



Projet de Fin de Master Année Scolaire : 2019

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

Ce document n'est pas confidentiel et seulement une copie peut être obtenue depuis la
bibliothèque de l'ENSTA Paris.

Auteur :
Antoine NASSER

Promotion :
2019

Tuteur ENSTA Paris :
Jérôme PEREZ

Tuteur organisme d'accueil :
Franck Le Petit
Emeric Bron

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

Ce document n'est pas confidentiel et seulement une copie peut être obtenue depuis la bibliothèque de l'ENSTA Paris.

Remerciements

Résumé

Table des matières

| | | |
|-----------------|--|-----------|
| I | Amplification de l'effet photoélectrique par le chlore | 11 |
| I.1 | Profil de température d'une PDR en présence de chlore | 11 |
| I.2 | Impact du chlore sur l'effet photoélectrique | 12 |
| I.3 | Modèle analytique - Chimie | 14 |
| I.3.1 | Ion hydrogène | 14 |
| I.3.2 | Ion chlore | 15 |
| I.3.3 | Recombinaison de H^+ sur les grains | 16 |
| I.4 | Modèle analytique - Thermique | 16 |
| I.4.1 | Chauffage net par effet photoélectrique sur les grains | 17 |
| I.4.2 | Refroidissement par les raies d'émissions du gaz | 18 |
| I.4.3 | Couplage gaz-grains | 18 |
| I.5 | Correction de l'effet photoélectrique par le code | 18 |
| I.6 | Prédiction de la température au bord de nuage | 19 |
| I.6.1 | Carte de température au bord du nuage | 19 |
| I.7 | A la recherche d'observables | 21 |
| I.7.1 | Détermination d'un traceur | 21 |
| I.7.2 | Choix de la raie [N] 5200Å | 22 |
| II | Effet du pompage UV de la molécule H_2 | 24 |
| II.1 | Réduction de la barrière d'activation par H_2 | 24 |
| II.2 | Dissociation collisionnelle du H_2 | 26 |
| II.2.1 | Grilles de modèles - Bord atomique | 27 |
| II.2.2 | Grilles de modèles - Transition H/H_2 | 28 |
| II.2.3 | Etude d'un modèle particulier | 28 |
| II.3 | Nouveaux taux de collisions de H_2 | 30 |
| Annexe A | Impact du chlore | 37 |
| Annexe B | H_2 excité | 40 |
| Annexe C | Impact de la prescription de Glover | 41 |

Introduction

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

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

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

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

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

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

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

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



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

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



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

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

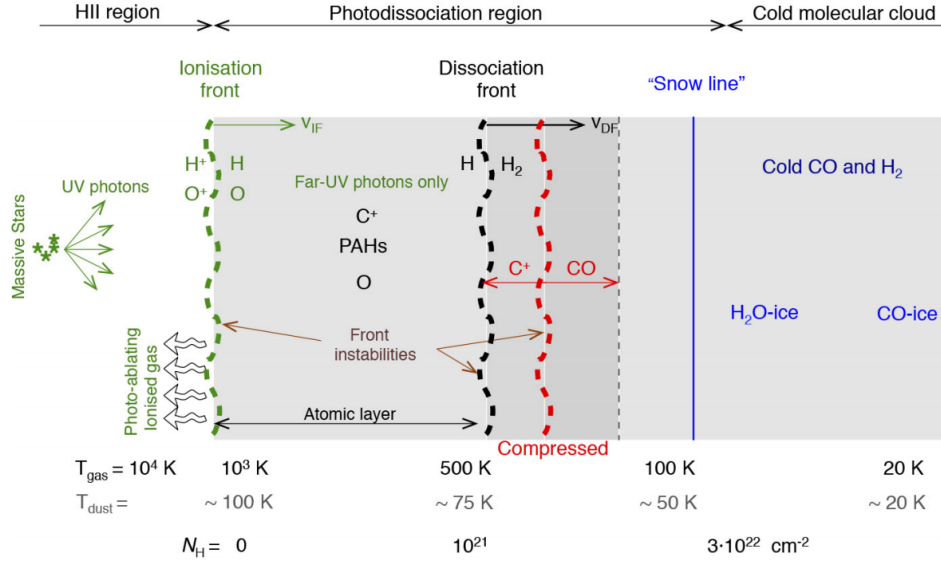


FIGURE .3 – Structure d’une région de photo-dissociation. Les photons UV émis par les étoiles viennent de la gauche. Image tirée de [Goicoechea et al., 2016].

