possible de caractériser cette constante en posant Q comme étant le taux de production des particules éjectées du noyau cométaire (en nombres de particules par unités de temps), et V le volume que ces particules occupent à une distance r du noyau :

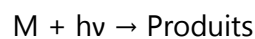
$$n(r) = \frac{Qdt}{V} = \frac{Qdt}{4\pi r^2 v dt} = \frac{Q}{4\pi r^2 v}$$

En comparant les équations les deux équations précédentes, il en découle la constante suivante :

$$c = \frac{Q}{4\pi v}$$

2.2.1. Cas d'une molécule mère

Prenons maintenant le cas d'une molécule mère, c'est-à-dire d'une espèce émise par la sublimation des glaces du noyau. On considère une molécule M avec un taux de production Q_M . Cette fois, la destruction par rayonnement solaire est prise en compte selon la réaction suivante :



Celle-ci est caractérisée par une constante de photolyse J (en s^{-1}). On peut donc écrire le terme de puits en fonction de la densité n_M de la manière suivante :

$$\frac{\partial n_M}{\partial t} = -J_M n_M \text{ (Eq 2)}$$

En intégrant cette équation, nous obtenons la densité n_M décrite par la relation :

$$n_M = n_{M0} \cdot e^{-J_M t}$$

avec n_{M0} , la densité au temps $t=0$.

En reprenant l'équation de conservation de la matière (Equation 1), mais en considérant cette fois ci la photodissociation d'une molécule mère, nous avons :

$$\frac{\partial n_M}{\partial t} + \text{div}(n_M v) = -J_M n_M$$

Le modèle de Haser stipule que la production de molécules à partir du noyau cométaire est constante, ainsi $\frac{\partial n_M}{\partial t} = 0$, soit :

$$\text{div}(n_M v) = -J_M n_M$$

Le modèle de Haser stipule que la vitesse est constante et que le noyau est de forme sphérique, ainsi la relation devient :

$$v_g \frac{d}{dr}(n_M r^2) = -J_M n_M r^2$$

Celle-ci peut également s'écrire :

$$\frac{dn_M r^2}{dr} = -\frac{J_M}{v_g} n_M r^2$$

Cette équation est par la suite intégrée, on définit la longueur d'échelle par $l_M = \frac{v}{J}$:

$$n_M r^2 = A e^{-r/l_M}$$

A étant une constante d'intégration qui peut être calculée lorsque l'on considère une condition limite près du noyau, là où il n'y pas de photolyse significative. r devient ainsi négligeable par rapport à l_M , nous avons :

$$n_M = \frac{Q_M}{4\pi r^2 v} = A$$

Il vient donc la relation suivante qui correspond au cas le plus simple de Haser, soit d'une molécule mère émise directement du noyau :

$$n_M(r) = \frac{Q_M}{4\pi r^2 v} e^{-r/l_M} \text{ (Eq 3)}$$

2.2.2. Cas d'une molécule fille

Le profil de densité $n_F(r)$ peut maintenant être calculé pour une molécule fille, c'est-à-dire pour une molécule produite à partir de la photodissociation d'une molécule mère avec les vitesses de photolyse

respectives J_F et J_M . De plus, la molécule mère est émise avec un taux de production Q_M . Suivant le modèle de Haser, la symétrie autour du noyau est sphérique, et les deux espèces ont une même vitesse v . En réalité, les molécules filles présentent un excès d'énergie cinétique par rapport à leur molécule mère (Crifo, 1994), mais cet aspect est négligé ici. Il apparaît donc un terme de source et un terme de puit tel que :

$$\begin{aligned}\frac{\partial n_F}{\partial t} + \text{div}(n_F v) &= J_M n_M - J_F n_F \\ \rightarrow \frac{\partial n_F r^2}{\partial r} &= \frac{r^2 J_M n_M}{v} - \frac{r^2 J_F n_F}{v} \\ \rightarrow \frac{\partial n_F r^2}{\partial r} &= \frac{J_M}{v} n_M r^2 - \frac{J_F}{v} n_F r^2\end{aligned}$$

Nous obtenons une équation différentielle avec un second membre connu, mais qui n'est pas constant.

En utilisant l'équation 3, et en utilisant $= \frac{v}{J}$, nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial n_F r^2}{\partial r} + \frac{n_F r^2}{l_F} = \frac{n_M r^2}{l_M} = f(r) \text{ (Eq 4)}$$

Où :

$$f(r) = \frac{Q_M}{4\pi v l_M} e^{-r/l_M} \text{ (Eq 5)}$$

L'équation 4 a pour solution générale :

$$n_F r^2 = x_1 + \text{solution générale de l'équation sans second membre}$$

Dans laquelle x_1 est une solution particulière de l'équation 4 :

$$x_1 = n_F r^2 = A(r) e^{-r/l_F}$$

Afin de déterminer la constante $A(r)$, nous posons dans un premier temps :

$$x_2 = e^{-r/l_F}$$

On considère x_1' et A' , comme des dérivées premières en fonction de la distance au noyau r . Ainsi, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
x_1' + \frac{x_1}{l_F} &= f(r) \\
\rightarrow A'x_2 + x_2'A + \frac{Ax_2}{l_F} &= f(r) \\
\leftrightarrow A'x_2 + A(x_2' + \frac{x_2}{l_F}) &= f(r)
\end{aligned}$$

Dans laquelle :

$$x_2' + \frac{x_2}{l_F} = 0$$

Finalement, l'équation devient :

$$A'x_2 = f(r)$$

Connaissant $f(r)$ donnée dans l'équation 5, on peut intégrer la constante $A(r)$ de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
A(r) &= \int_r \frac{f}{x_2} dr = \int_r e^{r/l_F} dr \\
\rightarrow A &= \frac{Q_M}{4\pi v l_M} \int_r e^{-r/l_M} e^{r/l_F} dr = \frac{Q_M}{4\pi v l_M} \int_r e^{-r(\frac{l_M - l_F}{l_F l_M})} dr \\
\rightarrow A &= \frac{Q_M}{4\pi v} \frac{l_F}{l_M - l_F} e^{-r/l_M} e^{r/l_F}
\end{aligned}$$

Nous pouvons donc maintenant remplacer les termes de la solution générale, soit :

$$n_F r^2 = \frac{Q_M}{4\pi v} \frac{l_F}{l_M - l_F} e^{-r/l_M} + K e^{-r/l_F}$$

Avec $x_1 = \frac{Q_M}{4\pi v} \frac{l_F}{l_M - l_F} e^{-r/l_M}$ et $K e^{-r/l_F}$ la solution générale de l'équation sans second membre, K étant une constante qui peut être déterminée grâce aux conditions limites de l'équation.

Finalement, il est possible de calculer la densité d'une molécule fille pour deux cas distincts :

- ✚ Lorsque la molécule fille ne possède aucune source directe à partir du noyau, alors $n_F = 0$, soit :

$$n_F(r) = \frac{Q_M}{4\pi v r^2} \frac{l_F}{l_M - l_F} (e^{-r/l_M} - e^{-r/l_F}) \quad (\text{Eq 6})$$

- ✚ Lorsque la molécule fille possède une source directe Q_F à partir du noyau, alors $n_F = \frac{Q_F}{4\pi v r^2}$, soit :

$$n_F(r) = \frac{1}{r^2} \left(\frac{Q_M}{4\pi v} \frac{l_F}{l_M - l_F} (e^{-r/l_M} - e^{-r/l_F}) + \frac{Q_F}{4\pi v} e^{-r/l_F} \right)$$

2.2.3. Evolution de la densité du formaldéhyde dans une atmosphère cométaire

Nous allons maintenant nous intéresser à la modélisation de la distribution du formaldéhyde. Dans certaines comètes, sa distribution radiale ne peut pas s'expliquer par une production unique à partir du noyau. Cottin et al. (2004) ont testé l'hypothèse de la formation de formaldéhyde à partir de la photolyse du méthanol parent émis du noyau. Dans le cas de la comète 1P/Halley, ils ont montré que CH_3OH n'est pas produit en quantité suffisante pour expliquer le profil de formaldéhyde. En effet celui-ci est produit en quantité allant de 1 à 6% par rapport à l'eau à partir du noyau selon les comètes (Bockelée-Morvan et al., 2004), or il faudrait un taux de production de 16% par rapport à l'eau pour ajuster le profil de H_2CO observé dans la comète 1P/Halley (Cottin et al., 2004). Ainsi, à ce jour, la meilleure interprétation des observations pour les comètes 1P/Halley et C/1995 O1 (Hale-Bopp) correspond à la présence d'une source distribuée de formaldéhyde à partir de la dégradation thermique et photochimique de polyoxyméthylène présent sur les particules éjectées du noyau (Cottin et al., 2004; Fray et al., 2006). Pour la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp), c'est d'ailleurs la dégradation thermique du polyoxyméthylène qui contribue largement pour des distances héliocentriques < 4 UA (Fray et al., 2006). Ce mécanisme est représenté sur la **Figure 2.24.b**. Dans cette partie, je vais rappeler le développement des équations différentielles permettant de modéliser une source distribuée présenté dans Cottin et al. 2004. Pour ce faire, nous avons appliqué le modèle de Haser à un cas de particules sphériques contenant du polyoxyméthylène, et émises de manière uniforme autour d'un noyau cométaire.

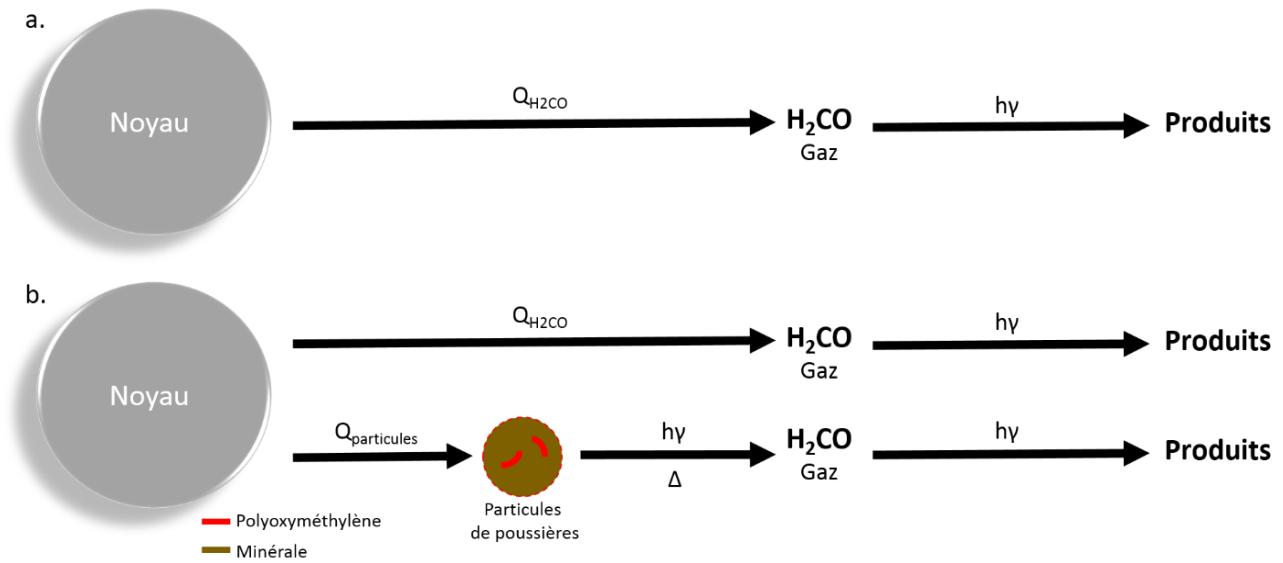


Figure 2.24 : Deux cas de production de formaldéhyde considérés dans cette thèse : a. le formaldéhyde est émis directement et uniquement à partir des glaces du noyau. b. le formaldéhyde est aussi émis à partir de la dégradation thermique et photochimique du polyoxyméthylène présent sur les particules éjectées du noyau.

2.2.3.1. Cas d'une molécule mère

Considérons d'abord le cas d'une molécule mère (**Figure 2.24.a**), c'est-à-dire que le formaldéhyde est émis directement à partir des glaces du noyau, puis photolysé. Il est possible de calculer sa distribution en appliquant l'équation 2, nous obtenons la relation suivante :

$$\frac{dn_{H_2CO}^{gaz} r^2}{dr} = \frac{-J_{H_2CO}}{v_g} n_{H_2CO}^{gaz} r^2$$

Cette équation différentielle permet de calculer la densité $n_{H_2CO}^{gaz}$ (molecules.m⁻³) s'il n'existe pas de source distribuée dans la comète, selon les hypothèses du modèle de Haser. Il est nécessaire de prendre en compte une condition initiale afin de résoudre cette équation, ici, elle correspond à une quantité de formaldéhyde émise directement à partir du noyau Q_{H_2CO} , en molécule par seconde.

2.2.3.2. Cas d'une source distribuée de formaldéhyde

L'évolution de la densité de formaldéhyde produite à partir de la dégradation photochimique et thermique de polyoxyméthylène présent sur les particules de poussières (**Figure 2.24.b**) peut être calculée à partir d'un système de deux équations.

Calculons dans un premier temps l'évolution du formaldéhyde en phase gazeuse en reprenant l'équation de conservation de la matière :

$$\frac{d(n_{H_2CO}^{gaz} r^2)}{dr} = \frac{r^2}{v_g} [Sources - Puits]$$

$n_{H_2CO}^{gaz}$ étant la densité volumique (molécules.m⁻³), r la distance au noyau (m), v_g la vitesse d'expansion des gaz (m.s⁻¹), et les sources et puits seront développés ci-dessous.

- Puits

- Photodissociation du formaldéhyde = $n_{H_2CO}^{gaz}(r) J_{H_2CO}$

Avec J_{H_2CO} étant la constante de photolyse du formaldéhyde.

- Sources

- Dégradation photochimique du polyoxyméthylène = $n_p(r) C' \sigma_p$

$n_p(r)$ correspond au nombre de particules de la classe p considérée (m⁻³), ce terme peut s'exprimer à partir de la relation suivante :

$$n_p(r) = \frac{Q_p}{4\pi v_p r^2} \text{ (Eq 7)}$$

Avec Q_p , le nombre de particules éjectées du noyau par seconde, et v_p la vitesse des particules (de classe p).

C' est un terme relatif à la vitesse de photolyse du polyoxyméthylène en molécule.m².s⁻¹. Il décrit la production de l'espèce gazeuse, le formaldéhyde. Il peut être calculé à partir de la relation :

$$C' = \int_{\lambda} f_{\lambda} \phi_{\lambda}^M d\lambda$$

avec f_{λ} qui correspond à l'irradiance solaire en photons.m⁻².s⁻¹.nm⁻¹ et ϕ_{λ} au rendement quantique de production de l'espèce considérée, ici le formaldéhyde, en fonction de la longueur d'onde.

- σ_p correspond à la section d'une particule équivalente exposée aux UVs solaires. La particule étant sphérique, cette section peut s'écrire :

$$\sigma_p = \pi R_{p,e}^2(r)$$

Avec $R_{p,e}(r)$ le rayon équivalent, en m, d'une particule de classe p , c'est-à-dire d'une particule qui serait composée uniquement de POM. $R_{p,e}(r)$ est donné à partir de la relation suivante :

$$R_{p,e}(r = 0) = R_{p,0} \left(\frac{\%POM}{100} \frac{\rho_p}{\rho_{H_2CO}} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$R_{p,0}$ correspond au rayon initial de la particule en m, et ρ_p à la masse volumique d'une particule en kg.m^{-3} .

De plus,

$$m_p(r) = \rho_p V_p = \rho_p \frac{4}{3} \pi R_{p,e}^3(r)$$

Ainsi, $R_{p,e}$ peut être remplacé par la relation suivante :

$$R_{p,e}(r) = \left(\frac{3m_p}{4\pi\rho_p} \right)^{1/3}$$

ρ_p la densité d'une particule (kg.m^{-3}), $R_{p,e}$ et V_p le rayon (m) et le volume (m^3) de la particule sphérique, et m_p la masse d'une particule (kg).

Ainsi, le terme de production représentant la dégradation photochimique du polyoxyméthylène peut être développée de la manière suivante :

$$n_p(r) C' \sigma_p = \frac{Q_p}{4\pi v_p r^2} C' \pi \left(\frac{3m_p(r)}{4\pi\rho_p} \right)^{2/3}$$

$$\Leftrightarrow n_p(r) C' \sigma_p = \frac{Q_p}{4v_p r^2} C' \left(\frac{3}{4\pi\rho_p} \right)^{2/3} m_p^{2/3}(r)$$

- Dégradation thermique du polyoxyméthylène = $n_p(r) k_{POM} N_A m_p$ (Eq 8)

k_{POM} correspond à la constante cinétique liée à la dégradation thermique du polyoxyméthylène, et régie par la loi d'Arrhénus :

$$k = A e^{-E_a/RT}$$

avec la constante des gaz parfaits $R=8,314 \text{ J.mol}^{-1}\text{K}^{-1}$, une constante d'Arrhenius $A= 8,7.10^8 \text{ mol.kg}^{-1} \text{ s}^{-1} \pm 60\%$ et une énergie d'activation $E_a=74,2 \text{ kJ.mol}^{-1} \pm 10\%$ (Cottin et al., 2001).

Enfin, m_p représente la masse d'une particule équivalente (kg), et N_A au nombre d'Avogadro.

Ainsi, le terme de production représentant la dégradation photochimique du polyoxyméthylène peut être développée de la manière suivante :

$$n_p(r) k_{POM} N_A m_p(r) = \frac{Q_p}{4\pi v_p r^2} k_{POM} N_A m_p(r)$$

Finalement, en reprenant l'équation de conservation de la matière :

$$\frac{d(n_{H_2CO}^{gaz} r^2)}{dr} = \frac{r^2}{v_g} [Sources - Puits]$$

$$\leftrightarrow \frac{d(n_{H_2CO}^{gaz} r^2)}{dr} = \frac{r^2}{v_g} \left(\sum \left[\frac{Q_p}{4v_p r^2} C' \left(\frac{3}{4\pi\rho_p} \right)^{2/3} m_p^{2/3}(r) + \frac{Q_p}{4\pi v_p r^2} k_{POM} N_A m_p(r) \right] - J_{H_2CO} n_{H_2CO}^{gaz}(r) \right)$$

$$\leftrightarrow \frac{d(n_{H_2CO}^{gaz} r^2)}{dr} = \sum \frac{Q_p}{4v_p v_g} C' \left(\frac{3}{4\pi\rho_p} \right)^{2/3} m_p^{2/3}(r) + \sum \frac{Q_p}{4\pi v_p v_g} k_{POM} N_A m_p(r) - \frac{J_{H_2CO}}{v_g} n_{H_2CO}^{gaz}(r) r^2$$

De la même manière, l'évolution de la quantité en masse de polyoxyméthylène, $m_p(r)$, sur une particule de poussières cométaires en fonction de la distance au noyau. Cette fois, on considère deux termes de puits, développés précédemment, correspondant à la photo-dégradation et la thermo-dégradation du polyoxyméthylène :

$$\frac{dm_p(r)}{dr} = -\frac{C\pi}{v_p} \left(\frac{3}{4\pi\rho_p} \right)^{2/3} m_p^{2/3}(r) - \frac{M_{H_2CO} k_{POM}}{v_p} m_p(r)$$

M_{H_2CO} correspond à la masse molaire du formaldéhyde. C est un terme relatif à la vitesse de photolyse du polyoxyméthylène, en $kg.m^{-2}.s^{-1}$, il peut être trouvé à partir de données expérimentales mais aussi du spectre solaire publié dans Mount and Rottman (1981). Il peut également être calculé à partir de la relation suivante :

$$C = \sum_i m_i \int_{\lambda} f_{\lambda} \phi_{\lambda}^i d\lambda$$

f_{λ} représente l'irradiance solaire en $photons.m^{-2}.s^{-1}.nm^{-1}$, ϕ_{λ}^i le rendement quantique de production en fonction de la longueur d'onde et m_i la masse de la molécule i en kg. L'ensemble des espèces gazeuses produites par l'irradiation UV du polyoxyméthylène doit être prise en compte pour effectuer le calcul, celui-ci se photo-dégrade en H_2CO , CO et $HCOOH$ et CO_2 . De plus, le rendement quantique de CO est égal à celui de H_2CO . En considérant m_x , les masses respectives des différentes molécules produites, C peut s'écrire :

$$C = ((m_{H_2CO} + m_{CO}) \int_{\lambda} f_{\lambda} \phi_{\lambda}^{H_2CO} d\lambda) + (m_{HCOOH} \int_{\lambda} f_{\lambda} \phi_{\lambda}^{HCOOH} d\lambda) + (m_{CO_2} \int_{\lambda} f_{\lambda} \phi_{\lambda}^{CO_2} d\lambda)$$

Finalement, afin de modéliser le cas de source distribuée de formaldéhyde, nous avons utilisé le système d'équation suivant :

$$\frac{dm_p}{dr} = -\frac{c\pi}{v_p} \left(\frac{3}{4\pi\rho}\right)^{2/3} m_p^{2/3}(r) - \frac{M_{H_2CO}k_{POM}}{v_p} m_p(r) \quad (\text{Equation 9})$$

$$\frac{dn_{H_2CO}^{gaz} r^2}{dr} = \sum \frac{Q_p}{4v_p} \frac{c'}{v_g} \left(\frac{3}{4\pi\rho}\right)^{2/3} m_p^{2/3}(r) + \sum \frac{Q_p}{4\pi v_p} \frac{k_{POM} N_A}{v_g} m_p(r) - \frac{J_{H_2CO}}{v_g} n_{H_2CO}^{gaz} r^2 \quad (\text{Equation 10})$$

L'équation 9 représente l'évolution de la quantité en masse, de polyoxyméthylène, sur les particules de poussières éjectées du noyau, et l'équation 10 correspond à l'évolution de la densité volumique de formaldéhyde dans la phase gazeuse.

La condition initiale de l'équation 7 est donnée par la masse au temps 0. Celle-ci est définie à partir du rayon équivalent de la particule :

$$m_{p,e}(r=0) = \frac{\rho_{H_2CO} 4\pi R_{p,e}^3(r=0)}{3}$$

ρ_{H_2CO} correspond à la masse volumique de formaldéhyde en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$, et $R_{p,e}$ au rayon équivalent d'une particule qui serait composée uniquement de POM, en m.

La résolution du système d'équations peut également se faire de manière analytique (Cottin et al., 2004). Mon modèle étant configuré pour utiliser la méthode d'Euler présenté dans la partie 2.1.2, j'ai uniquement travaillé avec les équations différentielles 9 et 10. L'avantage de l'approche numérique est qu'elle pourrait facilement s'adapter au cas où la vitesse des particules ne serait plus considérée comme constante.

2.2.4. Evolution de la densité de la glycine

Comme il a été expliqué dans la section 1.2, la glycine semble présenter une source distribuée dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Afin d'interpréter les données obtenues par la sonde Rosetta, deux mécanismes de production de sources distribuées seront considérés dans cette thèse. Le premier cas implique que la glycine est formée à partir de la sublimation de glycine à l'état solide présente sur les particules éjectées du noyau (**Figure 2.23.b**). Le second cas explique la présence de la glycine gazeuse par la sublimation de la glace d'eau sur les particules éjectées du noyau, cette glace d'eau contenant des molécules de glycine piégées dans sa matrice et qui subliment en même temps qu'elle (**Figure 2.23.c**). En effet, des mécanismes chimiques qui seront présentés dans le chapitre 4

montrent que la glycine pourrait se former directement dans les glaces cométaires (Bossa et al., 2010; Garrod, 2013).

Contrairement au cas du formaldéhyde, pour lequel le formalisme mathématique décrivant la production de sources distribuées à partir du polyoxyméthylène était déjà établi dans des travaux précédents, dans le cas de la glycine, la mise en équation et la paramétrisation des mécanismes décrits ci-dessous sont le résultat de mon travail. Dans cette partie, je vais développer les équations différentielles qui ont permis de modéliser les différents cas possibles.

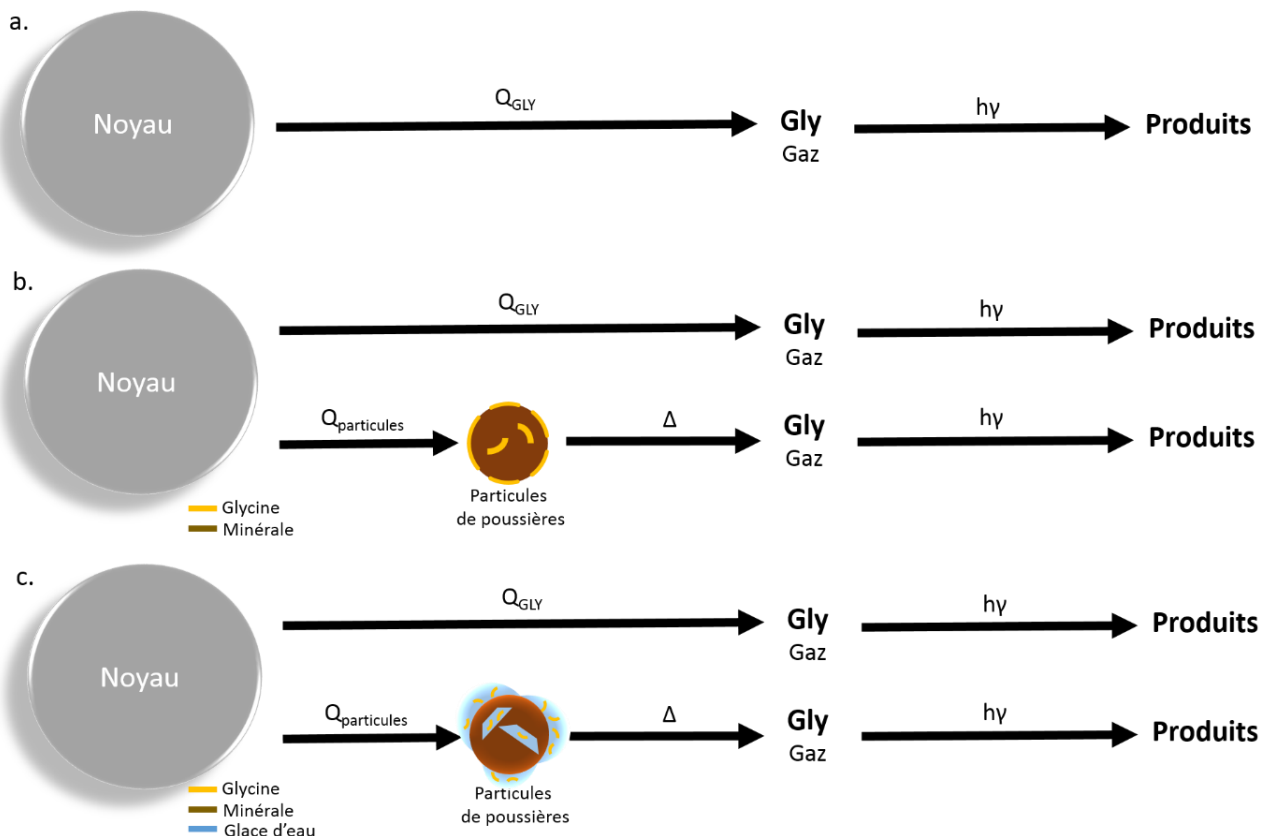


Figure 2.25 : Trois cas de production de glycine considérés dans cette thèse : a. la glycine est émise directement et uniquement à partir des glaces du noyau. b. la glycine est émise à partir de la sublimation de glycine solide sur les particules éjectées du noyau. c. la glycine est incluse dans de la glace d'eau sur les particules éjectées du noyau, et sublime en même temps que cette glace d'eau.

2.2.4.1. Cas d'une molécule mère

Considérons dans un premier temps le cas d'une molécule mère de glycine, c'est-à-dire provenant d'une source nucléaire (**Figure 2.25.a**).

La relation de Hertz-Knudsen (Miyamoto, 1933) permet de calculer le flux d'évaporation des molécules de glycine à partir d'une surface (en $\text{molec.cm}^{-2}.\text{sec}^{-1}$) :

$$\frac{dN}{dt} = A_p \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_{Gly} RT}}$$

A_p correspond à la surface à partir de laquelle les molécules subliment, ici elle correspond à la surface occupée par la glycine sur une particule cométaire, α représente le coefficient d'adhésion de la molécule à la surface (dans ce cas, en l'absence de données dans la littérature, nous considérons par défaut qu'il vaut 1). M_{Gly} est la masse molaire de la glycine ($g.mol^{-1}$), T la température de la particule d'où sublime la glycine (K), N_A et R sont respectivement le nombre d'Avogadro et la constante des gaz parfaits ($J.mol^{-1}.K^{-1}$). Enfin, P_{eq} (exprimée en Pa) correspond à la pression de vapeur de la glycine, calculée à partir de la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{eq} = P_{ref} e^{\frac{L_x}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_{eq}} \right)}$$

P_{ref} et T_{ref} étant la pression (Pa) et la température (K) pour lesquelles les mesures de références ont été effectuées, T_{eq} la température de la particule étudiée (K), et L_x l'enthalpie de sublimation de la glycine ($J.mol^{-1}$).

Il est possible de calculer la densité de glycine n_{gly} ($molécules.m^{-3}$) émise directement à partir de la sublimation des glaces du noyau, en appliquant l'équation 2 dans laquelle on retrouve un terme qui correspond la photodissociation de la glycine :

$$\frac{dn_{gly}^{gaz} r^2}{dr} = \frac{-J_{gly}}{v_g} n_{gly}^{gaz} r^2$$

J_{gly} correspond à la constante de photolyse de la glycine, et v_g à la vitesse d'expansion des gaz.

2.2.4.2. Cas d'une source distribuée de glycine

Les relations qui vont suivre peuvent s'appliquer au cas de la glycine solide, et au cas de la glace d'eau présente sur les particules, ainsi on désignera ces molécules par la lettre X.

Calculons dans un premier temps l'évolution de la glycine en phase gazeuse en reprenant l'équation de conservation de la matière :

$$\frac{d(n_{gly}^{gaz} r^2)}{dr} = \frac{r^2}{v_g} [Sources - Puits]$$

n_{gly} étant la densité volumique ($molécules.m^{-3}$), r la distance au noyau (m), v_g la vitesse d'expansion des gaz ($m.s^{-1}$), et les sources et puits seront développés ci-dessous.

- Puits

- Photodissociation de la glycine = $n_{gly}^{gaz}(r) J_{gly}$

Avec J_{gly} étant la constante de photolyse de la glycine.

- Sources

- Sublimation de la glace de glycine ou d'eau = $n_p(r) \frac{dN}{dt}$

$n_p(r)$ correspond au nombre de particules de la classe considérée (m^{-3}), ce terme peut s'exprimer à partir de la relation suivante :

$$n_p(r) = \frac{Q_p}{4\pi v_p r^2}$$

Avec Q_p , le nombre de particules éjectées du noyau par seconde, et v_p la vitesse des particules.

$\frac{dN}{dt}$ est définie à partir de la relation de Hertz-Knudsen, soit :

$$\frac{dN}{dt} = A_p \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X R T}}$$

Avec A_p , la surface de la particule considérée (m^{-2}) :

$$A_p = 4\pi R_{p,e}^2(r)$$

Avec :

$$R_{p,e}(r = 0) = R_{p,0} \left(\frac{\%GLY}{100} \frac{\rho_p}{\rho_{gly}} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$R_{p,0}$ correspond au rayon initial de la particule en m, et ρ_p la masse volumique d'une particule en $g.m^{-3}$.

Or,

$$m_X = \rho_X V = \rho_X \frac{4}{3} \pi R_{p,e}^3$$

Ainsi, $R_{p,e}$ peut être remplacé par la relation suivante:

$$\text{Donc } R_{p,e}(r) = \left(\frac{3m_X}{4\pi\rho_X} \right)^{\frac{1}{3}}$$

N_A représente le nombre d'Avogadro, ρ_X la densité de la glycine ou de l'eau en $g.m^{-3}$, A , R_p et V l'aire, le rayon et le volume de la particule sphérique. Enfin, m_X peut être remplacé par $m_X = n_X \times \frac{M_X}{N_A}$, n_X étant le nombre de molécules de glycine, ou d'eau et M_X la masse molaire de la glycine, ou d'eau. Ainsi, la surface de la particule peut s'écrire :

$$A_p = 4\pi \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{\frac{2}{3}} n_{gly}^{\frac{2}{3}}$$

Et la relation Hertz-Knudsen :

$$\frac{dN}{dt} = 4\pi \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X RT}} n_{gly}^p \quad 2/3$$

Finalement, en reprenant l'équation de conservation de la matière :

$$\begin{aligned} \frac{d(n_{gly}^{gaz} r^2)}{dr} &= \frac{r^2}{v_g} \left[n_p \frac{dN}{dt} - J_{gly} n_{gly}^{gaz} \right] \\ \Leftrightarrow \frac{d(n_{gly}^{gaz} r^2)}{dr} &= \frac{r^2}{v_g} \left[\frac{Q_p}{4\pi v_p r^2} 4\pi \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X RT}} n_{gly}^p \quad 2/3 - J_{gly} n_{gly}^{gaz} \right] \\ \Leftrightarrow \frac{d(n_{gly}^{gaz} r^2)}{dr} &= \frac{Q_p}{v_p v_g} \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X RT}} n_{gly}^p \quad 2/3 - \frac{J_{gly}}{v_g} n_{gly}^{gaz} r^2 \end{aligned}$$

De la même manière, il est possible de calculer l'évolution de la glycine, ou de la glace d'eau, présente initialement sur les particules cométaires. Cette fois, il existe uniquement un terme de puit. Celui-ci correspond à la sublimation de la glycine ou de la glace d'eau présenté précédemment, soit :

$$\frac{dN}{dt} = 4\pi \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X RT}} n_{gly}^p \quad 2/3$$

Ainsi, l'évolution de la glycine, ou de la glace d'eau, présente sur les particules s'écrit :

$$\frac{dn_{gly}^p}{dt} = -4\pi \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X RT}} n_{gly}^p \quad 2/3$$

Ou encore :

$$\frac{dn_{gly}^p}{dr} \frac{dr}{dt} = -4\pi \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X RT}} n_{gly}^p \quad 2/3$$

Avec $v_p = \frac{dr}{dt}$ qui correspond à la vitesse des particules :

$$\frac{dn_{gly}^p}{dr} = -\frac{4\pi}{v_p} \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X RT}} n_{gly}^p \quad 2/3$$

Finalement, Afin de modéliser le cas de source distribuée de la glycine, nous avons utilisé le système d'équation suivant :

$$\frac{dn_{gly}^p}{dr} = -\frac{4\pi}{v_p} \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X R T}} n_{gly}^p{}^{2/3} \quad (\text{Equation 11})$$

$$\frac{d(n_{gly}^{gaz} r^2)}{dr} = \frac{Q_p}{v_p v_g} \left(\frac{3M_X}{4\pi\rho_X N_A} \right)^{2/3} \frac{\alpha P_{eq} N_A}{\sqrt{2\pi M_X R T}} n_{gly}^p{}^{2/3} - \frac{J_{gly}}{v_g} n_{gly}^{gaz} r^2 \quad (\text{Equation 12})$$

L'équation 11 représente la vitesse d'évaporation des molécules de glycine, ou des molécules d'eau, en molecules.cm⁻³, présentes sous la forme solide sur les particules éjectées du noyau. L'équation 12 correspond à l'évolution de la densité de la glycine sous la forme gazeuse à partir des particules éjectées du noyau. Pour ce cas, on considère une condition initiale qui correspond à la quantité de glycine émise directement du noyau, en molécules par seconde.

La condition initiale de l'équation 9 est donnée par la masse au temps 0 :

$$m_{p,e}(r = 0) = \frac{\rho_{gly} 4\pi R_{p,e}^3 (r = 0)}{3}$$

ρ_{gly} correspond à la masse volumique de glycine en g.m⁻³, et $R_{p,e}$ au rayon équivalent d'une particule qui serait composée uniquement de glycine, en m.

Les différents paramètres utilisés pour modéliser la source distribuée de glycine sont présentés sur la Table 2.11. Les paramètres, tels que l'enthalpie de sublimation, la pression de référence et la température de référence sont différents selon la cinétique considérée, c'est-à-dire qu'ils sont propres à la glycine et à l'eau.

Glycine	Eau
L=137100 J.mol ⁻¹ (de Kruif et al., 1979)	L=52000 J.mol ⁻¹ (Wagner et al., 2011)
P _{ref} =0,4 Pa (de Kruif et al., 1979)	P _{ref} =611,657 Pa (Wagner et al., 2011)
T _{ref} =419,92 K (de Kruif et al., 1979)	T _{ref} =273 K (Wagner et al., 2011)
$\rho_{gly}=1,61.10^6 \text{ g.m}^{-3}$	
$J_{gly}=10^{-2} \text{ s}^{-1}$ (Saïagh et al., 2015)	
$Q_{gaz}=5.10^{26} \text{ molec.s}^{-1}$ (Biver et al., 2019)	
$v_g=750 \text{ m.s}^{-1}$ (Biver et al., 2019)	

Tableau 2.11 : Paramètres nécessaires à la modélisation de la source distribuée de glycine pour les deux cas considérés. La vitesse et la production de gaz correspondent au mois de mars 2015.

2.2.5. Les limites du modèle de Haser

Afin de résoudre l'équation de conservation de la matière, plusieurs hypothèses sont prises en compte. Mais la réalité est bien différente et plus complexe.

L'une des hypothèses du modèle de Haser consiste à considérer que la production à partir du noyau, pour les différentes espèces est à l'état stationnaire, or celle-ci n'est pas constante même à des échelles de temps courtes. Dans l'atmosphère de la comète 1P/Halley, il a été démontré que les taux de production des molécules de carbone diatomique (C_2) et du cyanure (CN) présentent un profil sinusoïdal dont la période est égale à celle de la rotation du noyau (soit environ 7 jours) (Schleicher et al., 1990). De la même manière, dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, il a été montré que les concentrations de trois molécules (H_2O , CO, CO_2) varient au cours de la période de rotation (environ 12,4 heures) de la comète avec une résolution temporelle, ce qui atteste d'une production non stationnaire dans le temps (Hässig et al., 2015). Ces observations ont montré qu'il existe des variations diurnes et longitudinales importantes dans la coma.

Une autre hypothèse du modèle de Haser décrit la vitesse d'expansion des gaz comme étant constante et de manière radiale. Cependant, Lämmerzahl et al. (1988) ont montré, grâce à des mesures *in-situ* par spectrométrie de masse dans la comète de Halley, que les gaz semblent être accélérés à des distances supérieures à 10^4 km du noyau. Des modélisations, menées par Combi (1989) à partir de ces mêmes mesures, démontrent que la vitesse d'expansion des gaz est quasiment constante à des distances entre 50 et 5000 km du noyau. Finalement, cette hypothèse n'est pas irréaliste si on s'intéresse à des distributions n'allant pas au-delà d'une distance de 10^4 km. En revanche, la vitesse radiale d'une molécule fille produite à partir d'une molécule mère n'est pas représentée fidèlement dans notre modèle. En effet, lors de la photodissociation d'une molécule mère, de l'énergie cinétique induite par les photons incidents, est reçue par les molécules filles impliquant alors une accélération. Celle-ci présente une direction isotrope dans le référentiel de mouvement de la molécule mère.

Enfin, il a été observé que les noyaux cométaires ne sont pas sphériques. De plus le noyau n'est pas éclairé de la même manière de chaque côté, il existe un côté jour, et un autre nuit. De ce fait, la température, et l'émission ne sont pas tout à fait homogène sur toute la surface telle que le décrit le modèle de Haser.

2.3. Paramètres d'entrée

La résolution des équations différentielles présentées précédemment nécessite de connaître la température et de la vitesse de chaque particule. Dans les atmosphères cométaires, les particules de poussières émises à partir du noyau, n'ont pas toutes la même taille ni la même masse. Afin d'interpréter au mieux les données d'observations, nous avons modélisé les sources distribuées à partir de descriptions réalistes de populations des particules éjectées, qui présentent chacune leur

propre vitesse d'expansion et température (McDonnell et al., 1991). C'est-à-dire avec des tailles, des températures et des vitesses différentes selon leur classe de taille et de masse.

2.3.4. Distribution des particules cométaires

Pour la majorité des comètes étudiées dans cette thèse, nous ne disposons pas de données aussi précises que pour celles qui ont été visitées par des sondes spatiales : la comète 1P/Halley et la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. De ce fait, certains paramètres nécessaires à mes modélisations, telle que la distribution en taille et en masse des particules, ne sont pas toujours connus. Afin d'appréhender au mieux les sources distribuées dans les comètes que j'ai traitées, j'ai choisi d'appliquer les caractéristiques des distributions des comètes 1P/Halley et 67P/Churyumov-Gerasimenko aux comètes pour lesquelles ces données manquaient.

La distribution en taille mesurée dans la comète 1P/Halley est présentée sur la **Figure 2.26**. Cette production de poussières a été calculée par Crifo and Rodionov (1997) à partir de données mesurées par la sonde spatiale Giotto (McDonnell et al., 1991). Les intervalles entre les différentes classes de tailles sont des intervalles logarithmiques. La densité des particules a été estimée à 1 g.cm^{-3} . Les particules d'une taille allant jusqu'à environ 10^{-4} m proviennent de mesures directes *in situ* alors que les données relatives aux plus grosses particules correspondent à des extrapolations des linéaires des mesures (Crifo and Rodionov, 1997). De la même manière que pour la distribution dans la comète 67P, la plus grande fraction de la masse totale des particules se trouve dans les particules de plus grosses tailles. On peut noter qu'une distribution similaire a été mesurée pour la comète 81P/Wild 2 (Green et al., 2004; Tuzzolino et al., 2004).

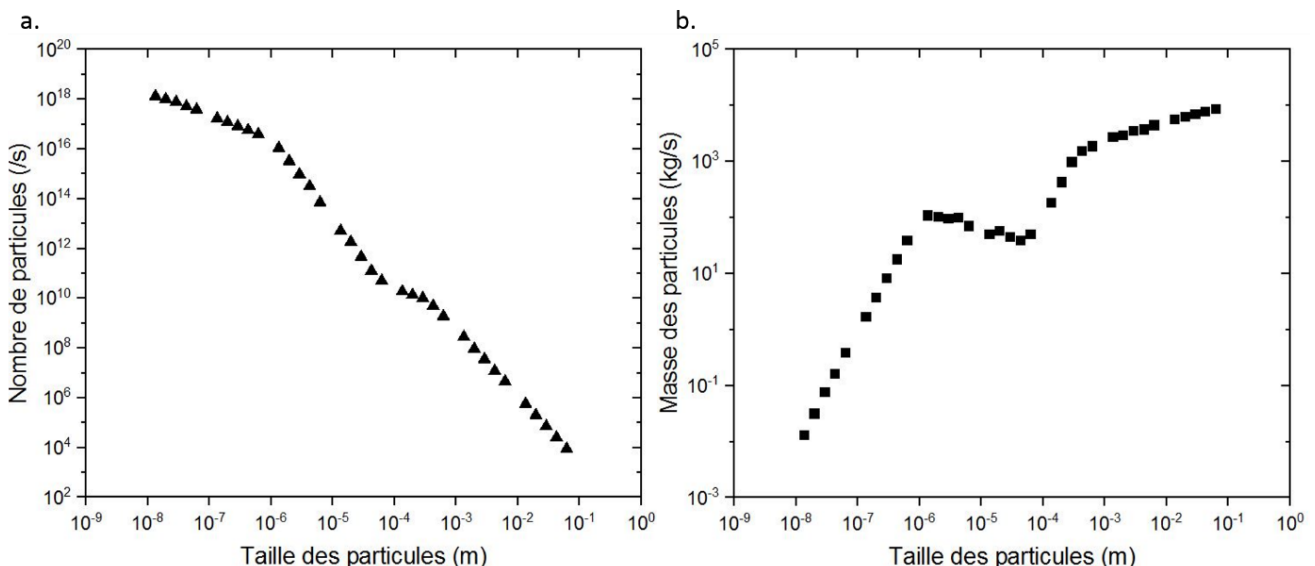


Figure 2.26 : Distribution a. en nombre et b. en masse des particules dans la comète Halley d'après McDonnell et al. (1991).

Pour ce qui concerne la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, la distribution en taille et en masse des particules a été calculée à partir de la loi de puissance $\alpha = -1,8 \pm 0,4$ proposée par Merouane et al. (2016) (**Figure 2.27**). Celle-ci a été déterminée à partir des observations lors de la période entre Aout 2014 et Mai 2015. Le spectromètre de masse COSIMA a mis en évidence la présence de particules de la taille du micromètre (Merouane et al., 2016), l'instrument GIADA (Grain Impact Analyser and Dust Accumulator) a détecté des particules autour de quelques millimètres (Della Corte et al., 2016; Rinaldi et al., 2017), enfin OSIRIS (Optical Spectroscopic and Infrared Remote Imaging System) a observé des particules autour du centimètre (Fulle et al., 2010; Fulle et al., 2016b). J'ai donc considéré une distribution en taille des particules allant du nanomètre au centimètre.

La **Figure 2.28** présente la distribution en nombre et en masse pour chaque classe de taille de particules, que j'ai déduite des résultats de Merouane et al. (2016) en considérant une densité des particules de 1 g.cm^{-3} . Celle-ci montre la présence d'une quantité importante de particules de petites tailles en nombre, mais qui représentent une petite fraction de la masse éjectée du noyau. Inversement, les plus grosses particules sont moins nombreuses mais représentent la majorité de la masse totale.

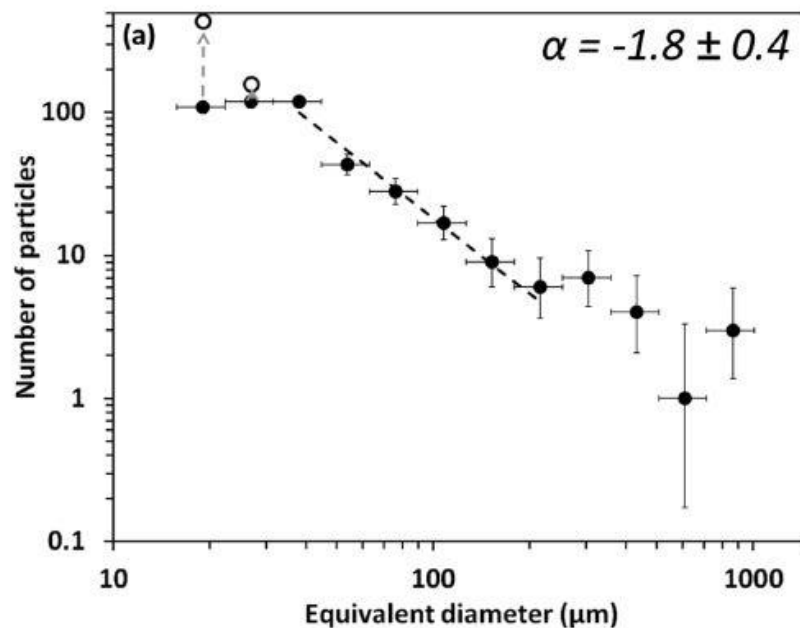


Figure 2.27 : Distribution en taille des particules dans la comète 67P mesurée entre le mois d'août 2014 et le mois de mai 2015. Les pointillés représentent le meilleur ajustement d'une loi de puissance à la distribution en taille des particules entre 30 et 150 µm. L'indice de puissance est indiqué en haut à droite. Crédit : (Merouane et al., 2016)

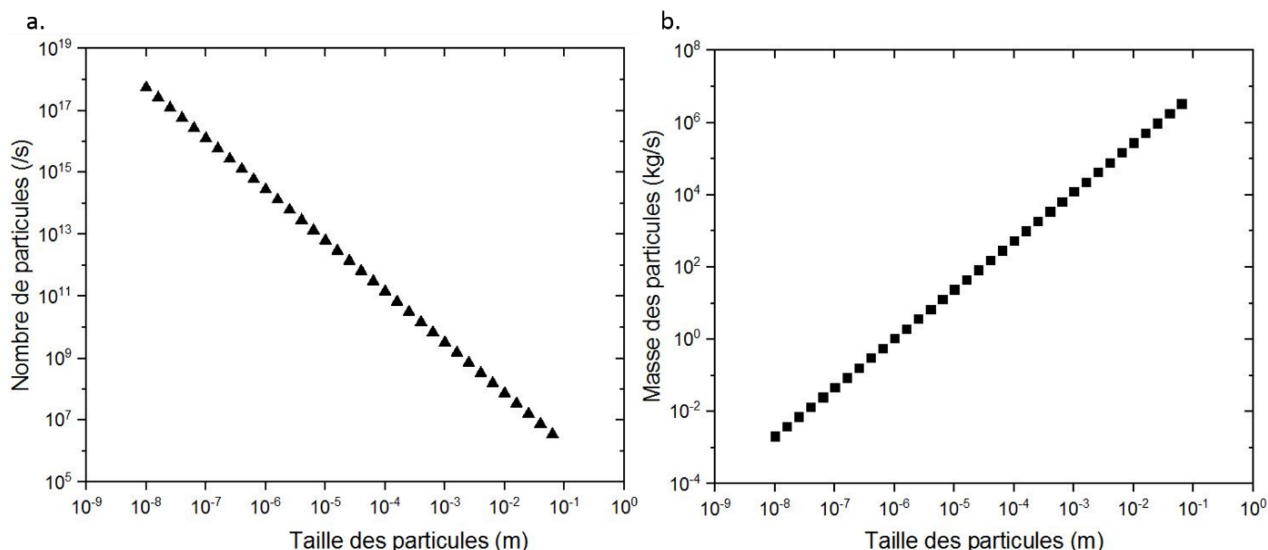


Figure 2.28 : Distribution a. en nombre et b. en masse des particules dans la comète 67P.

Cette loi de puissance a également été utilisée dans le cadre de l'étude de source distribuée de formaldéhyde dans les six comètes étudiées. La distribution a alors été normalisée en masse au rapport poussières sur gaz souhaité propre à chaque comète.

Pour ce qui concerne l'étude de la source distribuée de glycine dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, j'ai naturellement utilisé les mesures de poussières de cette même comète. Pour ce qui concerne le formaldéhyde, j'ai testé les deux types de distribution (1P/Halley et 67P/Churyumov-Gerasimenko) et j'ai travaillé plus particulièrement avec celle de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko.

2.3.5. Température des particules

La température des particules de poussières a été déterminée à partir de l'équilibre radiatif, c'est-à-dire que l'énergie du flux solaire incident absorbé est égale à l'énergie émise. De manière plus précise, la température de chaque classe de particules a été calculée à partir d'un modèle basé sur la théorie de diffusion de Mie développé pour des particules cométaires par Yves Bénilan, chercheur au Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA). Ce modèle s'applique à des particules sphériques dont la porosité ou la fraction en masse de matière organique peuvent varier. J'ai donc pu calculer les températures pour des distances héliocentriques propres à chaque comète lors des mesures que je cherchais à reproduire.

Afin de calculer les coefficients d'absorption des particules et par la suite les températures, il est nécessaire de connaître l'indice optique équivalent de chaque particule, de ce fait, deux modèles ont été utilisés. D'abord, le modèle développé par Greenberg and Hage (1990), qui permet de remonter à l'indice optique d'une particule composée d'un noyau de silicates et d'un manteau constitué de matières organiques réfractaires. Ensuite, Hage and Greenberg (1990) présentent un modèle permettant de calculer l'indice optique d'une particule poreuse dont la porosité et l'indice

optique de Greenberg sont bien connus. Finalement, l'indice optique équivalent peut-être calculé en appliquant successivement ces deux modèles.

Les indices de réfraction qui ont été utilisés sont ceux du pyroxène ($Mg_{0.6}Fe_{0.4}SiO_3$) (Dorschner et al., 1995), et du graphite (Jager et al., 1998). Le pyroxène correspond à la composante silicatée des particules, et présente une faible absorption dans le domaine du visible. Le graphite représente la matière organique des particules, il fournit la limite supérieure pour un composé organique très absorbant (Fray et al., 2006).

Les différents profils de températures seront présentés dans les chapitres suivant car ils sont propres à chaque comète, notamment du fait de leur distance héliocentrique différente. Nous montrerons que la température des particules, particulièrement les plus grosses, influe significativement sur l'évolution des profils de formaldéhyde et de glycine.

2.3.6. Vitesses des particules

2.3.6.1. Cas du formaldéhyde

Afin d'étudier la source distribuée de H_2CO dans les quatre comètes : 8P/Tuttle, C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz) et C/1996 B2 (Hyakutake), nous devons calculer la vitesse des particules de poussières, et pour ce faire, j'ai travaillé avec Stavro Ivanovski, chercheur à la National Institute of Astrophysics (INAF) (Rome, Italie). L'incertitude sur les paramètres qui décrivent la coma circumnucléaire de ces comètes et le manque de mesures précises des quantités physiques telles que l'abondance du gaz, la température ou le rayon du noyau, soulèvent la question de savoir comment nous pouvons estimer les vitesses des poussières avec des modèles dynamiques de gaz appropriés. Pour ce faire, nous avons comparé les vitesses calculées selon trois approches différentes :

En utilisant la relation de Wallis (1982) (pas de gravité exercée à partir du noyau, pas de pression de radiation solaire) considérée dans Crifo (1995). Cottin et al. (2004) et Fray et al. (2006) ont appliqué cette relation pour les comètes 1P/Halley et C/1995 O1 (Hale Bopp). Celle-ci est définie par les équations suivantes :

$$v_{grain}(a, Q_{gaz}) = \frac{W}{0,9+0,45X^{0,615}/2+0,275X^{0,615}}$$

$$\text{Où, } W = \sqrt{\left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1}\right) \left(\frac{\gamma k T_{gaz}^0}{m_{gaz}}\right)}$$

$$X = \frac{2\pi a \rho_{grain} W R_n}{m_{gaz} Q_{gaz}}$$

Ce modèle dépend du rayon de la particule considérée a (en m), et de la production totale de gaz Q_{gaz} (en molécules par seconde). Dans ce système d'équation, R_n représente le rayon du noyau de la comète étudiée (en m), ρ_{grain} la densité de la particule, k est la constante de Boltzmann en ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$). γ est le ratio entre la capacité calorifique et le volume, et vaut $4/3$ pour un gaz polyatomique. Enfin, T_{gaz}^0 correspond à la température à la surface de la particule (en K), et m_{gaz} se rapporte à la masse totale de gaz (en g).

En utilisant les relations décrites dans Zakharov et al. (2018) qui caractérisent le mouvement de la poussière dans un flux en expansion, la vitesse terminale des particules de poussières a été calculée, ainsi que le temps nécessaire pour l'atteindre et la distance à laquelle elle est atteinte pour les quatre comètes. Ce modèle prend en compte la gravité et la pression du rayonnement solaire.

En utilisant le modèle « $3D+t$ » de poussière non sphérique (Ivanovski et al., 2017b), les vitesses de la poussière ont été calculées en supposant des formes de particules sphéroïdales et des valeurs plausibles pour les propriétés physiques du noyau (par exemple, le rayon et la densité du noyau).

