

KInetic Database for Astrochemistry

Valentine Wakelam
Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux
Université Bordeaux 1
CNRS

Principales personnes et laboratoires impliqués en France dans le développement de la base

Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux / Observatoire Aquitain des Sciences de l'Univers: V. Wakelam (PI), A. Caillo, B. Pavone

Institut des Sciences Moléculaires / Université Bordeaux 1: J-C Loison

Laboratoire de Chimie-Physique (Orsay): P. Pernet

Experts consultés:

M-L Dubernet

D. Talbi

I. Sims

S. Le Picard

A. Bergeat

K. Hickson

M. Chabot

K. Beroff

N. Carrasco

M. Dobrijevic

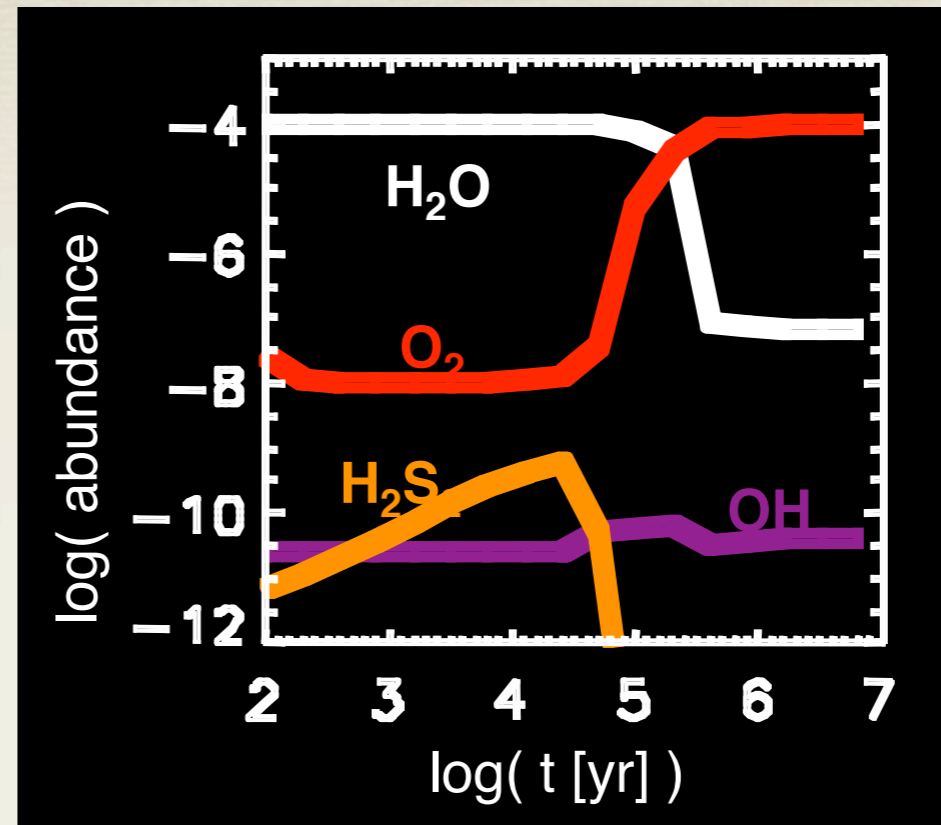
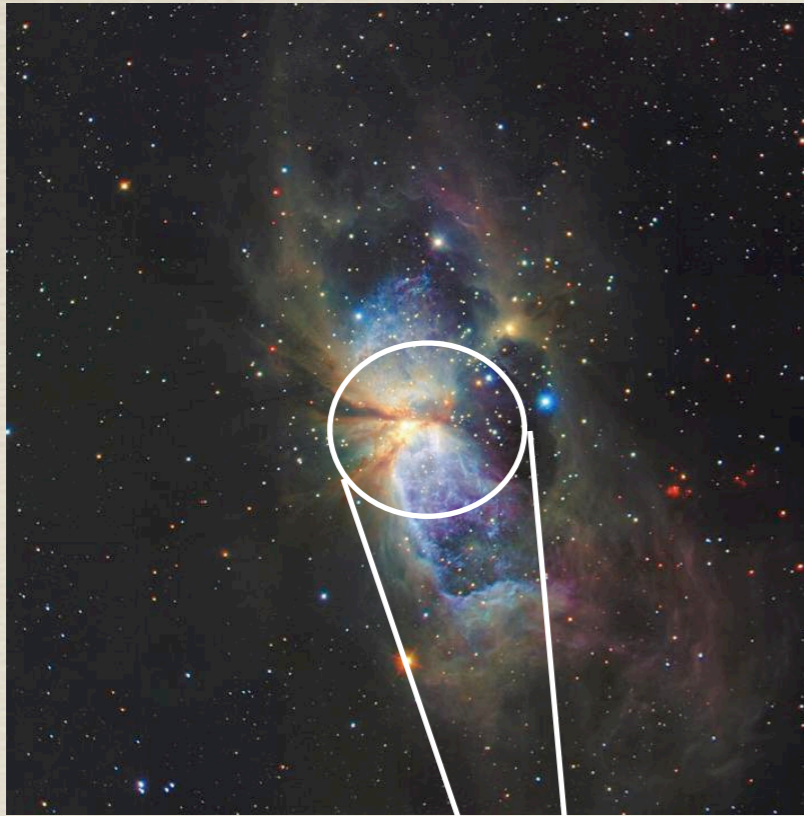
F. Selsis