On a découvert l’existence des phénomènes de chauffage et de refroidissement dans le milieu interstellaire à partir des années 60. Et jusqu’au années 90, des formules analytiques permettant d’estimer ces processus ont été proposées. Elles se fondaient sur notre connaissance des quantités physiques et des populations de grains que l’on avait à cette époque. Aujourd’hui notre compréhension des PDR est beaucoup plus fine notamment sur les poussières interstellaires grâce aux observations Planck⁴ [Jones, A. P. et al., 2017]. Pourtant nos modèles utilisent encore ces prescriptions alors que l’interprétation des observations en dépend directement. L’objectif du stage est donc de revoir l’ensemble des processus thermiques qui se déroulent au sein des PDR en s’intéressant à des processus de chauffage qui peuvent dominer localement dans des zones du nuage et jouer un rôle clé dans la compréhension de certains traceurs. Nous allons présenter les principaux phénomènes. Tout d’abord, l’effet photoélectrique sur les grains est le processus de chauffage dominant dans les PDR. L’absorption d’un photon UV par un grain entraîne l’éjection d’un électron de sa surface avec une énergie de l’ordre de l’électron volt. Ces électrons supra-thermiques (1 eV \approx 12 000 K) entrent en collisions avec les particules de gaz ce qui thermalise les électrons et chauffe le gaz. Un second processus de chauffage majeur est la désexcitation collisionnelle du H₂ : lorsque la molécule absorbe un photon, elle passe dans un état excité et peut se désexciter en entrant en collision avec les particules du gaz. Ainsi l’énergie du photon est convertie en agitation thermique ce qui chauffe le gaz. Cet effet peut être accentué par le pompage UV de la molécule H₂ qui permet à plus de molécule de passer dans ses états excités. Cela sera abordé dans la seconde section. La chimie a également un impact sur la température du nuage. En effet, une réaction chimique est endothermique ou exothermique selon que l’enthalpie des produits est plus grande que celles des réactifs. Ainsi, une réaction exothermique redistribue son excédent d’énergie au gaz, ce qui le chauffe, et inversement une réaction endothermique prélève de l’énergie. Cependant, les PDR se refroidissent principalement par les émissions du gaz. Cela concerne la molécule H₂ mais aussi les ions (C⁺, S⁺ ...), les atomes

4. Planck est un satellite (ESA, en activité de 2009 à 2012) ayant pour mission de cartographier le fond diffus cosmologique qui est le rayonnement de l’Univers primordial. Il trouve son origine dans le rayonnement émis directement par les étoiles et celui des poussières.
<https://www.cosmos.esa.int/web/planck>

(O, N, C ...) et les autres molécules (OH^+ ...) du nuage. Lorsque une espèce passe dans un état excité par collisions, elle se désexcite par émission spontanée, en émettant un photon dans une direction aléatoire. L'énergie d'agitation du gaz est convertie en un photon qui est perdu. Il y a enfin le couplage gaz-grains qui a tendance à refroidir le gaz : les grains généralement plus froids entrent en collisions avec les particules du gaz et se thermalisent. Il existe également d'autres phénomènes dont l'on ne parlera pas ici comme le chauffage par les rayons cosmiques.

L'étude est menée à l'aide du code PDR de Meudon [Le Petit et al., 2006] qui est un modèle complet de PDR. C'est un modèle stationnaire qui est correct dans la limite où les photoréactions sont très rapides devant l'évolution dynamique du nuage et le champ de rayonnement reste constant. Le code PDR résout dans une géométrie simplifiée 1D le transfert du rayonnement à travers le gaz, la chimie et le bilan thermique. Comme nous l'avons vu, ces trois éléments sont couplés et il faut les résoudre de manière cohérente. Le transfert de rayonnement est déterminé en résolvant l'équation de transfert par une méthode spectrale. La chimie fait intervenir des centaines d'espèces qui sont reliées par des milliers de réactions. Les densités des espèces sont calculées par une méthode du point fixe (Newton-Raphson). Le bilan thermique est résolu par dichotomie qui est une méthode simple mais robuste. Le code découpe en cellule la PDR et calcule, en parcourant chaque cellule, le transfert radiatif, les densités des espèces du gaz et la température d'équilibre. Comme l'état d'une cellule affecte le transfert de rayonnement des cellules voisines, le code itère à travers la PDR jusqu'à ce qu'il converge vers une solution stable. Ainsi le code PDR obtient des profils de densités et de température en fonction de la profondeur du nuage. Il produit également des diagrammes d'intensités de raies qui sont comparées aux observations. Enfin, les paramètres que l'on introduit pour un modèle de PDR sont l'intensité χ du rayonnement en unité d'Habing⁵, ainsi que sa densité n_{H} ou bien sa pression thermique P selon que l'on considère un nuage à densité constante⁶ ou à pression constante. Si des raies obtenues par calculs correspondent aux observations, alors on considère que les modèles dont ils sont issus décrivent bien la PDR.