Nous avons comparé la qualité de l'approximation de Wallis pour le calcul des vitesses de la poussière avec celles calculées avec les équations de Zakharov et al. (2018), qui prennent en compte l'entraînement par le gaz, la gravité du noyau et la pression du rayonnement solaire. Dans le cas d'une masse volumique apparente du noyau sphérique égale à 1000 kg/m^3 , nous avons obtenu que pour les comètes 2001 Q4 (NEAT), 2004 Q2 (Machholz) et 1996 B2 (Hyakutake), la gravité et la pression du rayonnement solaire ne régissent pas la dynamique de la poussière (que ce soit pour une distribution de taille de type 1P/Halley ou 67P/Churyumov-Gerasimenko). Par conséquent, l'approximation de Wallis apparaît comme un modèle suffisant qui fournit déjà la principale caractéristique de la dynamique des poussières des particules couvertes par les distributions de taille considérées. Au contraire, pour la comète 8P/Tuttle, les tailles de particules de poussières supérieures à 1 cm (distribution de 67P) et 0,4 cm (1P) doivent être exclues. Il faut noter que cette analyse affirme seulement que les particules ont une dynamique similaire et que cette dernière est régie par l'entraînement par les gaz. Il s'agit seulement d'une estimation qui fournit une limite supérieure sur les valeurs des vitesses de la poussière et où ces vitesses sont surestimées. Quelques simulations avec un modèle $3D+t$ non-sphérique ont été réalisées afin de quantifier la surestimation des vitesses de la poussière. Ces calculs, plus précis, mais très coûteux en temps de calcul, montrent que les vitesses des poussières peuvent être jusqu'à 20% inférieures à celles calculées avec le modèle de Wallis 1982.

En conclusion, nous avons calculé les vitesses des particules de poussières à l'aide de trois approches différentes afin d'obtenir les vitesses les plus plausibles à proximité des quatre comètes en supposant deux distributions connues de la taille de la poussière de 1P/Halley et 67P/Churyumov-Gerasimenko. L'ensemble complet des paramètres que nous avons utilisés est donné dans les **Tableaux 2.4** et **2.7**.

2.3.6.2. Cas de la glycine

Le calcul des vitesses des particules dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko a été mieux contraint du fait des nombreuses mesures effectuées dans la comète. Les vitesses utilisées pour la modélisation de source distribuée de glycine dans cette comète sont représentées sur la **Figure 2.29**. Elles ont été calculées, par Stavro Ivanovski à partir d'un modèle basé sur le mouvement des particules de poussières non sphériques (Fulle et al., 2015; Ivanovski et al., 2017a; Ivanovski et al., 2017b). Elles ont été calculées pour des particules de poussières individuelles de la taille de 10^{-8} m jusqu'au millimètre. Les conditions physiques réelles de la coma, lors de la détection de la glycine le 28 Mars 2015, ainsi que les données enregistrées par l'instrument GIADA à bord de la sonde Rosetta ont été utilisées (Della Corte et al., 2016; Rinaldi et al., 2017). Les paramètres nécessaires à la simulation des vitesses des particules sont stipulés dans le **Tableau 2.12**.

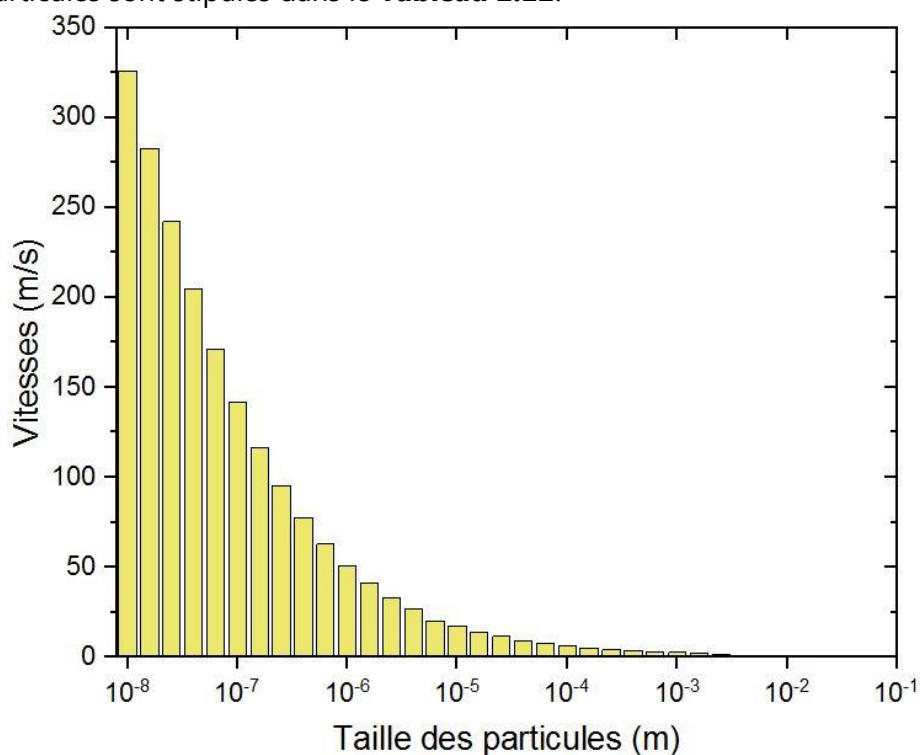


Figure 2.29 : Vitesse des particules de poussières éjectées du noyau de la comète 67P en fonction de leur taille. Les paramètres permettant le calcul de ces vitesses sont présentés sur le Tableau 2.12.

Paramètres d'entrée	Valeur des paramètres	Références
Paramètre des particules		
Taille des particules (m)	$1 \times 10^{-8} - 6.0 \times 10^{-2}$	
Densité des particules (kg.m^{-3})	900	(Fulle et al., 2017; Fulle et al., 2016a)
Ratio de l'aspect sphéroïde, a/b	0,2	(Fulle et al., 2017; Fulle et al., 2016a)
Orientation initiale des particules (deg)	45	(Ivanovski et al., 2017b)
Paramètres du gaz sur la surface initiale (moins de $R_N/50$ au-dessus de la surface du noyau)		
Vitesse du son (m.s^{-1})	500	
Composition du gaz	$10 \times \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	(Fougere et al., 2016)
Taux de production de gaz Q_{gas} (molec.s^{-1})	2×10^{27}	
Température du gaz (K)	100	
Densité du gaz (kg.m^{-3})	$1,0 \times 10^{-6}$	
Paramètre de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko		
Rayon, R_N (m)	$2,0 \times 10^3$	(Sierks et al., 2015)
Masse, m_N (kg)	$1,0 \times 10^{13}$	(Pätzold et al., 2016)
Température de la surface, T_N (K)	200	(Capaccioni et al., 2015)

Tableau 2.12 : Paramètres utilisés pour le calcul des vitesses des particules par Stavro Ivanovski dans la coma de la comète 67P.

La force aérodynamique du gaz s'exerçant sur des particules a été calculée à partir d'une approximation analytique d'Euler pour un gaz idéal en expansion détaillée dans Anderson and Wendt (1995). De plus, les paramètres physiques utilisés ont été ajustés grâce aux taux de production de gaz publiés par Fougere et al. (2016). Les particules sont considérées comme étant des sphères isothermes. Les mesures de la glycine ont été effectuées à proximité du noyau, entre 14 et 26 kilomètres, de ce fait, la force aérodynamique du gaz et la gravité correspondent aux deux principales forces agissant sur les particules de poussières (Hadraoui et al., 2019). Le taux de production de gaz présenté dans le **Tableau 2.12** est en réalité plus élevé que celui utilisé dans mes modèles de simulation de source distribuée ($Q_{\text{H}_2\text{O}} = 5.10^{26} \text{ molec.s}^{-1}$) (Biver et al., 2019), mais cela permet de compenser le fait que les particules ne soient pas sphériques (Ivanovski, Com. Privée). Les particules de quelques millimètres peuvent être soulevées (Ivanovski et al., 2017b) en revanche, la vitesse des particules de poussières dont la taille est supérieure à 10^{-2} m est principalement déterminée par les conditions d'éjection du noyau cométaire, et reste quasiment constante. Leur vitesse terminale ne peut pas être estimée, cependant Fulle et al. (2018) estiment leur vitesse moyenne à environ $1,7 \pm 0,9 \text{ m.s}^{-1}$. La vitesse utilisée pour ces grosses particules dans le modèle de sources distribuées a donc été fixée à 1 m.s^{-1} .

3. Conclusion

Ce chapitre a décrit comment j'ai travaillé sur des mesures de formaldéhyde à partir d'observations depuis le sol, pour les comètes C/1996 B2 (Hyakutake), C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon). Dans un premier temps, celles-ci ont été traitées afin de travailler avec un jeu de données comparables aux résultats de notre modèle. L'objectif est d'interpréter les observations qui ont été faites dans les différentes comètes en simulant des

paramètres physico-chimiques les plus proches possible de la réalité. Deux hypothèses ont été proposées pour le cas du formaldéhyde, et j'ai programmé des modèles en conséquence : d'une part le formaldéhyde pourrait être émis à partir de la sublimation directe des glaces du noyau puis photolysé, d'autre part, celui-ci pourrait être formé à partir de la dégradation thermique et photochimique de polyoxyméthylène présents sur les particules éjectées du noyau (source distribuée).

De la même manière, des mesures de glycine ont été obtenues, à partir d'un spectromètre de masse lors de la mission Rosetta, dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Le profil mesuré met en avant l'existence d'une source distribuée de glycine. Deux cas de sources distribuées ont été proposés. Le premier cas prend en compte le fait que la glycine pourrait provenir de la sublimation de glycine solide sur les particules éjectées du noyau. Dans le second cas, la glycine serait incluse dans de la glace d'eau sur les particules, et sublime en même temps que cette glace d'eau. Dans le cadre de mon travail j'ai considéré que le mélange d'eau et de glycine suivait la cinétique de sublimation de l'eau pure. Ainsi, la différence entre ces deux cas d'étude réside dans la cinétique de sublimation considérée.

J'ai donc conçu des modèles de résolution numérique d'équations différentielles pour la modélisation des sources distribuées de formaldéhyde et de glycine, afin d'évaluer si les observations peuvent être expliquées par un tel mécanisme. Ceux-ci prennent en compte différents paramètres tels que la distribution en nombre et en masse des particules, leur vitesse et leur température. Dans les deux prochains chapitres, je présenterai les résultats que j'ai obtenus en cherchant à ajuster les observations de formaldéhyde et de glycine en cherchant à m'approcher au mieux de conditions crédibles pour chaque comète considérée.

Chapitre 3 : Sources distribuées de formaldéhyde

1. Le formaldéhyde

1.1. Généralités

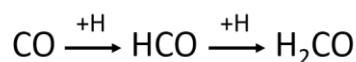
Il a été démontré, en 1861 par le chimiste russe Butlerov, que le formaldéhyde (CH_2O) pourrait être un bon précurseur de certaines briques du vivant (Butlerov, 1861). En effet, il serait à l'origine de la formation de sucres à partir d'une réaction dite de formose, pendant laquelle le formaldéhyde polymérise. Suite à cette réaction, des molécules telles que des pentoses peuvent être formées, c'est à dire des sucres à cinq atomes de carbone, et plus particulièrement du ribose. Celui-ci est un sucre essentiel au vivant puisqu'il rentre dans la composition de l'ARN.

Le formaldéhyde a été détecté pour la première fois, dans le milieu interstellaire en 1969, par Snyder et al. (1969) à l'Observatoire national de radioastronomie des Etats-Unis (NRAO), en absorption au moyen de la transition rotationnelle $1_{11}-1_{10}$ à 4830 Hz. C'est également la première molécule organique polyatomique observée dans le milieu interstellaire. Elle a, par la suite, été détectée dans de nombreuses autres galaxies. C'est par exemple le cas dans la galaxie NGC 7358, dans laquelle Forster et al. (1980) ont détecté la présence de formaldéhyde.

Le formaldéhyde a également été observé dans d'autres environnements. Comme il l'a déjà été mentionné dans les chapitres 1 et 2, il a été détecté dans de nombreuses comètes. Par exemple, les sondes japonaises Suisei et Sakigake, les sondes russes Véga 1 et Véga 2, et la sonde européenne Giotto ont mis en évidence la présence de molécules organiques dans la comète 1P/Halley, dont le formaldéhyde (Meier et al., 1993). De la même manière, celui-ci a été observé dans les comètes C/1996 B2 (Hyakutake) (Biver et al., 1999) et Hale-Bopp (Biver et al., 2002). Plus récemment, des observations depuis la Terre ont mis en évidence la présence de formaldéhyde dans de nombreuses comètes dont les comètes 8P/Tuttle, C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), C/2012 F6 (Lemmon) et C/2012 S1 (ISON) (Cordiner et al., 2014).

1.2. Processus de formation du formaldéhyde

Il existe différents mécanismes de formation du formaldéhyde. Des études théoriques menées par Woon (2002a) ont montré que le formaldéhyde peut être formé par l'hydrogénation successive du monoxyde de carbone (CO) sur des particules dans le milieu interstellaire. La voie suivante a été proposée par (Tielens and Whittet, 1997) :



Les atomes H se déposent sur de la glace de CO à basse température (10-30K) (Van Ijzendoorn et al., 1983). L'étape suivante impliquant le radical HCO se produit lorsque une collision a lieu à la surface des particules (Tielens and Whittet, 1997). Ce mécanisme est considéré comme étant le mécanisme de base de production du formaldéhyde. Cependant, cette réaction n'est pas suffisamment efficace pour expliquer les abondances de formaldéhyde déjà observées (Tielens and Whittet, 1997).

Différentes recherches ont montré que des glaces contenant du méthanol (CH₃OH) entraînent la formation de composés tels que du dihydrogène (H₂), de glycol (C₂H₆O₂) et de formaldéhyde à partir de la photolyse UV (T < 20K), ou de l'irradiation avec des protons (Allamandola et al., 1988; Moore et al., 1996; Moore and Khanna, 1991).

Enfin, il a été démontré par Cottin et al. (2000) que le formaldéhyde est la principale espèce gazeuse produite par la photodégradation du polyoxyméthylène à 122 et 147 nm. La décomposition thermique du polyoxyméthylène a été modélisée dans les comètes 1P/Halley (Cottin et al., 2004; Fray et al., 2004b) et C/1995 (Hale-Bopp) (Fray et al., 2006).

2. Le polyoxyméthylène

L'appellation du polyoxyméthylène –(CH₂O)_n– dépend de sa terminaison et de sa longueur de chaîne (Walker, 1964). Généralement, celui-ci possède le groupement –OH comme terminaison, dans ce cas précis son appellation dépend de sa longueur de chaîne. En effet, une chaîne de la taille de 3 à 8 monomères lui confère plus précisément le nom de lower polyoxyméthylène glycol. Lorsque sa taille vaut entre 6 à 100 monomères, celui-ci se nomme le paraformaldéhyde, enfin entre 100 à 300 monomères, celui-ci correspond à de l'alpha-polyoxyméthylène (ou encore beta-polyoxyméthylène s'il existe une petite quantité d'acide sulfurique, c'est-à-dire entre 0,2 et 0,4%). Cependant, il existe d'autres terminaisons possibles telles que –CH₃O (Walker, 1964), –CN (Danger et al., 2012), –COOH (Vinogradoff et al., 2012). Le polyoxyméthylène est thermodynamiquement instable, et sa température de fusion varie entre 80 et 200°C (Walker, 1964). A température élevée, celui-ci se dépolymérise rapidement en dégageant du formaldéhyde (Mercier and Maréchal, 1996), de plus sa dépolymérisation s'effectue à partir d'un mécanisme dit de « fermeture éclair » (Zimmermann and Behnisch, 1982).

2.1. Le POM dans les comètes

Le polyoxyméthylène a été évoqué pour la première fois, dans les années 70, dans le milieu interstellaire (Bessel and Wickramasinghe, 1975; Cooke and Wickramasinghe, 1977). Cela est dû à la détection de formaldéhyde en phase gazeuse, la première ayant été faite en 1969 (Snyder et al., 1969), et de bons ajustements des propriétés spectrales du polyoxyméthylène avec les observations. En 1977,

dans les environnements cométaires, le polyoxyméthylène a été proposé comme étant à l'origine des signatures spectrales dans l'infrarouge qui étaient attribuées aux silicates (Vanysek and Wickramasinghe, 1999).

Le polyoxyméthylène a de nouveau été évoqué, 10 années plus tard, lors des analyses de spectres de masse obtenu avec l'instrument PICCA à bord de la sonde spatiale Giotto (Huebner, 1987). Les mesures ont été faites dans la comète 1P/Halley à des distances entre 8200 et 12600 km du noyau. Les spectres de masse présentent une alternance de motifs dont l'écart en masse vaut 14 u ou 16 u (**Figure 3.1.a**) que l'auteur interprète comme étant lié à la présence de $-CH_2-$ et $-O-$. Huebner (1987) propose que ces résultats soient dus à la fragmentation du polyoxyméthylène. Les études menées par Möller and Jackson (1990) et Moore and Tanabe (1990) soutiennent cette hypothèse par la mesure en laboratoire de spectres de masse du polyoxyméthylène (**Figure 3.1.b**) qui présentent un profil similaire aux observations. Cependant, Mitchell et al. (1992) démontrent que les résultats obtenus par PICCA ne sont pas spécialement caractéristiques du polyoxyméthylène. En effet, ils calculent qu'il est possible d'obtenir un spectre similaire à partir d'un mélange de molécules organiques composé de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote. Le spectre de masse obtenu n'est donc pas une preuve suffisante à la présence de polyoxyméthylène dans les particules éjectées du noyau de la comète 1P/Halley.

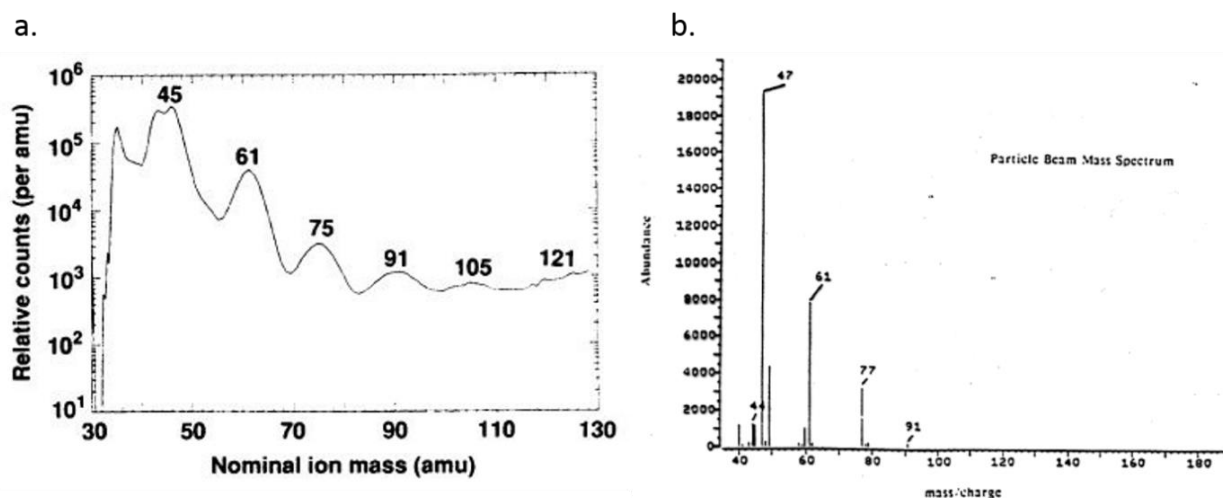


Figure 3.1 : Spectre de masse a. mesuré dans la coma de la comète 1P/Halley par l'instrument PICCA à bord de la sonde Giotto le 14 Mars 1986, Crédits : Huebner (1987) b. du polyoxyméthylène mesuré en laboratoire par (Möller and Jackson, 1990).

Plus récemment, la présence de polyoxyméthylène a aussi été proposée dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. L'instrument Ptolemy, à bord de l'atterrisseur Philae, a eu pour objectif de caractériser la composition de la surface cométaire. A partir de cet instrument, Wright et al. (2015) ont relevé un motif répétitif de pics avec une alternance de m/z de 14 et 16, qui ont été affectés aux fragments $-CH_2-$ et $-O-$. La fragmentation du polyoxyméthylène a de nouveau été proposée pour expliquer ces résultats. Les données présentées sur le spectre de la **Figure 3.2.C** peuvent s'interpréter

à partir de plusieurs formes de polyoxyméthylène avec des groupements terminaux différents : -H, HCO- et CH₃CO- (**Figure 3.2.A**).

Le polyoxyméthylène a également été recherché dans les particules éjectées du noyau de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Une calibration préalable du POM a été menée sur l'instrument COSIMA, le spectromètre de masse en charge d'analyser la composition des particules de poussière éjectées du noyau, et une stratégie d'analyse de ce polymère a été mise en œuvre (Le Roy, 2011; Le Roy et al., 2015b; Le Roy et al., 2012). En effet, Le Roy (2011) et Le Roy et al. (2012) ont effectué des travaux, en amont de la mission Rosetta, afin de caractériser les signatures spectrales du polyoxyméthylène. Celui-ci étant thermiquement instable, sa cinétique de dégradation a été étudiée (Cottin, 1999; Le Roy et al., 2012), et sera discutée dans la partie 2.2. Il a été établi que l'instrument COSIMA était capable de confirmer, ou non, la présence de ce polymère au sein des spectres de masse des particules éjectées du noyau cométaire si ces dernières étaient analysées après leur collecte. Le Roy et al. (2012) ont montré que le polyoxyméthylène présente des signatures caractéristiques de fragmentation dans le mode positif de l'instrument COSIMA. Bardyn (2016) a pris en charge la suite de ces analyses, et a mis en place un protocole de recherche du polyoxyméthylène à partir des spectres de masse de différentes particules analysées par COSIMA. Il en est ressorti que le polyoxyméthylène n'est observé dans aucune des particules étudiées dans les limites de détection de l'instrument COSIMA. Si ce polymère était bien présent dans les particules cométaires analysées par COSIMA, sa non-détection aurait pu peut-être être due à une quantité insuffisante dans les particules, ou encore au fait que le polyoxyméthylène aurait pu être dégradé thermiquement avant l'analyse par l'instrument COSIMA. Il est également possible que le polyoxyméthylène ne soit simplement pas présent dans cette comète, et que le formaldéhyde ne présente pas de source distribuée à partir du polyoxyméthylène.

Enfin, d'après Duvernay et al. (2014), des simulations, dans des conditions proches des conditions cométaires et interstellaires, conduisent à la formation de petites chaînes de polyoxyméthylène ($n < 5$), en majorité volatiles à 200 K.

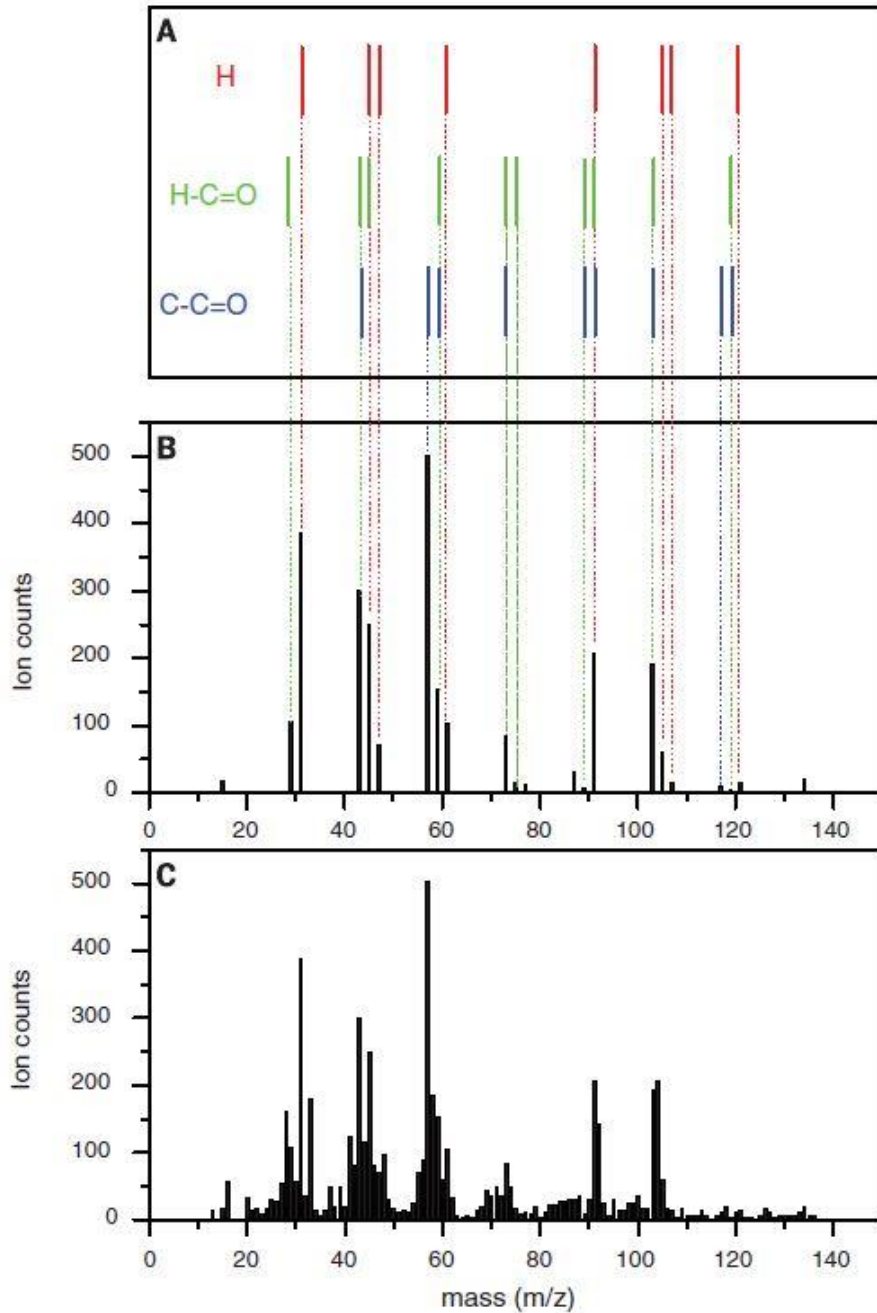


Figure 3.2 : Proposition d’ajustement avec le polyoxyméthylène à partir du spectre de masse obtenu par Ptolemy. A. Fragmentation du polyoxyméthylène pour trois groupements terminaux différents, B. pics provenant du polyoxyméthylène, C. spectre de masse mesuré par Ptolemy, les pics H₂O et CO₂ ont été supprimés (Wright et al., 2015).

2.2. Dégradation du polyoxyméthylène

Cottin (1999) a analysé le comportement du polyoxyméthylène sous l’action des rayonnements UV. Il a montré que sa photolyse conduit principalement à la production de deux molécules, le formaldéhyde et le monoxyde de carbone. Cela est également précisé par Rabek (1995), qui précise que le formaldéhyde et le monoxyde de carbone sont les deux uniques produits formés en l’absence d’oxygène. D’autres produits sont formés lors de la photolyse oxydante du polyoxyméthylène, tels

que du dioxyde de carbone (CO₂), de l'acide formique (HCOOH), du méthane (CH₄), et de l'éthane (C₂H₆).

La radiolyse du polyoxyméthylène, c'est-à-dire l'irradiation par des particules avec une énergie suffisamment élevée pour ioniser la molécule (rayons gamma, électrons et photons inférieurs à 100 nm), a également été étudiée en 1967 par Fischer and Langbein (1967). Le polymère a été irradié sous vide ($P \sim 10^{-4}$ mb) à 14°C avec des électrons de 1 MeV produits à partir d'un accélérateur de Van-de-Graaf (Dole, 2013; Shalaby, 1979). De nombreux composés gazeux ont été détectés tels que du dihydrogène (H₂), du méthane (CH₄), du monoxyde de carbone (CO), du formaldéhyde (H₂CO), du méthanol (CH₃OH), du méthylformate (CH₃OCHO), et du diméthoxyméthane (CH₃OCH₂OCH₃). (Roessler et al., 1992) ont également étudié l'irradiation du polyoxyméthylène à des longueurs d'onde inférieures à 200 nm, et ont identifié la formation de produits tels que du monoxyde de carbone et de formaldéhyde.

Sous vide, le polymère irradié par des électrons de 1 MeV produit plusieurs composés gazeux tels que H₂, CH₄, CO, H₂CO, CH₃CHO, CH₃OCHO, CH₃OCH₂OCH₃, CH₃OCH₂OCHO et H₂O. Le rendement de production de formaldéhyde à partir du polymère est de $G_{\text{H}_2\text{CO}} = 4 \pm 1$ (Fischer et Langbein, 1967 ; Dole, 1973 ; Shalaby, 1979) (note : la valeur G est définie comme le nombre de molécules produites par 100 eV d'énergie absorbée par les rayonnements ionisants).

Enfin, des auteurs ont montré que la décomposition thermique du polyoxyméthylène à l'état solide à partir de 255 K produit du formaldéhyde gazeux (Fray et al., 2004a; Grassie and Roche, 1968; Zimmermann and Behnisch, 1982). Il s'agit de longues chaînes de formaldéhyde, il n'existe pas de données concernant la dégradation thermique de petits polymères évoqués par Duvernay et al. (2014).

3. Modélisation de la distribution du formaldéhyde

Des études précédentes menées par Cottin et al. (2004) pour la comète 1P/ Halley, et par Fray et al. (2006) pour la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp), ont montré que la dégradation thermique de polyoxyméthylène présent sur les particules de poussières éjectées du noyau de ces comètes représentent à ce jour la meilleure explication à la production de formaldéhyde dans ces comètes. Les modélisations ont permis de quantifier l'abondance du polyoxyméthylène (en masse) dans les particules, soit 4% pour la comète 1P/Halley (Cottin et al., 2004) et 3% dans la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) (Fray et al., 2006).

Au cours de mon travail de thèse, j'ai cherché à modéliser la contribution d'une source distribuée de formaldéhyde pour les comètes C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/1996 B2 (Hyakutake), C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon). Pour ce faire, je vais d'abord appliquer les hypothèses du modèle de Haser (explicité dans la section 2.2 du chapitre 2) à un cas simple de formaldéhyde émis directement à partir des glaces du noyau. Il s'agira, avant toute chose,

d'établir si le formaldéhyde présente ou non un profil d'abondance distribuée dans les comètes pour lesquelles j'ai pu disposer de données d'observation. Comme il s'avère que le profil de formaldéhyde est bien celui d'une source distribuée, j'ai cherché à tester le mécanisme proposé par Cottin et al. (2004) et Fray et al. (2006), c'est à dire modéliser la production de formaldéhyde en phase gazeuse à partir de particules de poussières (approximées à des sphères) composées en partie de polyoxyméthylène et émises de manière uniforme autour du noyau. Différents paramètres d'entrées, propres à chaque comète, ont été fixés. Ces hypothèses ne sont pas forcément toutes représentatives de chaque cas étudié, mais le but de mon travail a été de montrer s'il existe ou non un mécanisme, telle qu'une source distribuée, permettant d'expliquer les observations, et du fait du manque de mesures pour ce qui concerne certaines caractéristiques des comètes étudiées, déterminer dans quelles conditions cela peut s'avérer possible et si ces conditions sont crédibles. Ces modélisations permettront également de quantifier la quantité de polyoxyméthylène en masse dans les particules, et la quantité de formaldéhyde par rapport à la production totale de gaz.

3.1. Définition de χ^2 et de χ^2 réduit (χ^2_ν)

Le χ^2 correspond à la somme pondérée des écarts au carré entre les observations et les modélisations. Le χ^2_ν réduit représente le résultat du χ^2 lorsqu'on le divise par $\nu = n-p$, avec ν le nombre de degré de liberté. Ici, nous considérons deux paramètres libres (p) : la fraction de formaldéhyde et la fraction de polyoxyméthylène.

La valeur du χ^2 réduit a été calculé pour chaque profil modélisé à partir de la relation suivante :

$$\chi^2 = \frac{\sum \text{écart}}{\text{nombre de points mesurés} - 2}$$

Avec,

$$\text{écart} = \frac{(\text{densité colonne mesurée} - \text{densité colonne calculée})^2}{\text{incertitude totale sur la mesure}^2}$$

L'incertitude totale sur la mesure correspond à la somme quadratique de l'incertitude sur l'aire mesurée lors des observations, de l'incertitude sur la moyenne entre les densités colonnes calculées pour une fraction étendue nulle et une fraction étendue égale à 1, et l'incertitude de 10% sur le signal qui a été intégré (voir section 1.1.2.2 du chapitre 2 pour plus de précisions).

Le meilleur ajustement du modèle aux observations correspond à une valeur de χ^2 réduit valant 1 ou se rapprochant le plus possible de 1. Si celui-ci est très inférieur à 1, cela signifie que les incertitudes peuvent être surévaluées. Les valeurs seront présentées par la suite pour chaque profil modélisé.

3.1.1. Incertitudes sur les pourcentages de polyoxyméthylène et formaldéhyde

Pour chaque quantité de polyoxyméthylène et de formaldéhyde dérivé du modèle, j'ai calculé l'incertitude en fonction du χ^2 réduit.

Pour 2σ , $\chi^2(2\sigma) = \chi^2 + 4$, pour lequel il existe deux pourcentages de polyoxyméthylène ou de formaldéhyde. Prenons le cas du polyoxyméthylène, ainsi pour $\chi^2(2\sigma)$, il existe un $\%POM_{inf}$ et un $\%POM_{sup}$. Ainsi,

$$\frac{\%POM_{inf} + \%POM_{sup}}{2} = \%POM_{moy}$$

Enfin l'incertitude est calculée à partir de la relation suivante :

$$\sigma = \frac{\%POM_{moy} - \%POM_{inf}}{2}$$

3.2. Source unique

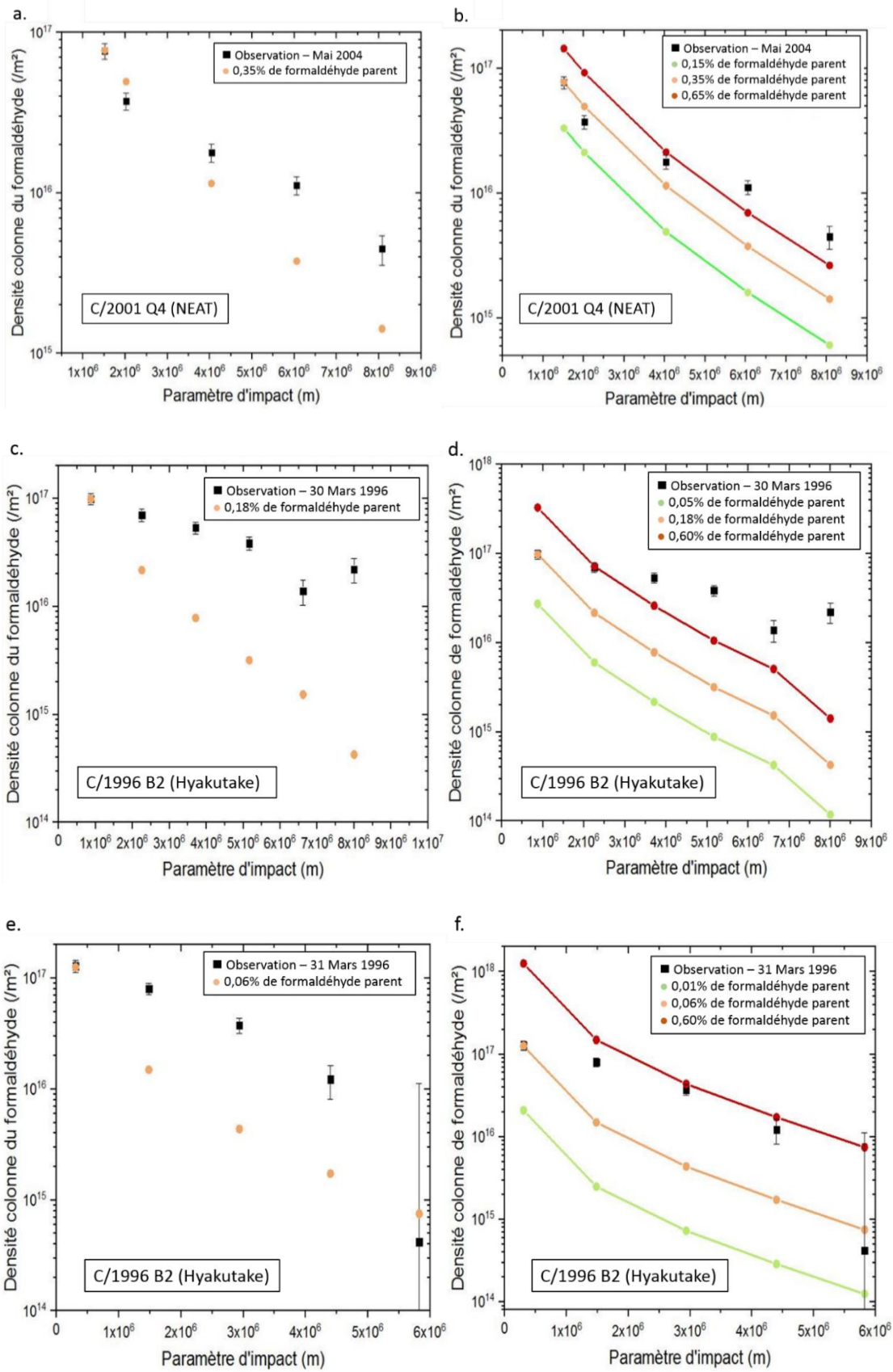
Dans un premier temps, j'ai modélisé le cas du formaldéhyde émis directement à partir de la sublimation des glaces du noyau pour les différentes comètes. Les paramètres utilisés sont précisés dans le chapitre 2, particulièrement dans le **Tableau 2.5** pour les comètes C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), et Tuttle, 2.2 pour la comète C/1996 B2 (Hyakutake), et 2.1 pour les comètes C/2012 F6 (Lemmon) et C/2012 S1 (ISON). La **Figure 3.3** représente la distribution du formaldéhyde en fonction de la distance au noyau mesuré dans chaque comète. Afin de comparer le profil modélisé et le profil mesuré, j'ai superposé, pour chaque comète, le premier point des deux profils.

3.2.1. C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz) et 8P/Tuttle

J'ai cherché à fixer un pourcentage de formaldéhyde parent (émis à partir du noyau) pour faire en sorte d'ajuster mes calculs aux premiers points de mesure, les quantités de formaldéhyde sont données par rapport à la production totale d'eau :

- ✚ 0,35 % pour C/2001 Q4 (NEAT) (**Figure 3.3.a**)
- ✚ 0,32% pour 8P/Tuttle (**Figure 3.3.c**)
- ✚ 0,18% pour le premier jour d'observation de C/1996 B2 (Hyakutake) (**Figure 3.3.e**)
- ✚ 0,06% pour le second jour d'observation de C/1996 B2 (Hyakutake) (**Figure 3.3.g**)
- ✚ 0,095% pour le premier jour d'observation de C/2004 Q2 (Machholz) (**Figure 3.3.h**)
- ✚ 0,105% pour le second jour d'observation de C/2004 Q2 (Machholz) (**Figure 3.3.k**)

Cependant, et pour chaque comète, le modèle ne permet pas de trouver un bon ajustement aux mesures d'observations. Différents pourcentages de formaldéhyde parent ont été testés. Sur les **Figures 3.3.b, 3.3.d, 3.3.f, et 3.3.h**, j'ai ajouté les profils de densité pour des pourcentages de formaldéhyde parent différents. L'allure des profils reste identique, la seule différence réside dans la quantité initiale de formaldéhyde. En effet, plus il y a de formaldéhyde dans le noyau, plus la densité colonne est élevée.



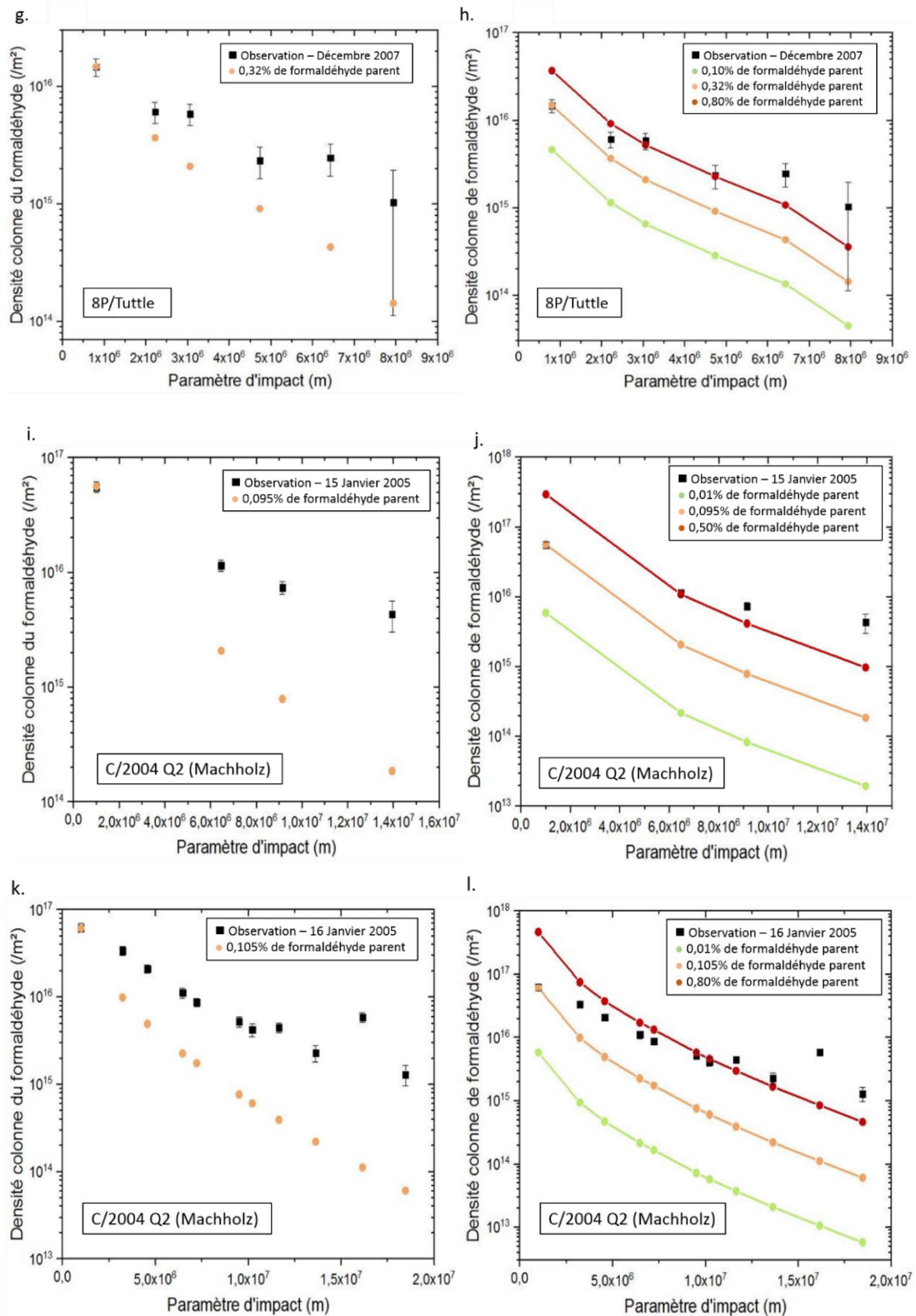


Figure 3.3 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact pour les comètes C/2001 Q4 (NEAT), C/1996 B2 (Hyakutake), 8P/Tuttle et C/2004 Q2 (Machholz). Les graphiques à gauche correspondent à la modélisation d'une source unique à partir du noyau en ajustant le premier point aux observations. Pour chaque cas les carrés correspondent aux mesures d'observation, et les points oranges représentent le profil modélisé pour une source parent. Les graphiques de droite correspondent à la modélisation d'une source parent avec différents pourcentages de formaldéhyde dans le noyau.

J'ai modélisé deux autres cas pour chaque comète (**Figures 3.3**) avec différents pourcentages de formaldéhyde parent. Le but est de vérifier si une source parente est suffisante pour expliquer les observations. Les χ^2 réduits calculés pour chaque abondance testée sont présentés dans le **Tableau 3.1**. Le plus petit χ^2 réduit correspond, dans tous les cas, au profil pour lequel les premiers points sont superposés. Quelle que soit la quantité de formaldéhyde choisie, le profil modélisé représente mal les observations.

C/2001 Q4 (NEAT)			
% H₂CO		χ^2	
0,15		43,4	
0,35		17,2	
0,65		73,4	
8P/Tuttle			
% H₂CO		χ^2	
0,10		43,4	
0,32		17,5	
0,60		22,3	
C/2004 Q2 (Machholz)			
Jour 1		Jour 2	
% H₂CO	χ^2	Pourcentage de formaldéhyde	χ^2
0,01	107,5	0,01	58,7
0,095	56,2	0,105	37,7
0,5	810,7	0,8	337,6
C/1996 B2 (Hyakutake)			
Jour 1		Jour 2	
% H₂CO	χ^2	Pourcentage de formaldéhyde	χ^2
0,05	55,1	0,01	53,6
0,18	55,1	0,06	28,9
0,6	114,3	0,6	1679,6

Tableau 3.1 : Valeurs des χ^2 réduits pour les différents pourcentages fixés dans noyau pour une source parent, les profils sont représentés sur la Figure 3.3.

Finalement, une source parente n'est pas suffisante pour expliquer les données d'observation. Il existerait ainsi une source supplémentaire de formaldéhyde dans ces comètes. J'ai donc été amenée à modéliser le cas d'une source distribuée, à partir de la dégradation thermique et photochimique du polyoxyméthylène. Ces résultats sont présentés dans la partie 3.3.

3.2.2. C/2012 F6 (Lemmon) et C/2012 S1 (ISON)

J'ai également modélisé le cas d'une source parente pour le formaldéhyde pour les comètes C/2012 F6 (Lemmon) et C/2012 S1 (ISON) (**Figures 3.4**). J'ai procédé de la même manière que précédemment, ainsi la première étape a été d'ajuster le profil d'abondance modélisée au premier point mesuré. Pour ce faire, il est nécessaire de fixer 0,01% de formaldéhyde parent par rapport à la production totale de

gaz dans la comète C/2012 F6 (Lemmon), et 0,30% dans la comète C/2012 S1 (ISON). Comme le montrent les **Figures 3.4.a** et **3.4.c**, il n'est pas possible d'interpréter les observations lorsque je procède de cette manière.

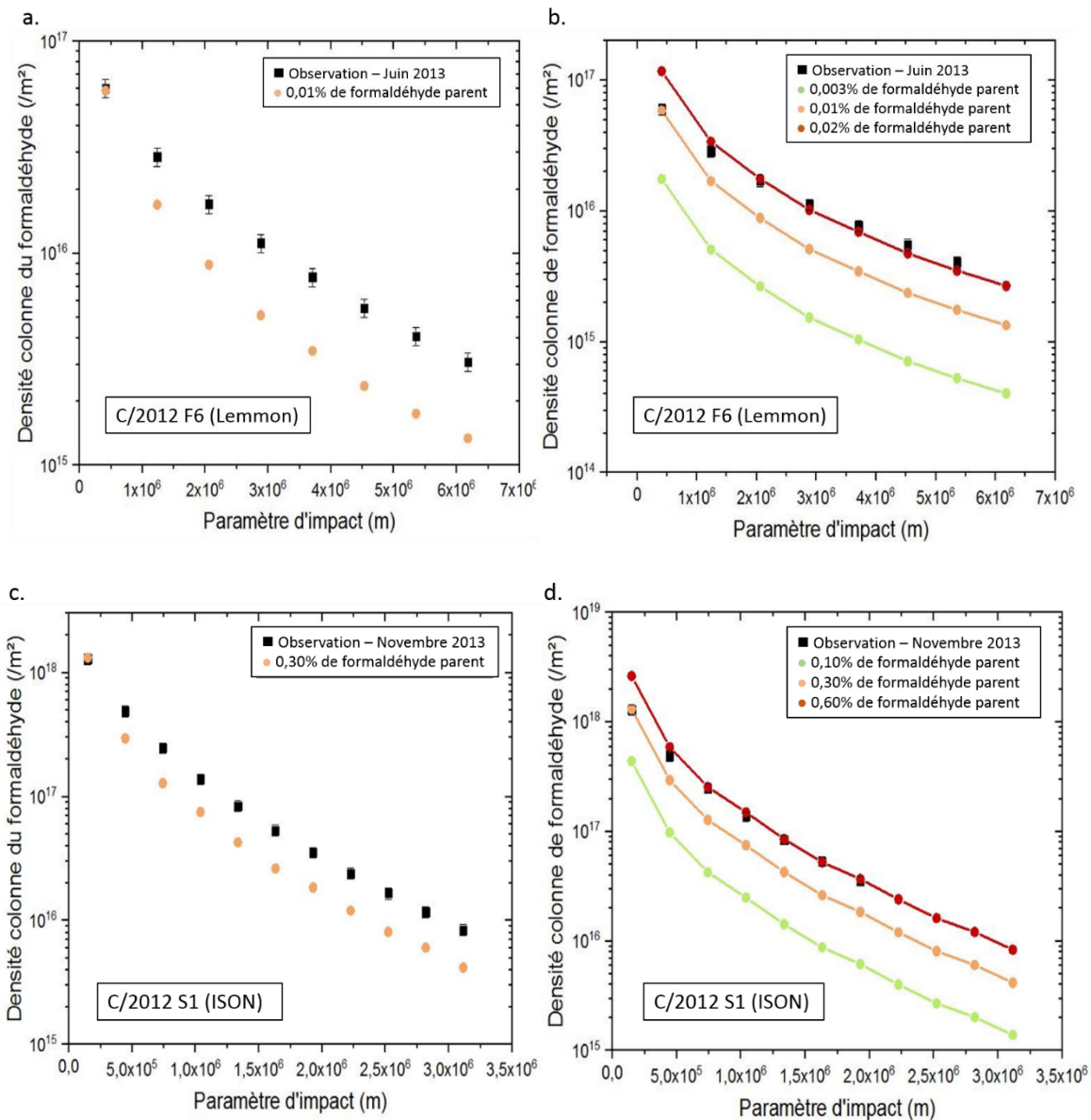


Figure 3.4 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact pour les comètes C/2012 F6 (Lemmon) et C/2012 S1 (ISON). Les graphiques à gauche correspondent à la modélisation d'une source unique à partir du noyau en ajustant le premier point aux observations. Pour chaque cas les carrés correspondent aux mesures d'observation, et les points oranges représentent le profil modélisé pour une source de formaldéhyde parent. Les graphiques de droite correspondent à la modélisation d'une source parente avec différents pourcentages de formaldéhyde dans le noyau.

Différents pourcentages de formaldéhyde parent ont été testés pour chaque comète, les profils sont présentés sur les **Figures 3.5.b** et **3.5.d**. Cette fois, lorsqu'on fait varier le pourcentage de formaldéhyde parent, il devient possible d'obtenir un profil similaire aux observations, cependant, et

pour les deux comètes, le premier point modélisé ne s'ajuste plus au premier point des mesures. Pour la comète C/2012 F6 (Lemmon), le meilleur fit correspond à 0,02% de formaldéhyde parent par rapport à la production totale de gaz, et pour la comète C/2012 S1 (ISON), 0,6%. Les valeurs des χ^2 réduits ont été calculés, et sont notés dans le **Tableau 3.2**. Ainsi ces abondances présentent bien les plus petits χ^2 réduits, soit respectivement 17 et 12,6.

Bien que la modélisation d'une source unique semble bien correspondre aux observations faites dans les comètes C/2012 F6 (Lemmon) et C/2012 S1 (ISON). J'ai tout de même considéré le cas d'une source distribuée de formaldéhyde afin de vérifier si l'allure diffère, et si la valeur du χ^2 réduit est meilleure. De plus, les données d'observations, initialement mesurées en flux azimutal, ont été converties en densité colonne à partir d'un modèle de transfert de rayonnement de Jérémie Boissier.

C/2012 F6 (Lemmon)	
% H ₂ CO	χ^2
0,003	94,3
0,01	32,8
0,02	17
C/2012 S1 (ISON)	
% H ₂ CO	χ^2
0,1	80,9
0,3	25,9
0,6	12,6

Tableau 3.2 : Valeurs des χ^2 réduits pour les différents pourcentages fixés dans noyau pour une source parente, les profils sont représentés sur la Figure 3.4.

3.3. Source distribuée

3.3.1. C/2001 Q4 (NEAT)

Afin de modéliser la source distribuée de formaldéhyde dans la comète C/2001 Q4 (NEAT), j'ai considéré une distribution en masse et en nombre de particules en fonction de leur taille, mais aussi d'autres paramètres qui leur sont propres, tels que leur vitesse et leur température. J'ai utilisé, dans un premier temps, la distribution en taille et en masse mesurée dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, et présentée dans la section 2.3.1 du chapitre 2. Les températures (**Figure 3.5.a**) ont été calculées lorsque la comète se trouvait à une distance héliocentrique de 0,966 UA, avec une abondance de 70 % en volume de matière organique dans les particules (Levasseur-Regourd et al., 2018), et une porosité de 90 % (Hornung et al., 2016). Ces valeurs sont reprises des mesures pour les particules de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Les vitesses (**Figure 3.5.b**) ont été calculées à partir du modèle de Crifo détaillé dans la section 2.3.3.1 du chapitre 2. Les températures s'étendent de 285K à 690K, et les vitesses de 2,3 m/s à 635 m/s. La masse totale de particules éjectée par le noyau est fixée pour obtenir un rapport poussière sur gaz, ou plus exactement taux de production de

poussière sur taux de production de H₂O égal à 0,4 en masse. Cette valeur correspond à la valeur minimale de l'intervalle discuté dans le chapitre 2.

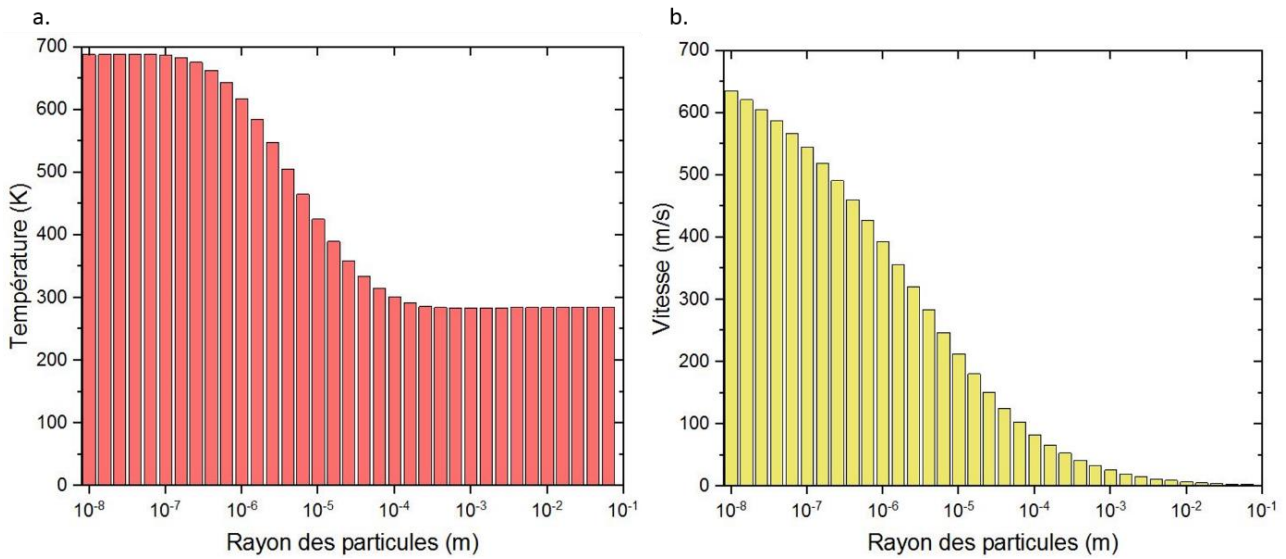


Figure 3.5 : Température (a) et vitesse (b) des particules en fonction de leur taille pour la comète C/2001 Q4 (NEAT).

