

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

1	Amplification de l'effet photoélectrique par le chlore	4
1.1	Comparaison de profil de température	4
1.2	Rôle du chlore	5
1.3	Modèle analytique - Chimie	6
1.3.1	Ion hydrogène	7
1.3.2	Ion chlore	8
1.3.3	Recombinaison de H^+ sur les grains	8
1.4	Modèle analytique - Thermique	9
1.4.1	Chauffage net par effet photoélectrique sur les grains	10
1.4.2	Refroidissement par les raies d'émissions du C^+ et de O	10
1.4.3	Couplage gaz-grains	10
1.4.4	Emission Lyman $H\alpha$	11
1.5	Correction de l'effet photoélectrique par le code	11
1.6	Prédiction de la température au bord de nuage	11
1.6.1	Carte de température au bord du nuage	11
1.7	A la recherche d'observables	13
1.7.1	Détermination d'un traceur	13
1.7.2	Choix de la raie [N] 5200A	15
2	Nouvelles voies de formation avec H_2 excité	15

3	Molécule H_2	18
3.1	Construction d'un modèle	18
3.1.1	Chauffage net par Rollig (1995)	18
3.1.2	Chauffage par désexcitation collisionnelle	18
3.1.3	Refroidissement par émission de photons	18
3.1.4	Bialy et Sternberg (2019)	18
3.1.5	Chauffage par photodissociation	19
3.1.6	Absorption du rayonnement	19
3.1.7	Extinction par les grains	19
3.1.8	Comparaison avec le code PDR de Meudon	19
3.2	Dissociation collisionnelle du H_2 (de Janev à Glover)	20
3.2.1	Grilles de modèles - Bord atomique	20
3.2.2	Grilles de modèles - Transition H/H_2	21
3.2.3	Etude d'un modèle particulier	23
Annexe A	Impact du chlore	31
Annexe B	H_2 excité	34

Introduction

1 Amplification de l'effet photoélectrique par le chlore

Le chlore est une espèce souvent négligé dans les réseaux d'astrochimie en raison de sa faible abondance dans les PDR (voir 1). Pourtant, 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]. Ses propriétés chimiques sont connues et étudiées par [Neufeld and Wolfire, 2009, Amin, 1996, Schilke et al., 1995] et l'équipe de Meudon avait brièvement commencé à observer les effets du chlore dans le code PDR. Ils avaient constaté que le chlore rendait le gaz plus chaud en bord atomique de nuage mais qu'il causait également des irrégularités dans les profils de densités et de température, pouvant traduire soit un problème numérique soit un nouvel effet dans les PDR. A l'occasion du stage qui traite explicitement des processus thermiques dans les nuages interstellaires, nous avons étudié les conséquences du chlore dans le code PDR.

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

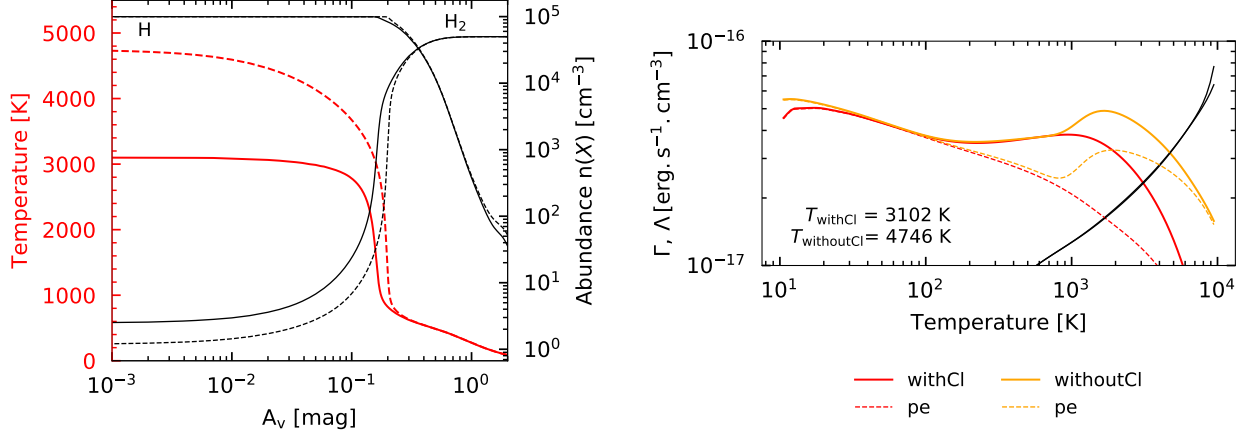
La fraction élémentaire δ_X est le rapport de la densité de l'espèce X par la densité d'élément hydrogène dans le gaz. PI est le potentiel de ionisation de l'espèce en électron volt.

1.1 Comparaison de profil de température

Afin de tester l'impact du chlore, on a résolu à l'aide du code PDR deux modèles à des conditions typiques de nuage ($n_{\text{H}} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^4$), l'un sans chlore et l'autre l'incluant (figure 1a). On retrouve le résultat précédent que le bord atomique du nuage est plus chaud de 1000 K. Pour comprendre l'origine de cette augmentation de température on a tracé les taux de chauffage et de refroidissement en fonction de la température au bord du nuage (figure 1b). L'équilibre thermique du gaz est déterminé par l'intersection des courbes de chauffage et de refroidissement. On voit, en effet, qu'ajouter du chlore dans le code PDR, augmente la courbe de chauffage (en trait plein) à partir de $T \geq 1000 \text{ K}$ 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 photoélectrique sur les grains tandis qu'il est refroidit par les émissions des raies de O et du C^+ . A la vu de la figure 1b, on en conclut que l'augmentation du chauffage total du gaz est causé par celle de l'effet photoélectrique qui est représenté en pointillé.

L'allure du taux de l'effet photoélectrique indique l'existence une possible bistabilité thermique en bord atomique de nuage, soit que les courbes se coupent en trois températures d'équilibres dont deux sont stables

et une instable. Une température d'équilibre est instable si une perturbation la déplace de son point d'équilibre, c'est à dire qu'une perturbation positive de température rend le taux de chauffage plus grand que le taux de refroidissement. Ceux de la figure 1b sont stables car si l'on refroidit le gaz alors le chauffage devient plus intense ce qui ramène le gaz à la température d'équilibre.



(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 1 – Impact du chlore sur les profils - modèles à densité constante ($n_H = 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^4$) Sur la figure (a) la température est tracé en rouge tandis que les densités de H et H₂ sont en noir. Le trait plein est le modèle sans chlore tandis que le pointillé est le modèle contenant du chlore. Pour la figure (b), les traits pleins en rouge et orange représentent les taux de chauffage total qui sont la somme du chauffage par pompage UV de H₂ 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.

1.2 Rôle du chlore

Il faut maintenant comprendre l'origine de l'augmentation de l'effet photoélectrique à $T \geq 1000 \text{ K}$ et chercher dans quelles conditions physiques de PDR, l'instabilité thermique peut avoir lieu. En isolant les réactions chimiques principales et en considérant les processus thermiques dominants, on a construit un modèle semi-analytique permettant d'explorer l'espace des paramètres des PDR et de déterminer les conditions où l'instabilité peut avoir lieu.

On a 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 2. 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 d'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.

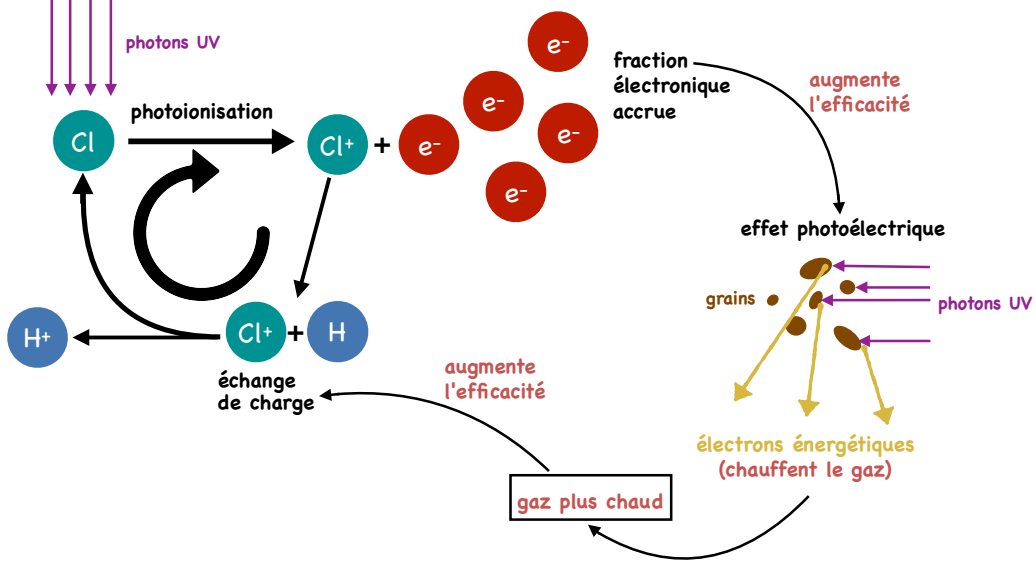


FIGURE 2 – Schéma représentant l'impact du chlore sur la chimie de bord de nuage atomique

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 via le chlore devienne dominante devant celle de la ionisation du carbone et du soufre et amorce la rétroaction 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 (Tableau 1). 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.

1.3 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 $\Gamma_{pe} = 10^{-24} \epsilon G_0 n_{\text{H}}$ en $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-3}$ où G_0 est l'intensité du champs UV en Habing ($G_0 = 1.71\chi$) et ϵ est l'efficacité en s^{-1} de l'effet photoélectrique :

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

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.

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.

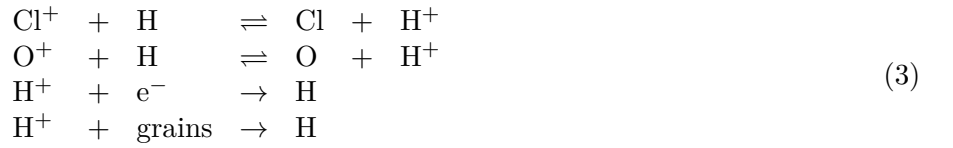
Les espèces qui contribuent à la production d'électrons en bord de nuage sont les ions hydrogène H^+ , carbone C^+ et soufre S^+ . Le gaz est neutre, le bilan de charge donne donc :

$$n_e = n(H^+) + n(C^+) + n(S^+) \quad (2)$$

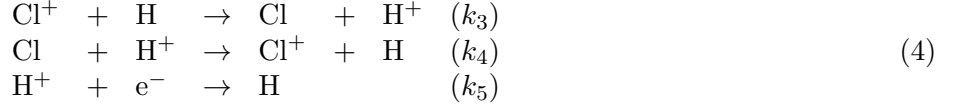
On peut supposer qu'en entrée de nuage atomique le carbone et le soufre sont totalement ionisés ce qui fournit une fraction d'électrons minimale² de 10^{-4} . Aussi ne reste il qu'à déterminer une expression de la densité de protons H^+ en fonction de la température.