Au cours du stage, j'ai travaillé avec le code PDR. J'ai découvert que l'ajout de chlore dans le réseau chimique pouvait provoquer une instabilité thermique dans les bords atomiques du nuage. Je me suis ensuite intéressé au chauffage par pompage UV de la molécule H_2 . J'ai d'abord testé l'impact sur les raies d'un nouveau calcul des taux de réactions impliquant le H_2 . Puis j'ai analysé dans quelles circonstances le chauffage par les réactions chimiques pouvait dominer. Ce processus est très souvent négligé dans les modèles de PDR.

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

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

$$n_{\text{H}} = n(\text{H}^+) + n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2) + \dots \neq n_{\text{tot}}$$

I Amplification de l'effet photoélectrique par le chlore

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

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

TABLE 1 – Abondances élémentaires dans le gaz

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

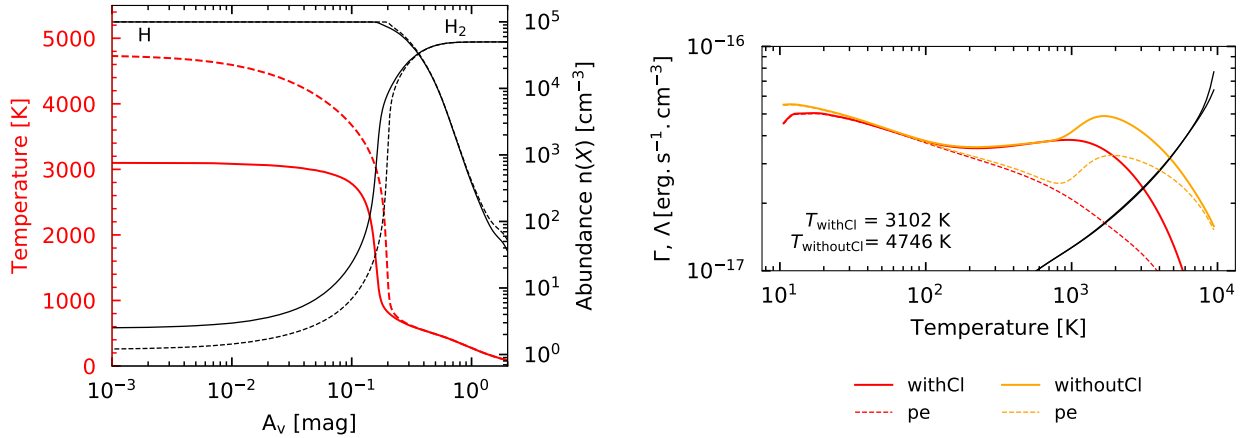
I.1 Profil de température d'une PDR en présence de chlore

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

Pour comprendre l'origine de cette augmentation de température, j'ai analysé les fonctions de chauffage et de refroidissement calculés par le code. Le code PDR de Meudon cherche l'état stationnaire du système. Pour l'équilibre thermique, cela revient à déterminer à chaque position dans le nuage la température d'équilibre telle que le taux de chauffage soit égal au taux de refroidissement. Pour trouver cette température d'équilibre, le code procède par dichotomie, méthode simple mais efficace pour ce type de codes dans les-

quels la température peut présenter des gradients forts en fonction de la position dans le nuage. En interne, dans le code, il est possible d'extraire les courbes de chauffage et de refroidissement, totaux et pour chaque processus individuel, à chaque position. La figure I.1b présente un exemple au bord du nuage pour les deux modèles. On voit, qu'ajouter du chlore dans le code PDR, augmente la courbe de chauffage (en trait plein) à partir de $T \geq 1000$ K et repousse le point d'intersection vers des températures plus chaudes. Pour ces conditions physiques de PDR, le bord de nuage est principalement chauffé par le pompage UV de H_2 et par l'effet photo-électrique sur les grains tandis qu'il est refroidit par les émissions des raies de O et de C^+ . A la vu de la figure I.1b, on voit clairement que ce qui provoque l'augmentation significative de la température du gaz en présence de chlore, est une augmentation de l'efficacité de chauffage de l'effet photo-électrique.

Enfin, comme on le verra plus loin, le système peut présenter une bistabilité thermique avec l'existence de deux solutions stables et une instable. On le voit à l'allure de la courbe de chauffage de la figure I.1b qui change de monotonie vers 1000 K. Si la courbe de refroidissement total avait une pente plus faible, elle couperait celle de chauffage en trois points dont deux stables et un instable.