La **Figure 3.6** décrit le meilleur ajustement que j'ai obtenu en considérant une source distribuée de formaldéhyde avec $1,44 \pm 0,2$ % de polyoxyméthylène en masse, soit $4,1 \cdot 10^4$ g.s⁻¹, présent dans les particules de poussière, et $0,09 \pm 0,05$ % de formaldéhyde par rapport à l'eau produit en tant que molécule mère. Sur la **Figure 3.6**, il est possible d'ajuster les observations de façon bien plus satisfaisante avec ce nouveau modèle de source distribuée. De la même manière que pour la source parent, j'ai déterminé le χ^2 réduit, celui-ci vaut 3,6. Cette valeur est bien plus petite dans le cas d'une source distribuée plutôt que dans le cas d'une source parente, pour laquelle $\chi^2=17,2$. Ainsi, une source distribuée permet un bien meilleur ajustement des observations de formaldéhyde par rapport à une interprétation basée sur une source unique de formaldéhyde en tant que molécule mère.

Compte tenu de l'incertitude quant au modèle de distribution des particules de poussières que j'ai utilisé, j'ai également considéré le cas d'une source distribuée en utilisant la distribution en masse et en nombre mesurée dans la comète de Halley, présentée sur la **Figure 2.26**, dans la section 2.3.1 du chapitre 2. J'ai fixé exactement les mêmes paramètres, et pourcentages de formaldéhyde et de polyoxyméthylène afin de pouvoir comparer les χ^2 réduits.

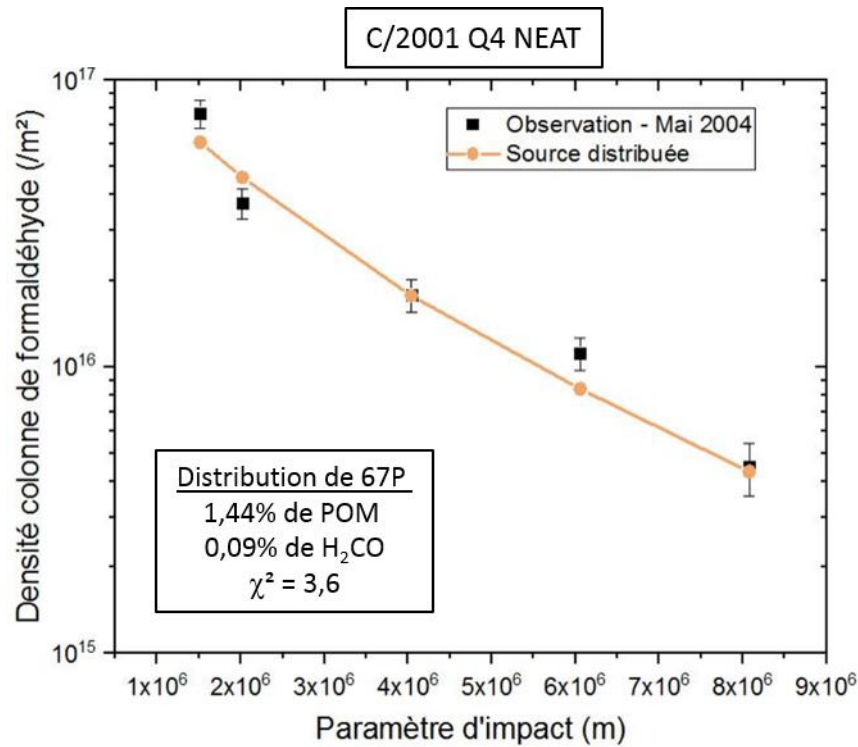


Figure 3.6 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du mois de mai 2004. Les points oranges représentent le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec 1,44% de POM en masse sur les particules de poussière et 0,09 % de H_2CO par rapport à l'eau en tant que molécule mère.

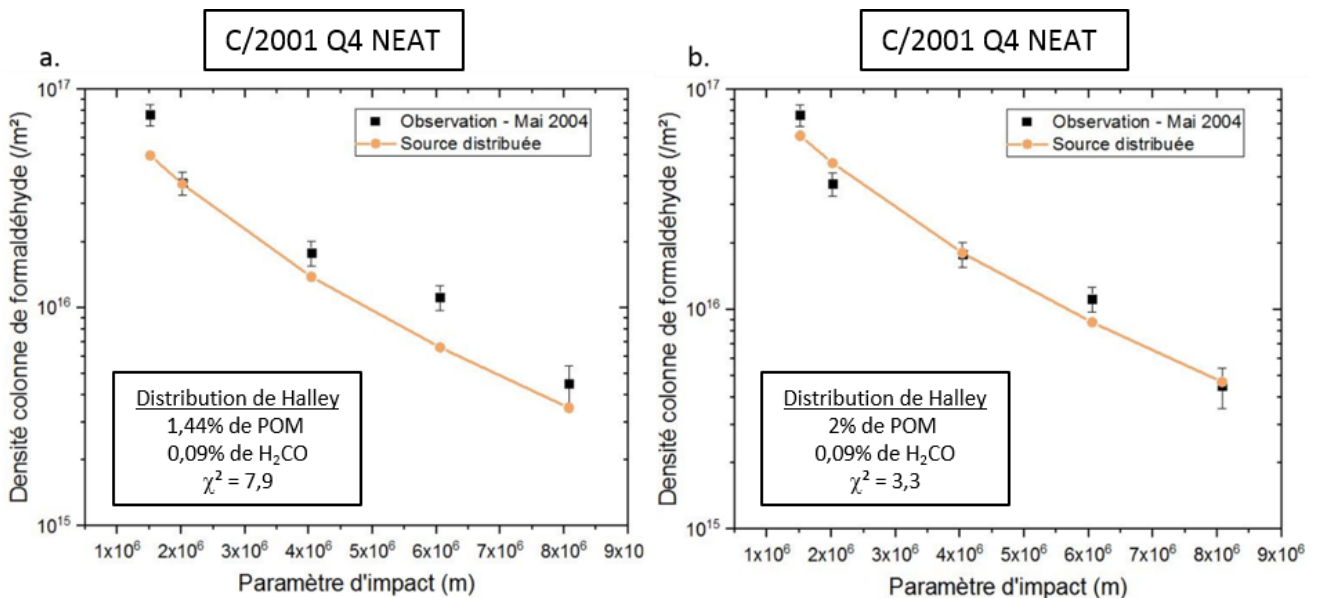


Figure 3.7 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du mois de mai 2004. Les points oranges représentent les ajustements obtenus pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde : a. avec 1,44 % de POM et 0,09% de H_2CO , et b. avec 2% de POM et 0,09% de H_2CO .

La **Figure 3.7.a** correspond au profil modélisé à partir d'une source distribuée avec 1,44% de polyoxyméthylène en masse et 0,09% de formaldéhyde par rapport à l'eau pour une distribution en nombre et en masse similaire à celle mesurée dans la comète de Halley. Le χ^2 réduit obtenu vaut 7,9 soit presque deux fois plus que si l'on considère la distribution en taille et en masse mesurées dans la comète 67P. J'ai donc cherché le meilleur fit avec la distribution de Halley, celui-ci est représenté sur la **Figure 3.7.b**. Cette fois, il faut fixer un pourcentage de polyoxyméthylène de $2 \pm 0,3$ % en masse, soit $5,7 \cdot 10^4 \text{ g.s}^{-1}$, et un pourcentage de formaldéhyde d'environ $0,09 \pm 0,05$ % par rapport à l'eau, pour un χ^2 réduit égal à 3,3. Seule la quantité de polyoxyméthylène est différente, un peu plus élevée, mais tout en demeurant autour de quelques pourcents.

Finalement, quelle que soit la distribution utilisée, et en considérant les erreurs calculées sur les abondances, les résultats sont similaires pour ce qui concerne la quantité de POM requise pour ajuster les observations. Pour la suite des modélisations, j'ai choisi de travailler avec la distribution en masse et en nombre des particules mesurée dans la comète 67P qui a pu être caractérisée avec bien plus de précision que dans la comète 1P/Halley.

3.3.2. 8P/Tuttle

Les températures et les vitesses utilisées pour la modélisation de la source distribuée de 8P/Tuttle sont représentées sur la **Figure 3.8**. Les températures (**Figure 3.8.a**) ont été calculées pour une distance héliocentrique de 1,109 UA, avec la même abondance de matière organique et le même pourcentage de porosité simulée pour la comète C/2001 Q4 (NEAT) (soit 70% de matière organique et 90% de porosité). Les températures maximales sont autour de 650 K et les plus faibles valent environ 285 K. Les vitesses (**Figure 3.8.b**) ont été calculées à partir du modèle de Crifo, et varie entre 0,5 m/s et 530 m/s. Le rapport poussière sur gaz a été fixé à 1. La distribution des particules utilisée est celle mesurée dans la comète 67P.

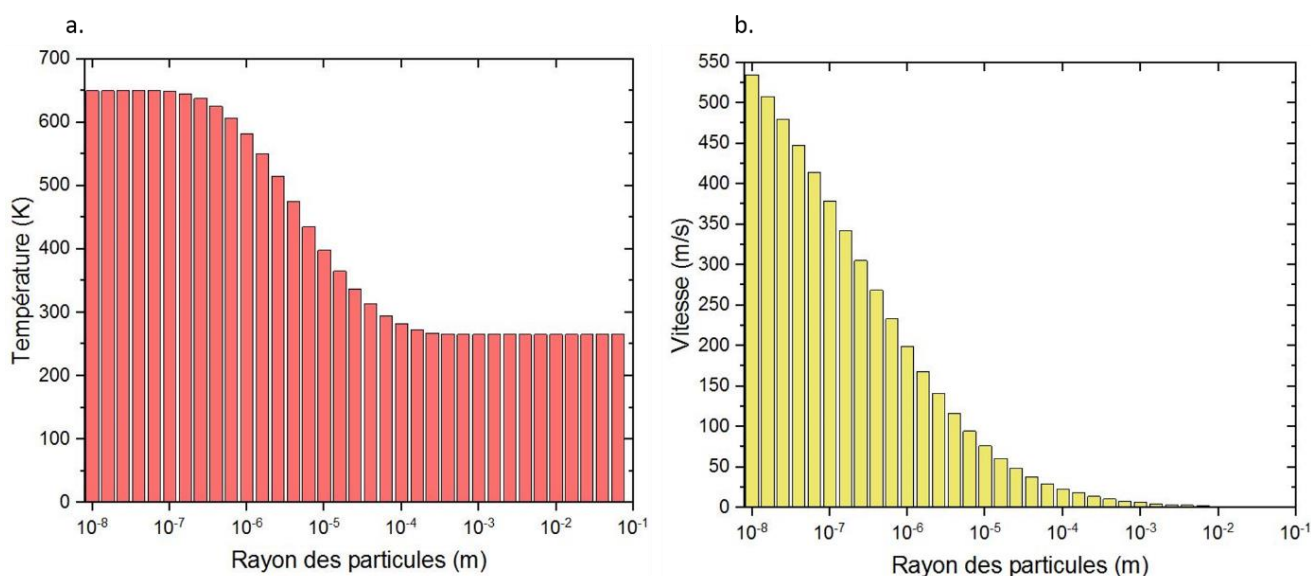


Figure 3.8 : Température (a) et vitesse (b) des particules en fonction de leur taille pour la comète Tuttle.

Le meilleur ajustement aux mesures est obtenu lorsque l'on fixe $0,17 \pm 0,09$ % de formaldéhyde par rapport à l'eau et $1,7 \pm 0,5$ % de polyoxyméthylène en masse dans la poussière, soit 1.10^4 g.s^{-1} . Cette distribution révèle un χ^2 réduit de 0,63, soit une valeur très inférieure au χ^2 réduit calculé pour une source parente (soit 17,5). Le profil est représenté sur la **Figure 3.9**. Ainsi, dans la comète Tuttle, les observations faites en Décembre 2007 sont très bien expliquées par la présence d'une source distribuée de formaldéhyde avec des quantités de polyoxyméthylène et de formaldéhyde qui semblent être des valeurs cohérentes au vue des résultats présentés dans les comètes 1P/Halley et C/1995 O1 (Hale-Bopp).

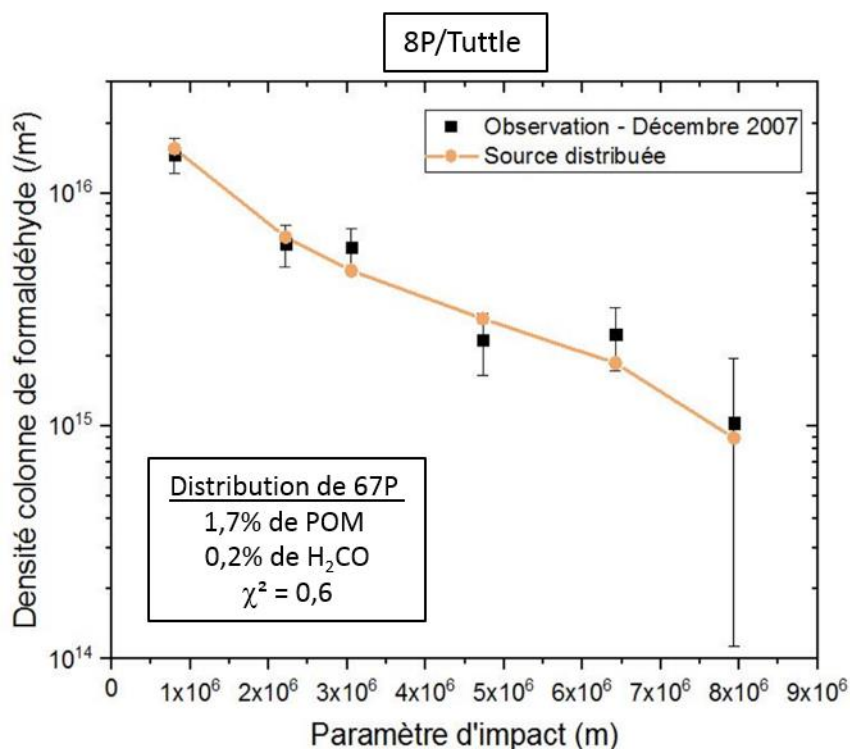


Figure 3.9 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact dans la comète 8P/Tuttle. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du mois de Décembre 2007. Le profil orange représente le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec 1,7% de POM et 0,2% de H_2CO .

3.3.3. C/2004 Q2 (Machholz)

J'ai modélisé les deux jours d'observations, soit les 15 et 16 Janvier 2005, de la comète C/2004 Q2 (Machholz) avec les mêmes paramètres. Les températures (**Figure 3.10.a**) ont été calculées pour une distance de 1,21 UA, avec 70% en volume de matière organique, et 90% de porosité, les valeurs varient entre 253 K et 627 K. Les vitesses (**Figure 3.10.b**) valent 2,4 m/s pour les plus grosses particules, et 638 m/s pour les plus petites. Le rapport poussière sur gaz a été fixé à 0,5, cela correspond à la valeur minimale de l'intervalle du rapport poussière sur gaz mesuré, et explicité dans les paramètres de la comète dans le Chapitre 2.

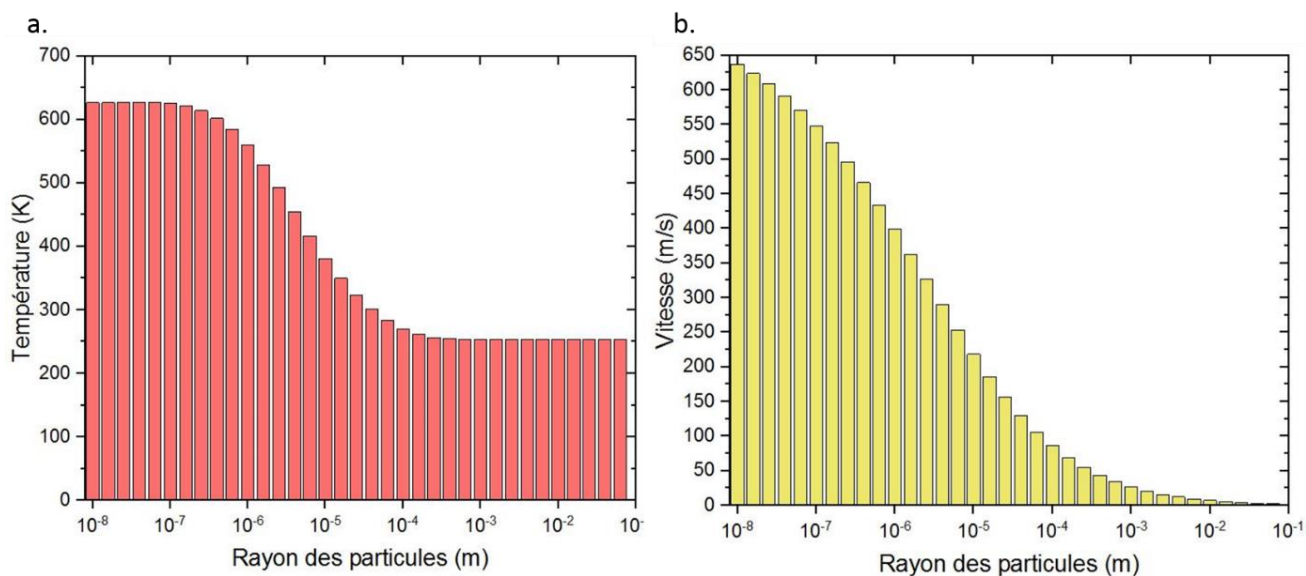


Figure 3.10 : Température (a) et vitesse (b) des particules en fonction de leur taille pour la comète C/2004 Q2 (Machholz).

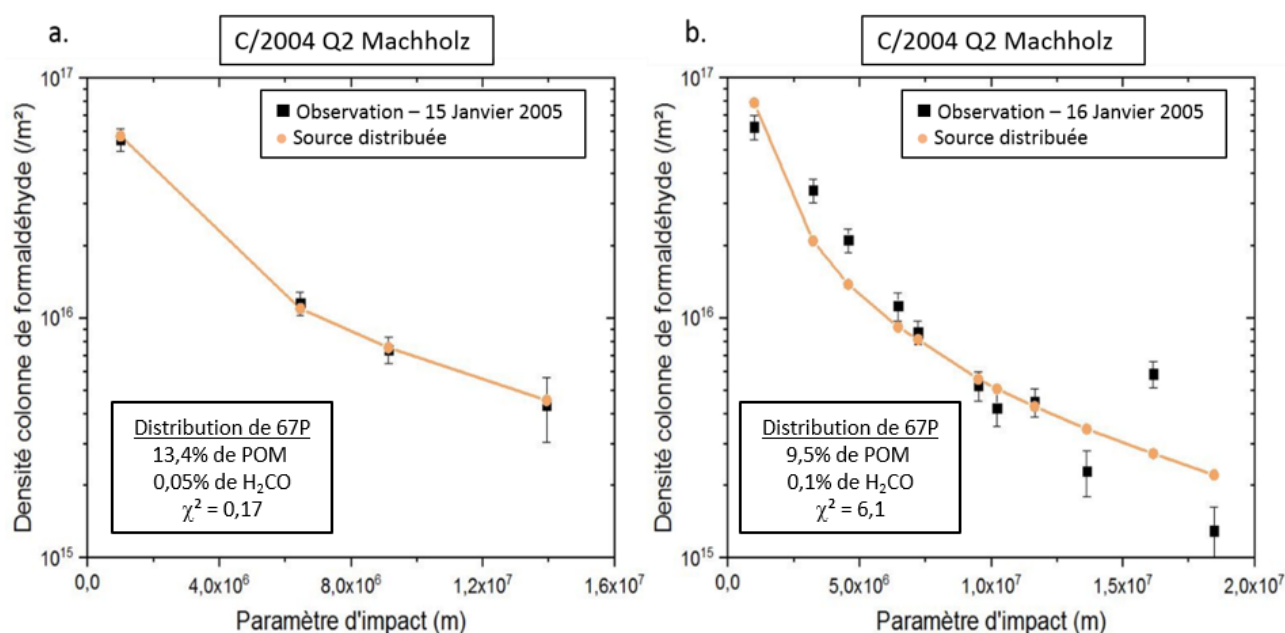


Figure 3.11 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact pour un rapport poussière sur gaz égal à 0,53 a. lors du premier jour d'observation en Janvier 2005 et b. lors du second jour d'observations en Janvier 2005. Les carrés correspondent aux mesures d'observation. Les profils oranges représentent le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde a. 13,4 % de POM et 0,05% de H₂CO, et b. 9,5% de POM et 0,1 % de H₂CO.

La distribution de formaldéhyde mesurée lors du premier jour des observations est très bien expliquée par la modélisation d'une source distribuée avec $13,4 \pm 0$ % de polyoxyméthylène en masse dans les particules de poussières, soit $5,2 \cdot 10^5 \text{ g.s}^{-1}$, et $0,05 \pm 0,014$ % de formaldéhyde par rapport à

la production totale de gaz, avec un χ^2 réduit très inférieur à 1, soit 0,17 (**Figure 3.11.a**). De plus, cette valeur est également inférieure à celle calculée pour une source parente, soit 56,2. Cependant, la quantité de polyoxyméthylène dans les particules semble bien trop élevée puisque les abondances proposées comme étant réalistes suite à des simulations expérimentales s'élèvent à quelques pourcents (Bernstein et al., 1995), tout comme les abondances estimées pour les cas déjà étudiés concernant les comètes 1P/Halley et C/1995 O1 (Hale-Bopp). Concernant le deuxième jour d'observation, le meilleur ajustement a été calculé avec $9,5 \pm 1,6$ % de polyoxyméthylène en masse, soit $3,7 \cdot 10^5 \text{ g.s}^{-1}$, et $0,1 \pm 0,003$ % de formaldéhyde par rapport à la production totale de gaz pour un χ^2 réduit valant 6,1 (**Figure 3.11.b**), le χ^2 réduit d'une source parente étant égale à 37,7, cela est donc un meilleur ajustement. Mais l'allure n'est pas tout à fait similaire à celle qui a été mesurée, d'où la valeur de χ^2 réduit égale à 6,1.

J'ai donc cherché dans quelle mesure il serait possible de remonter aux observations à partir d'une source distribuée mais avec des abondances plus réalistes. J'ai fait varier l'un des paramètres les moins contraints de mon modèle pour cette comète : le rapport poussière sur gaz dans le noyau. Dans un premier temps, les pourcentages de formaldéhyde et de polyoxyméthylène fixés restent ceux utilisés pour le test précédent, soit 0,1% de formaldéhyde par rapport à l'eau et 9,5% de polyoxyméthylène en masse. Seul le rapport poussière sur gaz varie afin d'étudier la variation du profil de distribution. Sur la **Figure 3.12**, j'ai représenté la modélisation des profils de distribution de formaldéhyde pour des rapports de 0,1 – 1 – 2 et 3. Ces profils sont comparés à celui déjà calculé au préalable avec un rapport de 0,53. Les χ^2 réduits sont également notés sur la **Figure 3.12**. Finalement, les profils calculés avec les rapports poussière sur gaz valant 1 – 2 et 3, soit plus élevés que le rapport initial, présentent des profils plus élevés, et donc des χ^2 réduits plus importants. Afin de se rapprocher de cas plus réalistes, en utilisant ces rapports, il serait nécessaire de fixer un pourcentage de polyoxyméthylène, en masse, inférieur à 9,5%. A l'inverse, avec un rapport inférieur à 0,53 ; le pourcentage de polyoxyméthylène sera plus élevé. Par la suite, j'ai cherché le meilleur ajustement possible pour différents rapports afin de confirmer la variation des pourcentages de polyoxyméthylène et de trouver s'il est possible d'ajuster les observations avec une faible abondance de POM dans les particules. Le **Tableau 3.3** montre les pourcentages de polyoxyméthylène en masse, de formaldéhyde par rapport à la production totale de gaz, et les χ^2 réduits obtenus pour les meilleurs ajustements en fonction du rapport poussières sur glace. La quantité de formaldéhyde et le χ^2 réduit ne varient pas d'une modélisation à l'autre.

d/g	% POM	$m_{\text{POM}} \text{ (g.s}^{-1}\text{)}$	% H ₂ CO	χ^2
0,1	$47,6 \pm 8,7$	$3,7 \cdot 10^5$	$0,11 \pm 0,03$	6,1
0,53	$9,5 \pm 1,6$	$3,7 \cdot 10^5$	$0,11 \pm 0,03$	6,1
1	$5,1 \pm 0,9$	$4,0 \cdot 10^5$	$0,11 \pm 0,04$	6,1
2	$2,5 \pm 0,45$	$4,0 \cdot 10^5$	$0,11 \pm 0,04$	6,1
3	$1,7 \pm 0,3$	$4,0 \cdot 10^5$	$0,11 \pm 0,04$	6,1

Tableau 3.3 : Valeurs des différents pourcentages de POM, de H₂CO, et de χ^2 réduits en fonction de différents rapports poussières sur glace.

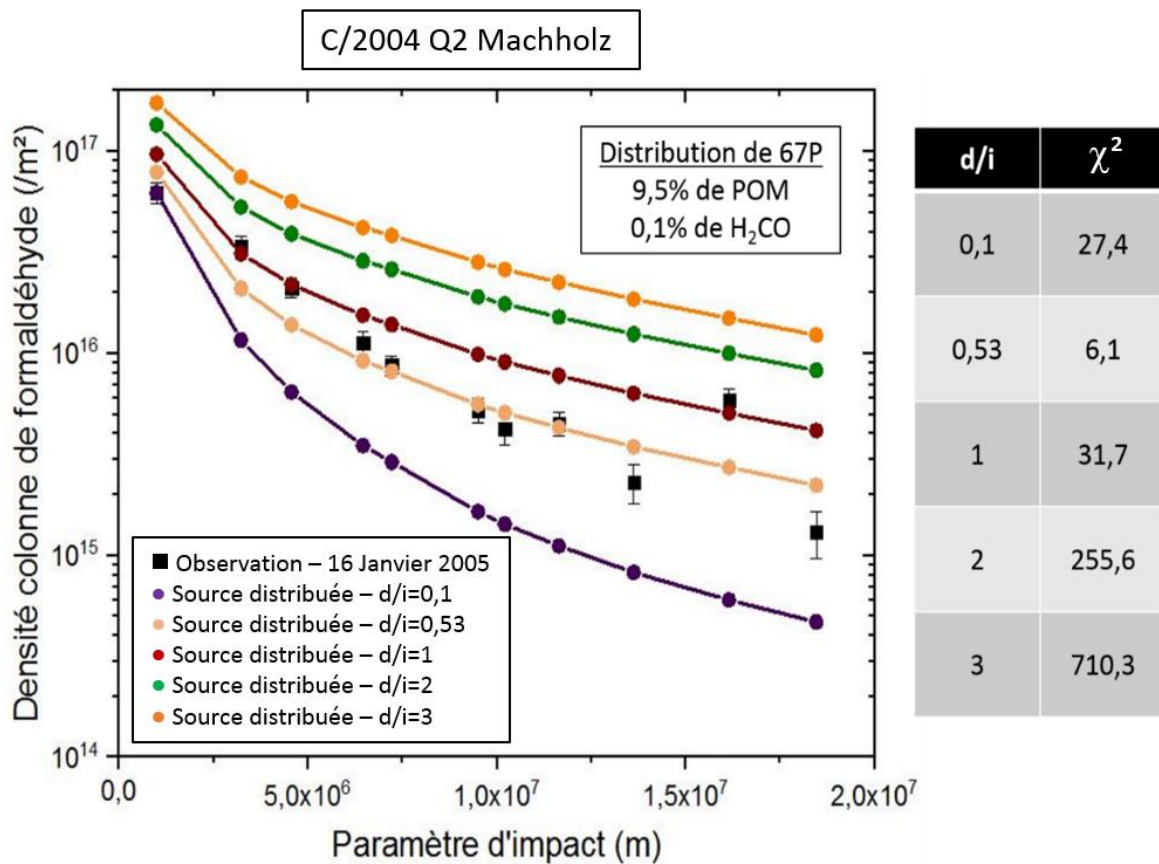


Figure 3.12 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du deuxième jour d'observation lors du mois de Janvier 2005. Les profils de couleur correspondent à des modélisations effectuées pour différents rapport poussières sur glace avec 9,5% de POM et 0,1% de H₂CO.

Le taux de production de poussières étant mal connu, surtout pour la masse dans les plus grosses particules, c'est en réalité la quantité totale de polyoxyméthylène qui est déterminée. En effet, lorsque le rapport poussière sur gaz varie, le pourcentage de polyoxyméthylène varie quasiment en sens inverse de sorte que :

$$m_{POM} = \%POM \times \left(\frac{d}{i} \times m_{gaz} \right) \approx \text{constante}$$

Avec,

$$m_{gaz} = \frac{Q_{H_2O} \times MM_{H_2O}}{N_A}$$

Q_{H_2O} correspond à la production totale de gaz (s⁻¹), MM_{H_2O} représente la masse molaire de l'eau (18 g.mol⁻¹) et N_A le nombre d'Avogadro (6,02.10²² mol⁻¹).

Ici, la valeur de la masse de polyoxyméthylène vaut environ 4,0.10⁵ g.s⁻¹.

Un rapport poussière sur gaz égal à 3 permet d'obtenir une valeur du pourcentage de polyoxyméthylène de $1,7 \pm 0,3$ % en masse, soit $3,7 \cdot 10^5 \text{ g.s}^{-1}$, ce qui correspond à une valeur crédible en comparaison avec des études déjà faites pour lesquels ce pourcentage s'élevait à environ 2% (Cottin et al., 2004; Fray et al., 2006). En revanche, le χ^2 réduit vaut toujours 6,1, cette valeur peut s'expliquer par le fait que l'avant dernier point des observations ne soit pas dans le prolongement des autres mesures. De manière générale, la dispersion des trois derniers points augmente la valeur du χ^2 , aucun des profils modélisés ne peut ajuster ces points. La distribution est représentée sur la **Figure 3.13.b**. J'ai également effectué la modélisation d'une source distribuée pour le jour 1 en utilisant la valeur de 3 comme rapport poussières sur glace. Le profil est représenté sur la **Figure 3.13.a**, l'ajustement est presque parfait avec un χ^2 réduit de 0,13 pour $0,05 \pm 0,01$ % de formaldéhyde en masse et $2,4 \pm 0,3$ % de polyoxyméthylène par rapport à la production totale de gaz, soit $5,6 \cdot 10^5 \text{ g.s}^{-1}$.

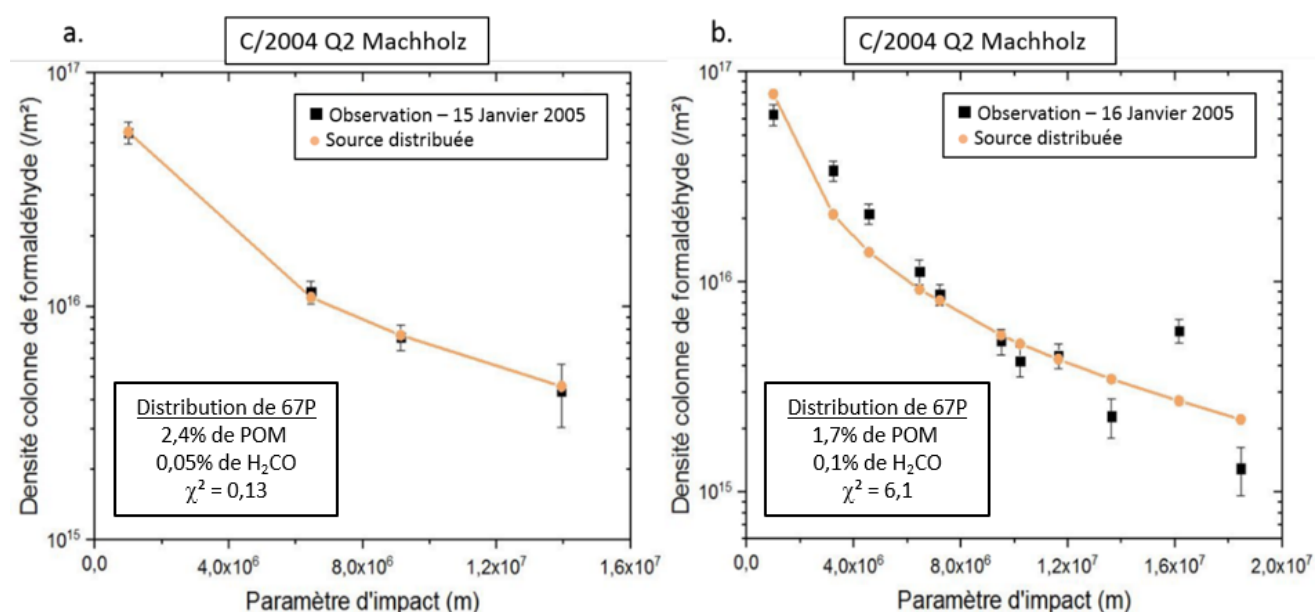


Figure 3.13 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact pour un rapport poussières sur glace en masse égal à 3 a. pour le premier jour d'observation et b. pour le deuxième jour d'observation lors du mois de Janvier 2005. Les carrés correspondent aux mesures d'observation. Les profils oranges représentent le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec a. 2,4% de POM et 0,05% de H₂CO, b. 1,7% de POM et 0,11% de H₂CO.

Les modélisations précédentes montrent que les pourcentages de polyoxyméthylène des deux jours d'observations sont similaires en considérant les barres d'erreur calculées. Cependant les pourcentages de formaldéhyde sont différents. Les quantités propres au jour 1 ont été fixées lors de la modélisation du jour 2, et inversement. Les résultats sont présentés sur la **Figure 3.14**. Pour les deux jours d'observations, le χ^2 réduit augmente considérablement. Plus précisément, pour le premier jour d'observation, l'allure reste similaire, mais 1,7% de polyoxyméthylène n'est pas tout à fait suffisant pour obtenir un bon ajustement avec les mesures. Concernant le deuxième jour d'observation, le fait

d'augmenter le pourcentage de polyoxyméthylène modifie significativement l'allure du profil et rend impossible un bon ajustement des observations.

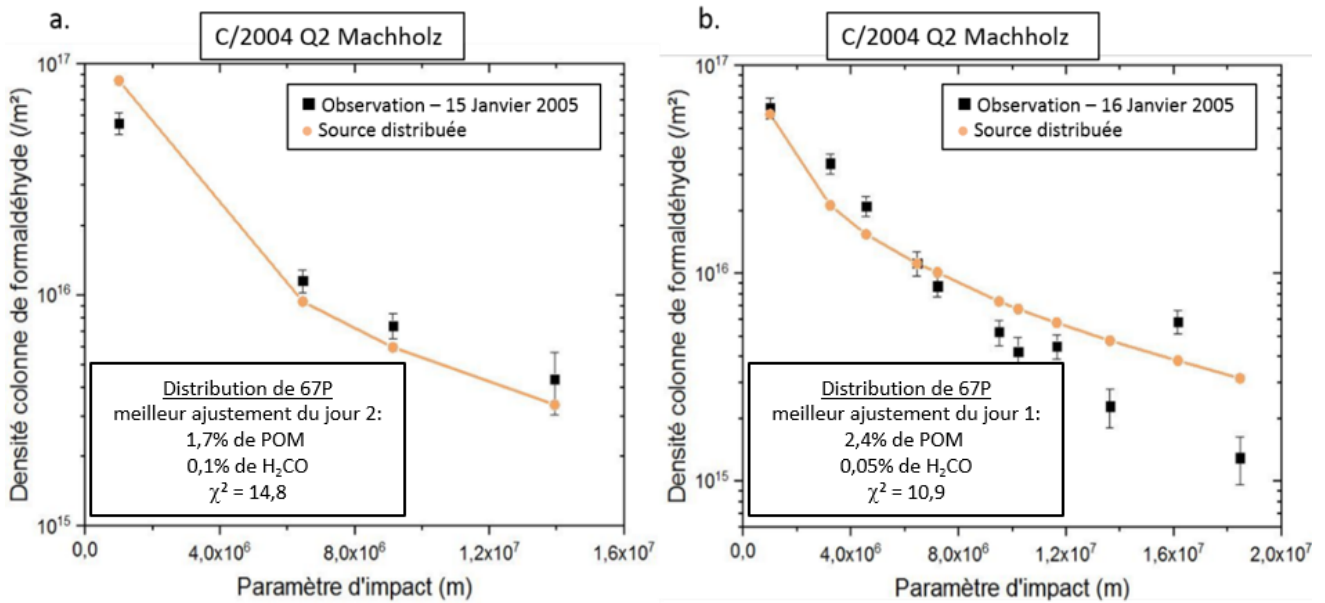


Figure 3.14: Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact pour un rapport poussières sur glace égal à 3 a. pour le premier jour d'observation et b. pour le deuxième jour d'observation lors du mois de Janvier 2005. Les carrés correspondent aux mesures d'observation. Les profils oranges représentent les ajustements obtenus pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec a. 1,7% de POM et 0,11% de H₂CO, b. 2,4% de POM et 0,05% de H₂CO. Ces valeurs correspondent au meilleur ajustement trouvé pour l'autre jour : solution jour 1 superposée au jour 2 et vice-versa.

Finalement, pour le premier jour d'observation, il est possible d'expliquer les mesures avec des quantités de formaldéhyde par rapport à l'eau et de polyoxyméthylène en masse satisfaisantes (respectivement 0,05 et 2,4%) lorsqu'on considère une source distribuée de formaldéhyde avec un rapport poussière sur gaz égale à 3. Cependant, l'ajustement est moins évident pour le deuxième jour d'observation, pour lequel le meilleur χ^2 réduit obtenu ne vaut pas en dessous de 6,1. Cependant, cette valeur est améliorée, et vaut 4,4 lorsque l'avant dernier point des observations n'est pas considéré. Cette valeur devient encore plus faible, soit 3,1, si les trois derniers points pour lesquels on observe une dispersion sont supprimés. Ces derniers points ne sont pas des moyennes azimutales puisqu'ils sont positionnés sur les coins de la carte de mesures, et par conséquent ils ne sont pas représentatifs de la coma.

3.3.4. C/1996 B2 (Hyakutake)

La distribution de formaldéhyde a été calculée dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake) avec des températures qui varient entre 295 K et 710 K, pour 70% de matière organique, et 90% de porosité. Ces températures sont représentées sur la **Figure 3.15**. Les vitesses valent entre 2,6 m/s et 641 m/s. Le rapport poussière sur gaz a été fixé à 1.

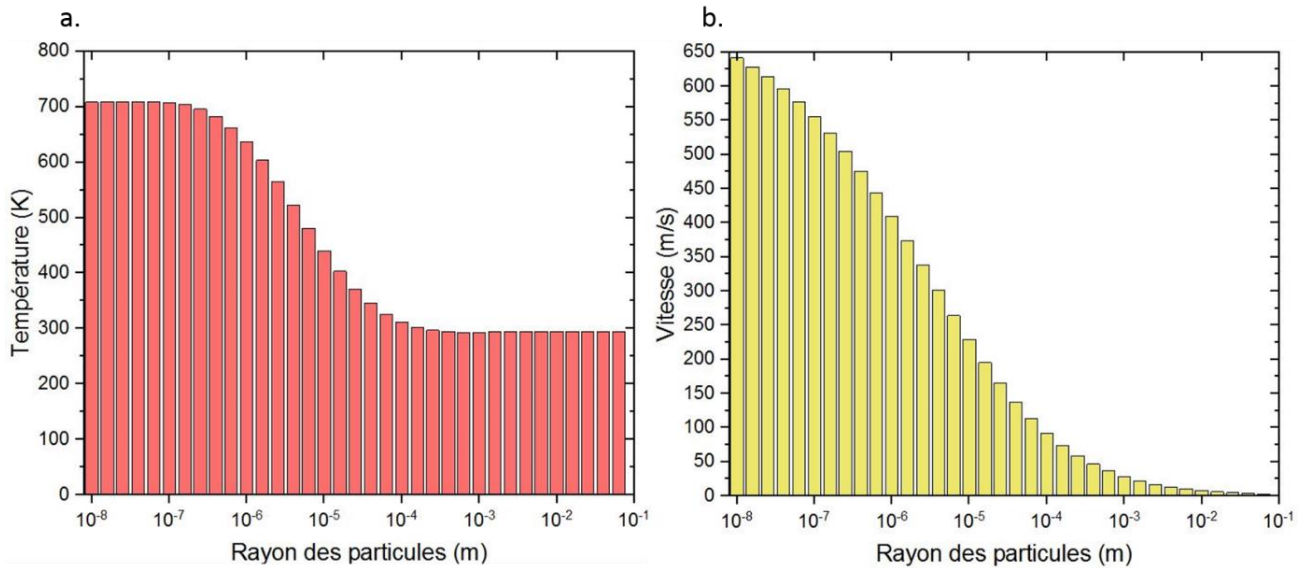


Figure 3.15 : Température (a) et vitesse (b) des particules en fonction de leur taille pour la comète C/1996 B2 (Hyakutake).

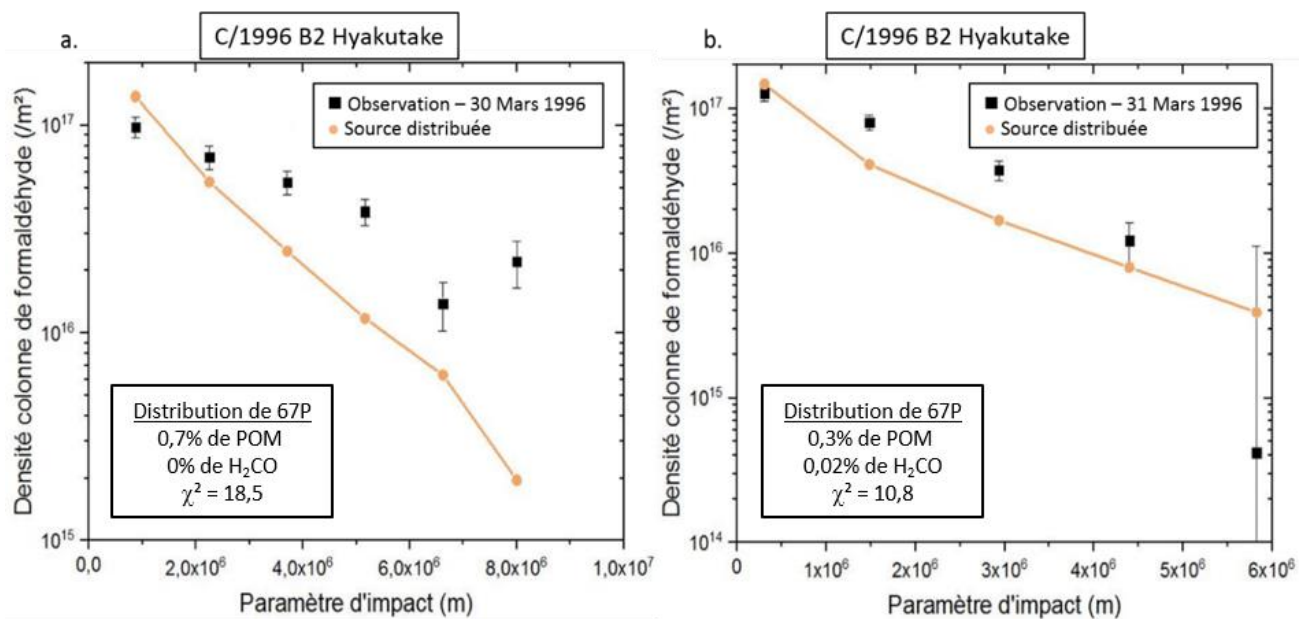


Figure 3.16 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact a. pour le premier jour d'observation et b. pour le deuxième jour d'observation lors du mois de Mars 1996. Les carrés correspondent aux mesures d'observation. Les profils oranges représentent les meilleurs ajustements obtenus pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec a. 0,7% de POM et 0% de H₂CO, b. 0,3% de POM et 0,02% de H₂CO.

Les profils modélisés à partir de sources distribuées pour les deux jours d'observations sont représentés sur la **Figure 3.16**. Pour chaque cas, les pourcentages de polyoxyméthylène et de formaldéhyde ont été ajustés de sorte à obtenir la plus petite valeur de χ^2 réduit. Pour le jour 1, le plus petit χ^2 réduit calculé vaut 18,5. Cet ajustement ne nécessite pas de formaldéhyde dans le noyau,

et $0,7 \pm 0,1\%$ de polyoxyméthylène en masse, c'est-à-dire $6,3 \cdot 10^4 \text{ g.s}^{-1}$. Comme le reflète bien la valeur de χ^2 réduit, ces conditions ne permettent pas de remonter aux mesures effectuées dans la comète. Concernant le deuxième jour, il faut fixer $0,02 \pm 0,013 \%$ de formaldéhyde par rapport à l'eau, et $0,3 \pm 0,1\%$ de polyoxyméthylène en masse, soit $2,7 \cdot 10^4 \text{ g.s}^{-1}$, le χ^2 réduit est un peu plus faible que le premier jour, soit 10,8, mais cela ne correspond toujours pas à un bon ajustement.

Finalement, il n'est pas possible de représenter la pente moyenne du profil de densité colonne mesurée lors du premier jour d'observation. Ainsi, afin d'ajuster au mieux les mesures, j'ai fait varier deux paramètres lors de la modélisation de ce cas, les températures et les vitesses, cela me permet également d'évaluer la sensibilité de la réponse du modèle à ces paramètres.

Dans un premier temps, les températures ont été augmentées ou diminuées arbitrairement de 100 K (**Figure 3.17**) pour chaque classe de particules. Quelle que soit la variation de température, il est impossible d'obtenir une allure similaire aux observations. En effet, lorsque les températures sont plus chaudes, aucun ajustement n'est possible, et le plus petit χ^2 réduit vaut 393. De la même manière, lorsque les températures sont plus froides, le profil présente des densités plus élevées, et permet de réduire la valeur du χ^2 réduit qui vaut 75,7, ce qui demeure élevé, et l'allure modélisée est très différente des mesures

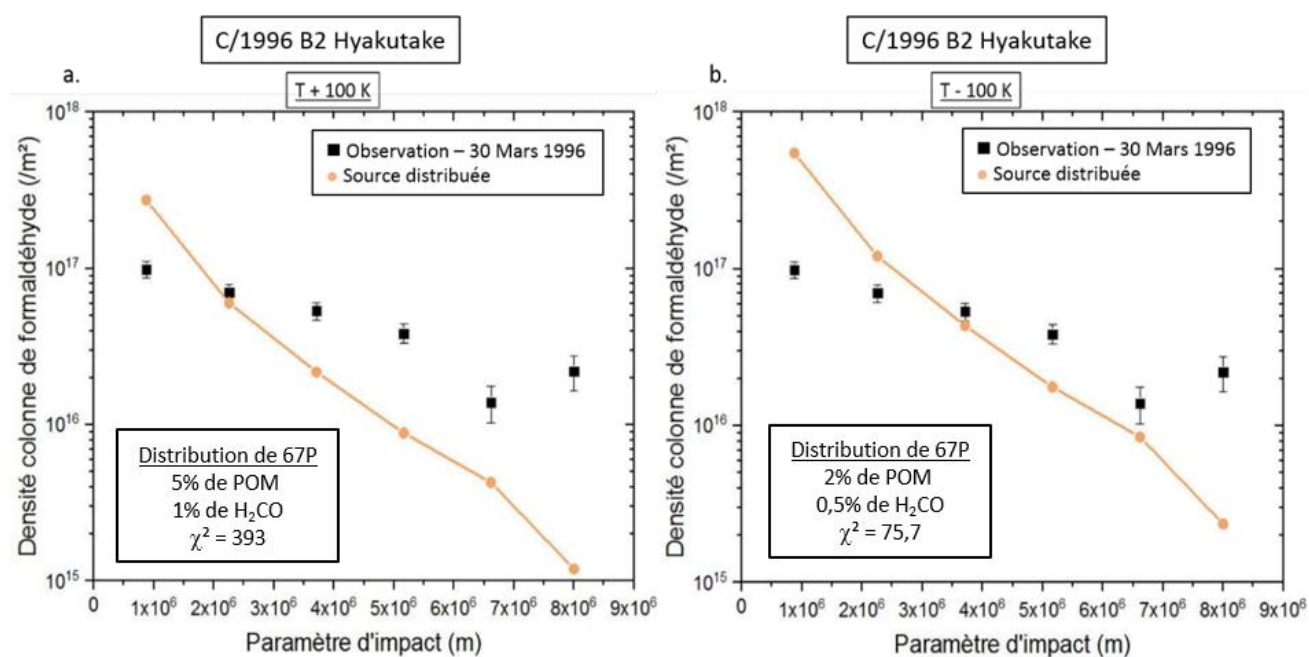


Figure 3.17 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact lors du premier jour d'observation du mois de Mars 1996. Les carrés correspondent aux mesures d'observation. Les profils oranges représentent le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde a. lorsque les températures sont plus chaudes de 100 K, avec 5% de POM et 1% de H₂CO, et b. lorsque les températures sont plus froides de 100 K, avec 2% de POM et 0,5% de H₂CO.

La température n'influe donc pas de manière favorable les profils modélisés. Un second travail a été d'étudier l'influence de la vitesse de chaque classe de particules. J'ai d'abord décéléralé artificiellement la vitesse des particules de 50 m/s, mais aucun ajustement n'a été possible. A l'inverse, des particules plus rapides conduisent à un meilleur ajustement des observations. Plusieurs tests ont été faits, dans un premier temps la vitesse de chaque classe de taille de particule a été augmentée d'environ 100 m/s, puis 50 m/s, 20 m/s, 10 m/s, et enfin 1 m/s. Les pourcentages de formaldéhyde et de polyoxyméthylène, ainsi que les valeurs des χ^2 réduits pour les meilleurs ajustements sont notés dans le **Tableau 3.4** pour chaque test effectué.

Vitesse (m/s)	% H ₂ CO	% POM	m _{POM} (g.s ⁻¹)	Xi ²
+ 100	0,03 ± 0,04	6,9 ± 10	6,2.10 ⁵	4,1
+ 50	0,02 ± 0,04	4 ± 0,50	3,6.10 ⁵	4
+ 20	0	2,2 ± 0,25	2,0.10 ⁵	3,8
+ 10	0	1,5 ± 0,20	1,3.10 ⁵	5,3
+ 5	0	1,1 ± 0,15	1,0.10 ⁵	8,1
+ 1	0	0,8 ± 0,15	7,2.10 ⁴	15,1

Table 3.4 : Valeurs des pourcentages de formaldéhyde, de polyoxyméthylène et des χ^2 réduits en fonction des différentes variations de vitesse dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake).

Finalement, plus on accélère les particules plus il est nécessaire d'ajouter d'augmenter les quantités de polyoxyméthylène et de formaldéhyde. Le meilleur χ^2 réduit est obtenu lorsque les vitesses sont accélérées de 20 m/s, au-delà et en-deçà de cette valeur, celui-ci augmente de nouveau. La **Figure 3.18.a** représente le meilleur ajustement pour le premier jour d'observation, soit pour 2,2 ± 0,25% de polyoxyméthylène en masse, soit 2,0.10⁵ g.s⁻¹, et sans formaldéhyde parent. Les mêmes paramètres ont été fixés pour le deuxième jour d'observation (**Figure 3.18.b**). Le meilleur ajustement est possible pour 0,04 ± 0,012% de formaldéhyde par rapport à la production totale de gaz et 0,8 ± 0,15% de polyoxyméthylène en masse, soit 7,2.10⁴ g.s⁻¹ avec un χ^2 réduit de 8,2.

De la même manière que pour la comète C/2004 Q2 (Machholz), les quantités de polyoxyméthylène et de formaldéhyde ne sont pas les mêmes d'un jour à l'autre. Les valeurs du premier jour d'observation ont donc, également, été fixés au second jour, et inversement. Les résultats sont présentés sur la **Figure 3.19**. Les valeurs des χ^2 réduits augmentent considérablement, soit 24,2 pour le premier jour et 18,2 pour le second jour au lieu de 3,8 et 8,2. Ces valeurs reflètent le fait que les quantités de formaldéhyde et de polyoxyméthylène semblent être bien différentes d'un jour à l'autre. Seule l'allure du second jour diffère, alors que pour le premier jour l'allure reste la même mais avec des densités de formaldéhyde moindre. Ces différences d'abondances peuvent être liées à une variation brutale du rapport poussière sur gaz dans la comète d'un jour à l'autre.

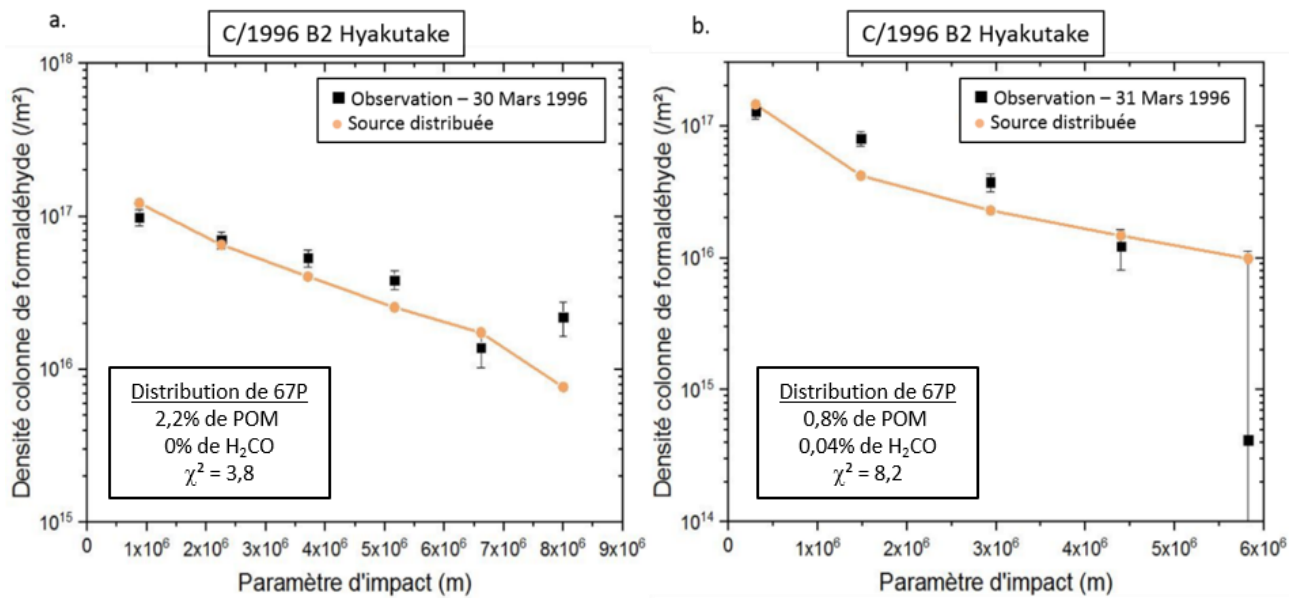


Figure 3.18 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact, lorsque les vitesses sont arbitrairement accélérées de 20 m/s par rapport aux vitesses calculées par le modèle de Crifo. a. pour le premier jour d'observation et b. pour le deuxième jour d'observation lors du mois de Mai 2004. Les carrés correspondent aux mesures d'observation. Les profils oranges représentent les meilleurs ajustements obtenus pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec a. 2,2 % de POM et 0% de H₂CO, b. 0,8% de POM et 0,04% de H₂CO.

