



Projet de Fin de Master Année Scolaire : 2019

Etude des processus thermiques dans les régions de photodissociation (PDR)

**Ce document est non confidentiel. Il peut donc être communiqué à l'extérieur sous format
papier mais également diffusé sous format électronique**

**Auteur :
Antoine NASSER**

**Promotion :
2019**

**Tuteur ENSTA Paris :
Jérôme PEREZ**

**Tuteurs organisme d'accueil :
Franck Le Petit
Emeric Bron**

**Stage effectué du 18/03/2019 au 17/09/2019
Nom de l'organisme d'accueil : Observatoire de Paris
Adresse : 61 AVENUE DE L'OBSERVATOIRE
75014 Paris
France**

Ce document est non confidentiel. Il peut donc être communiqué à l'extérieur sous format papier mais également diffusé sous format électronique.

Remerciements

Je tiens à remercier tous ceux qui ont contribué, d'une manière ou d'une autre, à la réussite de ce projet.

Tout d'abord, je remercie Franck Le Petit et Emeric Bron, du LERMA, pour leur patience et leur soutien sans faille. J'ai eu énormément de plaisir à travailler avec eux. Ils m'ont tant appris aussi bien sur la physique des milieux interstellaires que sur le savoir-être du chercheur.

Merci à Jacques le Bourlot, du LERMA, avec qui j'ai discuté pour la première fois du sujet et qui m'a accepté avec Franck Le Petit. Les discussions que l'on a eu ont toujours été très enrichissantes et agréables.

Je remercie Laurent Verstraete, de l'IAS, auprès de qui j'ai beaucoup appris sur les poussières interstellaires.

Je remercie mon enseignant référent de l'ENSTA, Jérôme Perez qui a accepté d'évaluer mes travaux avec beaucoup de gentillesse.

Je remercie par ailleurs toute l'équipe de Meudon pour son accueil chaleureux.

Je remercie également mes co-stagiaires, Raphael Meshaka et Flavien Barbier, avec qui j'ai partagé bien plus qu'un bureau.

Je pense enfin à ma famille qui me soutient et m'encourage dans tout ce que j'entreprends.

Résumé

A l'aide du code PDR de Meudon, nous avons revisité les processus de chauffages qui se déroulent au sein des PDR. L'ajout du chlore dans le réseau chimique a révélé l'existence d'une bistabilité thermique dans les bords atomiques des PDR denses et fortement illuminées. Néanmoins, nous n'avons pas de traceurs atomiques permettant de déceler son existence. La mise à jour du réseau chimique du code PDR a ouvert des nouvelles voies de formations du traceur CO qui est amorcée par la réaction $O + H_2 \rightarrow OH + H$. L'utilisation de nouvelles prescriptions pour calculer les taux de destruction collisionnelle du H_2 ont montré que les réactions chimiques pouvaient chauffer les PDR denses à l'entrée des nuages moléculaires ce qui a un impact fort sur le diagramme d'intensité des raies du CO. Enfin le nouveau calcul des taux des transitions par collisions du H_2 ont révélé l'existence d'une nouvelle instabilité thermique en fin de zone atomique pour les PDR fortement illuminées. Par manque de temps, son origine reste inconnue.

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| Introduction | 7 |
| I Amplification de l'effet photoélectrique par le chlore | 12 |
| I.1 Profil de température d'une PDR en présence de chlore | 12 |
| I.2 Impact du chlore sur l'effet photoélectrique | 13 |
| I.3 Modèle analytique - Chimie | 15 |
| I.3.1 Ion hydrogène | 15 |
| I.3.2 Ion chlore | 16 |
| I.3.3 Recombinaison de H^+ sur les grains | 17 |
| I.4 Modèle analytique - Thermique | 17 |
| I.4.1 Chauffage net par effet photoélectrique sur les grains | 18 |
| I.4.2 Refroidissement par les raies d'émissions du gaz | 19 |
| I.4.3 Couplage gaz-grains | 19 |
| I.5 Correction de l'effet photoélectrique par le code | 20 |
| I.6 Prédiction de la température au bord de nuage | 20 |
| I.6.1 Carte de température au bord du nuage | 21 |
| I.7 A la recherche d'observables | 22 |
| I.7.1 Détermination d'un traceur | 22 |
| I.7.2 Choix de la raie [N] 5200Å | 23 |
| II Impact du H_2 sur la température du gaz | 25 |
| II.1 Réactions chimiques initiées par H_2 | 26 |
| II.2 Dissociation collisionnelle du H_2 | 27 |
| II.2.1 Grilles de modèles - Bord atomique | 28 |
| II.2.2 Grilles de modèles - Transition H/H_2 | 29 |
| II.2.3 Étude d'un modèle particulier | 29 |
| II.3 Nouveaux taux de collisions de H_2 | 31 |
| II.3.1 Étude des courbes de chauffage et de refroidissement | 33 |
| II.4 Amplification de l'effet photoélectrique par le carbone | 34 |
| II.4.1 ion hydrogène | 34 |
| II.4.2 molécule CH^+ | 36 |
| II.4.3 molécule H_2 | 36 |
| II.4.4 thermique | 37 |
| II.5 A la recherche de l'instabilité induite par H_2 | 37 |
| III Explication du code python | 40 |
| III.1 Result_Test/ | 40 |
| III.2 Grille de modèles | 41 |
| III.3 Modèle analytique du chlore | 42 |
| III.4 Modèle du chauffage par H_2 | 42 |
| Conclusion | 44 |
| Annexe A Impact du chlore | 47 |

| | |
|---|-----------|
| Annexe B Réactions chimiques initiées par H_2 | 53 |
| Annexe C Impact de la prescription de Glover | 55 |

Introduction

Le contexte général de cette étude est le gaz et des poussières se trouvant entre les étoiles, il s'agit du milieu interstellaire (le MIS). Les poussières représentent à peine 1% de la masse du milieu interstellaire. Les 99% de gaz est constitué, en masse, de $\sim 74\%$ d'hydrogène, $\sim 25\%$ d'hélium et $< 1\%$ d'éléments dit « lourds » soit des éléments ayant un numéro atomique Z supérieur à celui de l'hélium (carbone, oxygène, azote...).

Le milieu interstellaire est intimement lié à la formation des étoiles. Celles-ci se forment dans des nuages moléculaires denses et froids qui sont confinés par leur propre gravité. L'effondrement d'un nuage moléculaire sur lui-même amorce la formation d'étoiles qui, une fois allumées, émettent un champ de rayonnement UV intense. Ces nouvelles sources d'énergies interagissent à leur tour avec leur nuage parent en dissociant les molécules et en chauffant le gaz. La photoévaporation par les UV entraîne une expansion rapide du gaz et peut causer la dissipation du nuage parent, mais aussi, comprimer localement le nuage ce qui peut amener à la formation de nouvelles étoiles (figure .1). On appelle parfois ces régions de formation des « pouponnières d'étoiles » tant leurs naissances amorcent la création, en cascade, d'autres étoiles (figure .2). Ainsi, comprendre le feedback radiatif des jeunes étoiles sur leurs nuages parents permet de mieux comprendre la formation des étoiles. C'est également une problématique importante en recherche extragalactique car elle contribue à déterminer les taux de formation et de destruction des étoiles dans les galaxies.

Ces jeunes étoiles interagissent avec les nuages moléculaires dans des interfaces que l'on appelle des régions photon-dominées ou régions de photo-dissociations (PDR). Il s'agit de région du milieu interstellaire où la chimie et la température du gaz sont fortement influencées par le champ UV émis. Les observations Herschel¹ et ALMA² ont sondé la structure de ces régions et révolutionné notre compréhension des mécanismes d'interactions [Goicoechea et al., 2016, Joblin, C. et al., 2018]. Proche de l'étoile, le champ UV photionise entièrement le gaz. Les photons ayant une longueur d'onde inférieure à la limite de Lyman ($\lambda < 912\text{\AA}$ soit $h\nu \geq 13.6\text{ eV}$) ionisent l'hydrogène et les espèces ayant un potentiel de ionisation (PI) supérieur à celui de l'hydrogène, c'est la « région HII »³. Une PDR commence à partir de la zone où les photons émis par les étoiles ne peuvent plus photoioniser les atomes d'hydrogène (photons dans l'UV lointain, $6 < h\nu < 13.6\text{ eV}$) mais seulement dissocier des molécules ($\text{H}_2 + h\nu \rightarrow \text{H} + \text{H}$) ou ioniser des espèces ayant un PI inférieur à 13.6 eV comme le carbone. A mesure que l'on s'enfonce dans le nuage et que l'on s'éloigne de l'étoile, les photons UV sont progressivement absorbés par les poussières (ou grains) et le gaz comme H_2 ou C. Le gaz est principalement sous forme atomique (H) et on nomme cette région la zone atomique que l'on appelle aussi « région HI ». Il vient une profondeur dans le nuage où le flux de photon UV capable de dissocier les molécules H_2 est totalement absorbé permettant au gaz de devenir moléculaire (H_2). La présence de H_2 amorce une chimie chaude qui initie la formation et l'excitation de molécules par exemple le CO dont on observe les raies d'émissions [Joblin, C. et al., 2018]. On utilise les émissions de molécules comme des traceurs des processus physico-chimiques qui se déroule dans la PDR. La figure .3 schématise la structure d'une PDR. Ainsi, le flux UV des jeunes étoiles assurent la formation des espèces moléculaires au sein du nuage et l'excitation des raies observées. Pour interpréter les raies d'émissions, les astronomes utilisent des modèles PDR qui calculent le transfert radiatif à travers le nuage, la chimie et le bilan thermique. Les modèles

1. Téléscope spatial développé par l'*European Spatial Agency* et en activité de 2009 à 2013. Il avait pour missions d'étudier dans les bandes de l'infrarouge lointain et submillimétriques la formation des galaxies et la naissance des étoiles.

<http://sci.esa.int/herschel/>

2. L'*Atacama Large Millimeter/submillimeter Array* (ALMA) est un réseau de télescope (plus d'une soixantaine) installé sur le plateau Chajnantor au Chili.

<https://www.eso.org/public/france/teles-instr/alma/>

3. Ou « région H^+ ». HII fait référence à H^+ , le II signifie qu'il a été ionisé une fois.



FIGURE .1 – M17 ou nébuleuse du Cygne. Crédits NASA/ESA/J. Hester (ASU)

Le rouge représente l'émission du soufre, le vert l'hydrogène et le bleu l'oxygène. Le nuage moléculaire froid est creusé et chauffé par le champ de rayonnement UV intense émis par un amas de jeunes étoiles qui serait situé hors du cadre en haut à gauche.



FIGURE .2 – Nébuleuse de la Carène, « Montagne mystique ». Image composite des émissions de l'oxygène (en bleu), hydrogène et azote (vert) et soufre (rouge). Crédits HST/NASA.

Cette image prise par Hubble montre la forme complexe du milieu interstellaire. Les filament bleus-verts révèlent des jeunes étoiles brillantes situés hors cadre et à des années lumière de la structure qui érodent les colonnes de gaz par leurs champ UV intense. Des milliers d'étoiles sont enfouies dans le nuage interstellaire qui absorbent leurs émissions et nous empêche de les détecter. Aux sommets des colonnes, on voit les signes d'étoiles récemment formées qui éjectent de la matière dans des jets chauds tourbillonnant venant s'accréter sur la surface de l'étoile.

permettent de comprendre la composition chimique des nuages et leurs températures qui sont déterminées à partir des processus de chauffage et de refroidissement.

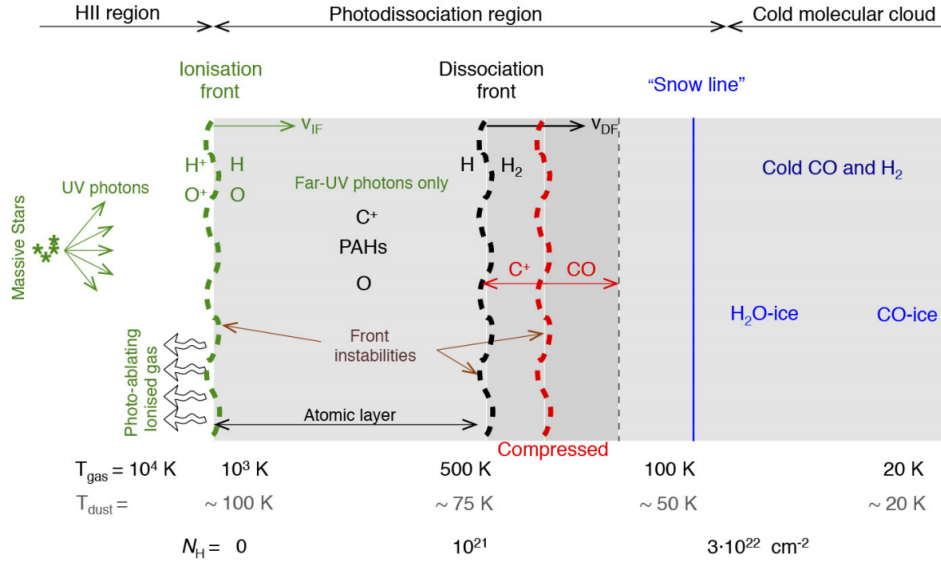


FIGURE .3 – Structure d’une région de photo-dissociation. Les photons UV émis par les étoiles viennent de la gauche. Image tirée de [Goicoechea et al., 2016]. N_{H} en cm^{-2} est la colonne densité de l’hydrogène. Elle correspond à la quantité de matière entre le bord gauche et la position dans le nuage le long de la ligne de visée.

On a découvert l’existence des phénomènes de chauffage et de refroidissement dans le milieu interstellaire à partir des années 60. Et jusqu’aux années 90, des formules analytiques permettant d’estimer ces processus ont été proposées. Elles se fondaient sur notre connaissance des quantités physiques et des populations de grains que l’on avait à cette époque. Aujourd’hui notre compréhension des PDR est beaucoup plus fine notamment sur les poussières interstellaires grâce aux observations Planck¹ [Jones, A. P. et al., 2017]. Pourtant nos modèles utilisent encore ces prescriptions alors que l’interprétation des observations en dépend directement. L’objectif du stage est donc de revoir l’ensemble des processus thermiques qui se déroulent au sein des PDR en s’intéressant à des processus de chauffage qui peuvent dominer localement dans des zones du nuage et jouer un rôle clé dans la compréhension de certains traceurs. Nous allons présenter les principaux phénomènes. Tout d’abord, l’effet photoélectrique sur les grains est le processus de chauffage dominant dans les PDR. L’absorption d’un photon UV par un grain entraîne l’éjection d’un électron de sa surface avec une énergie de l’ordre de l’électron volt. Ces électrons supra-thermiques ($1 \text{ eV} \approx 12\,000 \text{ K}$) entrent en collisions avec les particules de gaz ce qui thermalise les électrons et chauffe le gaz. Un second processus de chauffage majeur est la désexcitation collisionnelle du H_2 : lorsque la molécule absorbe un photon, elle passe dans un état excité et peut se désexciter en entrant en collision avec les particules du gaz. Ainsi l’énergie du photon est convertie en agitation thermique ce qui chauffe le gaz. Cet effet peut être accentué par le pompage UV de la molécule H_2 qui permet à plus de molécule de passer dans ses états excités. Ce processus sera abordé dans la seconde section. La chimie a également un impact sur la température du nuage. En

1. Planck est un satellite (ESA, en activité de 2009 à 2012) ayant pour mission de cartographier le fond diffus cosmologique qui est le rayonnement de l’Univers primordial. Il trouve son origine dans le rayonnement émis directement par les étoiles et celui des poussières.

<https://www.cosmos.esa.int/web/planck>

effet, une réaction chimique est endothermique ou exothermique selon que l'enthalpie des produits est plus grande que celles des réactifs. Ainsi, une réaction exothermique redistribue son excédent d'énergie au gaz, ce qui le chauffe, et inversement une réaction endothermique prélève de l'énergie. Cependant, les PDR se refroidissent principalement par les émissions du gaz. Cela concerne la molécule H_2 mais aussi les ions (C^+ , S^+ ...), les atomes (O, N, C ...) et les autres molécules (OH^+ ...) du nuage. Lorsque une espèce passe dans un état excité par une collision, elle se désexcite par émission spontanée, en émettant un photon dans une direction aléatoire. L'énergie d'agitation du gaz est convertie en photon et est perdue. Il y enfin le couplage gaz-grains qui a tendance à refroidir le gaz : les grains généralement plus froids entrent en collisions avec les particules du gaz et se thermalisent. Il existe également d'autres phénomènes dont l'on ne parlera pas ici comme le chauffage par les rayons cosmiques.

L'étude est menée à l'aide du code PDR de Meudon [Le Petit et al., 2006] qui est un modèle complet de PDR. C'est un modèle stationnaire qui est correct dans la limite où les photoréactions sont très rapides devant l'évolution dynamique du nuage, et le champs de rayonnement reste constant. Le code PDR résout dans une géométrie simplifiée 1D le transfert du rayonnement à travers le gaz, la chimie et le bilan thermique. Comme nous l'avons vu, ces trois éléments sont couplés et il faut les résoudre de manière cohérente. Le transfert de rayonnement est déterminé en résolvant l'équation de transfert par une méthode spectrale. La chimie fait intervenir des centaines d'espèces qui sont reliés par des milliers de réactions. Les densités solutions sont calculées par une méthode du point fixe (Newton-Raphson). Le bilan thermique est résolu par dichotomie qui est une méthode simple mais robuste. Le code découpe en cellule la PDR et calcule, en parcourant chaque cellule, le transfert radiatif, les densités des espèces du gaz et la température d'équilibre. Comme l'état d'une cellule affecte le transfert de rayonnement des cellules voisines, le code itère à travers la PDR jusqu'à ce qu'il converge vers une solution stable. Ainsi le code PDR obtient des profils de densité et de température en fonction de la profondeur du nuage. Il produit également des diagrammes d'intensité de raies qui sont comparés aux observations. Enfin, les paramètres que l'on introduit pour un modèle de PDR sont l'intensité χ du rayonnement en unité d'Habing¹, ainsi que sa densité n_H ou bien sa pression thermique P selon que l'on considère un nuage à densité constante² ou à pression constante. Si des raies obtenues par calculs correspondent aux observations, alors on considère que les modèles dont ils sont issues décrivent bien la PDR.

Au cours du stage, j'ai travaillé avec le code PDR. J'ai découvert que l'ajout de chlore dans le réseau chimique pouvait provoquer une instabilité thermique dans les bords atomique de nuage. Je me suis ensuite intéressé au chauffage par pompage UV de la molécule H_2 . J'ai d'abord testé l'impact sur les raies d'un nouveau calcul des taux de réactions impliquant le H_2 . Puis, j'ai analysé les changements qu'entraîne l'utilisation d'une nouvelle prescription pour calculer des taux de destructions de H_2 . J'ai enfin entamé une étude de l'impact sur les PDR des nouveaux taux de collisions de H_2 . Cette étude est malheureusement inachevée.

1. Est parfois utilisé $G_0 = 1.71\chi$ en unité de Draine

2. On note la densité du nuage n_H qui est la densité des éléments hydrogène (sous toutes ses formes) et non pas la densité totale du nuage. Ainsi selon que le nuage est sous forme moléculaire ou atomique, la densité n_H reste bien constante.

$$n_H = n(H^+) + n(H) + 2n(H_2) + \dots \neq n_{\text{tot}}$$

I Amplification de l'effet photoélectrique par le chlore

Le chlore est une espèce souvent négligée dans les réseaux d'astrochimie en raison de sa faible abondance dans le gaz interstellaire ($\text{Cl}/\text{H} = 1.8 \times 10^{-7}$, voir Tab. 1). Cependant, des espèces dérivées du chlore telles que H_2Cl^+ , HCl et HCl^+ ont été observées par Herschel dans plusieurs sources de la Galaxie et notamment dans le nuage moléculaire de la barre d'Orion [Neufeld et al., 2012, Neufeld and Wolfire, 2009, Schilke et al., 1995]. Ces observations, couplées à de la modélisation numérique des processus physico-chimiques dans le gaz diffus et froid, ont permis de comprendre globalement les mécanismes de la chimie du chlore dans le gaz interstellaire ([Neufeld and Wolfire, 2009, Amin, 1996, Schilke et al., 1995]). L'équipe de Meudon dans laquelle j'ai effectué mon stage, a participé à l'interprétation des observations Herschel ([Neufeld et al., 2012]) au moyen du code PDR de Meudon. Si le code prédisait correctement les abondances des espèces chlorées, un phénomène surprenant avait été identifié. Appliqué à du gaz dense et fortement éclairé par les UV, le code PDR incluant la chimie du chlore avait tendance à prédire des température du gaz bien supérieures à des versions sans chlore. Problème numérique ou mécanisme de chauffage insoupçonné du gaz interstellaire ? Mon stage, portant sur l'étude des processus du chauffage du gaz interstellaire, l'une de mes première tâches a été de m'attaquer à cette question.

| X | δ_X | PI (eV) |
|-----------|---------------------------------------|-----------|
| H | 1 | 13.6 |
| He | 0.1 | 24.6 |
| O | $3.2 \cdot 10^{-4}$ | 13.6 |
| C | $1.3 \cdot 10^{-4}$ | 11.3 |
| Ne | $6.9 \cdot 10^{-5}$ | 21.6 |
| N | $4.5 \cdot 10^{-5}$ | 14.5 |
| S | $1.9 \cdot 10^{-5}$ | 10.4 |
| Ar | $3.3 \cdot 10^{-6}$ | 15.8 |
| Si | $8.2 \cdot 10^{-7}$ | 8.2 |
| Cl | $1.8 \cdot 10^{-7}$ | 13 |
| F | $1.8 \cdot 10^{-8}$ | 17.4 |
| Fe | $1.5 \cdot 10^{-8}$ | 7.9 |

TABLE 1 – Abondances élémentaires dans le gaz

Abondances élémentaires des principaux éléments dans le gaz interstellaire (nombre d'atomes par rapport à H) et potentiel d'ionisation des espèces. Pour rappel, le potentiel d'ionisation de l'hydrogène étant de 13.6 eV, toutes les espèces ayant un PI plus grand sont neutres dans le gaz interstellaire neutre.

I.1 Profil de température d'une PDR en présence de chlore

Avant de commencer, il faut préciser que nous chercherons souvent à représenter les quantités physiques en fonction de la profondeur du nuage comme par exemple sur la figure I.1a. Il n'y a généralement pas de sens à utiliser une distance, comme le parsec, pour traduire cette profondeur. La communauté emploie plutôt l'extinction visuelle A_V qui est définie comme la différence entre la magnitude apparente dans le domaine du visible, la brillance, qu'aurait la PDR sans l'absorption des photons par les poussières et le gaz avec ce que l'on observe réellement. On placera toujours la source du champs de rayonnement, c'est à dire une étoile ou un amas d'étoile, sur le coté gauche de la PDR. Ainsi, $A_V = 0$ marque le début du modèle et correspond à la transition HII/HI. Puis, à mesure que l'on s'enfonce dans le nuage, le flux de photon est progressivement diminué ce qui fait croître l'extinction visuelle.

Afin de tester l'impact du chlore sur le profil de température d'une PDR, j'ai implémenté sa chimie dans le code PDR de Meudon. La figure (figure I.1a) présente une comparaison du profil de température obtenu avec et sans chlore pour des conditions physiques correspondant à une PDR typique ($n_{\text{H}} = 10^5 \text{cm}^{-3}$, $\chi = 10^4$). La température au bord est supérieure de 1000 K lorsque l'on ajoute le chlore dans le réseau chimique.

Pour comprendre l'origine de cette augmentation de température, j'ai analysé les fonctions de chauffage et de refroidissement calculées par le code. Le code PDR de Meudon cherche l'état stationnaire du système. Pour l'équilibre thermique, cela revient à déterminer à chaque position dans le nuage la température d'équilibre telle que le taux de chauffage soit égal au taux de refroidissement. Pour trouver cette température d'équilibre, le code procède par dichotomie, méthode simple mais efficace pour ce type de codes dans lesquels la température peut présenter des gradients forts en fonction de la position dans le nuage. En interne, dans le code, il est possible d'extraire les courbes de chauffage et de refroidissement, totaux et pour chaque processus individuel, à chaque position. La figure I.1b présente un exemple au bord du nuage pour les deux modèles. On voit, qu'ajouter du chlore dans le code PDR, augmente la courbe de chauffage (en trait plein) à partir de $T \geq 1000$ K et repousse le point d'intersection vers des températures plus chaudes. Pour ces conditions physiques de PDR, le bord de nuage est principalement chauffé par le pompage UV de H_2 et par l'effet photo-électrique sur les grains tandis qu'il est refroidit par les émissions des raies de O et de C^+ . A la vu de la figure I.1b, on voit clairement que ce qui provoque l'augmentation significative de la température du gaz en présence de chlore, est une augmentation de l'efficacité du chauffage par l'effet photo-électrique.