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

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

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

I.2 Impact du chlore sur l'effet photoélectrique

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

Tout d'abord, en isolant les réactions chimiques principales qui se déroulent en bord de nuage atomique et on a démontré que le chlore joue le rôle de catalyseur de l'effet photoélectrique. Le mécanisme est illus-

tré sur la Figure I.2. Le champs de rayonnement UV, intense en bord de nuage atomique, photoionise le chlore et produit des ions Cl^+ et des électrons. Le transfert de charge du Cl^+ avec l'hydrogène est une réaction rapide qui permet au chlore de se rendre de nouveau disponible pour la photoionisation. Le chlore permet ainsi de ioniser indirectement l'hydrogène. Par conséquent, la fraction électronique du gaz augmente.

Or on sait que l'effet photoélectrique sur les grains fonctionne d'autant plus que la fraction électronique dans le nuage est importante⁷. 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.

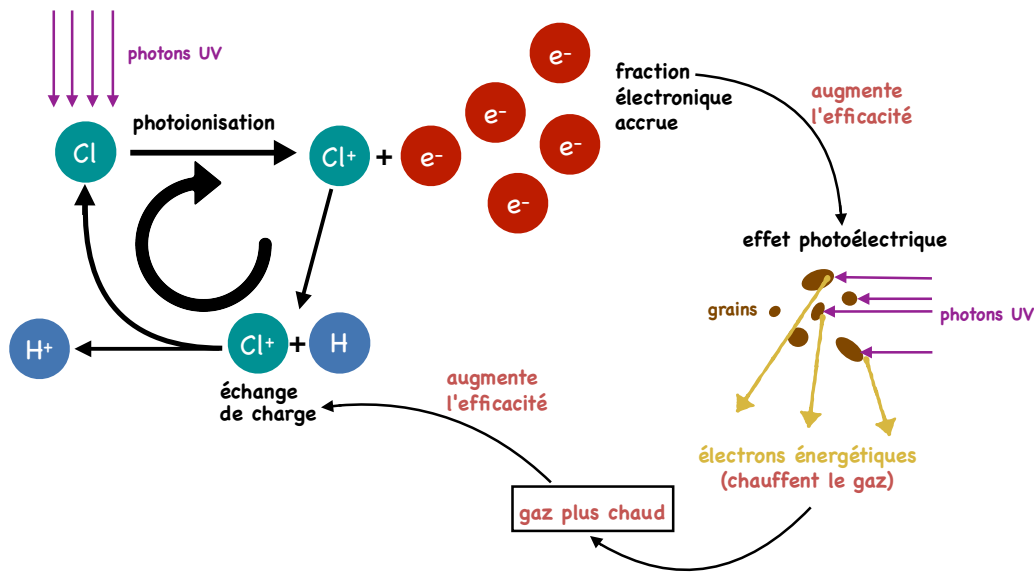


FIGURE I.2 – Schéma représentant l'impact du chlore sur la chimie du bord d'un nuage atomique

L'emballement de l'effet photoélectrique se produit à partir de 1000 K et est dû à la formation d'électrons par le chlore. De manière générale, la formation d'électrons en bord atomique de nuage est principalement assurée par la photoionisation du carbone et du soufre qui est indépendante de la température. Pourtant à partir de 1000 K, le transfert de charge devient suffisamment efficace pour que la fraction d'électrons créée via le chlore devienne dominante devant celle de l'ionisation du carbone et du soufre et amorce la 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 chimiques connues dans le milieu interstellaire, la carbone, le soufre, le silicium ou le fer ont également un potentiel de ionisation inférieur à celui de l'hydrogène (table 1). Pourtant aucun ne peut effectuer un transfert de charge avec l'hydrogène qui est l'espèce majoritaire en bord de nuage atomique. Seul le chlore peut être à l'origine, par le mécanisme expliqué plus haut, de l'emballement de l'effet photoélectrique.

7. 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.

Pour quantifier cela, j'ai développé un modèle semi-analytique permettant de déterminer la température du gaz et les conditions physique où l'instabilité peut avoir lieu.

