

# 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. Pernot

Experts consultés:

M-L Dubernet

D. Talbi

I. Sims

S. Le Picard

A. Bergeat

K. Hickson

M. Chabot

K. Beroff

N. Carrasco

M. Dobrijevic

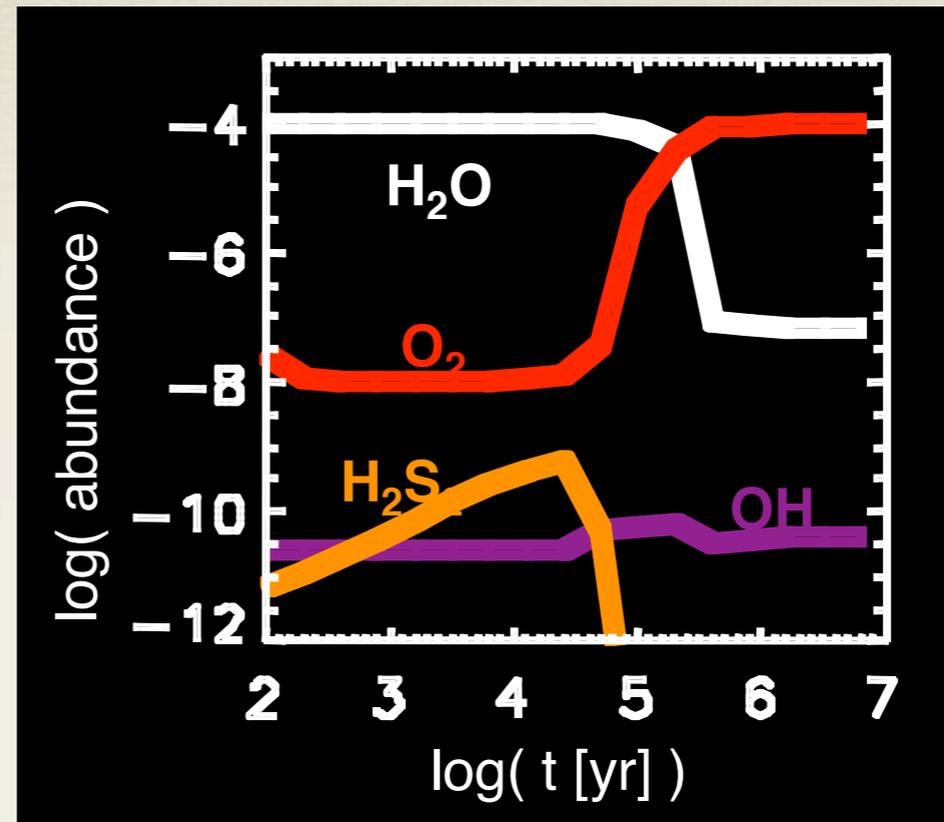
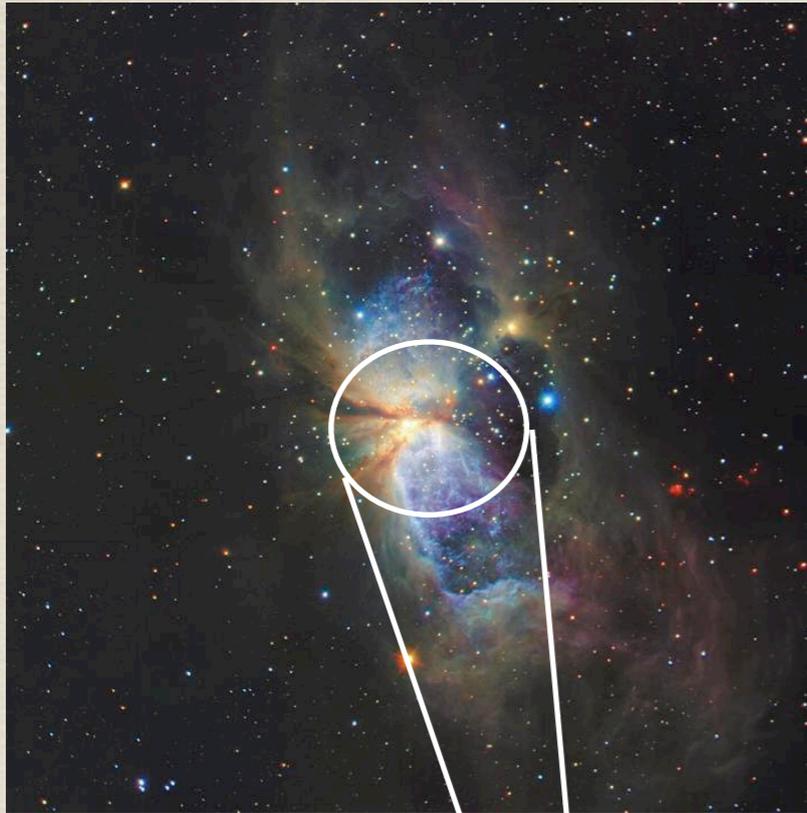
F. Selsis

