

Note de Stage
Observatoire de Meudon

Antoine Nasser

Printemps Été (chaud) 2019

Etude des processus de chauffage et de refroidissement
dans les régions de photodissociation (PDR)



Table des matières

I) Amplification de l'effet photoelectrique par le chlore	3
I-1) Neufeld and Wolfire	3
I-1-a) Profil des espèces dérivés du chlore	3
I-1-b) radm et ladm	4
I-1-c) run sur d'autres modèles	4
I-2) Analyse du rôle du chlore	4
I-3) Modèle analytique - Chimie	5
I-3-a) Ion hydrogène	5
I-3-b) Ion chlore	6
I-3-c) Recombinaison de H^+ sur les grains	6
I-4) Modèle analytique - Thermique	7
I-4-a) Effet photoélectrique sur les grains	8
I-4-b) Couplage gaz-grains	8
I-4-c) Refroidissement par les raies d'émissions du C^+ et de O	8
I-4-d) Emission Lyman $H\alpha$	9
I-4-e) Recombinaison des électrons sur les grains	9
I-5) Correction de l'effet photoélectrique par le code	10
I-6) Prédiction de la température au bord de nuage	10
I-6-a) Carte de température au bord du nuage	11
I-7) A la recherche d'observables	12
I-7-a) Détermination d'un traceur	12
I-7-b) Choix de la raie [N] 5200A	13
II) Nouvelles voies de formation avec H_2 excité	14
III) Molécule H_2	16
III-1) Construction d'un modèle	16
III-1-a) Chauffage net par Rollig (1995)	16
III-1-b) Chauffage par désexcitation collisionnelle	16
III-1-c) Refroidissement par émission de photons	16
III-1-d) Bialy et Sternberg (2019)	16
III-1-e) Chauffage par photodissociation	17
III-1-f) Absorption du rayonnement	17
III-1-g) Extinction par les grains	17
III-1-h) Comparaison avec le code PDR de Meudon	17
III-2) Dissociation collisionnelle du H_2 (de Janev à Glover)	18
III-2-a) Grilles de modèles - Bord atomique	18
III-2-b) Grilles de modèles - Transition H/H_2	19
III-2-c) Etude d'un modèle particulier	21
Annexe A Impact du chlore	29
Annexe B H_2 excité	32

Introduction

I) Amplification de l'effet photoelectrique par le chlore

I-1) Neufeld and Wolfire

I-1-a) Profil des espèces dérivées du chlore

Les réseaux d'astrochimie de PDR ont tendance à négliger le chlore qui a une abondance mineure dans les nuages. Or des espèces dérivées du chlore ont été observées en absorption dans des nuages diffus ($n \sim 10^2 \text{ cm}^{-3}$). Des raies de H_2Cl^+ , HCl et HCl^+ excitées ont également 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]. On a tout d'abord cherché à reproduire les résultats de [Neufeld and Wolfire, 2009]. On a ajouté un nouveau fichier de chimie au code comportant les réseaux chimiques du Cl et du F et on a résolu une PDR avec les mêmes conditions physiques de l'article (1).

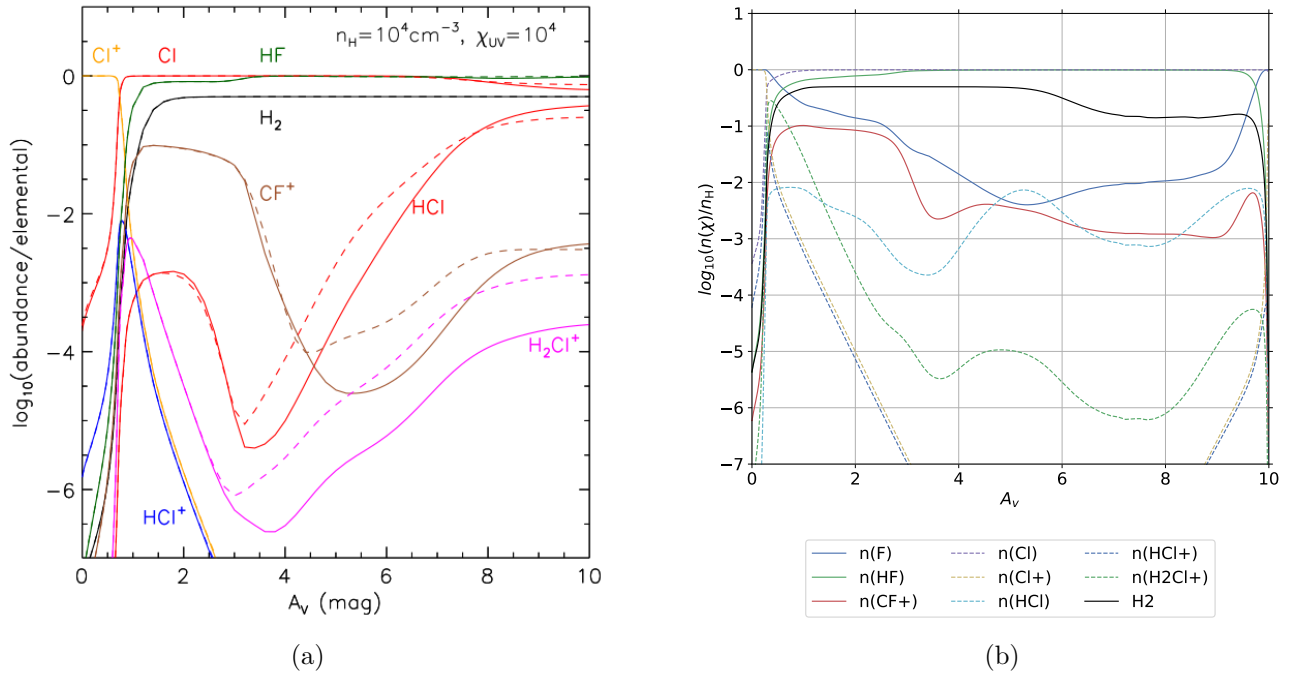


FIGURE 1 – Profil de densité pour un modèle isochore $n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi_{UV} = 10^4$. La figure de gauche (a) est extraite de [Neufeld and Wolfire, 2009] où les profils sont obtenus à partir d'une version modifié du code de [Kaufman et al., 2006]. Le trait plein est un calcul avec un taux de ionisation par les rayons cosmiques de $1.8 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$ par atome d'hydrogène, tandis qu'en pointillé $1.8 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$. A droite (b) le code PDR de Meudon résout la PDR en utilisant le même réseau chimique proposé dans l'article.

On n'arrivait pas à avoir le même profil de température, on a alors imposé au code de suivre le profil de température montré dans l'article. On utilise un modèle à densité constante qui, dans cette version du code (1.5.2_rev_1900), ne peut former de H_2 dans le nuage moléculaire. Pour parer cela, on a utilisé une réaction équivalente. On voit que l'on retrouve les allures des profils de densités. Les profils du Cl , Cl^+ , HCl , HF sont proches en ordre de grandeurs. Ceux du H_2HF^+ , HCl^+ , CF^+ n'ont pas exactement les mêmes allures ni les mêmes valeurs.

I-1-b) radm et ladm

I-1-c) run sur d'autres modèles

En runnant le code (comportant du chlore) sur d'autres types de PDR, on peut obtenir deux branches solutions possibles de températures (??). Sur les figures, ajouter du chlore augmente subitement la température en entrée du nuage moléculaire de plus de $3000K$. Cette montée subite signifie qu'il existe probablement deux solutions stables et que le code, en résolvant la PDR, a switché de branche. Il faut aller étudier les fonctions de chauffages et de refroidissements en bord de nuage pour s'en convaincre. L'existence de deux solutions stable signifie que le gaz en bord atomique de nuage peut se trouver dans une situation de bistabilité thermique qui est un phénomène nouveau.

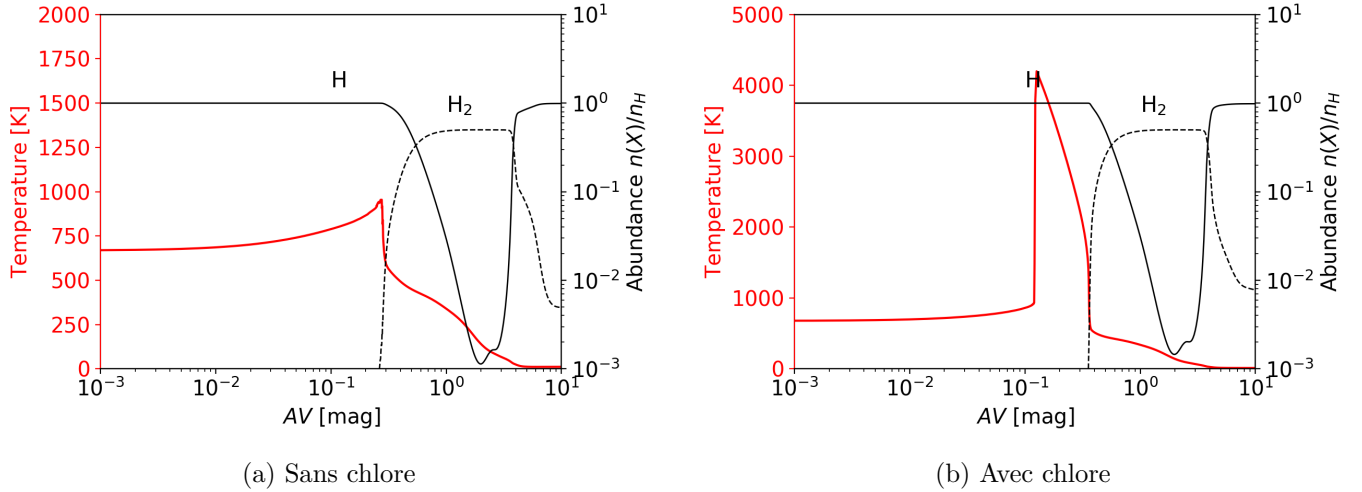


FIGURE 2

I-2) Analyse du rôle du chlore

J'ai étudié les réactions chimiques principales qui se déroulent en bord de nuage atomique et démontré que le chlore joue le rôle de catalyseur de l'effet photoélectrique. Le mécanisme est illustré sur la Figure 3. Le champ 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. Or la photoionisation du carbone et du soufre produit les électrons en bord de nuage atomique indépendamment de la température. Il existe une température où le transfert de charge devient suffisamment efficace pour que la fraction d'électrons créée

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.

via le chlore devienne dominante devant celle de la 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 figurant dans le modèle, la carbone, le soufre, le silicium ou le fer ont également un potentiel de ionisation inférieur à celui de l'hydrogène (??). Pourtant aucun ne peut effectuer un transfert de charge avec l'hydrogène qui est l'espèce majoritaire en bord de nuage atomique. Ces espèces ne peuvent pas donc pas provoquer un emballement similaire à celui induit par le chlore.

I-3) Modèle analytique - Chimie

Les espèces qui contribuent à la production d'électrons en bord de nuage sont les ions hydrogènes H^+ , carbones C^+ et soufres S^+ . On peut supposer qu'en entrée de nuage atomique le carbone et le soufre sont ionisés ce qui fournit une fraction d'électrons minimale de 10^{-4} . Le modèle doit retrouver l'augmentation de la densité d'électrons (jusqu'à $2 \cdot 10^{-3}$) pour des températures supérieures à 1000 K.

Le modèle que l'on propose extrapole à partir d'un modèle à densité constante fait à $n_{\text{H}} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$

I-3-a) Ion hydrogène

J'ai isolé les réactions principales qui font intervenir les ions H^+ . Les réactions avec l'oxygène sont négligées car la formation et destruction de H^+ par l'oxygène se compensent totalement en première approximation.