Enfin, si la courbe de refroidissement total avait une pente plus faible, elle couperait celle de chauffage en trois points. Le système présenterait une bistabilité thermique par l'existence de deux solutions stables et une instable. On le voit à l'allure de la courbe de chauffage de la figure I.1b qui change de monotonie vers 1000 K. On en discutera plus loin.

I.2 Impact du chlore sur l'effet photoélectrique

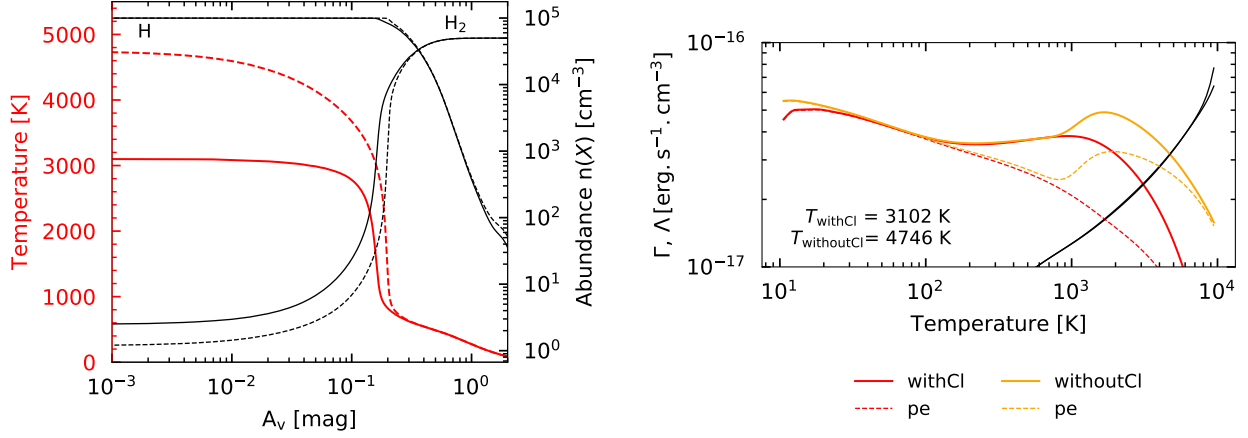
Il faut maintenant comprendre l'origine de l'augmentation de l'effet photoélectrique à $T \geq 1000$ K et chercher dans quelles conditions physiques de PDR, l'instabilité thermique peut avoir lieu.

Tout d'abord, en isolant les réactions chimiques principales qui se déroulent en bord de nuage atomique, on a démontré que le chlore joue le rôle de catalyseur de l'effet photoélectrique. Le mécanisme est illustré sur la figure I.2. Le champs de rayonnement UV, intense en bord de nuage atomique, photoionise le chlore et produit des ions Cl^+ et des électrons. Le transfert de charge du Cl^+ avec l'hydrogène est une réaction rapide qui permet au chlore de se rendre de nouveau disponible pour la photoionisation. Le chlore permet ainsi de ioniser indirectement l'hydrogène. Par conséquent, la fraction électronique du gaz augmente.

Or on sait que l'effet photoélectrique sur les grains fonctionne d'autant plus que la fraction électronique dans le nuage est importante¹. L'effet photoélectrique chauffe ainsi le gaz ce qui améliore l'efficacité du transfert de charge du Cl^+ avec l'hydrogène. En d'autres termes, le chlore induit une rétroaction positive de l'effet photoélectrique sur les grains. Cet emballement a tendance à chauffer le gaz à des températures nettement plus fortes et ce malgré la faible abondance du chlore.

L'emballement de l'effet photoélectrique se produit à partir de 1000 K et est dû à la formation d'électrons par le chlore. De manière générale, la formation d'électrons en bord atomique de nuage est principalement

1. Une forte densité d'électrons rend plus facile la recombinaison électronique des grains ce qui maintient le degré d'ionisation des grains raisonnablement faible. Il est plus facile d'arracher un électron d'un grain neutre que d'un grain qui a déjà été ionisé.



(a) Profil de température et densité en fonction de la profondeur dans le nuage

(b) Taux de chauffage et refroidissement en fonction de la température du gaz au bord atomique du nuage ($A_v = 10^{-6}$)

FIGURE I.1 – Impact du chlore sur les profils - modèles à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^4$) Sur la figure (a) la température est tracée en rouge tandis que les densités de H et H_2 sont en noir. Le trait plein est le modèle sans chlore tandis que les pointillés est le modèle contenant du chlore. Pour la figure (b), les traits pleins en rouge et jaune représentent les taux de chauffage total qui sont la somme du chauffage par pompage UV de H_2 et de l'effet photoélectrique sur les grains. Comme l'on s'intéresse particulièrement à l'effet du chlore sur l'effet photoélectrique, celui-ci est représenté en pointillé. Les courbes en noires sont les taux de refroidissement total des deux modèles. Ils ne varient pas ou à peine selon que l'on ajoute du chlore ou non.

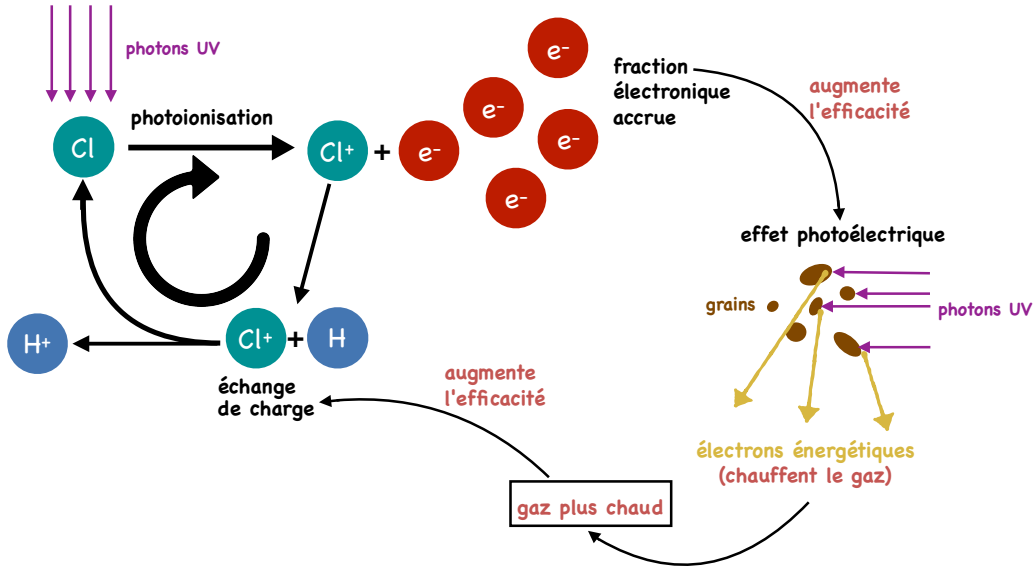


FIGURE I.2 – Schéma représentant l'impact du chlore sur la chimie en bord d'un nuage atomique

assurée par la photoionisation du carbone et du soufre qui est indépendante de la température. Pourtant à partir de 1000 K, le transfert de charge devient suffisamment efficace pour que la fraction d'électrons créée via le chlore devienne dominante devant celle de l'ionisation du carbone et du soufre et amorce la rétro-action de l'effet photoélectrique. L'amplification dépend donc l'énergie d'activation du transfert de charge $\text{Cl}^+ + \text{H} \rightarrow \text{Cl} + \text{H}^+$ qui vaut 6290 K.

Parmi les espèces chimiques connues dans le milieu interstellaire, la carbone, le soufre, le silicium ou le fer ont également un potentiel de ionisation inférieur à celui de l'hydrogène (table 1). Pourtant aucun ne peut effectuer un transfert de charge avec l'hydrogène qui est l'espèce majoritaire en bord de nuage atomique. Seul le chlore peut être à l'origine, par le mécanisme expliqué plus haut, de l'emballement de l'effet photoélectrique.

Pour faire une étude quantitative du phénomène, j'ai développé un modèle semi-analytique permettant de déterminer la température du gaz et à quelles conditions l'instabilité peut avoir lieu.

I.3 Modèle analytique - Chimie

L'effet photoélectrique sur les grains est le phénomène de chauffage dominant dans les PDR. Son taux, donnée dans [Bakes and Tielens, 1994], est

$$\Gamma_{pe} = 10^{-24} \epsilon G_0 n_{\text{H}} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (\text{I.1})$$

où G_0 est l'intensité du champs UV en l'unité d'Habing ($G_0 = 1.71\chi$) et ϵ est l'efficacité en s^{-1} de l'effet photoélectrique :

$$\epsilon = \frac{3 \times 10^{-2}}{1 + 2 \times 10^{-4} (G_0 \sqrt{T} / n_e)} \quad (\text{I.2})$$

Elle dépend de la température T et de la densité d'électrons n_e dans le nuage. Il faut donc déterminer une expression de la densité d'électrons en fonction de la température.

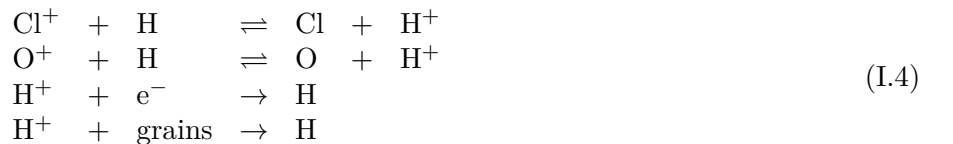
Les espèces qui contribuent à la production d'électrons en bord de nuage sont les ions hydrogène H^+ , carbone C^+ et soufre S^+ . Le gaz est neutre, le bilan de charge donne donc :

$$n_e = n(\text{H}^+) + n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+) \quad (\text{I.3})$$

On peut supposer qu'en entrée de nuage atomique le carbone et le soufre sont totalement ionisés ce qui fournit une fraction d'électrons minimale¹ de 10^{-4} . Aussi ne reste-t-il qu'à déterminer une expression de la densité de protons H^+ en fonction de la température.

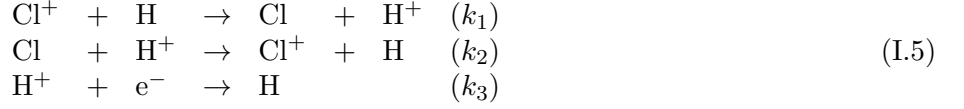
I.3.1 Ion hydrogène

Les réactions les plus efficaces qui forment et détruisent les ions H^+ en bord atomique de nuage sont :



1. Dans le modèle à $n_{\text{H}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$, le code obtient de manière indépendante de la température $n(\text{C}^+) = 1.32 \text{ cm}^{-3}$ et $n(\text{S}^+) = 1.86 \cdot 10^{-1} \text{ cm}^{-3}$ ce qui donne une fraction électronique $\frac{1}{n_{\text{H}}} (n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+)) = 1.5 \cdot 10^{-4} \approx 10^{-4}$

Les réactions avec l'oxygène sont négligées car la formation et la destruction de H^+ par l'oxygène se compensent totalement en première approximation. De plus la prise en compte de la recombinaison de l'ion H^+ sur les grains ($H^+ + \text{grains} \rightarrow H$) dans les calculs va alourdir les calculs, on la néglige dans un premier temps. Il reste le transfert de charge entre le chlore et l'hydrogène ($Cl^+ + H \rightleftharpoons Cl + H^+$) ainsi que la recombinaison électronique de l'hydrogène ($H^+ + e^- \rightarrow H$). On associe à chaque réaction un taux de réaction k_1, k_2, k_3 en $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ et qui dépendent de la température.



A l'état stationnaire, le bilan de formation des ions H^+ donne

$$\frac{d}{dt}n(H^+) = k_1n(Cl^+)n(H) - k_2n(Cl)n(H^+) - k_3n(H^+)n_e = 0 \quad (I.6)$$

En utilisant le bilan de charge on obtient une équation en $n(H^+)$:

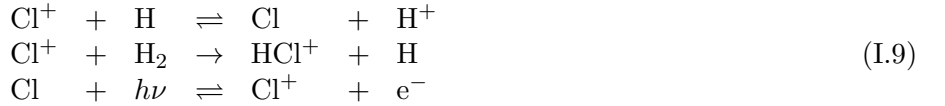
$$-k_1n(Cl^+)n_H + \left(k_2n(Cl) + k_3(n(C^+) + n(S^+))\right)n(H^+) + k_3n(H^+)^2 = 0 \quad (I.7)$$

On obtient alors une solution qui dépend de $n(Cl^+)$ et $n(Cl)$,

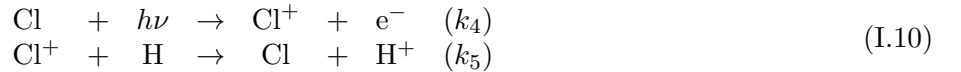
$$n(H^+) = -\frac{1}{2}\left(\frac{k_2}{k_3}n(Cl) + n(C^+) + n(S^+)\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{k_2}{k_3}n(Cl) + n(C^+) + n(S^+)\right)^2 + 4\frac{k_1}{k_3}n_Hn(Cl^+)} \quad (I.8)$$

I.3.2 Ion chlore

De la même manière, les réactions importantes faisant intervenir le chlore sont :



La recombinaison électronique de Cl^+ ($Cl^+ + e^- \rightarrow Cl + h\nu$) reste négligeable devant le transfert de charge avec H ($Cl^+ + H \rightarrow Cl + H^+$) pour des températures supérieures à 100K et la destruction par formation du HCl^+ devient dominante dans la gamme de température 100 – 1000 K. Négliger ces réactions donne une approximation correcte de la densité d'ion chlore pour les régimes de températures $T \geq 1000$ K et garde l'emballlement de l'effet photoélectrique. On considère ainsi les réactions ci-dessous avec les taux de réactions k_4 en s^{-1} et k_5 en $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$.



On obtient,

$$\frac{d}{dt}n(Cl^+) = k_4n(Cl) - k_5n(Cl^+)n_H = 0 \quad (I.11)$$

En introduisant la fraction atomique de chlore δ_{Cl} , fixée dans le gaz, on a

$$k_4(\delta_{Cl}n_H - n(Cl^+)) - k_5n(Cl^+)n_H = 0 \quad (I.12)$$

avec,

$$\delta_{Cl} = 1.8 \cdot 10^{-7} = \frac{n(\text{Cl}) + n(\text{Cl}^+) + \dots}{n(\text{H}) + n(\text{H}^+) + 2n(\text{H}_2) + \dots} \approx \frac{1}{n_{\text{H}}} (n(\text{Cl}) + n(\text{Cl}^+)) \quad (\text{I.13})$$

Ce qui fait en posant $A = \frac{k_4}{k_5 n_{\text{H}}}$:

$$n(\text{Cl}^+) = \frac{k_4 \delta_{Cl} n_{\text{H}}}{k_4 + k_5 n_{\text{H}}} = \frac{A}{1 + A} \delta_{cl} n_{\text{H}} \quad (\text{I.14})$$

De plus, en utilisant eq.I.11,

$$n(\text{H}^+) = -\frac{1}{2} \left(\frac{k_5 k_2}{k_4 k_3} n_{\text{H}} n(\text{Cl}^+) + n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+) \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{k_5 k_2}{k_4 k_3} n_{\text{H}} n(\text{Cl}^+) + n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+) \right)^2 + 4 \frac{k_1}{k_3} n_{\text{H}} n(\text{Cl}^+)} \quad (\text{I.15})$$

I.3.3 Recombinaison de H^+ sur les grains

Tout d'abord, sans la recombinaison, le modèle semi-analytique surestime la densité d'électrons aux hautes températures. Les figures I.3a et I.3b comparent les densités d'électrons prédites par le modèle semi-analytique et le code PDR. On voit, en effet, que le modèle prédit une trop grande quantité d'électron que celle du code PDR. Or, le taux de recombinaison de H^+ sur les grains calculé dans le code est fait à partir de la distribution des grains, et l'on ne dispose pas de formule simple qui dépend de la température. On utilise alors dans le modèle semi-analytique une expression obtenue en considérant une population de grains différente de celle du code (équations [5][8] de [Weingartner and Draine, 2001]).

$$\alpha(X^i, \psi, T) \approx \frac{10^{-14} C_0}{1 + C_1 \psi^{C_2} (1 + C_3 T^{C_4} \psi^{-C_5 - C_6 \ln T})} \quad \text{cm}^3 \text{s}^{-1} \quad (\text{I.16})$$

avec $\psi = \frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e}$. Les coefficients C_i sont des paramètres de fit. Le bilan de formation de H^+ devient :

$$\frac{d}{dt} n(\text{H}^+) = k_3 n(\text{Cl}^+) n(\text{H}) - k_4 n(\text{Cl}) n(\text{H}^+) - k_5 n(\text{H}^+) n_e - \alpha n(\text{H}^+) n_{\text{H}} = 0 \quad (\text{I.17})$$

où α est fonction de n_e . On obtient une équation implicite en fonction de la densité d'électrons qui vérifie :

$$x = n(\text{H}^+)(x) + n(\text{S}^+) + n(\text{C}^+) \quad (\text{I.18})$$

Pour résoudre ce système on utilise la fonction `newton` de la librairie `scipy.optimize`. La formule de [Weingartner and Draine, 2001] considère dans le nuage une distribution de grains incluant les PAH¹ qui est un support efficace pour la recombinaison des ions H^+ . En la prenant en compte dans le modèle semi-analytique, on obtient sur la figure I.3a une densité proche de celle du code. Sans PAH, le modèle doit diminuer le taux de recombinaison d'un facteur 1/6 pour approcher la densité d'électrons calculée par le code (figure I.3b).

I.4 Modèle analytique - Thermique

Pour construire un bilan thermique et déterminer la température d'équilibre du gaz, il faut considérer les processus de chauffage et de refroidissement qui interviennent en bord atomique des nuages. Les processus

1. Les PAH sont des *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons* qui sont des structures planes de carbones organisés en anneaux hexagonaux avec des atomes d'hydrogène liés aux extrémités. Ils ont une taille inférieure à environ 5 nm [Draine, 2011].

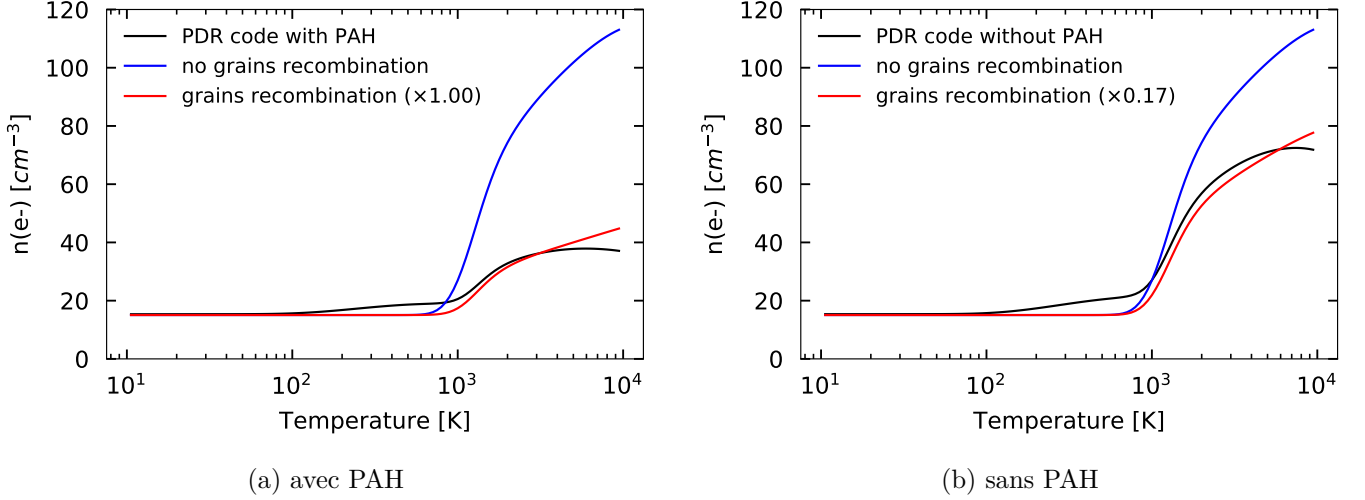


FIGURE I.3 – Comparaison des profils de densité d’électrons en fonction de la température. Les courbes en rouge et bleu sont les densités d’électrons obtenue par le modèle semi-analytique tandis que celle en noir représente la densité d’électron calculée par le code PDR. Il est possible dans le code de choisir de prendre en compte ou non les PAH dans le nuage.

thermiques employés dans le modèle sont :

- le chauffage net de l’effet photoélectrique sur les grains ([Bakes and Tielens, 1994])
- le refroidissement par émission de raies de structure fine du [CII] 158 μm , [OI]63 μm , [OI]6300Å ([Röllig, M. et al., 2006])
- le couplage gaz-grain ([Hollenbach et al., 1991])
- l’émissions Lyman H α ([Tielens, 2005]).

Les processus thermiques impliquant la molécule H₂ ont été négligé pour simplifier le modèle. On note Γ et Λ les taux de chauffage et de refroidissement total.

$$\begin{aligned}\Gamma &= \Gamma_{pe}^{\text{net}} \\ \Lambda &= \Lambda_{\text{CII } 158\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} + \Lambda_{g-g} + \Lambda_{H\alpha}\end{aligned}\tag{I.19}$$

$$\begin{aligned}\Gamma &= \Gamma_{pe}^{\text{net}} + \Gamma_{H_2}\Lambda = \Lambda_{\text{CII } 158\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} \\ &\quad + \Lambda_{g-g} + \Lambda_{H\alpha}\end{aligned}\tag{I.20}$$

I.4.1 Chauffage net par effet photoélectrique sur les grains

Quand un photon qui a suffisamment d’énergie est absorbé par un grain, un électron peut être excité puis éjecté de la surface du grain. Ce photoélectron a une énergie de l’ordre de l’eV (1 eV \approx 12 000K) et vient chauffer le gaz par thermalisation à un taux Γ_{pe} . Il y a également le phénomène inverse : la recombinaison des électrons et des ions (principalement H⁺ et C⁺) sur les grains fait perdre de l’énergie au gaz à un taux Λ_{rec} [Lequeux, 2012]. Ces phénomènes dépendent principalement de l’intensité du champ de rayonnement χ et de la charge de grain, c’est à dire le bilan de charge des grains dans le nuage, car il est par exemple plus difficile de prélever des photoélectrons et plus efficace de recombiner sur des grains positivement chargés.

Le taux de chauffage net des grains s'écrit $\Gamma_{\text{pe}}^{\text{net}} = \Gamma_{\text{pe}} - \Lambda_{\text{rec}}$. On se contente d'utiliser les formules de [Bakes and Tielens, 1994] :

$$\Gamma_{\text{pe}} = 10^{-24} G_0 n_{\text{H}} \frac{2 \times 10^{-2}}{1 + 2 \times 10^{-4} (G_0 \sqrt{T}/n_e)} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (\text{I.21})$$

$$\Lambda_{\text{rec}} = 3.49 \cdot 10^{-30} T^{0.944} \left(\frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e} \right)^{0.735 T^{-0.068}} n_e n_{\text{H}} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (\text{I.22})$$

avec $G_0 = 1.71\chi$.