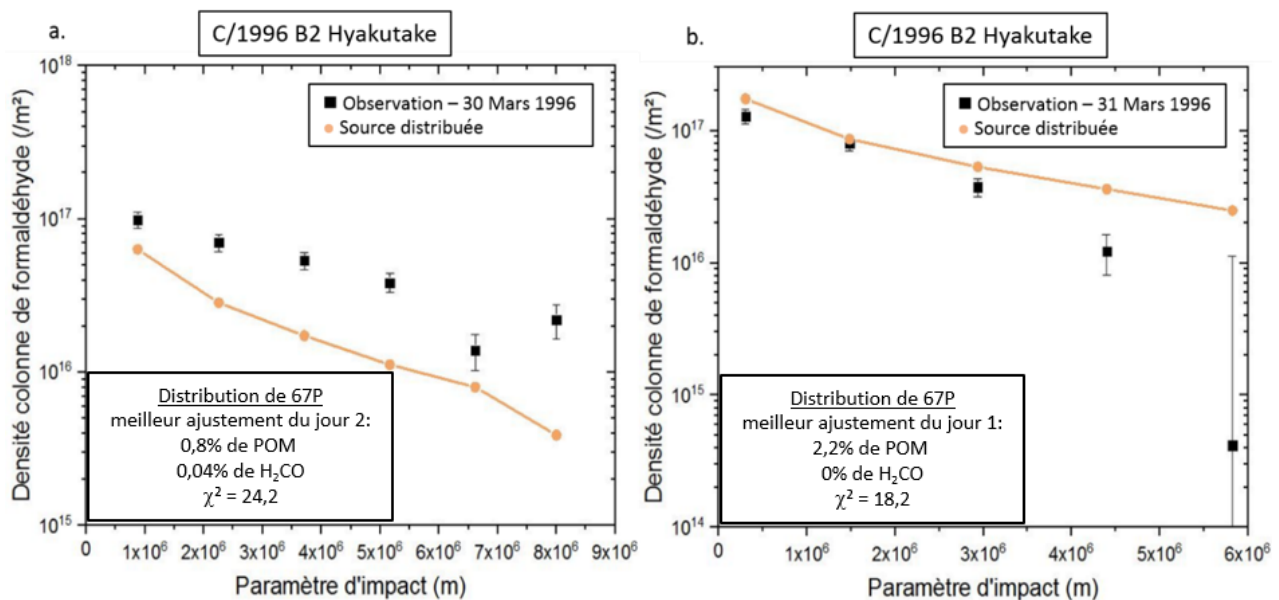


Figure 3.19 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact, lorsque les vitesses sont accélérées de 20 m/s a. pour le premier jour d'observation et b. pour le deuxième jour d'observation lors du mois de Mars 1996. Les carrés correspondent aux mesures d'observation. Les profils oranges représentent les ajustements obtenus pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec a. 0,8% de POM et 0,04% de H₂CO, b. 2,2% de POM et 0% de H₂CO. Les quantités de polyoxyméthylène pour le meilleur ajustement du jour 1 sont appliqué au jour 2, et inversement.

Finalement, il n'est pas évident de conclure que les observations faites dans la comète C/1996 B2 (Hyakutake) peuvent s'expliquer par la présence d'une source distribuée de formaldéhyde. Les valeurs du χ^2 réduit calculées pour tous les cas sont plus petites dans le cas d'une source distribuée plutôt que dans le cas d'une source parente, pour laquelle les valeurs sont respectivement, pour le jour 1 et le jour 2 : 55,1 et 28,9. Le meilleur ajustement a lieu lorsque l'on considère que les particules plus rapides de 20 m/s par rapport au modèle de Crifo. Ces nouvelles vitesses sont spécifiées sur le **Tableau 3.5**, celles-ci ne sont pas très différentes dans le cas des petites particules à la différence des grosses particules pour lesquelles la différence est notable.

J'ai donc essayé de faire varier les vitesses des particules en modifiant certains paramètres influents dans les relations de Crifo, afin de tester si mon hypothèse concernant des grains plus rapide que calculés d'emblée est réaliste. Initialement, j'ai calculé les vitesses pour un rayon du noyau similaire à celui de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Connaissant une approximation de du rayon noyau de la comète C/1995 B2 (Hyakutake), soit 1,2 km (Harmon et al., 1997), les vitesses ont été recalculées. Celles-ci sont présentées dans le **Tableau 3.5**. Les vitesses calculées avec un rayon de 1,2 km sont plus élevées que les vitesses initiales, mais moins élevées que les vitesses accélérées de 20 m/s. Une nouvelle modélisation a été faite en utilisant ces vitesses pour le premier jour d'observation. Le nouveau profil est représenté sur la **Figure 3.20**. Le meilleur ajustement est fait pour $0,8 \pm 0,1\%$ de polyoxyméthylène en masse et $0,001 \pm 0,28\%$ de formaldéhyde par rapport à la production totale de gaz. Cependant, la valeur de χ^2 réduit reste plus élevée que les ajustements initiaux présentés sur la **Figure 3.18**, avec une valeur de 14,8. Cela s'explique par le fait que les vitesses des grosses particules n'ont pas beaucoup augmenté contrairement aux petites particules lors du nouveau calcul de vitesse. Or, la majorité de la masse se trouve dans les grosses particules. Il est possible d'obtenir un ajustement correct lorsque les plus grosses particules ont des vitesses minimales de 6 m/s. J'ai donc fait varier le rayon du noyau afin d'évaluer l'évolution des vitesses. Lorsque que le rayon du noyau augmente, les vitesses diminuent et inversement. Il faudrait considérer un noyau de rayon de 500 m pour avoir des vitesses de 6 m/s pour les plus grosses particules.

La quantité de gaz totale fixée dans les relations de Crifo permet également de faire varier les vitesses. Initialement, le taux de production de gaz vaut 3.10^{29} s^{-1} . Lorsque celui-ci augmente, alors les vitesses des particules augmentent. De la même manière, pour obtenir des vitesses minimales de 6 m/s pour les plus grosses particules, il faudrait fixer une production de gaz égale à $1,2.10^{30} \text{ s}^{-1}$.

Rayon des particules (m)	Vitesse initiale - R=2 km	Vitesse +20 m/s	Vitesse - R=1,2 km
1,00E-08	641,4	661,4	653,9
1,59E-08	628,3	648,3	642,6
2,51E-08	613,5	633,5	629,9
3,98E-08	596,6	616,6	615,2
6,31E-08	577,4	597,4	598,5
1,00E-07	555,8	575,8	579,6
1,59E-07	531,5	551,5	558,1
2,51E-07	505,0	525,0	534,5
3,98E-07	475,6	495,6	508,0
6,31E-07	443,9	463,9	478,9
1,00E-06	410,0	430,0	447,5
1,59E-06	374,2	394,2	413,5
2,51E-06	337,8	357,8	378,4
3,98E-06	300,8	320,8	341,8
6,31E-06	264,2	284,2	304,8
1,00E-05	229,0	249,0	268,2
1,59E-05	195,5	215,5	232,5
2,51E-05	165,1	185,1	199,3
3,98E-05	137,4	157,4	168,3
6,31E-05	113,0	133,0	140,3
1,00E-04	92,0	112,0	115,5
1,59E-04	73,9	93,9	94,0
2,51E-04	59,1	79,1	75,9
3,98E-04	46,8	66,8	60,6
6,31E-04	36,8	56,8	48,0
1,00E-03	28,8	48,8	37,8
1,59E-03	22,3	42,3	29,5
2,51E-03	17,3	37,3	23,0
3,98E-03	13,3	33,3	17,8
6,31E-03	10,3	30,3	13,7
1,00E-02	7,9	27,9	10,6
1,59E-02	6,0	26,0	8,1
2,51E-02	4,6	24,6	6,2
3,98E-02	3,5	23,5	4,7
6,31E-02	2,7	22,7	3,6

Tableau 3.5 : Différents jeux de vitesses utilisés pour la modélisation de la source distribuée dans la comète C/1995 B2 (Hyakutake). La première colonne correspond aux vitesses calculées à partir des relations de Crifo pour un rayon du noyau de 2 km. La deuxième colonne correspond à l'accélération arbitraire des vitesses de 20 m/s. La troisième colonne représente les vitesses calculées à partir des relations de Crifo pour un rayon du noyau de 1,2 km.

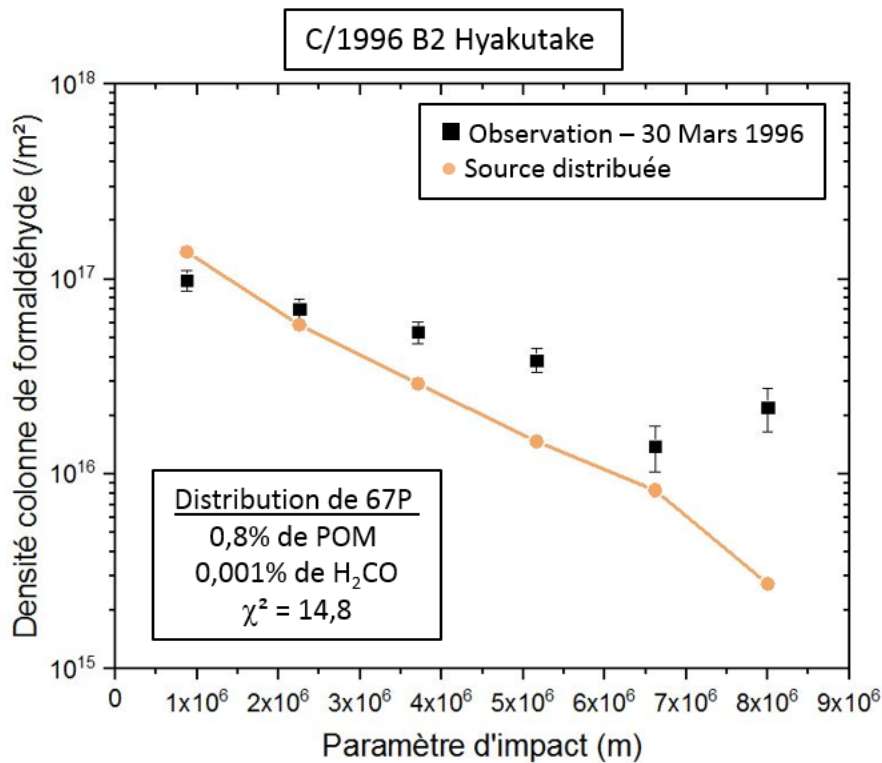


Figure 3.20 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du premier jour du mois de Mars 1996. Le profil orange représente le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec 0,8% de POM et 0,001% de H₂CO.

Finalement, le seul moyen de réduire la valeur du χ^2 réduit serait que les particules éjectées du noyau soient plus rapides que ce que j'ai pu calculer de prime abord. Compte tenu des incertitudes concernant la taille du noyau de la comète C/1995 B2 (Hyakutake), soit une limite inférieure du diamètre du noyau de 0,9 km (Harmon et al., 1997) et de la production de gaz total qui varie rapidement entre 2 et $3 \cdot 10^{29}$ sur les deux jours d'observations (Combi et al., 2005; Gérard et al., 1998), cette hypothèse est possible. Cependant, l'ajustement n'est pas parfait mais le profil obtenu se rapproche plus des mesures comparé au cas pour lequel une source unique de formaldéhyde parent est considéré. La contribution d'une source distribuée améliore l'interprétation des observations, sans toutefois en rendre compte de façon complètement satisfaisante.

3.3.5. C/2012 S1 (ISON)

Les températures (**Figure 3.21.a**) ont été calculées pour une distance au Soleil de 0,54 UA, avec 70% en volume de matière organique et 90 % de porosité. Elles varient entre 380 K et 865 K. Les vitesses (**Figure 3.21.b**) des plus petites particules s'élèvent jusqu'à 614,2 m/s et les plus grosses ont des vitesses minimales de 2,9 m/s. Le rapport poussière sur gaz a été fixé à 1.

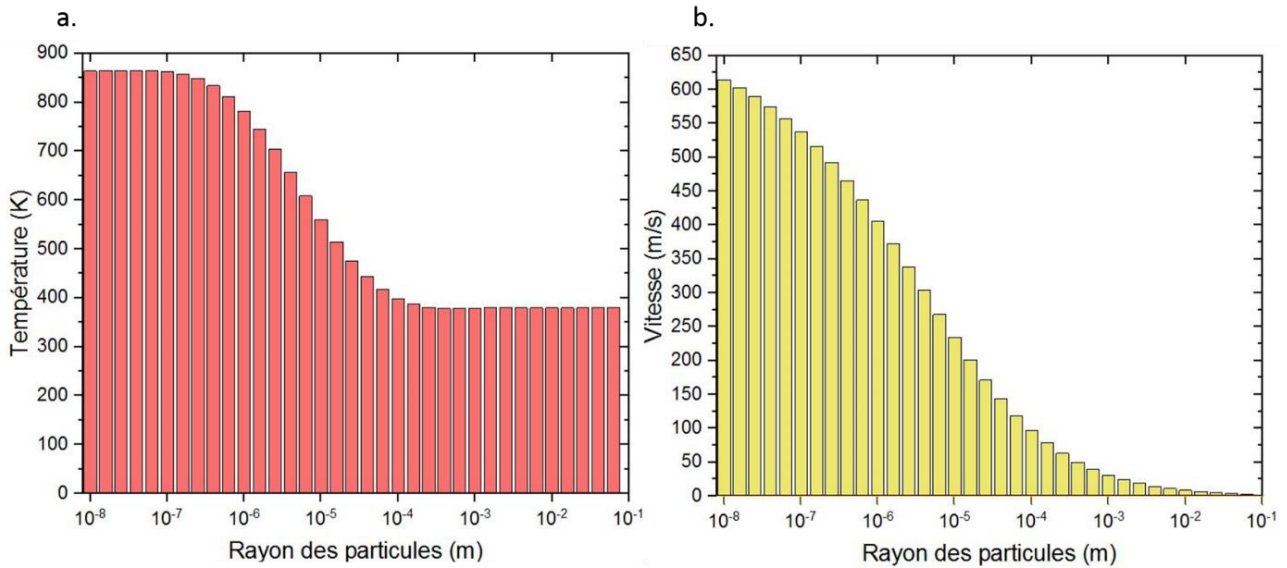


Figure 3.21 : Température (a) et vitesse (b) des particules en fonction de leur taille pour la comète C/2012 S1 ISON.

Dans un premier temps, j'ai modélisé la source de formaldéhyde à partir de ces paramètres. Le profil modélisé est représenté sur la **Figure 3.22**. Bien que l'ajustement semble correct, le pourcentage de polyoxyméthylène en masse, soit $83 \pm 20 \%$, soit $8,9 \cdot 10^6 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1}$, est beaucoup trop élevé pour être réaliste. La quantité de formaldéhyde s'élève à $0,3 \pm 0,05 \%$ par rapport à la production totale de gaz.

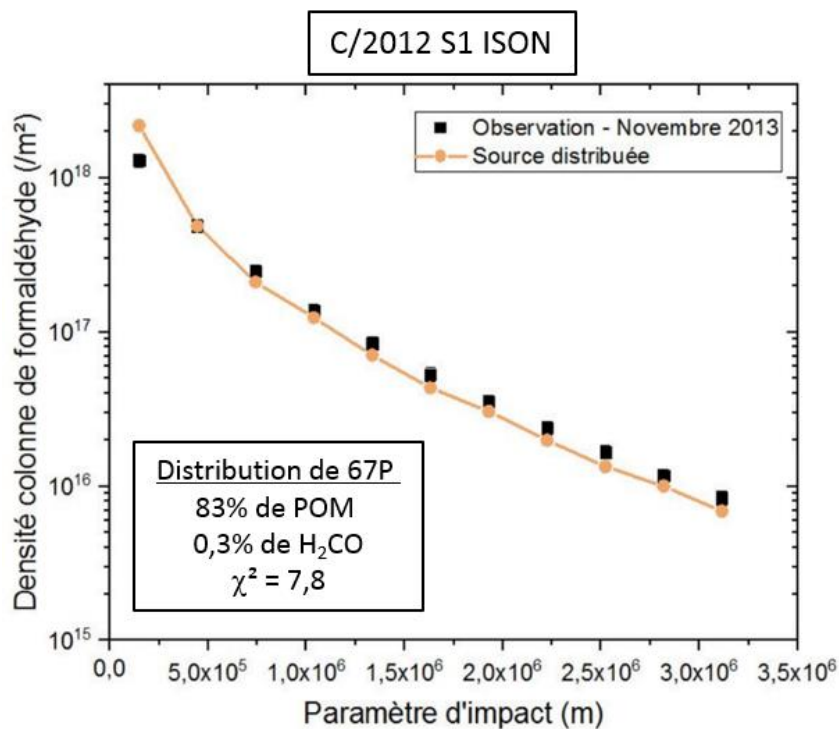


Figure 3.22 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du mois de Novembre 2013. Le profil orange représente le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec 83% de POM et 0,3% de H_2CO .

Afin de tester la sensibilité du modèle à différents paramètres j'ai fait varier les vitesses de plus ou moins 10 m/s dans un premier temps, et les températures de plus ou moins 100 K. Les résultats pour les meilleurs ajustements sont présentés dans le **Tableau 3.6**.

Vitesse (m/s)	% H ₂ CO	% POM	m _{POM} (g.s ⁻¹)	χ ²
- 10	0,3 ± 0,05	211,2 ± 51	2,3.10 ⁷	7,8
+ 10	0,3 ± 0,05	16 ± 3,7	1,7.10 ⁶	7,8
+ 20	0,3 ± 0,05	1 ± 0,2	1,1.10 ⁵	7,8
Température (K)	%H ₂ CO	%POM	m _{POM} (g.s ⁻¹)	χ ²
+ 100		Impossible d'ajuster les mesures		
- 100	0,3 ± 0,05	0,5 ± 0,1	5,4.10 ⁴	6,1

Table 3.6 : Valeurs du pourcentage de formaldéhyde, de polyoxyméthylène et du χ² réduit en fonction de la variation de la vitesse et de la température dans la comète C/2012 S1 ISON.

Lorsque les vitesses des particules sont plus faibles, il faut une plus grande quantité de polyoxyméthylène. Ce cas n'est donc pas réaliste. Accélérer les particules permet de réduire la quantité nécessaire de polyoxyméthylène afin d'ajuster le modèle aux données. Ainsi, lorsque les vitesses sont accélérées de 20 m/s, il est possible d'obtenir un bon ajustement avec 1 ± 0,2 % de polyoxyméthylène, soit 1,1.10⁵ g.s⁻¹, cependant la valeur du χ² réduit reste la même que les paramètres initiaux, soit 7,8. Concernant les températures, il n'est pas possible d'ajuster les observations lorsque que les particules sont plus chaudes, quel que soit le pourcentage de polyoxyméthylène fixé, le profil de densité du formaldéhyde ne varie pas. Au contraire, lorsque les particules sont plus froides, la valeur du χ² réduit diminue légèrement, soit 6,1 au lieu de 7,8, ces valeurs sont inférieures à celle calculées pour une source parente, soit 17. De plus, la quantité de polyoxyméthylène fixée est bien plus faible que les autres cas, soit 0,5 ± 0,1% en masse, c'est-à-dire 5,4.10⁴ g.s⁻¹. Ce profil est représenté sur la **Figure 3.23**.

Ainsi, bien que la valeur du χ² réduit reste supérieure à 1, une source distribuée de formaldéhyde avec des températures plus froides permet de se rapprocher des observations faites dans la comète C/2012 S1 (ISON) avec des quantités de polyoxyméthylène crédibles. J'ai donc cherché à trouver dans quelles conditions les particules de poussières de la comète C/2012 S1 (ISON) pourraient être sensiblement plus froide que dans le cas de figure utilisé initialement pour modéliser sa distribution de formaldéhyde. J'ai fait varier les pourcentages de matière organique et de porosité afin de faire varier les températures et d'évaluer s'il est possible d'obtenir des températures plus faibles. Le **Tableau 3.7** résume les températures calculées initialement avec 70% en volume de matière organique, et 90% de porosité, mais également les températures baissées de 100 K, ainsi que les températures calculées pour différents pourcentages de matière organique et de porosité.

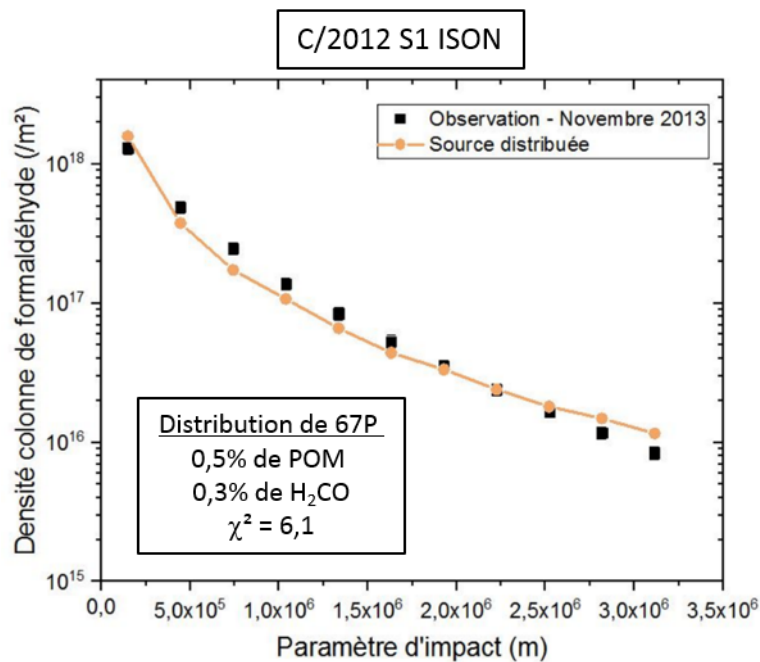


Figure 3.23 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact lorsque les températures sont plus froides de 100K. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du mois de Novembre 2013. Le profil orange représente le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec 0,5% de POM et 0,3% de H₂CO.

Les tests montrent qu'il est possible d'obtenir des températures plus froides lorsque la quantité de matière organique diminue. Cependant, les températures des plus grosses particules ne varient pas quel que soient les pourcentages fixés. Or, ces tailles de particules représentant la majorité de la masse totale, influent sur les profils calculés. Finalement, bien qu'une source distribuée puisse représenter un bon ajustement, en considérant des particules plus froides de 100 K, il n'est pas physiquement possible de remonter à ces températures.

Rayon des particules (m)	70% de matière organique 90% de porosité (Température initiale)	Température initiale - 100 K	30% de matière organique 90% de porosité	70% de matière organique 30% de porosité	30% de matière organique 30% de porosité	10% de matière organique 10% de porosité
1,00E-08	863,8	763,8	692,2	865,0	694,7	518,1
1,59E-08	865,0	765,0	693,4	866,3	699,6	520,6
2,51E-08	865,0	765,0	694,7	867,5	708,2	526,8
3,98E-08	865,0	765,0	695,9	868,7	726,8	541,6
6,31E-08	865,0	765,0	699,6	866,3	751,4	570,0
1,00E-07	862,6	762,6	700,8	852,7	773,7	604,5
1,59E-07	857,6	757,6	702,1	826,8	773,7	628,0
2,51E-07	849,0	749,0	697,1	783,5	740,3	623,1
3,98E-07	834,2	734,2	687,2	724,3	679,8	591,0
6,31E-07	811,9	711,9	671,2	656,4	604,5	532,9
1,00E-06	782,3	682,3	646,5	583,5	529,2	470,0
1,59E-06	745,3	645,3	615,6	515,6	467,5	425,5
2,51E-06	703,3	603,3	582,3	456,4	423,1	397,1
3,98E-06	656,4	556,4	546,5	411,9	393,4	376,1
6,31E-06	608,2	508,2	513,2	382,3	377,4	363,8
1,00E-05	560,1	460,1	484,8	366,3	371,2	361,3
1,59E-05	514,4	414,4	460,1	360,1	371,2	362,6
2,51E-05	474,9	374,9	440,3	361,3	374,9	366,3
3,98E-05	442,8	342,8	424,3	365,0	378,6	370,0
6,31E-05	416,9	316,9	413,2	370,0	379,8	373,7
1,00E-04	398,4	298,4	404,5	372,4	379,8	376,1
1,59E-04	387,2	287,2	399,6	374,9	379,8	378,6
2,51E-04	381,1	281,1	395,9	377,4	379,8	381,1
3,98E-04	378,6	278,6	392,2	378,6	379,8	382,3
6,31E-04	378,6	278,6	389,7	378,6	381,1	382,3
1,00E-03	378,6	278,6	386,0	379,8	381,1	383,5
1,59E-03	379,8	279,8	383,5	379,8	382,3	383,5
2,51E-03	379,8	279,8	381,1	381,1	382,3	383,5
3,98E-03	379,8	279,8	381,1	381,1	382,3	384,8
6,31E-03	379,8	279,8	379,8	381,1	382,3	384,8
1,00E-02	379,8	279,8	379,8	381,1	382,3	384,8
1,59E-02	379,8	279,8	379,8	381,1	382,3	384,8
2,51E-02	379,8	279,8	379,8	381,1	382,3	384,8
3,98E-02	379,8	279,8	379,8	381,1	382,3	384,8
6,31E-02	379,8	279,8	379,8	381,1	382,3	384,8

Table 3.7 : Températures calculées pour différents pourcentages de matière organique et de porosité. La troisième colonne correspond aux températures calculées pour 70% de matière organique et 90% de porosité plus froides de 100K.

3.3.6. C/2012 F6 (Lemmon)

Les températures (**Figure 3.24.a**) des particules ont été calculées pour une distance héliocentrique de 1,47 UA, avec 70% en volume de matière organique, et 90% de porosité. Celles-ci varient entre 230 K et 575 K. Les vitesses (**Figure 3.24.b**) présentent des valeurs entre 4,5 m/s et 500 m/s. Le rapport poussière sur gaz a également été fixé à 1.

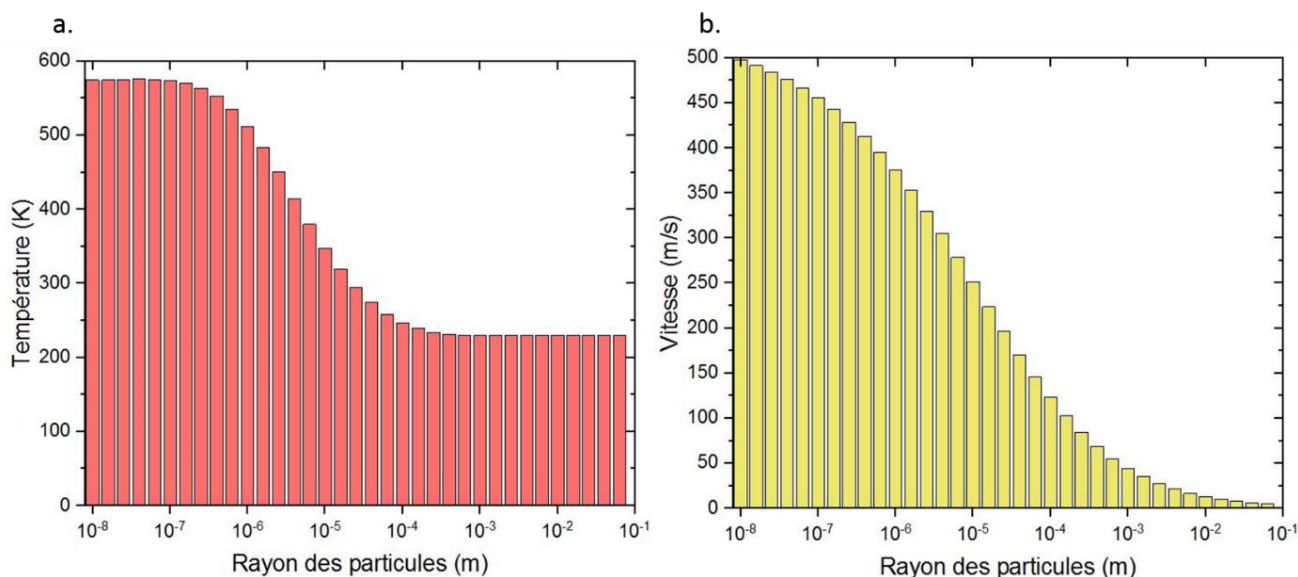


Figure 3.24 : Température (a) et vitesse (b) des particules en fonction de leur taille dans la comète C/2012 F6 (Lemmon).

Vitesse (m/s)	% H ₂ CO	% POM	m _{POM} (g.s ⁻¹)	χ ²
+ 10	0,01 ± 0,001	32,8 ± 10,3	8,8.10 ⁶	4
- 10	0,01 ± 0,001	2,1 ± 0,5	5,6.10 ⁵	3,7
Température (K)	%H ₂ CO	%POM	m _{POM} (g.s ⁻¹)	χ ²
+ 100	0,01 ± 0,001	0,012 ± 0,003	3,2.10 ³	12,5
- 100	0,01 ± 0,001	146,3 ± 26,2	3,9.10 ⁷	3,5

Table 3.8 : Valeurs du pourcentage de formaldéhyde, de polyoxyméthylène et de χ² réduit en fonction de la variation de la vitesse et de la température dans la comète C/2012 F6 (Lemmon).

La **Figure 3.25** représente le meilleur ajustement obtenu pour les observations faites dans la comète C/2012 F6 (Lemmon), avec 14,5 ± 3,7 % de polyoxyméthylène en masse, soit 3,9.10⁶ g.s⁻¹, et 0,012 ± 0,0015 % de formaldéhyde par rapport à l'eau, pour un χ² réduit de 3,4. Ce pourcentage de polyoxyméthylène semble trop élevé en vue des modélisations antérieures. Comme la comète C/2012 S1 ISON, j'ai modifié les vitesses et les températures afin d'étudier la variation de la quantité de polyoxyméthylène et du χ² réduit. Les résultats des différents tests sont présentés sur le **Tableau 3.8**.

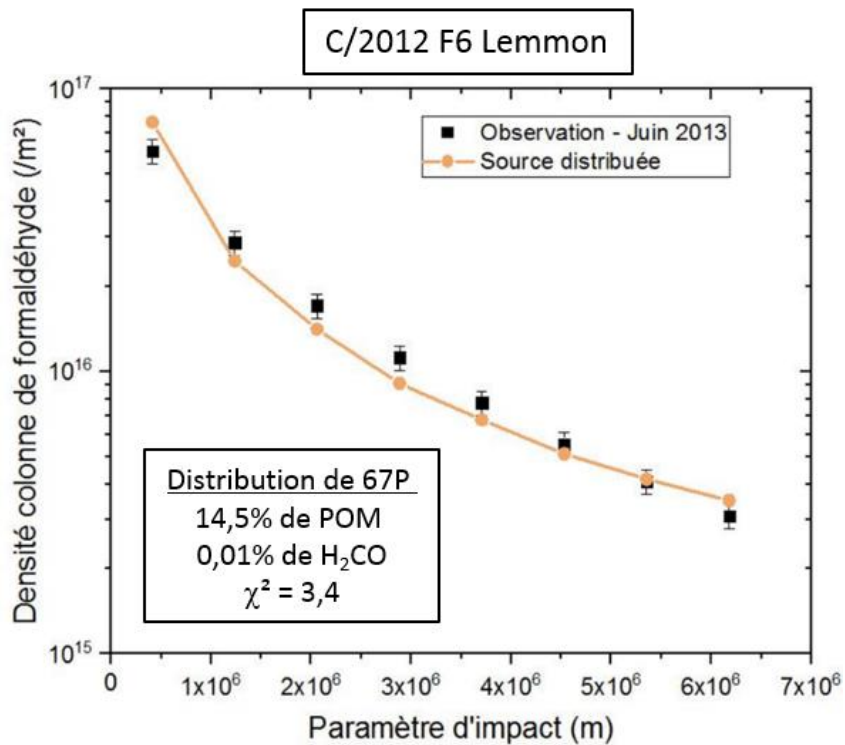


Figure 3.25 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du mois de Juin 2013. Le profil orange représente le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec 14,5% de POM et 0,012% de H₂CO.

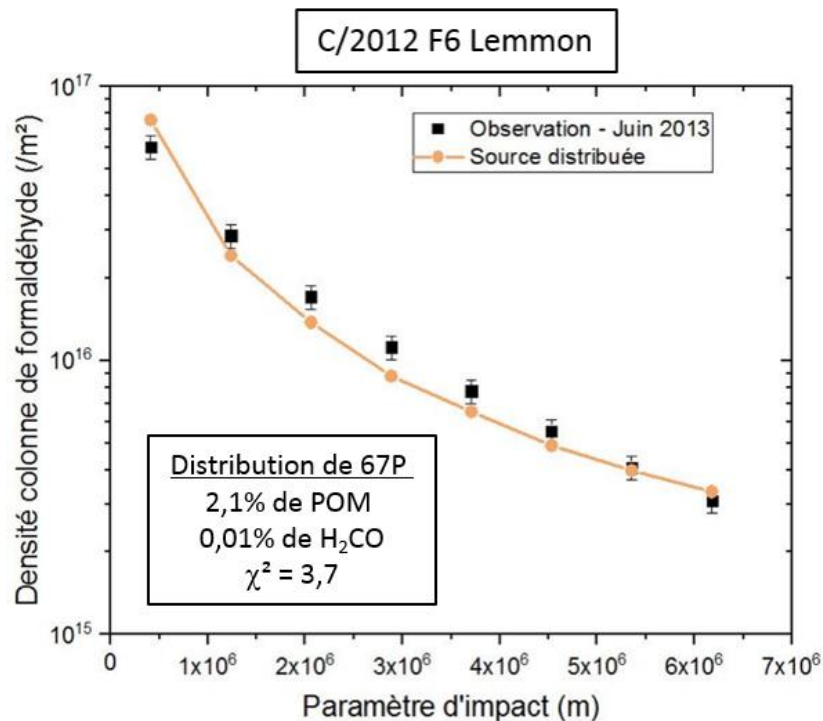


Figure 3.26 : Densité colonne du formaldéhyde en fonction du paramètre d'impact lorsque les vitesses des particules sont plus lentes de 10 m/s. Les carrés correspondent aux mesures d'observation du mois de Juin 2013. Le profil orange représente le meilleur ajustement obtenu pour un modèle de source distribuée de formaldéhyde, avec 2,1% de POM et 0,012% de H₂CO.

Ainsi, lorsque les particules sont accélérées de 10 m/s, il est possible d'ajuster le modèle aux mesures avec un pourcentage de polyoxyméthylène en masse plus élevé, ici 32,8%, soit $8,8 \cdot 10^6 \text{ g.s}^{-1}$. A l'inverse, lorsque les particules sont ralenties de 10 m/s, $2,1 \pm 0,5\%$ de polyoxyméthylène en masse sont nécessaires, soit $5,5 \cdot 10^5 \text{ g.s}^{-1}$, avec un χ^2 réduit de 3,7 (**Figure 3.26**), soit une valeur inférieure à celle calculée pour la source parent pour laquelle le χ^2 réduit vaut 12,6. La variation des températures ne permet pas d'obtenir des résultats satisfaisants, en effet, lorsque les températures sont plus chaude, il est impossible d'obtenir une allure similaire aux observations, enfin si celles-ci sont plus froides, il faudrait plus de 100 % de polyoxyméthylène en masse dans les particules, ce qui n'est pas possible.

Finalement, il est possible d'expliquer le profil de densité de formaldéhyde dans la comète C/2012 F6 (Lemmon) si on considère une source distribuée lorsque les particules évoluent avec des vitesses plus faibles de 10 m/s que ce qui est calculé avec le modèle de Crifo. Le meilleur ajustement est représenté sur la **Figure 3.26**.

J'ai donc calculé les vitesses pour différentes tailles du noyau cométaire (**Tableau 3.9**). Lorsque la taille du noyau est plus petite, les vitesses sont accélérées, et inversement. Ainsi, pour obtenir des vitesses similaires à celles qui m'intéressent, soit les vitesses réduites de 10 m/s, il faut considérer un noyau avec un rayon d'environ 4 km. Cependant, les vitesses des plus grosses particules ne sont pas influencées autant par la taille du noyau que les petites particules, et leurs nouvelles vitesses ne sont pas aussi faibles qu'on le souhaiterait. Or, ce sont ces tailles de particules qui influent le plus sur les profils modélisés. Un second travail a été de modifier la quantité de gaz produits à partir du noyau, les résultats sont présentés dans le **Tableau 3.10**. Initialement, les vitesses ont été calculées avec une quantité de gaz totale de $9 \cdot 10^{29} \text{ s}^{-1}$ (Biver et al., 2014), soit la valeur utilisée dans mon modèle de source distribuée pour la comète C/2012 F6 (Lemmon). Lorsque l'on diminue cette valeur, c'est-à-dire avec une quantité de gaz égale à $3 \cdot 10^{27} \text{ s}^{-1}$, les vitesses diminuent considérablement, il devient alors possible de retrouver de faibles vitesses, pour les plus grosses particules, et de se rapprocher ainsi des valeurs obtenues lorsque l'on réduit les vitesses initiales de 10 m/s. Cependant, cette valeur est bien trop inférieure à la quantité de totale de gaz initiale observée qui est mesurée à plus ou moins 10% (Combi et al., 2014). Il n'est pas possible d'imaginer une quantité de gaz totale aussi faible dans la comète à cette période. Bien que ce cas soit reproductible en considérant une source distribuée avec des vitesses plus faibles, les paramètres ne semblent pas être réalistes.

Rayon des particules (m)	Vitesse initiale (R=2km)	Vitesse initiale - 10 m/s	Vitesse (R=1,2 km)	Vitesse (R=4 km)
1,00E-08	498,08	488,08	504,17	488,13
1,59E-08	491,66	481,66	498,68	480,22
2,51E-08	484,40	474,40	492,46	471,30
3,98E-08	475,99	465,99	485,24	461,00
6,31E-08	466,36	456,36	476,96	449,27
1,00E-07	455,38	445,38	467,48	435,95
1,59E-07	442,79	432,79	456,57	420,80
2,51E-07	428,76	418,76	444,35	404,06
3,98E-07	412,80	402,80	430,37	385,23
6,31E-07	394,96	384,96	414,62	364,48
1,00E-06	375,20	365,20	397,01	341,87
1,59E-06	353,36	343,36	377,31	317,36
2,51E-06	330,07	320,07	356,02	291,81
3,98E-06	304,96	294,96	332,69	264,96
6,31E-06	278,59	268,59	307,75	237,57
1,00E-05	251,44	241,44	281,53	210,23
1,59E-05	223,81	213,81	254,24	183,32
2,51E-05	196,93	186,93	227,04	158,02
3,98E-05	170,70	160,70	199,83	134,18
6,31E-05	145,95	135,95	173,48	112,45
1,00E-04	123,14	113,14	148,57	93,09
1,59E-04	102,44	92,44	125,38	76,06
2,51E-04	84,44	74,44	104,73	61,69
3,98E-04	68,70	58,70	86,28	49,45
6,31E-04	55,34	45,34	70,29	39,31
1,00E-03	44,18	34,18	56,69	31,02
1,59E-03	34,94	24,94	45,23	24,28
2,51E-03	27,53	17,53	35,92	18,97
3,98E-03	21,52	11,52	28,27	14,71
6,31E-03	16,73	6,73	22,11	11,36
1,00E-02	12,95	2,95	17,20	8,74
1,59E-02	9,97	1,00	13,29	6,70
2,51E-02	7,68	1,00	10,28	5,14
3,98E-02	5,88	1,00	7,90	3,92
6,31E-02	4,49	1,00	6,05	2,99

Tableau 3.9 : Vitesses calculées pour différents rayons du noyau cométaire. La deuxième colonne correspond aux vitesses calculées pour un rayon de 2 km auxquelles on soustrait $10 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

Rayon des particules (m)	Vitesse initiale (Qgaz=9.10 ²⁹ s ⁻¹)	Vitesse initiale - 10 m/s	Vitesse (Qgaz=3.10 ²⁷ s ⁻¹)
1,00E-08	498,08	488,08	455,38
1,59E-08	491,66	481,66	442,79
2,51E-08	484,40	474,40	428,76
3,98E-08	475,99	465,99	412,80
6,31E-08	466,36	456,36	394,96
1,00E-07	455,38	445,38	375,20
1,59E-07	442,79	432,79	353,36
2,51E-07	428,76	418,76	330,07
3,98E-07	412,80	402,80	304,96
6,31E-07	394,96	384,96	278,59
1,00E-06	375,20	365,20	251,44
1,59E-06	353,36	343,36	223,81
2,51E-06	330,07	320,07	196,93
3,98E-06	304,96	294,96	170,70
6,31E-06	278,59	268,59	145,95
1,00E-05	251,44	241,44	123,14
1,59E-05	223,81	213,81	102,44
2,51E-05	196,93	186,93	84,44
3,98E-05	170,70	160,70	68,70
6,31E-05	145,95	135,95	55,34
1,00E-04	123,14	113,14	44,18
1,59E-04	102,44	92,44	34,94
2,51E-04	84,44	74,44	27,53
3,98E-04	68,70	58,70	21,52
6,31E-04	55,34	45,34	16,73
1,00E-03	44,18	34,18	12,95
1,59E-03	34,94	24,94	9,97
2,51E-03	27,53	17,53	7,68
3,98E-03	21,52	11,52	5,88
6,31E-03	16,73	6,73	4,49
1,00E-02	12,95	2,95	3,43
1,59E-02	9,97	1,00	2,61
2,51E-02	7,68	1,00	1,99
3,98E-02	5,88	1,00	1,51
6,31E-02	4,49	1,00	1,14

Table 3.10 : Vitesses calculées pour différentes vitesses des particules éjectées du noyau. La troisième colonne correspond aux vitesses calculées pour une quantité de gaz de 9.10²⁹ s⁻¹ auxquelles on soustrait 10 m.s⁻¹.

4. Conclusion

Mes modélisations ont confirmé le fait que les observations de formaldéhyde dans les comètes étudiées ne peuvent pas s'expliquer par l'unique sublimation des glaces du noyau. Même si c'est moins évident pour les comètes C/2012 F6 (Lemmon) et C/2012 S1 (ISON), le fait de considérer une source distribuée de formaldéhyde réduit considérablement la valeur du χ^2 réduit.

Mon premier travail a été de modéliser une source distribuée de formaldéhyde à partir de la dégradation photochimique et thermique du polyoxyméthylène dans des conditions qui se rapprochent le plus des observations, les calculs étant effectués à partir des données relevées dans la littérature pour ces comètes. Or, pour les comètes 8P/Tuttle et C/2001 Q4 (NEAT), ces conditions ne permettent pas d'ajuster les mesures avec un profil modélisé, pour des quantités de polyoxyméthylène de l'ordre de quelques pourcents tout au plus. Dans un second temps, j'ai cherché à ajuster paramètres de modélisations afin de trouver des conditions dans lesquelles les observations pourraient être expliquées par une source distribuée à partir de polyoxyméthylène. Le **Tableau 3.11** résume les conditions nécessaires aux meilleurs ajustements pour chaque comète, ainsi que les pourcentages de formaldéhyde et de polyoxyméthylène obtenus.

Comète	Paramètre modifié	Q_{H_2O} (s-1)	% H ₂ CO	% POM	m_{POM} (g.s ⁻¹)	χ^2
C/2001 Q4 (NEAT)	Aucun	$2,4 \cdot 10^{29}$	$0,09 \pm 0,05$ %	$1,44 \pm 0,2$ %	$4,1 \cdot 10^4$	3,6
8P/Tuttle		$2,0 \cdot 10^{28}$	$0,17 \pm 0,09$ %	$1,7 \pm 0,5$ %	$1,0 \cdot 10^4$	0,63
C/2004 Q2 (Machholz) – J1	d/g = 3	$2,6 \cdot 10^{29}$	$0,05 \pm 0,01$ %	$2,4 \pm 0,3$ %	$5,6 \cdot 10^5$	0,13
C/2004 Q2 (Machholz) – J2			$0,11 \pm 0,04$ %	$1,7 \pm 0,3$ %	$4,0 \cdot 10^5$	6,1
C/1996 B2 (Hyakutake) – J1	v + 20 m/s	$3,0 \cdot 10^{29}$	0 %	$2,2 \pm 0,25$ %	$2,0 \cdot 10^5$	3,8
C/1996 B2 (Hyakutake) – J2			$0,04 \pm 0,01$ %	$0,8 \pm 0,15$ %	$7,2 \cdot 10^4$	8,2
C/2012 S1 (ISON)	T – 100 K	$3,6 \cdot 10^{29}$	$0,3 \pm 0,05$ %	$0,5 \pm 0,1$ %	$5,4 \cdot 10^4$	6,1
C/2012 F6 (Lemmon)	v – 10 m/s	$9 \cdot 10^{29}$	$0,01 \pm 0,001$ %	$2,1 \pm 0,5$ %	$5,6 \cdot 10^5$	3,7

Tableau 3.11 : Tableau récapitulatif des meilleurs ajustements obtenus pour chaque comète étudiée.

Les profils mesurés dans les comètes C/2001 Q4 (NEAT) et 8P/Tuttle sont facilement explicables par la présence d'une source distribuée de formaldéhyde en appliquant au mieux les conditions décrites dans la littérature pour ces comètes. Ce n'est pas le cas des autres comètes pour lesquelles il a fallu ajuster certains paramètres et trouver dans quelles conditions il serait possible d'expliquer ces mesures par une source distribuée de formaldéhyde. En effet, le fait de considérer comme valide l'hypothèse d'une production de formaldéhyde à partir de polyoxyméthylène dans ces comètes nous permet de contraindre les conditions qui y régnaient lors des mesures, à partir de l'ajustement du modèle aux observations.

Des études similaires ont déjà été effectuées. La distribution radiale du formaldéhyde a été modélisée dans la comète 1P/Halley à partir de la dégradation thermique et photochimique du polyoxyméthylène présent sur les particules de poussières éjectées du noyau (Cottin et al., 2004). Ce mécanisme a également été modélisé pour la distribution héliocentrique de formaldéhyde dans la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) (Fray et al., 2006). Ces modèles ont bien reproduits les observations faites dans ces comètes, et le polyoxyméthylène a pu être quantifié dans chacune d'entre elles ; soit 4% en masse pour la comète 1P/Halley (Cottin et al., 2004) et 3% en masse dans la comète de C/1995 O1 Hale-Bopp (Fray et al., 2006). Les quantités de polyoxyméthylène calculées lors de notre étude prennent des valeurs entre 0,25 et 2,7 % en considérant les barres d'erreur. Ces valeurs sont en accord avec celles déjà publiées pour les comètes 1P/Halley et C/1995 O1 Hale-Bopp. Cela nous permet de confirmer qu'à ce jour, la présence de polyoxyméthylène à l'état solide sur les particules de poussières éjectées du noyau cométaire permet de rendre compte des observations de sources distribuées de formaldéhyde dans les comètes.

Chapitre 4 : Source distribuée de la glycine dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko

1. Chimie de la glycine

1.1. Historique

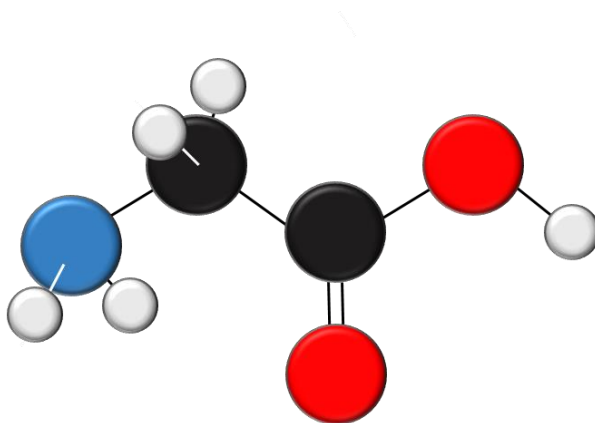


Figure 4.1 : Structure spatiale de la glycine. Les boules noires correspondent au carbone, les blanches à l'hydrogène, les bleues à l'azote, et les rouges à l'oxygène.

La glycine ($\text{NH}_2\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{H}$), dont la structure spatiale est représentée sur la **Figure 4.1**, est l'acide aminé le plus simple, certains des acides aminés étant des constituants des protéines. L'un des buts de l'exobiologie de comprendre la chimie qui a été à l'origine de la vie sur la Terre ou ailleurs dans l'univers. La glycine est considérée comme un ingrédient qui pourrait avoir été impliqué dans la chimie prébiotique, et dont l'origine pourrait remonter potentiellement à la chimie du milieu interstellaire (Garrod, 2013). Si des acides aminés et d'autres précurseurs biochimiques se sont formés dans le milieu interstellaire ou au cours de l'évolution de la nébuleuse protosolaire, et se sont accrétés dans les matériaux solides, alors ils auraient peut-être fourni une matière essentielle à la chimie prébiotique sur la Terre primitive (Bernstein et al., 1999; Chyba et al., 1990; Pendleton and Cruikshank, 1994). Ainsi, l'étude de la distribution de telles molécules clés dans l'univers pourrait contribuer à la compréhension de l'évolution chimique vers la vie. La glycine fait donc l'objet d'études depuis plus d'une cinquantaine d'années. La source des acides aminés sur la Terre primitive reste une question ouverte. A ce jour, il est admis que la production de ces acides aminés aurait pu avoir lieu dans l'atmosphère primitive de la Terre, ou dans des sources hydrothermales. Mais l'efficacité de ces voies de formation est fonction de la composition de l'atmosphère et de l'état d'oxydation du manteau supérieur terrestre (Cottin et al., 2017). L'apport de matière organique, dont des acides aminés, sur la Terre primitive est aussi

envisagé et peut être abordé directement via l'étude de la composition de météorites et celle des comètes.

La glycine a été détectée pour la première fois dans la météorite de Murchison (Kvenvolden et al., 1970) avec une abondance en masse de 3000 ppb (Martins and Sephton, 2009). Cette découverte a ouvert la porte à l'hypothèse selon laquelle les acides aminés ont été importés, dans une certaine mesure, à partir de matériaux extraterrestres. Par la suite, la glycine a également été détectée dans d'autres chondrites carbonées (Martins and Sephton, 2009). Martins and Sephton (2009) et Burton et al. (2015) ont montré que sa concentration dans les chondrites CI et CM s'élève, généralement, de quelques dizaines à quelques milliers de ppb en masse.

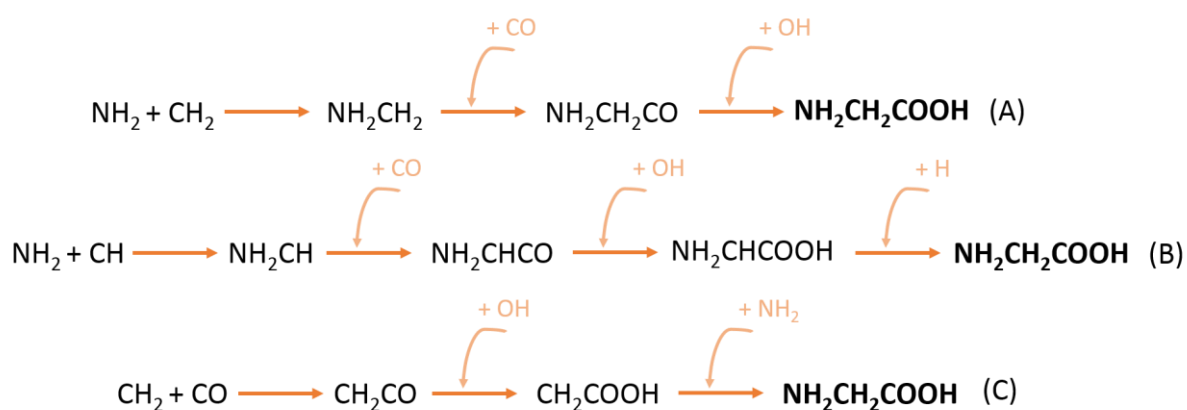
Plus tard, en 2006, lors d'un retour d'échantillons de la sonde américaine Stardust en provenance de la comète Wild 2, de la glycine a de nouveau été détectée (Elsila et al., 2009). Cette molécule étant très abondante sur Terre, le premier travail des chercheurs a été de vérifier qu'il ne s'agissait pas d'une contamination. Pour ce faire, ils ont mesuré l'abondance d'un des isotopes du carbone, le ^{13}C , dans la glycine présente dans les échantillons. Par manque de quantité de matière, les équipes scientifiques ont plus particulièrement étudié les feuilles d'aluminium qui séparaient les alvéoles d'aérogel sur lesquelles les particules de poussières ont été collectées. L'origine cométaire de cette glycine, ou de ses précurseurs, a bien pu être confirmée.

Enfin, très récemment, une détection *in situ* a été effectuée dans l'atmosphère de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko lors de la mission Rosetta (Altwegg et al. 2016). Une première détection a eu lieu avant la livraison de l'atterrisseur Philae, en octobre 2014, lorsque la comète se trouvait à une distance de 3 UA du Soleil. Le 28 Mars 2015, un profil de densité de glycine a été mesuré lors d'un survol rapproché de la comète à une distance comprise entre 14 et 26 km du noyau grâce au spectromètre ROSINA, à ce moment la comète se trouvait à une distance héliocentrique de 2 UA. Ces observations sont détaillées dans la partie 1.2 du chapitre 2. Les autres cas où la glycine a été mesurée dans la coma sont corrélés à des sursauts d'activité, lorsque la comète se trouvait proche de son périhélie, soit du 9 Juillet au 4 Août 2015.

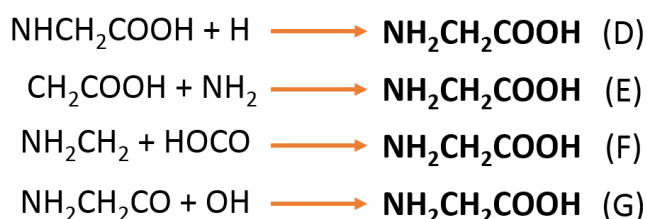
1.2. Mécanismes de formation de la glycine

Miller (1953) a montré par le biais d'expériences de simulation que des acides aminés peuvent être synthétisés, en présence d'eau liquide, sous l'action de décharges électriques simulant des orages dans une atmosphère primitive terrestre constitué de gaz réducteurs tels que CH_4 , NH_3 et H_2 . Cependant, compte tenu de ce que l'on sait désormais de la formation et de l'évolution des atmosphères des planètes telluriques, la composition de l'atmosphère primordiale choisie par Stanley Miller semble désormais assez improbable (Cottin et al., 2017). L'atmosphère primordiale de la Terre était probablement dominée par CO_2 et N_2 , une composition peu propice à la synthèse de matière organique (Miller and Schlesinger, 1984).