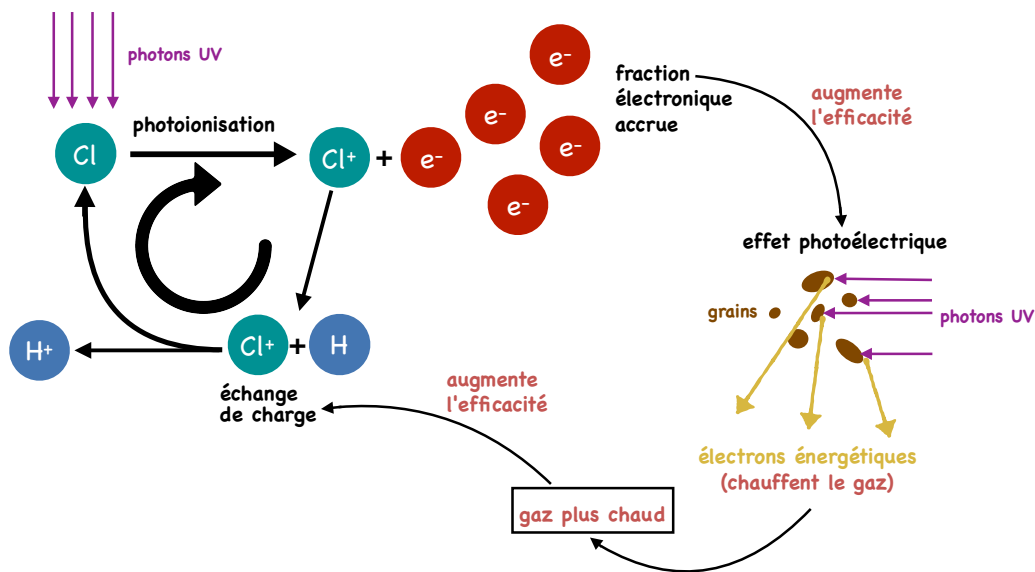
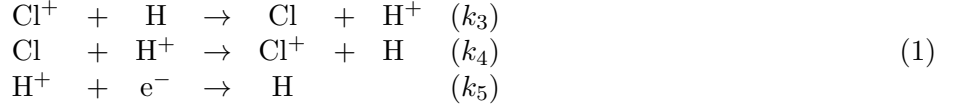


FIGURE 3 – Schéma représentant l'impact du chlore sur la chimie de bord de nuage atomique



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

$$\frac{d}{dt}n(\text{H}^+) = k_3n(\text{Cl}^+)n(\text{H}) - k_4n(\text{Cl})n(\text{H}^+) - k_5n(\text{H}^+)n(\text{e}^-) = 0 \tag{2}$$

En introduisant la fraction atomique de chlore δ_{Cl} , fixée dans le gaz, et le bilan de charge on obtient une équation en $n(\text{H}^+)$:

$$-k_3n(\text{Cl}^+)n_{\text{H}} + \left(\frac{k_3k_4}{k_1}n_{\text{H}}n(\text{Cl}^+) + k_5(n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+)) \right)n(\text{H}^+) + k_5n(\text{H}^+)^2 = 0 \tag{3}$$

avec,

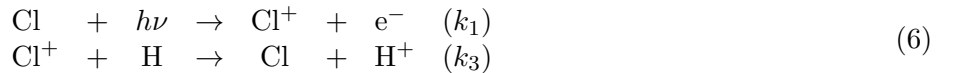
$$\delta_{Cl} = 1.810^{-7} = \frac{n(\text{Cl}) + n(\text{Cl}^+) + \dots}{n(\text{H}) + n(\text{H}^+) + 2n(\text{H}_2) + \dots} \approx \frac{1}{n_{\text{H}}}(n(\text{Cl}) + n(\text{Cl}^+)) \tag{4}$$

On obtient une solution qui dépend de $n(\text{Cl}^+)$,

$$n(\text{H}^+) = -\frac{1}{2} \left(\frac{k_3k_4}{k_1k_5}n_{\text{H}}n(\text{Cl}^+) + n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+) \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{k_3k_4}{k_1k_5}n_{\text{H}}n(\text{Cl}^+) + n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+) \right)^2 + 4\frac{k_3}{k_5}n_{\text{H}}n(\text{Cl}^+)} \tag{5}$$

I-3-b) Ion chlore

La recombinaison électronique de Cl^+ reste négligeable devant le transfert de charge avec H pour des températures supérieures à 100K et la destruction par formation du HCl^+ devient dominante dans la gamme de température 100 – 1000K. 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'emballage de l'effet photoélectrique. On considère ainsi les réactions ci-dessus :



Un travail similaire nous donne

$$k_1(\xi_{Cl}n_{\text{H}} - n(\text{Cl}^+)) - k_3n(\text{Cl}^+)n_{\text{H}} = 0 \tag{7}$$

Ce qui fait en posant $A = \frac{k_1}{k_3n_{\text{H}}}$:

$$n(\text{Cl}^+) = \frac{k_1\xi_{Cl}n_{\text{H}}}{k_1 + k_3n_{\text{H}}} = \frac{A}{1 + A}\xi_{cl}n_{\text{H}} \tag{8}$$

I-3-c) Recombinaison de H^+ sur les grains

La recombinaison du H^+ sur les grains est calculé dans le code à sa manière (type 14). Le modèle chimique sans la recombinaison surestime la densité de protons aux hautes températures. [Weingartner and Draine, 2001] donne un taux de recombinaison α (équations [5][8]).

$$\alpha_g(X^i, \psi, T) \approx \frac{10^{-14} C_0}{1 + C_1 \psi^{C_2} (1 + C_3 T^{C_4} \psi^{-C_5 - C_6 \ln T})} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad (9)$$

avec $\psi = \frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e}$. Les coefficients C_i sont des paramètres donnés dans l'article. Le bilan de formation devient :

$$\frac{d}{dt} n(\text{H}^+) = k_3 n(\text{Cl}^+) n(\text{H}) - k_4 n(\text{Cl}) n(\text{H}^+) - k_5 n(\text{H}^+) n(\text{e}^-) - \alpha_g n(\text{H}^+) n_{\text{H}} = 0 \quad (10)$$

On obtient une équation implicite en fonction de la densité d'électrons. La solution n_e vérifie :

$$x = n(\text{H}^+)(x) + n(\text{S}^+) + n(\text{C}^+) \quad (11)$$

La fonction newton de la librairie `scipy.optimize` vient à bout de ce système. La densité d'électrons calculée montrée sur la figure 4. On a résolu le système dans deux cas. Un cas avec les PAH (fraction massique $= 4.6 \cdot 10^{-2}$) où le taux de recombinaison donné [Weingartner and Draine, 2001] donne une bonne estimation de la densité d'électrons. Un second cas sans PAH, où il faut réduire d'un facteur 1/6 la recombinaison de H^+ sur les grains. On avait toujours $r_{\min} = 1 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ et $r_{\max} = 3 \cdot 10^{-5} \text{ m}$.

Quel réaction réduit la densité d'électrons à très hautes températures et qui nous empêche d'avoir la tangente horizontale ?

Conclure comme quoi on arrive à produire plein d'électrons comme dans le code

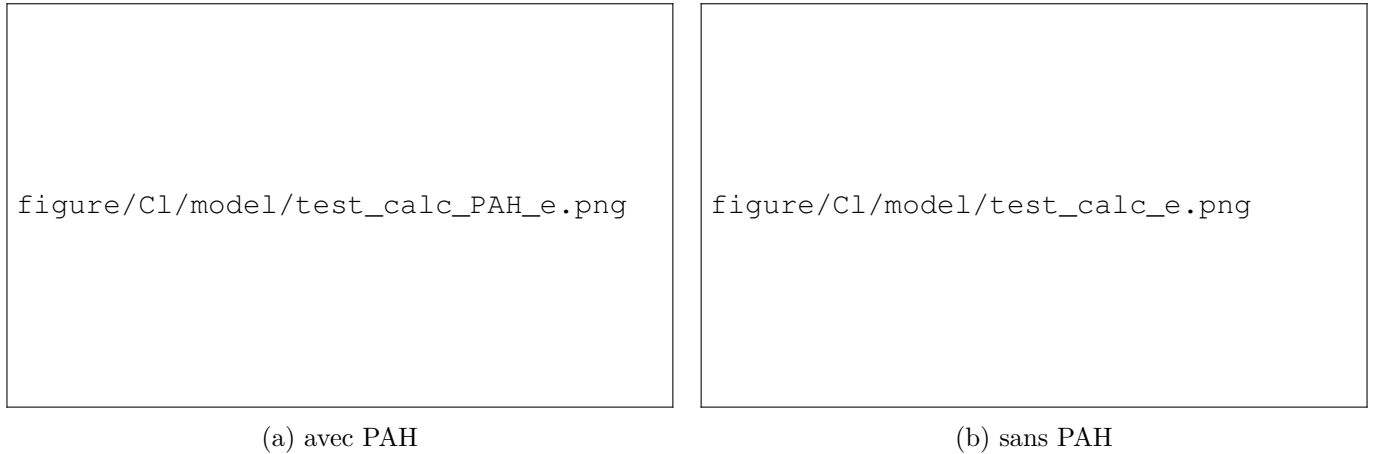


FIGURE 4 – Profil de la densité électronique calculé par le modèle. La formule proposée par [Weingartner and Draine, 2001] prend en compte la recombinaison sur les PAH. Avec la recombinaison, la prédiction de la densité d'électrons est bonne dans le cas avec PAH. Si on ne prend pas en compte les PAH, il faut diminuer le taux de recombinaison d'un facteur 1/6 pour prédire une densité d'électrons raisonnable.

I-4) Modèle analytique - Thermique

Pour construire le modèle thermique nous allons sommer l'ensemble des processus qui interviennent en bord atomique des nuages. Par simplicité, nous négligeons le chauffage par H_2 qui demande de connaître la densité $n(\text{H}_2)$ au bord ce qui n'est pas trivial. Les processus thermiques appliqués dans le modèle sont :

- 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])
- l'émissions Lyman $H\alpha$ ([Tielens, 2005])
- le couplage gaz-grain ([Hollenbach et al., 1991a]).

On dénote Γ et Λ les taux de chauffage et refroidissement, respectivement, total. On a

$$\begin{aligned}\Gamma &= \Gamma_{pe}^{\text{Röllig}} \\ \Lambda &= \Lambda_{\text{CII } 158\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} + \Lambda_{H\alpha} + \Lambda_{g-g} + \Lambda_{\text{rec}}^{\text{Röllig}}\end{aligned}\quad (12)$$

I-4-a) Effet photoélectrique sur les grains

De [Röllig, M. et al., 2006] (Eq (10) ou (C.3)) qui provient de [Bakes and Tielens, 1994], sans PAH, on utilise :

$$\Gamma_{pe} = 10^{-24} G_0 n_H \frac{2 \times 10^{-2}}{1 + 2 \times 10^{-4} G_0 \sqrt{T}/n_e} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (13)$$

Avec $G_0 = 1.71\chi \times 0.5$ car il considère une illumination provenant que d'un coté. ([Wolfire et al., 2003] Eq 20, [Bakes and Tielens, 1994]) propose une autre formule prenant en compte les PAH qui est de la forme

$$\Gamma_{pe}^{\text{Wolf}} = 10^{-24} G_0 n_H \left[\frac{4.9 \times 10^{-2}}{1 + 4 \times 10^{-3} \frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e \phi_{\text{PAH}}}} + \frac{3.7 \times 10^{-2} (T/10^4)^{0.7}}{1 + 2 \times 10^{-4} \frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e \phi_{\text{PAH}}}} \right] \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (14)$$

avec ϕ_{PAH} une efficacité de collision compris entre 0 et 1. L'effet photoélectrique est d'autant plus efficace sur les petits grains [Draine, 2011]. Le choix de r_{min} (la taille minimale des grains dans la description MRN) est décisif. Si l'on trace ces formules sur la Figure 5 pour différent ϕ_{PAH} et r_{min} on voit que la formule de [Röllig, M. et al., 2006] sous-estime le taux calculé par le code PDR de Meudon. Avec $r_{\text{min}} = 10^7 \text{ nm}$, la prescription de Rollig est 3 fois plus petit que le chauffage calculé par Meudon. Si l'on augmente la taille de grain minimale, on voit que cette écart diminue ce qui est cohérent car on enlève des petits grains. La prescription de [Wolfire et al., 2003] laisse plus de liberté à travers le ϕ_{PAH} (à mieux dire).

I-4-b) Couplage gaz-grains

De [Röllig, M. et al., 2006] ($Z = 1$), le couplage gaz grain s'exprime,

$$\Lambda_{g-g} = 3.5 \times 10^{-34} \times \sqrt{T} (T - T_g) n_H^2 \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (15)$$

Où T_g est donné par Eq. 6 de [Hollenbach et al., 1991b]

$$T_g = 12.2 G_0^{0.2} \quad (16)$$

I-4-c) Refroidissement par les raies d'émissions du C^+ et de O

[CII]158 μm , provient de [Röllig, M. et al., 2006], Equation (A.2) ($Z = 1$)

$$\Lambda_{\text{CII } 158\mu\text{m}} = n(\text{C}^+) \frac{2.89 \times 10^{-20}}{1 + \frac{1}{2} \exp(92/T) \left(1 + \frac{1300}{n_H}\right)} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (17)$$

Pour les raies de [OI], Rollig prend en compte les transitions adjacentes de [OI]62 μm et [OI]146 μm . ($Z, \beta = 1$)

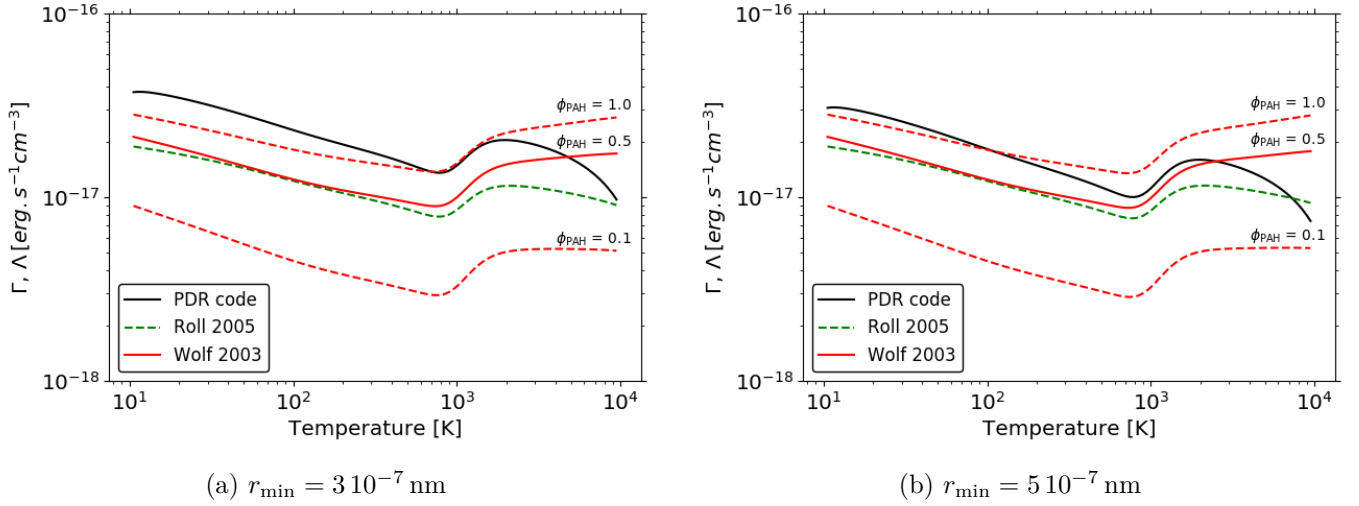


FIGURE 5 – Comparaison des formules de l'effet photoélectrique de [Röllig, M. et al., 2006] et [Wolfire et al., 2003] avec le code PDR pour différents r_{\min}

$$\Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} = 3.15 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \times \frac{e^{98/T} 3n_{\text{H}}(n_{\text{H}} + \beta n_{\text{cr01}})}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr01}})(3n_{\text{H}} + 5e^{228/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr12}}))} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (18)$$

$$\Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} = 1.35 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \times \frac{n_{\text{H}}^2}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr01}})(3n_{\text{H}} + 5e^{228/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr12}}))} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (19)$$