1.3.1 Ion hydrogène

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



Les réactions avec l'oxygène sont négligées car la formation et destruction de H^+ par l'oxygène se compensent totalement en première approximation. De plus le taux de recombinaison de l'ion H^+ sur les grains ($H^+ + \text{grains} \rightarrow H$) est difficile à estimer, on le 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_3, k_4, k_5 en $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ et qui dépendent de la température. <nommer les coefficients en recommençant de 1 ?>



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

$$\frac{d}{dt}n(H^+) = k_3n(Cl^+)n(H) - k_4n(Cl)n(H^+) - k_5n(H^+)n_e = 0 \quad (5)$$

En introduisant la fraction atomique de chlore δ_{Cl} , fixée dans le gaz, et le bilan de charge (eq 2) on obtient une équation en $n(H^+)$:

$$-k_3n(Cl^+)n_H + \left(\frac{k_3k_4}{k_1}n_Hn(Cl^+) + k_5(n(C^+) + n(S^+)) \right)n(H^+) + k_5n(H^+)^2 = 0 \quad (6)$$

avec,

$$\delta_{Cl} = 1.8 \cdot 10^{-7} = \frac{n(Cl) + n(Cl^+) + \dots}{n(H) + n(H^+) + 2n(H_2) + \dots} \approx \frac{1}{n_H}(n(Cl) + n(Cl^+)) \quad (7)$$

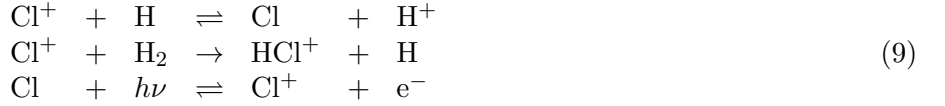
On obtient alors une solution qui dépend de $n(Cl^+)$,

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

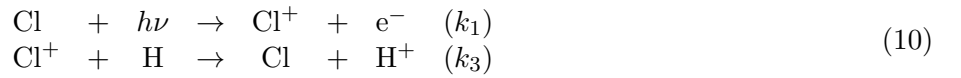
$$n(\text{H}^+) = -\frac{1}{2} \left(\frac{k_3 k_4}{k_1 k_5} n_{\text{H}} n(\text{Cl}^+) + n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+) \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{k_3 k_4}{k_1 k_5} n_{\text{H}} n(\text{Cl}^+) + n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+) \right)^2 + 4 \frac{k_3}{k_5} n_{\text{H}} n(\text{Cl}^+)}$$
(8)

1.3.2 Ion chlore

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



La recombinaison électronique de Cl^+ ($\text{Cl}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{Cl} + h\nu$) reste négligeable devant le transfert de charge avec H ($\text{Cl}^+ + \text{H} \rightarrow \text{Cl} + \text{H}^+$) 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-dessous avec les taux de réactions k_1 en s^{-1} et k_3 en $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$.



Un travail similaire nous donne

$$k_1(\delta_{\text{Cl}} n_{\text{H}} - n(\text{Cl}^+)) - k_3 n(\text{Cl}^+) n_{\text{H}} = 0 \quad (11)$$

Ce qui fait en posant $A = \frac{k_1}{k_3 n_{\text{H}}}$:

$$n(\text{Cl}^+) = \frac{k_1 \delta_{\text{Cl}} n_{\text{H}}}{k_1 + k_3 n_{\text{H}}} = \frac{A}{1 + A} \delta_{\text{Cl}} n_{\text{H}} \quad (12)$$

1.3.3 Recombinaison de H^+ sur les grains

Le taux de recombinaison du H^+ sur les grains est calculé dans le code à partir de la distribution des grains : nous n'avons pas d'expression explicite pour notre modèle. Par ailleurs, sans la recombinaison, le modèle semi-analytique surestime la densité d'électrons aux hautes températures. On utilise donc une expression calculée à partir de données observationnelles et qui considère une population de grains différente de celle du code (équations [5][8] de [Weingartner and Draine, 2001]).

$$\alpha(X^i, \psi, T) \approx \frac{10^{-14} C_0}{1 + C_1 \psi^{C_2} (1 + C_3 T^{C_4} \psi^{-C_5 - C_6 \ln T})} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad (13)$$

avec $\psi = \frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e}$. Les coefficients C_i sont des paramètres de fit. Le bilan eq.14 devient :

$$\frac{d}{dt} n(\text{H}^+) = k_3 n(\text{Cl}^+) n(\text{H}) - k_4 n(\text{Cl}) n(\text{H}^+) - k_5 n(\text{H}^+) n_e - \alpha n(\text{H}^+) n_{\text{H}} = 0 \quad (14)$$

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

vérifie :

$$x = n(\text{H}^+)(x) + n(\text{S}^+) + n(\text{C}^+) \quad (15)$$

La fonction `newton` de la librairie `scipy.optimize` vient à bout de ce système. On visualise sur la figure 3 les densités d'électrons calculés par le modèle semi-analytique et par le code PDR. La formule de [Weingartner and Draine, 2001] considère dans le nuage une distribution de grains incluant les PAH³ qui est un support efficace pour la recombinaison des ions H^+ . On voit en effet sur la figure 3a qu'avec les PAH le modèle semi-analytique surestime la densité d'électrons prédite par le code PDR tandis qu'en prenant en compte l'expression de [Weingartner and Draine, 2001] on obtient une densité proche de celle du code. Si l'on ne prend pas en compte les PAH dans le code PDR (figure 3b), le code PDR utilise moins de petits grains que la formule et il est nécessaire de diminuer le taux de recombinaison d'un facteur 1/6 pour approcher la densité d'électrons calculé par le code.

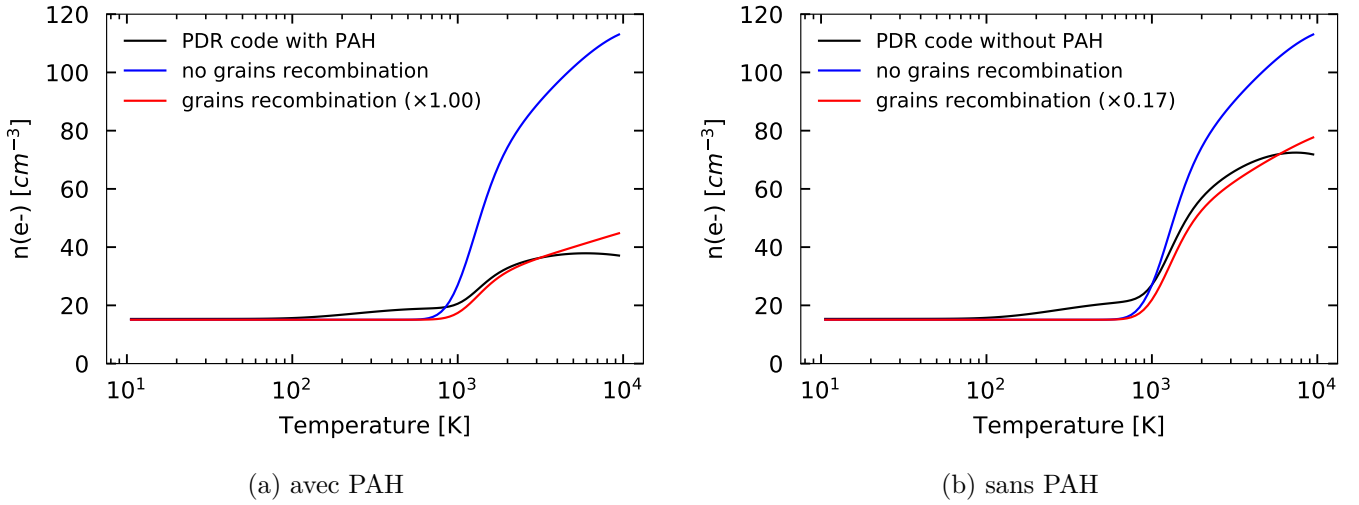


FIGURE 3 – Comparaison des profils de densité d'électrons en fonction de la température

1.4 Modèle analytique - Thermique

Pour construire un bilan thermique et déterminer la température d'équilibre du gaz, il faut considérer les processus de chauffage et refroidissement qui interviennent en bord atomique des nuages. Les processus 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 $[\text{CII}] 158\mu\text{m}$, $[\text{OI}]63\mu\text{m}$, $[\text{OI}]6300\text{\AA}$ ([Röllig, M. et al., 2006])
- l'émissions Lyman $\text{H}\alpha$ ([Tielens, 2005])
- le couplage gaz-grain ([Hollenbach et al., 1991a]).

Les processus thermiques impliquant la molécule H_2 ont été négligé car ils demandent de connaître la densité de H_2 dans le bord atomique du nuage. On dénote Γ et Λ les taux de chauffage et de refroidissement total.

3. 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].

$$\begin{aligned}\Gamma &= \Gamma_{pe}^{\text{net}} \\ \Lambda &= \Lambda_{\text{CII } 158\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} + \Lambda_{\text{H}\alpha} + \Lambda_{\text{g-g}}\end{aligned}\quad (16)$$

1.4.1 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 et être éjecté de la surface du grain. Ce photoélectron a une énergie de l'ordre de l'eV ($1 \text{ eV} \approx 50\,000\text{K}$) 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} [?]. Ces phénomènes dépendent principalement de l'intensité du champs 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 $\Gamma_{pe}^{\text{net}} = \Gamma_{pe} - \Lambda_{\text{rec}}$. On se contente d'utiliser les formules de [Bakes and Tielens, 1994] :

$$\Gamma_{pe} = 10^{-24} G_0 n_{\text{H}} \frac{2 \times 10^{-2}}{1 + 2 \times 10^{-4} (G_0 \sqrt{T}/n_e)} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (17)$$

$$\Lambda_{\text{rec}} = 3.49 \cdot 10^{-30} T^{0.944} \left(\frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e} \right)^{0.735 T^{-0.068}} n_e n_{\text{H}} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (18)$$

avec $G_0 = 1.71\chi$.

1.4.2 Refroidissement par les raies d'émissions du C^+ et de O

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 les expression de [Röllig, M. et al., 2006] qui estime le refroidissement des raies $[\text{CII}]158\mu\text{m}$, $[\text{OI}]62\mu\text{m}$ et $[\text{OI}]146\mu\text{m}$.

$$\Lambda_{\text{CII } 158\mu\text{m}} = n(\text{C}^+) \frac{2.89 \times 10^{-20}}{1 + \frac{1}{2} \exp(92/T) \left(1 + \frac{1300}{n_{\text{H}}} \right)} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (19)$$

$$\begin{aligned}\Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} &= 3.15 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \\ &\times \frac{e^{98/T} 3 n_{\text{H}} (n_{\text{H}} + \beta n_{\text{cr01}})}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T} (n_{\text{H}} + \frac{1}{2} n_{\text{cr01}}) (3 n_{\text{H}} + 5 e^{228/T} (n_{\text{H}} + \frac{1}{2} n_{\text{cr12}}))}\end{aligned} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (20)$$

$$\begin{aligned}\Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} &= 1.35 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \\ &\times \frac{n_{\text{H}}^2}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T} (n_{\text{H}} + \frac{1}{2} n_{\text{cr01}}) (3 n_{\text{H}} + 5 e^{228/T} (n_{\text{H}} + \frac{1}{2} n_{\text{cr12}}))}\end{aligned} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (21)$$

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

1.4.3 Couplage gaz-grains

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

$$\Lambda_{g-g} = 3.5 \cdot 10^{-34} \times \sqrt{T}(T - T_g)n_H^2 \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (22)$$

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

$$T_g = 12.2 G_0^{0.2} \quad (23)$$

1.4.4 Emission Lyman $H\alpha$

[Tielens, 2005], Eq 2.62

$$\Lambda_{H\alpha} = 7.3 \cdot 10^{-19} n_e n_H e^{-118400/T} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (24)$$

1.5 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 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 17) 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 obtenue par le code.