I.3 Modèle analytique - Chimie

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

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

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

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

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

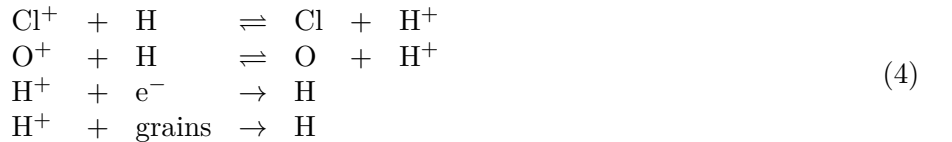
Les espèces qui contribuent à la production d'électrons en bord de nuage sont les ions hydrogène H^+ , carbone C^+ et soufre S^+ . Le gaz est neutre, le bilan de charge donne donc :

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

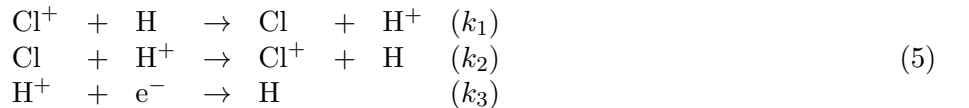
On peut supposer qu'en entrée de nuage atomique le carbone et le soufre sont totalement ionisés ce qui fournit une fraction d'électrons minimale⁸ de 10^{-4} . Aussi ne reste il qu'à déterminer une expression de la densité de protons H^+ en fonction de la température.

I.3.1 Ion hydrogène

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



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 la prise en compte de la recombinaison de l'ion H^+ sur les grains ($\text{H}^+ + \text{grains} \rightarrow \text{H}$) dans les calculs va les alourdir, on la néglige dans un premier temps. Il reste le transfert de charge entre le chlore et l'hydrogène ($\text{Cl}^+ + \text{H} \rightleftharpoons \text{Cl} + \text{H}^+$) ainsi que la recombinaison électronique de l'hydrogène ($\text{H}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H}$). On associe à chaque réaction un taux de réaction k_1, k_2, k_3 en $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ et qui dépendent de la température.



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

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

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

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

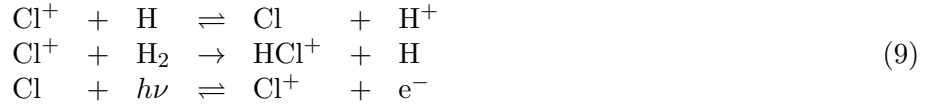
$$-k_1n(Cl^+)n_H + \left(k_2n(Cl) + k_3(n(C^+) + n(S^+))\right)n(H^+) + k_3n(H^+)^2 = 0 \quad (7)$$

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

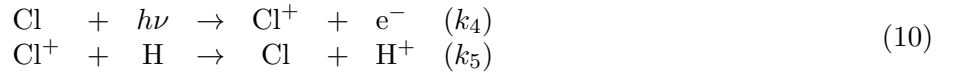
$$n(H^+) = -\frac{1}{2}\left(\frac{k_2}{k_3}n(Cl) + n(C^+) + n(S^+)\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{k_2}{k_3}n(Cl) + n(C^+) + n(S^+)\right)^2 + 4\frac{k_1}{k_3}n_Hn(Cl^+)} \quad (8)$$

I.3.2 Ion chlore

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



La recombinaison électronique de Cl^+ ($Cl^+ + e^- \rightarrow Cl + h\nu$) reste négligeable devant le transfert de charge avec H ($Cl^+ + H \rightarrow Cl + H^+$) pour des températures supérieures à 100K et la destruction par formation du HCl^+ devient dominante dans la gamme de température 100 – 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_4 en s^{-1} et k_5 en $cm^{-3}s^{-1}$.



On obtient,

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

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

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

avec,

$$\delta_{Cl} = 1.8 \cdot 10^{-7} = \frac{n(Cl) + n(Cl^+) + \dots}{n(H) + n(H^+) + 2n(H_2) + \dots} \approx \frac{1}{n_H}(n(Cl) + n(Cl^+)) \quad (13)$$

Ce qui fait en posant $A = \frac{k_4}{k_5n_H}$:

$$\boxed{n(Cl^+) = \frac{k_4\delta_{Cl}n_H}{k_4 + k_5n_H} = \frac{A}{1 + A}\delta_{Cl}n_H} \quad (14)$$

De plus, en utilisant eq.11,

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

I.3.3 Recombinaison de H^+ sur les grains

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

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

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

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

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

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

Pour résoudre ce système on utilise la fonction `newton` de la librairie `scipy.optimize`. La formule de [Weingartner and Draine, 2001] considère dans le nuage une distribution de grains incluant les PAH⁹ qui est un support efficace pour la recombinaison des ions H^+ . En la prenant en compte dans le modèle semi-analytique, on obtient sur la figure I.3a une densité proche de celle du code. Sans PAH, le modèle doit diminuer le taux de recombinaison d'un facteur 1/6 pour approcher la densité d'électrons calculé par le code (figure I.3b).