I.4.2 Refroidissement par les raies d'émissions du gaz

Les collisions entre les particules du gaz peuvent peupler les niveaux excités des espèces. S'il s'en suit une désexcitation par une collision le bilan d'énergie prélevé au gaz est nul. Tandis que s'il s'en suit une émission spontanée d'un photon, de l'énergie a été perdu par le gaz. On utilise l'expression de [Röllig, M. et al., 2006] qui estime le refroidissement des raies [CII]158 μm , [OI]62 μm et [OI]146 μm et celle de [Tielens, 2005], (eq 2.62) pour l'émission H_α

$$\Lambda_{\text{CII } 158\mu\text{m}} = n(\text{C}^+) \frac{2.89 \times 10^{-20}}{1 + \frac{1}{2} \exp(92/T) \left(1 + \frac{1300}{n_{\text{H}}} \right)} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (\text{I.23})$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} &= 3.15 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \\ &\times \frac{e^{98/T} 3n_{\text{H}}(n_{\text{H}} + \beta n_{\text{cr01}})}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr01}})(3n_{\text{H}} + 5e^{228/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr12}}))} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{I.24})$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} &= 1.35 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \\ &\times \frac{n_{\text{H}}^2}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr01}})(3n_{\text{H}} + 5e^{228/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr12}}))} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{I.25})$$

Avec $n_{\text{cr01}}(T) = \frac{1.66 \cdot 10^{-5}}{1.35 \cdot 10^{-11} T^{0.49}}$ et $n_{\text{cr12}}(T) = \frac{8.46 \cdot 10^{-5}}{4.37 \cdot 10^{-12} T^{0.66}}$.

$$\Lambda_{\text{H}\alpha} = 7.3 \cdot 10^{-19} n_e n_{\text{H}} e^{-118400/T} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (\text{I.26})$$

I.4.3 Couplage gaz-grains

Le gaz, à la température T , et les grains, à la température T_g se thermalisent au taux $\Lambda_{\text{g-g}}$. En pratique, la température moyenne des grains est de l'ordre de 75 K et n'excèdent pas les 250 K. Hormis dans la région moléculaire froide du nuage, la thermalisation avec les grains refroidit toujours le gaz. On utilise l'expression de [Röllig, M. et al., 2006].

$$\Lambda_{\text{g-g}} = 3.5 \cdot 10^{-34} \times \sqrt{T}(T - T_g) n_{\text{H}}^2 \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (\text{I.27})$$

Le calcul de T_g est fait avec précision dans le code PDR. On utilise l'expression simple de [Hollenbach et al., 1991].

$$T_g = 12.2 G_0^{0.2} \quad \text{K} \quad (\text{I.28})$$

I.5 Correction de l'effet photoélectrique par le code

Grâce aux expressions de chauffage et de refroidissement ainsi qu'au modèle semi-analytique, le modèle est capable de calculer la température d'équilibre du gaz. Elle est définie telle que $\Gamma(T_{\text{eq}}) - \Lambda(T_{\text{eq}}) = 0$ et est stable (instable) si autour de T_{eq} , $\frac{d}{dT}(\Gamma - \Lambda)$ est négatif (positif).

On trace sur la figure I.4a la courbe de chauffage et de refroidissement d'un bord atomique de nuage résolu par le code PDR. On trace également les courbes obtenues par notre modèle et on remarque qu'elles retrouvent l'emballement de l'effet photo-électrique à partir de 1000 K. Néanmoins, on constate que le calcul de Rollig (eq I.21) sous-estime d'un facteur 3 l'effet photo-électrique calculé par le code si bien que le modèle prédit une solution « chaude » 4000 K plus froide que celle du code.

Il est prévisible que la formule de Rollig (eq.I.21) diffère de l'effet photoélectrique calculé par le code PDR. En effet, ce processus dépend des paramètres de grains choisis et le code PDR traite les grains de façon plus détaillée que l'expression analytique de Rollig. Cette formule retrouve pourtant l'emballement à hautes températures et a la même allure que le taux calculé par le code. On constate sur la figure que l'expression de Rollig, multipliée par un facteur 3, retrouve celle du code et obtient une solution "chaude" cohérente avec le code (+1500 K). On gardera désormais cette correction.

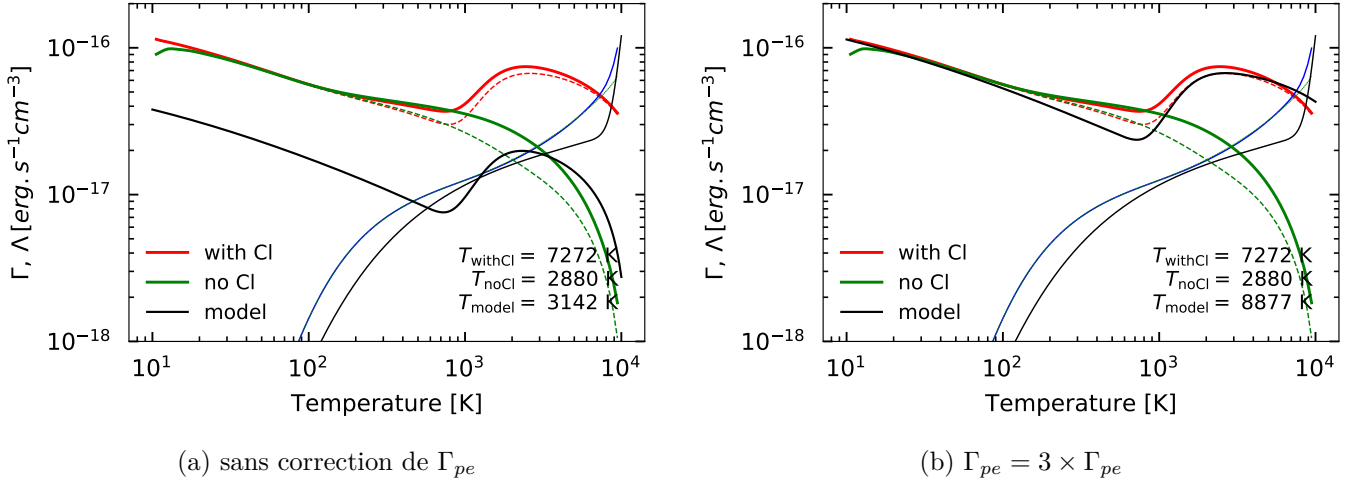


FIGURE I.4 – Courbes de chauffage et refroidissement au bord atomique d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$). Le trait en pointillé rouge et vert représente l'effet photoélectrique pour le modèle comportant ou non du chlore. Le trait plein est le chauffage total. L'écart entre le trait plein et pointillé est dû au chauffage par H_2 qui est mineur ici. Les courbes de refroidissements sont en bleues et quasi-identiques selon qu'il y ait du chlore ou non. La courbe en trait noir est le terme de chauffage du modèle, c'est à dire l'effet photoélectrique sur les grains, calculé par la formule de Rollig. La courbe de refroidissement du modèle est en trait fin noir.

I.6 Prédiction de la température au bord de nuage

A l'aide du modèle de chlore nous pouvons chercher dans quelles conditions (n_{H} et χ) les bords atomiques des PDR subissent l'instabilité induite par le chlore. Pour étudier globalement les PDR, on utilise des grilles de modèles qui varient dans l'espace des paramètres (densité n_{H} et le champ de rayonnement de l'étoile proche χ). Le code PDR résout chaque modèle puis l'on représente une donnée - la température au bord

de nuage ou le processus thermique dominant au bord du nuage - dans l'espace des paramètres. On préfère étudier des modèles à densités constantes qui sont plus faciles à interpréter (la pression et la température suivent les mêmes variations $P \propto T$) que les modèles isobares (la densité et la température varient de manière inversement proportionnelle $n_H T = \text{cte}$). Une grille contient environ 250 modèles.

I.6.1 Carte de température au bord du nuage

La figure I.5 représente la température d'équilibre maximale calculée par le modèle semi-analytique. On constate que les bords atomiques des régions fortement illuminées chauffent en présence du chlore de plusieurs milliers de Kelvin. Il apparaît également des instabilités thermiques dans les régions diffuses et fortement illuminées ($n_H \leq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \geq 10^2$). Les cartes de température de la figure I.6 sont calculées grâce au code PDR. La région chauffée par le chlore se réduit seulement aux régions denses et fortement illuminées ($n_H \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \geq 10^3$). Les régions moins denses ne sont pas aussi chaudes que ce que le modèle prédit. Cette différence est causée, dans une certaine mesure, par la formule de l'effet photoélectrique qui a été choisi et par la méthode de résolution du code PDR.

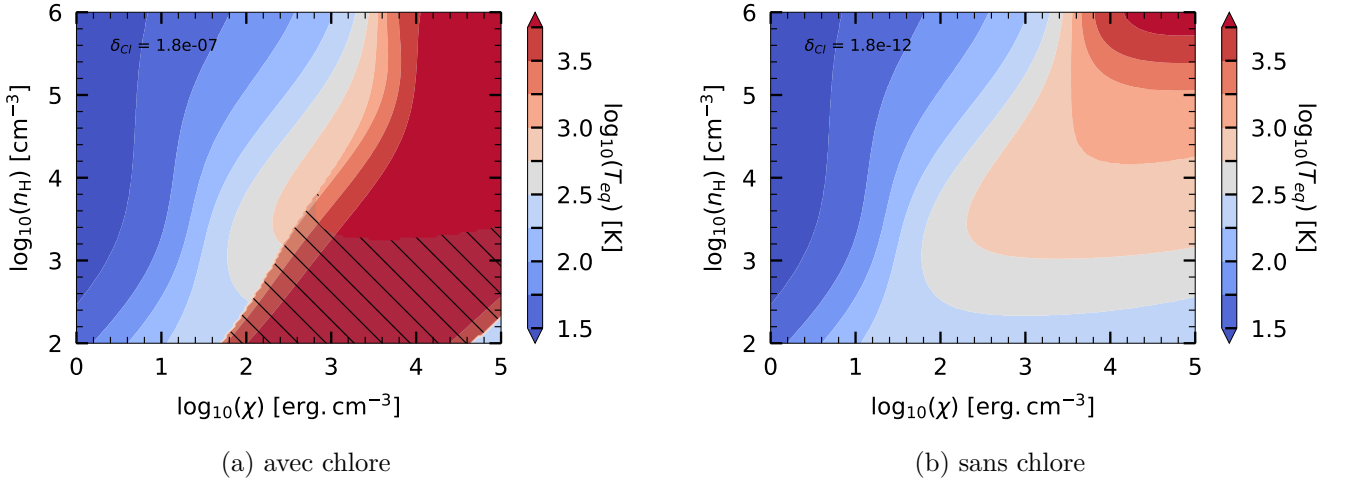


FIGURE I.5 – Carte de température prédite par le modèle

La zone hachurée sur la figure (a) signifie qu'il existe plus une solution : au moins une solution stable et une solution instable.

Tout d'abord sur la figure I.6b, on remarque l'existence d'un point-selle en température vers $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^3$ qui est absent de la figure I.5. Une analyse de cette région montre que l'augmentation de l'intensité du champs de rayonnement χ dans les régions à basse densité accélère la recombinaison des électrons sur les grains qui la rend plus efficace que l'effet photoélectrique pur, ce qui diminue le chauffage net et donc la température du gaz. Les formules d'effet photoélectrique (eq I.21) et de recombinaisons des électrons sur les grains (eq I.22) reproduisent mal ce phénomène. Le modèle obtient donc dans ces régions des températures plus chaudes.

De plus, le code PDR calcule la température d'équilibre du gaz en cherchant par dichotomie les zéros de la fonction $T \rightarrow (\Gamma - \Lambda)(T)$. Rien n'assure que le code décèle toutes les solutions. Par exemple dans la figure I.7a, le code ne trouve que la solution basse température alors qu'il existe une solution chaude proche de 9000 K. Il peut arriver que le code saute d'une branche de solution à une autre. Une amélioration qui pourrait être faite au code est de le rendre capable de déceler l'existence de plusieurs solutions et de rester

sur une même branche de solution à travers le nuage.

Enfin, l'absence de la prise en compte du H_2 dans le modèle semi-analytique a un impact important sur la température car il chauffe par pompage UV les régions denses et refroidit par désexcitation collisionnelle. On voit sur la figure I.7b qui est un modèle dense ($n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^{4.5}$) que l'effet photoélectrique est négligeable devant le chauffage par H_2 .

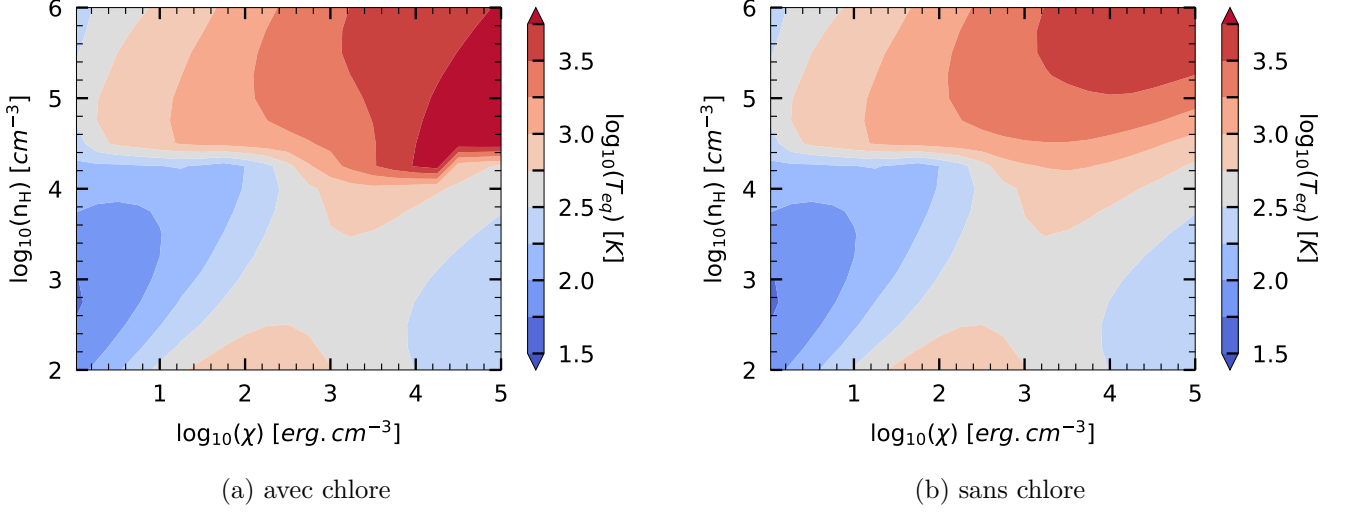


FIGURE I.6 – Température en bord atomique de nuage calculée par le code PDR de Meudon

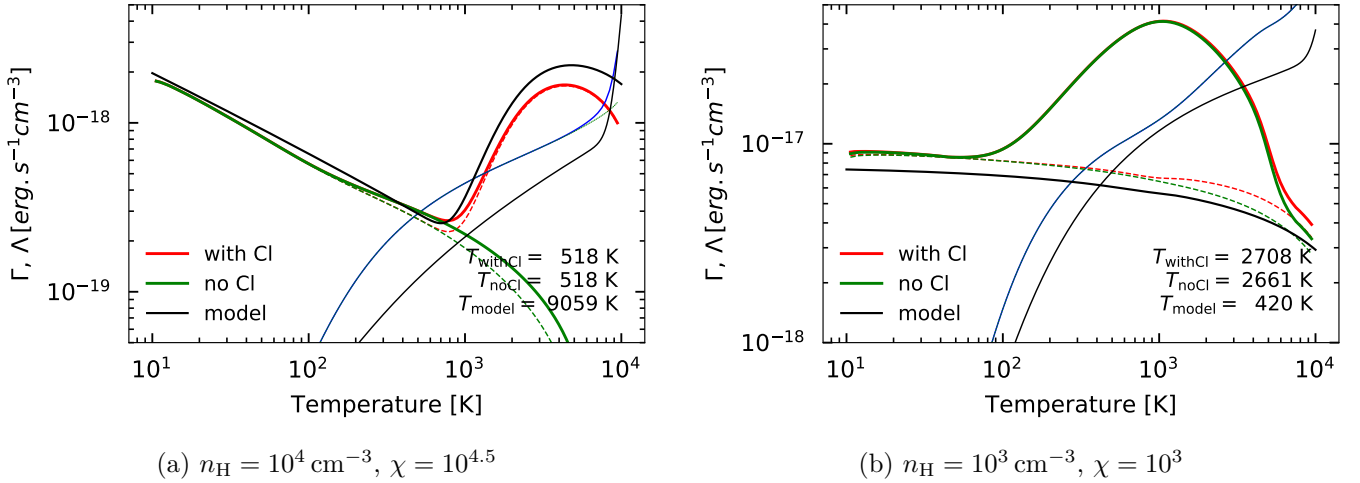


FIGURE I.7 – Courbes de chauffage et refroidissement, au bord atomique de nuage, de modèles à densités constantes. Mêmes règles de couleurs que dans la figure I.4a.

I.7 A la recherche d'observables

I.7.1 Détermination d'un traceur

Nous avons pu prouver l'existence et expliquer le fonctionnement de l'instabilité provoquée par le chlore dans le bord atomique des PDR. Afin de l'observer, il est nécessaire de trouver les diagrammes d'intensités

impactés par le chlore.

On choisit un modèle ($n_H = 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^{4.5}$) dont le bord atomique devient nettement plus chaud lorsque l'on ajoute du chlore (figure I.6). En traçant les diagrammes d'émission calculés par le code nous constatons que les raies N, N^+ , S, Si sont modifiées par la solution chaude (figure I.8, A.1, A.2, A.3). La présence du chlore augmente les raies du N, N^+ et Si d'un facteur 10 et du S d'un facteur 100. Bien que le chlore intensifie de manière importante les raies d'émissions, il y existe un seuil d'observabilité, de l'ordre de $10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, au dessus duquel les raies sont expérimentalement mesurables. Par conséquent on peut considérer seulement certaines raies du spectre de N. En revanche, les raies du CS, H_2O , H_2 , ne sont pas affectées par la présence de chlore dans le nuage (figure A.5, A.6, A.7, A.8) car le chlore agit dans la zone atomique où peu de molécule se forment.

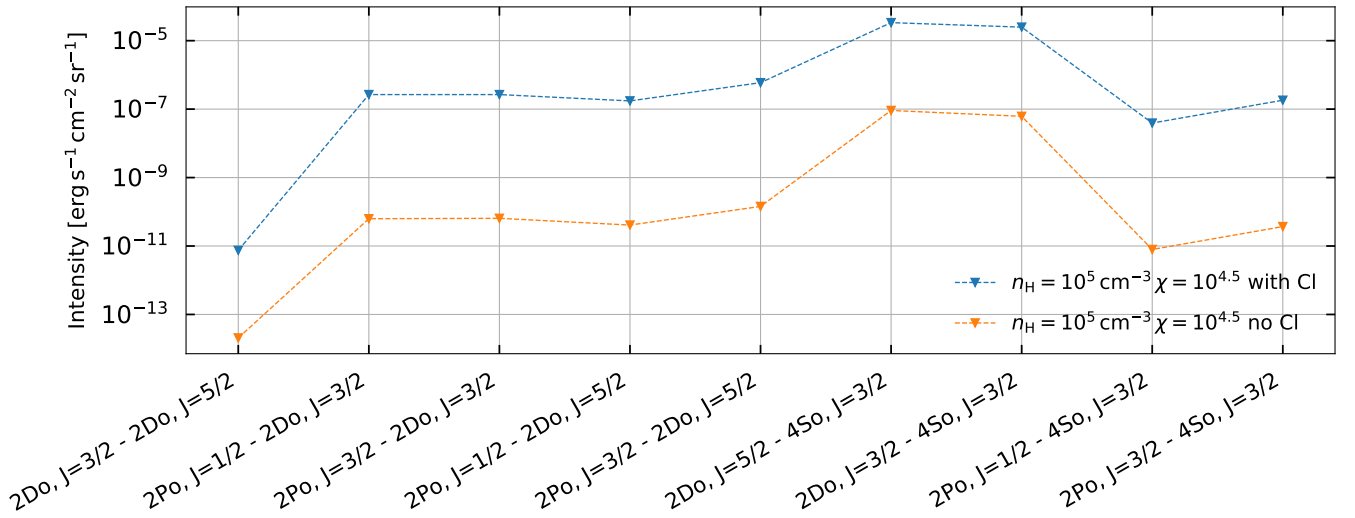


FIGURE I.8 – Diagramme d'intensité de N

I.7.2 Choix de la raie [N] 5200Å

On choisit donc la raie la plus intense de N. Il s'agit de la transition $Eu = 2D_{5/2}^0 \rightarrow El = 4S_{3/2}^0$ correspondant à la longueur d'onde 5200Å. Cette raie est dans le domaine du visible et pourrait être observée depuis la Terre par MUSE¹.

La figure I.9 représente le rapport des intensités de la raie [N] 5200Å des grilles de modèles. On constate que les régions dont les bords atomiques qui subissent l'emballlement de l'effet photoélectrique (figure I.6) ont des intensités de raies jusqu'à 10^6 fois plus grande. Essayer d'observer cette raie permettrait, à priori, de déterminer les bords atomiques chauffés par le chlore.

Il est cependant quasi impossible de l'observer car l'émission du N dans la partie atomique sera masquée par les émissions de l'azote situé avant le front d'ionisation de l'hydrogène. En effet, le potentiel d'ionisation de l'azote est 14.6 eV qui est plus grand que celui de l'hydrogène (13.6 eV) ce qui signifie que le front

1. Télescope terrestre géré par l'ESA observant dans le domaine du visible.
<https://www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/muse/overview.html>

d'ionisation de l'azote est devant celui de l'hydrogène. La raie de l'azote est produite par des excitations collisionnelles (avec H , H^+ , H_2 , He et e^- qui sont les espèces majoritaires dans le nuage) suivies d'émissions spontanées. La fraction électronique dans la partie atomique est de 10^{-3} alors qu'elle est de 1 dans la partie ionisée ce qui signifie que l'augmentation de l'intensité de la raie que l'on a observé est négligeable devant les émissions de N dans la partie ionisée du nuage.

Il est donc nécessaire de déterminer des traceurs qui ont des potentiels de ionisations inférieurs à celui de l'hydrogène et émettent dans le bord atomique du nuage.

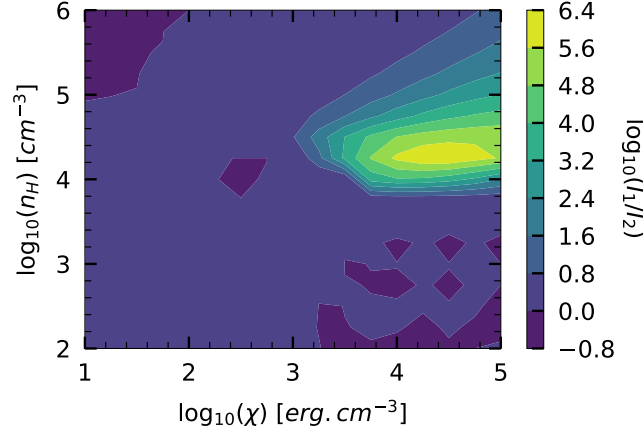


FIGURE I.9 – Rapport d'intensité de la raie $[\text{N}] \text{ Eu} = 2\text{D}_{5/2}^0$

Conclusion

On a compris que le chlore qui est d'ordinaire négligé déclenche une instabilité thermique dans les bords atomiques des nuages. Il est à la fois le support et le catalyseur de la formation d'électrons dans le gaz et déclenche un emballement de l'effet photoélectrique sur les grains. Bien que l'on ait malheureusement pas de traceurs capables d'identifier l'existence de la solution chaude dans les bords atomiques, il serait intéressant de voir les conséquences de cette bistabilité dans un code dynamique comme Hydra [Bron et al., 2018].

II Impact du H_2 sur la température du gaz

Le chauffage par H_2 a un rôle important dans les bords atomiques des PDR. Le H_2 est une espèce abondante dans le gaz capable d'absorber des photons UV. Elle peut convertir l'énergie UV en énergie thermique et chauffer le gaz grâce à la desexcitation collisionnelle. Ce processus est d'autant plus efficace dans les régions denses où les taux de collisions sont plus importants. La molécule a aussi un rôle indirecte sur la chimie du nuage ce qui peut impacter les raies. Ces processus sont améliorés par le pompage UV de la molécule qui excite de manière très efficace la molécule. Le principe est décrit dans la figure II.1.