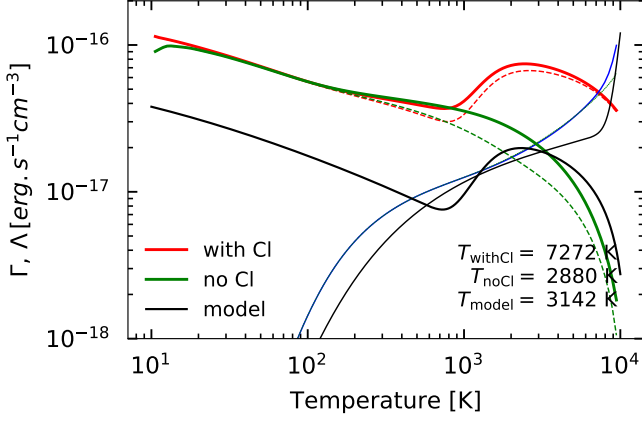
Il est prévisible que la formule de Rollig (eq.17) diffère de l'effet photoélectrique calculé par le code PDR. En effet, ce processus dépend des paramètres de grains choisis et le code PDR traite les grains de façon plus détaillée que l'expression analytique de Rollig. Cette formule retrouve pourtant l'emballement à hautes températures et a la même allure que le taux calculé par le code PDR. On constate sur la figure que l'expression eq.17, multipliée par un facteur 3, retrouve celle du code et obtient une solution "chaude" proche (+1500 K) de celle du code. On gardera désormais cette correction.

1.6 Prédiction de la température au bord de nuage

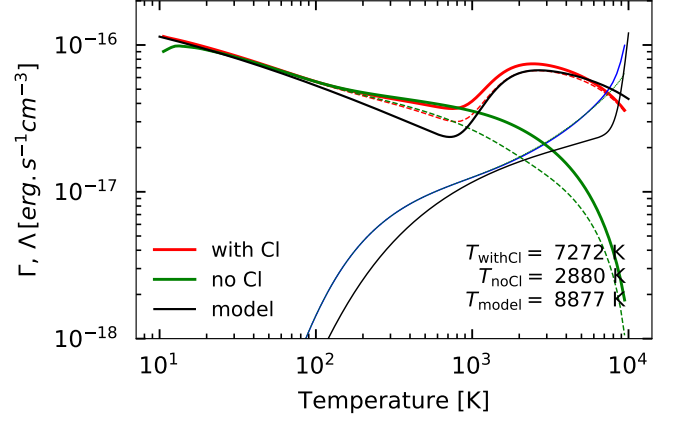
A l'aide du modèle de chlore nous pouvons chercher dans quelles conditions (n_H et χ) les bords atomiques des PDR subissent l'instabilité induite par le chlore. Pour étudier globalement les PDR, on utilise des grilles de modèles qui varient dans l'espace des paramètres (densité n_H et le champ de rayonnement 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 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 $n_H T = \text{cte}$).

1.6.1 Carte de température au bord du nuage

La figure 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 6 sont calculées grâce au code PDR. La région chauffée par le chlore se réduit seulement aux régions denses et fortement illuminées



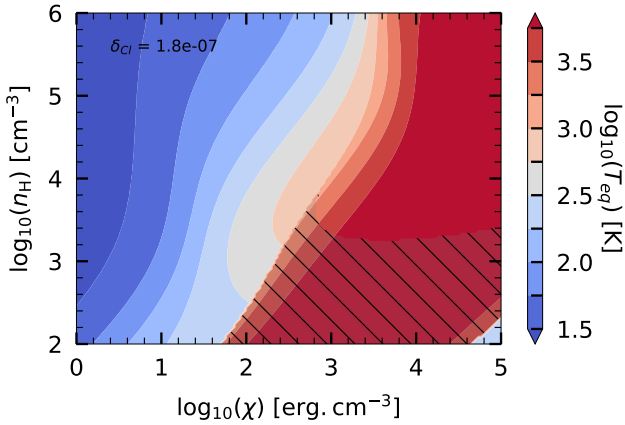
(a) $\Gamma = \Gamma_{pe}$



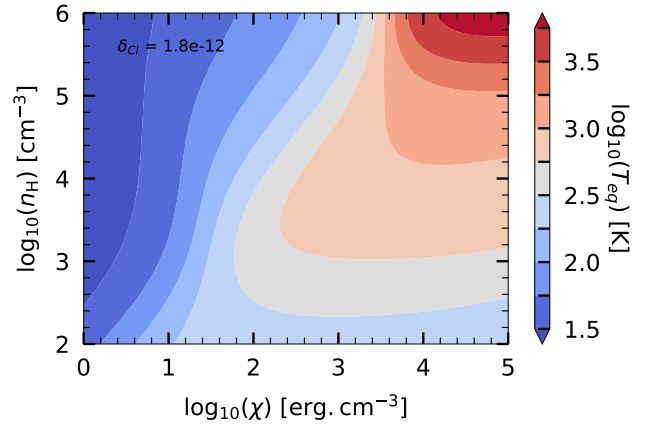
(b) $\Gamma = 3 \times \Gamma_{pe}$

FIGURE 4 – 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 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.

($n_H \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \geq 10^3$). Les régions moins denses ne sont pas aussi chaudes 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.



(a) avec chlore



(b) sans chlore

FIGURE 5 – 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 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 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 17) et de recombinaisons des électrons sur les grains (eq 18) reproduisent mal ce phénomène. Le modèle obtient 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 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 comme c’est le cas sur le profil de température de la figure ???. Une amélioration qui pourrait être faite au code est de le rendre capable de déceler deux solutions (s’il y en a) 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 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 .

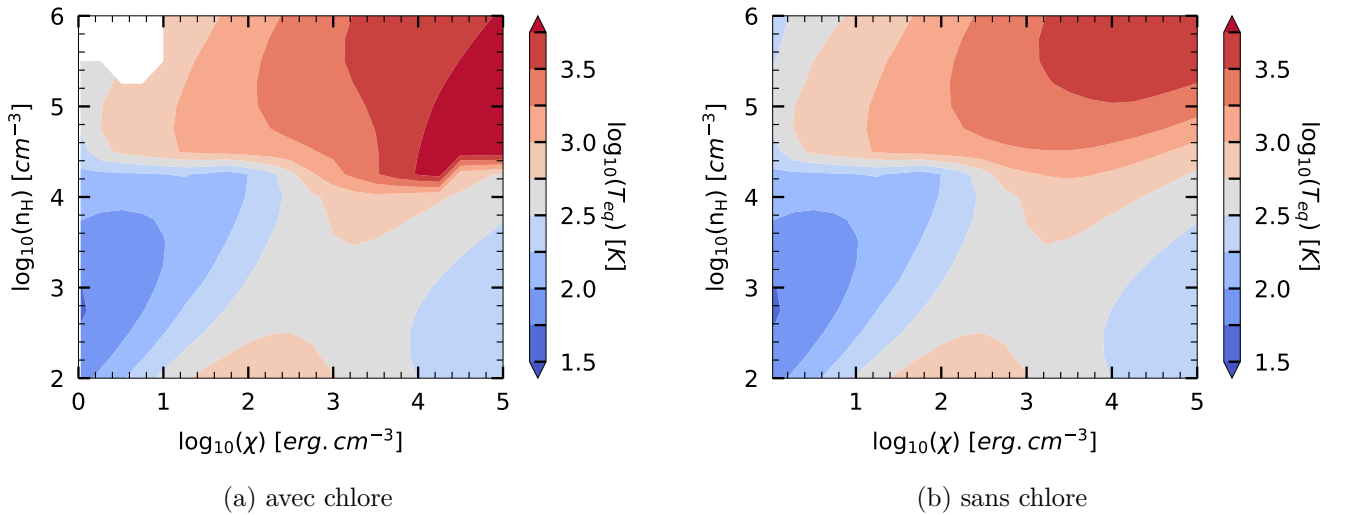


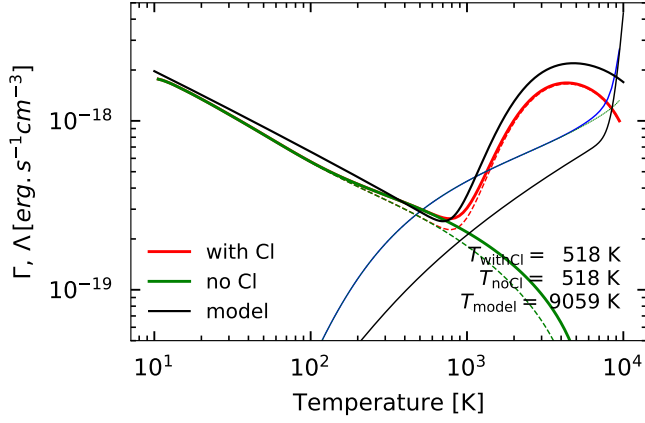
FIGURE 6 – Température en bord atomique de nuage calculé par le code PDR de Meudon

1.7 A la recherche d’observables

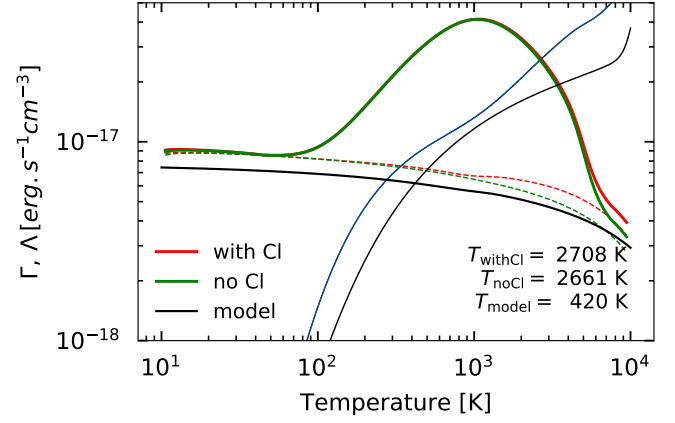
1.7.1 Détermination d’un traceur

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 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 6). 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 8). La présence du chlore augmente



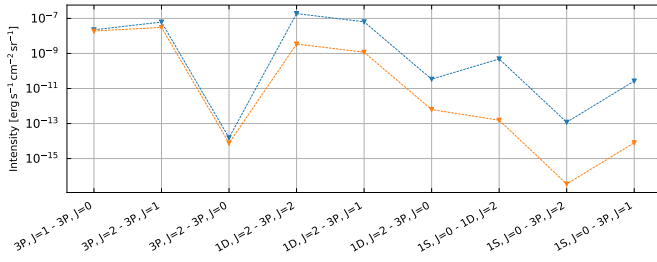
(a) $n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^{4.5}$



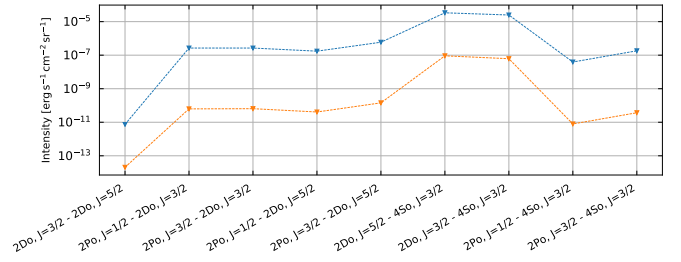
(b) $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^3$

FIGURE 7 – 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 4a.