A. Dutrey

S. Guilloteau

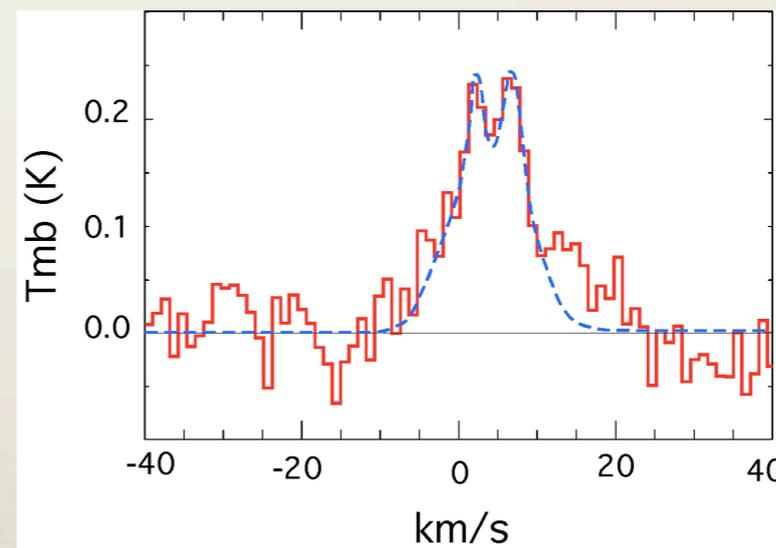
E. Hébard

# Etude de la chimie interstellaire



Theoretical abundances

Comparisons

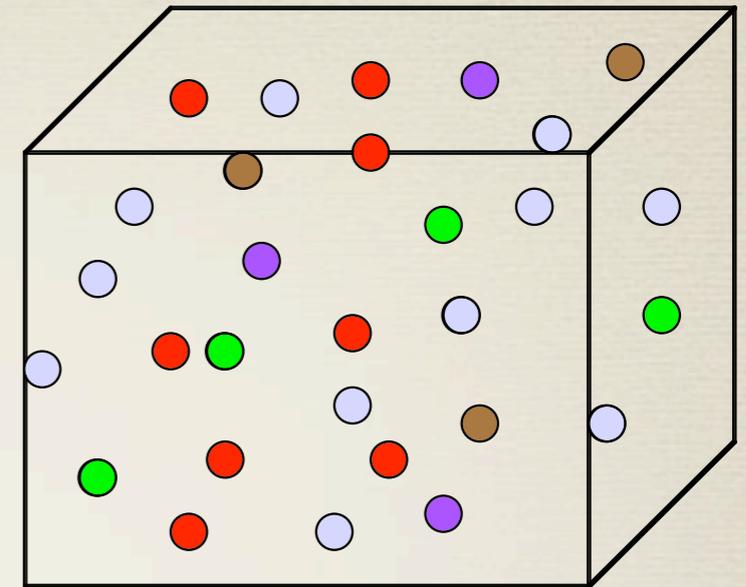


Observed abundances

# 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 ( $\text{cm}^{-3}$ )
- Abondances élémentaires
- Photons UV et X-ray, rayonnement cosmique
- Réseau chimique ( $\sim 4000$  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)