A. Dutrey

S. Guilloteau

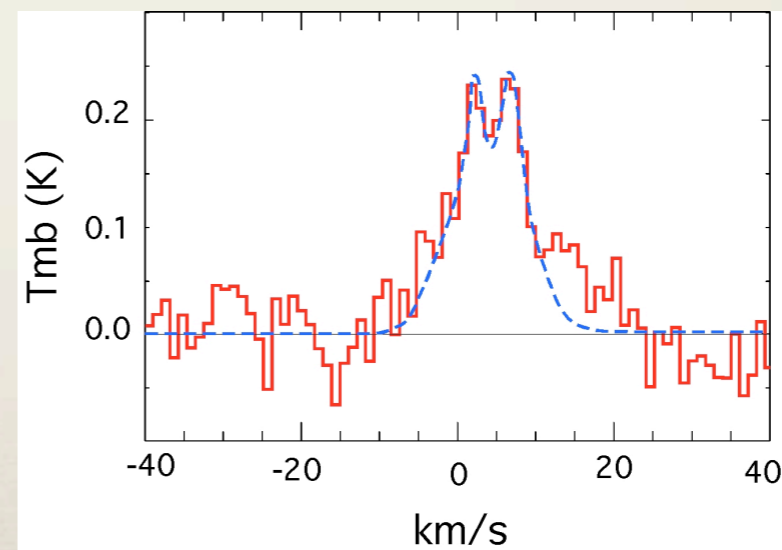
E. Hébard

Etude de la chimie interstellaire



Theoretical abundances

Comparisons

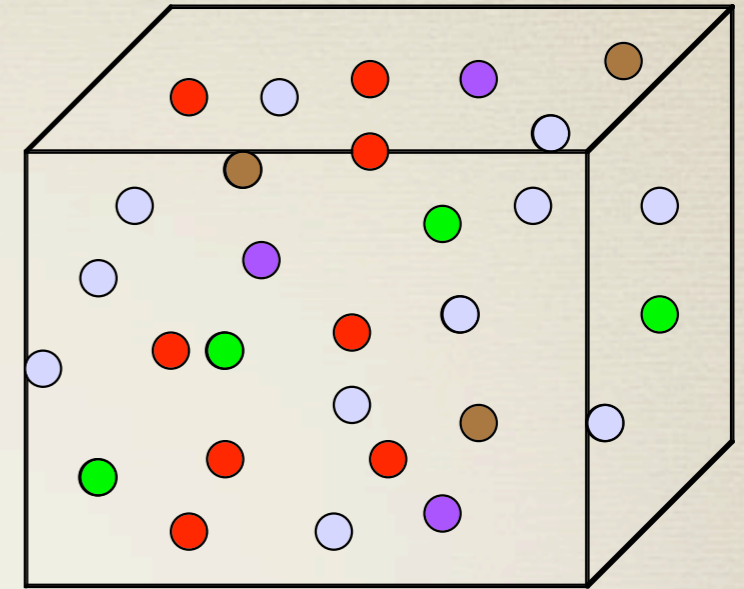


Observed abundances

Modèles chimiques

Calcul de l'abondance des espèces chimiques en fonction du temps :

$$\frac{dn_i}{dt} = \underbrace{\sum k_{ij} n_i n_j}_{\text{Production}} - \underbrace{n_i \sum k_{ij} n_j}_{\text{Destruction}}$$



k_{ij} = vitesses de réactions

Paramètres des modèles:

- Température du gaz et des grains de poussières (K)
- Densité (cm^{-3})
- Abondances élémentaires
- Photons UV et X-ray, rayonnement cosmique
- Réseau chimique (~ 4000 réactions pour le MIS)

Problèmes actuels

- ✓ Multiplicité des bases de données
- ✓ Incomplétude de ces bases
(en terme de données ou d'information)
- ✓ Bases non mises à jour