Bernstein et al. (2002), Munoz Caro et al. (2002), Meinert et al. (2012) et Esmaili et al. (2018) ont mené des expériences montrant que la glycine peut être le produit de la photolyse ou de l'irradiation ultraviolette, à une température de 10K, d'analogues de glace interstellaire et cométaire. Ces analogues sont composés de mélanges de glaces telles que H₂O, CO et CO₂ ou encore contiennent des petites quantités de CH₃OH, NH₃ et HCN. Il a été montré à partir de calculs de chimie quantique que la synthèse de la glycine peut également être expliquée par l'addition des radicaux NH₂CH₂ et HOCO, qui sont produits, respectivement, par l'hydrogénation successive de HCN et par l'addition de CO à OH (Woon, 2002b). D'autres mécanismes ont été proposés dans le milieu interstellaire par Singh et al. (2013), où trois différentes voies de réaction produisant de la glycine à partir de glaces, dominées par l'eau, sur les particules de poussières interstellaires, sont proposées.

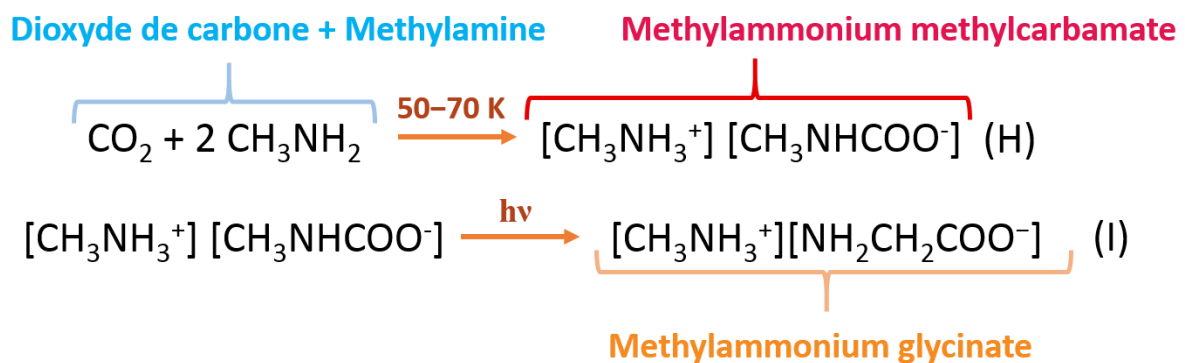


Le mécanisme B est considéré comme étant le plus favorable, thermodynamiquement parlant selon Singh et al. (2013). D'autres voies de formation ont été proposées par Garrod (2013), qui propose que les principales voies de formation de la glycine seraient les suivantes :



Un autre scénario, testé expérimentalement décrit la formation de sel d'un isomère de glycine, le méthylcarbamate de méthylammonium. Ce dernier se forme à partir de la réaction thermique entre deux composés déjà observés dans des comètes, le dioxyde de carbone et la méthylamine (Altwegg et al., 2016), (H₂O:CO₂:CH₃NH₂ = 10:3:0,5) dans une glace dominée par l'eau (Bossa et al., 2009; Bossa et al., 2010). La méthylamine a été mesurée dans les mêmes quantités que la glycine dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko (Altwegg et al., 2016). Biver and Bockelée-Morvan (2019) ont montré que celle-ci est aussi présente dans d'autres comètes des abondances inférieures à 0,1% par rapport

à l'eau. La méthylamine a également été détectée dans le milieu interstellaire (Ehrenfreund and Charnley, 2000).



Lors de la photolyse dans le domaine VUV (< 200 nm), le sel isomère agit comme le précurseur du sel de glycine, le methylammonium glycinate (Altwegg et al., 2016).

Ainsi, la production de la glycine dans la glace interstellaire et cométaire peut être expliquée de manière théorique et expérimentale. Dans les cas de figures décrits ci-dessus, on peut noter que la glycine serait formée au sein des matrices de glace. Nous verrons plus tard que c'est justement dans ce cas de figure que la distribution de glycine dans l'atmosphère de la comète 67P peut s'interpréter à travers mon modèle de source distribuée.

2. Modélisation de la distribution radiale autour du noyau

Afin d'expliquer le profil mesuré dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, j'ai tout d'abord cherché à confirmer le fait qu'il existe bien une source distribuée dans la comète (Altwegg et al., 2016) en modélisant le cas d'une source parent (**Figure 2.24.a**), c'est-à-dire de glycine émise directement à partir de la sublimation des glaces du noyau puis photolysée. Par la suite, j'ai cherché à élucider le mécanisme à l'origine de cette source distribuée de glycine. En effet, il n'est pas possible d'envisager un mécanisme similaire à celui du formaldéhyde produit à partir de son polymère. Il pourrait exister des petites chaînes peptidiques basées uniquement sur la glycine, mais la formation de telles structures dans les comètes serait vraiment très improbable (voir la discussion à ce sujet dans la section 4 de ce chapitre). J'ai considéré deux mécanismes à l'origine de la source distribuée.

Dans un premier cas, je considère qu'il y aurait de la glycine pure, condensée à la surface et à l'intérieur de particules poreuses de poussière éjectée du noyau de la comète. Cette glycine serait alors produite en phase gazeuse en suivant la cinétique de sublimation de glycine à l'état solide. Le second cas correspond à la production de glycine qui serait piégée au sein de la matrice de glace d'eau qui serait encore condensée au moment de l'éjection du noyau de particules de poussière (**Figure 2.24.c**). De ce fait, la production de glycine suit dans ce cas la cinétique de sublimation de la

glace d'eau (**Figure 4.2**). La glycine solide tout comme la glace d'eau est distribuée de manière uniforme dans les particules de poussières poreuses. Les particules de poussières sont considérées comme suffisamment poreuses pour permettre aux molécules de diffuser et d'être libérées directement dans l'atmosphère cométaire, comme si elles se trouvaient à la surface des particules.

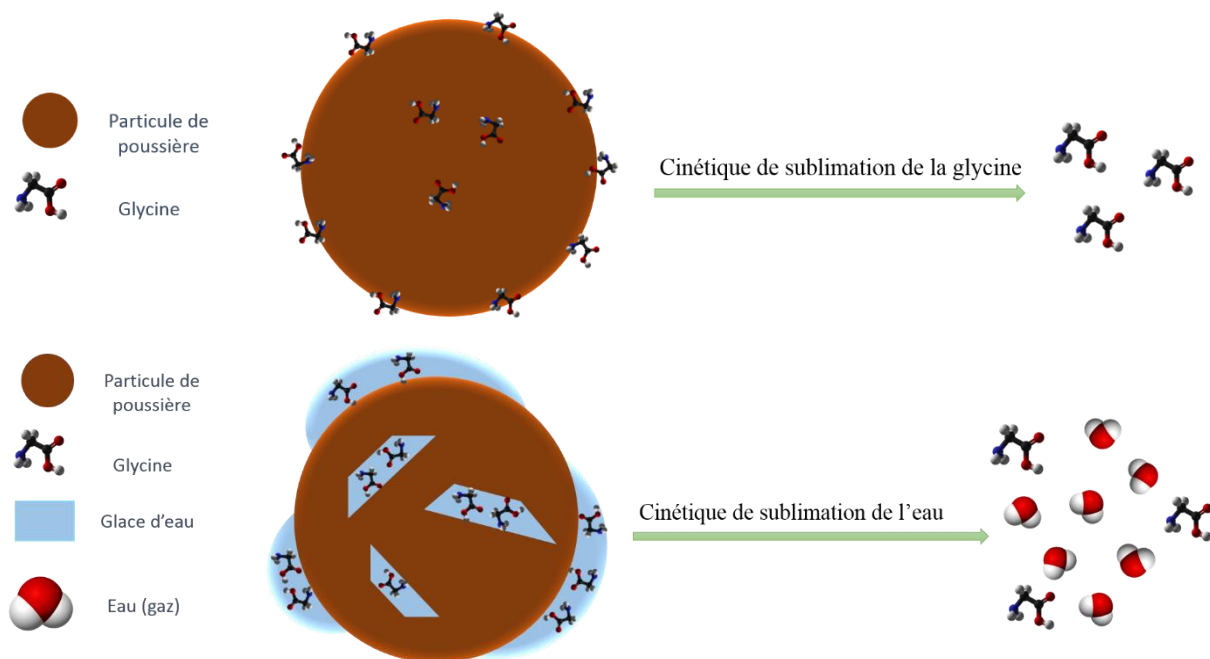


Figure 4.2 : Schémas explicatifs des particules considérées pour les 2 cas de figure étudiés pour la production de glycine par une source distribuée. Le schéma du haut représente les particules de poussières considérées dans le premier cas de source distribuée pour lequel la glycine suit sa propre cinétique de sublimation. Le schéma du bas correspond au second cas de source distribuée pour lequel la glycine suit la cinétique de sublimation de l'eau.

Tous les paramètres utilisés lors des modélisations sont présentés dans le chapitre 2. A savoir, que les paramètres des équations différentielles présentées dans le chapitre 2 diffèrent d'une molécule à l'autre, et sont référencés dans le **Tableau 2.8**. De plus, pour ces modélisations nous avons considéré la distribution de particules mesurée dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, et des températures calculées pour une quantité de matière organique de 75% (Levasseur-Regourd et al., 2018) en masse et avec une porosité de 90% (Hornung et al., 2016). Enfin, le rapport poussière sur glace utilisé vaut 1. Toutes les Figures de ce chapitre présentent la densité de la glycine multipliée par le carré de la distance au noyau. Nous avons adopté la représentation choisie dans l'article Altwegg et al. (2016) qui permet de visualiser plus facilement un écart à une source parent, puisque cette dernière devrait présenter un profil horizontal (s'il n'existe pas de puit), ou une pente négative si la molécule est détruite par photochimie. En cas de source distribuée, on observe une pente positive.

2.1. Cas d'une source unique de glycine à partir des glaces du noyau

Les profils de la glycine en fonction de la distance au noyau lorsque la glycine ne présente pas de source distribuée sont présentés sur la **Figure 4.3**. Ici, la glycine étant photolysée, les profils calculés montrent une pente négative lorsque qu'on s'éloigne du noyau. Ce cas a été modélisé pour différentes abondances de glycine dans le noyau. Nous avons essayé dans un premier temps d'ajuster au mieux les premiers points mesurés dans la comète, cela correspond à une quantité de glycine par rapport à l'eau dans le noyau de 0,15%. Cependant, l'allure du profil n'est pas du tout similaire aux mesures de ROSINA. Des pourcentages de glycine plus élevés ont été testés, soit 0,25% et 0,35%, mais cela ne change pas l'allure du profil, et n'affecte que la densité initiale de glycine. Ainsi, quelle que soit la quantité de glycine dans le noyau, il n'est effectivement pas possible de faire correspondre le cas le plus simple d'une source parente, dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, avec les observations qui ont été faites.

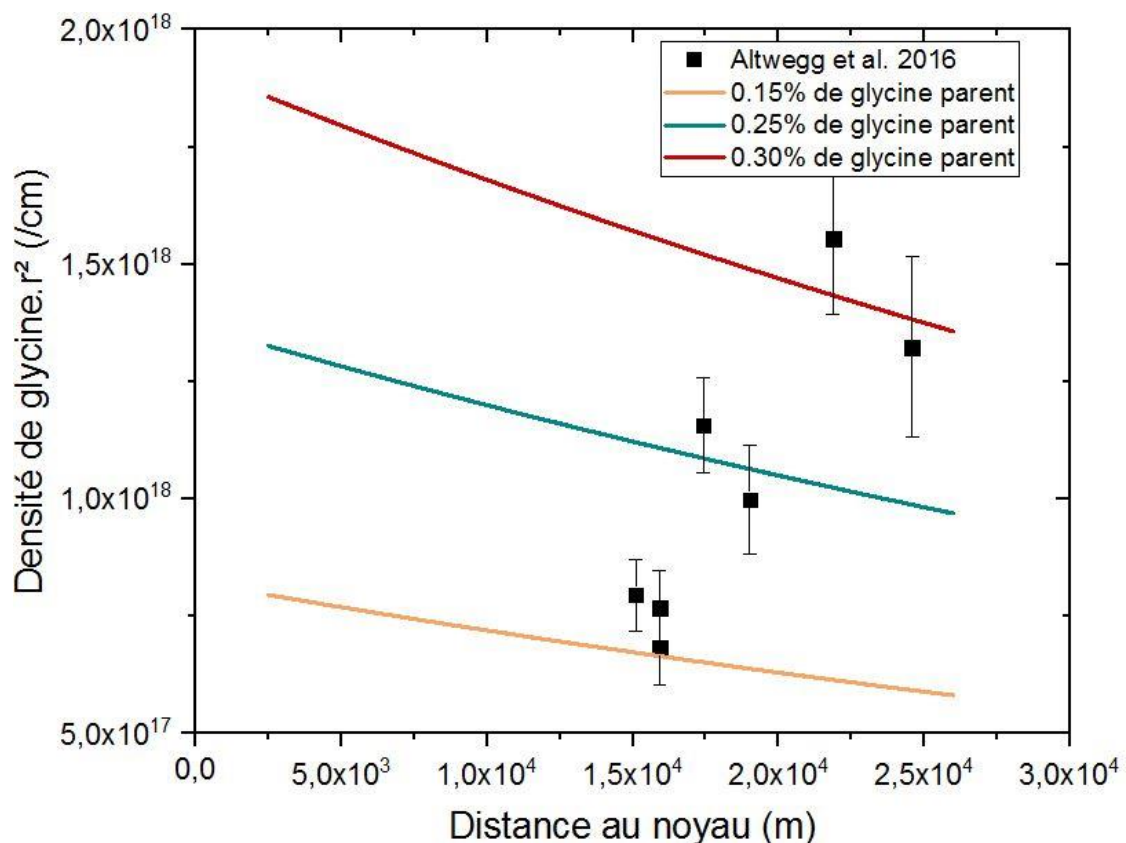


Figure 4.3 : Profil de densité de la glycine en fonction de la distance du noyau de 67P/Churyumov-Gerasimenko lorsque la glycine est émise par l'unique sublimation des glaces du noyau puis photolysée. La ligne rouge correspond à 0,30% de glycine par rapport à l'eau émise par le noyau, la ligne bleue à 0,25% et la ligne orange à 0,15%.

2.2. Cas d'une source distribuée de glycine à partir de glycine solide sur les particules éjectée du noyau

Le premier cas d'une source distribuée, dans laquelle la glycine est émise à partir de la sublimation de glycine solide dans les particules éjectées du noyau est représenté sur la **Figure 4.2**. Les paramètres utilisés sont ceux correspondant à la cinétique de sublimation de la glycine.

Le profil de densité de la glycine pour différentes abondances de glycine solide sur les particules de poussières, mais sans glycine parent dans le noyau, est présenté sur la **Figure 4.4.a**. Afin d'atteindre une abondance de glycine du même ordre de grandeur que les mesures faites dans la comète, il est nécessaire de fixer 100% de glycine sur les particules. Or cela n'est pas du tout réaliste. Lorsque l'abondance est réduite de 50%, la densité de glycine devient trop faible par rapport aux observations. Enfin, quelle que soit la quantité de glycine dans le noyau, ou sur les particules, il n'est pas possible de retrouver une allure similaire au profil mesuré. Ainsi, j'ai fixé la quantité de glycine solide sur les particules à 100%, et fais varier la quantité de glycine parent dans le noyau. Trois cas de figure ont été testés (**Figure 4.4.b**) : un cas sans glycine produite à partir du noyau, et deux autres cas avec 10^{-3} %, et 10^{-2} % de glycine parent par rapport à l'eau. En considérant les barres d'erreur, Il n'y a pas de différences significatives entre le profil sans glycine provenant du noyau, et celui avec 10^{-3} % de glycine parent. Au-delà de cette valeur, avec 10^{-2} % de glycine parent par exemple, le profil de la glycine présente des densités bien plus élevées.

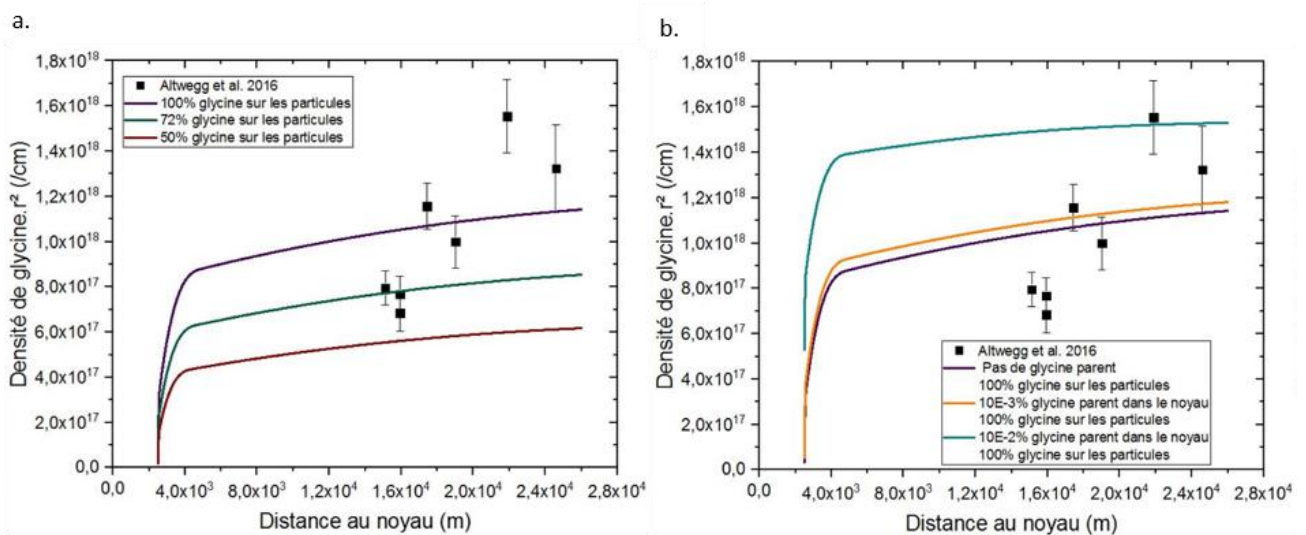


Figure 4.4 : Profil de densité de la glycine en fonction de la distance du noyau de 67P/Churyumov-Gerasimenko lorsque la glycine présente une source distribuée à partir de la sublimation de glycine solide sur les particules éjectées du noyau a. avec différentes abondances de glycine sur les particules et sans glycine parent dans le noyau b. avec différentes abondances de glycine parent dans le noyau, et des particules de glycine pure.

2.3. Cas d'une source distribuée de glycine à partir de la glace d'eau sur les particules éjectées du noyau

La cinétique de sublimation de la glycine ne permettant pas d'expliquer les observations. Nous avons considéré une source distribuée de glycine à partir de la sublimation de glycine piégée dans la glace d'eau. Ainsi, pour le deuxième cas de source distribuée, nous avons considéré la cinétique de sublimation de l'eau afin d'interpréter les observations. La glycine serait donc autant émise à partir de la sublimation des glaces du noyau que de la sublimation des glaces des particules éjectées du noyau.

La **Figure 4.5** présente le résultat de la modélisation d'une source distribuée de glycine piégée dans de la glace d'eau sublimant à partir de particules de poussières. Le profil de densité a été calculé avec le même rapport de glycine qui sublime à partir des glaces du noyau, et de glycine qui subliment à partir des particules de poussières. De plus, le rapport poussière sur glace a été fixé à 1. Contrairement au premier cas de source distribuée, ici, le profil modélisé présente une allure similaire aux observations. Le meilleur ajustement est obtenu pour une abondance de glycine, piégée dans la glace d'eau sur les particules de poussières, d'environ $1,7 \cdot 10^{-5}$ % en masse par rapport à l'eau.

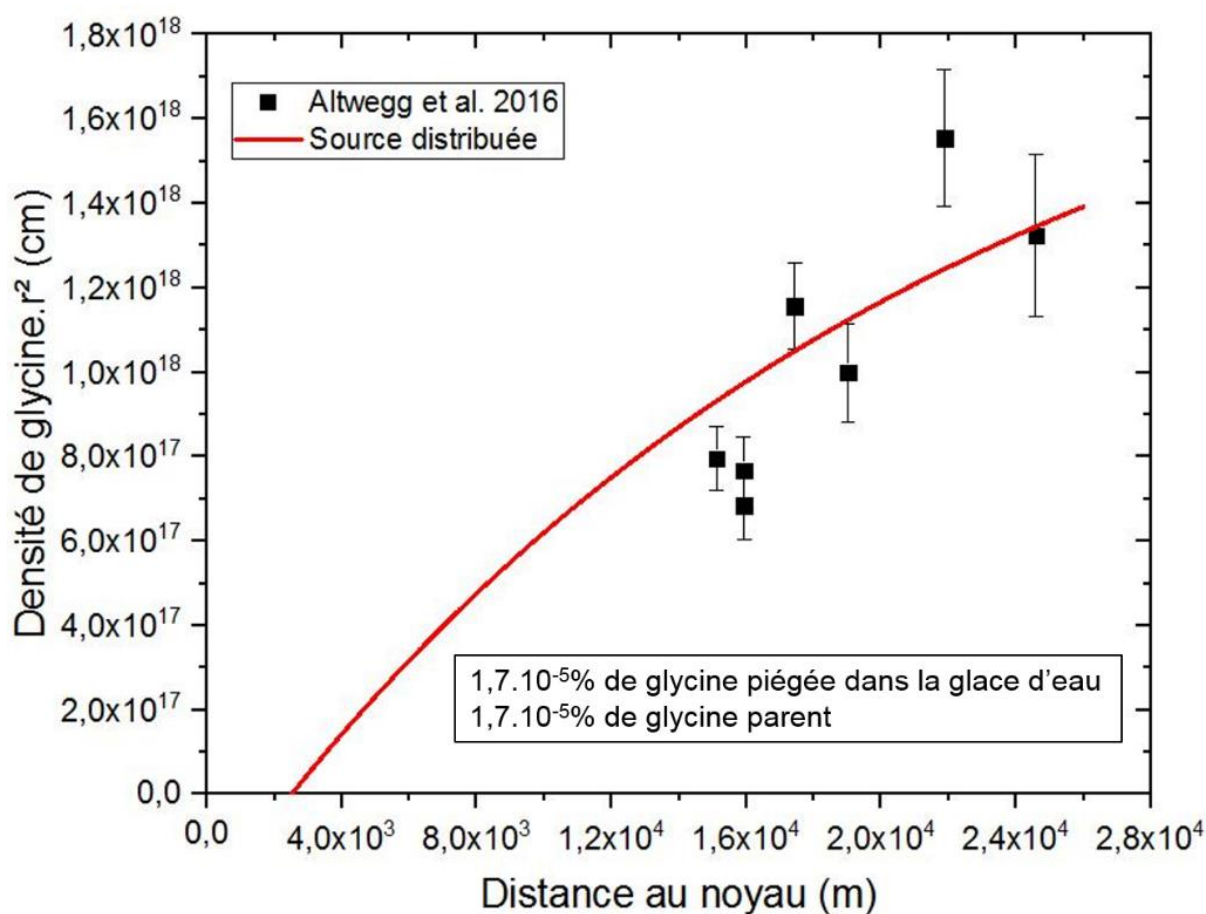


Figure 4.5 : Profil de densité de la glycine en fonction de la distance au noyau de 67P/Churyumov-Gerasimenko lorsque la glycine présente une source distribuée pour laquelle la glycine est piégée dans de la glace d'eau sur les particules éjectées du noyau avec $1,7 \cdot 10^{-5}$ % de glycine en masse, et $1,7 \cdot 10^{-5}$ % de glycine parent.

Le profil modélisé est sensible à des paramètres tels que la porosité des particules de poussières. En effet, jusqu'ici, les profils de densité de glycine ont été calculés pour des particules de poussières composées de 70% en volume de matière organique (Levasseur-Regourd et al., 2018), et avec un pourcentage de porosité égale à 90% (Hornung et al., 2016). Ces paramètres influent sur la température des particules. La **Figure 4.6** présente les températures calculées pour 90% et 30% de porosité. Lorsque celle-ci est réduite à 30%, les particules de poussières atteignent plus rapidement des températures plus froides pour les particules de plus petites tailles.

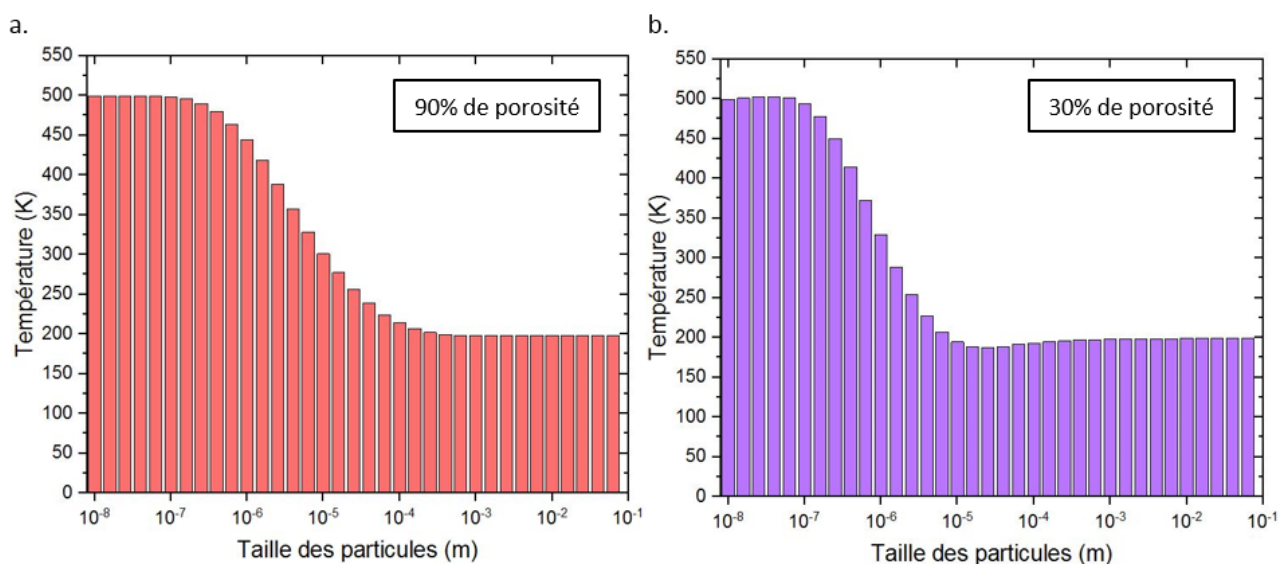


Figure 4.6 : Températures des particules de poussières dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko à une distance de 2 UA, avec 70% en volume de matière organique et a. une porosité de 90 %, b. une porosité de 30%.

Le profil de densité a aussi été calculé lorsque la porosité est égale à 30% (**Figure 4.7**). La concentration de glycine dans la glace d'eau est identique à celle qui a été fixée précédemment, soit $1,7 \cdot 10^{-5}\%$. De plus, le pourcentage de matière organique n'a pas été modifié (70% en volume). Les résultats montrent que la densité de glycine est plus élevée que le cas précédent. Ainsi, lorsque les particules sont moins poreuses, l'abondance de glycine nécessaire pour l'ajustement des observations est plus faible.

La vitesse des particules est également un paramètre qui influence la distribution de la glycine. Par exemple, lorsque toutes les vitesses sont augmentées de 20 %, il faudrait environ $2,5 \cdot 10^{-5}\%$ de glycine contenue dans la glace d'eau pour obtenir un résultat équivalent, soit près de 50% de glycine en plus que pour les vitesses initiales. Cette augmentation n'est pas négligeable, mais l'abondance de glycine requise reste toutefois comprise dans le même ordre de grandeur.

Le rapport poussière sur glace a été modifié afin d'étudier l'effet de la masse de glace d'eau sur les particules de poussières sur le profil de densité de glycine. Ce dernier n'est en effet pas encore bien contraint (Choukroun et al., 2020). La valeur d/i égale à 1 a été utilisée jusqu'à présent, mais certaines publications proposent des valeurs pouvant aller jusqu'à un d/i égale à 8 (Fulle et al., 2017).

Dans un cas comme celui-là, le pourcentage de glycine nécessaire est 2,5 fois plus élevé qu'avec un rapport poussière sur glace égale à 1, soit une valeur de $4,2 \cdot 10^{-5}\%$. Le profil est représenté sur la **Figure 4.8**.

Finalement, il est possible d'expliquer les mesures faites dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, lorsque l'on considère une source distribuée pour laquelle la glycine se trouve dans la glace d'eau sur les particules de poussières éjectées du noyau et est émise à partir de la sublimation de cette glace d'eau. Le meilleur ajustement nécessite environ 170 ppb en masse au sein de la glace d'eau.

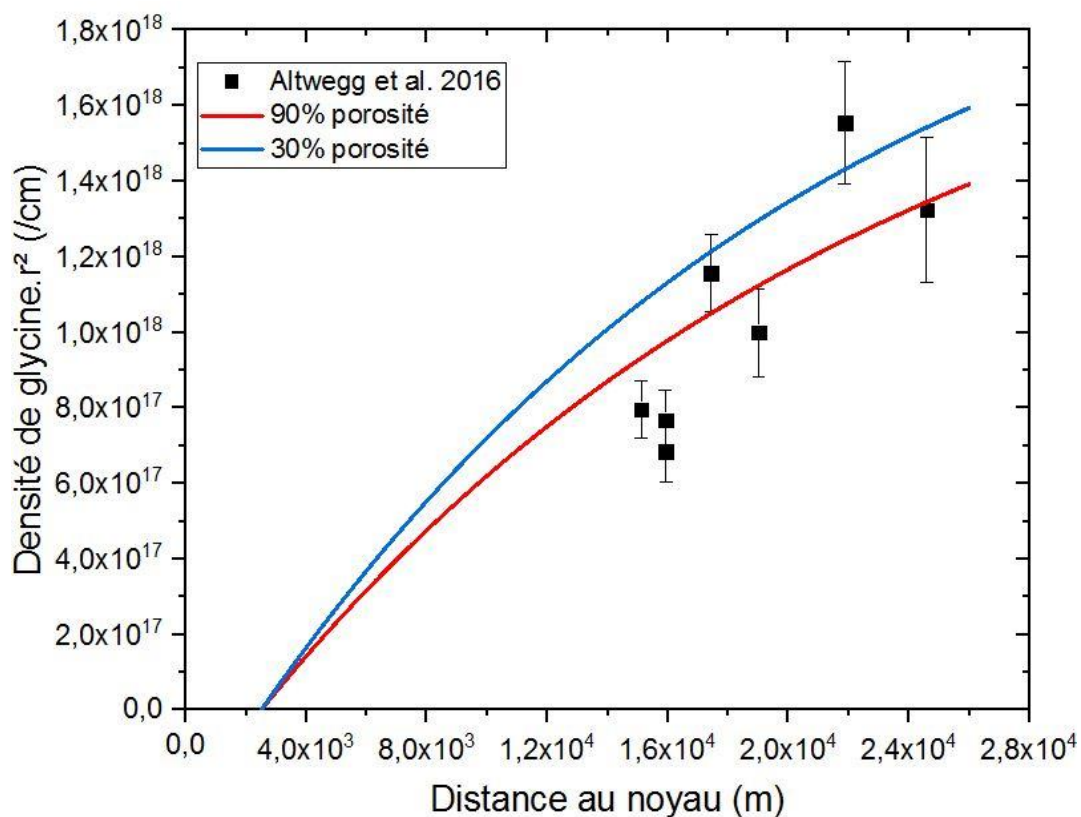


Figure 4.7 : Profil de densité de la glycine en fonction de la distance du noyau de 67P/Churyumov-Gerasimenko lorsque la glycine présente une source distribuée pour laquelle la glycine est piégée dans de la glace d'eau sur les particules éjectées du noyau avec $1,7 \cdot 10^{-5}\%$ de glycine en masse, et $1,7 \cdot 10^{-5}\%$ de glycine parent. Le profil bleu correspond au cas dont les particules présentent une porosité de 30%, et la ligne rouge une porosité de 90%.

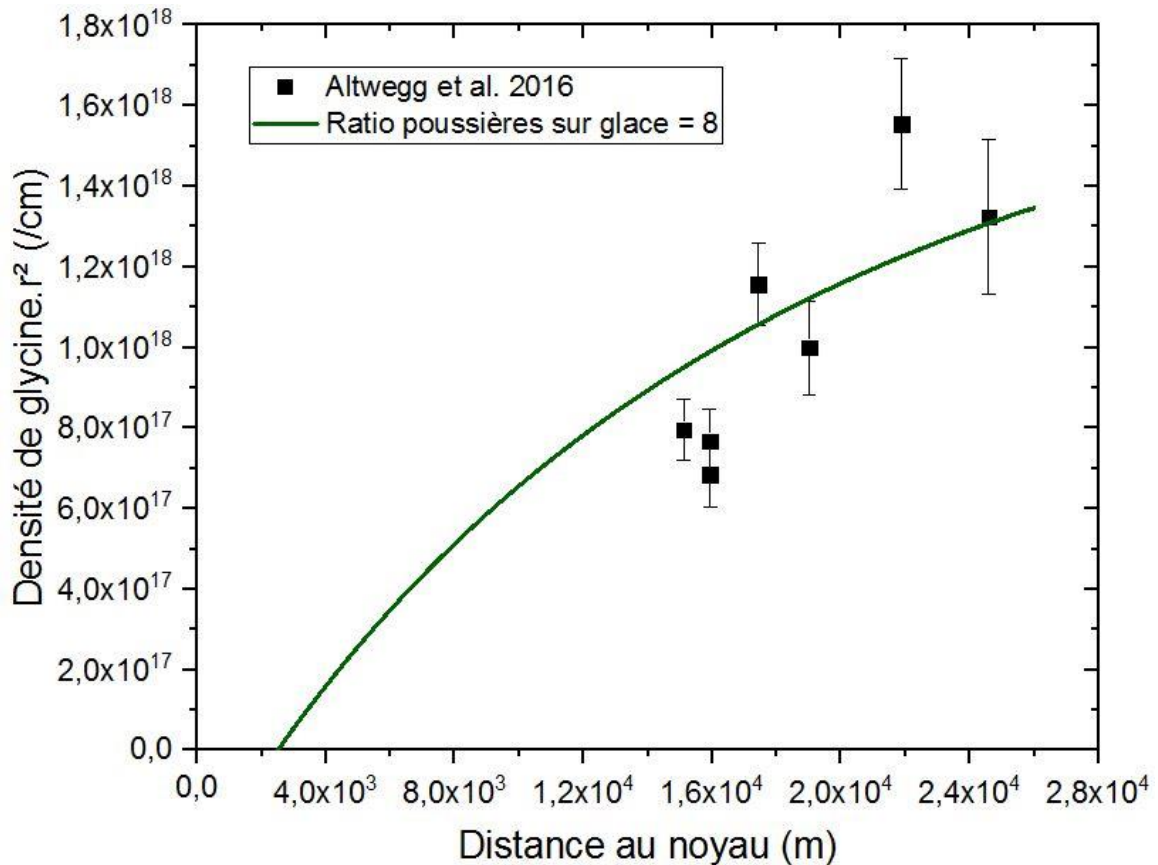


Figure 4.8 : Profil de densité de la glycine en fonction de la distance du noyau de 67P/Churyumov-Gerasimenko lorsque la glycine présente une source distribuée pour laquelle la glycine est piégée dans de la glace d'eau sur les particules éjectées du noyau lorsque le rapport poussières sur glace vaut 8. L'abondance de la glycine dans la glace d'eau s'élève à $4,2 \cdot 10^{-5}\%$ de glycine en masse

3. Discussion

La température est un paramètre important dans le calcul des profils de densité de glycine. En effet, les modélisations sont effectuées pour des températures à l'équilibre qui ne sont pas atteintes de manière immédiate lors de l'éjection des particules du noyau. Le temps pour atteindre l'équilibre thermique peut être estimé à partir de la diffusion de la chaleur à l'intérieur des particules de poussières (Huebner et al., 2006), et peut être calculé grâce à la relation suivante :

$$\tau = \frac{R^2 \rho c}{\pi^2 K}$$

R étant le rayon des particules de poussière, ρ leur densité, c la chaleur spécifique, et K la conductivité thermique. Différentes valeurs, mesurées à la surface de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko par l'atterrisseur Philae, ont été publiées par Spohn et al. (2015) : $\rho = 5 \cdot 10^{-2} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $300 \text{ J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1} < c < 600 \text{ J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$, et $0,02 \text{ W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1} < K < 0,06 \text{ W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$.

Par exemple, si on considère une particule de poussières avec un rayon de 1 cm, nous obtenons un temps τ compris entre 25 et 152 secondes pour atteindre l'équilibre. Les particules de poussières avec une taille autour du millimètre, atteignent leur température d'équilibre en environ 6 secondes.

Enfin, pour les plus petites particules, il faut quelques fractions de secondes. Or, les particules de poussières présentent des vitesses comprises entre 326 m/s pour les plus petites particules (10^{-8} m), et 1 m/s pour les plus grosses ($>10^{-2}$ m). Ainsi, pour atteindre 14 km (soit le premier point de mesure), le temps de transport des particules de poussières varie entre 42 secondes, pour les plus petites qui atteignent l'équilibre en quelque fraction de secondes, et 3 heures pour les plus grandes qui atteignent l'équilibre en quelques minutes. Les valeurs calculées pour atteindre l'équilibre sont inférieures au temps de transport entre la surface de la comète et le premier point de mesure de ROSINA. Par conséquent, le fait de considérer des températures d'équilibres pour les particules de poussières lors de nos modélisations est une approximation valable. Cependant, le fait que la sublimation est un processus endothermique, qui refroidirait les particules, au fur et à mesure qu'il se produit, n'est pas pris en compte. En réalité, les particules de poussières seraient donc plus froides. Comme il a été démontré dans la section 2.3 de ce chapitre, le fait que les températures soient refroidies plus rapidement n'influence pas de manière significative la quantité de la glycine nécessaire pour ajuster les mesures.

4. Conclusion

Sources	Concordance avec les mesures	Paramètres	Abondance de glycine
Source parent		Non	
Source distribuée – Cinétique de la glycine			
Source distribuée – Cinétique de l'eau	Oui	Paramètres initiaux	170 ppb
		30% de porosité	< 170 ppb
		Vitesses + 20%	250 ppb
		$d/i = 8$	420 ppb

Tableau 1 : Tableau récapitulatif des modélisations.

Trois cas ont été modélisés afin d'interpréter les mesures de glycine de l'instrument ROSINA dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Dans un premier temps, nous avons considéré le cas simple d'une source parent pour laquelle la glycine serait émise directement à partir de la sublimation des glaces du noyau. Dans un second temps, nous avons testé deux cas de source distribuée, d'une part lorsque la glycine est émise à partir de la sublimation de glycine solide sur les particules et d'autre part lorsque la glycine est piégée dans de la glace d'eau et est émise en même temps que celle-ci sublime. Le résumé est présenté sur la **Tableau 1**. Seul le deuxième cas de source distribuée est représentatif des mesures, avec une abondance de glycine par rapport à l'eau d'environ 170 ppb.

Type de chondrite	Nom	Quantité de glycine (ppb)
Altération aqueuse		
CM2	Murchison	2919 ± 433
	Murray	2110 ± 144
	ALH 83100	300 ± 75
CV3	Allende	457 ± 121
CR1	GRO 95577	136 ± 14
Métamorphisme thermique		
CK3	NWA 5956	207 ± 61
CK4	ALH 85002	9,8 ± 0,4
	LAR 04318	5,3 ± 0,8
CK5	EET 92002	6,1 ± 1,5
CK6	LEW 87009	3,8 ± 1,2

Tableau 2 : Tableau résumant quelques mesures de quantité de glycine dans différentes chondrites carbonées. Les valeurs concernant les chondrites ayant subi une altération aqueuse sont extraites de Martins and Sephton (2009), et celles des chondrites ayant subi un métamorphisme thermiques sont extraites de Burton et al. (2015).

Comme il a été mentionné au début de ce chapitre, la glycine a déjà pu être détectée dans les chondrites carbonées (Martins and Sephton, 2009). Sa concentration varie de quelques centaines à quelques milliers de ppb dans les chondrites qui ont présenté une altération aqueuse (Martins and Sephton, 2009). Les chondrites ayant subi un métamorphisme thermique présentent des concentrations de glycine entre quelques dizaines à quelques centaines de ppb (Burton et al., 2015). Quelques mesures de glycine sont présentées dans le **Tableau 2**. Notre meilleur ajustement tend vers une abondance de glycine d'environ 170 ppb dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Cette valeur correspond à la plus petite plage de mesure détectée dans les chondrites carbonées aqueuses et la plus grande mesurée dans les chondrites présentant un métamorphisme thermique. Bardyn et al. (2017) ont montré que les matériaux au sein de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko n'ont pas subi d'altération aqueuse. De plus, il a été démontré que les quantités d'acides aminés sont très différentes pour les résidus de fraction hydrolysée et non hydrolysée d'analogues de glaces cométaires photolysés, la concentration est plus élevée dans la fraction hydrolysée (Nuevo et al., 2008). Ainsi, la concentration dérivée de notre modélisation concorde avec des matériaux qui n'ont pas subi d'altération de manière significative que ce soit par la chaleur ou par l'eau liquide.

Le deuxième cas de source distribuée de glycine considère que la glycine est libérée en même temps que la glace d'eau se sublime. Par conséquent, il serait logique d'observer une source distribuée d'eau et d'autres molécules piégées dans la glace d'eau dans le même jeu de données. Cependant, cela n'a pas été signalé à ce jour. Une source distribuée de HCl et de HF à partir de la sublimation de glace d'eau sur les particules de poussières dans l'atmosphère de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko ont également été mentionnées par (De Keyser et al., 2017), mais aucune source distribuée d'eau n'a été détectée dans leurs données. Les auteurs concluent que la contribution de la sublimation de l'eau à partir des particules de poussières est probablement négligeable par rapport

au bilan total de production d'eau dans la coma de la comète. Cette hypothèse s'applique également pour les données obtenues par ROSINA le 28 Mars 2015. De plus, lorsque la glycine a été détectée, la sonde spatiale était soit proche du noyau soit il y avait beaucoup de poussière à proximité de Rosetta après des épisodes intenses d'émissions de particules à partir du noyau (Altwegg et al. 2016). La glycine semble donc associée à des jets de particules de poussière. Gicquel et al. (2016), en se basant sur les profils de luminosité des jets de poussières, ont suggéré que des particules contenant de la glace peuvent être éjectées et se sublimer dans la coma de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko avec une échelle de longueur de quelques dizaines de kilomètres. Ceci est cohérent avec les mesures de glycine et nos modélisations. Aucun autre événement de source distribuée de glycine n'a été rapporté à ce jour.

Le travail de cette thèse vise à proposer une interprétation plausible au comportement de la glycine lors des observations faites dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Le mécanisme et l'abondance de la glycine proposés semblent être réalistes. Cependant, il n'est pas exclu que d'autres mécanismes, encore à déterminer, puissent également expliquer ces observations. Par exemple, en suivant une approche similaire au premier cas de source distribuée, il est possible d'imaginer que la glycine serait produite à partir de la dégradation d'un matériau organique macromoléculaire complexe. Cependant, à ce jour, il n'existe pas de preuve d'un tel composé organique macromoléculaire qui serait en mesure de libérer de la glycine par dégradation thermique. Il est également peu probable que des polymères d'acides aminés puissent être une alternative réaliste à la présence de glycine dans l'atmosphère cométaire. Si de tels composés se trouvaient dans les particules de poussières, ils résulteraient de la condensation de la glycine sur elle-même, cela implique qu'ils seraient certainement présents avec une abondance moindre que leur précurseur (la glycine). Un tel cas nécessite plus de données pour une modélisation correcte, notamment en ce qui concerne la sublimation des peptides qui dépend de leur taille (dimères, trimères, et polymères), mais aussi en ce qui concerne leur cinétique de dégradation. Le spectromètre de masse, COSIMA, qui analyse la phase solide des particules de poussières n'a pas détecté de molécules telles que la glycine et d'autres composés à faible volatilité, comme des acides carboxyliques, des composés aliphatiques et aromatiques, des amines, ou encore des cétones. La matière organique mesurée dans les particules de poussière est plutôt similaire à de la matière organique insoluble (IOM) déjà observée dans les chondrites carbonées en grande quantité (Bardyn et al., 2017; Fray et al., 2016). Finalement, l'hypothèse selon laquelle la glycine est synthétisée dans de la glace d'eau, puis libérée lorsque la glace d'eau sublime, est cohérente avec la détection faite par ROSINA en phase gazeuse, et non en phase solide par COSIMA.

L'ensemble des travaux décrits dans ce chapitre ont fait l'objet d'une publication (Hadraoui et al., 2019) joint en annexe 2 de ce manuscrit.

Conclusions générales et perspectives

Au cours de ce travail de thèse, j'ai contribué à l'étude des sources distribuées de formaldéhyde dans les comètes, mais également à celle de la glycine récemment observée dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Pour cela, j'ai élaboré un modèle, propre à chaque molécule étudiée dans cette thèse, pour calculer la densité volumique en fonction de la distance au noyau, afin d'interpréter les observations faites dans les comètes en prenant en compte différents modes de production des molécules considérées. J'ai pu recenser et traiter des jeux de données de formaldéhyde existants pour différentes comètes. Ainsi, six comètes ont été traitées dans le cas de la source distribuée de formaldéhyde : C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/1996 B2 (Hyakutake), C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon)

Afin de comparer mon modèle aux observations, un premier travail a été de collecter puis de traiter les mesures de formaldéhyde afin de convertir les données disponibles en profils de densité en fonction de la distance au noyau. Ces données sont principalement obtenues à partir d'observations depuis le sol et les mesures correspondent à des cartes d'intensités de raies. Il a donc été nécessaire de les convertir d'une part en taux de production de formaldéhyde et d'autre part en profils de densité colonne. Enfin, mon modèle calculant des densités volumiques, une autre étape a été de convertir les profils de densités volumiques obtenus en profils de densité colonnes afin de pouvoir les comparer aux observations.

Au cours de cette thèse, j'ai cherché à déterminer si l'existence d'une source distribuée de formaldéhyde permet d'expliquer les observations dans les comètes C/2001 Q4 (NEAT), C/2004 Q2 (Machholz), 8P/Tuttle, C/1996 B2 (Hyakutake), C/2012 S1 (ISON) et C/2012 F6 (Lemmon). J'ai considéré deux cas pour chaque comète. Le premier cas correspond à la production de formaldéhyde à partir de la sublimation directe des glaces du noyau (source parente), et le second à la production de formaldéhyde à partir de la dégradation photochimique et thermique du polyoxyméthylène présent sur des particules de poussières éjectées du noyau. Ce dernier cas s'apparente à une source distribuée. Pour cela, j'ai fixé des paramètres d'entrée propres à chaque comète, et les plus réalistes possibles. Le but de mon travail a été de montrer s'il existe ou non un mécanisme tel qu'une source distribuée dans ces comètes, et dans quelle mesure cela peut s'avérer être plausible. Dans un premier temps, j'ai montré que le premier cas d'une source parente n'explique aucune des observations faites dans les comètes étudiées. Cependant, lorsque j'ai considéré le cas d'une source distribuée, il est possible de s'en approcher en considérant certaines conditions en ce qui concerne les vitesses de particules, l'abondance de gaz total, ou encore le rapport poussières sur gaz. J'ai également quantifié la quantité de polyoxyméthylène en masse sur les particules de poussières pour chaque comète. Ces valeurs varient entre 0,25 et 2,7 % en masse dans les particules, soit entre $4 \cdot 10^4$ et $6 \cdot 10^5 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1}$. Les différents résultats concernant les quantités de polyoxyméthylène et de formaldéhyde sont résumés sur le **Tableau 5.1** pour chaque comète. Finalement, si du formaldéhyde a pu être délivré sur Terre sous une

forme concentrée telle que son polymère, cela aurait pu jouer un rôle essentiel dans la synthèse des sucres.

Comète	Q_{H_2O} (s ⁻¹)	% H ₂ CO	% POM	m_{POM} (g.s ⁻¹)
C/2001 Q4 (NEAT)	$2,4 \cdot 10^{29}$	$0,09 \pm 0,05$ %	$1,44 \pm 0,2$ %	$4,1 \cdot 10^4$
8P/Tuttle	$2,0 \cdot 10^{28}$	$0,17 \pm 0,09$ %	$1,7 \pm 0,5$ %	$1,0 \cdot 10^4$
C/2004 Q2 (Machholz) – J1	$2,6 \cdot 10^{29}$	$0,05 \pm 0,01$ %	$2,4 \pm 0,3$ %	$5,6 \cdot 10^5$
C/2004 Q2 (Machholz) – J2		$0,11 \pm 0,04$ %	$1,7 \pm 0,3$ %	$4,0 \cdot 10^5$
C/1996 B2 (Hyakutake) – J1	$3,0 \cdot 10^{29}$	0 %	$2,2 \pm 0,25$ %	$2,0 \cdot 10^5$
C/1996 B2 (Hyakutake) – J2		$0,04 \pm 0,01$ %	$0,8 \pm 0,15$ %	$7,2 \cdot 10^4$
C/2012 S1 (ISON)	$3,6 \cdot 10^{29}$	$0,3 \pm 0,05$ %	$0,5 \pm 0,1$ %	$5,4 \cdot 10^4$
C/2012 F6 (Lemmon)	$9,0 \cdot 10^{29}$	$0,01 \pm 0,001$ %	$2,1 \pm 0,5$ %	$5,6 \cdot 10^5$

Tableau 5.1 : Tableau résumant la quantité de gaz total mesurée dans les différentes comètes, les différentes quantités de formaldéhyde et de polyoxyméthylène dérivées du modèle pour les meilleurs ajustements, et la masse totale de polyoxyméthylène produite par seconde à partir du noyau. Les pourcentages de formaldéhyde sont donnés par rapport à la production de gaz total, et les pourcentages de polyoxyméthylène sont définis en masse dans les particules. Concernant la comète C/2012 F6 (Lemmon), l'abondance de gaz total était en réalité 4 fois plus faible, les abondances de POM et de H₂CO sont donc sous estimées.

Concernant le profil de glycine mesuré dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, j'ai considéré trois cas : a. la glycine est émise à partir de la sublimation des glaces du noyau (source parente), b. la glycine est produite à partir de la sublimation de glycine solide présent sur les particules éjectées du noyau, et suit sa propre cinétique de sublimation (source distribuée), c. la glycine est incluse dans la matrice de glace d'eau présente sur les particules de poussière éjectées du noyau et est émise en phase gazeuse en même temps que la glace d'eau sublime (source distribuée). Les paramètres de modélisation sont plutôt bien contraints grâce aux mesures effectuées lors de la mission Rosetta. Les profils calculés pour les deux premiers cas n'expliquent pas les observations faites dans la comète. En revanche, le profil calculé lorsque je considère le dernier cas de source distribuée semble bien correspondre aux observations faites dans la comète. J'ai obtenu le meilleur ajustement pour une quantité de glycine en masse par rapport à l'eau de 170 ppb. Cet ajustement correspond à une abondance de glycine similaire à la plus petite gamme d'abondance mesurée dans les chondrites carbonées montrant une altération aqueuse, et la plus grande mesurée dans les chondrites ayant subi un métamorphisme thermique. Des études antérieures ont montré qu'il n'y pas eu d'altération aqueuse des matériaux au sein de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko, et que la quantité d'acides aminés dans des analogues de glaces cométaires diffèrent d'une fraction hydrolysée à une fraction non hydrolysée. En effet, la concentration est plus élevée dans la fraction hydrolysée. Ainsi, notre résultat concorde avec des matériaux n'ayant pas subi d'altération aqueuse ou thermique de manière significative. Enfin, la glycine n'a été détectée que de façon épisodique au cours de la mission, cela

suppose que la composition des particules émises du noyau est plutôt hétérogène vis-à-vis de ce composé.

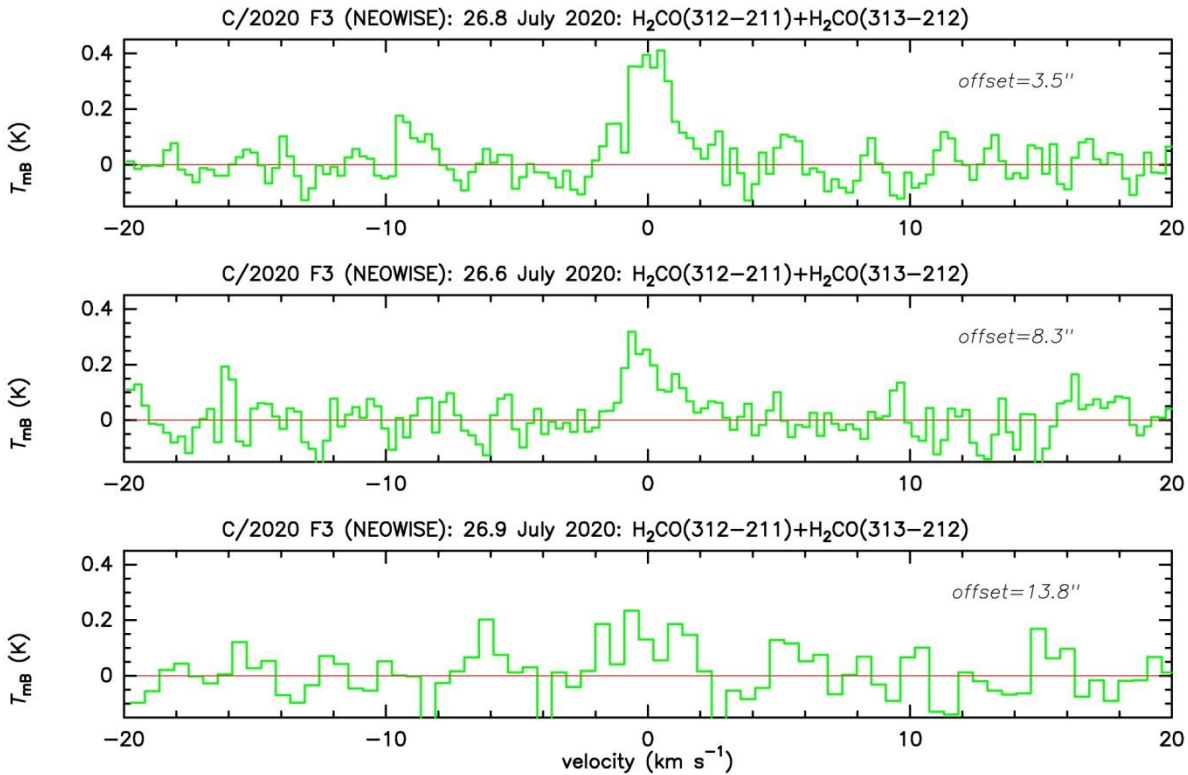


Figure 5.1 : Détection du formaldéhyde à 3 positions (offset) différentes dans la coma de la comète Neowise en Juillet 2020. Ces données ont été obtenues dans le cadre du programme D01-20 pour lequel j'étais co-investigatrice.