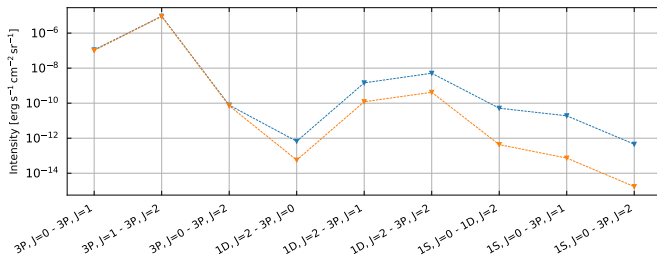
les raies du N, N^+ et Si d'un facteur 10 et du S d'un facteur 100. Bien que le chlore intensifie de manière importante les raies d'émissions, il y existe un seuil d'observabilité, de l'ordre de $10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, au dessus duquel les raies sont expérimentalement mesurables. 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 26) car il agit dans la zone atomique du nuage où les molécules ne sont pas formés.



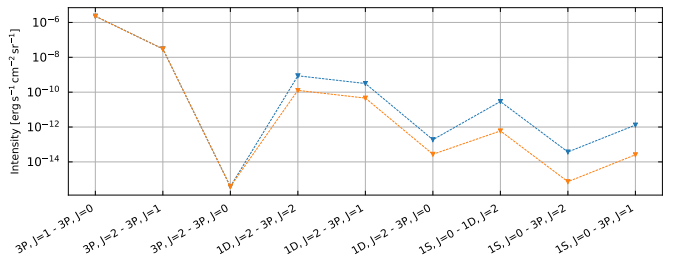
(a) N^+



(b) N



(c) S



(d) Si

FIGURE 8 – Diagramme d'intensité 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.

1.7.2 Choix de la raie [N] 5200Å

On choisit la raie la plus intense du spectre d'émission de N qui est la transition $\text{Eu} = 2\text{D}_{5/2}^0 \rightarrow \text{El} = 4\text{S}_{3/2}^0$ correspondant à la longueur d'onde 5200Å. Cette raie est dans le domaine du visible et pourrait être observé depuis la Terre par MUSE.

La figure 9 représente le rapport d'intensité de la raie [N] 5200Å 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 6) 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 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 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 ionisé 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 ionisé 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.

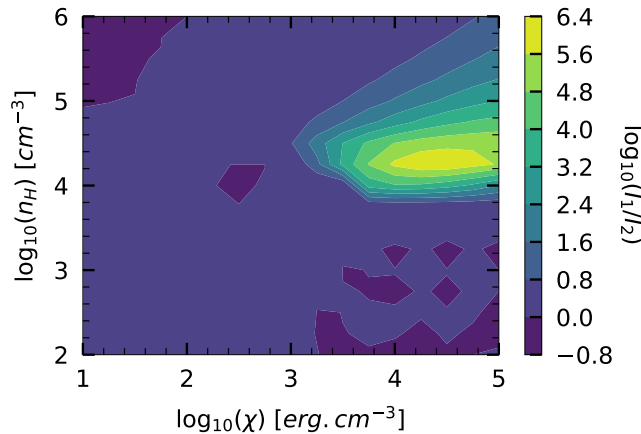


FIGURE 9 – Rapport des intensités de grilles de modèles contenant, ou non, du chlore a refaire + schéma des front de ionisations + aller jusqu'à 10^0

2 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 25) [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 10), du H_2 (figure 27) et H_2O (figure 28). 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. 25) 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 11 rassemble les réactions servant à former la molécule. Par ailleurs, la découverte de cette nouvelle voie de formation par OH est un résultat important.

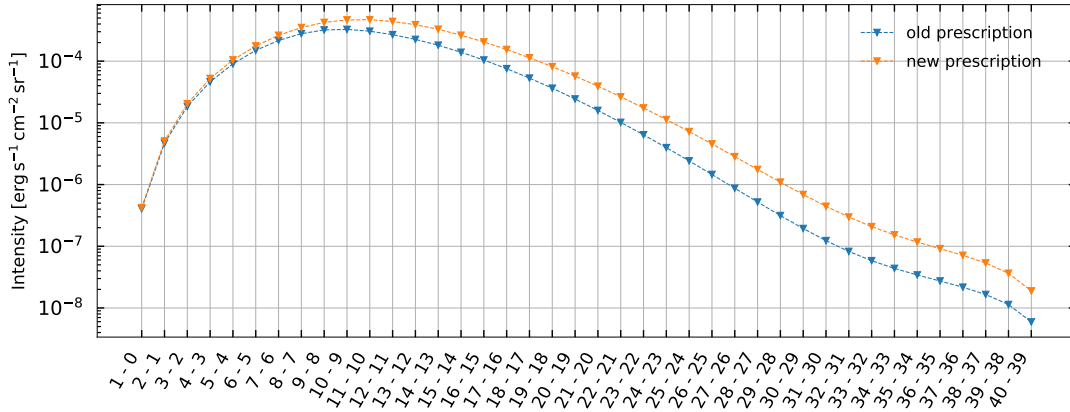


FIGURE 10 – Diagramme d'excitation du CO avec la nouvelle prescription
Seules les transitions rotationnelles du CO ont été écrites (toutes s'effectuent à $v = 0$). Un modèle isobare a été choisi ($P = 2.8 \cdot 10^8 \text{ cm}^3 \text{ K}$ et $\chi = 3.1 \cdot 10^4$).

FIGURE 11 – 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 H_2O ($\times 10$) ainsi que ses raies d'émissions (figure 28). 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.

3 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.

3.1 Construction d'un modèle

3.1.1 Chauffage net par Rollig (1995)

3.1.2 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. $\Gamma_{H_2^*} > 0$

$$\Gamma_{H_2^*} = n_{H_2} \frac{\chi P}{1 + \frac{A_{\text{eff}} + \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}} n}} \Delta E \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (26)$$

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.

3.1.3 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 $\Lambda_{H_2} < 0$.

$$\Lambda_{H_2} = -\Delta E_{1,0} \gamma_{1,0} e^{-\Delta E_{1,0}/kT} n_H n_{H_2} \frac{A_{1,0} + \chi D_1}{\gamma_{1,0} n_H + A_{1,0} + \chi D_1} \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (27)$$

3.1.4 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.

$$\Gamma_{H_2 \text{ pump}} = 9 D_0 \chi E_{\text{pump}} n(H_2) \times \frac{1}{1 + \frac{n_{\text{crit}}}{n_H}} \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (28)$$

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 $\chi = 10^5$

$$\frac{A_{\text{eff}} + \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}}} \approx 2.9 \cdot 10^6 / \sqrt{T/1000\text{K}} \text{ cm}^{-3} \quad ! \sim n_{\text{crit}} \quad (29)$$

3.1.5 Chauffage par photodissociation

$$\Gamma_{\text{H}_2 \text{ pd}} = D_0 \chi E_{\text{pd}} n(\text{H}_2) \quad (30)$$

3.1.6 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 :

$$\Gamma_{\text{H}_2^*} = n_{\text{H}_2} \frac{\chi P f_{\text{shield}}}{1 + \frac{A_{\text{eff}} + f_{\text{shield}} \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}} n}} \Delta E \text{ erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (31)$$

On fait de même pour le taux de refroidissement.

3.1.7 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,

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

3.1.8 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.

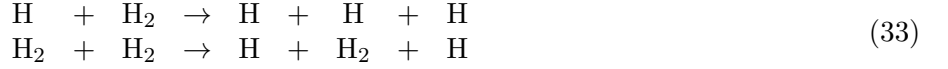
$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{Rollig net}} &= \Gamma_{\text{H}_2^*} + \Lambda_{\text{H}_2} \\ \Gamma_{\text{BS net}} &= \Gamma_{\text{H}_2 \text{ pump}} + \Gamma_{\text{H}_2 \text{ pd}} \end{aligned} \quad (32)$$

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]).

3.2 Dissociation collisionnelle du H₂ (de Janev à Glover)

La destruction du H₂ dans les nuages interstellaire s'effectue soit par photodissociation soit par réactions chimiques. Les dissociations collisionnelles (eq. 33) sont des réactions de destruction du H₂ 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/H₂.



Il existe plusieurs prescriptions qui tentent d'estimer les valeurs des taux de dissociation collisionnelle du H₂ (eq 33) en fonction de la température et des niveaux de la molécule. Connaître leurs taux de réaction est important car ils changent la densité de H₂ à travers le nuage ce qui a un impact sur le chauffage par H₂ et donc la température du gaz. Deux prescriptions possibles ont été retenue 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/H₂ 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 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 $n_{\text{H}}T = \text{cte}$).

3.2.1 Grilles de modèles - Bord atomique

Sur la figure 12, 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 ($n_{\text{H}} \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \geq 10^3$) qui sont légèrement plus chaudes. En visualisant sur la figure 13a 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 H₂. Il devient en effet plus efficace de former du H₂ dans les bords atomiques des nuages grâce taux calculés par Glover. Le chauffage par pompage UV étant d'autant plus efficace que la densité de H₂ 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 H₂ et la quantité de photons UV deviennent importantes (hum le refroidissement par les raies également nan?).

On constate sur la figure 14 que le chauffage par H₂ reste dominant dans les bords atomique des PDR denses quelque soit la prescription que l'on utilise. En revanche, les processus de refroidissements (figure 15) varient pour les PDR denses et faiblement illuminées ($n_{\text{H}} \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ 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 H₂ (eq 33) sont des réactions endothermiques très efficaces.