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

I-4-d) Emission Lyman H α

[Tielens, 2005], Eq 2.62

$$\Lambda_{\text{H}\alpha} = 7.3 \cdot 10^{-19} n_e n_{\text{H}} e^{-118400/T} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (20)$$

I-4-e) Recombinaison des électrons sur les grains

Dans le modèle de chlore, on prend celle de [Röllig, M. et al., 2006] Eq.4 qui provient elle même de [Bakes and Tielens, 1994].

$$\Lambda_{\text{rec}}^{\text{Rollig}} = 3.49 \cdot 10^{-30} T^{0.944} \left(\frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e} \right)^{\frac{0.735}{T^{0.068}}} n_e n_{\text{H}} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (21)$$

Il existe également celle ci [Wolfire et al., 1995] Eq. 9 que l'on n'utilise pas.

$$\Lambda_{\text{rec}}^{\text{Wolfire}} = 4.65 \cdot 10^{-30} T^{0.94} \left(\frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e} \right)^{\frac{0.74}{T^{0.068}}} n_e n_{\text{H}} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (22)$$

I-5) Correction de l'effet photoélectrique par le code

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

On trace sur la figure 6a 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 13) sous-estime d'un facteur 3 l'effet photo-électrique calculé par le code si bien que le modèle obtient une solution « chaude » 4000 K plus froide que celle obtenue par le code.

Il est prévisible que la formule de Rollig (eq 13) diffère de l'effet photoélectrique calculé par le code. En effet, ce processus dépend des paramètres de grains choisis et sont probablement différents de ceux de l'éq. 13. Cette formule retrouve pourtant l'emballement à hautes températures et a la même allure que le taux calculé par le code PDR. On constate sur la figure que l'expression eq 13, multipliée par un facteur 3, retrouve celle du code et obtient une solution "chaude" proche (+1500 K) de celle du code. On utilisera désormais cette correction.

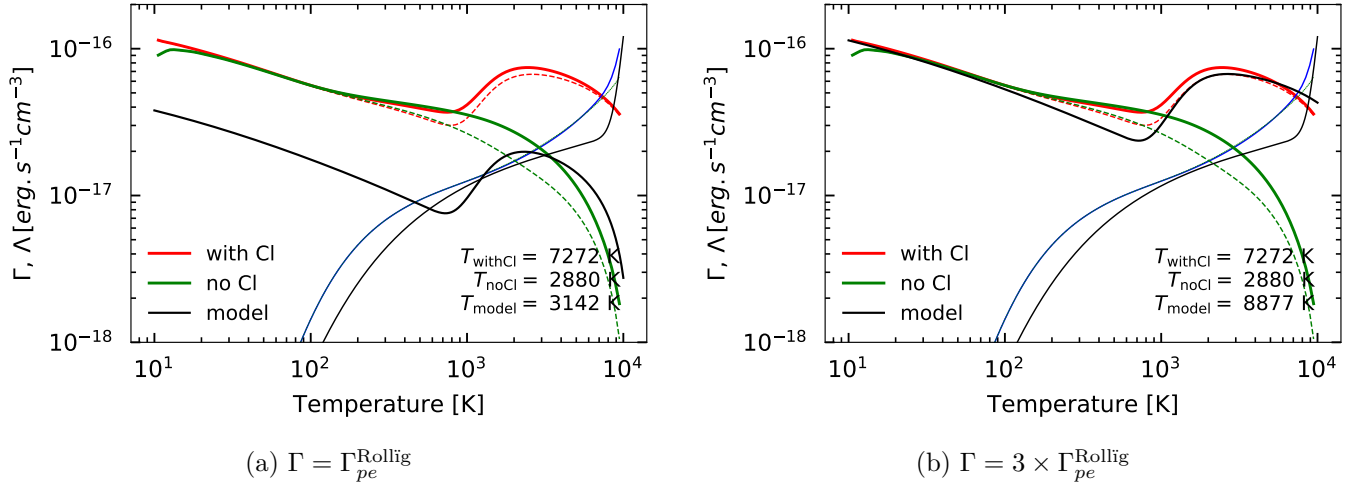


FIGURE 6 – Courbes de chauffage et refroidissement au bord atomique d'un modèle à densité constante ($n_H = 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$). Le trait en pointillé rouge et vert représente l'effet photoélectrique pour le modèle comportant ou non du chlore. Le trait plein est le chauffage total. L'écart entre le trait plein et pointillé est du 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 modèles 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 facile 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 $n_H T = \text{cte}$).

I-6-a) Carte de température au bord du nuage

La figure 7 représente la température d'équilibre maximale calculée par notre modèle. 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 8 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 notre 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.

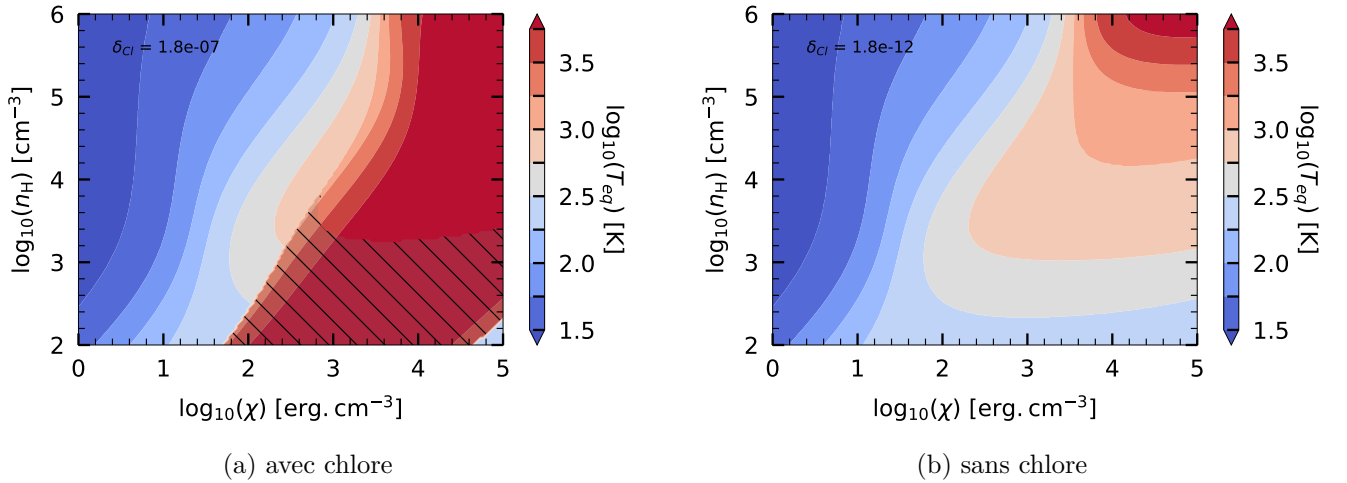


FIGURE 7 – Carte de température prédite par le modèle

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

Tout d'abord sur la figure 8b, on remarque l'existence d'un point-selle en température vers $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^3$ qu'y est absent de la figure 7. 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 13) et de recombinaisons des électrons sur les grains (eq 21) reproduisent mal ce phénomène. Le modèle obtient dans ces régions des températures plus chaudes. <discussion sur la remonté quand nh diminue ,>.

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 9a, 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 comme c'est le cas sur le profil de température de la figure 2. Une amélioration qui pourrait être faite au code est de le rendre

capable de détecter deux solutions (s'il y en a) et de rester sur une même branche de solution à travers le nuage.

Enfin, l'absence du H_2 dans le modèle thermo-chimique 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 9b 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 .

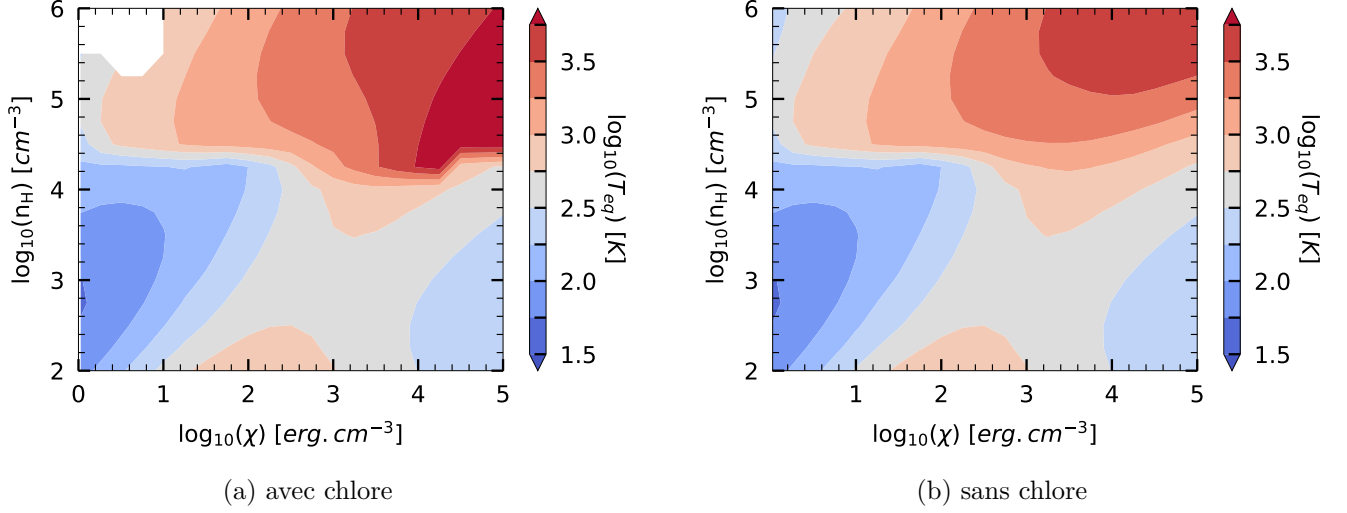


FIGURE 8 – Température en bord atomique de nuage calculé par le code PDR de Meudon

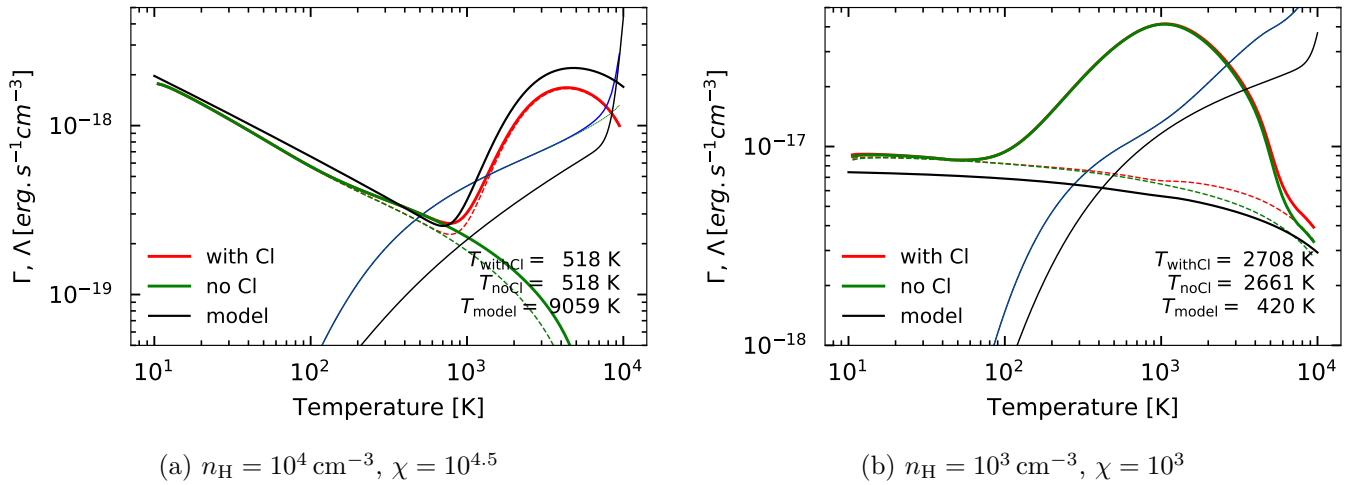


FIGURE 9 – Courbes de chauffage et refroidissement, au bord atomique de nuage, de modèles résolus par le code PDR de Meudon. Mêmes règles de couleurs que dans la figure 6a.

I-7) A la recherche d'observables

I-7-a) 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 spectres d'émissions

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 8). En traçant les spectres d'émission donnés par le code nous constatons que les raies N, N^+ , S, Si sont modifiées par la solution chaude (figure 10). 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 ne 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 28).