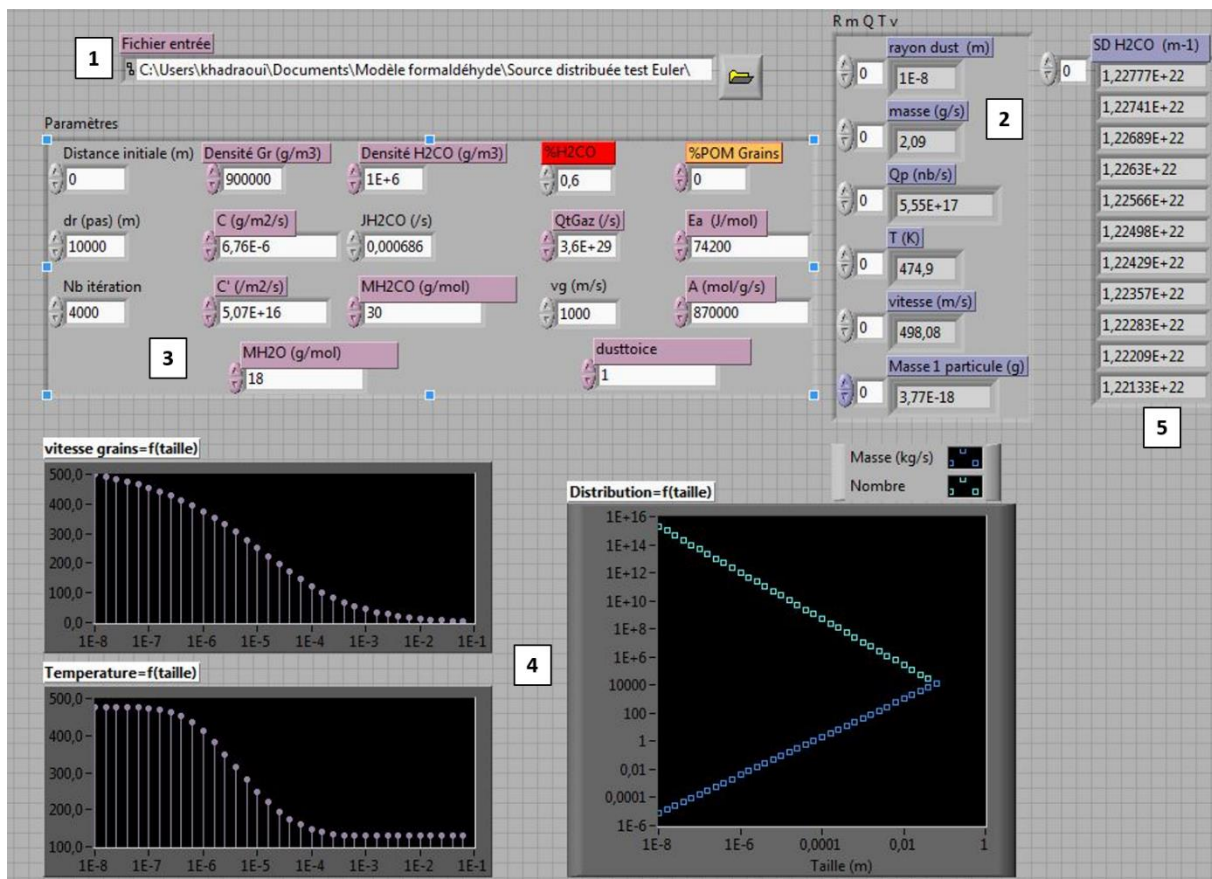
Jusqu'à aujourd'hui, le mécanisme de source distribuée de formaldéhyde dans les comètes avait été étudié uniquement au sein des comètes 1P/Halley, et C/1995 O1 (Hale-Bopp). Il s'agissait de mesures in-situ par spectrométrie de masse dans l'atmosphère de la comète 1P/Halley et du profil de taux de production de H_2CO en fonction de la distance héliocentrique pour la comète C/1995 O1. Dans les deux cas, quelques pourcents de POM, en masse, dans les particules de poussière, suffisaient à ajuster les modélisations aux observations. Ce travail de thèse a permis d'élargir le champ d'étude des sources distribuées de formaldéhyde, à partir d'autres types de mesures. Il est intéressant de noter, que même s'il existe dans chaque cas étudié un certain nombre de paramètres peu contraints, malgré les différents types d'observations (in situ, évolution héliocentrique, cartes d'intensité de raies), la présence de quelques pourcents de polyoxyméthylène dans les particules conduit à un bon ajustement du modèle aux observations. Des perspectives sont envisageables dans le cas des sources distribuées du formaldéhyde. D'une part, il est possible d'exploiter des jeux de données récents, tels que pour les comètes 46P/Wirtanen, C/2017 T2 (PanSTARRS) ou C/2020 F3 (Neowise) dans lesquelles le formaldéhyde a été détecté (**Figure 5.1**). De plus, du formaldéhyde a été détecté en radio dans plus de 30 comètes (Biver et al., 2019). De ce fait, on peut se poser la question

de l'existence d'une source distribuée dans chacune d'entre elles. Il serait intéressant de pouvoir leur appliquer le modèle de source distribuée de formaldéhyde développé au cours de cette thèse. Des mesures de formaldéhyde ont également été faites dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko et sont disponibles. Je n'ai pas pu les exploiter faute de temps au cours de ma thèse, mais il serait intéressant de traiter les données afin d'évaluer s'il existe ou non une source distribuée de formaldéhyde dans cette comète. Un autre travail serait d'améliorer le modèle afin d'élargir le champ de variation des paramètres tels que la distribution en taille et en masse qui jusqu'ici est contrainte par les distributions mesurées dans les comètes 67P/Churyumov-Gerasimenko et 1P/Halley. Il serait par exemple intéressant de pouvoir modifier, directement sur le modèle, une loi en puissance régissant la distribution des particules.

En résumé, les travaux présentés sur cette thèse ont élargi le champ d'étude des sources distribuées de formaldéhyde. Ces travaux ont permis l'interprétation des mesures de formaldéhyde dans différentes comètes, mais également l'interprétation du profil de glycine mesurée dans la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Ces études ont contribué à identifier la présence de sources distribuées dans ces différentes comètes. La quantité de polyoxyméthylène et de formaldéhyde ainsi que la quantité de glycine ont été calculées à partir de mes modèles. Ceux-ci pourront encore être améliorés afin de mieux contraindre certains paramètres tels que la distribution en taille et en masse des particules de poussières. Il sera intéressant par la suite de compléter ces travaux en appliquant ces modèles à de nouvelles comètes pour lesquelles il existe des données de formaldéhyde.

Annexe 1 – Programme de sources distribuées de formaldéhyde et de glycine

Face avant du programme de source distribuée de formaldéhyde



[1] Entrée du fichier des différents paramètres des particules : rayon, masse totale, nombre, température, vitesse, masse d'une particule.

[2] Visualisation des différents paramètres d'entrée précédents.

[3] Paramètres d'entrées, appelées commandes, utilisés dans les équations différentielles. Ces paramètres peuvent être changés en tout temps. Le pourcentage de formaldéhyde est affiché en rouge, et celui du polyoxyméthylène en jaune.

[4] Visualisation des différents paramètres d'entrées [1] présentés sous forme d'indicateur graphique.

[5] Résultats des densités volumiques de formaldéhyde calculées pour les différents paramètres fixés présentés sous forme d'indicateur numérique.

Vue d'ensemble du diagramme de source distribuée de formaldéhyde

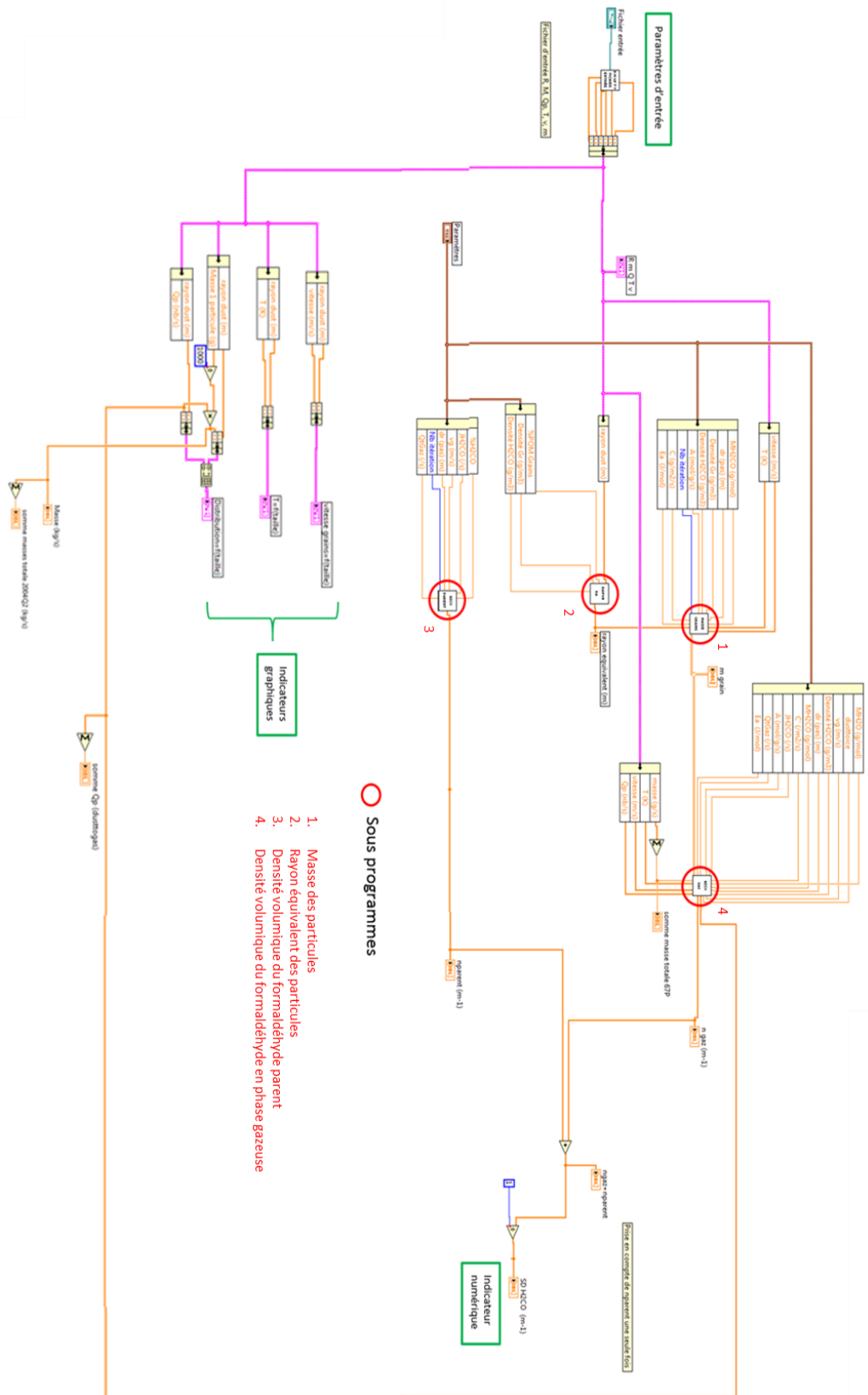


Diagramme du calcul du rayon équivalent

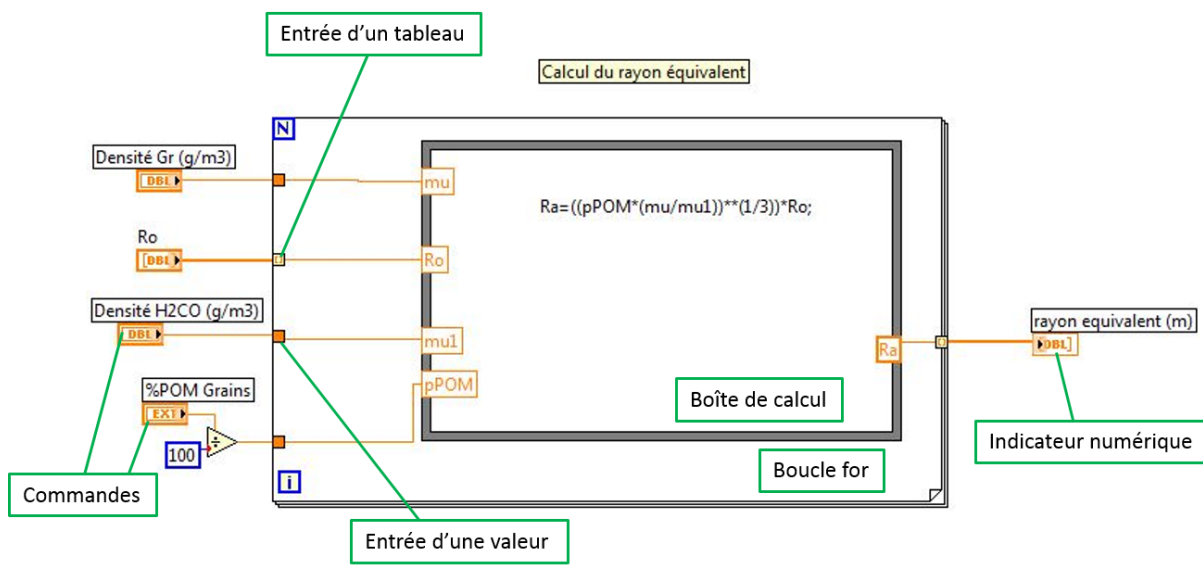


Diagramme du calcul de la densité volumique du formaldéhyde parent

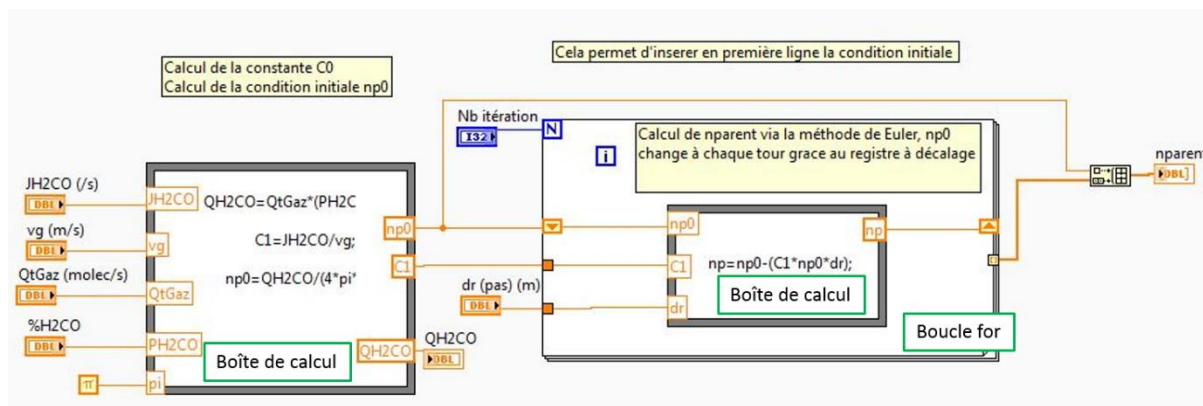


Diagramme du calcul de la masse des particules

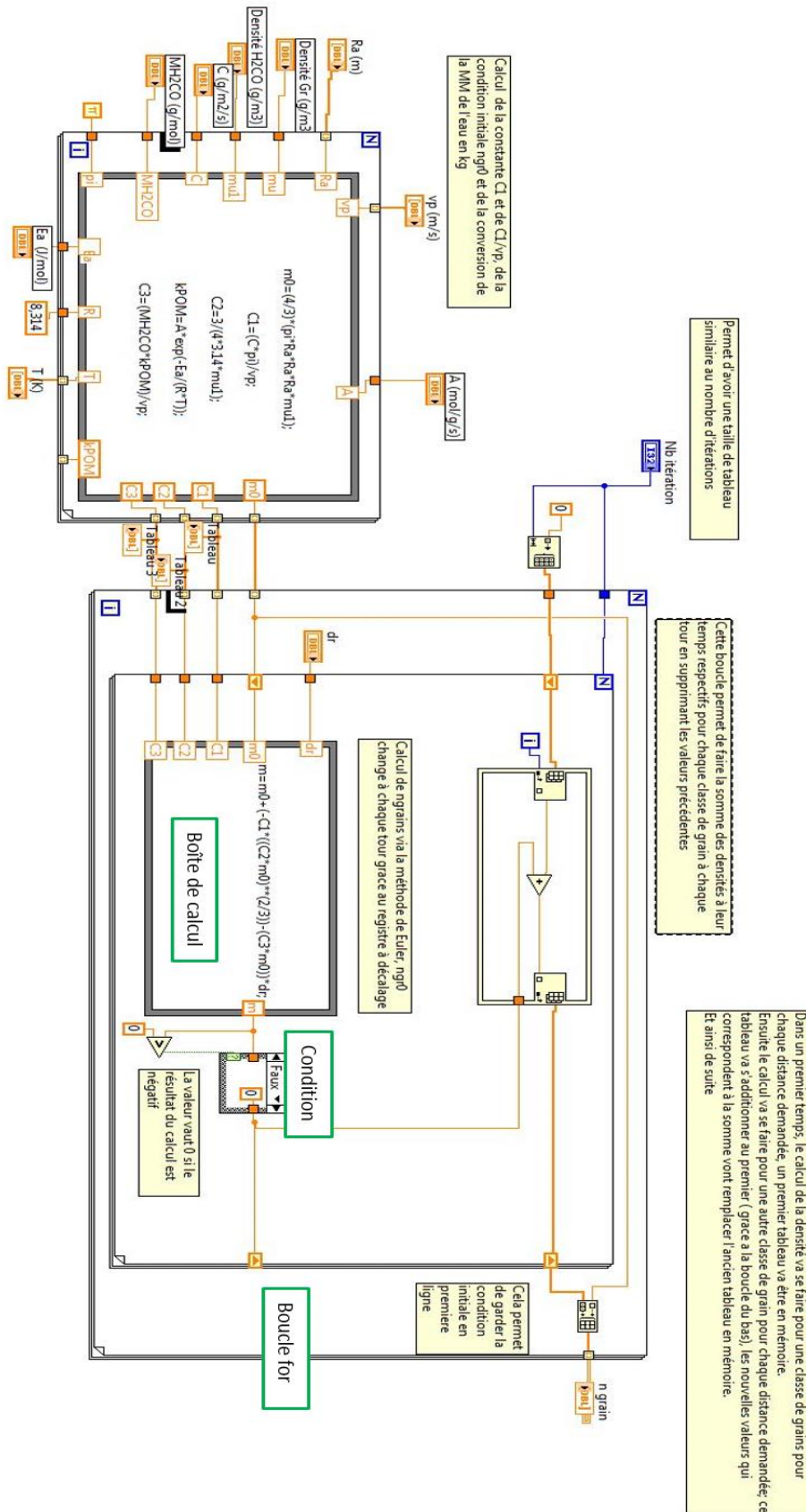
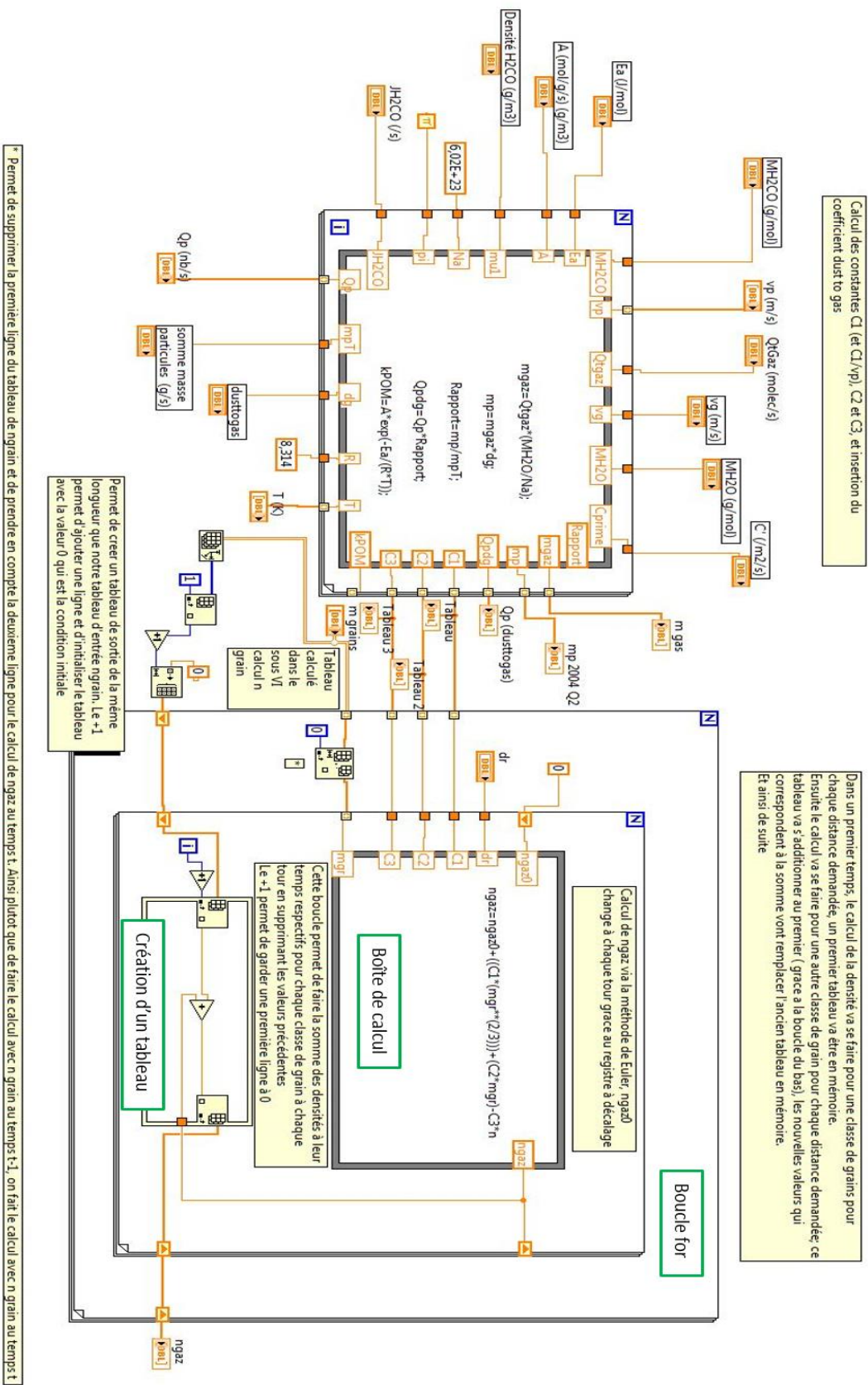
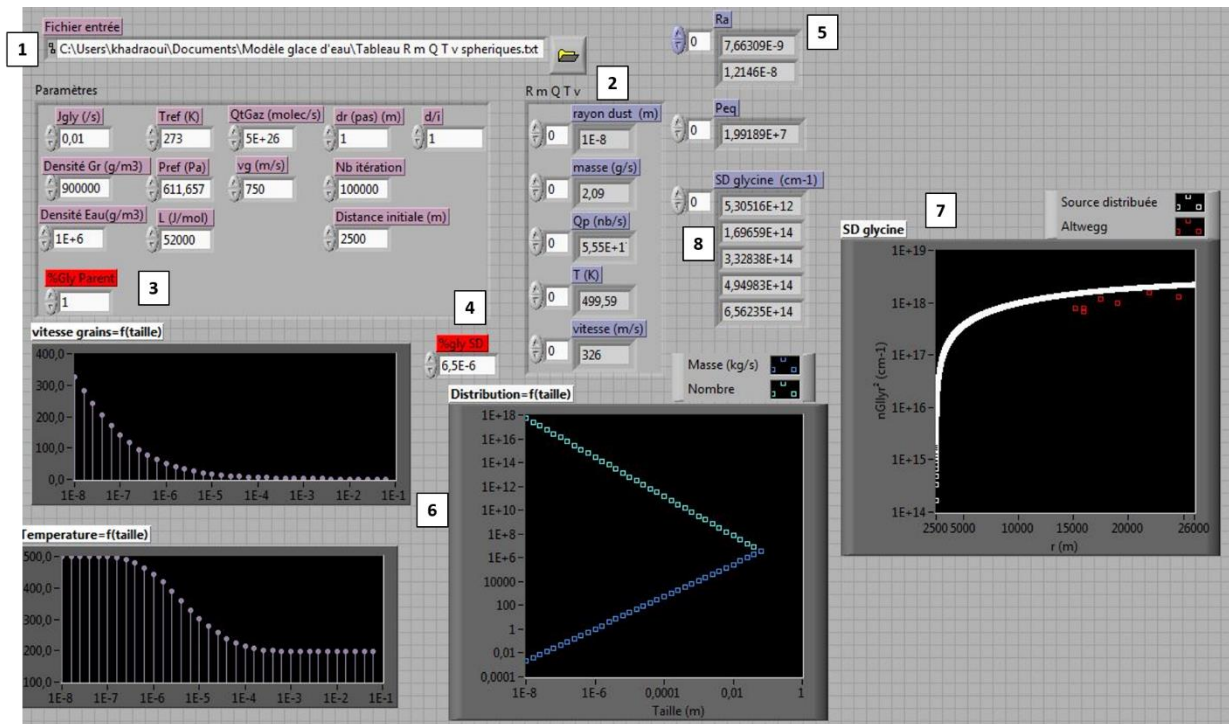


Diagramme du calcul de la densité volumique de formaldéhyde en phase gazeuse



Face avant du programme de source distribuée de glycine



[1] Entrée du fichier des différents paramètres des particules : rayon, masse totale, nombre, température, vitesse, masse d'une particule.

[2] Visualisation des différents paramètres d'entrée précédents.

[3] Paramètres d'entrées, appelées commandes, utilisés dans les équations différentielles. Ces paramètres peuvent être changés en tout temps. Le pourcentage de glycine parent est affiché en rouge.

[4] Commande de pourcentage de glycine solide sur les particules.

[5] Résultats des rayons et pressions équivalents sous forme d'indicateurs numériques.

[6] Visualisation des différents paramètres d'entrées [1] présentés sous forme d'indicateur graphique.

[7] Résultats des densités volumiques de formaldéhyde en fonction de la distance au noyau calculés pour les différents paramètres fixés présentés sous forme d'indicateur graphique.

[8] Résultats des densités volumiques de glycine calculées pour les différents paramètres fixés présentés sous forme d'indicateur numérique.

Vue d'ensemble du diagramme de source distribuée de glycine

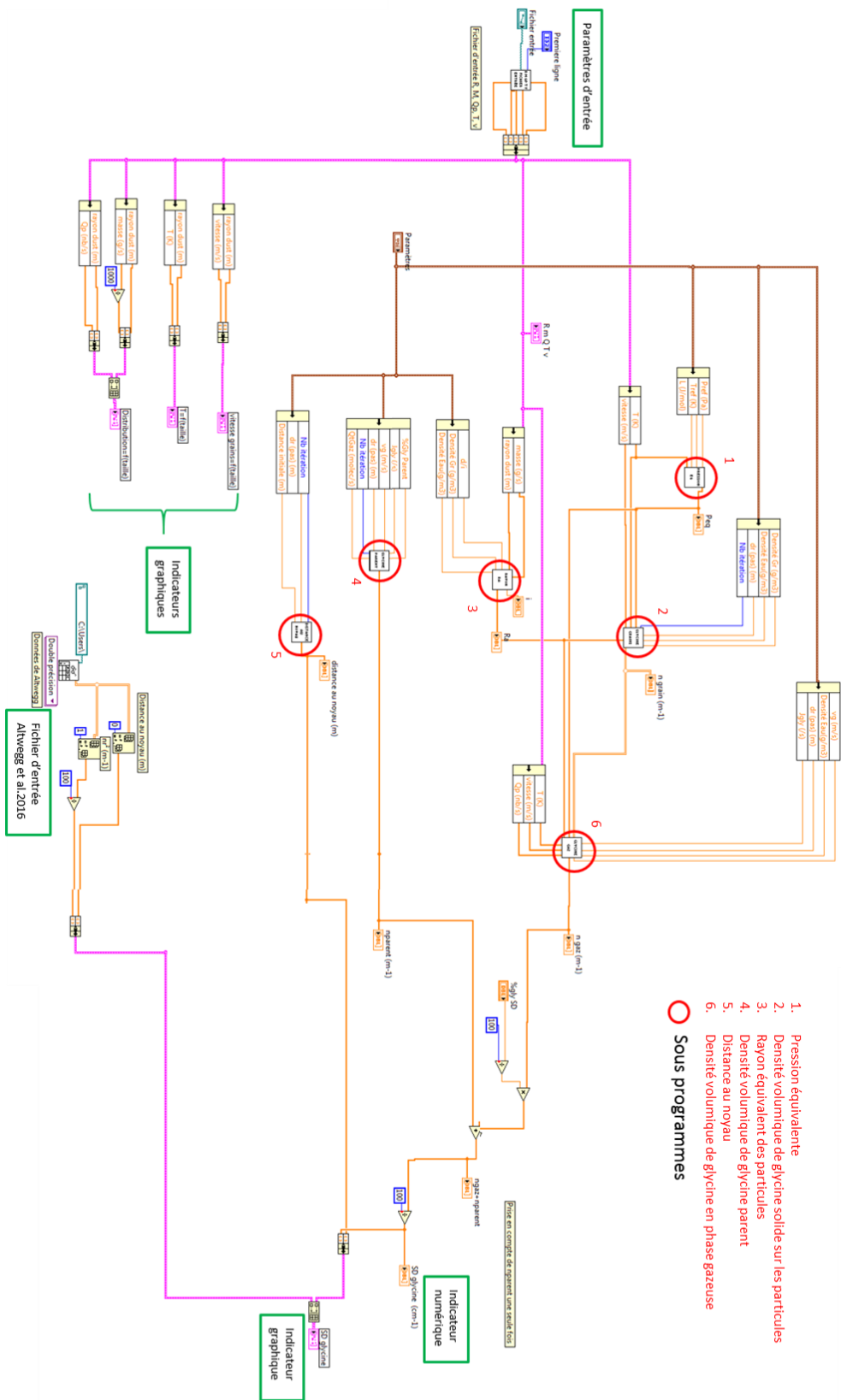


Diagramme du calcul de la distance au noyau

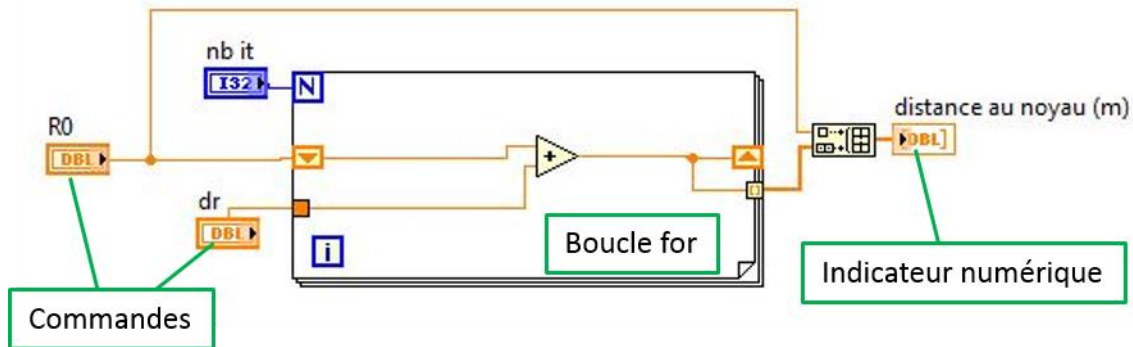


Diagramme du calcul du rayon équivalent

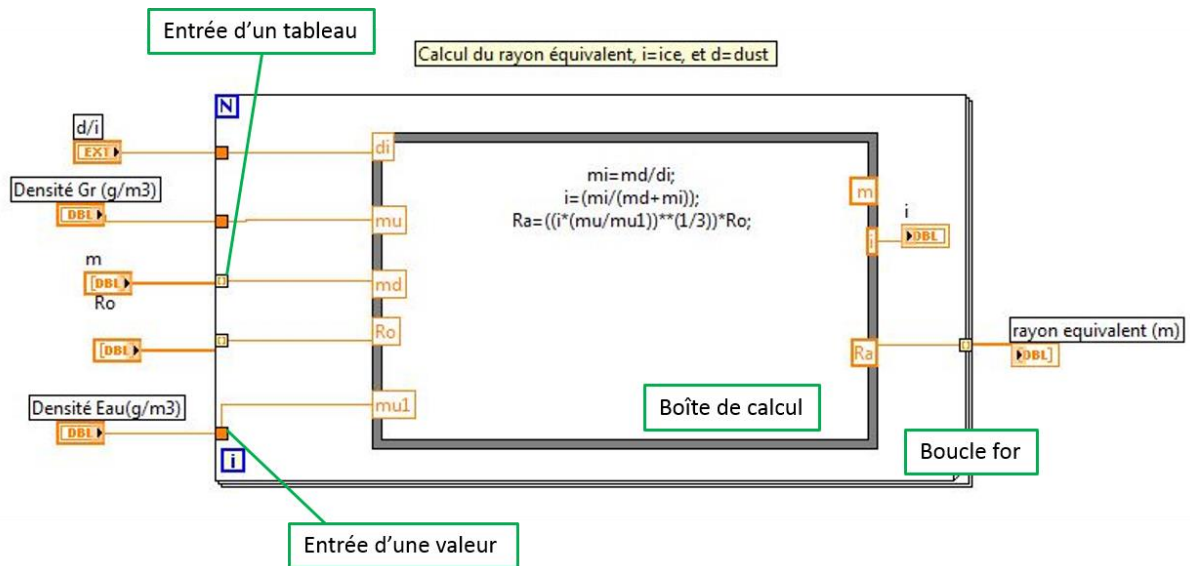


Diagramme du calcul de la pression équivalente

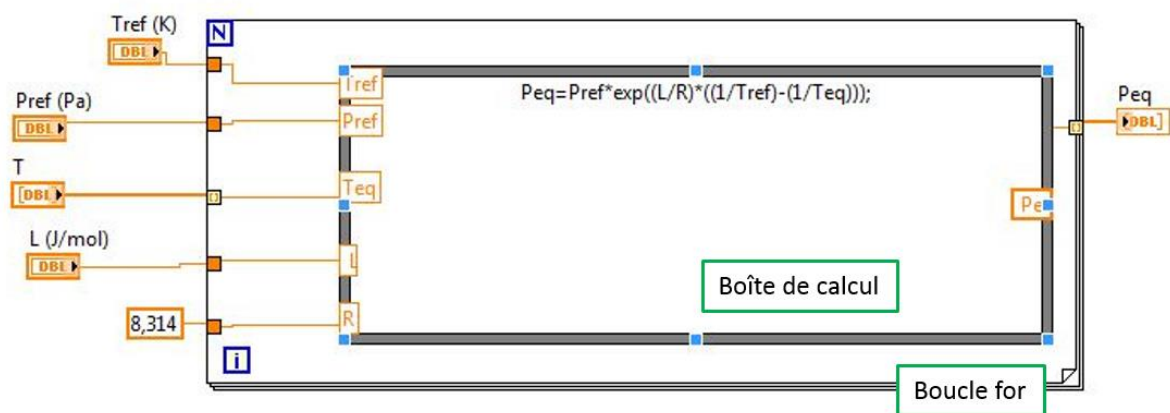


Diagramme de la densité volumique de glycine parent

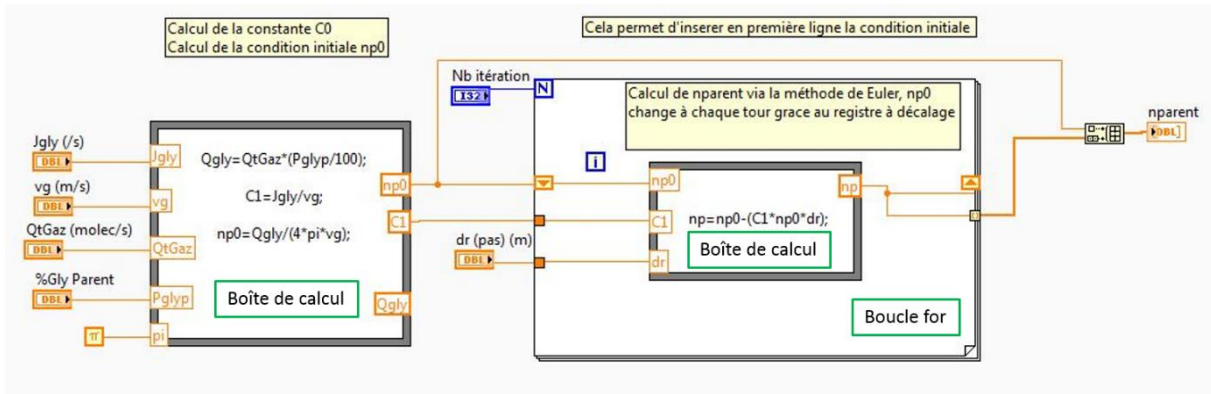


Diagramme du calcul la densité volumique de glycine solide sur les particules

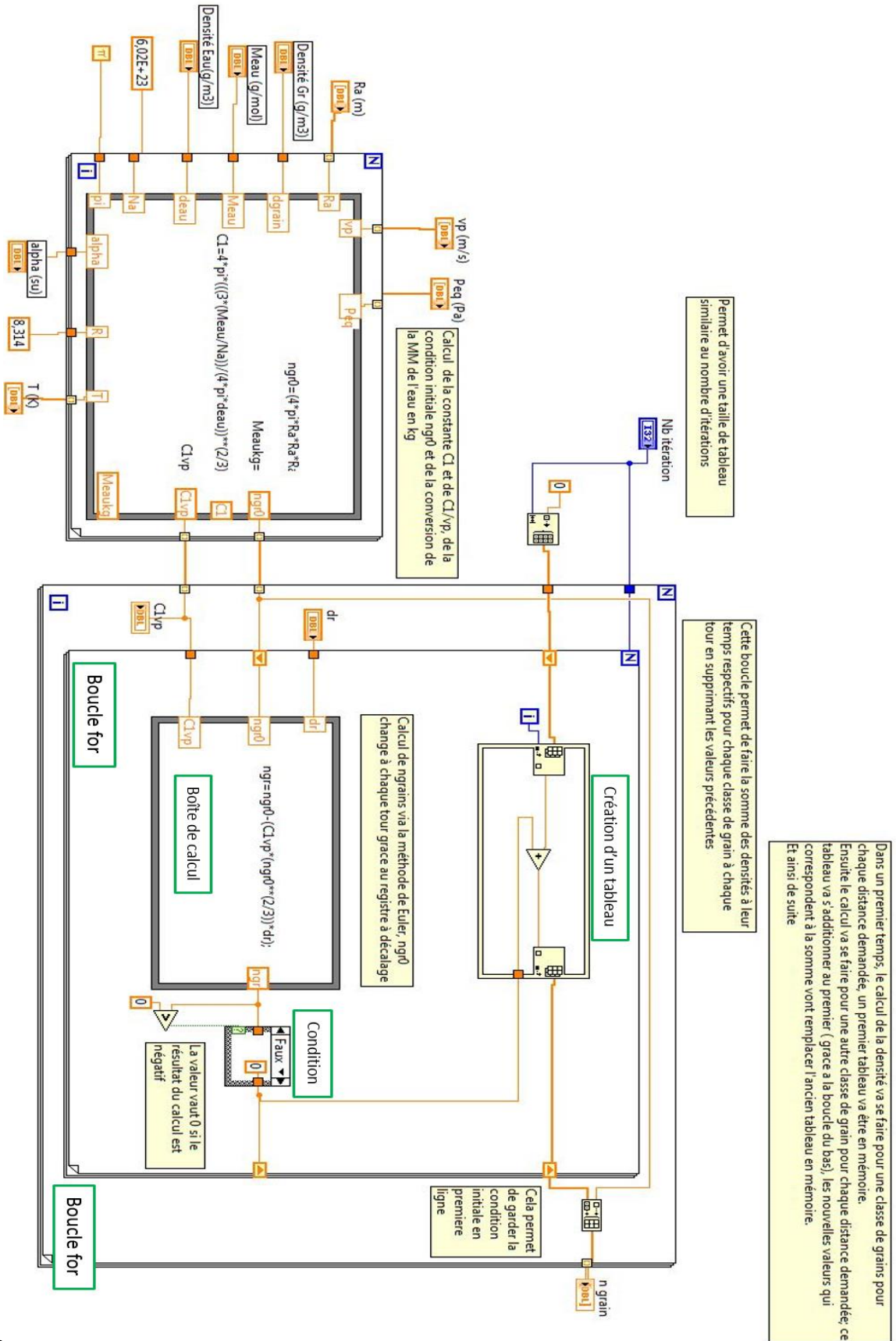
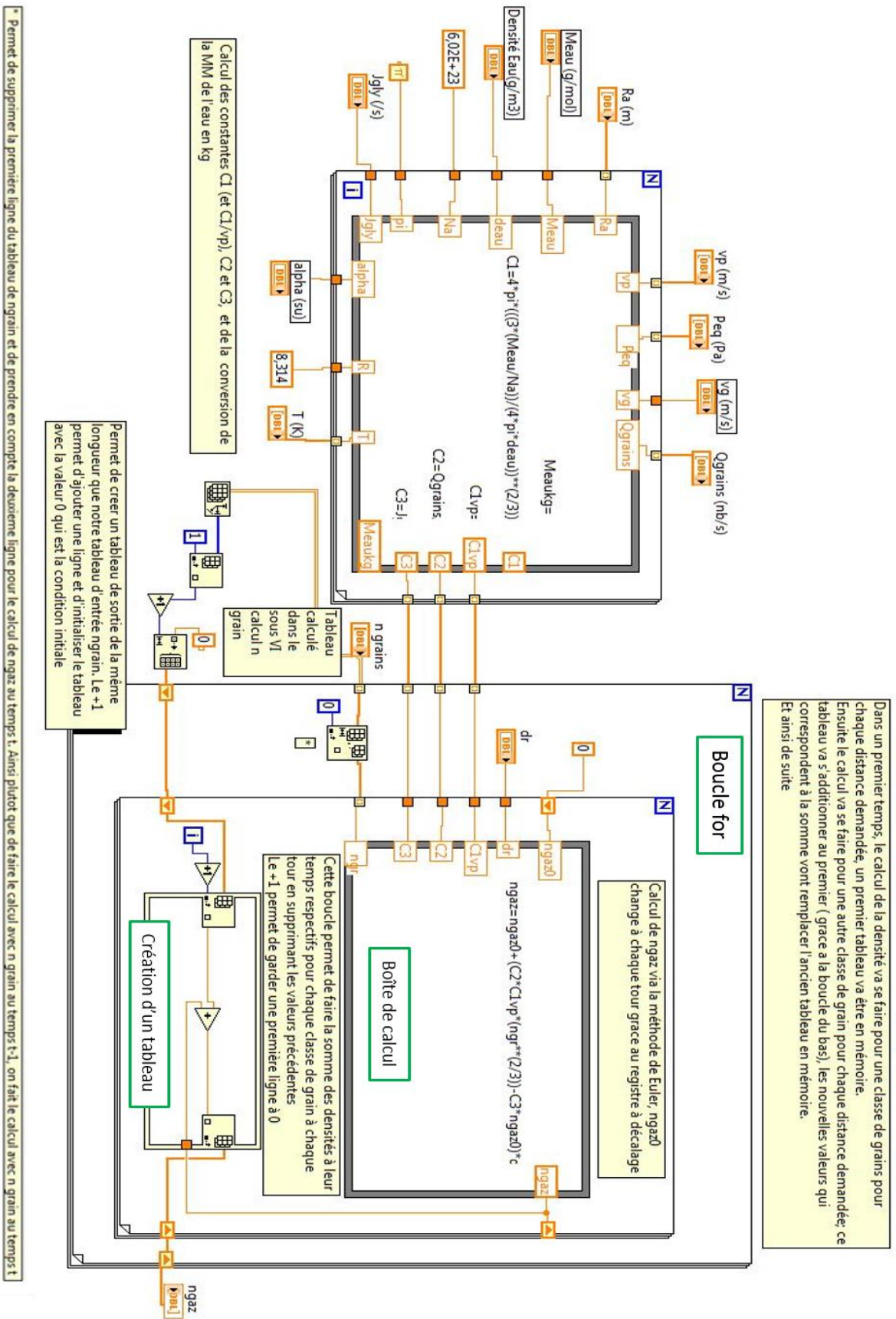


Diagramme du calcul la densité volumique de glycine en phase gazeuse



Annexe 2 – Article sur la source distribuée de glycine

Hadraoui, K., Cottin, H., Ivanovski, S., Zapf, P., Altwegg, K., Benilan, Y., Biver, N., Della Corte, V., Fray, N., Lasue, J., Merouane, S., Rotundi, A., Zakharov, V., 2019. Distributed glycine in comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Astronomy & Astrophysics* 630, A32.

Distributed glycine in comet 67P/Churyumov-Gerasimenko

K. Hadraoui^{1,5}, H. Cottin¹, S. L. Ivanovski², P. Zapf¹, K. Altwegg^{3,4}, Y. Benilan¹, N. Biver⁵, V. Della Corte^{6,7}, N. Fray¹, J. Lasue⁸, S. Merouane⁹, A. Rotundi^{6,7}, and V. Zakharov^{6,7}

¹ Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA), UMR CNRS 7583, Université Paris-Est-Créteil, Université de Paris, Institut Pierre Simon Laplace (IPSL), Créteil, France

e-mail: katia.hadraoui@lisa.u-pec.fr

² INAF – Osservatorio Astronomico di Trieste, Via Tiepolo 11, 34143 Trieste, Italy

³ Physikalisches Institut, University of Bern, Sidlerstrasse 5, 3012 Bern, Switzerland

⁴ Center for Space and Habitability, University of Bern, Sidlerstrasse 5, 3012 Bern, Switzerland

⁵ LESIA, Observatoire de Paris, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon, France

⁶ INAF – Istituto di Astrofisica e Planetologia Spaziali, Ricerca Tor Vergata, Via Fosso del Cavaliere 100, 00133 Rome, Italy

⁷ Università degli Studi di Napoli Parthenope, Dipartimento di Scienze e Tecnologie, CDN IC4, 80143 Naples, Italy

⁸ IRAP, Université de Toulouse, CNRS, UPS, Toulouse, France

⁹ Max-Planck-Institut für Sonnensystemforschung, Justus-von-Liebig-Weg 3, 37077 Göttingen, Germany

Received 4 January 2019 / Accepted 18 May 2019

ABSTRACT

Most of the gaseous molecules that are detected in cometary atmospheres are produced through sublimation of nucleus ices. Distributed sources may also occur, that is, production within the coma, from the solid component of dust particles that are ejected from the nucleus. Glycine, the simplest amino acid, was observed episodically in the atmosphere of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko (67P) by the ROSINA mass spectrometer on board the Rosetta probe. A series of measurements on 28 March 2015 revealed a distributed density profile at between 14 and 26 km away from the nucleus. We here present and discuss three study cases: (i) glycine emitted directly and only from the nucleus, (ii) glycine emitted from the sublimation of solid-state glycine on the dust particles that are ejected from the nucleus, and (iii) glycine molecules embedded in water ice that are emitted from the sublimation of this ice from the dust particles that are ejected from the nucleus. A numerical model was developed to calculate the abundance of glycine in the atmosphere of comet 67P as a function of the distance from the nucleus, and to derive its initial abundance in the lifted dust particles. We show that a good fit to the observations corresponds to a distributed source of glycine that is embedded in sublimating water ice from dust particles that are ejected from the nucleus (iii). The few hundred ppb of glycine embedded in water ice on dust particles (nominally 170 ppb by mass) agree well with the observed distribution.

Key words. comets: individual: 67P/Churyumov-Gerasimenko – astrochemistry

1. Introduction

Glycine (NH₂-CH₂-CO₂H) is the simplest amino acid and is a building block of proteins. Although realistic prebiotic chemical pathways from amino acids to proteins are still being investigated, glycine is often considered as being involved in the prebiotic chemistry that led to the origin of life on Earth. The source of amino acids to the primitive Earth is still an open question. Whether they could be produced in the Earth's early atmosphere or in hydrothermal vents depends on the composition of the atmosphere and oxidation state of the upper mantle (Cottin et al. 2017). However, it has been demonstrated that amino acids have been imported to some extent to Earth from extraterrestrial material. In 1970, glycine was first unambiguously detected in the Murchison meteorite (Kvenvolden et al. 1970) with an abundance of about 3000 ppb (Martins & Sephton 2009), and since then, it was discovered in numerous carbonaceous chondrites (Martins & Sephton 2009). Its concentration is usually of a few tens to a few thousand ppb by mass most in CI and CM chondrites (Martins & Sephton 2009; Burton et al. 2015). Glycine has also been detected in comets. First,

in dust particles collected from comet 81P/Wild 2 and returned to Earth during the Stardust mission in 2004 (Elsila et al. 2009). Then, in situ detection was reported in the atmosphere of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko (hereafter 67P) during the Rosetta mission (Altwegg et al. 2016). On 28 March 2015, a glycine density profile was measured at between 14 and 26 km away from the nucleus of 67P with the Rosetta Orbiter Spectrometer for Ion and Neutral Analysis (ROSINA) on board the Rosetta probe (Altwegg et al. 2016). It can be deduced from these measurements that its distribution cannot be interpreted by direct sublimation from the nucleus (Fig. 1a) (hereafter referred to as case 1), but rather from a distributed source (Altwegg et al. 2016). This means that there is an additional source of glycine that is produced from the dust particles that are ejected from the nucleus, which releases glycine in the gaseous phase as they move outward in the coma. Other distributed sources have previously been observed in comets for molecules such as H₂CO and for HNC or CN, and processes such as the thermal or photodegradation of organic material in the solid state on dust particles have been evoked as an interpretation (see Cottin & Fray 2008 for a review or Cordiner et al. 2014

Table 1. Glycine and water parameters.

Glycine	Water
$L = 137100 \text{ J mol}^{-1}$ (De Kruif et al. 1979)	$L = 52000 \text{ J mol}^{-1}$ (Wagner et al. 2011)
$P_{\text{ref}} = 0.4 \text{ Pa}$ (De Kruif et al. 1979)	$P_{\text{ref}} = 611.657 \text{ Pa}$ (Wagner et al. 2011)
$T_{\text{ref}} = 419.92 \text{ K}$ (De Kruif et al. 1979)	$T_{\text{ref}} = 273 \text{ K}$ (Wagner et al. 2011)
$\rho_{\text{Gly}} = 1.61 \times 10^6 \text{ g m}^{-3}$	$\rho_{\text{Gly}} = 1.61 \times 10^6 \text{ g m}^{-3}$
$J_{\text{Gly}} = 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ (Saiagh et al. 2015)	$J_{\text{Gly}} = 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ (Saiagh et al. 2015)
$Q_{\text{gas}} = 5 \times 10^{26} \text{ molec s}^{-1}$ (Biver et al. 2019)	$Q_{\text{gas}} = 5 \times 10^{26} \text{ molec s}^{-1}$ (Biver et al. 2019)
$V_g = 750 \text{ m s}^{-1}$ (Biver et al. 2019)	$V_g = 750 \text{ m s}^{-1}$ (Biver et al. 2019)

Notes. The gas velocity and the total gas abundance correspond to March 2015.

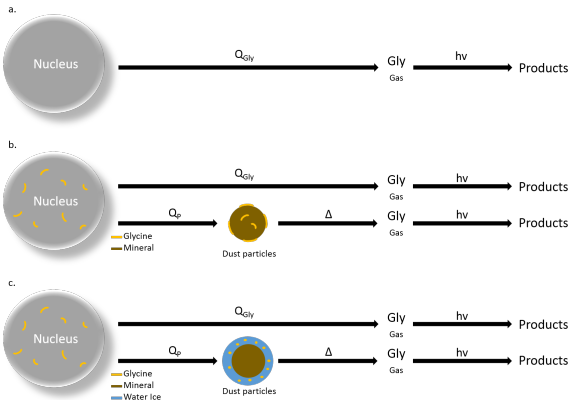
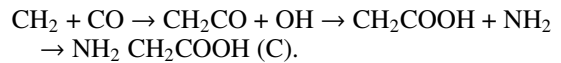
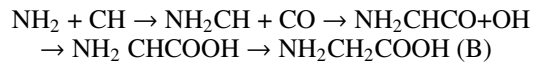
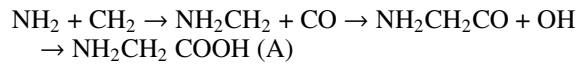


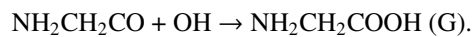
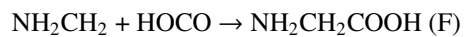
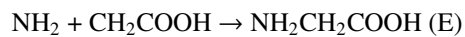
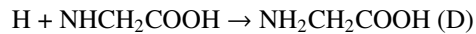
Fig. 1. Three cases of glycine production discussed in this work. *Panel a:* glycine emitted directly and only from the nucleus. *Panel b:* glycine emitted from the sublimation of solid-state glycine in the dust particles that are ejected from the nucleus. *Panel c:* glycine embedded in water ice that is emitted from the sublimation of this ice from the dust particles that are ejected from the nucleus.

for more recent observations of H_2CO and HNC distributed sources). In order to assess the validity of a distributed source of glycine in comet 67P, two cases of a distributed source are considered in this paper. In a first case (case 2), glycine is emitted from the sublimation of solid-state glycine on the dust particles that are ejected from the nucleus (Fig. 1b). In this case study, we consider that the dust particles are porous aggregates (Langevin et al. 2016) with 90% of porosity (Hornung et al. 2016), in which inclusions of glycine molecules, in the solid state, are randomly dispersed at the surface and inside the dust particles. The porosity is sufficiently high so that when it sublimates, glycine readily diffuses and is released into the cometary atmosphere. The sublimation of glycine is then modeled as if it were pure solid-state glycine inclusions at the surface of the dust particles. In another case (case 3), glycine is embedded in water ice and emitted from the sublimation of this water ice from the dust particles that are ejected from the nucleus (Fig. 1c). In this case study, glycine molecules are trapped in the water ice, which is uniformly distributed within the porous dust particles. Like in case 2, the dust particles are considered to be sufficiently porous to allow water and molecules trapped within the ice to diffuse and be released into the atmosphere. Then the release of glycine is modeled following the kinetics of water ice sublimation, as if it were located at the surface of the dust particles, whereas in case 2 the release of glycine follows the kinetics of glycine sublimation. Thus some parameters in Eqs. (1)–(6) differ from one case to another and are referenced in Table 1.

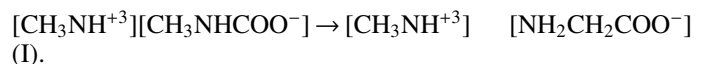
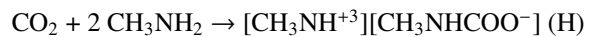
Experiments reported by Bernstein et al. (2002), Caro et al. (2002), Meinert et al. (2012), and Esmaili et al. (2018) have shown that glycine could be produced in laboratory interstellar and cometary ice analogs (simple ice mixtures such as H_2O , CO , and CO_2 , photolyzed or irradiated at about 10 K and then warmed to room temperature). From the theoretical point of view, Woon (2002) has suggested that the synthesis of glycine might be explained by the addition of radicals NH_2CH_2 and HOCO that formed by successive hydrogenation of HCN and by the addition of CO to OH , respectively. More recently, several studies have proposed other mechanisms for glycine production in the interstellar medium. For instance, Singh et al. (2013) discussed three different reaction paths in the gaseous phase as well as in water-dominated ices that coat interstellar dust,



The most thermodynamically favored of these three mechanisms is mechanism B. Garrod (2013) also proposed four processes that lead to glycine, in which reactions (E)–(G) are the main potential formation routes:



Another scenario was presented in Bossa et al. (2009, 2010). The authors showed both experimentally and theoretically that a glycine isomer salt, methylammonium methylcarbamate, can be produced in a water-dominated ice from the thermal reaction between carbon dioxide and methylamine ($\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{CH}_3\text{NH}_2 = 10:3:0.5$) (both compounds have been observed in comets):



Then, the isomer salt acts as the glycine salt precursor upon vacuum-ultraviolet (VUV) photolysis. This means that

experimental observations and theoretical mechanisms can both explain that glycine production in interstellar and cometary ice. Moreover, because it is mainly synthesized within the ice, it seems to be a good working hypothesis that it is embedded in the water-ice matrix.