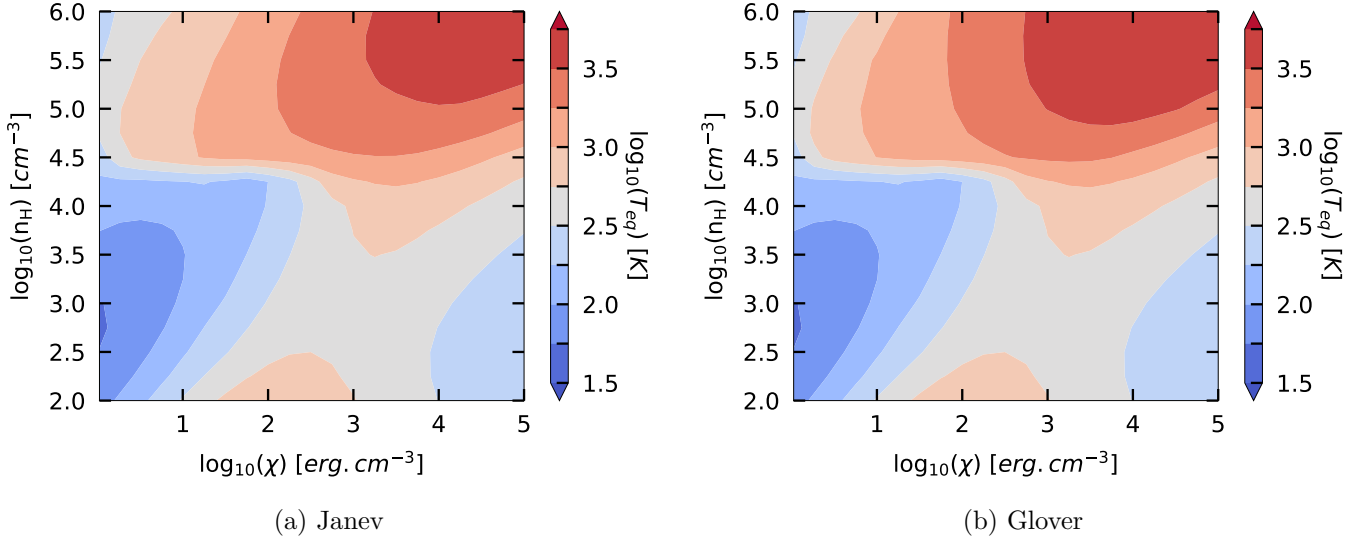


FIGURE 12 – Comparaison des température en bord atomique de nuage pour des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

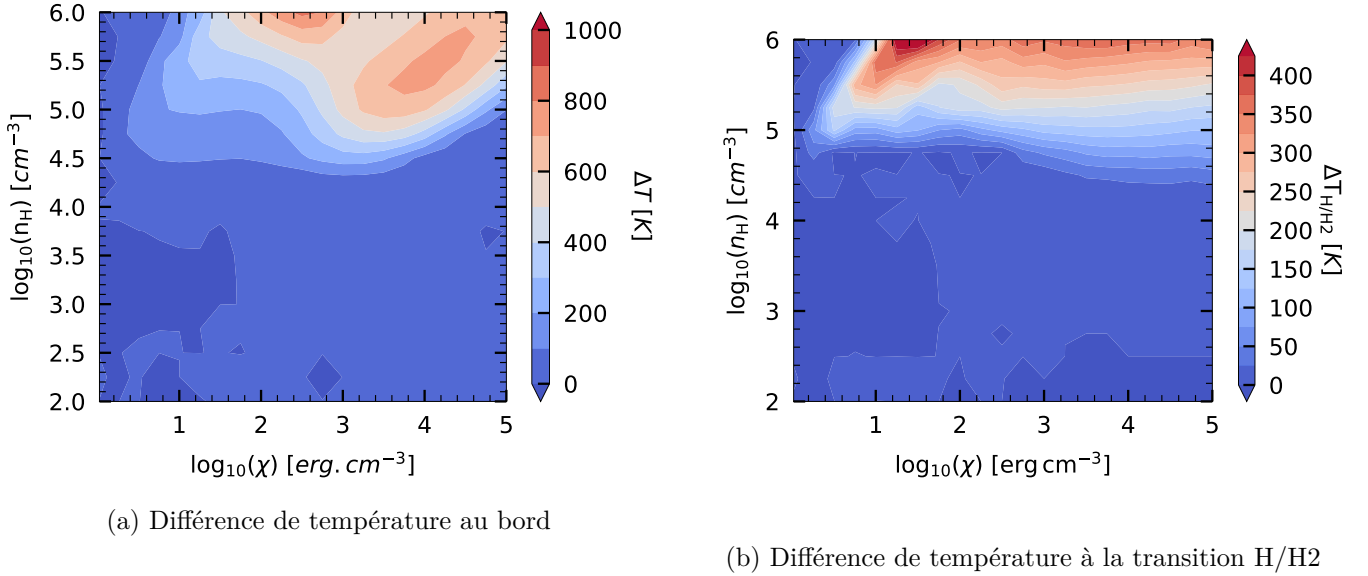
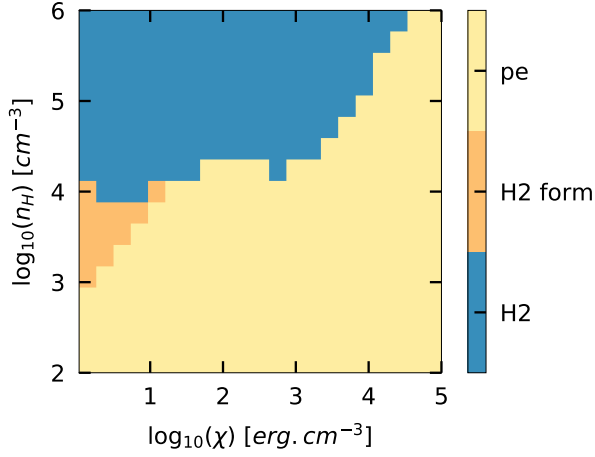


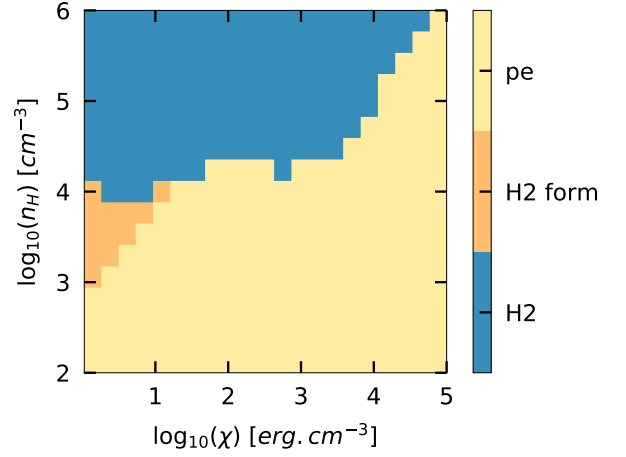
FIGURE 13 – Différence de température aux bords de nuage et aux transitions H/H₂ de modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover (les cartes ne sont pas en harmonie)

3.2.2 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, 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?).

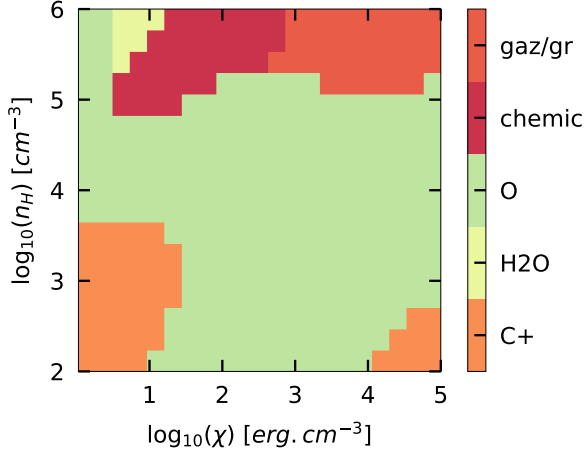


(a) Janev

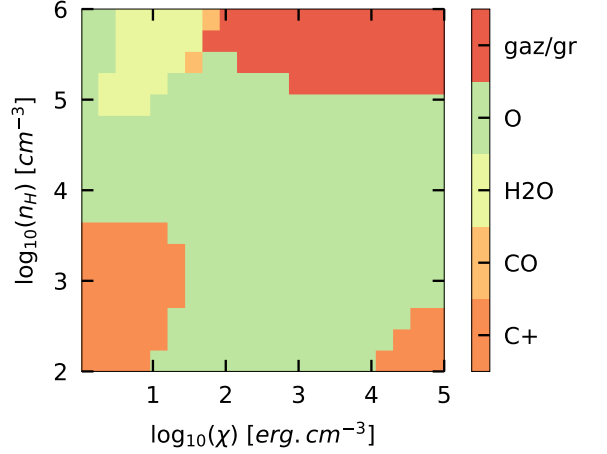


(b) Glover

FIGURE 14 – 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 15 – 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 16 et 17 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 17) 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 16).

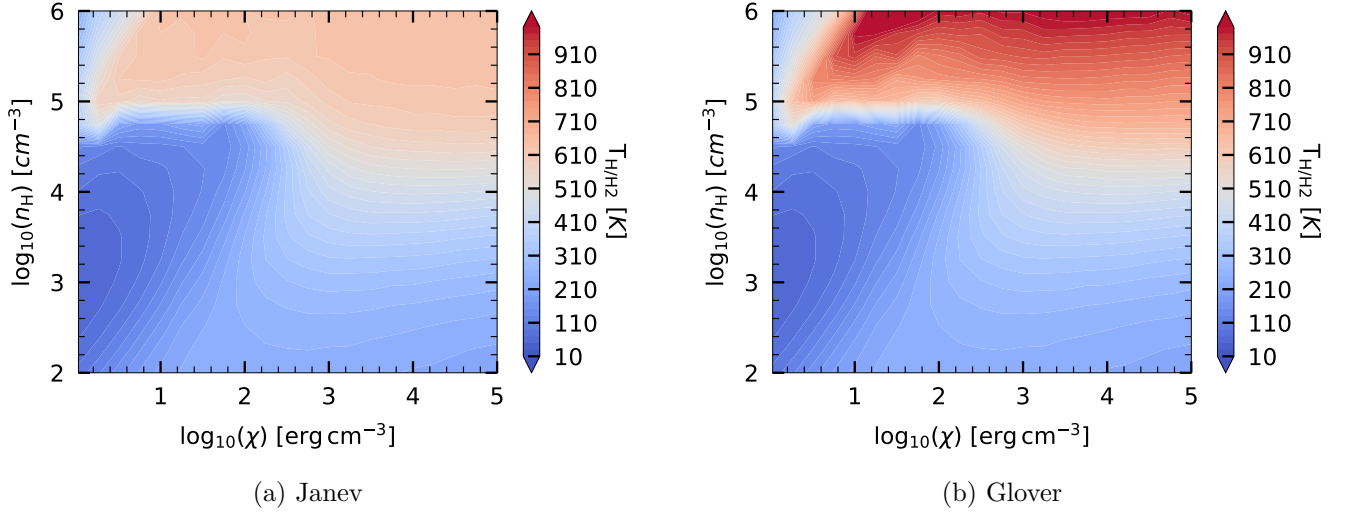


FIGURE 16 – Comparaison des température à la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