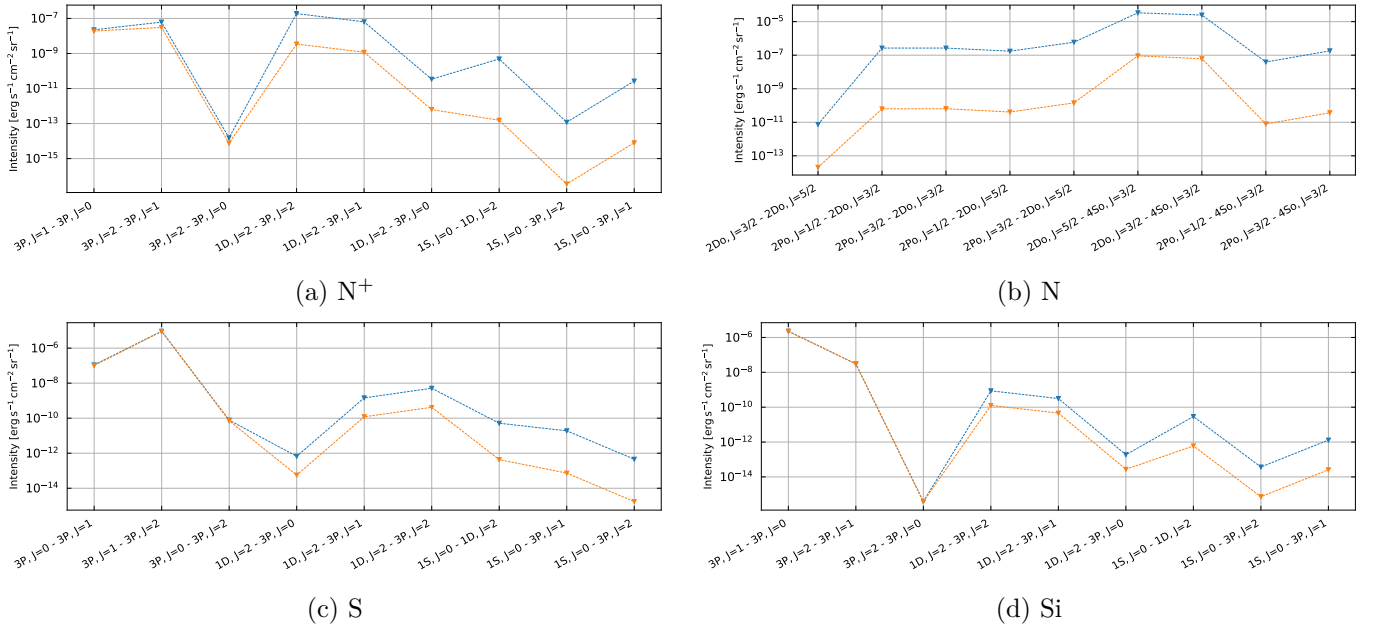


FIGURE 10 – Diagramme d'excitation des traceurs modifiés par l'ajout du chlore.

Les traits en bleue et orange sont les modèles $n_H = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^{4.5}$ avec et sans le chlore (respectivement). Ces spectres sont affichés en plus grande taille dans l'annexe.

I-7-b) Choix de la raie [N] 5200A

On choisit la raie la plus intense du spectre d'émission de N qui est la transition $El=2Do, J=5/2 \rightarrow El=4So, J=3/2$ correspondant à la longueur d'onde 5200A <quelle sonde voit dans le visible?>.

La figure 11 représente le rapport d'intensité de la raie [N] 5200A des grilles de modèle contenant du chlore ou ne contenant pas de chlore. On constate que les régions dont les bords atomiques qui subissent l'emballlement de l'effet photoélectrique (figure 8) ont des intensités de raies jusqu'à 10^6 fois plus grande. Tenter d'observer cette raie permettrait à priori de déterminer les bords atomiques des PDR 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 atomique situé avant le font de ionisation de l'hydrogène. En effet, le potentiel

de 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 de 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.

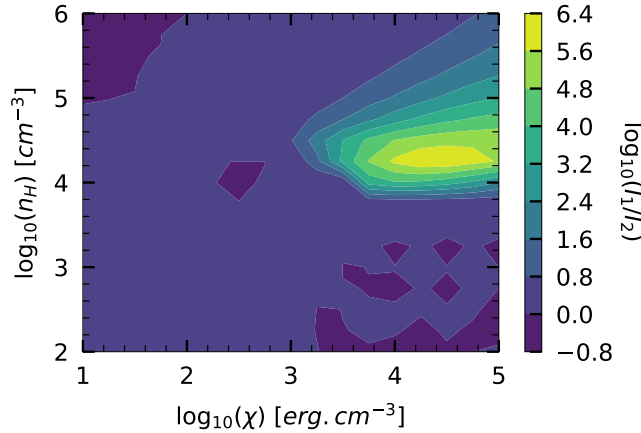


FIGURE 11 – Rapport des intensités de grilles de modèles contenant, ou non, du chlore a refaire + schéma des front de ionisations + aller jusqu'à 10^0

II) Nouvelles voies de formation avec H_2 excité

Dans certaines zones du nuage, une fraction importante de H_2 est excitée par pompage UV dans ses états vibrationnels. Pour les réactions impliquant la molécule, une partie de l'énergie nécessaire à la réaction peut être prélevée dans son énergie interne ce qui a tendance à les favoriser. La prise en compte de l'énergie interne de la molécule a un impact sur les intensités des raies d'émissions de traceurs clés comme le CO [Joblin, C. et al., 2018], H_2 ou H_2O . C'est un phénomène déjà bien connue pour la formation du CH^+ (eq 23) [Herráez-Aguilar et al., 2014, Zanchet et al., 2013].



Pour calculer le nouveau taux de réaction, le principe est de passer de la loi d'Arrhénius à un calcul des taux de réactions entre chaque populations des niveaux du H_2 et de l'espèce X. Cependant réaliser un calcul précis de ce phénomène est coûteux car il demande de connaître les taux de réactions d'une espèce avec la molécule H_2 dans chacun de ses états excités. Afin de mieux expliquer les raies d'émissions, on cherche à comprendre comment un nouveau calcul des coefficients de réaction qui prend en compte l'énergie interne de H_2 modifie les voies de formations des principaux traceurs. Sans connaître précisément les taux des réactions des populations de H_2 avec des espèces autres que le C^+ , le code PDR fait une approximation de la nouvelle prescription. Si elle entraîne des changements majeurs dans la chimie et les raies d'émissions des traceurs, il sera alors intéressant de faire un calcul précis de ces taux.

Les différences les plus importantes que l'on observe sur les spectres d'émissions sont pour la molécule du CO (figure 12), du H₂ (figure 29) et H₂O (figure 30). Or, on sait jusqu'à présent que le CO est principalement formé à partir du CH⁺ et que le calcul précis du taux de formation du CH⁺ par le C⁺ (eq. 23) est déjà connu dans le code. L'analyse de la chimie montre que la voie de formation du CO par OH est devenue efficace ce qui contribue à former davantage de CO ($\times 10$) et à intensifier ses raies. Le schéma 13 rassemble les réactions servant à former la molécule. Par ailleurs, la découverte de cette nouvelle voie de formation par OH est un résultat important.

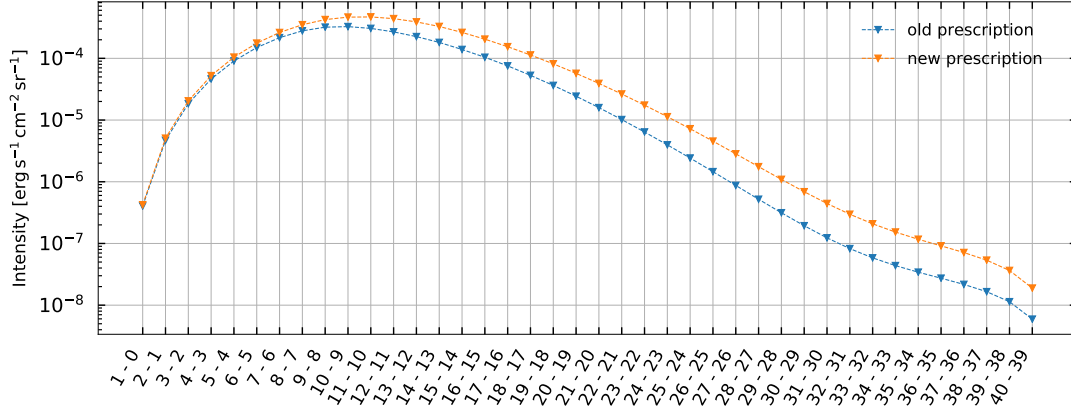


FIGURE 12 – Diagramme d'excitation du CO avec la nouvelle prescription
Seules les transitions rotationnelles du CO ont été écrites (toutes s'effectuent à $v = 0$). Un modèle isobare a été choisi ($P = 2.8 \cdot 10^8 \text{ cm}^3 \text{ K}$ et $\chi = 3.1 \cdot 10^4$).

FIGURE 13 – Réseau de formation du CO

En comparant les réseaux chimiques du modèle avec la nouvelle prescription on trouve que la réaction $\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$, devenue efficace, augmente la densité de H₂O ($\times 10$) ainsi que ses raies d'émissions (figure 30). On constate également que la réaction $\text{N} + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ devient importante. La densité du NH augmente ($\times 10^3$) de même que celle du HCN ($\times 2$) et de NO ($\times 2$) <spectres du NH?>. Il est présenté dans l'appendice ?? les voies de formations des espèces qui sont impactées par le nouveau calcul des taux de réactions.

Cette étude a notamment permis de découvrir une nouvelle voie de formation du CO et de déceler d'autres espèces susceptibles de réagir avec le H₂ comme N. Enfin, on a montré qu'une connaissance plus fine de la chimie impliquant la molécule H₂ pouvait avoir un impact important sur les spectres d'émissions des traceurs comme le CO. Il serait intéressant de continuer l'étude dans ce sens en comparant par exemple d'autres PDR avec des conditions physiques différentes.

III) Molécule H₂

On cherche dans un premiers temps des expressions permettant d'estimer le chauffage par pompage UV de la molécule H₂ calculé par le code.

III-1) Construction d'un modèle

III-1-a) Chauffage net par Rollig (1995)

III-1-b) Chauffage par désexcitation collisionnelle

Eq (10) ou (C.3).

Il propose un modèle d'excitation effectif à deux niveaux au lieu d'un modèle prenant en compte les 15 premiers états vibrationnels ($v \leq 15$) de la molécule. Se fonde sur SternbergDalgarno (1995) et Burton (1990). Traduit l'absorption du flux de photons à un taux P (90% sert à à exciter la molécule) puis le chauffage par désexcitation collisionnelle. $\Gamma_{H_2^*} > 0$

$$\Gamma_{H_2^*} = n_{H_2} \frac{\chi P}{1 + \frac{A_{\text{eff}} + \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}} n}} \Delta E \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (24)$$

Où le taux de pompage par unité de champs FUV $P = 2 \times 2.9 \cdot 10^{-10} \text{ s}^{-1}$. Le facteur 2 est considéré car Rollig considère un demi champs incident en bord de nuage (contrairement à nous qui utilisons le flux calculé à partir du transfert radiatif total). Le taux de pompage représente 100% du pompage. Normalement 85-90% du pompage maintient la molécule dans un état excité, les autres desexcitation dissocient la molécule. Il retransche un terme de refroidissement pour corriger.

III-1-c) Refroidissement par émission de photons

Eq (11) ou (C.2). Excitation collisionnelle (à $v = 1$) puis émission (ou photodissociation à inspecter : pourquoi il prend en compte 1). Rollig veut un terme de refroidissement et construit le taux tel que $\Lambda_{H_2} < 0$.

$$\Lambda_{H_2} = -\Delta E_{1,0} \gamma_{1,0} e^{-\Delta E_{1,0}/kT} n_H n_{H_2} \frac{A_{1,0} + \chi D_1}{\gamma_{1,0} n_H + A_{1,0} + \chi D_1} \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (25)$$

III-1-d) Bialy et Sternberg (2019)

Chauffage par désexcitation collisionnelle

[Bialy and Sternberg, 2019] (A12) considère que 9 photons sur 10 permettent d'avoir du H₂ excité.

$$\Gamma_{H_2 \text{ pump}} = 9 D_0 \chi E_{\text{pump}} n(H_2) \times \frac{1}{1 + \frac{n_{\text{crit}}}{n_H}} \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (26)$$

D_0 est le taux de photodissociation ($P \approx 10 D_0$, 1 photon sur 10 mène à une photodissociation). $E_{\text{pump}} = 1.12 \text{ eV}$ et $n_{\text{crit}} = 1.1 \cdot 10^5 / \sqrt{T/1000\text{K}} \text{ cm}^{-3}$ représente la compétition entre émission spontanée et désexcitation par collisions. Si on compare ces termes entre [Bialy and Sternberg, 2019] et [Röllig, M. et al., 2006] au bord de nuage avec un champs de rayonnement $\chi = 10^5$

$$\frac{A_{\text{eff}} + \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}}} \approx 2.9 \cdot 10^6 / \sqrt{T/1000\text{K}} \text{ cm}^{-3} \quad ! \sim n_{\text{crit}} \quad (27)$$

III-1-e) Chauffage par photodissociation

$$\Gamma_{\text{H}_2 \text{ pd}} = D_0 \chi E_{\text{pd}} n(\text{H}_2) \quad (28)$$

III-1-f) Absorption du rayonnement

Shielding par le molécule H_2

On utilise la fonction fitté (Eq.37) par [Draine and Bertoldi, 1996] pour calculer le *shielding* de la molécule H_2 sur le taux d'excitation par pompage χP .

$$f_{\text{shield}}(x) = \frac{0.965}{(1 + x/b_5)^2} + \frac{0.035}{(1 + x)^{0.5}} \exp \left[-8.5 \times 10^{-4} (1 + x)^{0.5} \right]$$

avec $x = N(\text{H}_2)/5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ et $b_5 = b/10^5 \text{ cm s}^{-1}$. L'écrantage affecte la formation et destruction de la molécule. Je multiplie la fonction f_{shield} au champs de rayonnement χ . On obtient ainsi un nouveau taux de chauffage :

$$\Gamma_{\text{H}_2^*} = n_{\text{H}_2} \frac{\chi P f_{\text{shield}}}{1 + \frac{A_{\text{eff}} + f_{\text{shield}} \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}} n}} \Delta E \text{ erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (29)$$

On fait de même pour le taux de refroidissement.