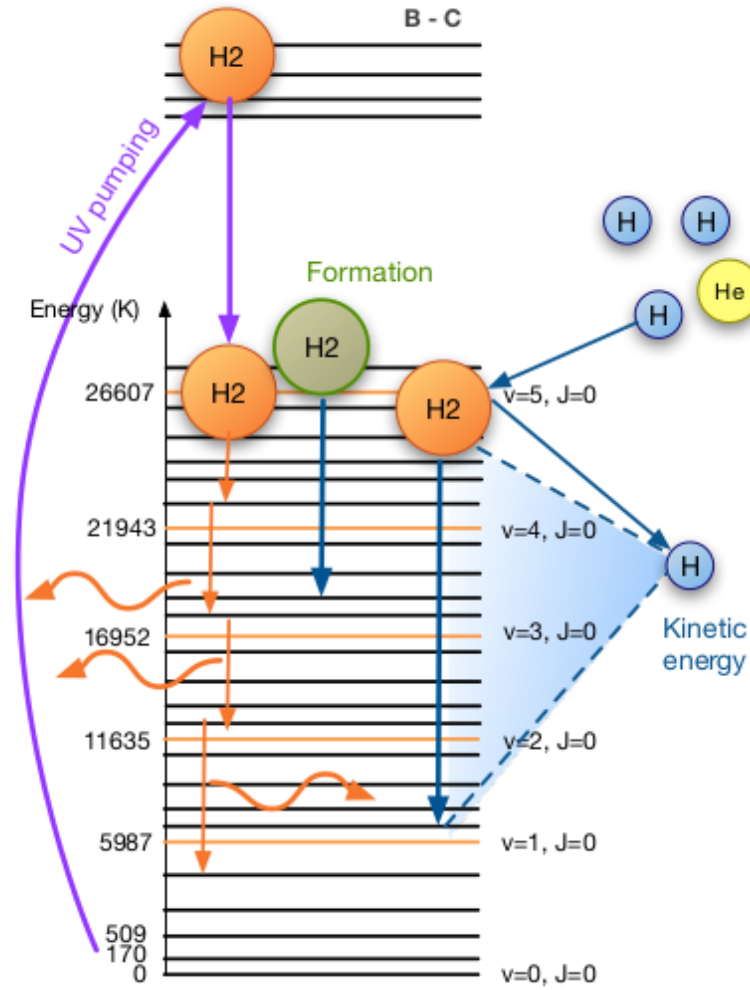


FIGURE II.1 – Fonctionnement du pompage UV de H_2

L'absorption d'un photon UV passe la molécule dans ses états électroniques excités B-C (transitions de Lyman ou Werner, $11 < h\nu < 13.6\text{eV}$) puis, par émission spontanée, se désexcite dans le continuum vibrationnel dans 10-15% des cas, ou bien, dans 85-90% des cas, dans un niveau fondamental ro-vibrationnellement excité ($J \geq 0, v > 0$). La molécule pourra alors se désexciter soit par émission spontanée soit par collisions avec H, He ou des électrons.

II.1 Réactions chimiques initiées par H₂

Certaines réactions chimiques peuvent avoir des barrières d'activation (ou énergies d'activation) qui correspondent à l'énergie qui doit être apportée aux réactifs pour initier une réaction (figure II.2).

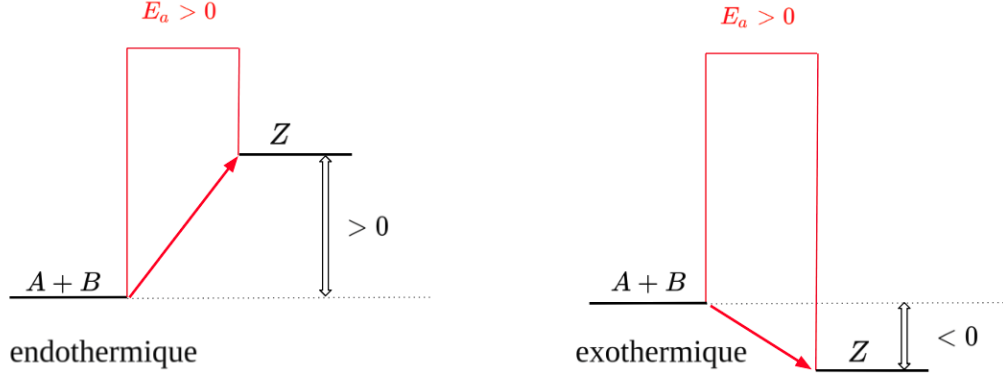


FIGURE II.2 – Diagramme d'énergie d'une réaction chimique ($A + B \rightarrow Z$) ayant une énergie d'activation non nulle

Pour passer cette barrière il faut que le gaz soit très chaud ou alors il faut prélever de l'énergie interne des réactifs. De nombreuses réactions permettant la formation de traceurs importants ont une barrière d'activation comme $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$ (4537 K), $O + H_2 \rightarrow OH + H$ (3241 K) ou bien $N + H_2 \rightarrow NH + H$ (16 607 K). C'est un phénomène déjà bien connu pour la formation du CH^+ par H_2 [Herráez-Aguilar et al., 2014, Zanchet et al., 2013]. Grâce au pompage UV, la molécule H_2 peut facilement initier les réactions auxquelles elle participe. Il faut alors connaître les taux de réactions états par états des réactifs. Ils sont déjà connus pour H_2 avec C^+ et H_2 et S^+ . Pour les autres espèces, il faut calculer un nouveau taux de réaction qui prend en compte l'énergie interne E_i que peut fournir chaque niveaux i de H_2 . On obtient un nouveau taux de réaction k' qui est de la forme :

$$k(T) = Ae^{-E_a/k_B T} \rightarrow k(T)' = \frac{1}{n_{tot}} \sum_i A_i n_i e^{-(E_a - E_i)/k_B T} \quad (II.1)$$

Ces nouveaux calculs des taux de réactions peuvent potentiellement changer les profils de température des nuages par l'exothermicité ou l'endothermicité des réactions chimiques. Ce n'est pas le cas. Néanmoins, les intensités des raies de traceurs importants comme le CO (figure II.3), H_2 (figure B.1) et H_2O (figure B.2) sont impactées. Une analyse des réseaux chimiques ont souligné l'importance d'une voie de formation du CO qui est souvent négligée. Les observations Herschel ont montré que la formation CO était principalement initiée par celle du CH^+ via $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$. Or, on a une nouvelle voie de formation principale qui initie celle du CO, il s'agit de $O + H_2 \rightarrow OH + H$ (le schéma de la figure II.4 décrit le réseau chimique de formation du CO).

D'autres espèces sont impactées par le nouveau calcul des taux de réactions comme N, HCN ou bien H_2O mais l'on n'en discutera pas. Cette étude a permis de mettre à jour la chimie des nuages. Dans les développements futurs, le code PDR intégrera ces nouveaux calculs des taux de formations pour les réactions ayant une barrière d'activation non nulle.

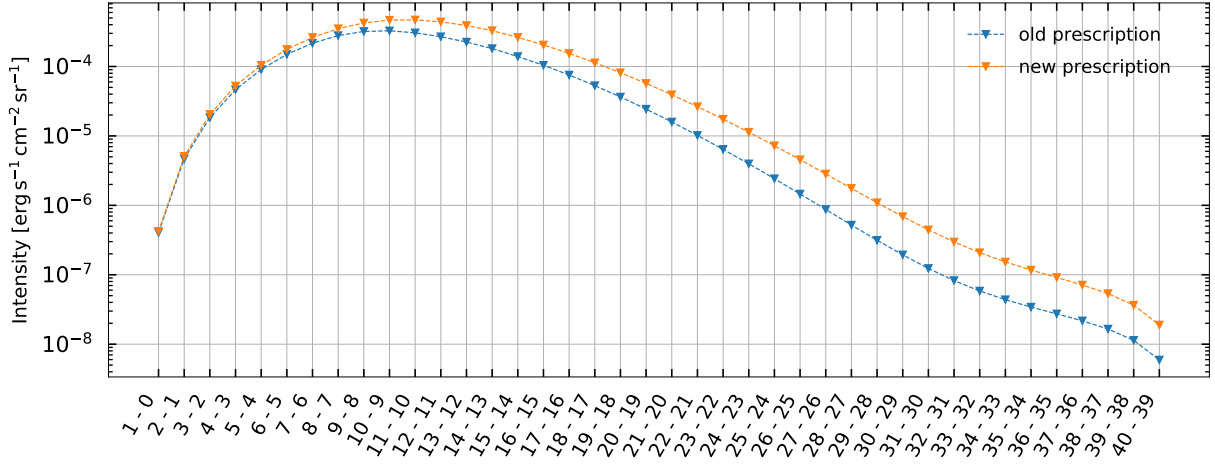


FIGURE II.3 – Diagramme d'intensité du CO avec la nouvelle prescription
Seules les transitions rotationnelles du CO ont été écrites (toutes s'effectuent à $v = 0$). On a utilisé un modèle isobare ($P = 2.8 \cdot 10^8 \text{ cm}^3 \text{ K}$ et $\chi = 3.1 \cdot 10^4$).

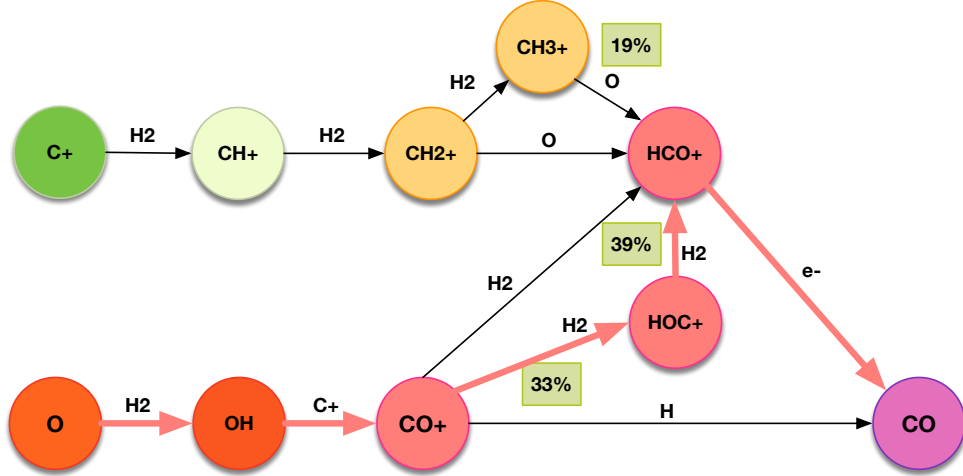
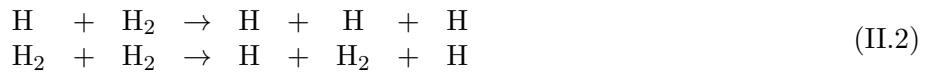


FIGURE II.4 – Nouveau réseau de formation du CO
A titre de comparaison, l'ancien réseau chimique se trouve en annexe figure B.3.

II.2 Dissociation collisionnelle du H₂

Une autre voie de destruction rapide du H₂ autre que la photodissociation est la dissociation collisionnelle (eq. II.2). Les taux de réaction de ces voies sont mal connues et jouent dans les bords atomiques des nuages où la température est élevée.



Il existe plusieurs prescriptions qui tentent d'estimer ces taux en fonction de la température. Deux ont été retenus dans le code : celle de Glover et Mac Low [Glover and Mac Low, 2007] et celle de Janev

[Janev et al., 2003]. On constate par ailleurs que la prescription de Glover obtient des taux de dissociation plus faibles devant ceux de Janev ce qui peut changer radicalement la composition du nuage. Nous avons étudié les modifications qu’apportaient la prescription de Glover par rapport à Janev puis avons choisi de garder celle qui correspondait le mieux aux observations.

II.2.1 Grilles de modèles - Bord atomique

Sur la figure C.1, la température en bord de nuage atomique est représentée. On constate qu’elle est sensiblement similaire selon que l’on utilise la prescription de Janev ou de Glover à l’exception des PDR denses et fortement illuminées ($n_H \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \geq 10^3$) qui sont légèrement plus chaudes. En visualisant sur la figure II.5 la différence des cartes de température, on comprend que la prescription de Glover a tendance à chauffer les bords atomiques de l’ensemble des PDR de +200 K et peut augmenter la température jusqu’à +800 K pour les PDR denses et fortement illuminées.

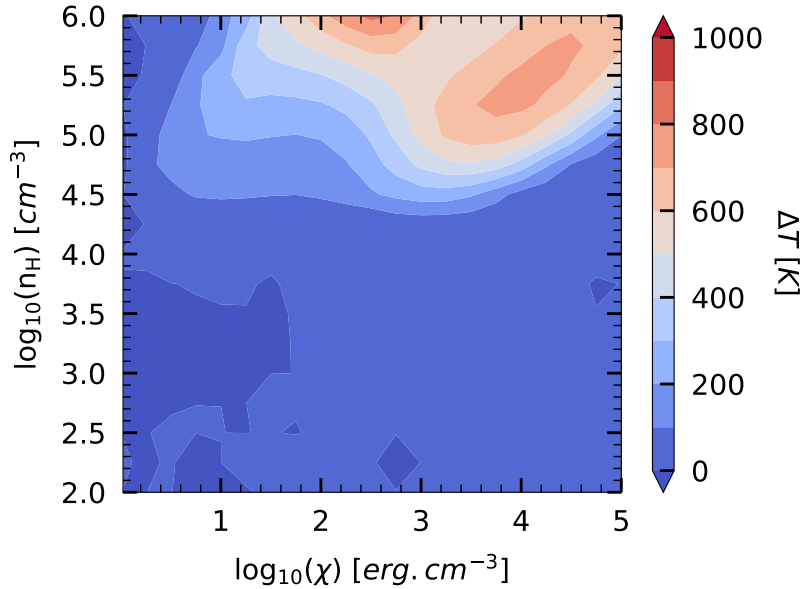


FIGURE II.5 – Différence de température aux bords de nuage entre des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

Cette différence est due à l’amélioration du chauffage par la molécule H_2 . La prescription de Glover diminue les taux de destruction ce qui produit davantage de H_2 dans le bord atomique. Le chauffage étant d’autant plus efficace que la densité de H_2 est grande, les bords atomiques de l’ensemble des PDR chauffent. Par ailleurs, le chauffage par H_2 devient particulièrement efficace dans les régions denses et fortement illuminées.

On constate sur la figure C.2 que le chauffage par H_2 reste dominant dans les bords atomique des PDR denses quelque soit la prescription que l’on utilise. En revanche, les processus de refroidissement (figure C.3) varient pour les PDR denses et faiblement illuminées ($n_H \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \leq 10^3$). Les réactions de dissociations collisionnelles sont des réactions endothermiques efficaces. Le changement de prescription diminue les taux de réaction et donc les taux de refroidissement par ces réactions.

II.2.2 Grilles de modèles - Transition H/H₂

La transition H/H₂ marque la frontière entre le milieu atomique et moléculaire du nuage. Elle survient une fois que le H₂, jusque là détruit dans la zone atomique par les photons UV, parvient à se former en suffisamment grande quantité pour que l'hydrogène soit majoritairement sous forme moléculaire. Nous avons défini le critère tel qu'il y ait autant d'élément hydrogène sous forme atomique que moléculaire soit $n(\text{H}) = 2n(\text{H}_2)$. La température et l' A_v auxquelles s'effectuent la transition H/H₂ sont déterminants puisque les observables moléculaires se forment et sont excitées dans cette région du nuage qui est encore chaude.

Les figures II.6 et C.4 montrent les températures et les A_v des transitions de chaque modèles. Alors que la position de la transition dans le nuage reste sensiblement identique (figure C.4) en passant de la prescription de Janev à celle de Glover, la température parvient à dépasser un plateau à 600 K et atteint les 1000 K (figure II.6). Ce résultat peut avoir un impact important sur les diagrammes d'intensités des traceurs.

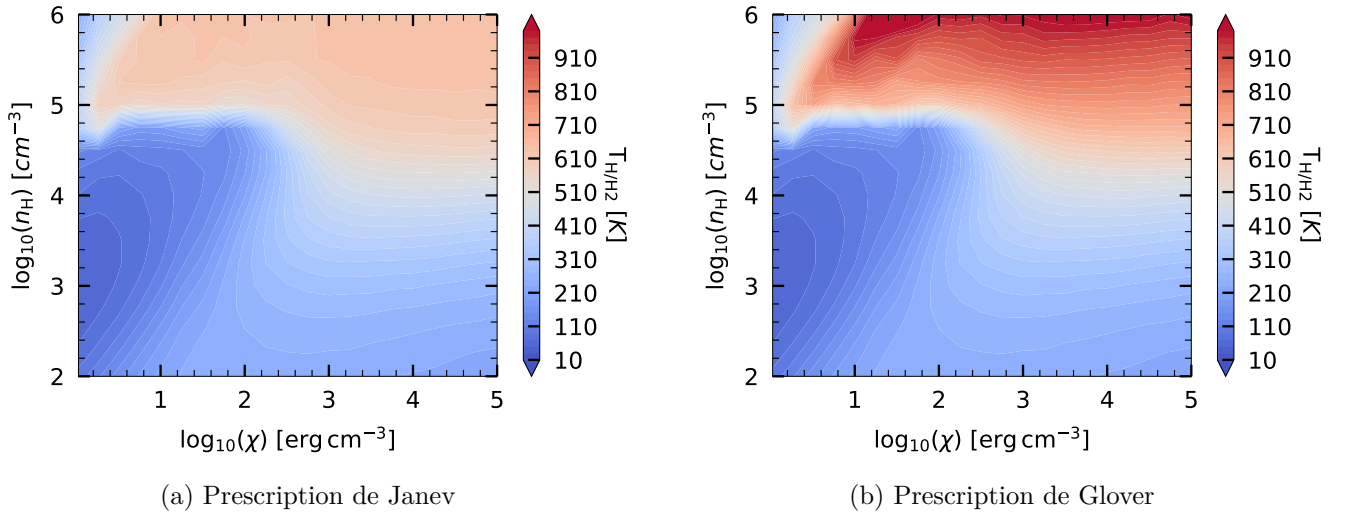


FIGURE II.6 – Comparaison de la température à la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

II.2.3 Étude d'un modèle particulier

On cherche à comprendre dans cette section d'où vient l'augmentation de la température à la transition H/H₂. On a choisi un modèle à $n_{\text{H}} = 10^{5.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$ qui subit une augmentation de +300 K à la frontière. Le profil de température (figure II.7a) montre une augmentation locale de la température commençant à un $A_v \approx 0.1 \text{ mag}$ et finissant à $A_v \approx 0.4 \text{ mag}$ accompagnée d'une augmentation de la densité de H₂. L'augmentation locale de température est également très proche de la transition C⁺/C/CO permettant de former du CO chaud.

La figure II.8 trace les taux de chauffages en fonction de l'extinction. On constate, qu'avec la prescription de Glover, les réactions chimiques chauffent le gaz de manière aussi intense que l'effet photoélectrique ce qui est peu commun dans les PDR. Afin de comprendre l'origine de cette augmentation locale de température, on a tracé à $A_v \approx 0.2 \text{ mag}$, les courbes de chauffage et de refroidissement en fonction de la température (figure II.9). L'équilibre thermique du gaz est déterminée par l'intersection de la courbe de chauffage et de refroidissement total. A première vue, les allures des courbes sont très différentes. En passant de la prescription de Janev à celle de Glover, on voit qu'un nouveau processus de chauffage intervient entre 100 K et

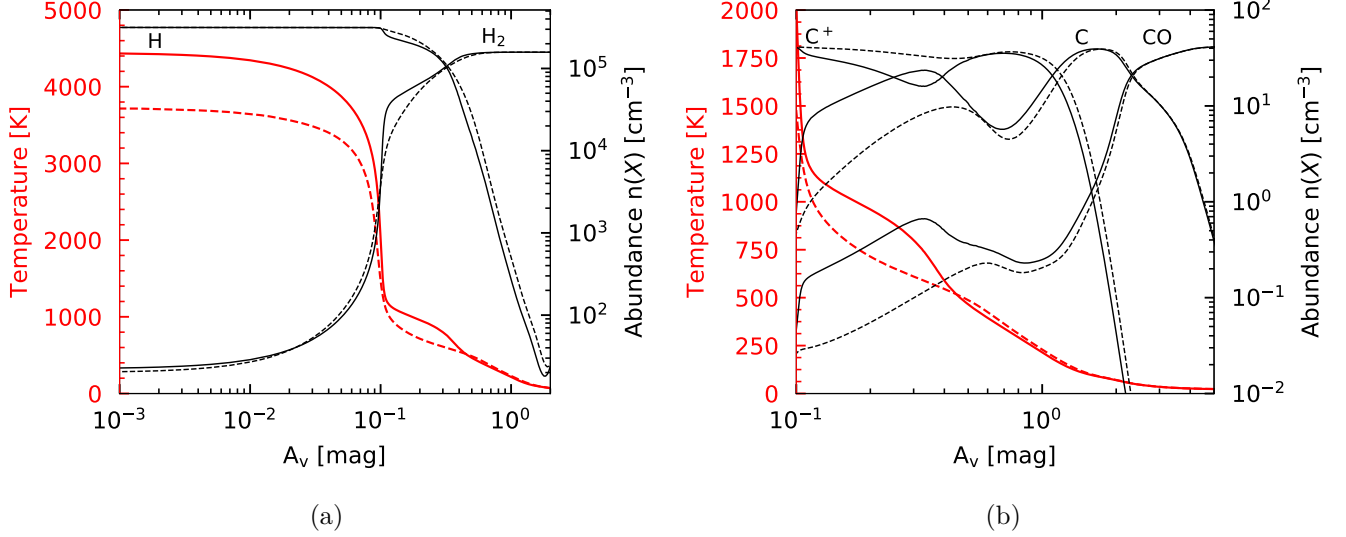
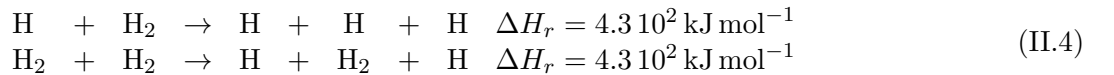
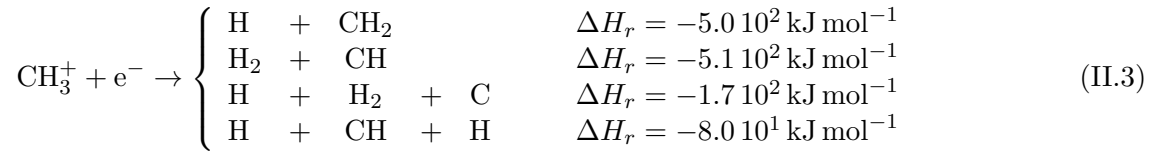


FIGURE II.7 – Profils de densités de H et H₂ (a) et C⁺, C et CO (b) d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$). Le trait plein correspond au calcul utilisant la prescription de Glover et les trait pointillés celle de Janev. La température est représentée en rouge.

1000 K. Il s'agit des réactions chimiques qui se mettent à chauffer le gaz de manière plus efficace.

Une analyse préliminaire a montré que le caractère exothermique ou endothermique des réactions chimiques était globalement gouverné par la compétition entre la recombinaison électronique du CH₃⁺ (qui est exothermique et qui peut se faire sous quatre formes) et la dissociation collisionnelle du H₂ (qui est endothermique). Les réactions et leurs enthalpies de réactions ont été écrites ci dessous. Le passage de la prescription de Janev à celle de Glover a pour effet d'affaiblir la destruction du H₂ ce qui rend le bilan des réactions chimiques exothermique. Il permet également de former plus facilement du H₂ qui devient alors un agent refroidissant efficace. On le visualise sur la figure II.8.



L'augmentation de température est provoquée par le changement d'allure de la courbe de refroidissement total ce qui déplace le point d'équilibre vers des températures plus chaudes. Les conséquences sont importantes. Plus de CO chaud parvient à se former après la transition H/H₂ donnant des raies (figure C.5) plus intenses. Les raies $8 \leq J \leq 15$ doublent leur intensités tandis que les raies $J \geq 15$ augmente d'un facteur 10 ce qui est majeur. Elle permet notamment de retrouver des les diagrammes d'intensité du CO observée ([Joblin, C. et al., 2018]). La figure II.10 trace les diagrammes d'intensités du CO pour une grille de modèle. Comme l'augmentation locale agit après la transition H/H₂ et que le CO est un traceur moléculaire, la figure II.10 montre l'impact global de l'augmentation de la température à la transition. Elle concerne les mêmes régions PDR que la figure II.6.