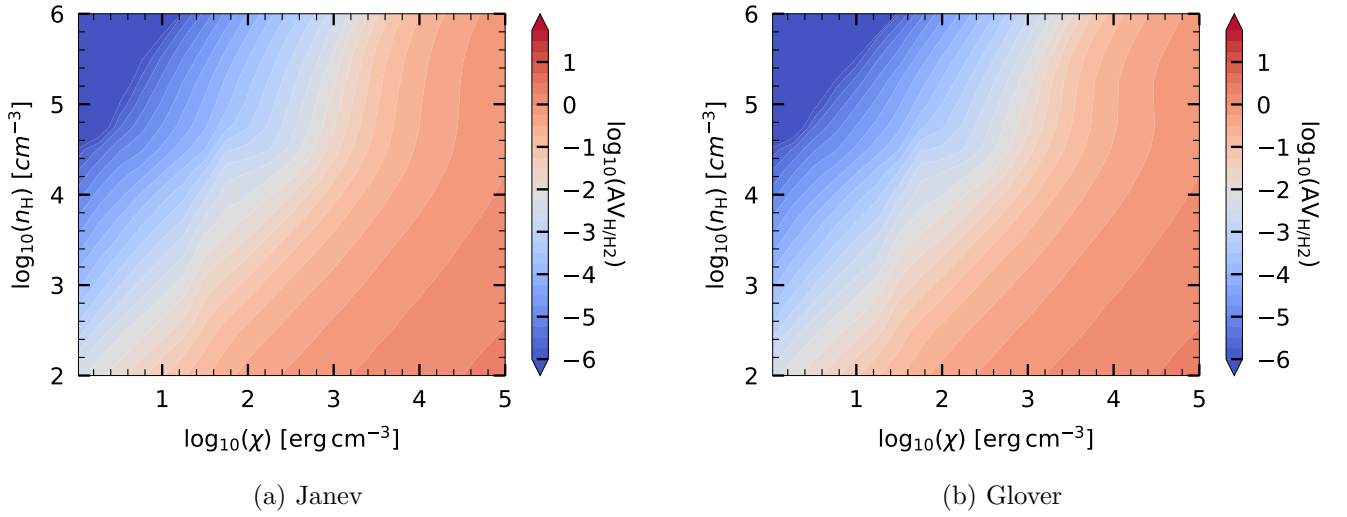


FIGURE 17 – Comparaison des A_v de la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

3.2.3 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 18a) 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 19 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

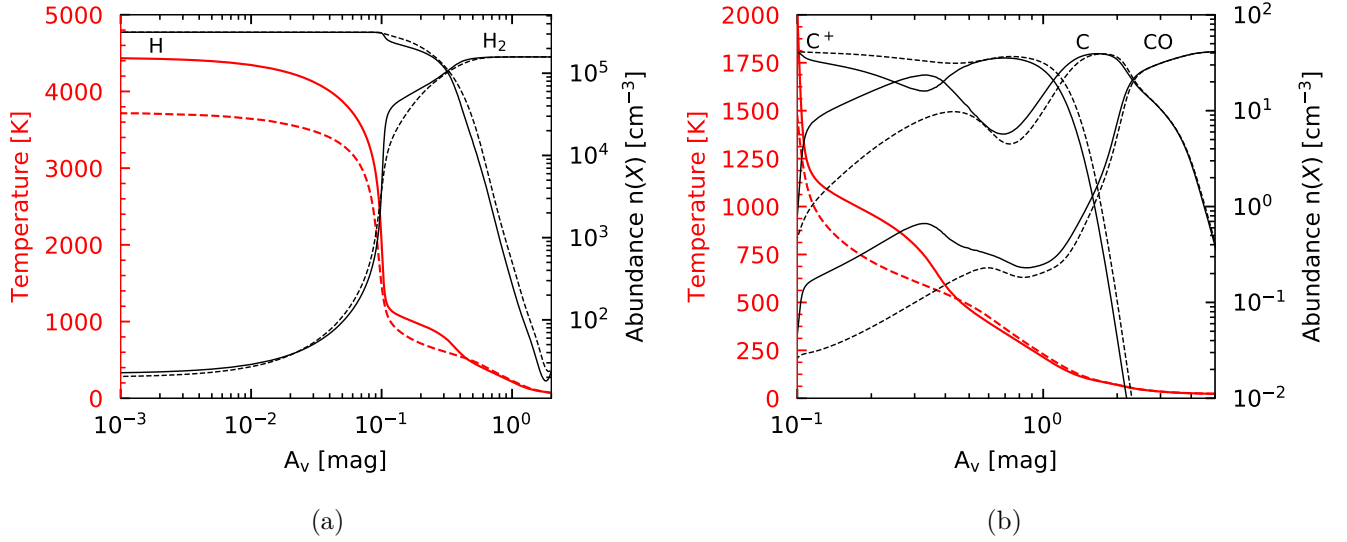


FIGURE 18 – Profils de densités de H et H_2 (a) et C^+ , C et CO (b) d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$). Le trait plein correspond au calcul utilisant la prescription de Glover et les trait pointillés celle de Janev.

la température (figure 20). 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 21).

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 20.

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 22). 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.

Chauffage par exothermicité des réactions chimiques

Conclusion

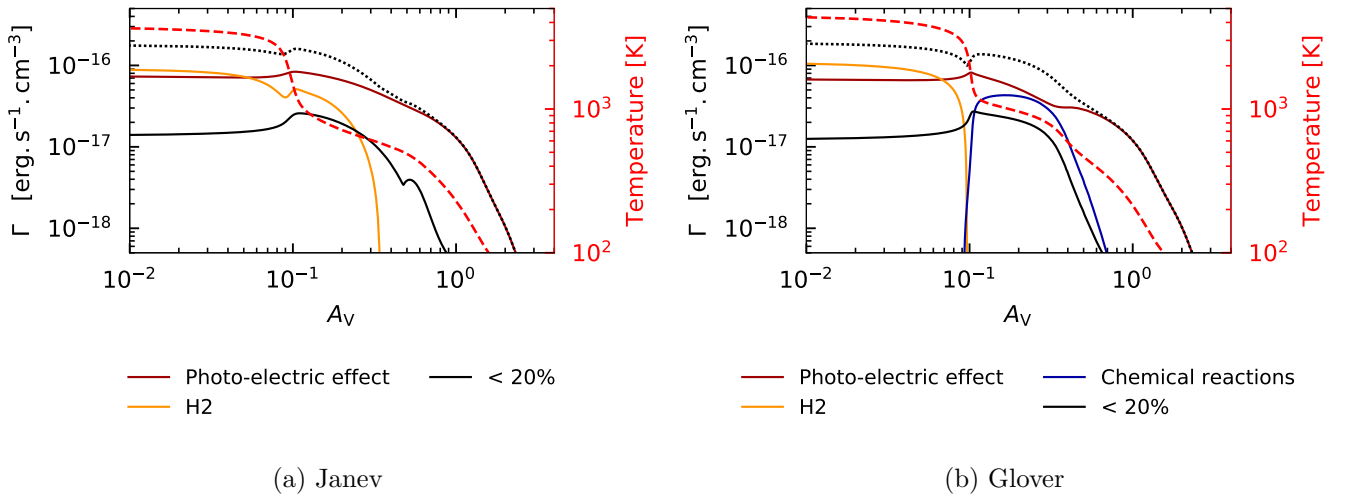
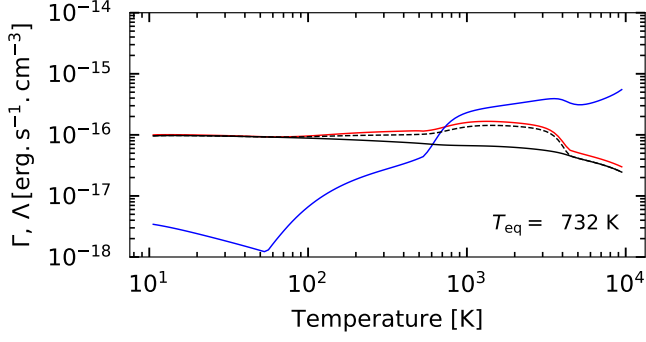
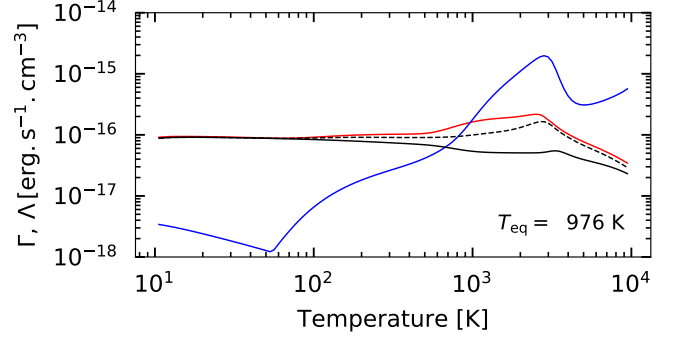


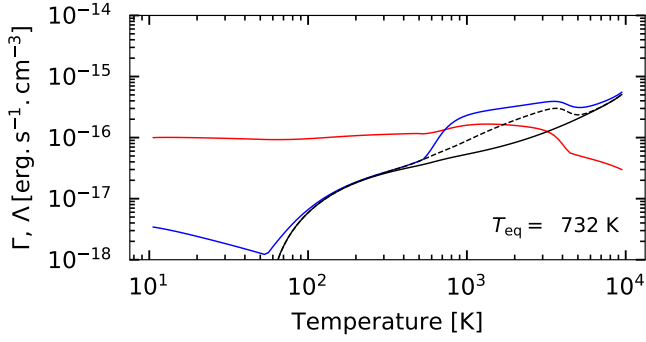
FIGURE 19 – (ANNEXE) Profils des taux de chauffages d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Janev ou de Glover. La température (axe de droite) est représentée en tiret rouge. Le taux de chauffage total est en pointillé noir.



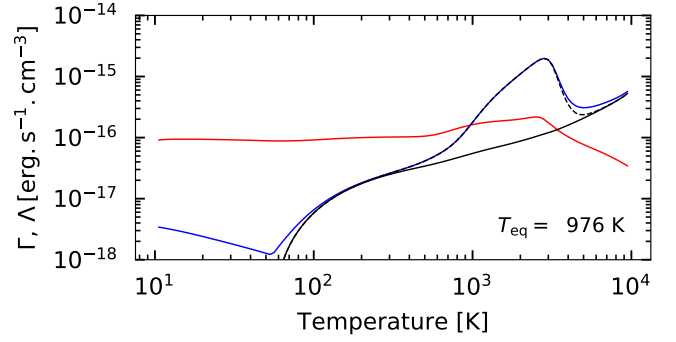
(a) Janev



(b) Glover



(c) Janev



(d) Glover

FIGURE 20 – (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 $\chi = 10^4$).