III-1-g) Extinction par les grains

Le champs de rayonnement calculé par le code ne prend pas en compte l'extinction par les grains. Approximation FGK. Je corrige le champs de rayonnement par $e^{-\tau_d}$ où $\tau_d = N_{\text{H}} \sigma_d$ donné par [Sternberg et al., 2014] Eq 20. Ainsi,

$$\chi' = e^{-\tau_d} f_{\text{shield}} \chi$$

III-1-h) Comparaison avec le code PDR de Meudon

On récupère du code le taux de refroidissement Λ_{PDR} par la molécule H_2 qui peut être positif ou négatif. Le taux prend en compte du chauffage par desexcitation collisionnelle et du refroidissement ro-vibrationnelle (émission). Il ne prend pas en compte de la photodissociation (qui chauffe). On veut étudier le chauffage, on appelle Γ_{PDR} la partie négative du taux ($\Lambda_{\text{PDR}} < 0$) et on le compare aux de chauffage nets.

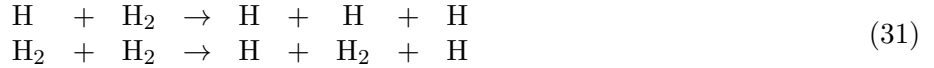
$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{Rollig net}} &= \Gamma_{\text{H}_2^*} + \Lambda_{\text{H}_2} \\ \Gamma_{\text{BS net}} &= \Gamma_{\text{H}_2 \text{ pump}} + \Gamma_{\text{H}_2 \text{ pd}} \end{aligned} \quad (30)$$

La figure ?? compare les taux de chauffages nets utilisant différentes prescriptions à celui calculé dans le code (en noir). Le chauffage calculé par Rollig et de Bialy&Sternberg ont la même intensité en bord de nuage où la désexcitation collisionnelle est prédominante.

L'approximation FGK est une méthode qui calcule le spectre du champs de rayonnements à travers le nuage qui prend en compte l'absorption dans le continuum et le carbone. Il prend également en compte l'écrantage de la molécule H_2 (figure ?? [Le Petit et al., 2006]).

III-2) Dissociation collisionnelle du H_2 (de Janev à Glover)

La destruction du H_2 dans les nuages interstellaires s'effectue soit par photodissociation soit par réactions chimiques. Les dissociations collisionnelles (eq. 31) sont des réactions de destruction du H_2 mal connues alors qu'elles interviennent dans du gaz chaud, ce qui est le cas du bord atomique de la PDR jusqu'à la transition H/H_2 .



Il existe plusieurs prescriptions qui tentent d'estimer les valeurs des taux de dissociation collisionnelle du H_2 (eq 31) en fonction de la température et des niveaux de la molécule. Connaître leurs taux de réaction est important car ils changent la densité de H_2 à travers le nuage ce qui a un impact sur le chauffage par H_2 et donc la température du gaz. Deux prescriptions possibles ont été retenues dans le code : celle de Glover et Mac Low (article) et celle de Janev (article). Par ailleurs on a constaté que la prescription de Glover calcule des taux de dissociation très faible (d'un facteur 10^{-50} bof) devant ceux de Janev ce qui change radicalement la chimie du nuage. Afin de n'en garder qu'une, nous avons comparé les effets de ces prescriptions sur l'ensemble des PDR.

Pour étudier globalement les PDR, on utilise des grilles de modèles qui explorent l'espace des paramètres (pression P , densité n_H et le champ de rayonnement de l'étoile proche χ). On représente une donnée - la température au bord de nuage, la température et l' A_V de la transition H/H_2 ou le processus thermique dominant au bord du nuage - à travers la grille et étudions quelques modèles particuliers afin de comprendre profondément les changements sur le code. On étudie d'abord 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 $n_H T = \text{cte}$).

III-2-a) Grilles de modèles - Bord atomique

Sur la figure 14, 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 15a 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.

Cette différence est principalement due à l'amélioration du chauffage par pompage UV de la molécule H_2 . Il devient en effet plus efficace de former du H_2 dans les bords atomiques des nuages grâce aux taux calculés par Glover. Le chauffage par pompage UV étant d'autant plus efficace que la densité de H_2 est grande, les bords atomiques de l'ensemble des PDR sont plus chauds. Le pompage UV devient encore plus intense dans les PDR denses et fortement illuminés où la densité de molécule H_2 et la quantité de photons UV deviennent importantes (hum le refroidissement par les raies également nan?).

On constate sur la figure 16 que le chauffage par H_2 reste dominant dans les bords atomiques des PDR denses quelque soit la prescription que l'on utilise. En revanche, les processus de refroidissements (figure 17) varient pour les PDR denses et faiblement illuminées ($n_H \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \leq 10^3$). L'utilisation des taux de dissociation de Glover tue le refroidissement par les réactions chimiques ce qui est normal car les réactions de dissociation du H_2 (eq 31) sont des réactions endothermiques très efficaces.

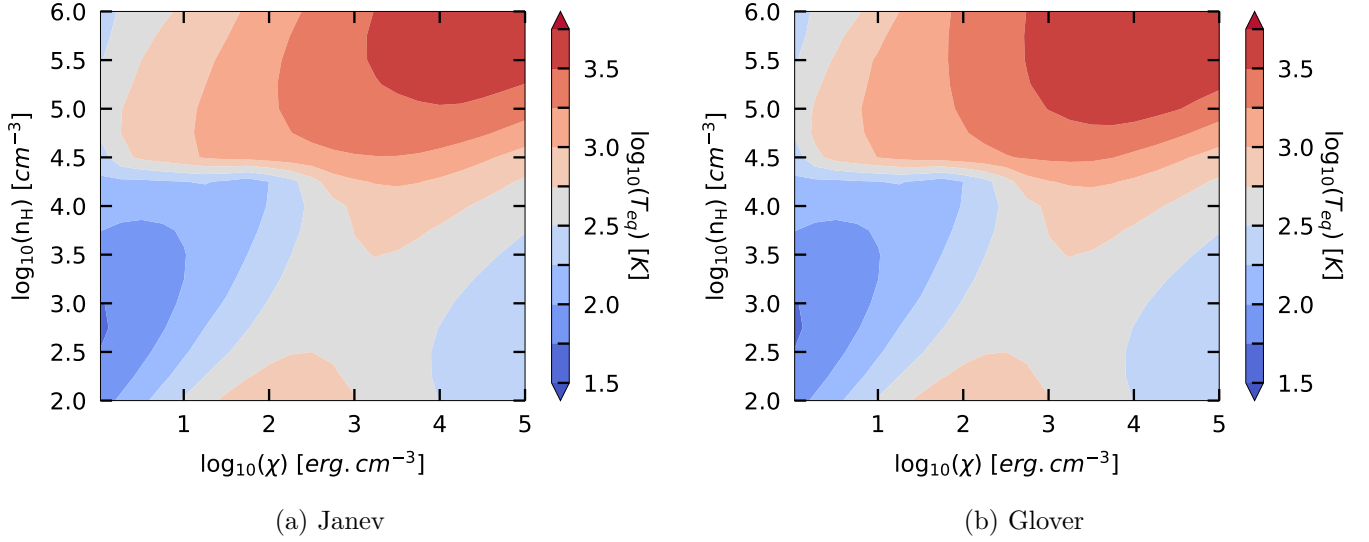


FIGURE 14 – Comparaison des température en bord atomique de nuage pour des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

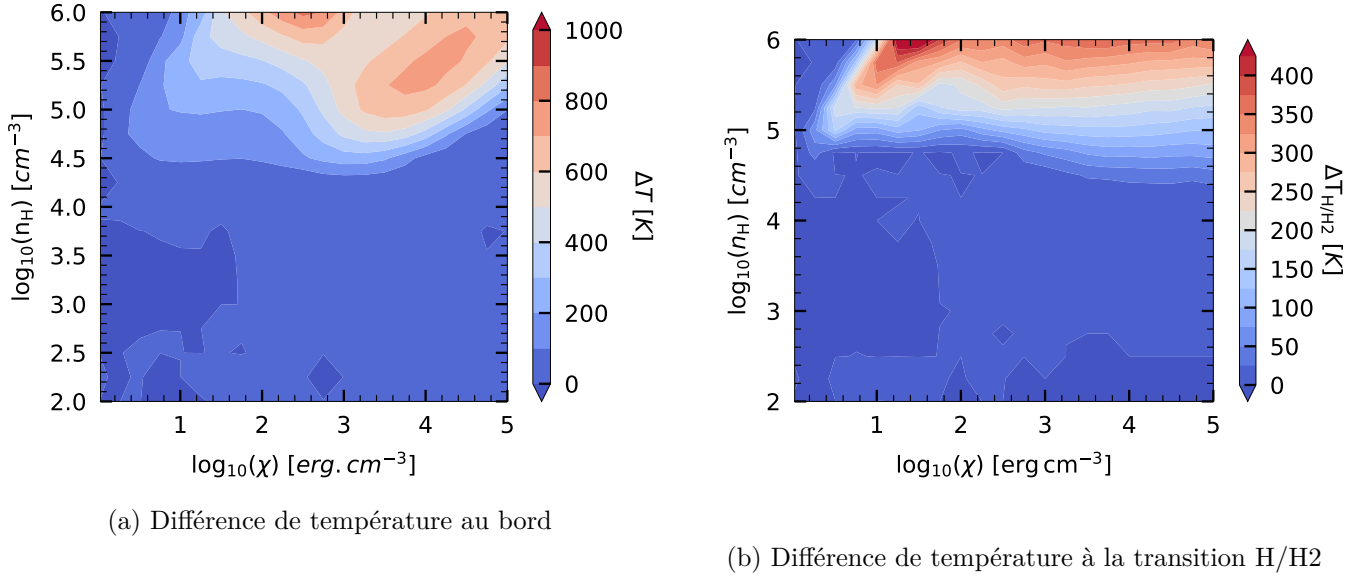
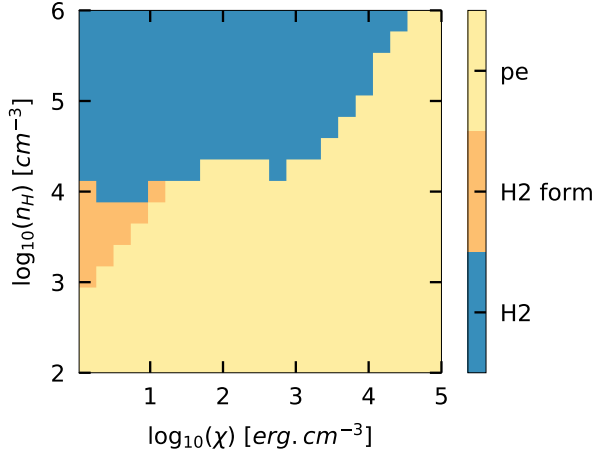


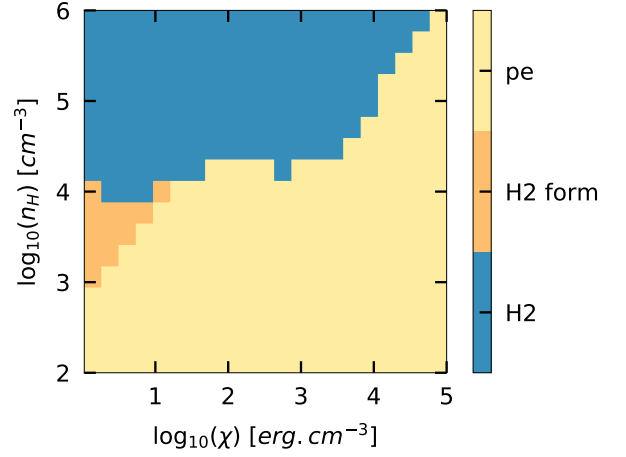
FIGURE 15 – Différence de température aux bords de nuage et aux transitions H/H₂ de modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover (les cartes ne sont pas en harmonie)

III-2-b) 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, jusqu'à 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 ont un impact sur les observables puisque que c'est dans la phase moléculaire que de nombreux traceurs tels que le H₂, CO, H₂O ou HCN se forment et sont excités (par...le H2 excité ou les grains?).