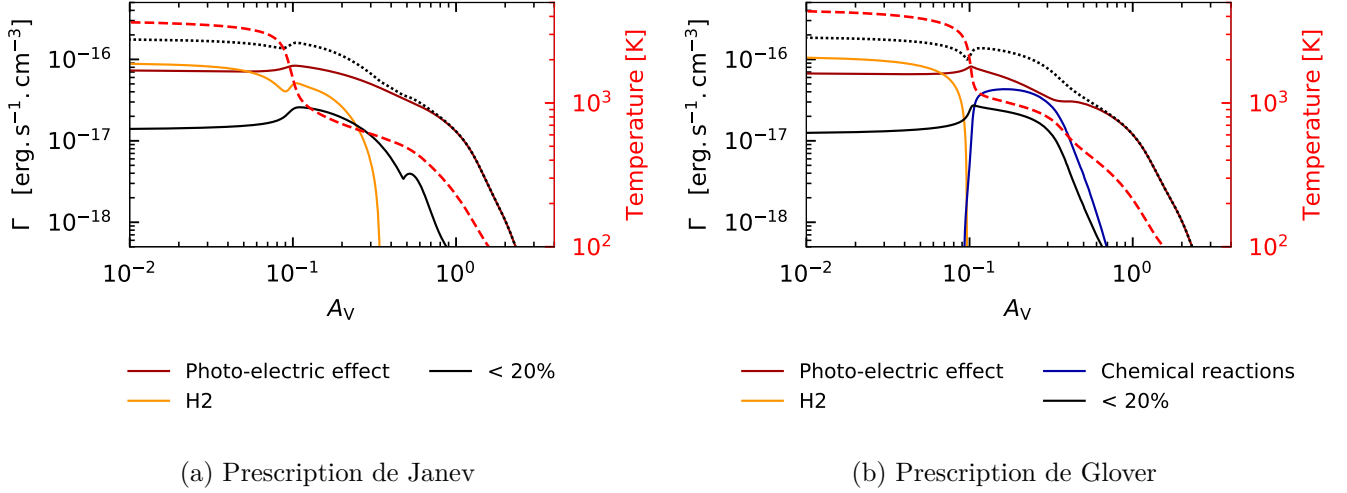


FIGURE II.8 – Profils des taux de chauffages d'un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Janev ou de Glover. La température est représentée en tiret rouge. Le taux de chauffage total est en pointillé noir.

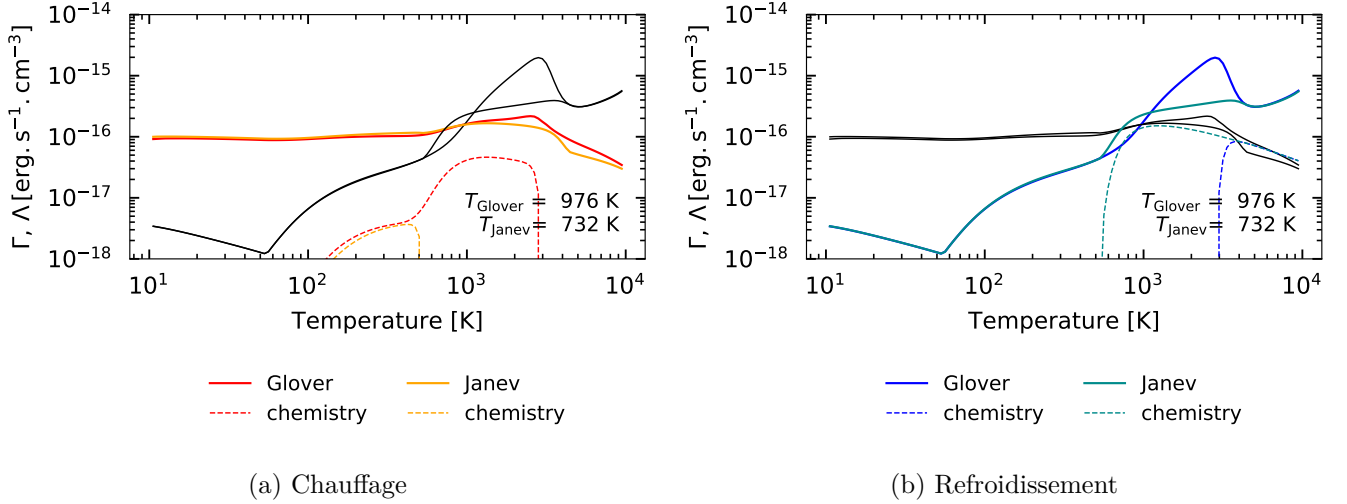


FIGURE II.9 – Efficacité du chauffage des réactions chimiques en fonction de la température pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$). Les courbes en rouge et jaune sur la figure (a) représente les processus de chauffage tandis que celles en noires les courbes de refroidissement total. Sur la figure (b), les courbes en bleu et bleu clair représentent le refroidissement alors que celles en noires le chauffage.

II.3 Nouveaux taux de collisions de H₂

On a vu dans les sections précédentes qu'une nouvelle chimie du H₂ pouvait avoir un impact fort sur les profils de densité et de température du gaz. Nous cherchons maintenant à affiner la physique qui décrit le phénomène de chauffage par H₂. Afin de calculer le taux de chauffage par desexcitation collisionnelle, le code PDR effectue le bilan des transitions collisionnelles des niveaux de H₂. Il dépend directement des taux de collision k_{ij} qui donnent la probabilité d'une transition de l'état i à l'état j par collision avec une espèce du gaz. On connaissait ces k_{ij} seulement pour les états peu énergétiques du H₂ ($J \leq 15$ de l'état fondamentale). De récents calculs de chimie semi-classique ont permis d'estimer avec précision les taux de

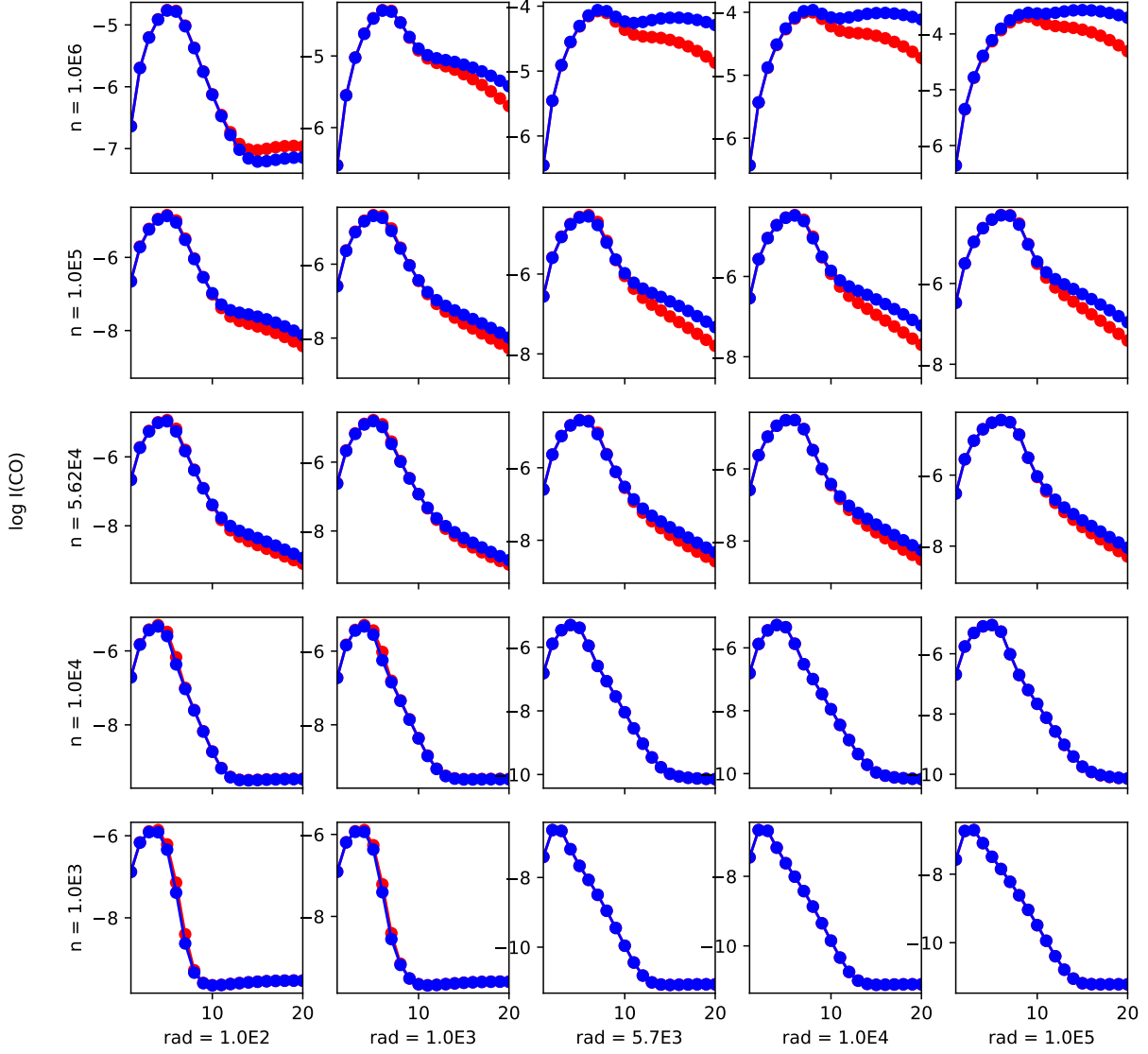


FIGURE II.10 – Diagramme d'intensité des raies du CO pour une grille de modèles à densité constante. Les lignes en rouge sont les modèles utilisant la prescription de Janev tandis que celles en bleues utilisent la prescription de Glover. Les 20 premières transitions sont représentées.

collisions jusqu'à des niveaux très énergétiques [Bossion et al., 2018].

Une étude rapide a montré que l'utilisation des nouveaux taux de collisions montrait que H_2 chauffait globalement les bords atomiques de +100K (figure II.11a). On sait que H_2 peut provoquer une instabilité thermique, dans différentes zones du nuage, mais pour des conditions physiques que l'on ne connaît pas. Le code PDR obtient des températures en bords atomique de nuage plus chaudes pour les PDR denses et peu illuminées avec les nouveaux taux de collisions, ce qui suggère l'existence d'une instabilité thermique. En effet, le code PDR ne pouvant déterminer qu'une seule température d'équilibre, les PDR qui était anciennement à la température d'équilibre froide deviennent chaude provoquant un ΔT important. En revanche, la comparaison des températures maximales atteintes par les PDR peuvent révéler de nouvelles régions dans l'espace des paramètres qui sont impactées par l'utilisation des nouveaux taux de collisions (figure II.11b). Les bords atomiques des PDR étant les zones les plus proche de la source de rayonnement, elles sont généralement les zones les plus chaudes du nuage. La carte II.11b doit, à priori, englober la carte de température du bord atomique des PDR. Pourtant, ce n'est pas le cas.

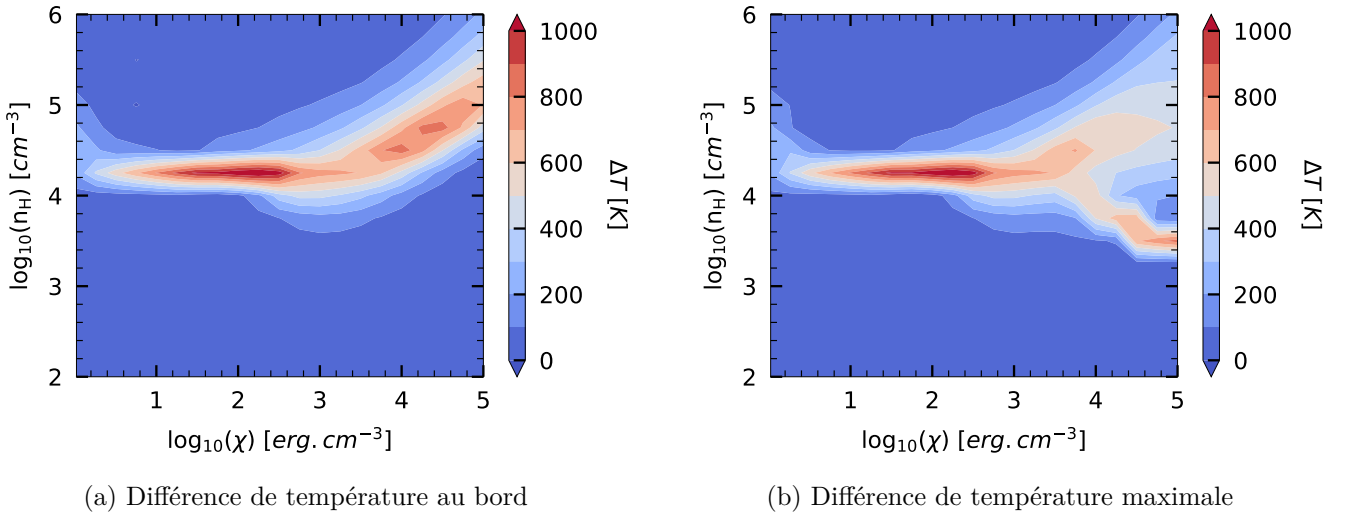
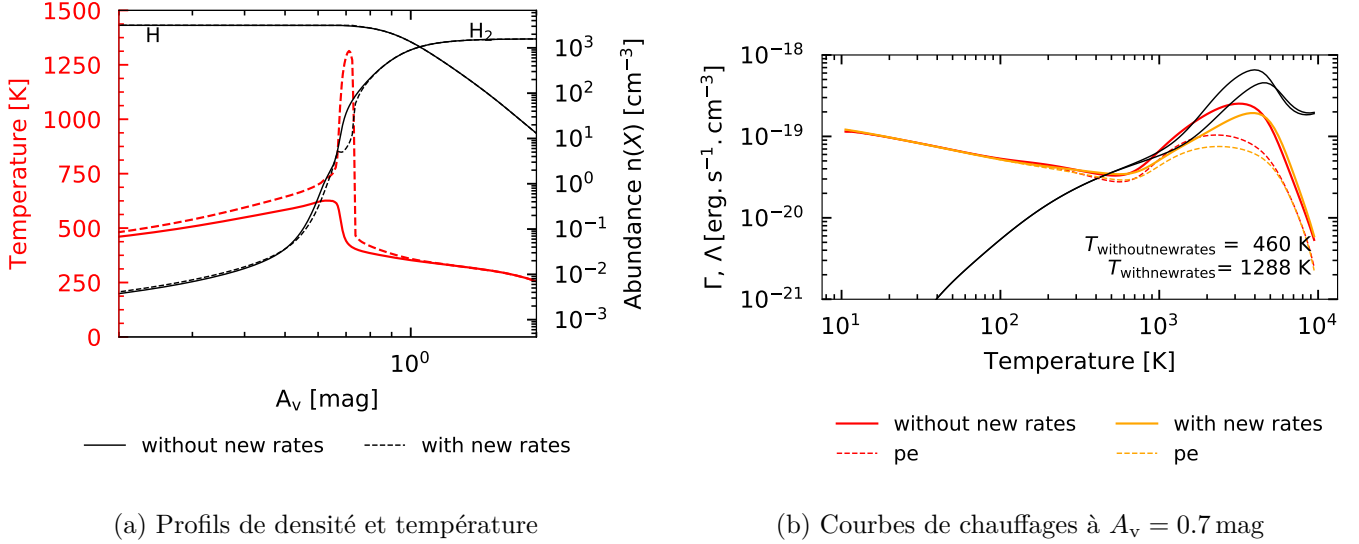


FIGURE II.11 – Carte de température comparant l'impact des nouveaux taux de collisions de H_2 sur des modèles à densités constantes.

II.3.1 Étude des courbes de chauffage et de refroidissement

En traçant les profils de densités d'un modèle ($n_H = 10^{3.5} \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^{4.5}$) on constate une augmentation brutale de la température à la fin de la zone atomique vers $A_v = 0.7 \text{ mag}$ (figure II.12a) accompagné d'une diminution de la densité de H_2 . Les courbes de chauffage et de refroidissement (figure II.12b) de cette zone du nuage montre qu'il existe une bistabilité thermique provoquée par un emballement de l'effet photoélectrique à partir de $T \geq 800 \text{ K}$ et du refroidissement par H_2 . Elle existait déjà sans les nouveaux taux de collisions qui diminuaient même l'emballement de l'effet photoélectrique. Les figures II.13a et II.13b montrent séparément les courbes de chauffage et de refroidissement pour les deux modèles utilisant ou non les nouveaux taux. Ces courbes pointent par ailleurs une ambiguïté dans les fichiers *.res* sur le calcul des totaux notamment sur les termes de refroidissement. En effet, la somme des colonnes de refroidissement dépasse celle du total donnée par le code. Comme j'ai préféré me fier aux processus plutôt qu'au total, les courbes de total ont été recalculées à partir des autres colonnes. Cela peut amener à la situation où l'on ne parvient pas à retrouver la température prédite par le code avec celle donnée par l'intersection des courbes

de chauffage et de refroidissement (figure II.13b). Je n'ai pas eu le temps de chercher les raisons. Il y a néanmoins deux autres points remarquables : à basse température ($T \geq 100\text{K}$) le refroidissement total devient négatif à cause des termes de refroidissement par les raies de C^+ et de O mais aussi par le couplage gaz-grains qui devient chauffant ; la colonne *refrec* qui est le refroidissement par recombinaison électroniques des ions est comptabilisée comme un terme négatif alors que les autres colonnes de refroidissement sont positives.



(a) Profils de densité et température

 (b) Courbes de chauffages à $A_v = 0.7$ mag

 FIGURE II.12 – Modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{3.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$).

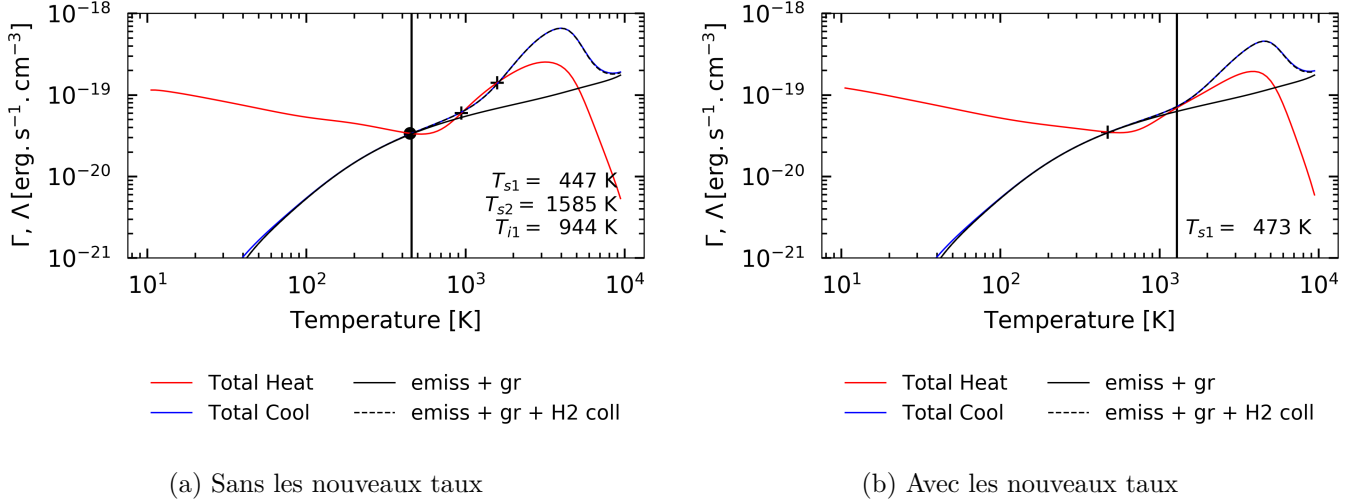
Sur (b), les courbes de chauffage total sont représentées en trait plein rouge et orange. Les traits noirs sont les courbes de refroidissement total qui est principalement assuré par les émissions de C^+ et de O , le couplage gaz-grains et le refroidissement par les émissions ro-vibrationnelles du H_2 particulièrement actif entre $T \sim 10^3 - 10^4\text{K}$.

II.4 Amplification de l'effet photoélectrique par le carbone

J'ai analysé la chimie du nuage à $A_v = 0.7$ mag et compris que l'amplification de l'effet photoélectrique fonctionnait selon un mécanisme similaire à celui induit par le chlore. Ici l'atome de chlore est remplacé par l'atome de carbone et la recombinaison des ions chlore par transfert de charge par la formation par H_2 suivie de la dissociation radiative de la molécule CH^+ . Un schéma résume le mécanisme de chauffage (figure II.14). Le carbone ayant un potentiel de ionisation de 11.3eV il peut être photoionisé même à cette profondeur du nuage. La présence d'une grande quantité de H_2 excité permet la formation du CH^+ qui se dissocie radiativement formant un ion H^+ et un atome C . Celui peut de nouveau se rendre disponible pour la photoionisation. Comme pour le chlore, ce mécanisme permet de former efficacement une grande quantité d'électrons qui produit un emballement de l'effet photoélectrique sur les grains. J'ai identifié les réactions principales en jeu et construit un modèle permettant de retrouver l'augmentation de la fraction électronique à haute température.

II.4.1 ion hydrogène

Les réactions efficaces qui concernent les ions hydrogènes dans cette région du nuage sont :


 FIGURE II.13 – Courbes de chauffage et de refroidissement à $A_V = 0.7$ mag

Les traits verticaux représentent la température d'équilibre trouvé par le code PDR. Les marqueurs (cercle plein et croix verticale) sont calculées comme les intersections des courbes de chauffage et de refroidissement. La température d'équilibre choisie par le code est indiquée par le cercle plein tandis que les autres solutions trouvées sont indiquée par une croix verticale.

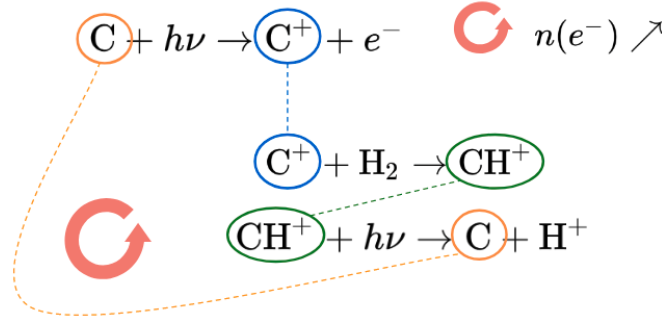
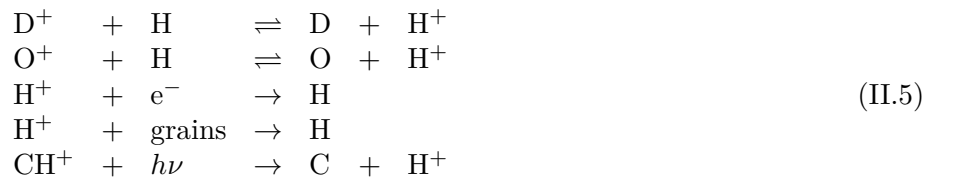
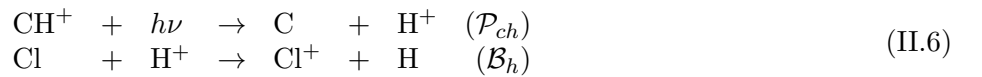


FIGURE II.14 – Mécanisme de l'instabilité induit par le carbone



On ne prend pas en compte les réactions impliquant D et O car elles forment autant de H⁺ qu'elles en détruisent. On néglige dans un premier temps la recombinaison de H⁺ sur les grains qui ne modifie que très peu le profil de densité. Il reste :



avec \mathcal{P}_{ch} en s⁻¹ et \mathcal{B}_h en cm⁻³s⁻¹ les coefficients de réactions.