- Travail de construction d'un réseau recommencé à chaque fois
- Choix arbitraire dans le cas où plusieurs données existent
- Mauvaise communication entre chimistes/physiciens et astrophysiciens
- Pas de valorisation du travail des chimistes/physiciens qui déterminent ces données fondamentales

Base de données réactionnelles unique pour les différents milieux astrophysiques (milieu interstellaire et atmosphères planétaires)

Objectifs :

- ✓ Accessibilité des données disponibles pour toute la (les) communauté(s)
- ✓ Information sur l'origine, la précision et la qualité des données
- ✓ Développer une interface pour les utilisateurs et pour les expérimentateurs et théoriciens
- ✓ Flécher les priorités

The screenshot shows the homepage of the Kinetic Database for Astrochemistry (KIDA). The page has a header with the site title and logo, a navigation menu on the left, and a main content area. The main content area includes a welcome message, a list of services, a member login area, and a news section. The footer contains logos for Fedora, Apache, and W3C Quality Assurance.

Kinetic Database for Astrochemistry

Tuesday 04th November 2008 05:40 PM

Home | Site Map | Copyright | Events | Links

There had 4 this day, with 2 in this time and 15 visitors in general.

Presentation

Notice and Help
List of species
Database access
Molecules detected
Publication
Commyity of experts
Funding
Mailing list

Member area

Your login :

Your password : [Click here, if you have forgotten your password.](#)

Powered by and

W3C Quality Assurance

Kinetic Database for Astrochemistry

KIDA is an international project to create a unique and comprehensive database for reaction rate coefficient useful in the chemical modeling of the interstellar chemistry and in planetary atmospheres.

What can you do in this database?

- You can find all existing data useful for the chemical modeling of the interstellar chemistry and in planetary atmospheres.
- If you are chemist of physicist and that your data are not there, you can add them yourself. You can also correct, add references and update the data. You can also discuss with your colleagues on the data.
- If you are modeler, you can dowload a complet set of reaction rate coefficient and/or store your list of reactions to allow comparisions.
- You can find information on the quality of the data and recommanded data for some of them.

If you have any comments or bug reports, please send an email to wakelam_at_obs.u-bordeaux1.fr