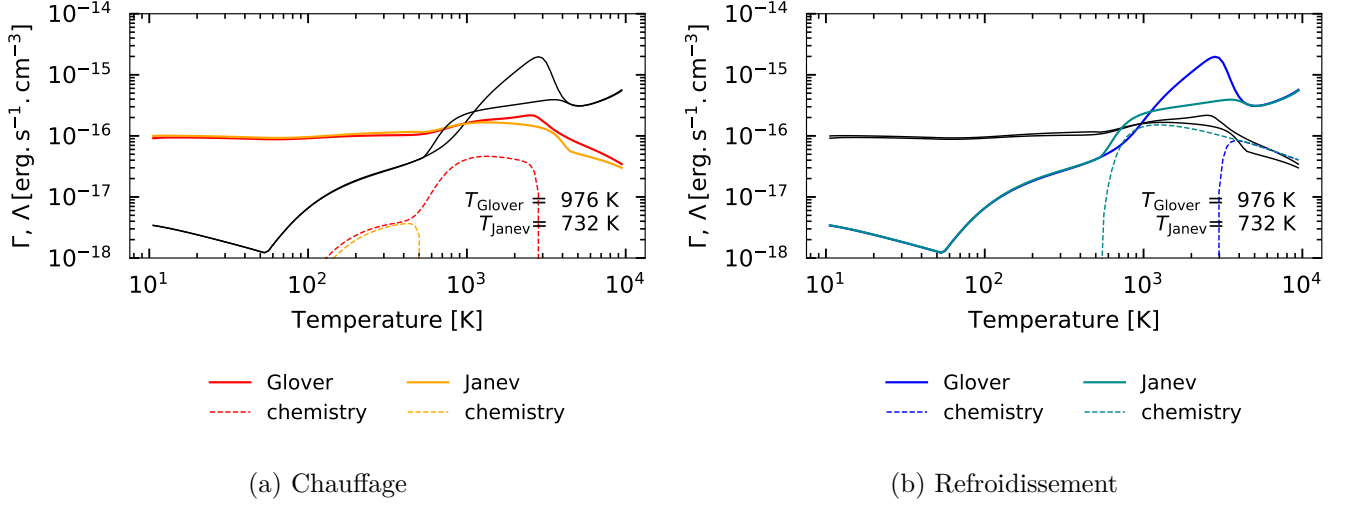


FIGURE 21 – Efficacité du chauffage des réactions chimiques en fonction de la température pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$). Les courbes en rouge et jaune sur la figure (a) représente les processus de chauffage tandis que celles en noires les courbes de refroidissement total. Sur la figure (b), les courbes en bleu et bleu clair représentent le refroidissement alors que celles en noires le chauffage.

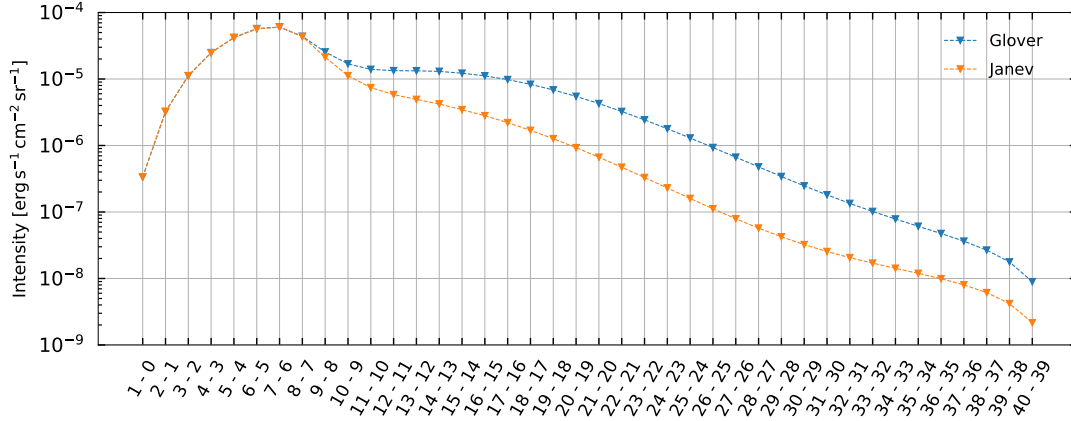


FIGURE 22 – Raies d'émissions du CO pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Glover ou bien celle de Janev. Les transitions écrites sur l'axe des abscisses signifient les transitions des niveaux rotationnels de la molécule CO.

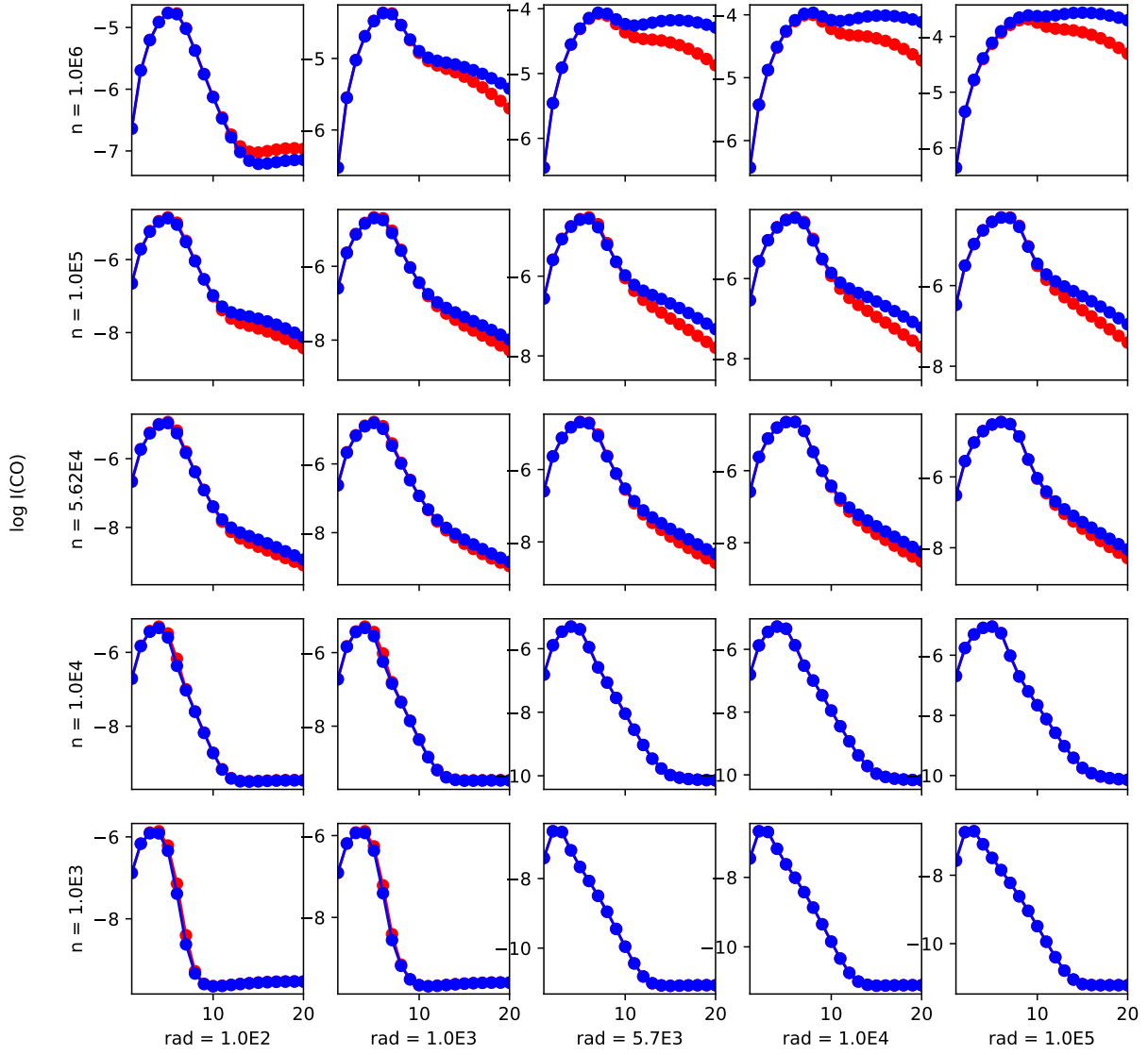


FIGURE 23 – Raies d'émissions du CO pour une grille de à densité constante. Les lignes en rouge sont les modèles utilisant la prescription de Janev tandis que celles en bleues utilisent la prescription de Glover. Les 20 premières transitions sont représentées.

Références

- [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.
- [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 $c + h_2$ 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 hercules observations of high-j co emission lines. A&A, 615 :A129.
- [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.
- [Schilke et al., 1995] Schilke, P., Phillips, T. G., and Wang, N. (1995). Hydrogen Chloride in OMC-1. , 441 :334.
- [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.
- [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

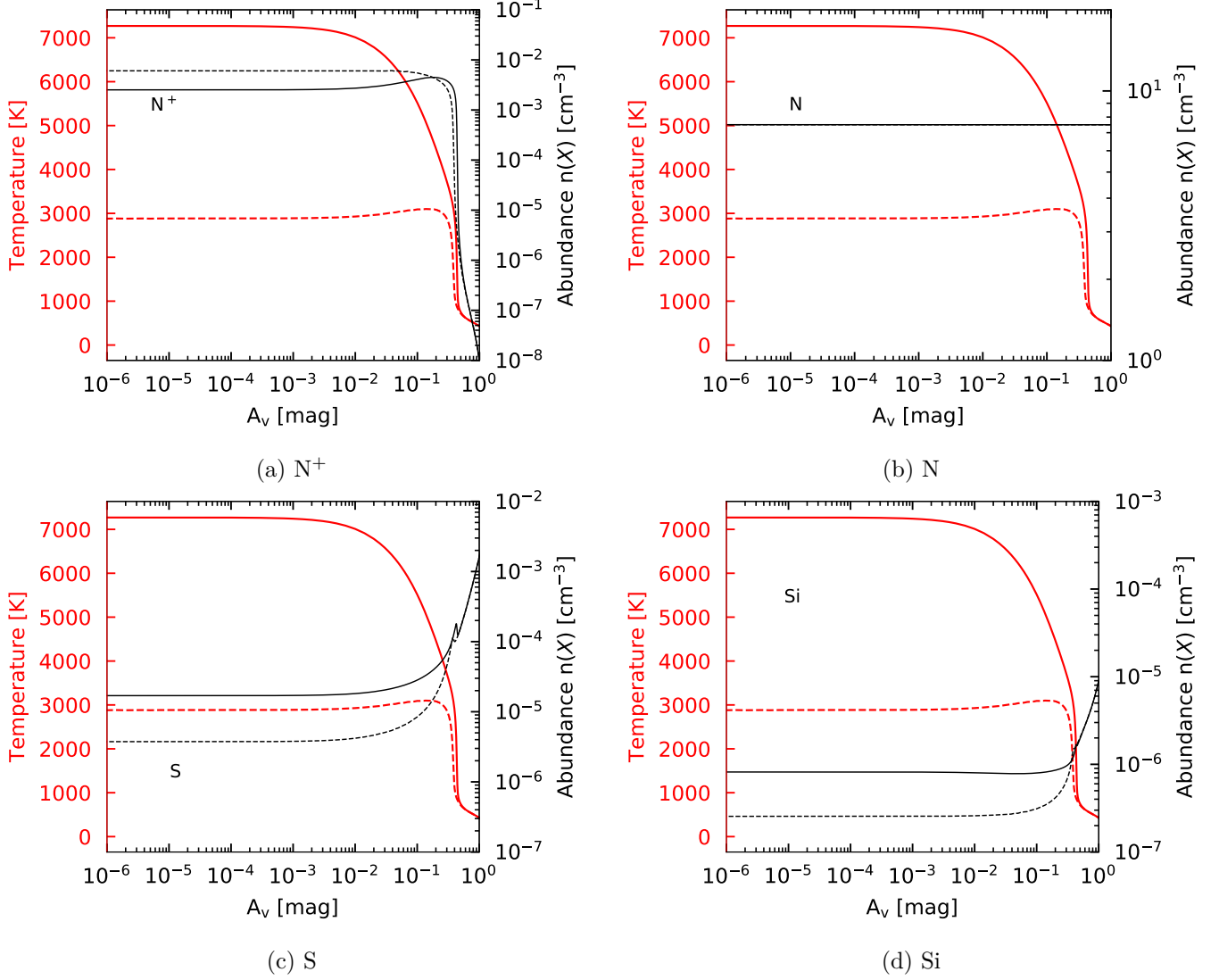


FIGURE 24 – (ANNEXE) Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore. Il est représenté en trait plein les profils du modèle avec le chlore et en trait pointillé le modèle ne contenant pas de chlore. La température est en rouge et la densité en noir.