Le bilan de formation donne :

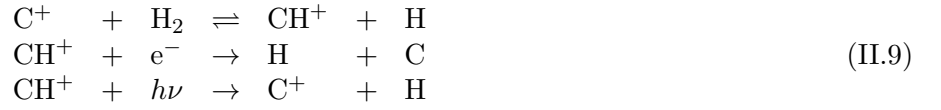
$$\frac{d}{dt}n(\text{H}^+) = \mathcal{P}_{ch}n(\text{CH}^+) - \mathcal{B}_h n(\text{H}^+)n(e^-) \quad (\text{II.7})$$

ce qui donne en considérant que $n(e^-) \approx n(\text{H}^+)$:

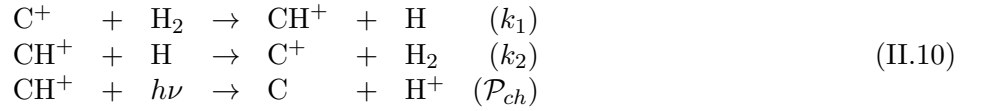
$$\boxed{n(\text{H}^+) = \sqrt{\frac{\mathcal{P}_{ch}}{\mathcal{B}_h} n(\text{CH}^+)}} \quad (\text{II.8})$$

II.4.2 molécule CH^+

De même les réactions impliquant la molécule CH^+ sont :



On négligera seulement la recombinaison dissociation. On pose deux nouveaux coefficients de réactions k_1 et k_2 en $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$.



Le bilan de formation du CH^+ donne

$$\frac{d}{dt}n(\text{CH}^+) = k_1 n(\text{C}^+)n(\text{H}_2) - k_2 n(\text{CH}^+)n(\text{H}) - \mathcal{P}_{ch}n(\text{CH}^+) \quad (\text{II.11})$$

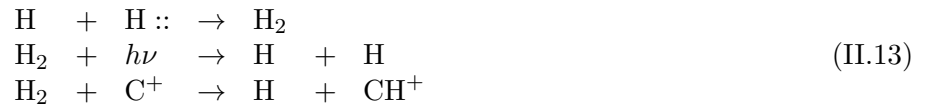
Même à $A_V = 0.7$ mag, l'hydrogène reste principalement atomique (voir figure II.12a) et on a $n_{\text{H}} \approx n(\text{H})$. Il est également correct de poser $n(\text{C}^+) \approx \delta_{\text{C}} n_{\text{H}}$ dans la mesure où le carbone est principalement atomique. On obtient alors :

$$\boxed{n(\text{CH}^+) = \frac{k_1 \delta_{\text{C}} n_{\text{H}}}{\mathcal{P}_{ch} + k_2 n_{\text{H}}} n(\text{H}_2)} \quad (\text{II.12})$$

Il faudrait maintenant chercher à estimer la densité de H_2 en fonction de la température à cette position du nuage.

II.4.3 molécule H_2

Les réactions les plus efficaces sont



Il est pourtant difficile d'estimer le taux de formation de H_2 sur les grains. En prenant les formules proposées dans [Röllig, M. et al., 2006] que j'ai fitté avec les taux de réactions données par le code, je n'ai pas pu obtenir des taux de formation et de destruction du H_2 satisfaisant. J'ai donc choisi de ne pas chercher à estimer la densité du H_2 et ai pris celle donnée par le *.res* pour le besoin de la démonstration.

II.4.4 thermique

Nous sommes maintenant en mesure d'estimer la densité d'électrons en fonction de la température. Le modèle que nous avons construit retrouve l'emballlement de l'effet photoélectrique à partir de $T \geq 800\text{K}$ ce qui prouve que nous avons compris le mécanisme de chauffage. On a calculé le refroidissement par les émissions de H₂ (pointillé bleue) à partir d'une expression analytique ([Röllig, M. et al., 2006], équation C.1) qui ne prend en compte que les émissions vibrationnelles de la molécule. Or les émissions depuis les états rotationnels sont également très efficaces pour refroidir le gaz, c'est pourquoi on ne parvient pas à retrouver le refroidissement calculé par le code. Il resterait maintenant à analyser dans quelles conditions physiques cette bistabilité peut se produire.

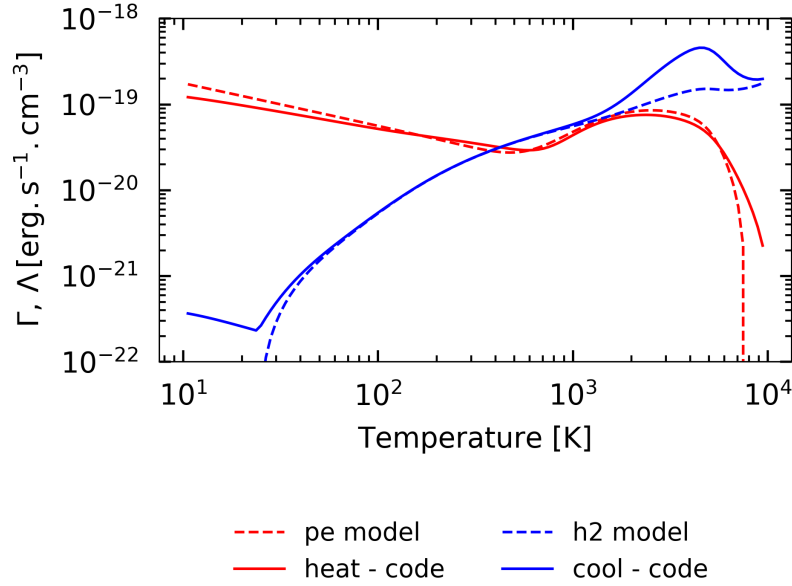


FIGURE II.15 – Comparaison du modèle chimique avec le code PDR

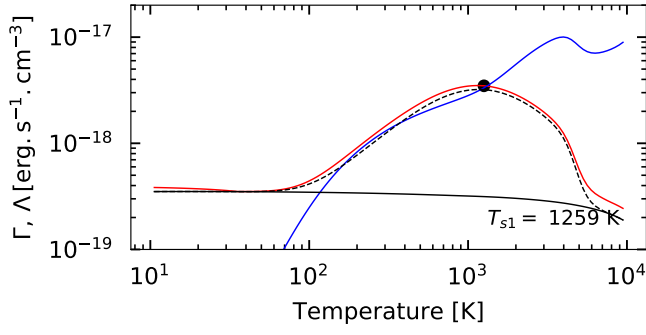
II.5 A la recherche de l'instabilité induite par H₂

Sur toutes les cartes de températures des bords atomiques de PDR, on a remarqué une zone à fort gradient pour les PDR à $n_{\text{H}} \sim 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ et faiblement illuminées. De plus, le passage de la prescription de Janev à celle de Glover ainsi qu'à l'utilisation des nouveaux taux de collisions de H₂ rend le chauffage par pompage UV de H₂ plus efficace qui déplace la zone à gradient. On a voulu étudier ces régions des PDR et avons tracé les courbes de chauffage et de refroidissement en bord de nuage pour un modèle ($n_{\text{H}} = 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^2$) ayant :

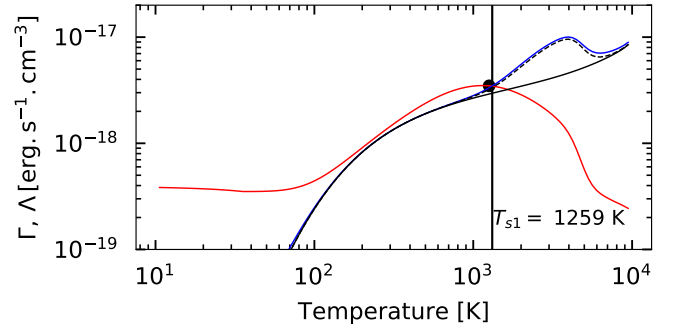
- la prescription de Janev et qui n'utilise pas les nouveaux taux de collisions (cas 1)
- la prescription de Glover et qui n'utilise pas les nouveaux taux de collisions (cas 2)
- la prescription de Glover et qui utilise les nouveaux taux de collisions (cas 3)

Les courbes sont rassemblées sur la figure II.16. Pour ces conditions physiques de PDR, le chauffage par H₂ change l'allure de la courbe du chauffage total de telle sorte qu'une bistabilité peut apparaître dans les bords atomiques des PDR. Sans les taux de collisions, l'utilisation de la prescription de Glover détruit moins de H₂ lorsque le gaz est chaud. Le chauffage (mais aussi le refroidissement) par H₂ change d'allure aux hautes températures ce qui déplace le point d'équilibre vers du gaz plus chaud. L'utilisation des nouveaux taux

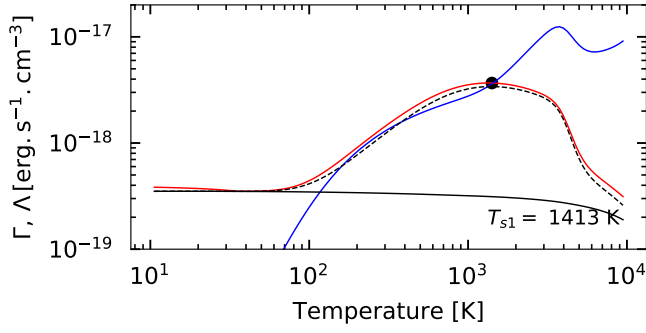
augmente globalement l'efficacité du chauffage par H_2 qui déplace aussi le point d'équilibre vers du gaz plus chaud. On constate enfin que l'instabilité apparaît presque pour les modèles n'utilisant pas les nouveaux taux de collisions. L'on pourrait peut être l'observer pour une PDR moins dense. La modification qu'apporte l'utilisation des nouveaux taux ne fait que déplacer dans l'espace des paramètres la région bistable .



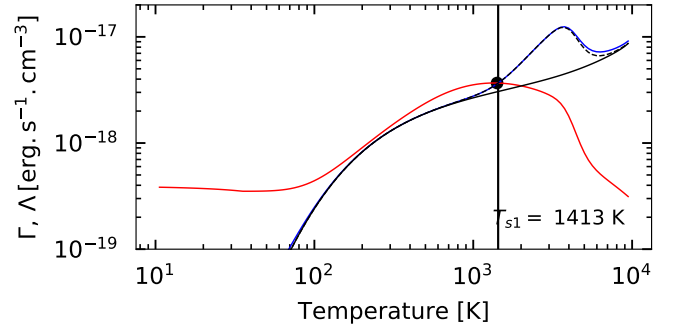
(a) Chauffage - cas 1



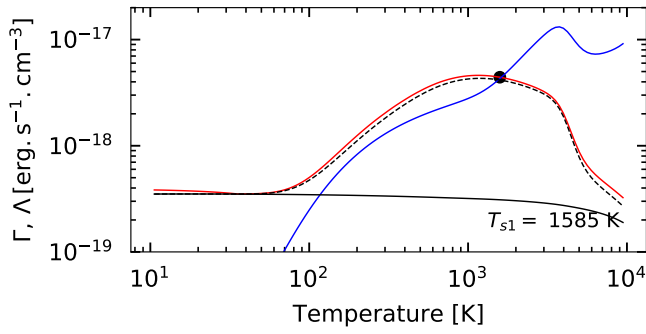
(b) Refroidissement - cas 1



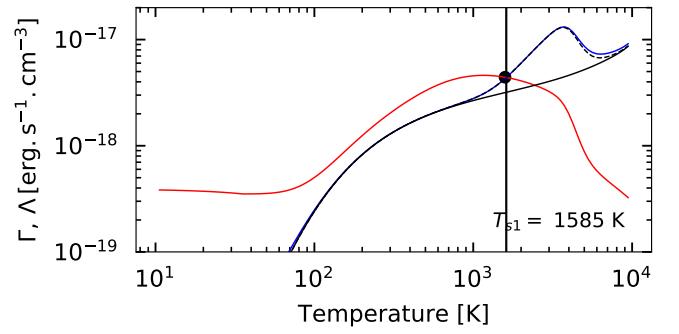
(c) Chauffage - cas 2



(d) Refroidissement - cas 2



(e) Chauffage - cas 3



(f) Refroidissement - cas 3

 FIGURE II.16 – Bord atomique du nuage, modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^2$)

III Explication du code python

J'ai écrit pendant mon stage des scripts python pour manipuler le code PDR ainsi que pour traiter les données de sorties. De manière générale, tout est rangé dans le dossier `./Result_test` d'où je travaillais. Certaines fonctions faisaient appels à des parties du code PDR comme l'extracteur ou les fichiers des raies des traceurs. J'utilisais pour ma part cette version du code : `./PDR155stag_SVN` qui était rangée au même niveau que `./Result_test`. J'expose ici l'arborescence de mes fichiers.

III.1 Result_Test/

repository des .in : pdrin
repository des scripts : analysePDR

C'est le dossier contenant les `.txt` des modèles ainsi que les scripts d'analyse.

Les dossiers commençant par `OrbarJ18_BestMod_*`, `PDR155_*` et `Neufire_*` (contraction astucieuse de Neufeld & Wolfire) sont des modèles PDR résolus par le code. Ces dossiers comportent un dossier `brupt/` qui renferment des fichiers HDF5, `.bin`, `.stats` voire des `.res`; un dossier `data/` qui contient les extractions des HDF5 (via l'extracteur); et un dossier `figure/` qui contient les graphiques construits à partir des données de ces modèles (certains comparent plusieurs modèles à la fois et sont forcément rangés dans l'un des dossiers des modèles).

En construisant mes graphiques, j'essayais de former des fonctions génériques qui permettent de lire les fichiers, classer les tableaux et afficher des plots. Elles sont regroupées dans `plot_hdf5.py`, `plot_res.py` et `plotI.py`. Certaines fonctions sont devenues obsolètes.

Le dossier `traceurs/` renferme un script qui compare les raies des traceurs qui sont rangées dans les fichiers `.stats`. Ce script compare les `.stats` de deux modèles puis écrit un tableau qui classe les rapports d'intensités des raies. En prenant le \log_{10} du rapport des intensité, on obtient un score. Les rapports de raies les plus positifs et les plus négatifs sont les plus différentes entre les deux modèles. On peut ainsi comparer deux modèles PDR mais aussi que deux couples deux à deux.

Les scripts `soutenance.py` et `ED127.py` contiennent des fonctions que j'ai spécialement adaptée pour construire les graphes de l'oral de l'ED127 et de ma soutenance de master.

Je vais maintenant présenter les scripts d'analyse qui sont simplement des appels à mes fonctions qui sont rangés dans `plot_hdf5.py`, `plot_res.py` et `plotI.py`. Historiquement, je travaillais au début du stage avec les modèles PDR du type `OrbarJ18_BestMod_*`, `PDR155_*` et `Neufire_*`. Je faisais appel à mes fonctions depuis un terminal et presque aucune trace était gardée. Puis lorsque j'ai commencé à utiliser les grilles de modèles, j'ai créé des "scripts d'analyse" qui rassemble les appels. Les modèles que j'utilisais étaient des modèles PDR de la grille et ils étaient rangés dans un des dossiers de `./Result_test/GridSingle/`.

De plus, pour faire appel à mes modèles dans mes scripts j'utilise des objets qui renferme les noms complets de mes objets. Ils sont regroupés `config.py`. Ainsi, `compareCl` est un groupe de modèles PDR utilisé pour étudier l'impact du chlore. Il comporte des attributs faisant référence aux noms ("`Cl155_n_d5p0r4p5`") ainsi qu'à son fichier `.res`. Je garde toujours la structure `/brupt/`, `/data` et `/figure` pour un modèle. Voici une description des scripts d'analyse :

- `analysis46` compare l'impact du nouveau calcul des taux de réaction qui prend en compte l'énergie interne de H_2 , sur les raies des traceurs. On s'intéresse surtout au CO. Il ne faut pas oublier le png qui rassemble tous les réseaux de formations des molécules que j'ai pu étudier (`type46.png`).

- `analysisBosseChem` étudie l'augmentation locale de température au niveau de la transition H/H₂ au passage de la prescription de Janev à celle de Glover. Les diagrammes d'intensités de H₂ et de CO et les courbes de chauffage et de refroidissement au niveau de la bosse sont tracés. Les profils de densités H, H₂ ainsi que C⁺, C et CO sont créés. Certains graphes ont été reproduit pour un modèle isobare type barre d'Orion. J'en ai également profité pour voir l'impact de Glover sur le chauffage au bord du nuage.
- `analysisCl` trace les diagrammes d'intensités de raies de nombreux traceurs (moléculaires ou atomiques) ainsi que des courbes de chauffage et de refroidissement pour quelques modèles de la grille. Je compare également les courbes de chauffage et de refroidissement avec celles du modèle analytique du chlore (`modelCl`).
- `modelCl` copie simple du modèle analytique du chlore que j'utilise pour les graphes de `analysisCl`.
- `analysisGradT` : début de recherche de l'instabilité par H₂ dans les bords atomiques des régions peu illuminées.
- `analysispicT` étudie l'emballlement de l'effet photoélectrique à la fin de la zone atomique pour des PDR fortement illuminées. Je compare dans un premier temps les courbes de chauffage et de refroidissement en la zone du nuage. Puis j'observe les profils de densités en fonction de la températures pour les deux mêmes modèles.
- `modelC` est un premier modèle chimique expliquant l'emballlement de l'effet photoélectrique de `analysispicT`.
- `analysisSaddle` construit simplement un graphique pour essayer de comprendre pourquoi y a t-il un point selle sur les cartes de température des bords atomique des nuages.
- `analysisRes` décortique le `.res`. Il reste assez brouillon. Il a surtout servi à construire la fonction `sort_res` de `plot_res.py` qui refait les totaux des colonnes du `.res`.

Ne prenez pas en compte les fichiers `.xxx.py`.

III.2 Grille de modèles

repository sur gitlab : grilles

J'ai construit des grilles de modèles PDR que j'ai fait résoudre par différentes versions du code. Leurs noms signifient :

- `noCl155_n` : modèles à densité constante résolus par la version 1.5.2_rev_1900 du code PDR (+ prescription de Janev).
- `noCl155_P` : modèles à pression constante résolus par la version 1.5.2_rev_1900 du code PDR (+ prescription de Janev). Pas réellement utilisé.
- `Cl155_n` : modèles à densité constante résolus par la version 1.5.2_rev_1900 du code PDR (+ prescription de Janev). Ces modèles contiennent du chlore dans leurs réseaux chimiques.
- `Cl155_P` : modèles à pression constante résolus par la version 1.5.2_rev_1900 du code PDR (+ prescription de Janev). Pas réellement utilisé. Ces modèles contiennent du chlore dans leurs réseaux chimiques.
- `H2_n_1p7_nobossion` modèles à densités constantes résolus par la version 1.7.0_stab_1926 du code PDR (+ prescription de Glover).
- `H2_P_1p7_nobossion` modèles à pression constantes résolus par la version 1.7.0_stab_1926 du code PDR (+ prescription de Glover). Pas réellement utilisé.
- `H2_n_1p7_bossion` modèles à densités constantes résolus par la version 1.7.0_stab_1926 du code PDR (+ prescription de Glover). Ces modèles utilisent les nouveaux taux de collisions du H₂ calculé par Bossion.

- `H2_P_1p7_bossion` modèles à pression constantes résolus par la version `1.7.0_stab_1926` du code PDR (+ prescription de Glover). Pas réellement utilisé. Ces modèles utilisent les nouveaux taux de collisions du H_2 calculé par Bossion.

Une grille comporte quatre dossiers ainsi qu’une méta. Elles sont rangées dans ma session sur tycho chez `/data/Grid`. Il y a

- le dossier du code qui est utilisé;
- `/grid_nodes` qui contient tous les `.in` des modèles;
- `/data` qui contient les `.txt` qui sont extraits des HDF5 résultant des calculs;
- et `/processed` contient les fichiers `.txt` donnant sous forme d’un tableau rangé par ligne des grandeurs comme la température au bord ou l’intensité d’une raie.

Pour créer les cartes à partir de ces fichiers, je fais appel à mes scripts rangé dans `Result_test/Grid/`. Les dossiers de mes grilles contiennent un dossier pour ranger les figures (`/figure`) et un dossier pour ranger les données (`/processed`).

- `plotT.py` construit à partir des tableaux, les cartes de températures, de chauffage maximal etc...
- `plotI.py` construit les cartes d’intensités des raies.
- `run.py` rassemble les appels des fonctions.

III.3 Modèle analytique du chlore

repository sur gitlab : modelCl

Ce modèle est construit indépendamment du reste (`.Result_test/ModelCl`). Il ne fait pas appel aux fonctions regroupées dans `plot_hdf5.py`, `plot_res.py` et `plotI.py` bien que quelques unes y soient copiées. Le coeur du modèle est écrit dans `chth.py` qui contient les calculs des coefficients de réactions, des densités et du bilan thermique. A côté, `testchem.py` est juste un bac à sable qui sert à comparer les taux de réactions utilisés dans le modèle avec ceux du code PDR.

Les scripts `exploration_T.py` et `exporation_e.py` contiennent les fonctions qui construisent les maps de densités d’électrons et de températures et testent la robustesse du modèle. `config.py` est gère plusieurs paramètres du modèles comme la prise en compte des PAH, de la recombinaison du H^+ sur les grains ou certains processus thermiques. D’autres fonctions y sont rangées pour manipuler les fichiers de données rangés dans `/data/`. Ils étaient là pour comparer le modèle analytique au code PDR.

Le fichier `run.py` contient tous les appels des fonctions de calculs qui sont rangées dans `exploration_T.py` et `exporation_e.py`. On trouve en fin de script des appels à des fonctions permettant de ploter des diagrammes d’états (P,n) ou (T,P) mais cela n’a finalement pas été exploité.

Enfin, l’ensemble des références utilisées par le modèle analytique sont rangées dans `/bib/`.

III.4 Modèle du chauffage par H_2

repository sur gitlab : modelH2

C’est un début d’étude menée sur le chauffage par pompage UV par la molécule H_2 . Il est rangé strictement de la même manière que le modèle analytique du chlore.

On y compare le code PDR à des formules tirées de [Röllig, M. et al., 2006] et [Bialy and Sternberg, 2019]. Les expressions analytiques représentaient mal le chauffage lorsque l'on quitte la zone atomique du nuage. On avait commencé à étudier l'impact du calcul du transfert de rayonnement sur les profils de chauffage. Un fichier readme rassemble les formules que l'on a utilisées.

Conclusion

Les observations ne cessent de faire des découvertes surprenantes qui remettent en question notre conception des PDR. Herschel a par exemple observé du CO excité dans des régions plus chaudes que celles calculées dans nos modèles ce qui nous pousse à revoir les processus thermiques qui interviennent au sein des PDR. La découverte de la bistabilité induite par le chlore en bord de région atomique est un phénomène nouveau. Bien que nous n'ayons pas de traceurs atomiques pouvant déceler l'existence d'une solution chaude, les changements de volumes et de températures dues à l'instabilité peuvent avoir des conséquences dynamiques intéressantes qu'il faudrait étudier (code Hydra [Bron et al., 2018]). De plus, la mise en lumière d'une nouvelle voie de formation principale du CO par la molécule OH montre sur les diagrammes d'intensité des raies l'importance d'avoir un réseau chimique à jour en terme de physique. Par ailleurs, l'utilisation des nouveaux taux de destruction du H_2 prouve que le chauffage par les réactions chimiques, qui est généralement négligé dans les modèles de PDR, est déterminant pour prédire des diagrammes d'intensité du CO en accord avec les observations.

Par manque de temps, nous n'avons pas pu mesurer entièrement l'impact du calcul des nouveaux taux de collisions de H_2 . On a néanmoins décelé une nouvelle instabilité à la fin de la zone atomique du nuage qu'il faudrait approfondir. La plupart des résultats obtenus feront l'objet d'une publication. Ces travaux ont montré que l'étude des processus thermiques au sein du nuage ouvrait de nombreuses pistes pour la compréhension des PDR. Par la suite, il sera également intéressant de revisiter le chauffage par les rayons cosmiques ou le refroidissement par le couplage gaz-grains que l'on estime trop simplement.