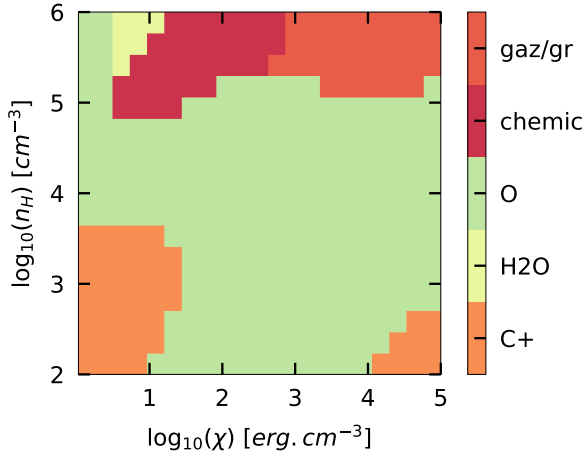
(a) Janev



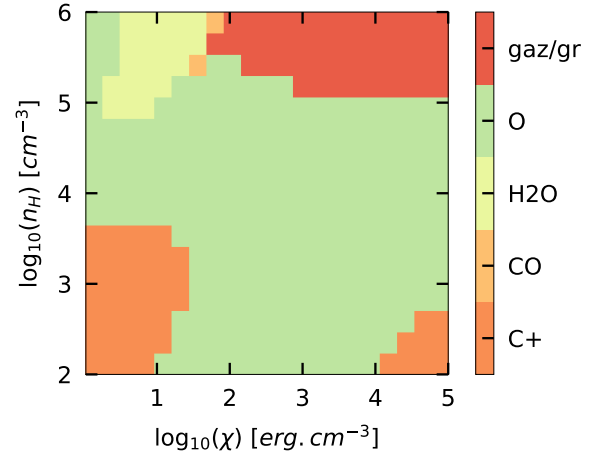
(b) Glover

FIGURE 16 – Processus de chauffage dominant en bord de région atomique

Le chauffage par effet photoélectrique sur les grains est désigné ici sous l'abréviation "pe". "H2" désigne le chauffage par pompage UV de la molécule H₂ et "H2 form" la formation de la molécule sur les grains.



(a) Janev



(b) Glover

FIGURE 17 – Processus de refroidissement dominant en bord de région atomique

Les noms "O", "H₂O", "CO" et "C⁺" désignent des processus de refroidissement par désexcitation collisionnelles des espèces O, H₂O, 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.

Les figures 18 et 19 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 19) en passant de la prescription de Janev à celle de Glover, la température dépasse le seuil limite de 600 K et atteint les 1000 K (figure 18).

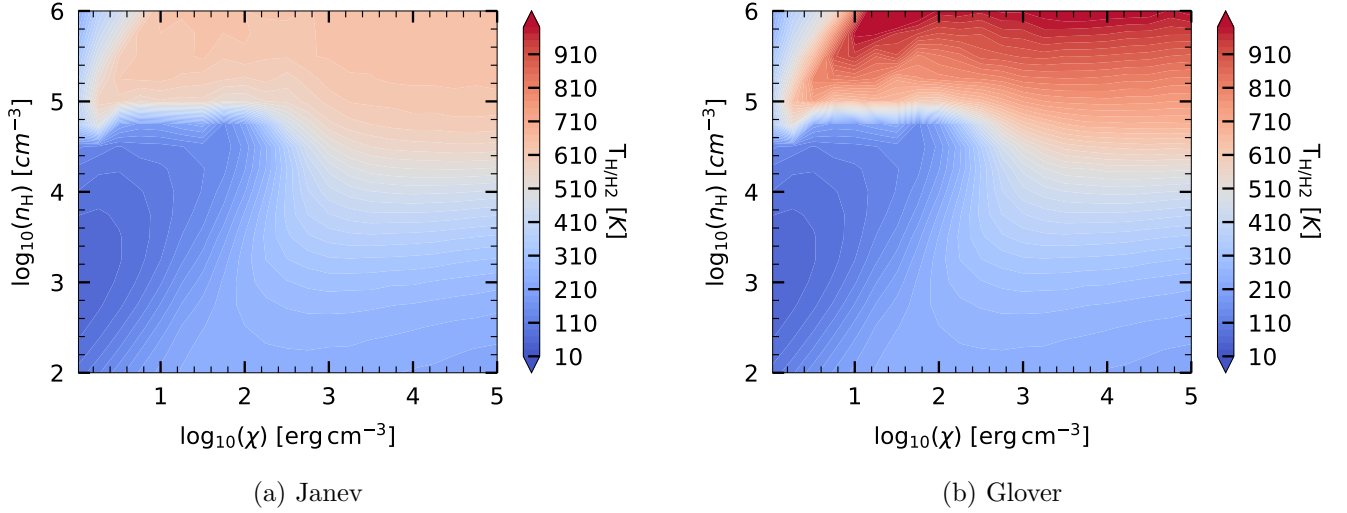


FIGURE 18 – Comparaison des température à la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

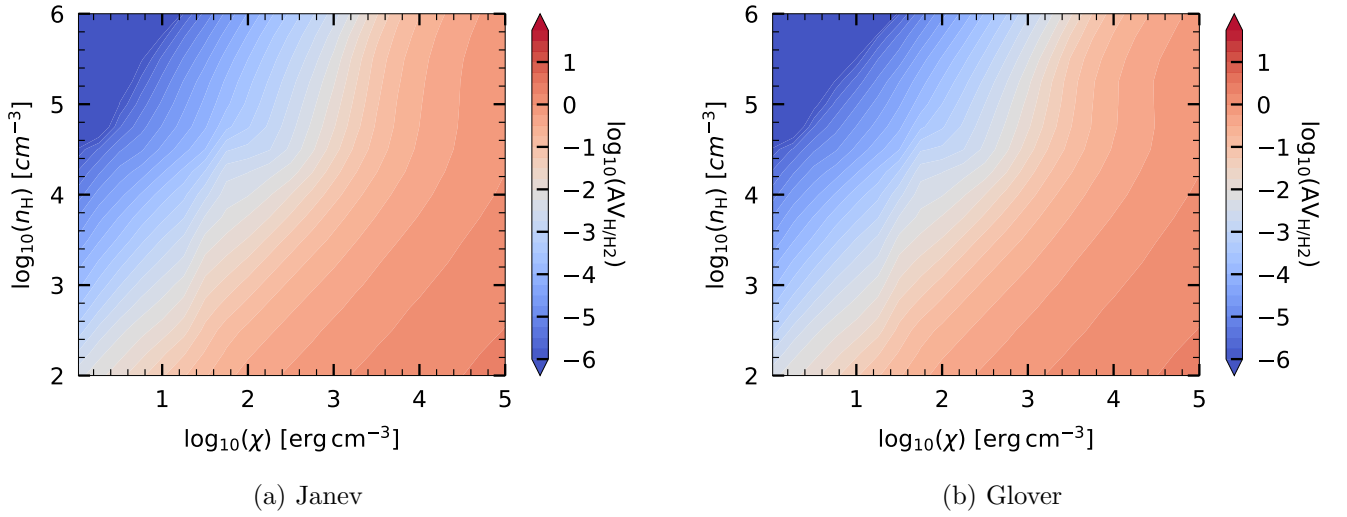


FIGURE 19 – Comparaison des A_v de la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

III-2-c) Etude d'un modèle particulier

On cherche à comprendre dans cette section pourquoi la température à la transition H/H₂ devient plus forte en utilisant la prescription de Glover. On a choisit un modèle à $n_H = 10^{5.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$ qui subit une augmentation de +300 K à la frontière. Le profil de température (figure 20a) montre immédiatement une augmentation locale de la température - une bosse - 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.

La figure 21 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 peu commun dans les PDR. Afin de comprendre l'origine de la bosse de température, on a tracé à $A_v \approx 0.2 \text{ mag}$, soit au milieu de la bosse, les courbes de chauffages et de refroidissements en fonction de

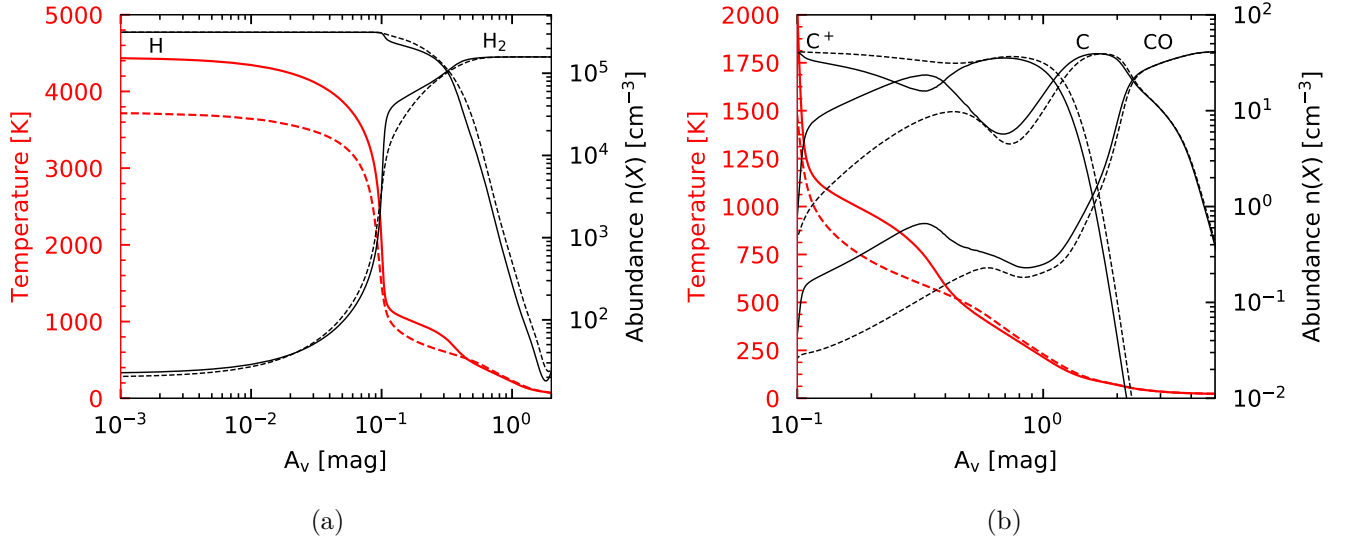


FIGURE 20 – Profils de densités de H et H_2 (a) et C^+ , C et CO (b) d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$). Le trait plein correspond au calcul utilisant la prescription de Glover et les trait pointillés celle de Janev.

la température (figure 22). 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 1000 K. Il s'agit des réactions chimiques qui se mettent à chauffer le gaz de manière plus efficace (figure 23).

Une étude préliminaire montre que la recombinaison électronique du CH_3^+ est la réaction exothermique prédominante dans le chauffage du gaz aux réactions chimiques. Le passage de la prescription de Janev à celle de Glover a pour effet de tuer la destruction du H_2 permettant de rendre le bilan d'exothermicité des réactions chimiques positif et de former plus facilement du H_2 qui va devenir un agent refroidissant efficace. On le visualise simplement sur la figure 22.

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. La conséquence immédiate de cette bosse de température s'observe sur les diagrammes d'intensité du CO (figure 24). Les raies $8 \leq J \leq 15$ doublent leur intensités tandis que les raies $J \geq 15$ augmentent d'un facteur 10 ce qui est important. On constate enfin que cette augmentation locale de température impacte les raies d'émissions du CO des PDR denses.

Conclusion

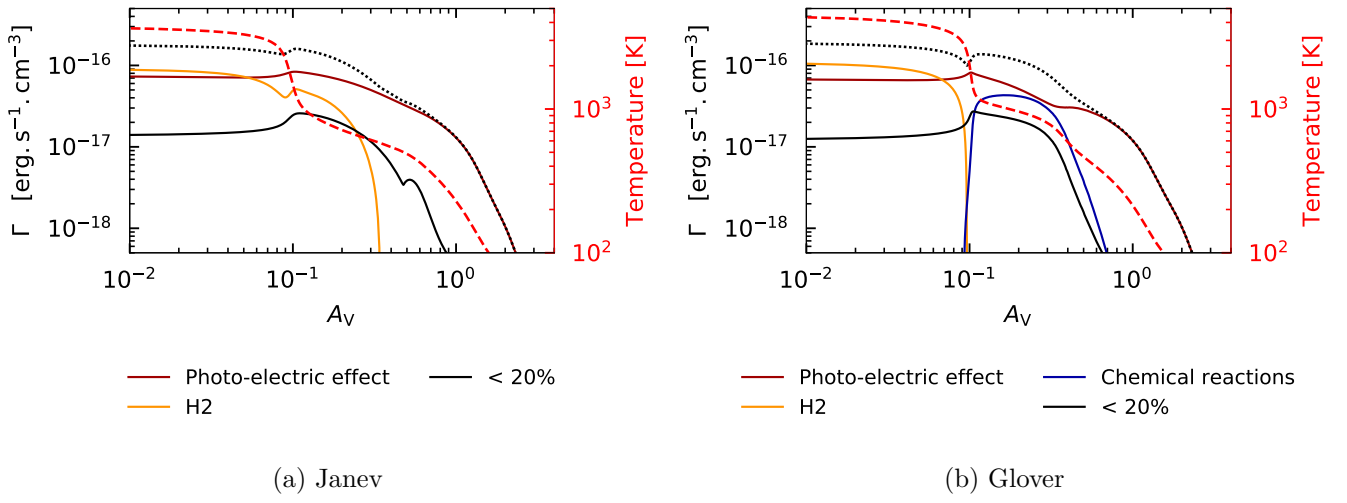
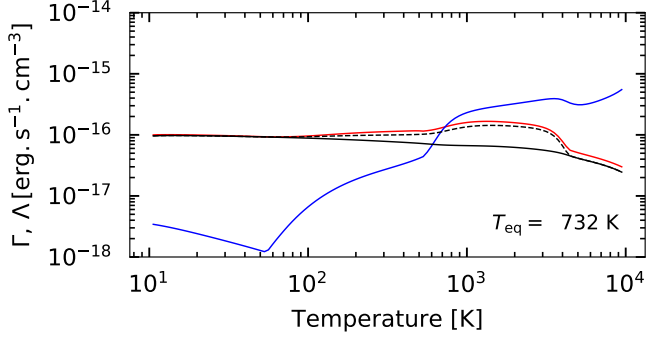
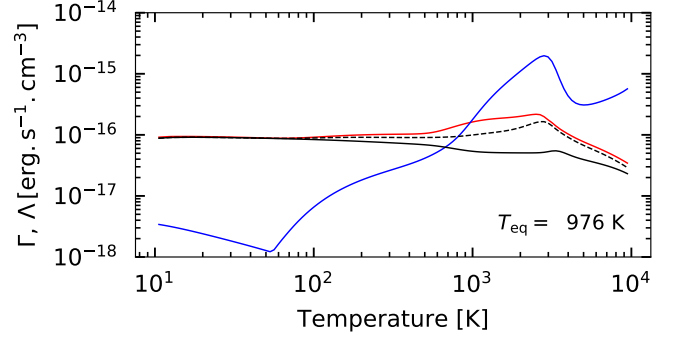


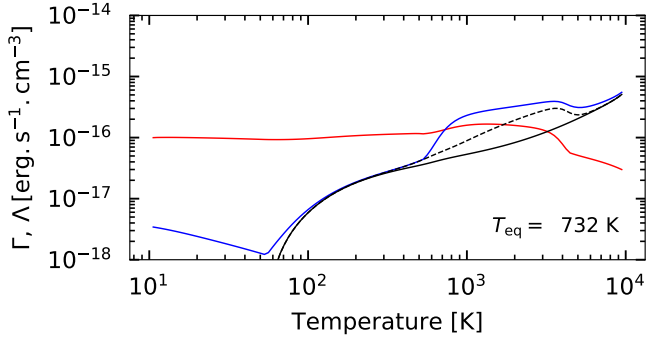
FIGURE 21 – (ANNEXE) Profils des taux de chauffages d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Janev ou de Glover. La température (axe de droite) est représentée en tiret rouge. Le taux de chauffage total est en pointillé noir.