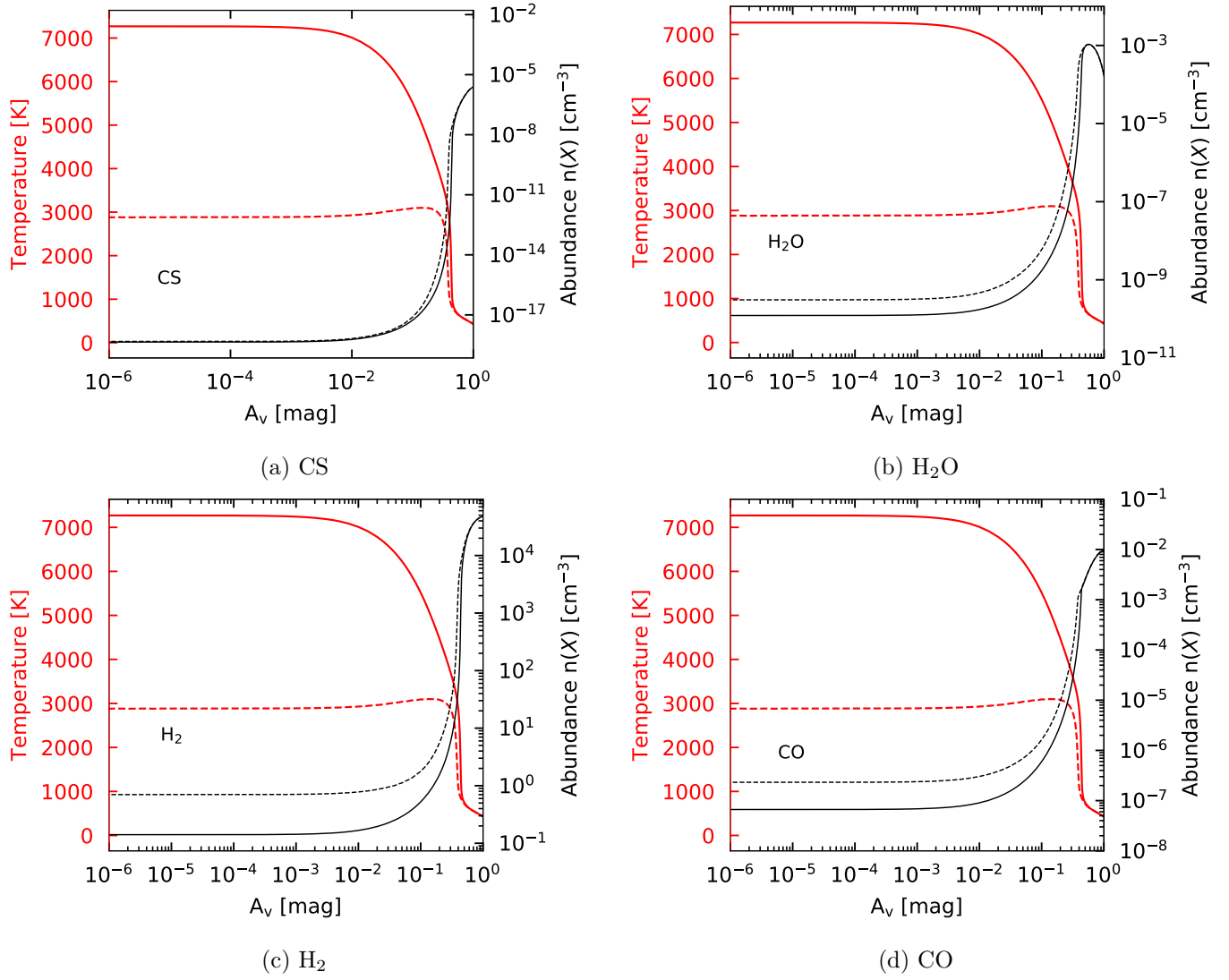
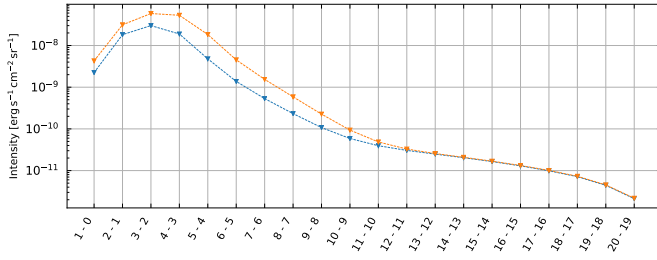
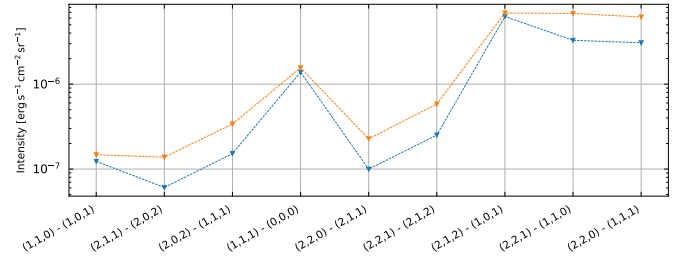


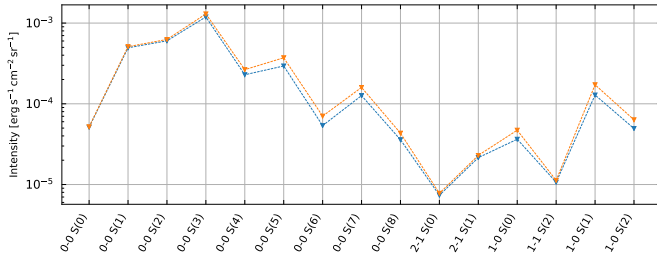
FIGURE 25 – ((ANNEXE) Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore. Mêmes conventions que pour la figure 24.



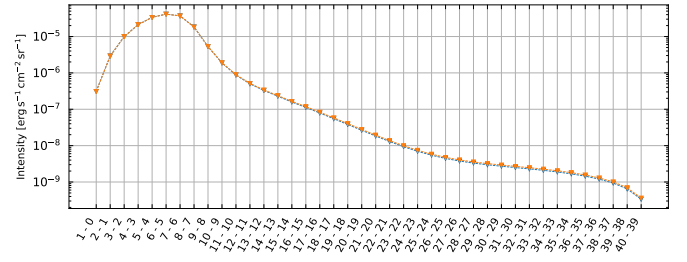
(a) CS



(b) H₂O



(c) H₂



(d) CO

FIGURE 26 – (ANNEXE) Diagramme d'excitation des traceurs peu modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (même convention que la figure 8). Pour la molécule CO, les transitions rotationnelles ont été écrites (toutes s'effectuent à $v = 0$).

B H₂ excité

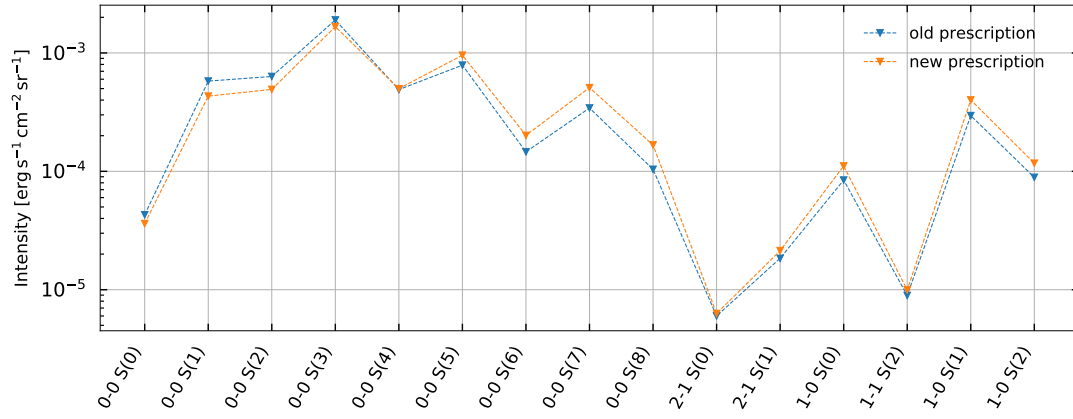


FIGURE 27 – Diagramme d'excitation du H₂

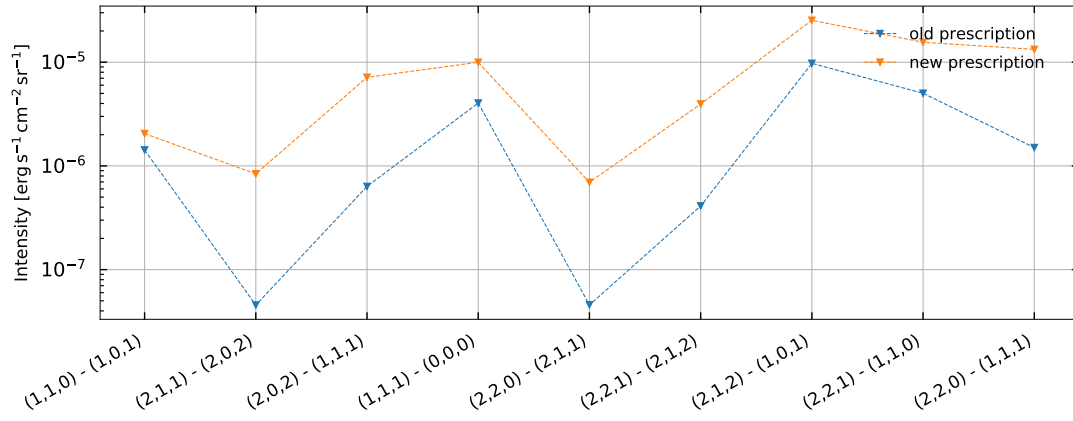


FIGURE 28 – Diagramme d'excitation du H₂O