Références

- [Amin, 1996] Amin, M. Y. (1996). Chlorine-Bearing Molecules in Cold and Warm Interstellar Clouds. *Earth Moon and Planets*, 73(2) :133–145.
- [Bakes and Tielens, 1994] Bakes, E. L. O. and Tielens, A. G. G. M. (1994). The Photoelectric Heating Mechanism For Very Small Graphitic Grains and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *The Astrophysical Journal*, 427 :822.
- [Bialy and Sternberg, 2019] Bialy, S. and Sternberg, A. (2019). Thermal Phases of the Neutral Atomic Interstellar Medium – from Solar Metallicity to Primordial Gas. *arXiv e-prints*, page arXiv :1902.06764.
- [Bossion et al., 2018] Bossion, D., Scribano, Y., Lique, F., and Parlant, G. (2018). Ro-vibrational excitation of H₂ by H extended to high temperatures. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 480(3) :3718–3724.
- [Bron et al., 2018] Bron, E., Agúndez, M., Goicoechea, J. R., and Cernicharo, J. (2018). Photoevaporating PDR models with the Hydra PDR Code. *arXiv e-prints*, page arXiv :1801.01547.
- [Draine, 2011] Draine, B. T. (2011). *Physics of the interstellar and intergalactic medium*. "Princeton University Press".
- [Glover and Mac Low, 2007] Glover, S. C. O. and Mac Low, M.-M. (2007). Simulating the Formation of Molecular Clouds. I. Slow Formation by Gravitational Collapse from Static Initial Conditions. , 169(2) :239–268.
- [Goicoechea et al., 2016] Goicoechea, J. R., Pety, J., Cuadrado, S., Cernicharo, J., Chapillon, E., Fuente, A., Gerin, M., Joblin, C., Marcelino, N., and Pilleri, P. (2016). Compression and ablation of the photo-irradiated molecular cloud the orion bar. *Nature*, 537 :207.
- [Herráez-Aguilar et al., 2014] Herráez-Aguilar, D., Jambrina, P. G., Menéndez, M., Aldegunde, J., Warmbier, R., and Aoiz, F. J. (2014). The effect of the reactant internal excitation on the dynamics of the c+ + h₂ reaction. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16 :24800–24812.
- [Hollenbach et al., 1991] Hollenbach, D. J., Takahashi, T., and Tielens, A. G. G. M. (1991). Low-density photodissociation regions. , 377 :192–209.
- [Janev et al., 2003] Janev, R. K., Reiter, D., and Samm, U. (2003). Collision processes in low-temperature hydrogen plasmas. Technical report, Germany. Juel-4105.
- [Joblin, C. et al., 2018] Joblin, C., Bron, E., Pinto, C., Pilleri, P., Le Petit, F., Gerin, M., Le Bourlot, J., Fuente, A., Berne, O., Goicoechea, J. R., Habart, E., Köhler, M., Teyssier, D., Nagy, Z., Montillaud, J., Vastel, C., Cernicharo, J., Röllig, M., Ossenkopf-Okada, V., and Bergin, E. A. (2018). Structure of photodissociation fronts in star-forming regions revealed by herschelservations of high-j co emission lines. *A&A*, 615 :A129.
- [Jones, A. P. et al., 2017] Jones, A. P., Köhler, M., Ysard, N., Bocchio, M., and Verstraete, L. (2017). The global dust modelling framework themis. *A&A*, 602 :A46.
- [Le Petit et al., 2006] Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., and Roueff, E. (2006). A Model for Atomic and Molecular Interstellar Gas : The Meudon PDR Code. , 164(2) :506–529.
- [Lequeux, 2012] Lequeux, J. (2012). *Le Milieu interstellaire*. SAVOIRS ACTUELS. EDP Sciences.
- [Neufeld et al., 2012] Neufeld, D. A., Roueff, E., Snell, R. L., Lis, D., Benz, A. O., Bruderer, S., Black, J. H., De Luca, M., Gerin, M., Goldsmith, P. F., Gupta, H., Indriolo, N., Le Bourlot, J., Le Petit, F., Larsson, B., Melnick, G. J., Menten, K. M., Monje, R., Nagy, Z., Phillips, T. G., Sandqvist, A., Sonnentrucker, P., van der Tak, F., and Wolfire, M. G. (2012). HERSCHEL OBSERVATIONS OF INTERSTELLAR CHLORONIUM. *The Astrophysical Journal*, 748(1) :37.

- [Neufeld and Wolfire, 2009] Neufeld, D. A. and Wolfire, M. G. (2009). The Chemistry of Interstellar Molecules Containing the Halogen Elements. , 706 :1594–1604.
- [Röllig, M. et al., 2006] Röllig, M., Ossenkopf, V., Jeyakumar, S., Stutzki, J., and Sternberg, A. (2006). [cii] 158 emission and metallicity in photon dominated regions. *A&A*, 451(3) :917–924.
- [Schilke et al., 1995] Schilke, P., Phillips, T. G., and Wang, N. (1995). Hydrogen Chloride in OMC-1. , 441 :334.
- [Tielens, 2005] Tielens, A. G. G. M. (2005). *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*. Cambridge University Press.
- [Weingartner and Draine, 2001] Weingartner, J. C. and Draine, B. T. (2001). Electron-ion recombination on grains and polycyclic aromatic hydrocarbons. *The Astrophysical Journal*, 563(2) :842–852.
- [Zanchet et al., 2013] Zanchet, A., Godard, B., Bulut, N., Roncero, O., Halvick, P., and Cernicharo, J. (2013). $\text{H}_2(v = 0,1) + \text{C}^+(^2\text{P}) \rightarrow \text{H} + \text{CH}^+$ State-to-state Rate Constants for Chemical Pumping Models in Astrophysical Media. , 766(2) :80.

Appendices

A Impact du chlore

Traceurs atomiques

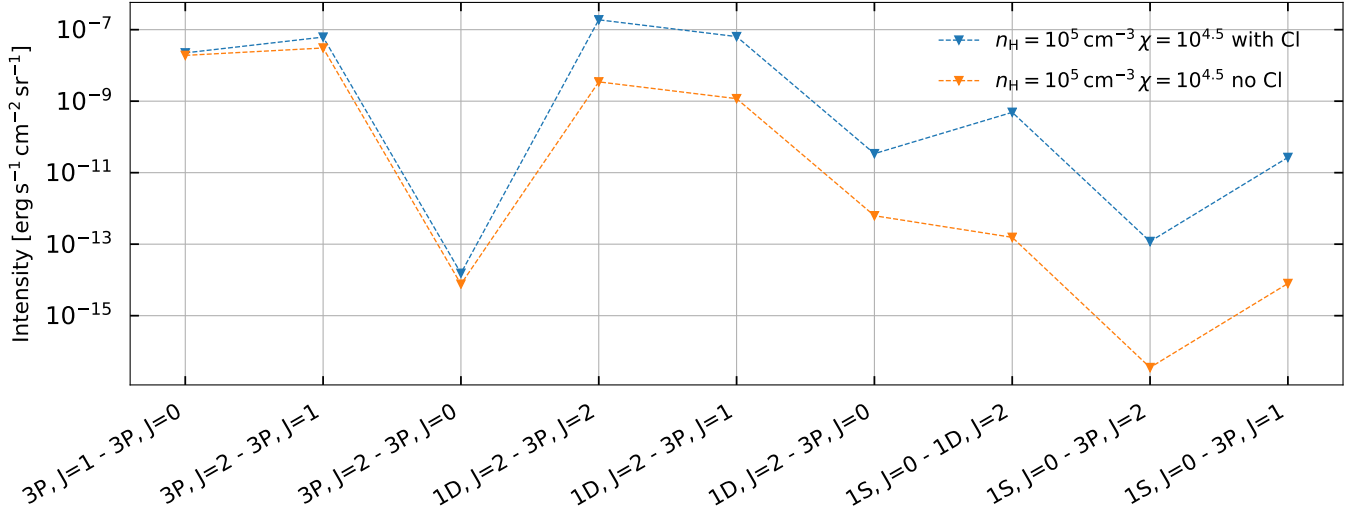


FIGURE A.1 – Diagramme d'intensité de N^+

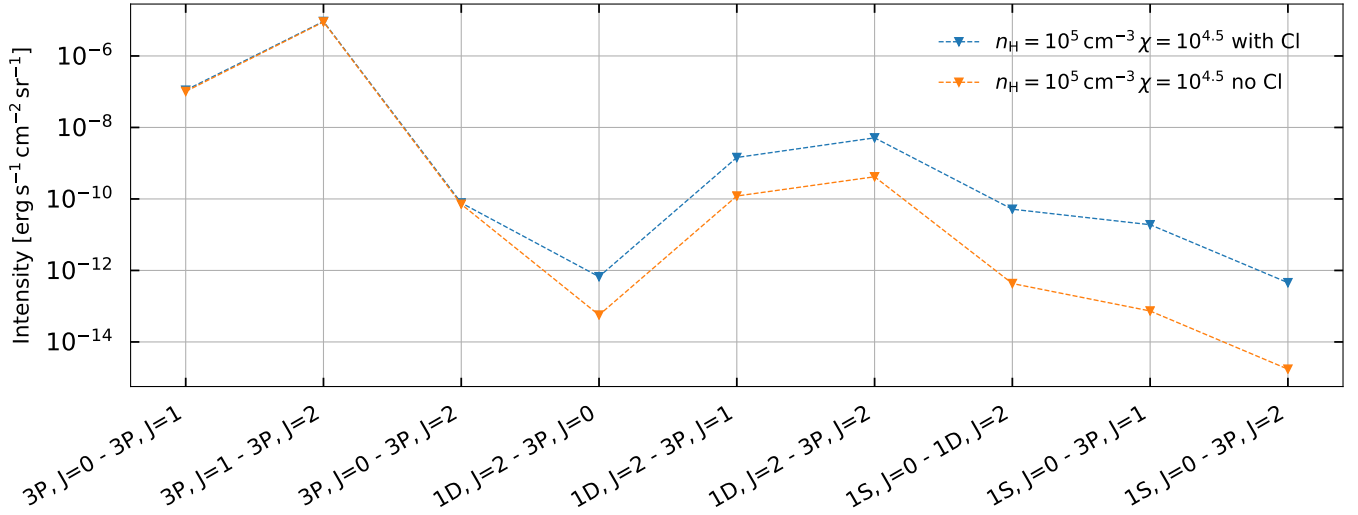


FIGURE A.2 – Diagramme d'intensité de S

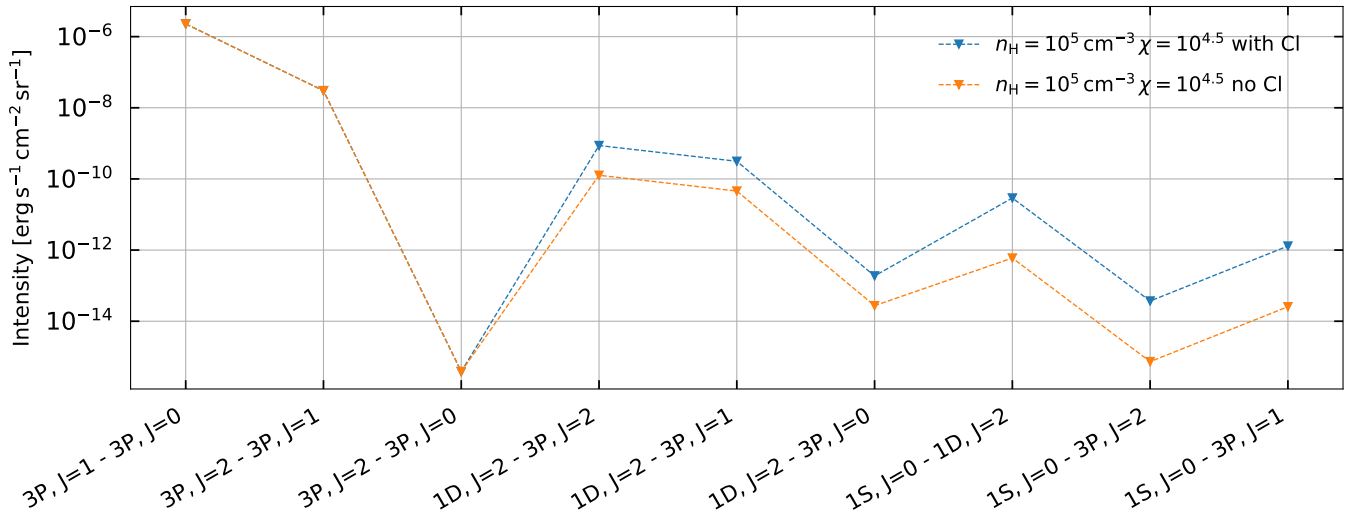


FIGURE A.3 – Diagramme d'intensité de Si

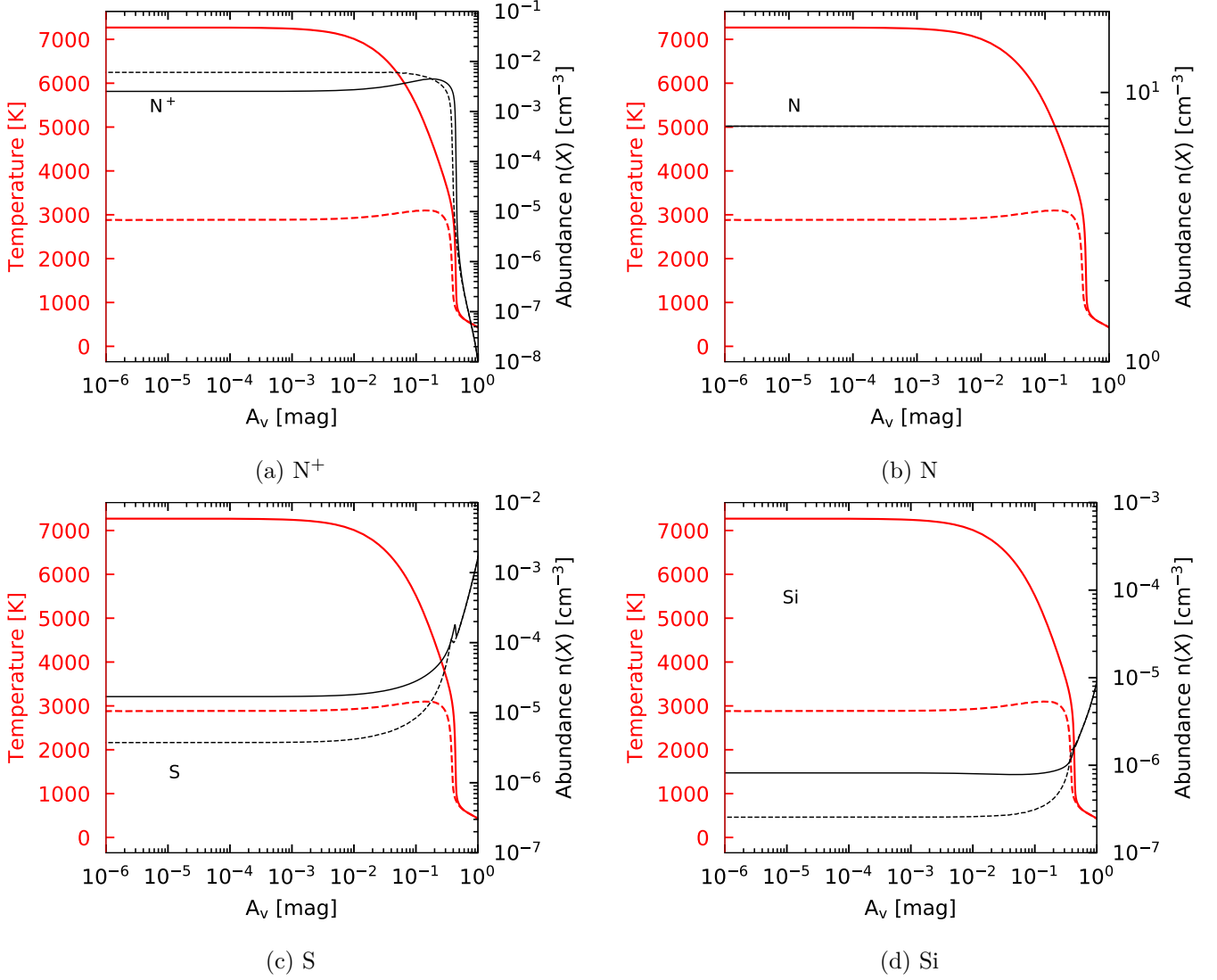


FIGURE A.4 – Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore.

Il est représenté en trait plein les profils du modèle avec le chlore et en trait pointillé le modèle ne contenant pas de chlore. La température est en rouge et la densité en noir. On constate que l'augmentation de la température induite par le chlore facilite la formation des traceurs atomiques.

Traceurs moléculaires

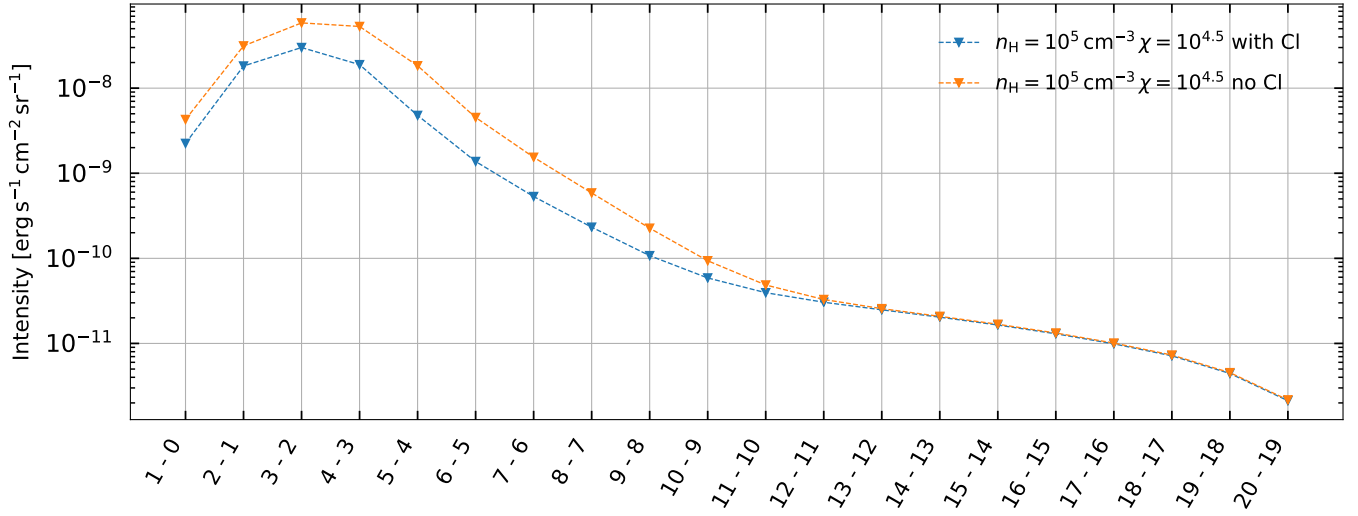
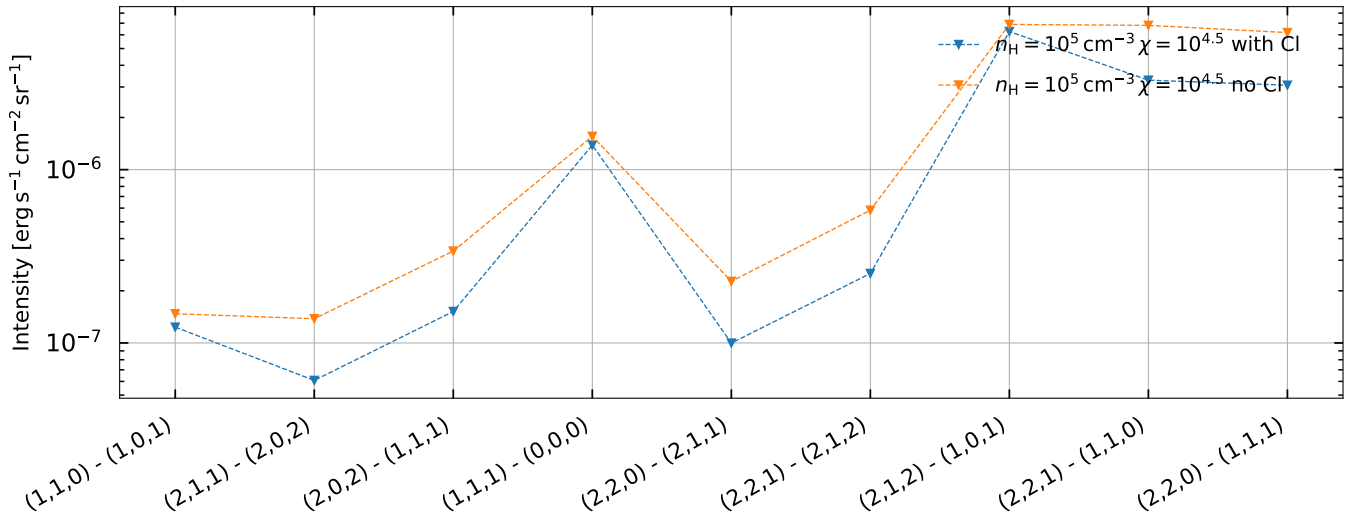
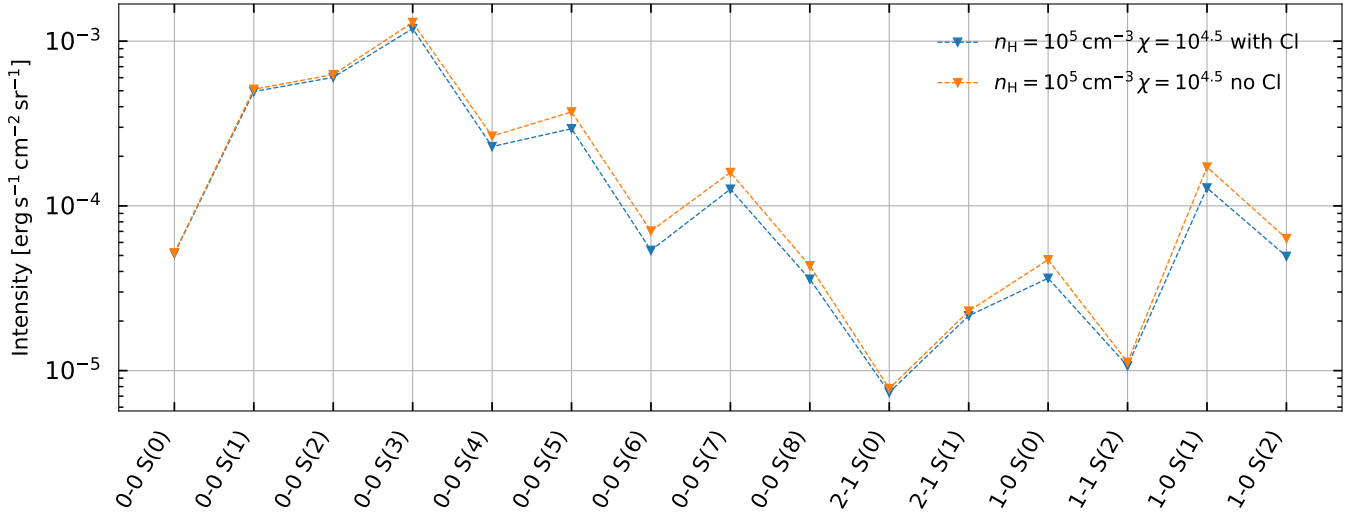
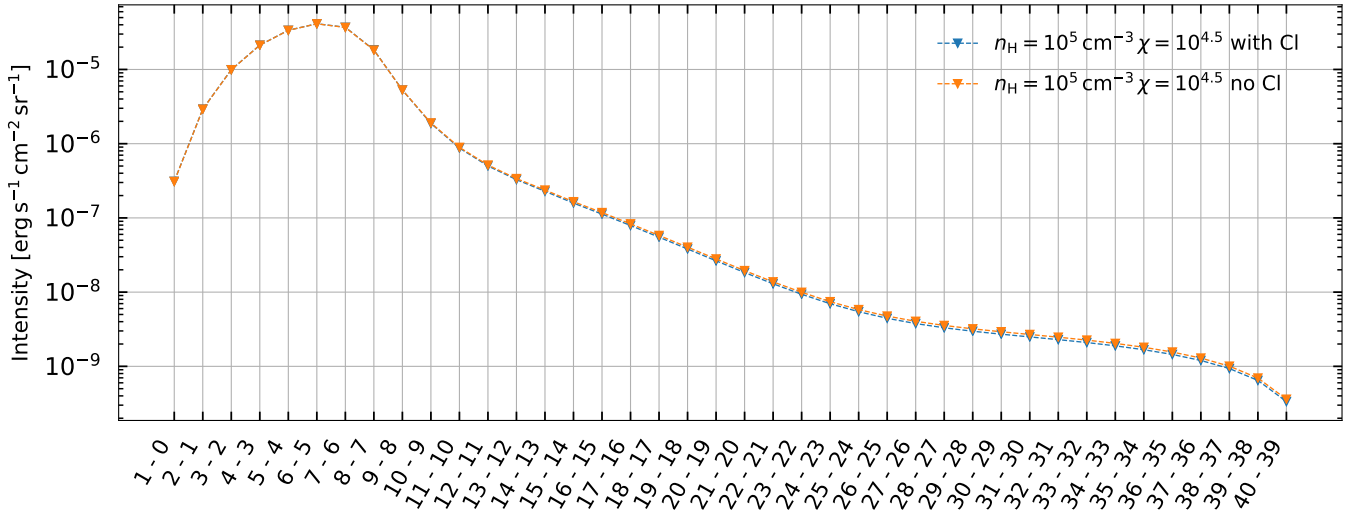