I.4 Modèle analytique - Thermique

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

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

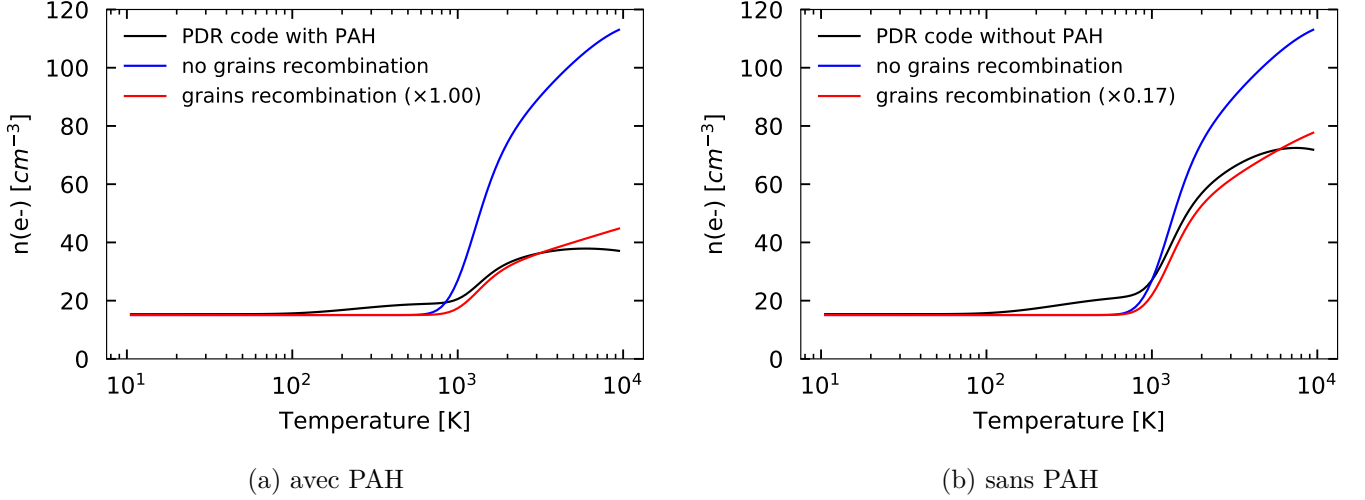


FIGURE I.3 – Comparaison des profils de densité d'électrons en fonction de la température. Les courbes en rouge et bleu sont les densités d'électrons obtenue par le modèle semi-analytique tandis que celle en noir représente la densité d'électron calculé par le code PDR. Il est possible dans le code de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

Les processus thermiques impliquant la molécule H_2 ont été négligé pour simplifier dans un premier temps. On note Γ et Λ les taux de chauffage et de refroidissement total.

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

I.4.1 Chauffage net par effet photoélectrique sur les grains

Quand un photon qui a suffisamment d'énergie est absorbé par un grain, un électron peut être excité et être éjecté de la surface du grain. Ce photoélectron a une énergie de l'ordre de l'eV ($1\text{ eV} \approx 12\,000\text{ K}$) 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} [Lequeux, 2012]. 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 $\Gamma_{pe}^{net} = \Gamma_{pe} - \Lambda_{rec}$. On se contente d'utiliser les formules de [Bakes and Tielens, 1994] :

$$\Gamma_{pe} = 10^{-24} G_0 n_H \frac{2 \times 10^{-2}}{1 + 2 \times 10^{-4} (G_0 \sqrt{T}/n_e)} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1}\tag{20}$$

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

avec $G_0 = 1.71\chi$.

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

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

$$\Lambda_{\text{CII } 158\mu\text{m}} = n(\text{C}^+) \frac{2.89 \times 10^{-20}}{1 + \frac{1}{2} \exp(92/T) \left(1 + \frac{1300}{n_{\text{H}}}\right)} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (22)$$

$$\Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} = 3.15 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \times \frac{e^{98/T} 3n_{\text{H}}(n_{\text{H}} + \beta n_{\text{cr01}})}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T} (n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr01}})(3n_{\text{H}} + 5e^{228/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr12}}))} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (23)$$

$$\Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} = 1.35 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \times \frac{n_{\text{H}}^2}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T} (n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr01}})(3n_{\text{H}} + 5e^{228/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr12}}))} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (24)$$

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

$$\Lambda_{\text{H}\alpha} = 7.3 \cdot 10^{-19} n_e n_{\text{H}} e^{-118400/T} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (25)$$

I.4.3 Couplage gaz-grains

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

$$\Lambda_{\text{g-g}} = 3.5 \cdot 10^{-34} \times \sqrt{T}(T - T_g) n_{\text{H}}^2 \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (26)$$