In order to interpret the observations made by ROSINA, a numerical model was developed to calculate the abundance of glycine in the atmosphere of comet 67P as a function of the distance from the nucleus, and derive its initial abundance in the nucleus. Sublimation of glycine from the nucleus, which is called parent glycine, or from dust particles that are ejected from the nucleus, as well as the release of glycine when water ice sublimates from dust particles, was modeled and compared to observations.

2. Model

2.1. Glycine density profile

In order to calculate glycine density as a function of distance from the nucleus of 67P, an approach based on Haser's model assumptions (Haser 1957) was used. This model is quite common for studies of the density distribution of compounds in the atmosphere of comets and also in the case of distributed source studies: for instance, H₂CO in C/1996 B2 (Hyakutake), (Biver et al. 1999), C/1995 O1 (Hale-Bopp) (Fray et al. 2006) C/2012 F6 (Lemmon) and C/2012 S1 (ISON) (Cordiner et al. 2014), and for HNC in C/2012 S1 (ISON) (Cordiner et al. 2014). This implies the following:

- the cometary nucleus has a spherical shape, the emission is homogeneous from the entire nucleus surface;
- the nucleus production is constant over the timescale that is covered by the calculations;
- expansion of molecules from the nucleus is radial and with constant velocity;
- molecules are only destroyed by photochemistry.

This is considered the simplest model for computing the spatial distribution of gaseous molecules in cometary atmospheres, and it is obvious that it does not reflect the complexity of the cometary nucleus and its activity. For instance, it is clear that the nucleus of comet 67P is not spherical and that the gas production is not homogeneous. However, it is satisfactory as a first approach for an approximate modeling because our goal here is to study relevant production mechanisms rather than computing precise abundances. Haser's model was also used in previous distributed-source studies that were applied to formaldehyde in comet 1P/Halley (Cottin et al. 2004) and C/1995 O1 Hale-Bopp (Fray et al. 2006).

The glycine and the water sublimation rate (molec cm⁻² s⁻¹) from the surface can be calculated through the Hertz-Knudsen relation (Miyamoto 1933),

$$\frac{1}{A} \frac{dN_x}{dt} = \frac{\alpha P_x N_A}{\sqrt{2\pi M_x R T_p}} \quad (1)$$

N_x is a number of molecules, A is the surface from which molecules sublime (cm²), N_A is the Avogadro constant (mol⁻¹), R is the gas constant (J mol⁻¹ K⁻¹), and α is the sticking coefficient of the gas molecules to the surface ($0 \leq \alpha \leq 1$, here α is considered to be equal to 1). M_x is the molar mass (g mol⁻¹), and T_p is the temperature of a dust particle (K) from which the glycine sublime. Last, P_x is the pressure (Pa) calculated from the

Clausius Clapeyron relation,

$$P_x = P_{\text{ref}} \exp\left(\frac{L}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T_p}\right)\right), \quad (2)$$

where P_{ref} and T_{ref} are the pressure (Pa) and temperature (K) for which the reference measurements were made. T_p is the temperature of the particle (K), and L is the sublimation enthalpy (J mol⁻¹). The values are reported in Table 1.

By applying Haser's hypotheses and assuming that glycine can be emitted and photolyzed only from the nucleus, a first-degree differential equation is obtained:

$$\frac{dn_{\text{Gly}}^{\text{Gas}} r^2}{dr} = \frac{-J_{\text{Gly}}}{v_{\text{gas}}} n_{\text{Gly}} r^2. \quad (3)$$

Equation (3) corresponds to the simple case of glycine distribution that is emitted only from the nucleus and is then photolyzed. n_{Gly} is the glycine molecule density profile (molec m⁻³), v_{gas} corresponds to the gas velocity in m s⁻¹, r is the distance from the nucleus (m), and J_{Gly} is the glycine photolysis constant (s⁻¹). A production rate of glycine Q_{Gly} (molec s⁻¹) that is emitted directly from nucleus ices is considered as initial condition.

To simulate a distributed source of glycine in the gas phase that is emitted from the sublimation of solid-state glycine or from the sublimation of glycine that is embedded in water ice on dust particles that are ejected from the nucleus, the following system of equations has to be considered:

$$\frac{dn_{\text{Gly}}^{\text{Gr}}}{dr} = -\frac{4\pi}{v_p} \left(\frac{3M_x}{4\pi\rho_x}\right)^{2/3} \frac{\alpha P_x N_A}{\sqrt{2\pi R T_p}} (n_{\text{Gly}}^{\text{Gr}})^{2/3}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\text{Gly}}^{\text{Gas}} r^2}{dr} &= \frac{Q_{\text{Grains}}}{4\pi v_p v_{\text{gas}}} \frac{4\pi}{v_p} \left(\frac{3M_x}{4\pi\rho_x}\right)^{2/3} \frac{\alpha P_x N_A}{\sqrt{2\pi M_x R T_p}} (n_{\text{Gly}}^{\text{Gr}})^{2/3} \\ &\quad - \frac{J_{\text{Gly}}}{v_{\text{gas}}} n_{\text{Gly}}^{\text{Gas}} r^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Equation (4) is related to the glycine molecule density profile, $n_{\text{Gly}}^{\text{Gr}}$ (molec m⁻³) from dust particles ejected from

the nucleus. The Hertz-Knudsen relation $A = 4\pi \left(\frac{3M_x}{4\pi\rho_x}\right)^{2/3}$ is injected in this equation, where M_x is the glycine or water molecular mass, ρ_x is the glycine or water bulk density (g m⁻³), and v_p is the dust particles velocity (m s⁻¹). Equations (4) and (5) were used to model cases 2 and 3 using the parameters given in Table 1 (glycine) for case 2 and Table 1 (water) for case 3. In each particle, β corresponds to the initial fraction of glycine in dust particles by mass. The calculations were made for equivalent spherical dust particles of pure glycine by calculating an equivalent radius with

$$R_\beta = \beta \left(\frac{\rho_p}{\rho_x}\right)^{1/3} R_0, \quad (6)$$

in which ρ_p represents the particle mass density (g m⁻³), ρ_x is the glycine or water mass density (g m⁻³), and R_0 is the initial particle radius. R_β decreases with distance from the nucleus as glycine or water ice sublime. For the sublimation of glycine embedded in water ice in dust particles, the equivalent radius is

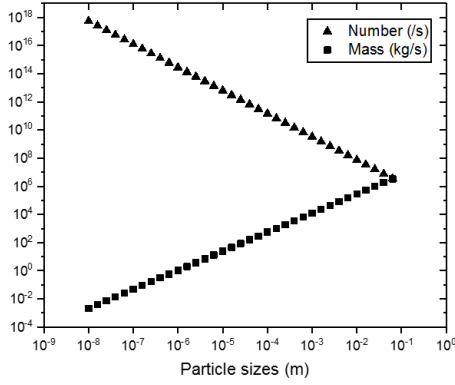


Fig. 2. Particle distribution as a function of particle sizes (m). The triangles represent the number of particles produced per seconds, and the circles show the mass particle production per second (kg s^{-1}) from the cometary nucleus of 67P.

calculated based on a fraction of ice that is present on dust particles instead of the fraction of glycine by mass. To estimate the ice mass m_i (g), a dust-to-ice ratio d/i (estimated to be close to 1; Combi et al., in prep.) and the dust mass m_d (g) are considered:

$$m_i = \frac{m_d}{d/i}. \quad (7)$$

Then the fraction of ice is derived by calculating the ratio between the ice mass and the total mass m_T :

$$i = \frac{m_i}{m_T}. \quad (8)$$

The equivalent radius relation is finally obtained using Eq. (6).

Equation (5) is the gaseous glycine density evolution as a function of the distance from the nucleus, $n_{\text{Gly}}^{\text{Gas}}(r)$ (molec m^{-3}), with a source term that is the glycine sublimation from the dust particles, as well as a sink term that is related to the molecule photolysis. Finally, v_{gas} corresponds to the gas velocity in m s^{-1} , J_{Gly} is the glycine photolysis constant (s^{-1}), and Q_{Grains} is the number of dust particles that are ejected from the nucleus per second in each size bin. The parameter values are shown in Table 1. It is assumed here that glycine molecules reach the gas velocity immediately after their sublimation, which is a simplification that was also used in Cottin et al. (2004) and Fray et al. (2006). Calculations are made following an Eulerian method.

2.2. Particle distribution

In a cometary atmosphere, dust particles do not have the same sizes and masses. The differential equations presented in Sect. 2.1 depend on the temperature and velocity of each particle. Therefore, the distributed sources from a realistic ejected dust particle distribution were computed with their own expansion profiles, that is, with different sizes, temperatures, and velocities.

2.2.1. Dust production model

The dust production rate in number for each size range (Fig. 2) was calculated with the power law $\gamma = -1.8 \pm 0.4$ described in Merouane et al. (2017) during the period between August 2014 and the May 2015 equinox. Dust particles from micrometers to centimeters were taken into account. The COmetary Secondary

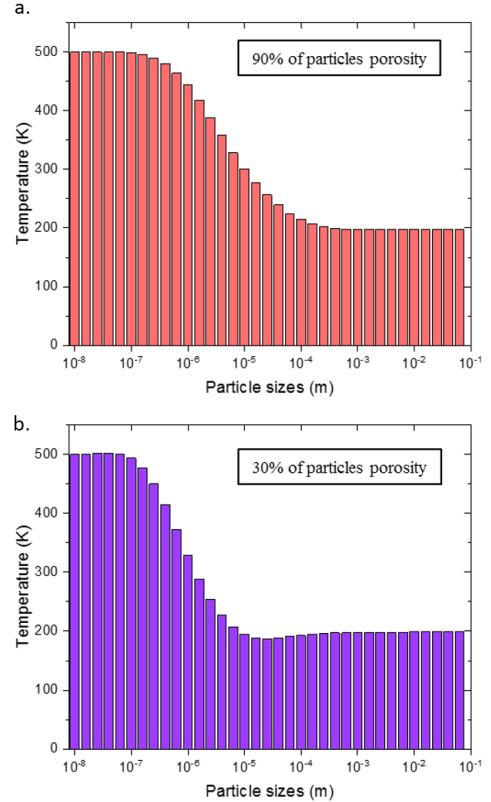


Fig. 3. Calculated profile of particle temperatures as a function of particle sizes at 2 AU from the Sun. Panel a: with 90% particle porosity. Panel b: with 30% particle porosity.

Ion MAss spectrometer (COSIMA) has detected dust particles in the micrometer range (Merouane et al. 2016), the Grain Impact Analyser and Dust Accumulator (GIADA) has measured dust particles of a few millimeters (Della Corte et al. 2016; Rinaldi et al. 2017), and the Optical, Spectroscopic and Infrared Remote Imaging System (OSIRIS) has observed dust particles of a few centimeters (Fulle et al. 2010, 2016a).

Figure 2 shows the many small dust particles that correspond to a very low fraction of the total ejected mass. Conversely, there are only a few of the largest dust particles, but they contribute most of the ejected mass.

2.2.2. Temperatures

Temperatures (Fig. 3a) were calculated for each class of dust particles with a model based on the Mie scattering theory detailed in Fray et al. (2006). This model takes the size, porosity, and albedo of the dust particles into account. For the albedo, we used the refractive indices of pyroxene ($\text{Mg}_0.6\text{Fe}_{0.4}\text{SiO}_3$; Dorschner et al. 1995) and graphite (Jager et al. 1998). Graphite is representative of black organic matter and provides an upper limit for a strongly absorbing organic component of the grains, and pyroxene represents the silicate component of grains with very low absorption in the visible range.

These temperatures were estimated at 2 AU from the Sun, which is where 67P/Churyumov-Gerasimenko was when the ROSINA glycine measurements were made. Our calculations are also based on dust particles with 70% in volume of organic matter (Levasseur-Regourd et al. 2018), precisely with amorphous carbon in the model, and with 90% particle porosity (Hornung et al. 2016). Figure 3b was calculated with 30% porosity.

Table 2. Initial parameters of the dust model.

Input parameters	Parameter value	Comments
Particle parameters		
Particle size (m)	$1 \times 10^{-8} - 6.0 \times 10^{-2}$	
Particle density (kg m^{-3})	900	1
Spheroid aspect ratio, a/b	0.2	2
Initial particle orientation (deg)	45	3
Gas parameters on the initial surface (less than $R_N/50$ above the nucleus surface)		
Sound speed (m s^{-1})	500	
Gas composition	$10 \times \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	4
Gas production rate Q_{gas} (molec s^{-1})	2×10^{27}	
Gas temperature (K)	100	
Gas density (kg m^{-3})	1.0×10^{-6}	
67P/CG parameters		
Radius, R_N (m)	2.0×10^3	(Sierks et al. 2015)
Mass, m_N (kg)	1.0×10^{13}	(Pätzold et al. 2016)
Surface temperature, T_N (K)	200	(Capaccioni et al. 2015)

Notes. ⁽¹⁾Constrained by the GIADA data (Fulle et al. 2016b, 2017). ⁽²⁾Compatible with the GIADA measurements (Fulle et al. 2016b, 2017). ⁽³⁾Compatible with the density used to reproduce particle speeds measured by GIADA (Ivanovski et al. 2017a). ⁽⁴⁾All these parameters are derived by the Euler gas flow solutions calibrated with the DCMC 3D+t gas solutions constrained by ROSINA data (Fougere et al. 2016).

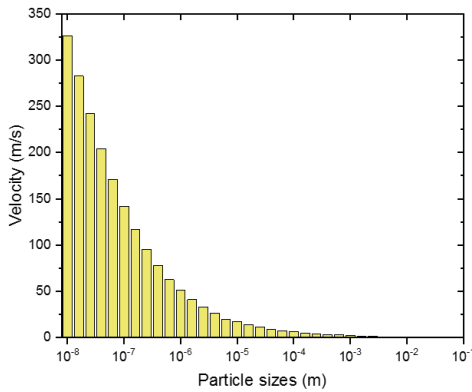


Fig. 4. Particle terminal speeds as a function of particle sizes. The initial properties of the particles are described in Table 2. The particle spheres have a bulk density of 900 kg m^{-3} .

2.2.3. Velocities

The velocities were calculated using a model for nonspherical dust (Fulle et al. 2015; Ivanovski et al. 2017a,b) by computing the motion of single dust particles in the size range from 10^{-8} m up to millimeters (Fig. 4). For our simulations we used the physical conditions corresponding to the coma of 67P/CG on 28 March 2015 and GIADA data (Della Corte et al. 2016; Rinaldi et al. 2017). The gas approximation that we used to calculate the aerodynamic force is the Euler approximation for an expanding ideal gas (Anderson & Wendt 1995, for details), which is analytical. The physical parameters of these gas distributions were adjusted using the gas production rates reported in Fougere et al. (2016). As dust particles, we considered homogeneous isothermal spheres and oblate spheroids with an aspect ratio $a/b = 0.2$. This elongation value was able to reproduce the GIADA data best (Ivanovski et al. 2017a). Because the measurements on 28 March

2015 were performed close to the nucleus (altitudes from 14 km up to 26 km), the two main forces acting on the dust particles are the aerodynamic force and gravity. In Table 2 we list three sets of parameters: the parameters for 67P/CG, the assumed physical properties of the simulated dust particles, and the gas flow parameters with the gas production rate. We used a higher gas production rate Q_{gas} ($2 \times 10^{27} \text{ molec s}^{-1}$) than was used in the density model (i.e., $5 \times 10^{26} \text{ molec s}^{-1}$; Biver et al. 2019) with respect to that reported in Table 1 in order to compensate for the nonsphericity of the real expansion. We considered the gas production locally, and in the case of expanding flow, it was derived from numerical calibration using ROSINA data. The maximum liftable dust size under these conditions is a few millimeters (Ivanovski et al. 2017a). The velocity of the large dust particles (10^{-2} m and larger) is mostly defined by the ejection conditions and remains practically unchanged. In the frame of the spherical expansion model, we cannot estimate their terminal velocity, but based on Fulle et al. (2018), their average velocity is $1.7 \pm 0.9 \text{ m s}^{-1}$. For instance, in order to have lifted dust particles of 10^{-2} m and larger, a higher gas production rate should be assumed locally if the total gas production rate still remains the same at $5 \times 10^{26} \text{ s}^{-1}$. For dust sizes $\geq 10^{-2}$ m and the physical conditions used in this study, the coefficients I_v and F_u (Zakharov et al. 2018) show that these dust particles conserve their velocity in the coma. The velocities of oblate spheroids are about twice the velocities of spherical dust particles, which suggests a high sensitivity of the chosen shape to the computed dust velocities.

3. Results

Three cases were considered. The first describes glycine that is only emitted as a parent compound from the nucleus and is then photolyzed (Fig. 1a). The two other cases correspond to a distributed source: a first case in which glycine is emitted from the

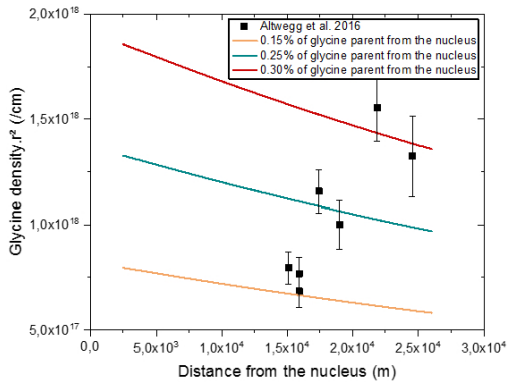


Fig. 5. Glycine density profile as a function of the distance from the nucleus of 67P when glycine is only emitted from the sublimation of nucleus ice and is then photolysed. The red line corresponds to 0.30% relative to water of the parent glycine emitted from the nucleus, the blue line corresponds to 0.25%, and the yellow line corresponds to 0.15%.

sublimation of solid-state glycine on the dust particles that are ejected from the nucleus (Fig. 1b), and the other case in which glycine is embedded in water ice and emitted from the sublimation of this water ice from dust particles that are ejected from the nucleus (Fig. 1c).

Figure 5 shows the glycine density profile as a function of distance from the nucleus when glycine does not present a distributed source. Specifically, all figures of this paper show the glycine density multiplied by the square of the distance from the nucleus (converted into centimeters). With this representation, a parent source only from the nucleus and without sinks should be presented as a horizontal trend. The ROSINA measurements clearly show a positive slope while the probe moved away from the nucleus, which is characteristic of a distributed source. Here the hypothetical case of glycine only emitted from the nucleus for different abundances is modeled. A good fit for the first points of the ROSINA measurements corresponds to 0.15% of glycine relative to water in the nucleus, but the trend does not match the data. A higher glycine percentage, 0.25 and 0.35%, was tested, but it only affects the initial glycine density. The trend is still the same. Regardless of the glycine abundance in the nucleus, it is not possible to fit the ROSINA measurements as a parent compound.

The first case for a distributed source, in which glycine is emitted from the sublimation of solid-state glycine on the dust particles ejected from the nucleus, is shown in Fig. 6 using the parameters as presented in Table 1. Figure 6a shows the evolution of glycine density for different abundances of parent glycine from the nucleus. There are no significant differences within the error bars between no parent glycine and $10^{-3}\%$ parent glycine from the nucleus, while higher percentages of parent glycine, such as $10^{-2}\%$, do not match the ROSINA measurements. Therefore, we consider that the amount of parent glycine is not significant for the distribution we modeled. Consequently, the cases shown in Fig. 6b for different abundances of glycine in dust particles were calculated without any parent glycine. To reach an abundance with the same order of magnitude as the measurements, 100% of glycine in the dust particles is required, which is unrealistic. If the abundance is decreased to 50%, the glycine density is too low compared to the measured density. Moreover, the profile shapes are very different from the measured shape, regardless of the amount of glycine in the dust particles. The kinetics of sublimation of glycine, rather than its amount, is the reason why case 2 seems to be inconsistent with measurements.

Figure 7 shows the result of the modeling in case 3, for which the density profile of glycine was calculated with the same ratio of glycine in the sublimating ices from the nucleus (parent source) and those sublimating from the dust particles (distributed source). This shows that it is possible to match ROSINA data with our model when a distributed source of glycine embedded in water ices on dust particles is considered. A good fit corresponds to an abundance of glycine embedded in water ice on dust particles of about $1.7 \times 10^{-5}\%$ (in mass relative to water). The fit is quite sensitive to parameters such as the porosity of the dust particles, however. As described in Sect. 2.2.1, we considered that the dust particles are made of 70% in volume of organic matter (Levasseur-Regourd et al. 2018), precisely, amorphous carbon, and with a dust particle porosity of 90% (Hornung et al. 2016).

The porosity affects the particle temperature. As an example, when the porosity decreases to 30%, dust particles would reach cooler temperatures faster. Results for this case are shown in Fig. 8. The same concentration of glycine in water ice, that is, $1.7 \times 10^{-5}\%$, and also the same percentage of organic matter (70% in volume) was used. Here the glycine density is higher than our first result, meaning that when the dust particles are less porous, the less glycine is required to fit the measurements. Particle velocity also has an influence on glycine density. For example, when all velocities are increased by 20%, about $2.5 \times 10^{-5}\%$ of the glycine that is embedded in water ice would be required to have an equivalently good fit. This means almost 50% more glycine than for the velocities we used here. We tested the effect of the H_2O ice mass fraction on the dust particles by changing the dust-to-ice ratio. When it is multiplied by 8, that is, $d/i=8$ to reach some of the higher values published for comet 67P (Fulle et al. 2017), the required glycine density is $4.2 \times 10^{-5}\%$ (420 ppb), which is 2.5 times more than for a d/i equal to 1. The quality of the fit remains the same and the amount of glycine derived is on the same order of magnitude.

The three computed cases to interpret the atypical distribution of glycine measured by ROSINA are summarized below.

- The first case corresponds to a direct production of glycine from the nucleus does not match the observations.
- The second case takes into account the sublimation of solid-state glycine from dust particles that are ejected from the nucleus and cannot explain the trend of the measurements either. It also requires an unrealistically high quantity of solid-state glycine of a few tens of percent in mass of the ejected dust particles.
- The third case considers that glycine is present within the water ice and is emitted from the sublimation of this ice from dust particles that are ejected from the nucleus. This seems to be a good interpretation. It requires about 170 ppb of glycine on dust particles.

4. Discussion

The glycine concentration is about a few hundreds to a few thousands of ppb in chondrites that present aqueous alteration (Martins & Sephton 2009). By contrast, in thermal metamorphism chondrites, the glycine concentration is about a few tens to a few hundreds of ppb (Burton et al. 2015). Our modeling tends to an abundance of glycine in 67P of about 170 ppb, which corresponds to the smallest measurement range of glycine detected in aqueous carbonaceous chondrites and to the widest range in chondrites with thermal metamorphism. Studies made by Bardyn et al. (2015) have shown that the materials of 67P have not undergone aqueous alteration. Furthermore,

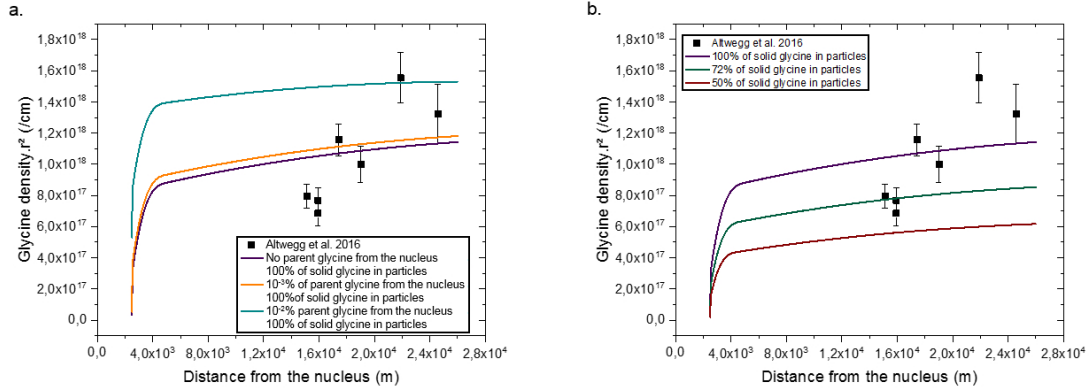


Fig. 6. Density profile of glycine as a function of the distance from the nucleus of 67P when it presents a distributed source for which glycine is emitted from the sublimation of a solid state on particles. *Panel a:* with different abundances of parent glycine in the nucleus. *Panel b:* with different abundances of glycine in particles and no parent glycine from the nucleus.

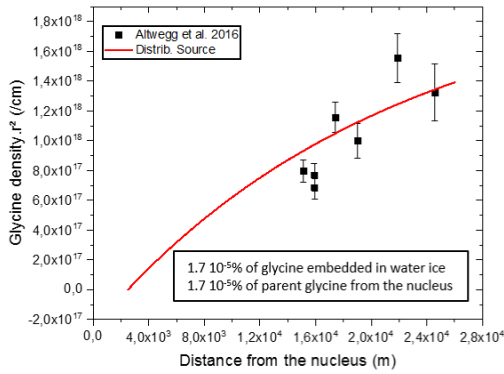


Fig. 7. Density profile of glycine as a function of the distance from the nucleus of 67P when glycine presents a distributed source for which it is embedded in water ice on particles with $1.7 \times 10^{-5}\%$ glycine, and with $1.7 \times 10^{-5}\%$ parent glycine from the nucleus.

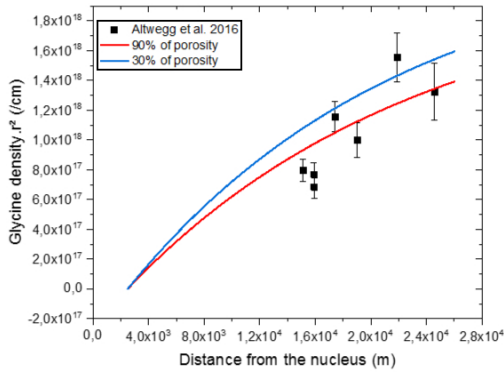


Fig. 8. Density profile of glycine as a function of the distance from the nucleus of 67P when it presents a distributed source for which glycine molecules are embedded in water ice on particles with $1.7 \times 10^{-5}\%$ glycine and with $1.7 \times 10^{-5}\%$ parent glycine from the nucleus. The blue line corresponds to 30% porosity, and the red line represents particles with 90% porosity.

Nuevo et al. (2008) have demonstrated that amino acid quantities are very different for hydrolyzed and non-hydrolyzed fraction residues of photolyzed cometary ice analogs; the concentration is significantly higher in the hydrolyzed fraction. This means that the amount of glycine derived from our modeling is consistent with pristine material that has not been significantly altered either by heat or liquid water.

An important parameter regarding our fits to observations seems to be the temperature. Our modeling is computed at

equilibrium temperature, which is not reached immediately at ejection from the nucleus as in our theoretical modeling. The thermal equilibrium time estimated from the heat diffusion inside dust particles (Huebner et al. 2006) can be calculated from

$$\tau = \frac{R^2 \rho c}{\pi^2 K}, \quad (9)$$

with R the dust particles radius, ρ their density, c the specific heat, and K the thermal conductivity. Spohn et al. (2015) presented different values measured on the surface by the Philae lander, $\rho = 5 \times 10^{-2} \text{ kg m}^{-3}$, $300 \text{ J (kg K)}^{-1} < c < 600 \text{ J (kg K)}^{-1}$, and $0.02 \text{ W (m K)}^{-1} < K < 0.06 \text{ W (m K)}^{-1}$. As an example, for a particle with a radius of 1 cm, values between 25 and 152 s are obtained to reach the equilibrium. For the smallest dust particles with millimeter sizes, the equilibrium temperature is reached in about 6 s. For the smallest particles it takes a few fractions of a second.

The dust particles have velocities of between 326 m s^{-1} for the smallest (10^{-8} m) and 1 m s^{-1} for the largest ($> 10^{-2} \text{ m}$), which means a transport time to reach 14 km (the first measurement point) of between 42 s (for the smallest, which reach equilibrium within fractions of second) and 3 h (for the largest, which reach equilibrium within at most a few minutes). Therefore, the calculated values to reach equilibrium temperature are significantly lower than the transport time from the comet surface to the first ROSINA measurement point. As a first approximation, modeling dust particles at their equilibrium temperature is therefore valid. However, we did not consider the fact that sublimation is an endothermic process that would cool the dust particles as it occurs. Dust particles would therefore be cooler than in our modeling. As shown in Sect. 3, dust particles that reach the coolest temperatures faster would not dramatically influence the amount of glycine that is needed to fit the data.

Because glycine is released at the same time as water ice is sublimating, a distributed source of water and other molecules embedded in water might be detected in the same data set. No such distributed source detection has been reported so far, however. It is interesting to note that De Keyser et al. (2017) have also reported a distributed source for HCl and HF due to water-ice sublimation from dust particles in the atmosphere of comet 67P. No distributed source of water is detected in their data either, however, because the contribution of sublimating water from the icy dust particles to the total water budget in the coma is suspected to be minor. This is probably also the case for the 28 March 2015 data discussed in this paper: glycine has been measured in a jet of icy dust particles that were ejected from

the nucleus. We may not have found other distributed source events for glycine because there was only this one fast flyby on 28 March 2015, where the spacecraft changed the radial distance in a short time. For the sublimation of water from dust particles, Gicquel et al. (2016) have suggested based on the brightness profiles of dust jets that icy aggregates can sublimate in the coma of 67P, and that most of this ice sublimates on a length scale of a few tens of kilometers, which is consistent with glycine measurements and our modeling.

This paper is meant to propose a plausible interpretation of the puzzling behavior of glycine in the atmosphere of comet 67P. We suggest a mechanism and an abundance that are quite realistic, but we do not pretend that other mechanisms yet to be conceived might not produce similar matches between observation and theory. For instance, following an approach similar to case 2, it might be considered that glycine is produced from the degradation of a complex macromolecular organic material. However, to our knowledge, there is no evidence of a macromolecular organic component that would release glycine upon heating. We also consider it unlikely that peptide molecules (polymers of amino acids, in this case, glycine polymers) could be a realistic alternative to the presence of glycine itself. If such peptides compounds were in the dust particles, they would result from the condensation of glycine on itself, and certainly would be order(s) of magnitude less abundant than their precursor (glycine monomer). Data are also lacking for a proper modeling of such a case (both regarding the sublimation of the peptides, depending on their size (dimer, trimers, and polymers), and their kinetics of degradation into glycine). COSIMA, the mass spectrometer that analyzed the solid phase of dust particles (which were captured and analyzed after water ice and volatile are gone), has not reported any detection of molecules such as glycine and other compounds with a rather low volatility (carboxylic acid, aliphatic and aromatic compounds, amines, ketones, etc.) that were expected to be found in the dust particles (Le Roy et al. 2015). The organic matter detected in the dust particles is rather a complex organic network similar to the insoluble organic matter (IOM) observed in carbonaceous chondrites, but in a larger amount (Fray et al. 2016; Bardyn et al. 2017). The hypothesis that compounds such as glycine would be synthesized within the ices and released from the ices as they sublime is consistent with a detection by ROSINA in the gaseous phase and not COSIMA in the solid state. Recent results regarding the detection of aliphatic and aromatic hydrocarbons in comet 67P have shown that many of them are only observed when the coma is dusty (Schuhmann et al. 2019). However, only in March 2015 was a flyby where the spacecraft changed the radial distance in a short time, making this a unique opportunity for distributed sources detection.

Acknowledgements. The authors wish to thank the referee of the paper for their careful reading of the manuscript, questions and comments that contributed to improving the paper. This work has been supported through CNES fundings, in the frame of the Rosetta project. K.H. benefits from a PhD grant from Université Paris Est Créteil. This work was also supported by the Italian Space Agency (ASI) within the ASI-INAF agreements I/032/05/0 and I/024/12/0. We thank the Rosetta Science Ground Segment at ESAC, the Rosetta Mission Operations Centre at ESOC and the Rosetta Project at ESTEC for their outstanding work enabling the science return of the Rosetta Mission. Rosetta is an ESA mission with contributions from its Member States and NASA.

References

Altwegg, K., Balsiger, H., Bar-Nun, A., et al. 2016, *Sci. Adv.*, **2**, e1600285
 Anderson, J. D., & Wendt, J. 1995, *Computational Fluid Dynamics* (Berlin: Springer), 206

Bardyn, A., Hilchenbach, M., Briois, C., et al. 2015, *AAS/Division Planet. Sci. Meeting Abstracts*, 47
 Bardyn, A., Baklouti, D., Cottin, H., et al. 2017, *MNRAS*, **469**, S712
 Bernstein, M. P., Dworkin, J. P., Sandford, S. A., Cooper, G. W., & Allamandola, L. J. 2002, *Nature*, **416**, 401
 Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., et al. 1999, *AJ*, **118**, 1850
 Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Hofstadter, M., et al. 2019, *A&A*, **630**, A19 (Rosetta 2 SI)
 Bossa, J.-B., Duvernay, F., Theulé, P., et al. 2009, *A&A*, **506**, 601
 Bossa, J.-B., Borget, F., Duvernay, F., Theulé, P., & Chiavassa, T. 2010, *J. Phys. Org. Chem.*, **23**, 333
 Burton, A. S., McLain, H., Glavin, D. P., et al. 2015, *Meteorit. Planet. Sci.*, **50**, 470
 Capaccioni, F., Coradini, A., Filacchione, G., et al. 2015, *Science*, **347**, aaa0628
 Caro, G. M., Meierhenrich, U., Schutte, W., et al. 2002, *Nature*, **416**, 403
 Cordiner, M., Remijan, A., Boissier, J., et al. 2014, *ApJ*, **792**, L2
 Cottin, H., & Fray, N. 2008, *Space Sci. Rev.*, **138**, 179
 Cottin, H., Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., & Raulin, F. 2004, *Icarus*, **167**, 397
 Cottin, H., Kotler, J. M., Bartik, K., et al. 2017, *Space Sci. Rev.*, **209**, 1
 De Keyser, J., Dhooche, F., Altwegg, K., et al. 2017, *MNRAS*, **469**, S695
 De Kruijff, C., Voogd, J., & Offringa, J. 1979, *J. Chem. Thermodyn.*, **11**, 651
 Della Corte, V., Rotundi, A., Fulle, M., et al. 2016, *MNRAS*, **462**, S210
 Dorschner, J., Begemann, B., Henning, T., Jaeger, C., & Mutschke, H. 1995, *A&A*, **300**, 503
 Elsila, J. E., Glavin, D. P., & Dworkin, J. P. 2009, *Meteorit. Planet. Sci.*, **44**, 1323
 Esmaili, S., Bass, A. D., Cloutier, P., Sanche, L., & Huels, M. A. 2018, *J. Chem. Phys.*, **148**, 164702
 Fougere, N., Altwegg, K., Berthelier, J.-J., et al. 2016, *A&A*, **588**, A134
 Fray, N., Bénilan, Y., Biver, N., et al. 2006, *Icarus*, **184**, 239
 Fray, N., Bardyn, A., Cottin, H., et al. 2016, *Nature*, **538**, 72
 Fulle, M., Colangeli, L., Agarwal, J., et al. 2010, *A&A*, **522**, A63
 Fulle, M., Della Corte, V., Rotundi, A., et al. 2015, *ApJ*, **802**, L12
 Fulle, M., Marzari, F., Della Corte, V., et al. 2016a, *ApJ*, **821**, 19
 Fulle, M., Della Corte, V., Rotundi, A., et al. 2016b, *MNRAS*, **462**, S132
 Fulle, M., Della Corte, V., Rotundi, A., et al. 2017, *MNRAS*, **469**, S45
 Fulle, M., Blum, J., Green, S., et al. 2018, *MNRAS*, **482**, 3326
 Garrod, R. T. 2013, *ApJ*, **765**, 60
 Gicquel, A., Vincent, J.-B., Agarwal, J., et al. 2016, *MNRAS*, **462**, S57
 Haser, L. 1957, *Bull. Soc. Roy. Sci. Liège*, **43**, 740
 Hornung, K., Merouane, S., Hilchenbach, M., et al. 2016, *Planet. Space Sci.*, **133**, 63
 Huebner, W. F., Benkhoff, J., Capria, M.-T., et al. 2006, *Heat and Gas Diffusion in Comet Nuclei* (Bern: International Space Science Institute)
 Ivanovski, S. L., Zakharov, V. V., Della Corte, V., et al. 2017a, *Icarus*, **282**, 333
 Ivanovski, S. L., Della Corte, V., Rotundi, A., et al. 2017b, *MNRAS*, **469**, S774
 Jager, C., Mutschke, H., & Henning, T. 1998, *A&A*, **332**, 291
 Kvenvolden, K., Lawless, J., Pering, K., et al. 1970, *Nature*, **228**, 923
 Langevin, Y., Hilchenbach, M., Ligier, N., et al. 2016, *Icarus*, **271**, 76
 Le Roy, L., Bardyn, A., Briois, C., et al. 2015, *Planet. Space Sci.*, **105**, 1
 Levasseur-Regourd, A.-C., Agarwal, J., Cottin, H., et al. 2018, *Space Sci. Rev.*, **214**, 64
 Martins, Z., & Sephton, M. 2009, *Amino Acids, Peptides and Proteins in Organic Chemistry: Origins and Synthesis of Amino Acids* (Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH), 1, 1
 Meinert, C., Filippi, J.-J., de Marcellus, P., Le Sergeant d'Hendecourt, L., & Meierhenrich, U. J. 2012, *ChemPlusChem*, **77**, 186
 Merouane, S., Zaprudin, B., Stenzel, O., et al. 2016, *A&A*, **596**, A87
 Merouane, S., Stenzel, O., Hilchenbach, M., et al. 2017, *MNRAS*, **469**, S459
 Miyamoto, S. 1933, *Trans. Faraday Soc.*, **29**, 794
 Nuevo, M., Auger, G., Blanot, D., & d'Hendecourt, L. 2008, *Orig. Life Evol. Biosph.*, **38**, 37
 Pätzold, M., Andert, T., Hahn, M., et al. 2016, *Nature*, **530**, 63
 Rinaldi, G., Della Corte, V., Fulle, M., et al. 2017, *MNRAS*, **469**, S598
 Saiagh, K., Belilla, J., Fray, N., Valorso, R., & Cottin, H. 2015, *Eur. Planet. Sci. Congress*, **10**
 Schuhmann, M., Altwegg, K., Balsiger, H., et al. 2019, *A&A*, **630**, A31 (Rosetta 2 SI)
 Sierks, H., Barbieri, C., Lamy, P. L., et al. 2015, *Science*, **347**, aaa1044
 Singh, A., Misra, A., Tandon, P., et al. 2013, *Res. Astron. Astrophys.*, **13**, 912
 Spohn, T., Knollenberg, J., Ball, A. J., et al. 2015, *Science*, **349**, aab0464
 Wagner, W., Riethmann, T., Feistel, R., & Harvey, A. H. 2011, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **40**, 043103
 Woon, D. E. 2002, *ApJ*, **571**, L177
 Zakharov, V., Ivanovski, S., Crifo, J.-F., et al. 2018, *Icarus*, **312**, 121

Bibliographie

- A'Hearn, M.F., Belton, M., Delamere, W., Kissel, J., Klaasen, K., McFadden, L., Meech, K., Melosh, H., Schultz, P., Sunshine, J., 2005. Deep impact: excavating comet Tempel 1. *science* 310, 258-264.
- A'Hearn, M.F., Feaga, L.M., Keller, H.U., Kawakita, H., Hampton, D.L., Kissel, J., Klaasen, K.P., McFadden, L.A., Meech, K.J., Schultz, P.H., 2012. Cometary volatiles and the origin of comets. *The Astrophysical Journal* 758, 29.
- A'Hearn, M.F., Hoban, S., Birch, P.V., Bowers, C., Martin, R., Klinglesmith, D.A., 1986. Cyanogen jets in comet Halley. *Nature* 324, 649-651.
- A'Hearn, M.F., Millis, R.C., Schleicher, D.G., Osip, D.J., Birch, P.V., 1995. The ensemble properties of comets: Results from narrowband photometry of 85 comets, 1976-1992. *Icarus* 118, 223-270.
- A'Hearn, M.F., Belton, M.J., Delamere, W.A., Feaga, L.M., Hampton, D., Kissel, J., Klaasen, K.P., McFadden, L.A., Meech, K.J., Melosh, H.J., 2011. EPOXI at comet Hartley 2. *science* 332, 1396-1400.
- Agarwal, J., Jewitt, D., Mutchler, M., Weaver, H., Larson, S., 2017. A binary main-belt comet. *Nature* 549, 357-359.
- Allamandola, L., Sandford, S., Valero, G., 1988. Photochemical and thermal evolution of interstellar/precometary ice analogs. *Icarus* 76, 225-252.
- Altwegg, K., Balsiger, H., Bar-Nun, A., Berthelier, J.-J., Bieler, A., Bochsler, P., Briois, C., Calmonte, U., Combi, M., De Keyser, J., 2015. 67P/Churyumov-Gerasimenko, a Jupiter family comet with a high D/H ratio. *science* 347.
- Altwegg, K., Balsiger, H., Bar-Nun, A., Berthelier, J.-J., Bieler, A., Bochsler, P., Briois, C., Calmonte, U., Combi, M.R., Cottin, H., 2016. Prebiotic chemicals—amino acid and phosphorus—in the coma of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Science advances* 2, e1600285.
- Anders, E., 1989. Pre-biotic organic matter from comets and asteroids. *Nature* 342, 255-257.
- Anderson, J.D., Wendt, J., 1995. *Computational fluid dynamics*. Springer.
- Balsiger, H., Altwegg, K., Bochsler, P., Eberhardt, P., Fischer, J., Graf, S., Jäckel, A., Kopp, E., Langer, U., Mildner, M., Müller, J., Riesen, T., Rubin, M., Scherer, S., Wurz, P., Wüthrich, S., Arijs, E., Delanoye, S., Keyser, J.D., Neefs, E., Nevejans, D., Rème, H., Aoustin, C., Mazelle, C., Médale, J.-L., Sauvaud, J.A., Berthelier, J.-J., Bertaux, J.-L., Duvet, L., Illiano, J.-M., Fuselier, S.A., Ghielmetti, A.G., Magoncelli, T., Shelley, E.G., Korth, A., Heerlein, K., Lauche, H., Livi, S., Loose, A., Mall, U., Wilken, B., Gliem, F., Fiethe, B., Gombosi, T.I., Block, B., Carignan, G.R., Fisk, L.A., Waite, J.H., Young, D.T., Wollnik, H., 2007. Rosina – Rosetta Orbiter Spectrometer for Ion and Neutral Analysis. *Space Science Reviews* 128, 745-801.
- Bardyn, A., 2016. Caractérisation de la matière organique contenue dans les particules de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko par spectrométrie de masse avec l'instrument COSIMA de la sonde Rosetta - Thèse de doctorat - Université Paris Est. Paris-Est.
- Bardyn, A., Baklouti, D., Cottin, H., Fray, N., Briois, C., Paquette, J., Stenzel, O., Engrand, C., Fischer, H., Hornung, K., 2017. Carbon-rich dust in comet 67P/Churyumov-Gerasimenko measured by COSIMA/Rosetta. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 469, S712-S722.
- Bentley, M.S., Schmied, R., Mannel, T., Torkar, K., Jeszenszky, H., Romstedt, J., Levasseur-Regourd, A.-C., Weber, I., Jessberger, E.K., Ehrenfreund, P., 2016. Aggregate dust particles at comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Nature* 537, 73.
- Berger, E.L., Zega, T.J., Keller, L.P., Lauretta, D.S., 2011. Evidence for aqueous activity on comet 81P/Wild 2 from sulfide mineral assemblages in Stardust samples and CI chondrites. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 75, 3501-3513.
- Bernstein, M.P., Dworkin, J.P., Sandford, S.A., Cooper, G.W., Allamandola, L.J., 2002. Racemic amino acids from the ultraviolet photolysis of interstellar ice analogues. *Nature* 416, 401.

- Bernstein, M.P., Sandford, S.A., Allamandola, L.J., 1999. Life's far-flung raw materials. *Scientific American* 281, 42-49.
- Bernstein, M.P., Sandford, S.A., Allamandola, L.J., Chang, S., Scharberg, M.A., 1995. Organic compounds produced by photolysis of realistic interstellar and cometary ice analogs containing methanol.
- Bessel, M., Wickramasinghe, N., 1975. Polyoxymethylene polymers as interstellar grains. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 170, 11P-16P.
- Bibring, J.-P., Langevin, Y., Carter, J., Eng, P., Gondet, B., Jorda, L., Le Mouélic, S., Mottola, S., Pilorget, C., Poulet, F., 2015. 67P/Churyumov-Gerasimenko surface properties as derived from CIVA panoramic images. *science* 349.
- Biraud, F., Bourgois, G., Crovisier, J., Fillit, R., Gerard, E., Kazes, I., 1974. OH observation of comet Kohoutek (1973f) at 18 cm wavelength. *Astronomy and Astrophysics* 34, 163.
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., 2019. Complex organic molecules in comets from remote-sensing observations at millimeter wavelengths. *ACS Earth and Space Chemistry* 3, 1550-1555.
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Colom, P., Crovisier, J., Henry, F., Lellouch, E., Winnberg, A., Johansson, L.E., Gunnarsson, M., Rickman, H., 2002. The 1995–2002 long-term monitoring of Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) at radio wavelength, *Cometary Science after Hale-Bopp*. Springer, pp. 5-14.
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Colom, P., Crovisier, J., Lecacheux, A., Frisk, U., Hjalmarsen, Å., Olberg, M., Sandqvist, A., 2009. Periodic variation in the water production of comet C/2001 Q4 (NEAT) observed with the Odin satellite. *Astronomy & Astrophysics* 501, 359-366.
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Davies, J., Matthews, H., Wink, J., Rauer, H., Colom, P., Dent, W., Despois, D., 1999. Spectroscopic monitoring of comet C/1996 B2 (Hyakutake) with the JCMT and IRAM radio telescopes. *The Astronomical Journal* 118, 1850.
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Lecacheux, A., Frisk, U., Hjalmarsen, Å., Olberg, M., Florén, H.-G., Sandqvist, A., Kwok, S., 2007. Submillimetre observations of comets with Odin: 2001–2005. *Planetary and Space Science* 55, 1058-1068.
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Lis, D., Moreno, R., Colom, P., Henry, F., Herpin, F., Paubert, G., Womack, M., 2006. Radio wavelength molecular observations of comets C/1999 T1 (McNaught-Hartley), C/2001 A2 (LINEAR), C/2000 WM1 (LINEAR) and 153P/Ikeya-Zhang. *Astronomy & Astrophysics* 449, 1255-1270.
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Debout, V., Crovisier, J., Boissier, J., Lis, D., Russo, N.D., Moreno, R., Colom, P., Paubert, G., 2014. Complex organic molecules in comets C/2012 F6 (Lemmon) and C/2013 R1 (Lovejoy): Detection of ethylene glycol and formamide. *Astronomy & Astrophysics* 566, L5.
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Hofstadter, M., Lellouch, E., Choukroun, M., Gulakis, S., Crovisier, J., Schloerb, F., Rezac, L., Von Allmen, P., 2019. Long-term monitoring of the outgassing and composition of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko with the Rosetta/MIRO instrument. *Astronomy & Astrophysics* 630, A19.
- Biver, N., Lis, D., Fray, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Boissier, J., Colom, P., Dello-Russo, N., Moreno, R., Vervack, R., 2008. Molecular composition of comet 8P/Tuttle from radio observations with the IRAM and CSO telescopes. *LPICo* 1405, 8151.
- Bockelée-Morvan, D., 2011. An overview of comet composition. *Proceedings of the International Astronomical Union* 7, 261-274.
- Bockelée-Morvan, D., Biver, N., 2017. The composition of cometary ices. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 375, 20160252.
- Bockelée-Morvan, D., Boissier, J., Biver, N., Crovisier, J., 2010. No compelling evidence of distributed production of CO in Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) from millimeter interferometric data and a re-analysis of near-IR lines. *Icarus* 210, 898-915.
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., 1992. Formaldehyde in comets. II-Excitation of the rotational lines. *Astronomy and Astrophysics* 264, 282-291.
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Colom, P., Despois, D., 1994. The rotational lines of methanol in comets Austin 1990 V and Levy 1990 XX. *Astronomy and Astrophysics* 287, 647-665.
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Mumma, M., Weaver, H., 2004. The composition of cometary volatiles. *Comets II* 1, 391-423.

Bockelée-Morvan, D., Lis, D., Wink, J., Despois, D., Crovisier, J., Bachiller, R., Benford, D., Biver, N., Colom, P., Davies, J., 2000. New molecules found in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp). Investigating the link between cometary and interstellar material. *Astronomy and Astrophysics* 353, 1101-1114.

Bockelée-Morvan, D., Rickman, H., 1997. C/1995 O1 (Hale-Bopp): Gas production curves and their interpretation. *Earth, Moon, and Planets* 79, 55-77.

Bockelée-Morvan, D., Gautier, D., Hersant, F., Huré, J.-M., Robert, F., 2002. Turbulent radial mixing in the solar nebula as the source of crystalline silicates in comets. *Astronomy & Astrophysics* 384, 1107-1118.

Bodewits, D., Farnham, T., A'Hearn, M., Feaga, L., McKay, A., Schleicher, D., Sunshine, J., 2014. The evolving activity of the dynamically young comet C/2009 P1 (Garradd). *The Astrophysical Journal* 786, 48.

Boice, D., Huebner, W., Sablik, M., Konno, I., 1990. Distributed coma sources and the CH sub 4/CO ratio in Comet Halley. *Geophysical Research Letters (American Geophysical Union);(United States)* 17.

Boice, D., Naegeli, D., Huebner, W., 1989. Physico-chemical properties of formaldehyde-ice-dust mixtures, *Physics and Mechanics of Cometary Materials*.

Boissier, J., 2007. Etude des comètes en interférométrie millimétrique - Thèse de doctorat - Université Paris 7.

Borg, J., Chaumont, J., Langevin, Y., Maurette, M., Jouret, C., 1980. Solar wind radiation damage in lunar dust grains and the characteristics of the ancient solar wind, *The Ancient Sun: Fossil Record in the Earth, Moon and Meteorites*, pp. 431-461.

Bossa, J.-B., Borget, F., Duvernay, F., Theulé, P., Chiavassa, T., 2008. Formation of neutral methylcarbamic acid (CH₃NHCOOH) and methylammonium methylcarbamate [CH₃NH₃⁺][CH₃NHCO₂⁻] at low temperature. *The Journal of Physical Chemistry A* 112, 5113-5120.

Bossa, J.-B., Duvernay, F., Theulé, P., Borget, F., d'Hendecourt, L., Chiavassa, T., 2009. Methylammonium methylcarbamate thermal formation in interstellar ice analogs: a glycine salt precursor in protostellar environments. *Astronomy & Astrophysics* 506, 601-608.

Bossa, J.B., Borget, F., Duvernay, F., Theulé, P., Chiavassa, T., 2010. How a usual carbamate can become an unusual intermediate: A new chemical pathway to form glycinate in the interstellar medium. *Journal of Physical Organic Chemistry* 23, 333-339.

Bradley, J., 2003. The astromineralogy of interplanetary dust particles, *Astromineralogy*. Springer, pp. 217-235.

Brooke, T., Weaver, H., Chin, G., Bockelée-Morvan, D., Kim, S., Xu, L.-H., 2003. Spectroscopy of Comet Hale-Bopp in the infrared. *Icarus* 166, 167-187.

Brownlee, D., 2014. The Stardust mission: analyzing samples from the edge of the solar system. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences* 42, 179-205.

Brownlee, D., Tsou, P., Aléon, J., Alexander, C.M.D., Araki, T., Bajt, S., Baratta, G.A., Bastien, R., Bland, P., Bleuet, P., 2006. Comet 81P/Wild 2 under a microscope. *science* 314, 1711-1716.

Brownlee, D.E., 1985. Cosmic dust: Collection and research. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences* 13, 147-173.

Brownlee, D.E., Tsou, P., Anderson, J., Hanner, M., Newburn, R., Sekanina, Z., Clark, B., Hörz, F., Zolensky, M., Kissel, J., 2003. Stardust: Comet and interstellar dust sample return mission. *Journal of Geophysical Research: Planets* 108.

Burton, A.S., McLain, H., Glavin, D.P., Elsila, J.E., Davidson, J., Miller, K.E., Andronikov, A.V., Lauretta, D., Dworkin, J.P., 2015. Amino acid analyses of R and CK chondrites. *Meteoritics & Planetary Science* 50, 470-482.

Butlerov, A.M., 1861. Einiges über die chemische Structur der Körper. *Zeitschrift für Chemie* 4, 549-560.

Capaccioni, F., Coradini, A., Filacchione, G., Erard, S., Arnold, G., Drossart, P., De Sanctis, M., Bockelée-Morvan, D., Capria, M., Tosi, F., 2015. The organic-rich surface of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko as seen by VIRTIS/Rosetta. *science* 347, aaa0628.

Caselli, P., Ceccarelli, C., 2012. Our astrochemical heritage. *The Astronomy and Astrophysics Review* 20, 56.

Choukroun, M., Altwegg, K., Kührt, E., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Drążkowska, J., Hérique, A., Hilchenbach, M., Marschall, R., Pätzold, M., 2020. Dust-to-Gas and Refractory-to-Ice Mass Ratios of Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko from Rosetta Observations. *SSRv* 216, 44.

Choukroun, M., Keihm, S., Schloerb, F., Gulkis, S., Lellouch, E., Leyrat, C., von Allmen, P., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., 2015. Dark side of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko in Aug.–Oct. 2014-MIRO/Rosetta continuum observations of polar night in the southern regions. *Astronomy & Astrophysics* 583, A28.

Chyba, C., Sagan, C., 1992. Endogenous production, exogenous delivery and impact-shock synthesis of organic molecules: an inventory for the origins of life. *Nature* 355, 125-132.

Chyba, C.F., Thomas, P.J., Brookshaw, L., Sagan, C., 1990. Cometary delivery of organic molecules to the early Earth. *science* 249, 366-373.

Clark, B., Mason, L., Kissel, J., 1988. Systematics of the “CHON” and other light-element particle populations in Comet P/Halley, *Exploration of Halley’s Comet*. Springer, pp. 779-784.

Cochran, A.L., Levasseur-Regourd, A.-C., Cordiner, M., Hadamcik, E., Lasue, J., Gicquel, A., Schleicher, D.G., Charnley, S.B., Mumma, M.J., Paganini, L., 2015. The composition of comets. *Space Science Reviews* 197, 9-46.

Colangeli, L., Brucato, J., Bar-Nun, A., Hudson, R., Moore, M., 2004. Laboratory experiments on cometary materials. *Comets II*, 695-717.

Colom, P., Crovisier, J., Bockelée-Morvan, D., Despois, D., Paubert, G., 1992. Formaldehyde in comets. I-Microwave observations of P/Brorsen-Metcalf (1989 X), Austin (1990 V) and Levy (1990 XX). *Astronomy and Astrophysics* 264, 270-281.