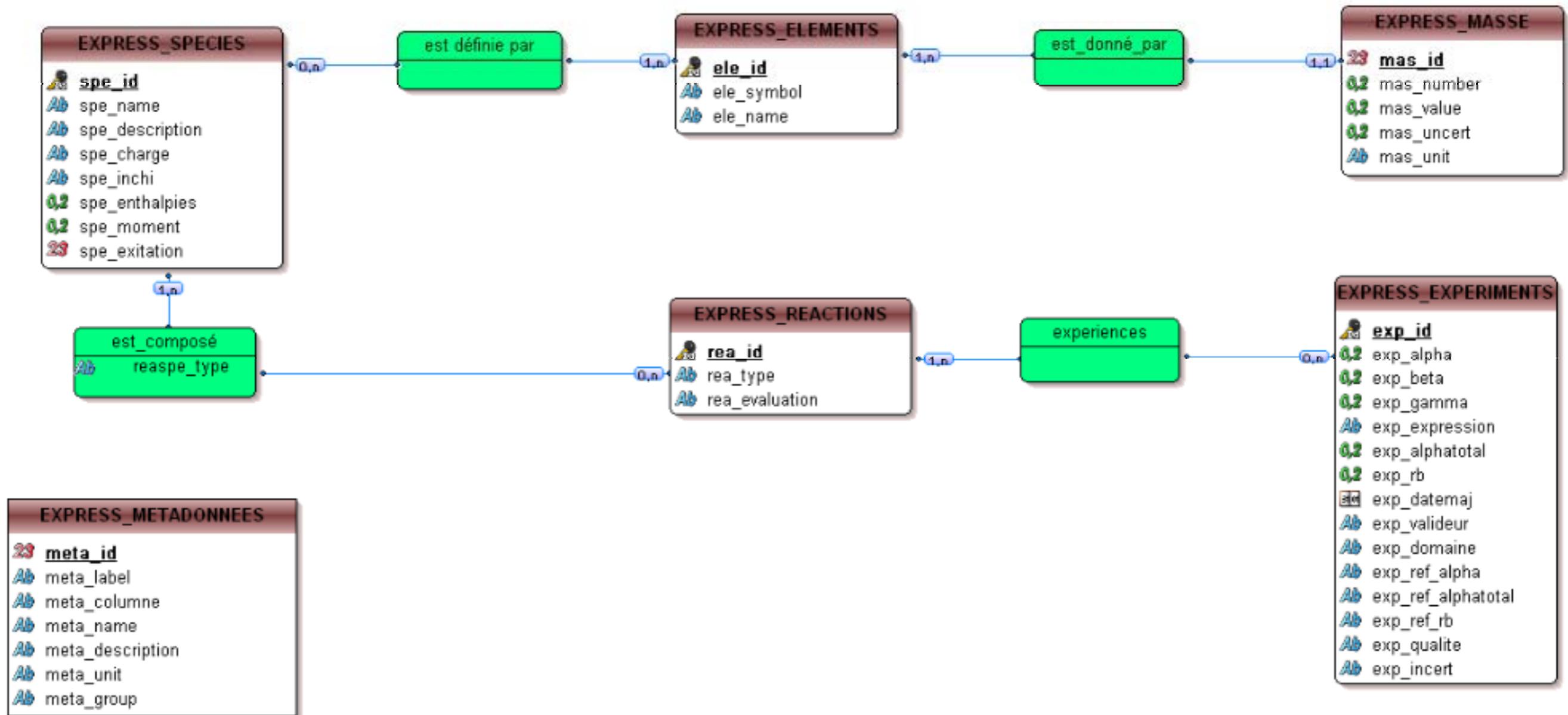
Objectifs :

- ✓ 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 light beige background with a dark header. The header contains the site title "Kinetic Database for Astrochemistry" on the left, a date and time "Tuesday 04th November 2008 05:40 PM" in the center, and navigation links "Home | Site Map | Copyright | Events | Links" on the right. A small KIDA logo is also present in the top right corner. Below the header, there is a sidebar on the left with a menu of links: "Presentation", "Notice and Help", "List of species", "Database access", "Molecules detected", "Publication", "Community of experts", "Funding", and "Mailing list". Below the menu is a "Member area" with login and password fields, a "Connexion" button, and a link for forgotten passwords. At the bottom of the sidebar are logos for "Powered by Fedora Project" and "and Apache Software Foundation", along with "W3C Quality Assurance" logos for HTML 4.01 and CSS. The main content area on the right features the title "Kinetic Database for Astrochemistry" and a paragraph: "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." Below this is a section titled "What can you do in this database?" with four bullet points: finding existing data, adding/correcting data, downloading reaction rate coefficients, and finding information on data quality. A contact email "wakelam\_at\_obs.u-bordeaux1.fr" is provided. A "News" section at the bottom states "The database is under construction." The footer of the page reads "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  $T_{\text{range}}$  is different. If the  $T_{\text{range}}$  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, E<sub>3</sub>ARTHs 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)