FIGURE A.5 – Diagramme d'intensité du CS


 FIGURE A.6 – Diagramme d'intensité du H_2O


 FIGURE A.7 – Diagramme d'intensité du H₂

 FIGURE A.8 – Diagramme d'intensité du CO. Seules les transitions rotationnelles ont été écrites (toutes s'effectuent à $v = 0$)

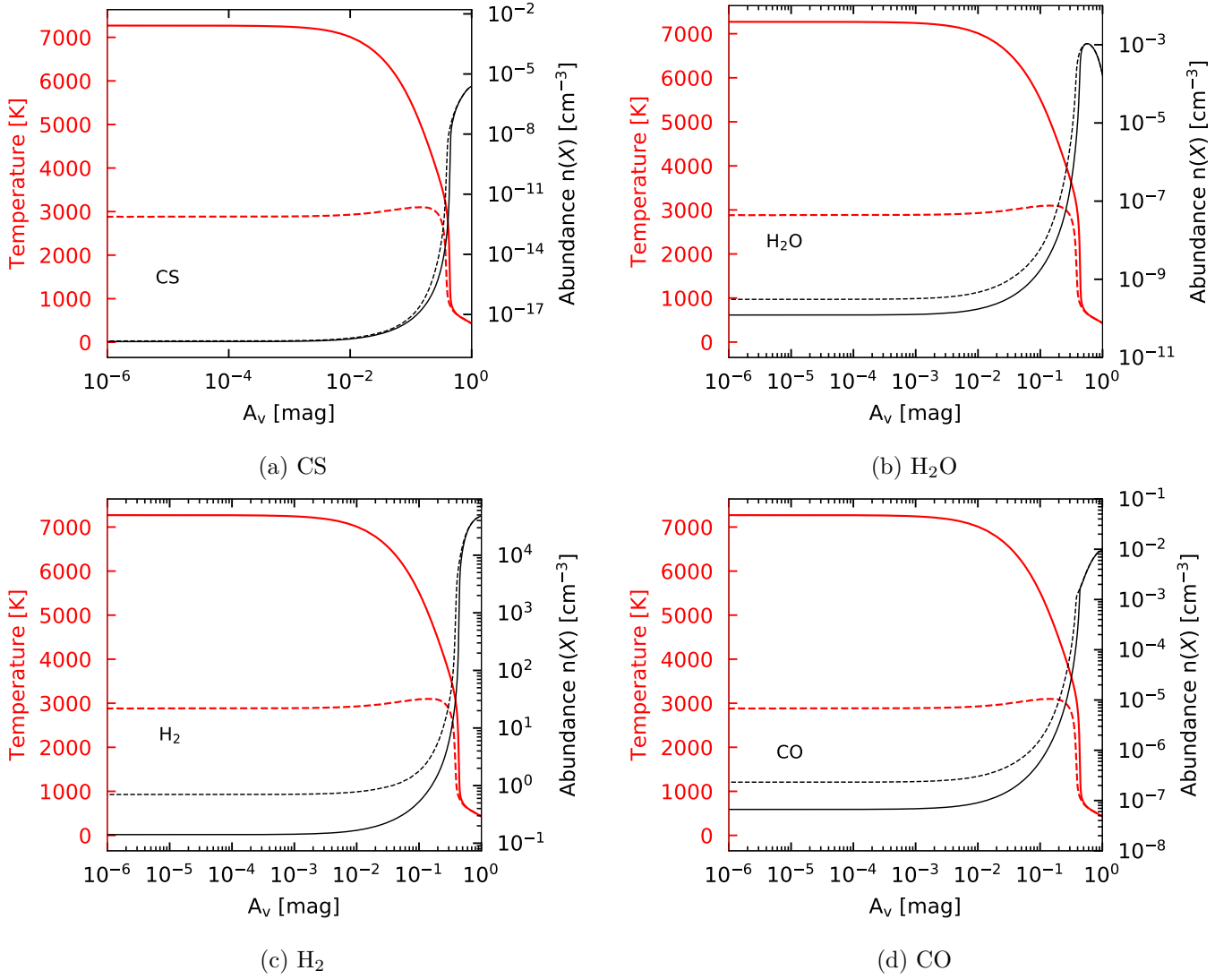
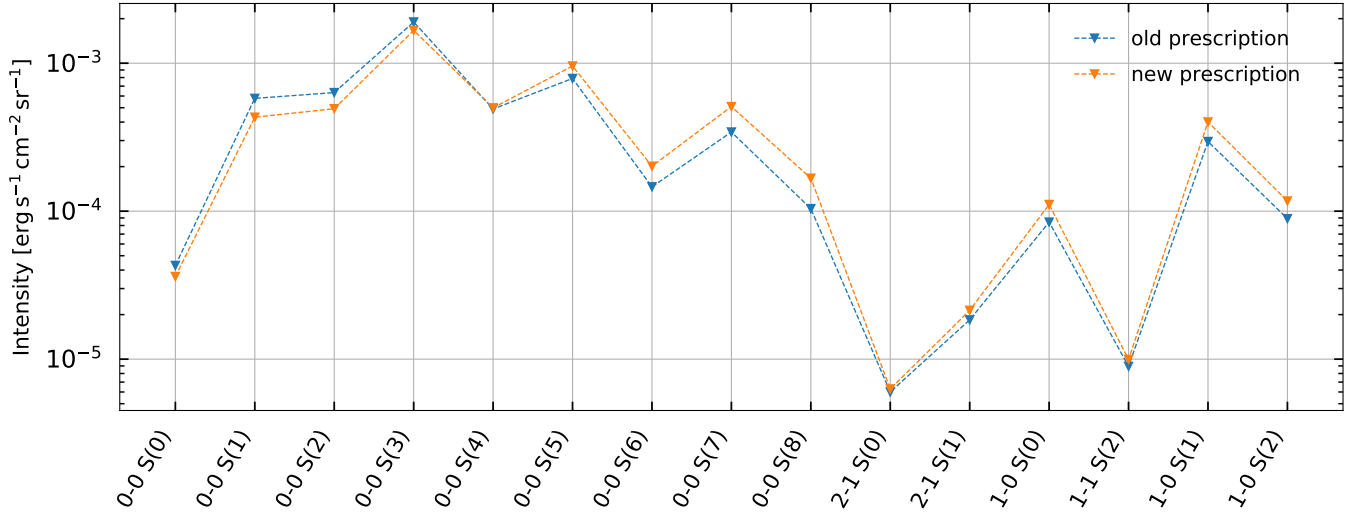
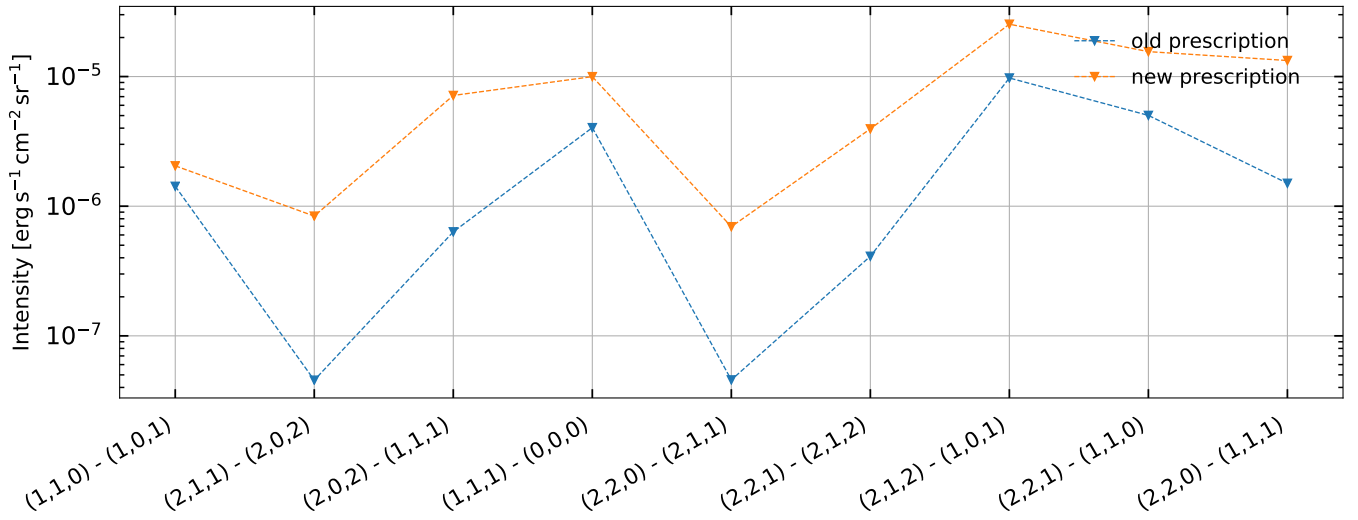


FIGURE A.9 – Profils de densité et de températures des traceurs impactés par l’ajout du chlore. Mêmes conventions que pour la figure A.4. Les traceurs moléculaires sont peu modifiés par l’augmentation de la température de la zone atomique du nuage.

B Réactions chimiques initiées par H₂


 FIGURE B.1 – Diagramme d'intensité du H₂

 FIGURE B.2 – Diagramme d'intensité du H₂O

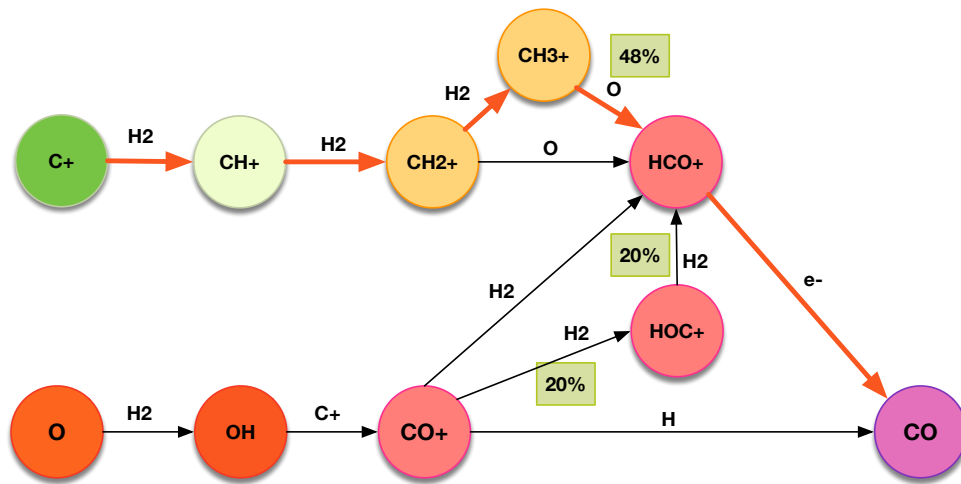


FIGURE B.3 – Ancien réseau de formation du CO

C Impact de la prescription de Glover

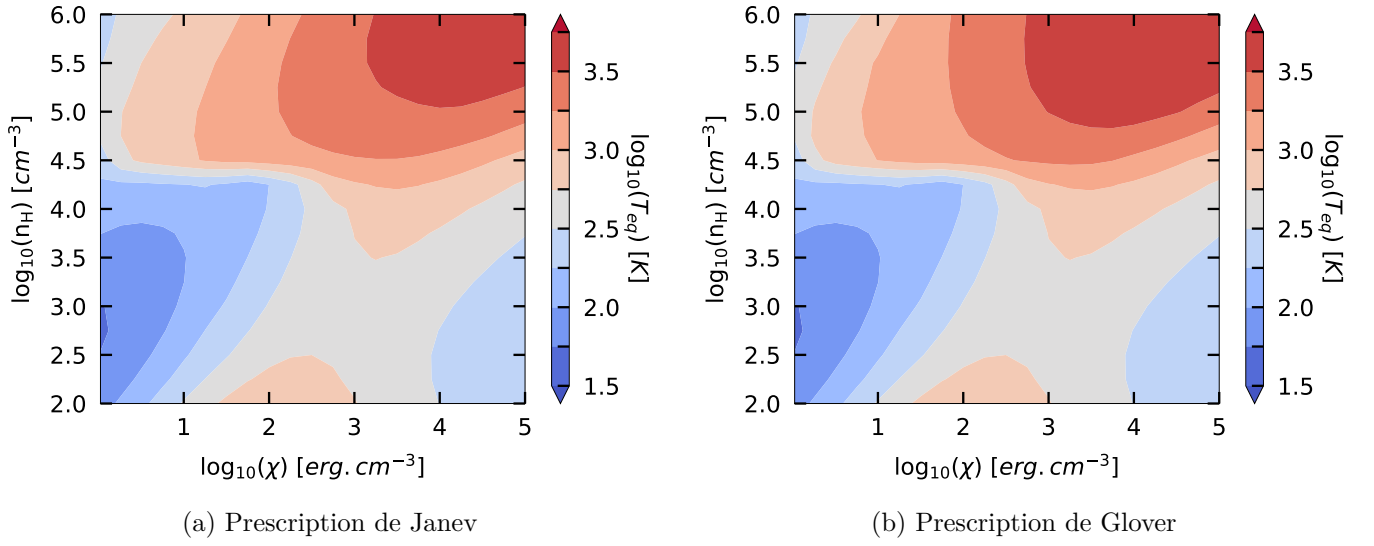


FIGURE C.1 – Comparaison de la température en bord atomique de nuage pour des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

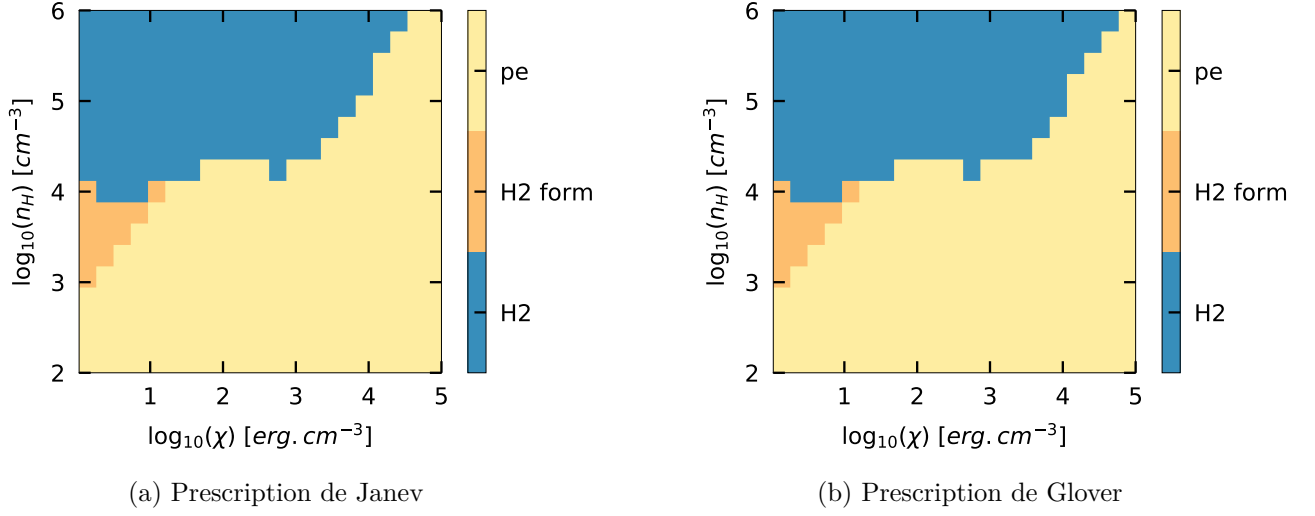


FIGURE C.2 – Processus de chauffage dominant en bord de région atomique
 "pe" désigne le chauffage par effet photoélectrique sur les grains. "H2" désigne le chauffage par pompage UV de la molécule H_2 et "H2 form" la formation de la molécule sur les grains.

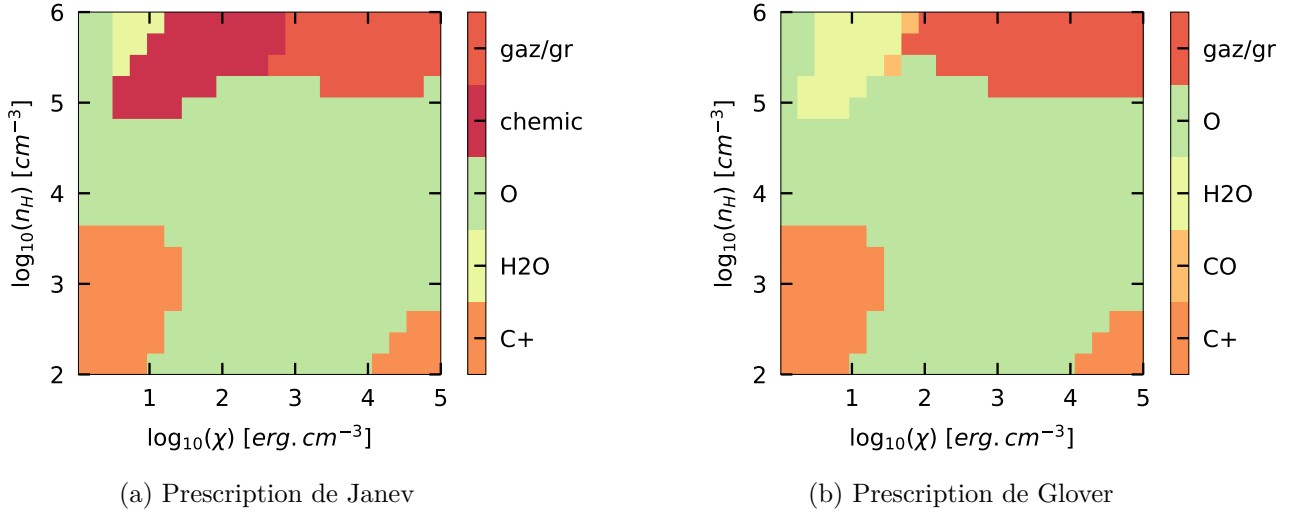


FIGURE C.3 – Processus de refroidissement dominant en bord de région atomique
 Les noms "O", "H2O", "CO" et "C+" désignent des processus de refroidissement par émission des espèces O, H_2O , CO et C^+ respectivement. "gaz/gr" réfère à la thermalisation du gaz avec les grains du nuage généralement plus froid ($T \sim 20$ K) et "chemic" au bilan thermique des réactions chimiques qui est ici endothermique.

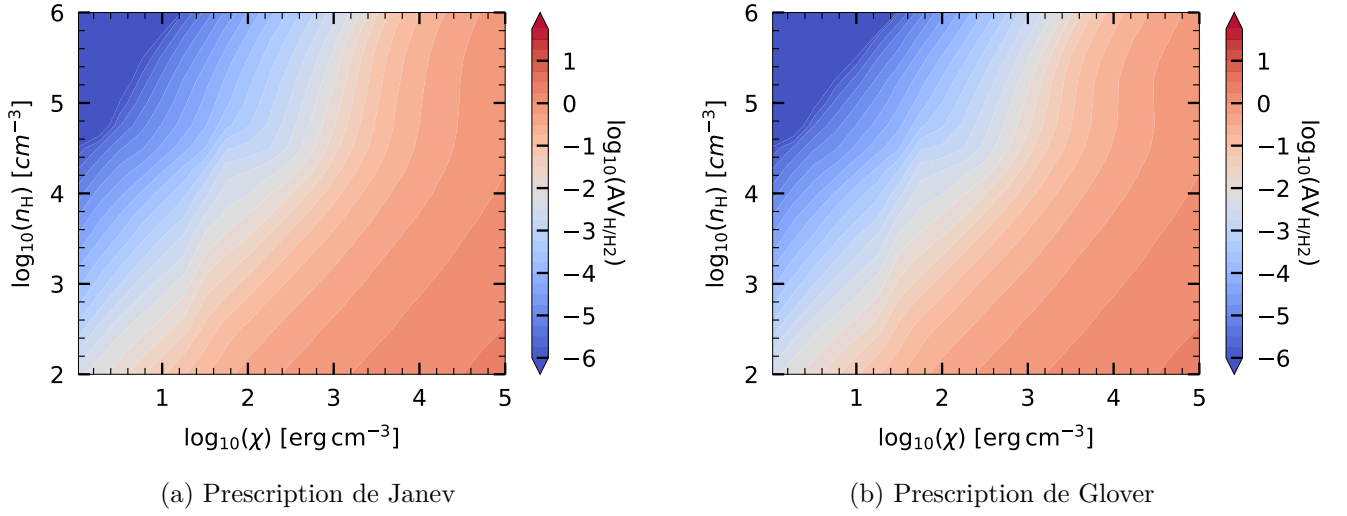


FIGURE C.4 – Comparaison des A_{v} de la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Jansev et de Glover

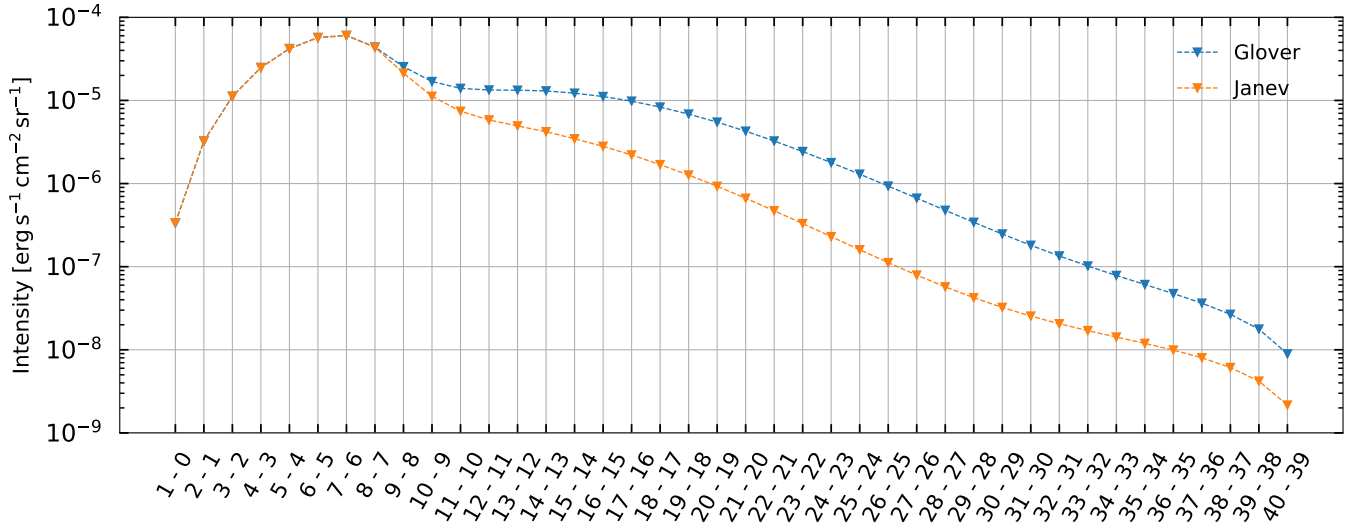


FIGURE C.5 – Raies d'émissions du CO pour un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Glover ou bien celle de Jansev. Les transitions écrites sur l'axe des abscisses signifient les transitions des niveaux rotationnels de la molécule CO.