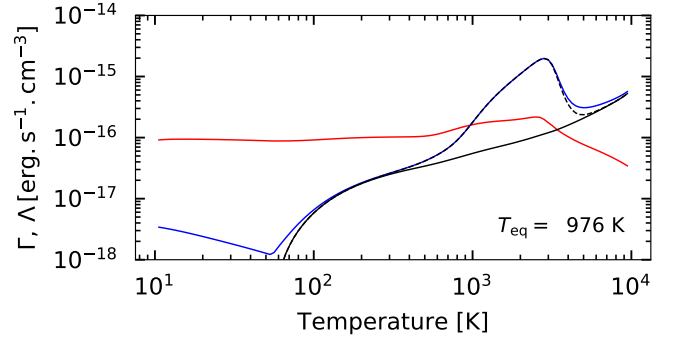
(a) Janev



(b) Glover



(c) Janev



(d) Glover

FIGURE 22 – (ANNEXE) Taux de chauffages et de refroidissements en fonction de la température à A_V de 0.2 mag pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$).

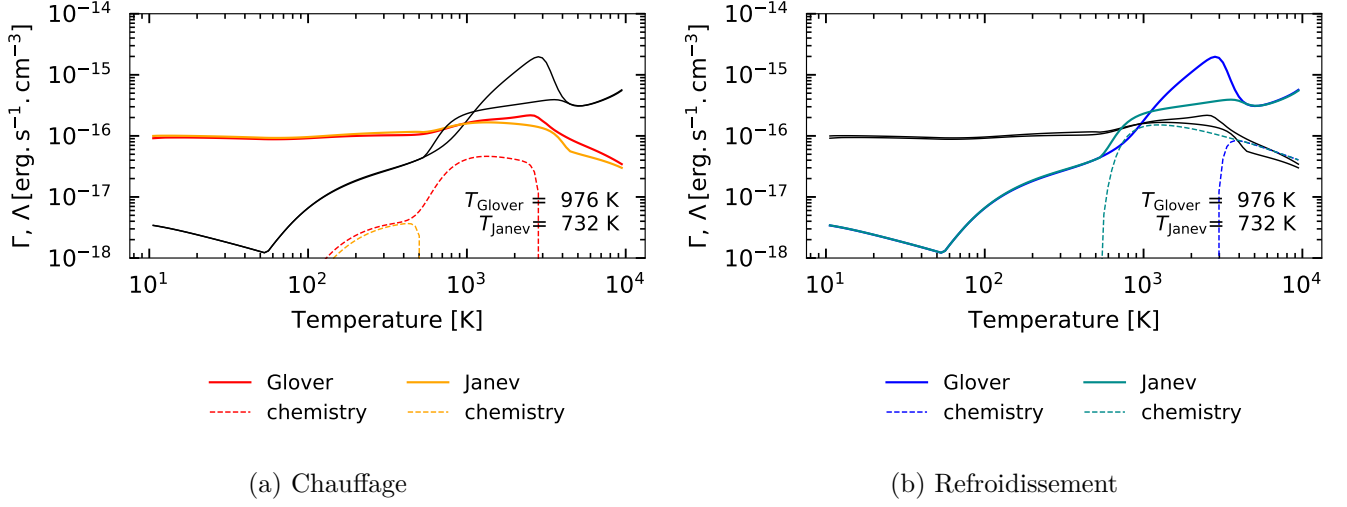


FIGURE 23 – Efficacité du chauffage des réactions chimiques en fonction de la température pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$). Les courbes en rouge et jaune sur la figure (a) représentent les processus de chauffage tandis que celles en noires les courbes de refroidissement total. Sur la figure (b), les courbes en bleu et bleu clair représentent le refroidissement alors que celles en noires le chauffage.

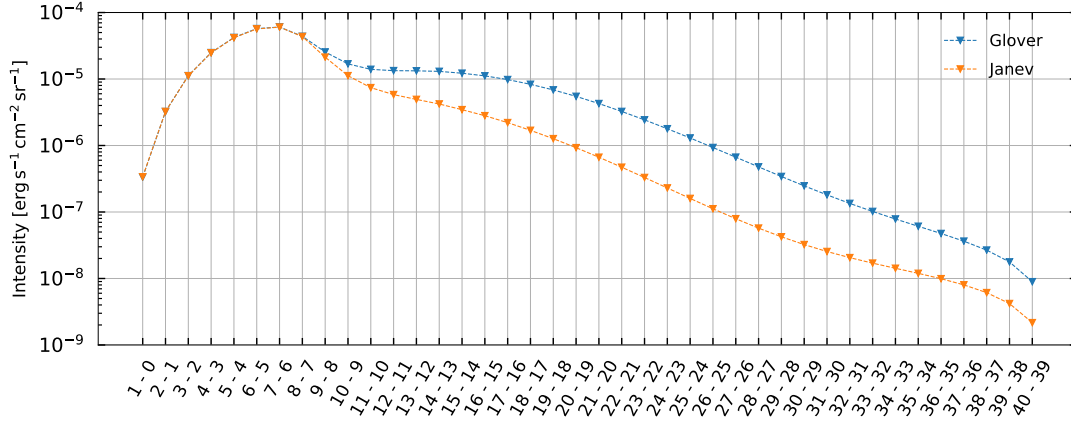


FIGURE 24 – Raies d'émissions du CO pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Glover ou bien celle de Janev. Les transitions écrites sur l'axe des abscisses signifient les transitions des niveaux rotationnels de la molécule CO.

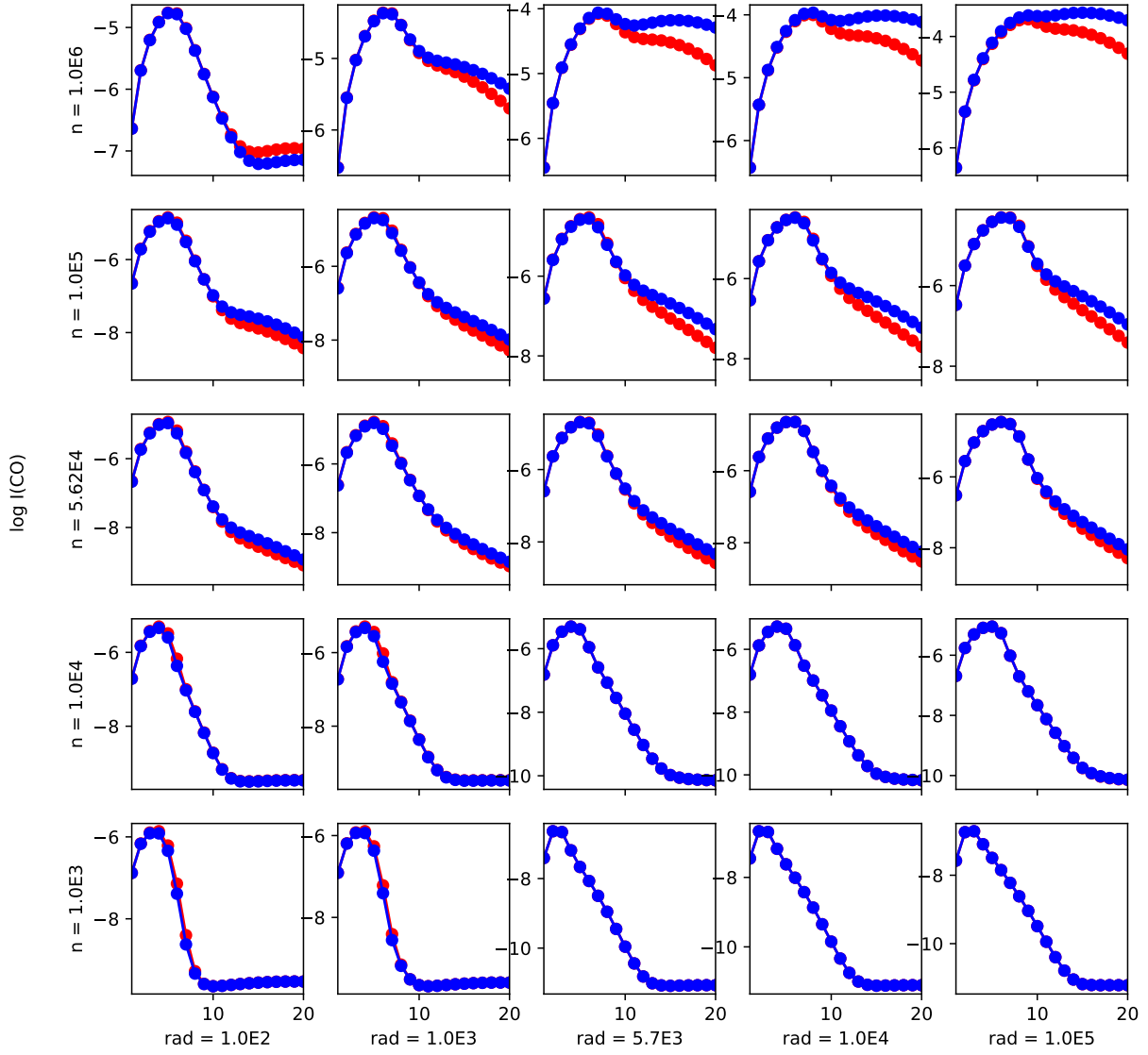


FIGURE 25 – Raies d'émissions du CO pour une grille de à densité constante. Les lignes en rouge sont les modèles utilisant la prescription de Janev tandis que celles en bleues utilisent la prescription de Glover. Les 20 premières transitions sont représentées.

Références

- [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.
- [Draine, 2011] Draine, B. T. (2011). Physics of the interstellar and intergalactic medium. "Princeton University Press".
- [Draine and Bertoldi, 1996] Draine, B. T. and Bertoldi, F. (1996). Structure of Stationary Photodissociation Fronts. , 468 :269.
- [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 $\text{C} + \text{H}_2$ reaction. Phys. Chem. Chem. Phys., 16 :24800–24812.
- [Hollenbach et al., 1991a] Hollenbach, D. J., Takahashi, T., and Tielens, A. G. G. M. (1991a). Low-density photodissociation regions. , 377 :192–209.
- [Hollenbach et al., 1991b] Hollenbach, D. J., Takahashi, T., and Tielens, A. G. G. M. (1991b). Low-density photodissociation regions. , 377 :192–209.
- [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 herchel observations of high-j co emission lines. A&A, 615 :A129.
- [Kaufman et al., 2006] Kaufman, M. J., Wolfire, M. G., and Hollenbach, D. J. (2006). [Si II], [Fe II], [C II], and H_2 Emission from Massive Star-forming Regions. , 644 :283–299.
- [Le Petit et al., 2006] Le Petit, F., Le Bourlot, J., Roueff, E., and Nehmé, C. (2006). A model for atomic and molecular interstellar gas : The meudon pdr code. The Astrophysical Journal Supplement Series, 164.
- [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.
- [Sternberg et al., 2014] Sternberg, A., Petit, F. L., Roueff, E., and Bourlot, J. L. (2014). H i-TO-H_2 transitions AND H i COLUMN DENSITIES IN GALAXY STAR-FORMING REGIONS. The Astrophysical Journal, 790(1) :10.
- [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.