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

$$T_g = 12.2 G_0^{0.2} \quad \text{K} \quad (27)$$

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

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

On trace sur la figure I.4a la courbe de chauffage et de refroidissement d'un bord atomique de nuage résolu par le code PDR. On trace également les courbes obtenues par notre modèle et on remarque qu'elles retrouvent l'emballement de l'effet photo-électrique à partir de 1000 K. Néanmoins, on constate que le calcul de Röllig (eq 20) sous-estime d'un facteur 3 l'effet photo-électrique calculé par le code si bien que le modèle

fortement illuminées ($n_H \leq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \geq 10^2$). Les cartes de température de la figure I.6 sont calculées grâce au code PDR. La région chauffée par le chlore se réduit seulement aux régions denses et fortement illuminées ($n_H \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \geq 10^3$). Les régions moins denses ne sont pas aussi chaudes que le modèle prédit. Cette différence est causée, dans une certaine mesure, par la formule de l'effet photoélectrique qui a été choisi et par la méthode de résolution du code PDR.

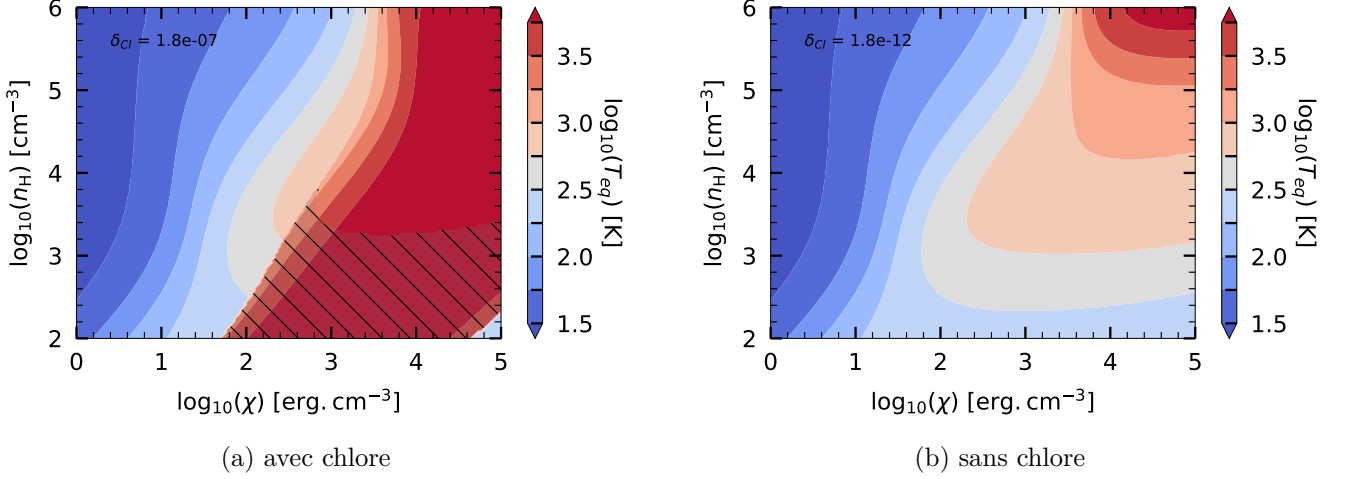


FIGURE I.5 – Carte de température prédite par le modèle

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

Tout d'abord sur la figure I.6b, on remarque l'existence d'un point-selle en température vers $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^3$ qui est absent de la figure I.5. Une analyse de cette région montre que l'augmentation de l'intensité du champs de rayonnement χ dans les régions à basse densité accélère la recombinaison des électrons sur les grains qui la rend plus efficace que l'effet photoélectrique pur, ce qui diminue le chauffage net et donc la température du gaz. Les formules d'effet photoélectrique (eq 20) et de recombinaisons des électrons sur les grains (eq 21) 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 I.7a, le code ne trouve que la solution basse température alors qu'il existe une solution chaude proche de 9000 K. Il peut arriver que le code saute d'une branche de solution à une autre. Une amélioration qui pourrait être faite au code est de le rendre capable de détecter 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 I.7b qui est un modèle dense ($n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, $\chi = 10^{4.5}$) que l'effet photoélectrique est négligeable devant le chauffage par H_2 .