Combes, M., Moroz, V., Crovisier, J., Encrenaz, T., Bibring, J.-P., Grigoriev, A., Sanko, N., Coron, N., Crifo, J.-F., Gispert, R., 1988. The 2.5–12 μm spectrum of Comet Halley from the IKS-VEGA experiment. *Icarus* 76, 404-436.

Combi, M., Bertaux, J.-L., Quémerais, E., Ferron, S., Mäkinen, J., Aptekar, G., 2014. Water Production in Comets C/2011 I4 (PanSTARRS) and C/2012 f6 (Lemmon) from observations with SOHO/SWAN. *The Astronomical Journal* 147, 126.

Combi, M.R., 1989. The outflow speed of the coma of Halley's comet. *Icarus* 81, 41-50.

Combi, M.R., Mäkinen, J.T.T., Bertaux, J.-L., Quémerais, E., 2005. Temporal deconvolution of the hydrogen coma: II. Pre-and post-perihelion activity of Comet Hyakutake (1996 B2). *Icarus* 177, 228-245.

Cooke, A., Wickramasinghe, N., 1977. Polyoxymethylene co-polymers on grains. *Astrophysics and Space Science* 50, 43-53.

Cordiner, M., Milam, S., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Roth, N., Bergin, E., Jehin, E., Remijan, A., Charnley, S., Mumma, M., 2020. Unusually high CO abundance of the first active interstellar comet. *Nature Astronomy*, 1-6.

Cordiner, M., Remijan, A., Boissier, J., Milam, S., Mumma, M., Charnley, S., Paganini, L., Villanueva, G., Bockelée-Morvan, D., Kuan, Y.-J., 2014. Mapping the release of volatiles in the inner comae of comets C/2012 F6 (Lemmon) and C/2012 S1 (ISON) using the Atacama Large Millimeter/Submillimeter Array. *The Astrophysical Journal Letters* 792, L2.

Cottin, H., 1999. *Chimie organique de l'environnement cométaire: étude expérimentale de la contribution de la composante organique réfractaire à la phase gazeuse*. Université Paris XII, Créteil, p. 171.

Cottin, H., Bachir, S., Raulin, F., Gazeau, M.-C., 2002. Photodegradation of hexamethylenetetramine by VUV and its relevance for CN and HCN extended sources in comets. *Advances in Space Research* 30, 1481-1488.

Cottin, H., Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., Raulin, F., 2004. Origin of cometary extended sources from degradation of refractory organics on grains: polyoxymethylene as formaldehyde parent molecule. *Icarus* 167, 397-416.

Cottin, H., Fray, N., 2008. Distributed sources in comets. *Origin and Early Evolution of Comet Nuclei*, 179-197.

Cottin, H., Gazeau, M.-C., Doussin, J.-F., Raulin, F., 2000. An experimental study of the photodegradation of polyoxymethylene at 122, 147 and 193 nm. *Journal of photochemistry and photobiology A: Chemistry* 135, 53-64.

Cottin, H., Gazeau, M., Benilan, Y., Raulin, F., 2001. Polyoxymethylene as parent molecule for the formaldehyde extended source in comet Halley. *The Astrophysical Journal* 556, 417.

Cottin, H., Gazeau, M., Doussin, J., Raulin, F., 1999. SEMA Ph. Or. E COMETAIRE, a tool for the study of the photochemical decomposition of probable large organic molecules in comets. first application: Polyoxymethylene. *Physics and Chemistry of the Earth, Part C: Solar, Terrestrial & Planetary Science* 24, 597-602.

Cottin, H., Kotler, J.M., Bartik, K., Cleaves, H.J., Cockell, C.S., de Vera, J.-P.P., Ehrenfreund, P., Leuko, S., Ten Kate, I.L., Martins, Z., 2017. Astrobiology and the Possibility of Life on Earth and Elsewhere.... *Space Science Reviews* 209, 1-42.

Crifo, J., 1994. Elements of cometary aeronomy. *Current science (Bangalore)* 66, 583-602.

Crifo, J., 1995. A general physicochemical model of the inner coma of active comets. 1: Implications of spatially distributed gas and dust production. *The Astrophysical Journal* 445, 470-488.

Crifo, J., Rodionov, A., 1997. The dependence of the circumnuclear coma structure on the properties of the nucleus. *Icarus* 129, 72-93.

Crovisier, J., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Boissier, J., Colom, P., Lis, D.C., 2009. The chemical diversity of comets: synergies between space exploration and ground-based radio observations. *Earth, Moon, and Planets* 105, 267-272.

Crovisier, J., Colom, P., Biver, N., Bockelee-Morvan, D., Agundez, M., Santos-Sanz, P., Opitom, C., Jehin, E., Manfroid, J., Gillon, M., Gonzalez, J.J., Karhula, T., Granslo, B.H., Green, D.W.E., Souza, W., 2013. Comet C/2012 S1 (Ison). *Central Bureau Electronic Telegrams* 3711, 1.

Crovisier, J., Encrenaz, T., Combes, M., 1991. Carbon suboxide in comet Halley. *Nature* 353, 610-610.

Crovisier, J., Leech, K., Bockelee-Morvan, D., Brooke, T.Y., Hanner, M.S., Altieri, B., Keller, H.U., Lellouch, E., 1997. The spectrum of comet Hale-Bopp (C/1995 O1) observed with the Infrared Space Observatory at 2.9 astronomical units from the Sun. *science* 275, 1904-1907.

Danger, G., Duvernay, F., Theulé, P., Borget, F., Chiavassa, T., 2012. Hydroxyacetonitrile (HOCH₂CN) Formation in astrophysical conditions. Competition with the aminomethanol, a glycine precursor. *The Astrophysical Journal* 756, 11.

Danger, G., Fresneau, A., Abou Mrad, N., De Marcellus, P., Orthous-Daunay, F.-R., Duvernay, F., Vuitton, V., d'Hendecourt, L.L.S., Thissen, R., Chiavassa, T., 2016. Insight into the molecular composition of laboratory organic residues produced from interstellar/pre-cometary ice analogues using very high resolution mass spectrometry. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 189, 184-196.

Danger, G., Orthous-Daunay, F.-R., de Marcellus, P., Modica, P., Vuitton, V., Duvernay, F., Flandinet, L., d'Hendecourt, L.L.S., Thissen, R., Chiavassa, T., 2013. Characterization of laboratory analogs of interstellar/cometary organic residues using very high resolution mass spectrometry. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 118, 184-201.

Dartois, E., Engrand, C., Brunetto, R., Duprat, J., Pino, T., Quirico, E., Remusat, L., Bardin, N., Briani, G., Mostefaoui, S., 2013. UltraCarbonaceous Antarctic micrometeorites, probing the Solar System beyond the nitrogen snow-line. *Icarus* 224, 243-252.

De Gregorio, B.T., Stroud, R.M., Cody, G.D., Nittler, L.R., David Kilcoyne, A., Wirick, S., 2011. Correlated microanalysis of cometary organic grains returned by Stardust. *Meteoritics & Planetary Science* 46, 1376-1396.

De Keyser, J., Dhooghe, F., Altwegg, K., Balsiger, H., Berthelier, J.-J., Briois, C., Calmonte, U., Cessateur, G., Combi, M.R., Equeter, E., 2017. Evidence for distributed gas sources of hydrogen halides in the coma of comet 67P/Churyumov–Gerasimenko. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 469, S695-S711.

de Kruif, C.G., Voogd, J., Offringa, J.C.A., 1979. Enthalpies of sublimation and vapour pressures of 14 amino acids and peptides. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 11, 651-656.

Della Corte, V., Rotundi, A., Fulle, M., Ivanovski, S., Green, S.F., Rietmeijer, F.J.M., Colangeli, L., Palumbo, P., Sordini, R., Ferrari, M., Accolla, M., Zakharov, V., Mazzotta Epifani, E., Weissman, P., Gruen, E., Lopez-Moreno, J.J., Rodriguez, J., Bussoletti, E., Crifo, J.-F., Esposito, F., Lamy, P.L., McDonnell, J.A.M., Mennella, V., Molina, A., Morales, R., Moreno, F., Palomba, E., Perrin, J.M., Rodrigo, R., Zarnecki, J.C., Cosi, M., Giovane, F., Gustafson, B., Ortiz, J.L., Jeronimo, J.M., Leese, M.R., Herranz, M., Liuzzi, V., Lopez-Jimenez, A.C., 2016. 67P/C-G Inner Coma dust properties from 2.2 au inbound to 2.0 au outbound to the Sun. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 462, S210-S219.

Despois, D., Cottin, H., 2005. Comets: potential sources of prebiotic molecules for the early Earth, *Lectures in astrobiology*. Springer, pp. 289-352.

DiSanti, M.A., Mumma, M.J., Russo, N.D., Magee-Sauer, K., 2001. Carbon monoxide production and excitation in Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp): Isolation of native and distributed CO sources. *Icarus* 153, 361-390.

DiSanti, M.A., Mumma, M.J., Russo, N.D., Magee-Sauer, K., Novak, R., Rettig, T.W., 1999. Identification of two sources of carbon monoxide in Comet Hale-Bopp. *Nature* 399, 662-665.

Dobrică, E., Engrand, C., Duprat, J., Gounelle, M., Leroux, H., Quirico, E., Rouzaud, J.N., 2009. Connection between micrometeorites and Wild 2 particles: From Antarctic snow to cometary ices. *Meteoritics & Planetary Science* 44, 1643-1661.

Dole, M., 2013. *The Radiation Chemistry of Macromolecules: Volume II*. Elsevier.

Dones, L., Brassier, R., Kaib, N., Rickman, H., 2015. Origin and evolution of the cometary reservoirs. *Space Science Reviews* 197, 191-269.

Dorschner, J., Begemann, B., Henning, T., Jaeger, C., Mutschke, H., 1995. Steps toward interstellar silicate mineralogy. II. Study of Mg-Fe-silicate glasses of variable composition. *Astronomy and Astrophysics* 300, 503.

Duprat, J., Dobrică, E., Engrand, C., Aléon, J., Marrocchi, Y., Mostefaoui, S., Meibom, A., Leroux, H., Rouzaud, J.-N., Gounelle, M., 2010. Extreme deuterium excesses in ultracarbonaceous micrometeorites from central Antarctic snow. *science* 328, 742-745.

Duvernay, F., Danger, G., Theulé, P., Chiavassa, T., Rimola, A., 2014. Formaldehyde chemistry in cometary ices: On the prospective detection of NH₂CH₂OH, HOCH₂OH, and POM by the on-board ROSINA instrument of the Rosetta mission. *The Astrophysical Journal* 791, 75.

Eberhardt, P., 1999. Comet Halley's gas composition and extended sources: Results from the neutral mass spectrometer on Giotto, *Composition and Origin of Cometary Materials*. Springer, pp. 45-52.

Eberhardt, P., Krankowsky, D., Schulte, W., Dolder, U., Lämmerzahl, P., Berthelier, J., Woweries, J., Stubbemann, U., Hodges, R., Hoffman, J., 1988. The CO and N₂ abundance in comet P/Halley, *Exploration of Halley's Comet*. Springer, pp. 481-484.

Ehrenfreund, P., Charnley, S., Wooden, D., 2004. From interstellar material to cometary particles and molecules. *Comets II*, 115-133.

Ehrenfreund, P., Charnley, S.B., 2000. Organic molecules in the interstellar medium, comets, and meteorites: a voyage from dark clouds to the early Earth. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 38, 427-483.

Elsila, J.E., Glavin, D.P., Dworkin, J.P., 2009. Cometary glycine detected in samples returned by Stardust. *Meteoritics & Planetary Science* 44, 1323-1330.

Esmaili, S., Bass, A.D., Cloutier, P., Sanche, L., Huels, M.A., 2018. Glycine formation in CO₂: CH₄: NH₃ ices induced by 0-70 eV electrons. *The Journal of chemical physics* 148, 164702.

Fernández, J.A., 1997. The formation of the Oort cloud and the primitive galactic environment. *Icarus* 129, 106-119.

Festou, M., Keller, H., Weaver, H., 2004. A brief conceptual history of cometary science. *Comets II*, 3-16.

Festou, M.C., 1999. On the existence of distributed sources in comet comae, *Composition and Origin of Cometary Materials*. Springer, pp. 53-67.

Fischer, H., Langbein, W., 1967. Strahlungsinduzierte Reaktionen in Polyoxymethylen. *Kolloid-Zeitschrift und Zeitschrift für Polymere* 216, 329-336.

- Flynn, G., Keller, L., Feser, M., Wirick, S., Jacobsen, C., 2003. The origin of organic matter in the solar system: Evidence from the interplanetary dust particles. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 67, 4791-4806.
- Flynn, G., Sutton, S., 1991. Cosmic dust particle densities-Evidence for two populations of stony micrometeorites, Lunar and Planetary Science Conference Proceedings, pp. 541-547.
- Fomenkova, M., Chang, S., Mukhin, L., 1994. Carbonaceous components in the comet Halley dust. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 58, 4503-4512.
- Fomenkova, M.N., 1999. On the organic refractory component of cometary dust, Composition and Origin of Cometary Materials. Springer, pp. 109-114.
- Fornasier, S., Hasselmann, P., Barucci, M., Feller, C., Besse, S., Leyrat, C., Lara, L., Gutierrez, P.J., Oklay, N., Tubiana, C., 2015. Spectrophotometric properties of the nucleus of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko from the OSIRIS instrument onboard the ROSETTA spacecraft. *Astronomy & Astrophysics* 583, A30.
- Forster, J., Goss, W., Wilson, T., Downes, D., Dickel, H., 1980. A formaldehyde maser in NGC 7538. *Astronomy and Astrophysics* 84, L1-L3.
- Fougere, N., Altwegg, K., Berthelier, J.-J., Bieler, A., Bockelee-Morvan, D., Calmonte, U., Capaccioni, F., Combi, M.R., De Keyser, J., Debout, V., 2016. Three-dimensional direct simulation Monte-Carlo modeling of the coma of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko observed by the VIRTIS and ROSINA instruments on board Rosetta. *Astronomy & Astrophysics* 588, A134.
- Fray, N., Bardyn, A., Cottin, H., Altwegg, K., Baklouti, D., Briois, C., Colangeli, L., Engrand, C., Fischer, H., Glasmachers, A., 2016. High-molecular-weight organic matter in the particles of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Nature* 538, 72-74.
- Fray, N., Bénilan, Y., Biver, N., Bockelee-Morvan, D., Cottin, H., Crovisier, J., Gazeau, M.-C., 2006. Heliocentric evolution of the degradation of polyoxymethylene: Application to the origin of the formaldehyde (H₂CO) extended source in Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp). *Icarus* 184, 239-254.
- Fray, N., Bénilan, Y., Cottin, H., Gazeau, M.-C., Crovisier, J., 2005. The origin of the CN radical in comets: A review from observations and models. *Planetary and Space Science* 53, 1243-1262.
- Fray, N., Bénilan, Y., Cottin, H., Gazeau, M.C., 2004a. New experimental results on the degradation of polyoxymethylene: Application to the origin of the formaldehyde extended source in comets. *Journal of Geophysical Research: Planets* 109.
- Fray, N., Bénilan, Y., Cottin, H., Gazeau, M.C., Minard, R., Raulin, F., 2004b. Experimental study of the degradation of polymers: Application to the origin of extended sources in cometary atmospheres. *Meteoritics & Planetary Science* 39, 581-587.
- Fulle, M., Blum, J., Green, S., Gundlach, B., Herique, A., Moreno, F., Mottola, S., Rotundi, A., Snodgrass, C., 2018. The refractory-to-ice mass ratio in comets. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 482, 3326-3340.
- Fulle, M., Colangeli, L., Agarwal, J., Aronica, A., Della Corte, V., Esposito, F., Grün, E., Ishiguro, M., Ligustri, R., Lopez-Moreno, J.J., Mazzotta Epifani, E., Milani, G., Moreno, F., Palumbo, P., Rodriguez Gomez, J., Rotundi, A., 2010. Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko: the GIADA dust environment model of the Rosetta Mission target.
- Fulle, M., Della Corte, V., Rotundi, A., Green, S., Accolla, M., Colangeli, L., Ferrari, M., Ivanovski, S., Sordini, R., Zakharov, V., 2017. The dust-to-ices ratio in comets and Kuiper belt objects. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 469, S45-S49.
- Fulle, M., Della Corte, V., Rotundi, A., Rietmeijer, F., Green, S., Weissman, P., Accolla, M., Colangeli, L., Ferrari, M., Ivanovski, S., 2016a. Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko preserved the pebbles that formed planetesimals. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 462, S132-S137.
- Fulle, M., Della Corte, V., Rotundi, A., Weissman, P., Juhasz, A., Szego, K., Sordini, R., Ferrari, M., Ivanovski, S., Lucarelli, F., 2015. Density and charge of pristine fluffy particles from comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *The Astrophysical Journal Letters* 802, L12.
- Fulle, M., Marzari, F., Della Corte, V., Fornasier, S., Sierks, H., Rotundi, A., Barbieri, C., Lamy, P.L., Rodrigo, R., Koschny, D., 2016b. Evolution of the dust size distribution of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko from 2.2 AU to perihelion. *The Astrophysical Journal* 821, 19.

- Fulle, M., Mikuz, H., Bosio, S., 1997. Dust environment of Comet Hyakutake 1996B2. *Astronomy and Astrophysics* 324, 1197-1205.
- Garrod, R.T., 2013. A three-phase chemical model of hot cores: The formation of glycine. *The Astrophysical Journal* 765, 60.
- Gérard, E., Crovisier, J., Colom, P., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Rauer, H., 1998. Observations of the OH radical in comet C/1996 B2 (Hyakutake) with the Nançay radio telescope. *Planetary and Space Science* 46, 569-577.
- Gicquel, A., Vincent, J.-B., Agarwal, J., A'Hearn, M.F., Bertini, I., Bodewits, D., Sierks, H., Lin, Z.-Y., Barbieri, C., Lamy, P., 2016. Sublimation of icy aggregates in the coma of comet 67P/Churyumov–Gerasimenko detected with the OSIRIS cameras on board Rosetta. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 462, S57-S66.
- Gladman, B., Marsden, B.G., VanLaerhoven, C., 2008. Nomenclature in the outer Solar System. *The Solar System Beyond Neptune* 43.
- Grassie, N., Roche, R., 1968. The thermal degradation of polyoxymethylene. *Die Makromolekulare Chemie: Macromolecular Chemistry and Physics* 112, 16-33.
- Green, S., McDonnell, J., McBride, N., Colwell, M., Tuzzolino, A., Economou, T., Tsou, P., Clark, B., Brownlee, D., 2004. The dust mass distribution of comet 81P/Wild 2. *Journal of Geophysical Research: Planets* 109.
- Greenberg, J.M., 1998. Making a comet nucleus. *A&A* 330, 375-380.
- Greenberg, J.M., Hage, J., 1990. From interstellar dust to comets-A unification of observational constraints. *The Astrophysical Journal* 361, 260-274.
- Gross, D., Grodsky, G., 1955. On the sublimation of amino acids and peptides. *Journal of the American Chemical Society* 77, 1678-1680.
- Groussin, O., A'Hearn, M., Li, J.-Y., Thomas, P., Sunshine, J., Lisse, C., Meech, K., Farnham, T., Feaga, L., Delamere, W., 2007. Surface temperature of the nucleus of Comet 9P/Tempel 1. *Icarus* 187, 16-25.
- Grün, E., Hanner, M., Peschke, S., Müller, T., Boehnhardt, H., Brooke, T., Campins, H., Crovisier, J., Delahodde, C., Heinrichsen, I., 2001. Broadband infrared photometry of comet Hale-Bopp with ISOPHOT. *Astronomy & Astrophysics* 377, 1098-1118.
- Gunnarsson, M., Bockelée-Morvan, D., Biver, N., Crovisier, J., Rickman, H., 2008. Mapping the carbon monoxide coma of comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1. *Astronomy & Astrophysics* 484, 537-546.
- Gunnarsson, M., Bockelée-Morvan, D., Winnberg, A., Rickman, H., Crovisier, J., Biver, N., Colom, P., Davies, J., Despois, D., Henry, F., 2003. Production and kinematics of CO in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) at large post-perihelion distances. *Astronomy & Astrophysics* 402, 383-393.
- Hadraoui, K., Cottin, H., Ivanovski, S., Zapf, P., Altwegg, K., Benilan, Y., Biver, N., Della Corte, V., Fray, N., Lasue, J., Merouane, S., Rotundi, A., Zakharov, V., 2019. Distributed glycine in comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Astronomy & Astrophysics* 630, A32.
- Hage, J., Greenberg, J.M., 1990. A model for the optical properties of porous grains. *The Astrophysical Journal* 361, 251-259.
- Hagen, W., Allamandola, L., Greenberg, J., 1979. Interstellar molecule formation in grain mantles: The laboratory analog experiments, results and implications. *Astrophysics and Space Science* 65, 215-240.
- Harker, D.E., Woodward, C.E., Wooden, D.H., 2005. The dust grains from 9P/Tempel 1 before and after the encounter with Deep Impact. *science* 310, 278-280.
- Harmon, J., Ostro, S., Benner, L., Rosema, K., Jurgens, R., Winkler, R., Yeomans, D., Choate, D., Cormier, R., Giorgini, J., 1997. Radar detection of the nucleus and coma of comet Hyakutake (C/1996 B2). *science* 278, 1921-1924.
- Hartogh, P., Lis, D.C., Bockelée-Morvan, D., de Val-Borro, M., Biver, N., Küppers, M., Emprechtinger, M., Bergin, E.A., Crovisier, J., Rengel, M., 2011. Ocean-like water in the Jupiter-family comet 103P/Hartley 2. *Nature* 478, 218-220.
- Haser, L., 1957. Distribution d'intensité dans la tête d'une comète, *Bulletin de la Class des Sciences de l'Académie Royale de Belgique*, pp. 740-750.

- Hässig, M., Altwegg, K., Balsiger, H., Bar-Nun, A., Berthelier, J.J., Bieler, A., Bochsler, P., Briois, C., Calmonte, U., Combi, M., De Keyser, J., Eberhardt, P., Fiethe, B., Fuselier, S.A., Galand, M., Gasc, S., Gombosi, T.I., Hansen, K.C., Jäckel, A., Keller, H.U., Kopp, E., Korth, A., Kührt, E., Le Roy, L., Mall, U., Marty, B., Mousis, O., Neefs, E., Owen, T., Rème, H., Rubin, M., Sémon, T., Tornow, C., Tzou, C.-Y., Waite, J.H., Wurz, P., 2015. Time variability and heterogeneity in the coma of 67P/Churyumov-Gerasimenko. *science* 347.
- Horner, J., Evans, N., Bailey, M., Asher, D., 2003. The populations of comet-like bodies in the Solar system. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 343, 1057-1066.
- Hornung, K., Merouane, S., Hilchenbach, M., Langevin, Y., Mellado, E.M., Della Corte, V., Kissel, J., Engrand, C., Schulz, R., Ryno, J., Silen, J., the, C.t., 2016. A first assessment of the strength of cometary particles collected in-situ by the COSIMA instrument onboard ROSETTA. *Planetary and Space Science* 133, 63-75.
- Hsieh, H.H., Denneau, L., Wainscoat, R.J., Schörghofer, N., Bolin, B., Fitzsimmons, A., Jedicke, R., Kleyna, J., Micheli, M., Vereš, P., 2015. The main-belt comets: the Pan-STARRS1 perspective. *Icarus* 248, 289-312.
- Hsieh, H.H., Jewitt, D., 2006. A population of comets in the main asteroid belt. *science* 312, 561-563.
- Huebner, W., 1987. First polymer in space identified in comet Halley. *science* 237, 628-630.
- Huebner, W., Benkhoff, J., Capria, M., Coradini, A., De Sanctis, C., Orosei, R., Prialnik, D., 2006. Heat and Gas Diffusion in Comet Nuclei, in: Report, I.S. (Ed.). International Space Science Institute.
- Huebner, W.F., Keady, J.J., Lyon, S., 1992. Solar photo rates for planetary atmospheres and atmospheric pollutants, Solar photo rates for planetary atmospheres and atmospheric pollutants. Springer, pp. 1-289.
- Huntress, W., Alien, M., Delrtsky, M., 1991. Carbon suboxide in comet Halley? *Nature* 352, 316-318.
- Irvine, W., Dickens, J., Lovell, A., áPeter Schloerb, F., Bergin, E., Matthews, H., 1998a. Chemistry in cometary comae. *Faraday discussions* 109, 475-492.
- Irvine, W.M., Bergin, E.A., Dickens, J.E., Jewitt, D., Lovell, A.J., Matthews, H.E., Schloerb, F.P., Senay, M., 1998b. Chemical processing in the coma as the source of cometary HNC. *Nature* 393, 547-550.
- Irvine, W.M., Bergman, P., Lowe, T.B., Matthews, H., McGonagle, D., Nummelin, A., Owen, T., 2003. HCN and HNC in comets C/2000 WM1 (linear) and C/2002 C1 (Ikeya-Zhang). *Origins of life and evolution of the biosphere* 33, 609-619.
- Irvine, W.M., Senay, M., Lovell, A.J., Matthews, H.E., McGonagle, D., Meier, R., 2000. Detection of nitrogen sulfide in comet Hale–Bopp. *Icarus* 143, 412-414.
- Ishii, H.A., Bradley, J.P., Chi, M., Kearsley, A.T., Burchell, M.J., Browning, N.D., Molster, F., 2008. Comparison of comet 81P/Wild 2 dust with interplanetary dust from comets. *science* 319, 447-450.
- Ivanovski, S.L., Della Corte, V., Rotundi, A., Fulle, M., Fougere, N., Bieler, A., Rubin, M., Ivanovska, S., Liuzzi, V., 2017a. Dynamics of non-spherical dust in the coma of 67P/Churyumov–Gerasimenko constrained by GIADA and ROSINA data. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 469, S774-S786.
- Ivanovski, S.L., Zakharov, V.V., Della Corte, V., Crifo, J.-F., Rotundi, A., Fulle, M., 2017b. Dynamics of aspherical dust grains in a cometary atmosphere: I. Axially symmetric grains in a spherically symmetric atmosphere. *Icarus* 282, 333-350.
- Jager, C., Mutschke, H., Henning, T., 1998. Optical properties of carbonaceous dust analogues. *Astronomy and Astrophysics* 332, 291-299.
- Jewitt, D., 1996. From comets to asteroids: When hairy stars go bald, *Worlds in Interaction: Small Bodies and Planets of the Solar System*. Springer, pp. 185-201.
- Jewitt, D., 2012. The active asteroids. *The Astronomical Journal* 143, 66.
- Jewitt, D., Luu, J., Trujillo, C., 1998. Large Kuiper belt objects: the Mauna Kea 8K CCD survey. *The Astronomical Journal* 115, 2125.
- Jewitt, D.C., Matthews, H.E., 1997. Submillimeter continuum observations of Comet Hyakutake (1196 B2). *The Astronomical Journal* 113, 1145.
- Kaib, N.A., Quinn, T., 2009. Reassessing the source of long-period comets. *science* 325, 1234-1236.
- Kamoun, P., Lamy, P., Toth, I., Herique, A., 2014. Constraints on the subsurface structure and density of the nucleus of Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko from Arecibo radar observations. *Astronomy & Astrophysics* 568, A21.

- Keller, H., Barbieri, C., Koschny, D., Lamy, P., Rickman, H., Rodrigo, R., Sierks, H., A'Hearn, M.F., Angrilli, F., Barucci, M., 2010. E-type asteroid (2867) Steins as imaged by OSIRIS on board Rosetta. *science* 327, 190-193.
- Kissel, J., Brownlee, D., Büchler, K., Clark, B., Fechtig, H., Grün, E., Hornung, K., Igenbergs, E., Jessberger, E., Krueger, F., 1986. Composition of comet Halley dust particles from Giotto observations. *Nature* 321, 336-337.
- Kissel, J., Krueger, F., 1987. The organic component in dust from comet Halley as measured by the PUMA mass spectrometer on board Vega 1. *Nature* 326, 755-760.
- Knight, M.M., Schleicher, D.G., 2014. Observations of comet ISON (C/2012 S1) from Lowell Observatory. *The Astronomical Journal* 149, 19.
- Küppers, M., Bertini, I., Fornasier, S., Gutierrez, P.J., Hviid, S.F., Jorda, L., Keller, H.U., Knollenberg, J., Koschny, D., Kramm, R., 2005. A large dust/ice ratio in the nucleus of comet 9P/Tempel 1. *Nature* 437, 987-990.
- Kvenvolden, K., Lawless, J., Pering, K., Peterson, E., Flores, J., Ponnampereuma, C., Kaplan, I.R., Moore, C., 1970. Evidence for extraterrestrial amino-acids and hydrocarbons in the Murchison meteorite. *Nature* 228, 923.
- Lämmerzahl, P., Krankowsky, D., Hodges, R., Stubbemann, U., Woweries, J., Herrwerth, I., Berthelier, J., Illiano, J., Eberhardt, P., Dolder, U., 1988. Expansion velocity and temperatures of gas and ions measured in the coma of comet P/Halley, *Exploration of Halley's Comet*. Springer, pp. 169-173.
- Lamy, P., Herique, A., Toth, I., 2015. The subsurface structure and density of cometary nuclei. *Space Science Reviews* 197, 85-99.
- Lamy, P.L., Perrin, J.-M., 1988. Optical properties of organic grains: Implications for interplanetary and cometary dust. *Icarus* 76, 100-109.
- Langevin, Y., Hilchenbach, M., Ligier, N., Merouane, S., Hornung, K., Engrand, C., Schulz, R., Kissel, J., Rynö, J., Eng, P., 2016. Typology of dust particles collected by the COSIMA mass spectrometer in the inner coma of 67P/Churyumov Gerasimenko. *Icarus* 271, 76-97.
- Langevin, Y., Kissel, J., Bertaux, J., Chassefiere, E., 1988. First statistical analysis of 5000 mass spectra of cometary grains obtained by PUMA 1 (Vega 1) and PIA (Giotto) impact ionization mass spectrometers in the compressed modes, *Exploration of Halley's Comet*. Springer, pp. 761-766.
- Lauretta, D., DellaGiustina, D., Bennett, C., Golish, D., Becker, K., Balram-Knutson, S., Barnouin, O., Becker, T., Bottke, W., Boynton, W., 2019. The unexpected surface of asteroid (101955) Bennu. *Nature* 568, 55-60.
- Lawler, M.E., Brownlee, D., 1992. CHON as a component of dust from comet Halley. *Nature* 359, 810-812.
- Le Roy, L., 2011. Préparation à la caractérisation in-situ de la matière organique cométaire par spectrométrie de masse: application à l'instrument COSIMA - Thèse de doctorat - Université d'Orléans.
- Le Roy, L., Altwegg, K., Balsiger, H., Berthelier, J.-J., Bieler, A., Briois, C., Calmonte, U., Combi, M.R., De Keyser, J., Dhooghe, F., 2015a. Inventory of the volatiles on comet 67P/Churyumov-Gerasimenko from Rosetta/ROSINA. *Astronomy & Astrophysics* 583, A1.
- Le Roy, L., Bardyn, A., Briois, C., Cottin, H., Fray, N., Thirkell, L., Hilchenbach, M., 2015b. COSIMA calibration for the detection and characterization of the cometary solid organic matter. *Planetary and Space Science* 105, 1-25.
- Le Roy, L., Briani, G., Briois, C., Cottin, H., Fray, N., Thirkell, L., Poulet, G., Hilchenbach, M., 2012. On the prospective detection of polyoxymethylene in comet 67P/Churyumov-Gerasimenko with the COSIMA instrument onboard Rosetta. *Planetary and Space Science* 65, 83-92.
- Leroux, H., 2012. Fine-grained material of 81P/Wild 2 in interaction with the Stardust aerogel. *Meteoritics & Planetary Science* 47, 613-622.
- Levasseur-Regourd, A.-C., Agarwal, J., Cottin, H., Engrand, C., Flynn, G., Fulle, M., Gombosi, T., Langevin, Y., Lasue, J., Mannel, T., Merouane, S., Poch, O., Thomas, N., Westphal, A., 2018. Cometary Dust. *Space Science Reviews* 214, 64.

- Levasseur-Regourd, A.C., Zolensky, M., Lasue, J., 2008. Dust in cometary comae: present understanding of the structure and composition of dust particles. *Planetary and Space Science* 56, 1719-1724.
- Levison, H.F., 1996. Comet taxonomy, *Completing the Inventory of the Solar System*, pp. 173-191.
- Lien, D., 1990. Dust in comets. I-Thermal properties of homogeneous and heterogeneous grains. *The Astrophysical Journal* 355, 680-692.
- Lin, Z., Weiler, M., Rauer, H., Ip, W., 2007. Photometry and imaging of comet C/2004 Q2 (Machholz) at Lulin and La Silla. *Astronomy & Astrophysics* 469, 771-776.
- Lis, D.C., Bockelée-Morvan, D., Güsten, R., Biver, N., Stutzki, J., Delorme, Y., Durán, C., Wiesemeyer, H., Okada, Y., 2019. Terrestrial deuterium-to-hydrogen ratio in water in hyperactive comets. *Astronomy & Astrophysics* 625, L5.
- Lisse, C.M., Wolk, S.J., Christian, D.J., Dennerl, K., Bodewits, D., Combi, M.R., Lepri, S.T., Zurbuchen, T.H., Geophys, J., Opitom, C., Jehin, E., Manfroid, J., Gillon, M., Souza, W., Baroni, S., Granslo, B.H., Cernis, K., Paradowski, M.L., Chambo, J.J., Yoshimoto, K., Gonzalez, J.J., Bortle, J.E., 2013. Comet C/2012 S1 (Ison). *Central Bureau Electronic Telegrams* 3719, 1.
- Love, S., Brownlee, D., 1993. A direct measurement of the terrestrial mass accretion rate of cosmic dust. *science* 262, 550-553.
- Martins, Z., Sephton, M., 2009. Extraterrestrial amino acids. *Amino Acids, Peptides and Proteins in Organic Chemistry: Origins and Synthesis of Amino Acids* 1, 1-42.
- Marty, B., Altwegg, K., Balsiger, H., Bar-Nun, A., Bekaert, D., Berthelier, J.-J., Bieler, A., Briois, C., Calmonte, U., Combi, M., 2017. Xenon isotopes in 67P/Churyumov-Gerasimenko show that comets contributed to Earth's atmosphere. *science* 356, 1069-1072.
- Mattauch, J., Herzog, R., 1934. Über einen neuen Massenspektrographen. *Zeitschrift für Physik* 89, 786-795.
- Maurette, M., Olinger, C., Michel-Levy, M.C., Kurat, G., Pourchet, M., Brandstätter, F., Bourot-Denise, M., 1991. A collection of diverse micrometeorites recovered from 100 tonnes of Antarctic blue ice. *Nature* 351, 44-47.
- McDonnell, J., Lamy, P., Pankiewicz, G., 1991. Physical properties of cometary dust, *International Astronomical Union Colloquium*. Cambridge University Press, pp. 1043-1073.
- Meier, R., Eberhardt, P., Krankowsky, D., Hodges, R., 1993. The extended formaldehyde source in comet P/Halley. *Astronomy and Astrophysics* 277, 677.
- Meinert, C., Filippi, J.J., de Marcellus, P., Le Sergeant d'Hendecourt, L., Meierhenrich, U.J., 2012. N-(2-Aminoethyl) glycine and amino acids from interstellar ice analogues. *ChemPlusChem* 77, 186-191.
- Meinert, C., Myrgorodska, I., De Marcellus, P., Buhse, T., Nahon, L., Hoffmann, S.V., d'Hendecourt, L.L.S., Meierhenrich, U.J., 2016. Ribose and related sugars from ultraviolet irradiation of interstellar ice analogues. *science* 352, 208-212.
- Mercier, J.P., Maréchal, E., 1996. *Chimie des polymères: synthèses, réactions, dégradations*. PPUR presses polytechniques.
- Merouane, S., Zaprudin, B., Stenzel, O., Langevin, Y., Altobelli, N., Della Corte, V., Fischer, H., Fulle, M., Hornung, K., Silén, J., 2016. Dust particle flux and size distribution in the coma of 67P/Churyumov-Gerasimenko measured in situ by the COSIMA instrument on board Rosetta. *Astronomy & Astrophysics* 596, A87.
- Messenger, S., 2002. Opportunities for the stratospheric collection of dust from short-period comets. *Meteoritics & Planetary Science* 37, 1491-1505.
- Milam, S.N., Remijan, A.J., Womack, M., Abrell, L., Ziurys, L.M., Wyckoff, S., Apponi, A., Friedel, D., Snyder, L., Veal, J., 2006. Formaldehyde in comets C/1995 O1 (Hale-Bopp), C/2002 T7 (LINEAR), and C/2001 Q4 (NEAT): Investigating the cometary origin of H₂CO. *The Astrophysical Journal* 649, 1169.
- Miller, S.L., 1953. A production of amino acids under possible primitive earth conditions. *science* 117, 528-529.
- Miller, S.L., Schlesinger, G., 1984. Carbon and energy yields in prebiotic syntheses using atmospheres containing CH₄, CO and CO₂. *Origins of life* 14, 83-90.

- Mitchell, D., Lin, R., Anderson, K., Carlson, C., Curtis, D., Korth, A., Reme, H., Sauvaud, J., d'Uston, C., Mendis, D., 1987. Evidence for chain molecules enriched in carbon, hydrogen, and oxygen in comet Halley. *science* 237, 626-628.
- Mitchell, D., Lin, R., Carlson, C., Korth, A., Reme, H., Mendis, D., 1992. The origin of complex organic ions in the coma of comet Halley. *Icarus* 98, 125-133.
- Miyamoto, S., 1933. A theory of the rate of sublimation. *Transactions of the Faraday Society* 29, 794-797.
- Möller, G., Jackson, W.M., 1990. Laboratory studies of polyoxymethylene: application to comets. *Icarus* 86, 189-197.
- Moore, M., Ferrante, R., Nuth Iii, J., 1996. Infrared spectra of proton irradiated ices containing methanol. *Planetary and Space Science* 44, 927-935.
- Moore, M., Khanna, R., 1991. Infrared and mass spectral studies of proton irradiated H₂O+ CO₂ ice: Evidence for carbonic acid. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular Spectroscopy* 47, 255-262.
- Moore, M.H., Tanabe, T., 1990. Mass spectra of sputtered polyoxymethylene-implications for comets. *The Astrophysical Journal* 365, L39-L42.
- Morbidelli, A., 2008. Comets and their reservoirs: Current dynamics and primordial evolution, *Trans-Neptunian objects and comets*. Springer, pp. 79-163.
- Moreno, F., Pozuelos, F., Aceituno, F., Casanova, V., Duffard, R., López-Moreno, J., Molina, A., Ortiz, J., Santos-Sanz, P., Sota, A., 2014. On the dust environment of comet C/2012 S1 (ISON) from 12 AU pre-perihelion to the end of its activity around perihelion. *The Astrophysical Journal* 791, 118.
- Mount, G.H., Rottman, G.J., 1981. The solar spectral irradiance 1200–3184 Å near solar maximum: July 15, 1980. *Journal of Geophysical Research: Space Physics* 86, 9193-9198.
- Müller, T., Ďurech, J., Ishiguro, M., Mueller, M., Krühler, T., Yang, H., Kim, M.-J., O'Rourke, L., Usui, F., Kiss, C., 2017. Hayabusa-2 mission target asteroid 162173 Ryugu (1999 JU3): Searching for the object's spin-axis orientation. *Astronomy & Astrophysics* 599, A103.
- Mumma, M.J., Charnley, S.B., 2011. The chemical composition of comets emerging taxonomies and natal heritage. *Annual review of astronomy and astrophysics* 49, 471-524.
- Munoz Caro, G., Meierhenrich, U., Schutte, W., Barbier, B., Segovia, A.A., Rosenbauer, H., Thiemann, W.-P., Brack, A., Greenberg, J., 2002. Amino acids from ultraviolet irradiation of interstellar ice analogues. *Nature* 416, 403-406.
- Munoz Caro, G., Meierhenrich, U., Schutte, W., Barbier, B., Segovia, A.A., Rosenbauer, H., Thiemann, W.-P., Brack, A., Greenberg, J., 2002. Amino acids from ultraviolet irradiation of interstellar ice analogues. *Nature* 416, 403.
- Munoz Caro, G., Meierhenrich, U., Schutte, W., Greenberg, J., 2004. UV-photoprocessing of interstellar ice analogs: Detection of hexamethylenetetramine-based species. *Astronomy & Astrophysics* 413, 209-216.
- Munoz Caro, G.M., Dartois, E., 2013. Prebiotic chemistry in icy grain mantles in space. An experimental and observational approach. *Chemical Society Reviews* 42, 2173-2185.
- Noguchi, T., Ohashi, N., Tsujimoto, S., Mitsunari, T., Bradley, J.P., Nakamura, T., Toh, S., Stephan, T., Iwata, N., Imae, N., 2015. Cometary dust in Antarctic ice and snow: Past and present chondritic porous micrometeorites preserved on the Earth's surface. *Earth and Planetary Science Letters* 410, 1-11.
- Nuevo, M., Auger, G., Blanot, D., d'Hendecourt, L., 2008. A detailed study of the amino acids produced from the vacuum UV irradiation of interstellar ice analogs. *Origins of Life and Evolution of Biospheres* 38, 37-56.
- Olson, R.J., Pasachoff, J.M., 2002. Comets, meteors, and eclipses: Art and science in early Renaissance Italy. *Meteoritics & Planetary Science* 37, 1563-1578.
- Ootsubo, T., Kawakita, H., Hamada, S., Kobayashi, H., Yamaguchi, M., Usui, F., Nakagawa, T., Ueno, M., Ishiguro, M., Sekiguchi, T., 2012. AKARI near-infrared spectroscopic survey for CO₂ in 18 comets. *The Astrophysical Journal* 752, 15.
- Opitom, C., Jehin, E., Manfroid, J., Gillon, M., 2013. Comets C/2012 F6 (Lemmon), C/2013 E2 (Iwamoto), and 63P/Wild. *Central Bureau Electronic Telegrams* 3530, 1.

- Oró, J., 1961. Comets and the formation of biochemical compounds on the primitive Earth. *Nature* 190, 389-390.
- Ostro, S.J., West, R.D., Janssen, M.A., Lorenz, R.D., Zebker, H.A., Black, G.J., Lunine, J.I., Wye, L.C., Lopes, R.M., Wall, S.D., 2006. Cassini RADAR observations of Enceladus, Tethys, Dione, Rhea, Iapetus, Hyperion, and Phoebe. *Icarus* 183, 479-490.
- Pätzold, M., Andert, T., Hahn, M., Asmar, S., Barriot, J.-P., Bird, M., Häusler, B., Peter, K., Tellmann, S., Grün, E., 2016. A homogeneous nucleus for comet 67P/Churyumov–Gerasimenko from its gravity field. *Nature* 530, 63.
- Pendleton, Y.J., Cruikshank, D.P., 1994. Life from the Stars? *S&T* 87, 36.
- Rabek, J.F., 1995. *Polymer photodegradation: mechanisms and experimental methods*. Springer Science & Business Media.
- Rietmeijer, F.J., 2002. The earliest chemical dust evolution in the solar nebula. *Geochemistry* 62, 1-45.
- Rinaldi, G., Della Corte, V., Fulle, M., Capaccioni, F., Rotundi, A., Ivanovski, S.L., Bockelée-Morvan, D., Filacchione, G., D'Aversa, E., Capria, M.T., Tozzi, G.P., Erard, S., Leyrat, C., Palomba, E., Longobardo, A., Ciarniello, M., Taylor, F., Mottola, S., Salatti, M., 2017. Cometary coma dust size distribution from in situ IR spectra. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 469, S598-S605.
- Rodgers, S., Charnley, S., 1998. HNC and HCN in comets. *The Astrophysical Journal Letters* 501, L227.
- Rodgers, S., Charnley, S., 2001. On the origin of HNC in Comet Lee. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 323, 84-92.
- Rodgers, S., Charnley, S., 2005. Suprathermal chemical reactions driven by fast hydrogen atoms in cometary comae. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 356, 1542-1548.
- Roessler, K., Sauer, M., Schulz, R., 1992. Gaseous products from VUV photolysis of cometary solids. *AnGeo* 10, 226-231.
- Russo, N.D., DiSanti, M.A., Mumma, M.J., Magee-Sauer, K., Rettig, T.W., 1998. Carbonyl sulfide in Comets C/1996 B2 (Hyakutake) and C/1995 O1 (Hale–Bopp): Evidence for an extended source in Hale–Bopp. *Icarus* 135, 377-388.
- Russo, N.D., Vervack Jr, R., Kawakita, H., Cochran, A., McKay, A., Harris, W.M., Weaver, H., Lisse, C., DiSanti, M., Kobayashi, H., 2016. The compositional evolution of C/2012 S1 (ISON) from ground-based high-resolution infrared spectroscopy as part of a worldwide observing campaign. *Icarus* 266, 152-172.
- Saiagh, K., Belilla, J., Fray, N., Valorso, R., Cottin, H., 2015. Photostability of glycine and nitrogen basis in cometary grains : application to the transport of organic matter within the primitive Earth., *European Planetary Science Congress, Nantes, France*
- Sandford, S.A., Aléon, J., Alexander, C.M.D., Araki, T., Bajt, S., Baratta, G.A., Borg, J., Bradley, J.P., Brownlee, D.E., Brucato, J.R., 2006. Organics captured from comet 81P/Wild 2 by the Stardust spacecraft. *science* 314, 1720-1724.
- Sandford, S.A., Bajt, S., Clemett, S.J., Cody, G.D., Cooper, G., Degregorio, B.T., de VERA, V., Dworkin, J.P., Elsila, J.E., Flynn, G.J., 2010. Assessment and control of organic and other contaminants associated with the Stardust sample return from comet 81P/Wild 2. *Meteoritics & Planetary Science* 45, 406-433.
- Schleicher, D., Woodney, L., 2007. Comet 8P/Tuttle. *IAUC* 8903, 1.
- Schleicher, D.G., Millis, R.L., Thompson, D.T., Birch, P.V., Martin, R., Tholen, D.J., Piscitelli, J.R., Lark, N.L., Hammel, H.B., 1990. Periodic variations in the activity of Comet P/Halley during the 1985/1986 apparition. *The Astronomical Journal* 100, 896-912.
- Schramm, L., Brownlee, D., Wheelock, M., 1989. Major element composition of stratospheric micrometeorites. *Meteoritics* 24, 99-112.
- Schuhmann, M., Altwegg, K., Balsiger, H., Berthelier, J.-J., De Keyser, J., Fiethe, B., Fuselier, S., Gasc, S., Gombosi, T., Hänni, N., 2019a. Aliphatic and aromatic hydrocarbons in comet 67P/Churyumov-Gerasimenko seen by ROSINA. *Astronomy & Astrophysics* 630, A31.
- Schuhmann, M., Altwegg, K., Balsiger, H., Berthelier, J.-J., De Keyser, J., Fuselier, S.A., Gasc, S., Gombosi, T.I., Hänni, N., Rubin, M., 2019b. CHO-bearing molecules in Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *ACS Earth and Space Chemistry* 3, 1854-1861.

- Schultz, P.H., Hermalyn, B., Veverka, J., 2013. The deep impact crater on 9P/Tempel-1 from Stardust-NExT. *Icarus* 222, 502-515.
- Schulz, R., Stüwe, J., Erd, C., 2005. Coma morphology of three non-periodic comets. *Earth, Moon, and Planets* 97, 387-397.
- Schutte, W., Allamandola, L., Sandford, S., 1993. An experimental study of the organic molecules produced in cometary and interstellar ice analogs by thermal formaldehyde reactions. *Icarus* 104, 118-137.
- Schwehm, G., Schulz, R., 1999. Rosetta goes to comet Wirtanen, Composition and origin of cometary materials. Springer, pp. 313-319.
- Senay, M., Matthews, H., Jewitt, D., 1996. Comet C/1996 B2 (Hyakutake). *IAUC* 6335, 1.
- Shalaby, S., 1979. Radiative degradation of synthetic polymers: chemical, physical, environmental, and technological considerations. *J. Polym. Sci., Part D* 14.
- Sierks, H., Barbieri, C., Lamy, P.L., Rodrigo, R., Koschny, D., Rickman, H., Keller, H.U., Agarwal, J., A'hearn, M.F., Angrilli, F., 2015. On the nucleus structure and activity of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *science* 347, aaa1044.
- Sierks, H., Lamy, P., Barbieri, C., Koschny, D., Rickman, H., Rodrigo, R., A'Hearn, M.F., Angrilli, F., Barucci, M.A., Bertaux, J.-L., 2011. Images of asteroid 21 Lutetia: a remnant planetesimal from the early solar system. *science* 334, 487-490.
- Singh, A., Misra, A., Tandon, P., 2013. Quantum chemical analysis for the formation of glycine in the interstellar medium. *Research in Astronomy and Astrophysics* 13, 912.
- Snyder, L.E., Buhl, D., Zuckerman, B., Palmer, P., 1969. Microwave detection of interstellar formaldehyde. *Physical Review Letters* 22, 679.
- Snyder, L.E., Palmer, P., De Pater, I., 1989. Radio detection of formaldehyde emission from comet Halley. *The Astronomical Journal* 97, 246-253.
- Soderblom, L.A., Becker, T., Bennett, G., Boice, D., Britt, D., Brown, R.H., Buratti, B., Isbell, C., Giese, B., Hare, T., 2002. Observations of Comet 19P/Borrelly by the miniature integrated camera and spectrometer aboard Deep Space 1. *science* 296, 1087-1091.
- Stephan, T., 2008. Assessing the elemental composition of comet 81P/Wild 2 by analyzing dust collected by Stardust. *Space Science Reviews* 138, 247-258.
- Stern, S.A., 2003. The evolution of comets in the Oort cloud and Kuiper belt. *Nature* 424, 639-642.
- Sunshine, J., A'hearn, M., Groussin, O., Li, J.-Y., Belton, M., Delamere, W., Kissel, J., Klaasen, K., McFadden, L., Meech, K., 2006. Exposed water ice deposits on the surface of comet 9P/Tempel 1. *science* 311, 1453-1455.
- Thomas, N., 2009. The nuclei of Jupiter family comets: A critical review of our present knowledge. *Planetary and Space Science* 57, 1106-1117.
- Thomas, N., Boice, D., Huebner, W., Keller, H., 1988. Intensity profiles of dust near extended sources on comet Halley. *Nature* 332, 51-52.
- Tielens, A., Whittet, D., 1997. *Molecules in Astrophysics: Probes and Processes* ed EF van Dishoeck. Dordrecht: Kluwer.
- Tosi, F., Capaccioni, F., Filacchione, G., Erard, S., Rouseau, B., Combe, J.-P., Capria, M.T., Leyrat, C., Longobardo, A., Bockelée-Morvan, D., 2016. Seasonal effects on the nucleus of comet 67P revealed by Rosetta/VIRTIS, EGU General Assembly Conference Abstracts, p. 17371.
- Tuzzolino, A.J., Economou, T.E., Clark, B.C., Tsou, P., Brownlee, D.E., Green, S.F., McDonnell, J., McBride, N., Colwell, M.T., 2004. Dust measurements in the coma of comet 81P/Wild 2 by the Dust Flux Monitor Instrument. *science* 304, 1776-1780.
- Van Ijendoorn, L., Allamandola, L., Baas, F., Greenberg, J., 1983. Visible spectroscopy of matrix isolated HCO: The $2 A''(\Pi) \leftarrow X 2 A'$ transition. *The Journal of chemical physics* 78, 7019-7028.
- Vanysek, V., Wickramasinghe, N., 1999. Formaldehyde polymers in comets. *Astrophysics and Space Science* 268, 115-124.
- Veverka, J., Klaasen, K., A'Hearn, M., Belton, M., Brownlee, D., Chesley, S., Clark, B., Economou, T., Farquhar, R., Green, S., 2013. Return to comet Tempel 1: overview of Stardust-NExT results. *Icarus* 222, 424-435.

- Vinogradoff, V., Fray, N., Duvernay, F., Briani, G., Danger, G., Cottin, H., Theulé, P., Chiavassa, T., 2013. Importance of thermal reactivity for hexamethylenetetramine formation from simulated interstellar ices. *Astronomy & Astrophysics* 551, A128.
- Vinogradoff, V., Rimola, A., Duvernay, F., Danger, G., Theulé, P., Chiavassa, T., 2012. The mechanism of hexamethylenetetramine (HMT) formation in the solid state at low temperature. *Physical Chemistry Chemical Physics* 14, 12309-12320.
- Wagner, W., Riethmann, T., Feistel, R., Harvey, A.H., 2011. New equations for the sublimation pressure and melting pressure of H₂O ice Ih. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 40, 043103.
- Walker, J.F., 1964. Formaldehyde.
- Wallis, M., 1982. Dusty gas-dynamics in real comets, *Comets*. Univ. of Arizona Press Tucson, pp. 357-369.
- Weaver, H., Brooke, T., Chin, G., Kim, S., Bockelée-Morvan, D., Davies, J., 1997. Infrared spectroscopy of comet Hale-Bopp. *Earth, Moon, and Planets* 78, 71-80.
- Wellnitz, D.D., Collins, S.M., A'Hearn, M.F., Team, T.D.I.M., Team, T.S.-N.M., 2013. The location of the impact point of the Deep Impact Impactor on Comet 9P/Tempel 1. *Icarus* 222, 487-491.
- Whipple, F.L., 1950. A comet model. I. The acceleration of Comet Encke. *The Astrophysical Journal* 111, 375-394.
- Willacy, K., Alexander, C., Ali-Dib, M., Ceccarelli, C., Charnley, S., Doronin, M., Ellinger, Y., Gast, P., Gibb, E., Milam, S., 2015. The composition of the protosolar disk and the formation conditions for comets. *Space Science Reviews* 197, 151-190.
- Wink, J., Bockelée-Morvan, D., Despois, D., Colom, P., Biver, N., Crovisier, J., Gérard, E., Lellouch, E., Davies, J., Dent, W., 1997. Evidences for extended sources and temporal modulations in molecular observations of C/1995 O1 (Hale-Bopp) at the IRAM interferometer. *Earth, Moon, and Planets* 78, 63-63.
- Woon, D.E., 2002a. Modeling gas-grain chemistry with quantum chemical cluster calculations. I. Heterogeneous hydrogenation of CO and H₂CO on icy grain mantles. *The Astrophysical Journal* 569, 541.
- Woon, D.E., 2002b. Pathways to glycine and other amino acids in ultraviolet-irradiated astrophysical ices determined via quantum chemical modeling. *The Astrophysical Journal Letters* 571, L177.
- Wright, I., Sheridan, S., Barber, S., Morgan, G., Andrews, D., Morse, A., 2015. CHO-bearing organic compounds at the surface of 67P/Churyumov-Gerasimenko revealed by Ptolemy. *science* 349.
- Xue, T.J., 1997. M. a. McKinney and C. a. Wilkie. *Polym. Degrad. Stab* 58, 193-202.
- Zakharov, V., Ivanovski, S., Crifo, J.-F., Della Corte, V., Rotundi, A., Fulle, M., 2018. Asymptotics for spherical particle motion in a spherically expanding flow. *Icarus* 312, 121-127.
- Zimmermann, H., Behnisch, J., 1982. Thermogravimetric investigations on the kinetics of thermal degradation of polyoxymethylenes. *Thermochimica Acta* 59, 1-8.