- [Wolfire et al., 1995] Wolfire, M. G., Hollenbach, D., McKee, C. F., Tielens, A. G. G. M., and Bakes, E. L. O. (1995). The neutral atomic phases of the interstellar medium. , 443 :152–168.
- [Wolfire et al., 2003] Wolfire, M. G., McKee, C. F., Hollenbach, D., and Tielens, A. G. G. M. (2003). Neutral atomic phases of the interstellar medium in the galaxy. The Astrophysical Journal, 587(1) :278–311.
- [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

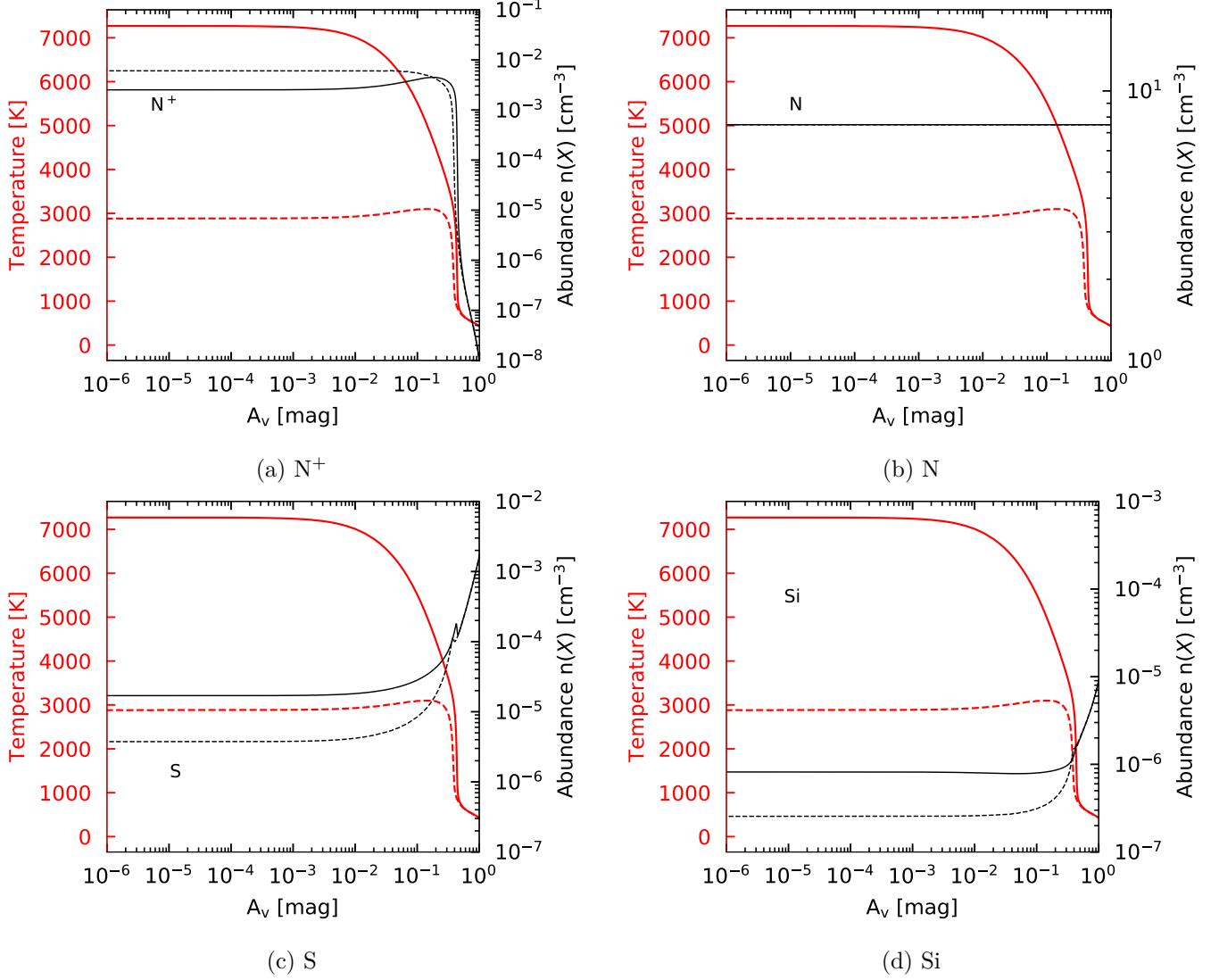


FIGURE 26 – (ANNEXE) Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore. Il est représenté en trait plein les profils du modèle avec le chlore et en trait pointillé le modèle ne contenant pas de chlore. La température est en rouge et la densité en noir.

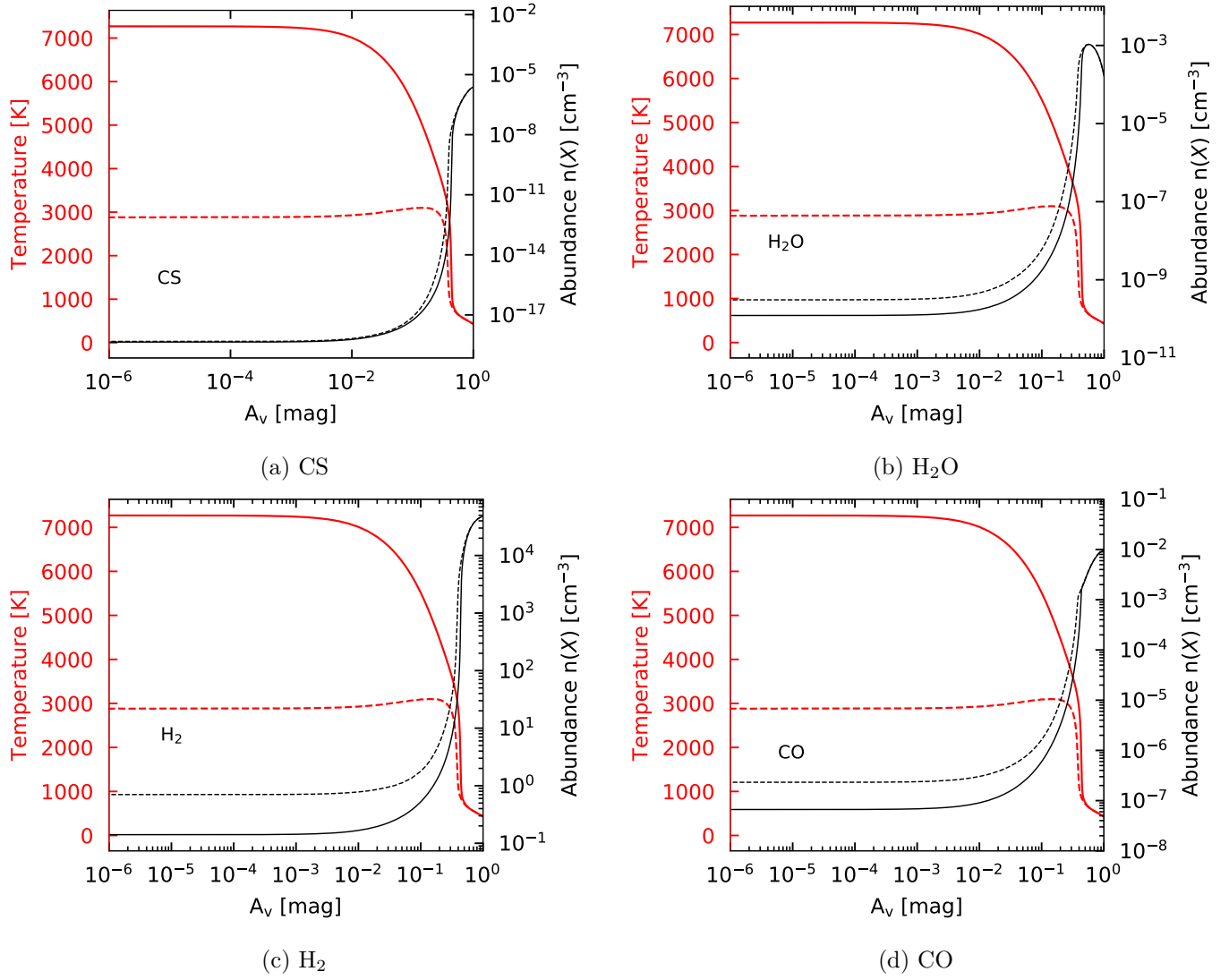
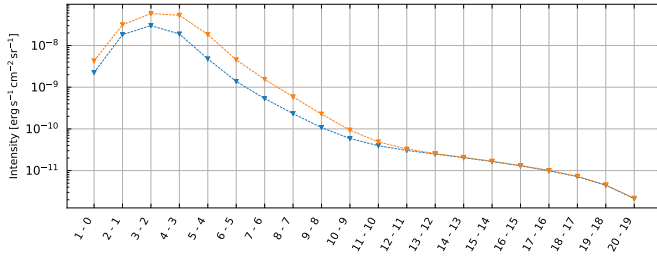
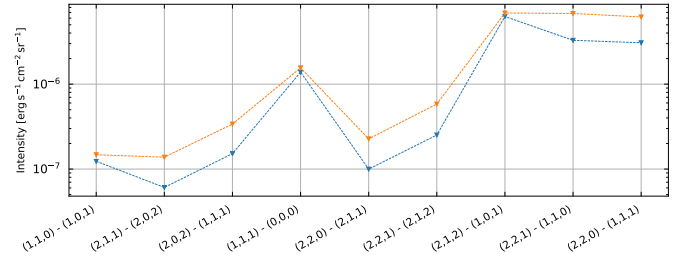


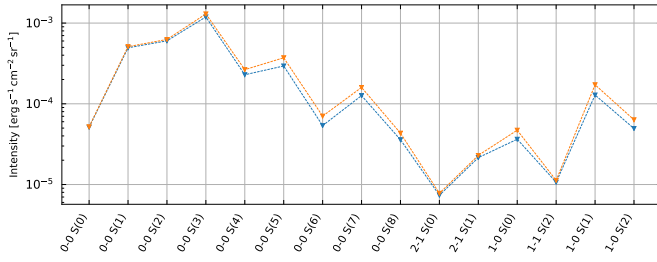
FIGURE 27 – ((ANNEXE) Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore. Mêmes conventions que pour la figure 26.



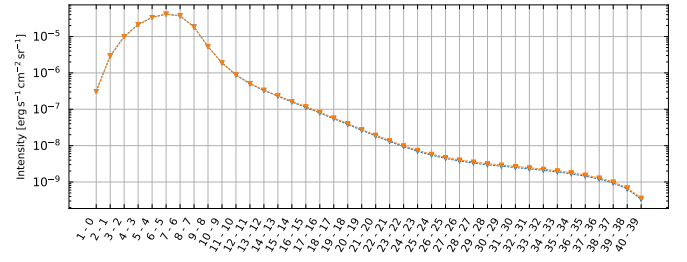
(a) CS



(b) H₂O



(c) H₂



(d) CO

FIGURE 28 – (ANNEXE) Diagramme d'excitation des traceurs peu modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (même convention que la figure 10). Pour la molécule CO, les transitions rotationnelles ont été écrites (toutes s'effectuent à $v = 0$).

B H₂ excité

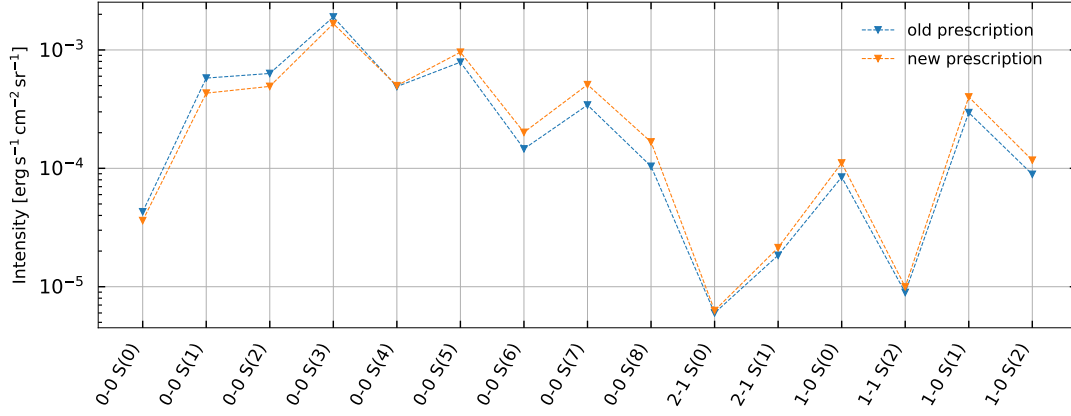


FIGURE 29 – Diagramme d'excitation du H₂

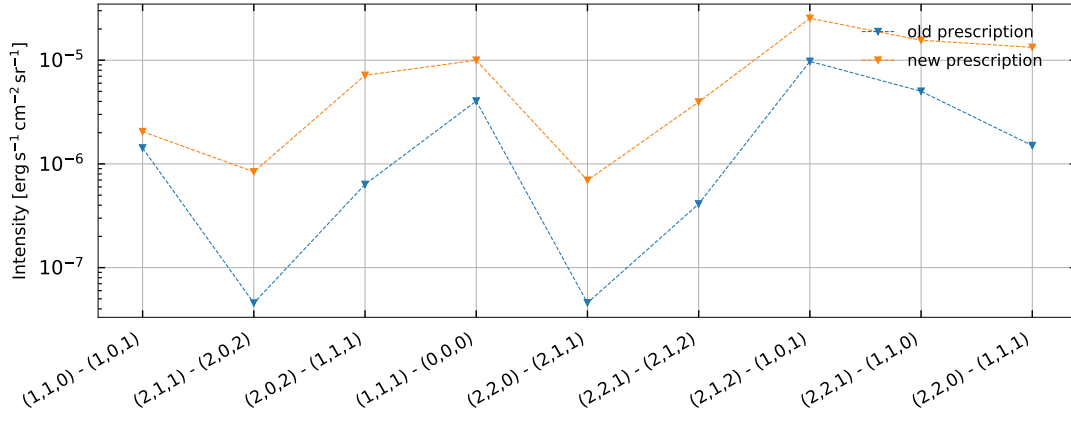


FIGURE 30 – Diagramme d'excitation du H₂O