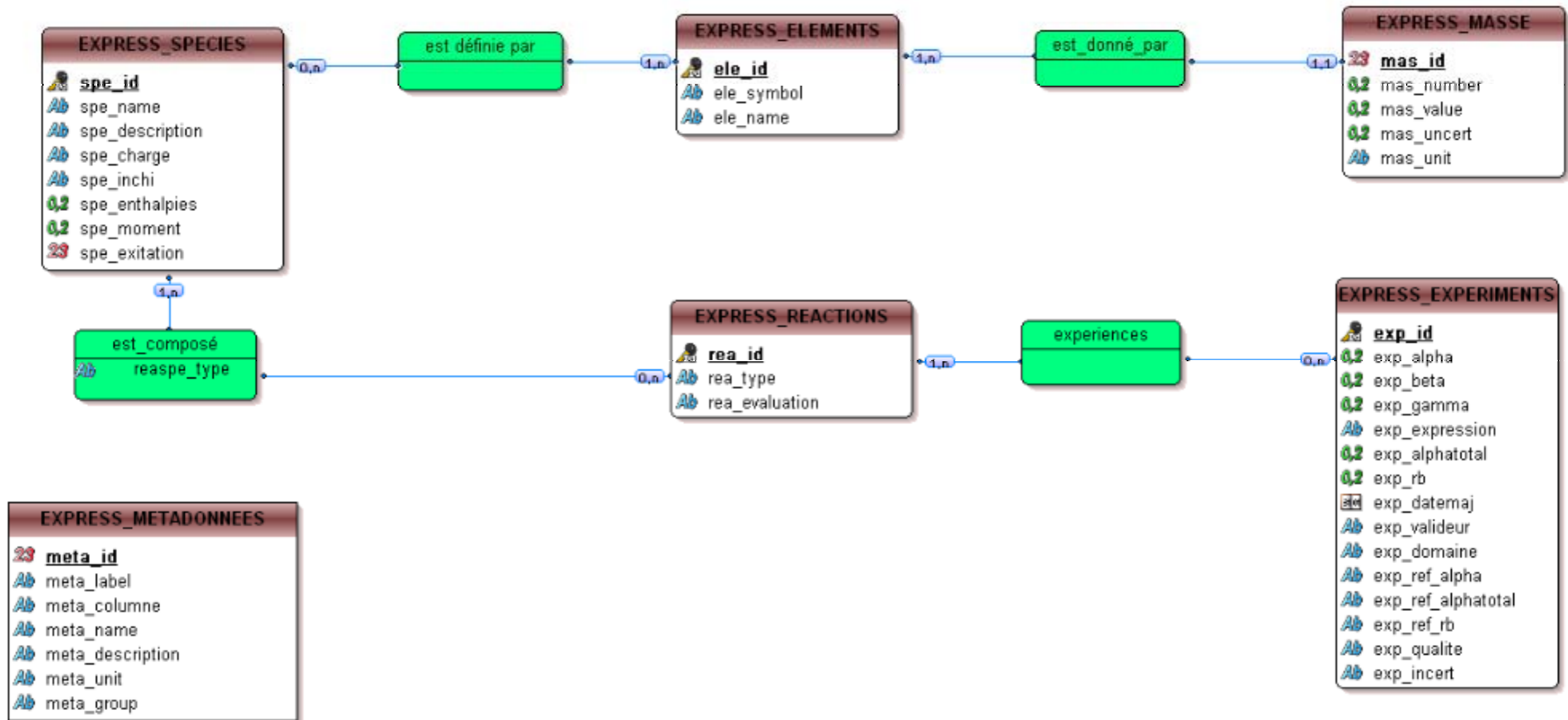
News

The database is under construction.

Création et maintenance par Arnaud Caillo, OASU

DataModel

Modèle Conceptuel de Données (MCD) – (Analyse Windev)



NB : Ne pas se fier aux noms de classe : il ne faut pas tenir compte de « EXPRESS_ » (c'est un préfixe ajouté systématiquement par Windev et ne peut être supprimé).

Some tools

Updates

Add a new species: need to fill in all the quantities defining the species (polarizability and dipole moments will be optional).

Add a new reaction: Comments and/or reference + the name of the user will be required.

Update a reaction

Tests

When an update is proposed, several tests will be performed.

If a new reaction is added, the database will check if it does not already exist. The user cannot add a second identical reaction except if the T_{range} is different. If the T_{range} overlap with one already in the database, specific notice will be printed.

When a new reaction is added, the enthalpy of reaction will be checked using the enthalpy of formation stored in the database. If the reaction cannot proceed, the user will not be able to propose his reaction and he will have to write to one of the database administrator.

Fits of chemical data

Programs can be proposed to chemists to fit their data using on the formula given in KIDA.

References

Users will be able to propose a link to their article in personal web pages or databases.

Visualization of data

For reactions with several data, the user will be able to compare them at specific temperature and also plot them on the same figure as a function of temperature.

Storage

When a user download a list of reactions from KIDA, he will be propose to store the network in KIDA as a text file with a specific name: KIDA_year_vx (x is different from 1 if more than one database is downloaded in the year).

Other users can also store text files with their list of reactions even if it is not from KIDA.

Papers can be associated with the networks and comments can be included (and modified) to explain what is the database.

Étapes et avancement du projet

- ✓ Réunion en mars 2007 (Bordeaux)
- ✓ Réunion en novembre 2007 (Paris) pour discuter du format de la base (Financement par l'IPF)
- ✓ Formation d'un groupe international comme embryon du groupe d'experts sur les données (Financement par l'institut Suisse International Space Science Institute de 2 ateliers: Jan. et Dec. 2008)
- ✓ Charte graphique et DataModel de la base en 2008 (par Arnaud Caillo, OASU)
- ✓ Début d'un CDD de 6 mois d'un assistant ingénieur en Janvier 2009 (Financement ANR Jeune Chercheur)

- ✓ Recrutement d'un IR pour s'occuper du contenu de la base à la fin du mois de Janvier (Financement 6 mois ERC)
- ✓ Atelier en Février 2009 (Observatoire de Meudon) pour finaliser le DataModel (Financement des programmes nationaux PCMI et PNP)
- ✓ Début d'un CDD d'1 an et demi d'un ingénieur de recherche/postdoc sur le contenu de la base début 2010 (financement Astronet et Europlanet)



Financements/remerciements

- Prix Jeune Chercheur 2007 de l'IPF (missions)
- BQR 2007 (serveur)
- International Space Science Institute 2008 (missions)
- FP7 2008 Europlanet (salaire)
- PCMI/PNP 2007-2008 (missions)
- European Research Council 2008, E₃ARTHs de F. Selsis (LAB) (salaire+missions)
- Astronet 2008 (salaire)
- Royal Society (missions)
- ANR Jeune Chercheur 2008, EMA:INC de V. Wakelam (LAB) (salaire)
- Europlanet (PF7) 2008 (salaire)