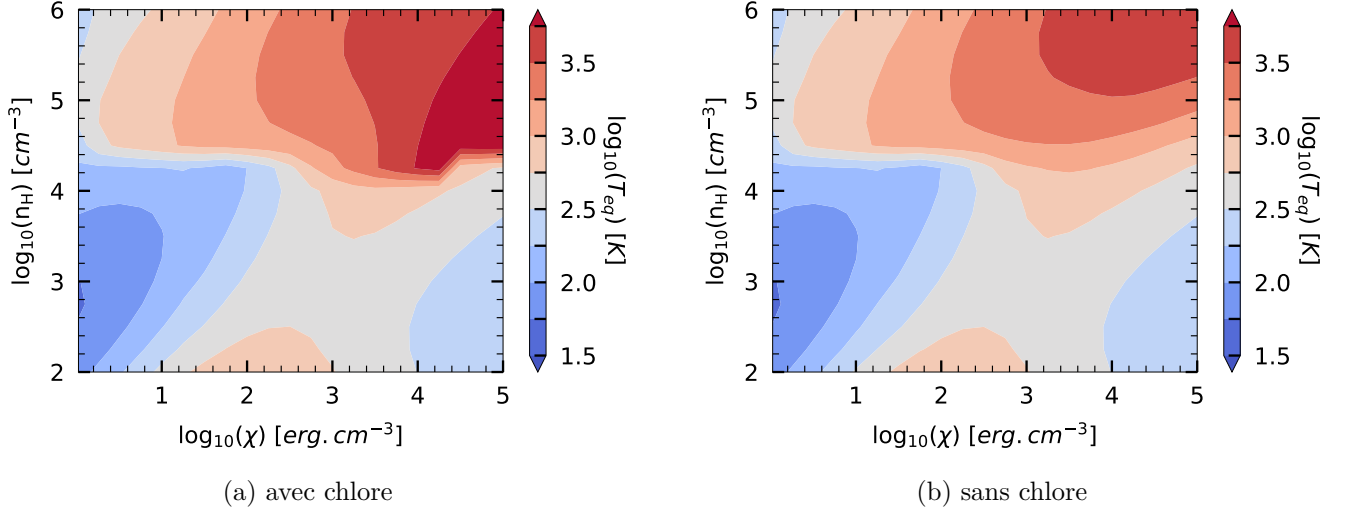


FIGURE I.6 – Température en bord atomique de nuage calculé par le code PDR de Meudon

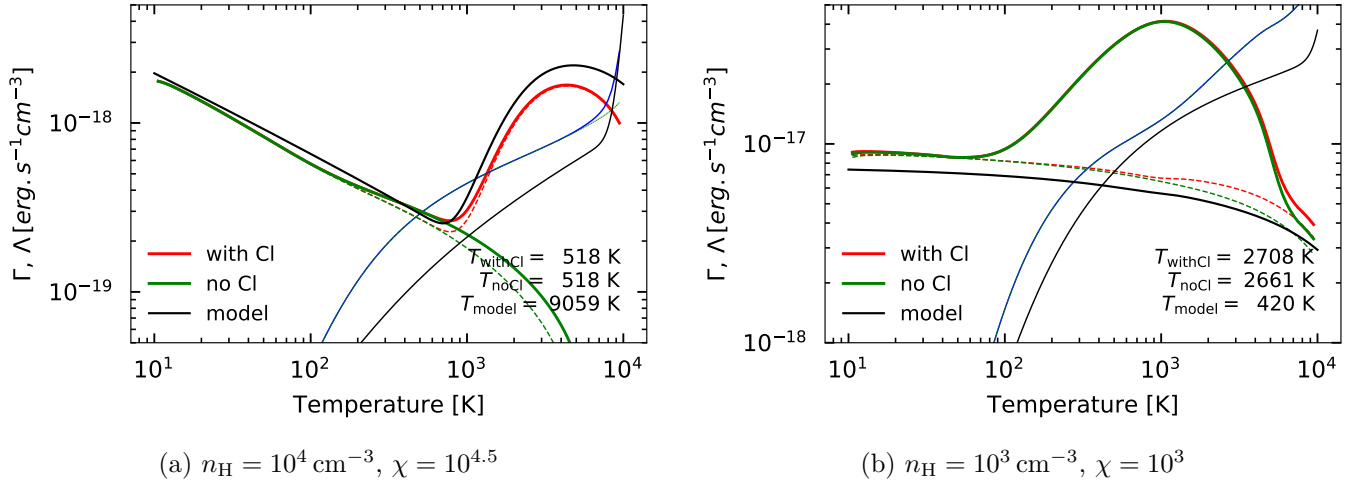


FIGURE I.7 – Courbes de chauffage et refroidissement, au bord atomique de nuage, de modèles résolus par le code PDR de Meudon. Mêmes règles de couleurs que dans la figure I.4a.

I.7 A la recherche d'observables

I.7.1 Détermination d'un traceur

Nous avons pu prouver l'existence et expliquer le fonctionnement de l'instabilité provoquée par le chlore dans le bord atomique des PDR. Afin de l'observer, il est nécessaire de trouver les 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 I.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 I.8). La présence du chlore augmente les raies du N, N⁺ et Si d'un facteur 10 et du S d'un facteur 100. Bien que le chlore intensifie de manière importante les raies d'émissions, il y existe un seuil d'observabilité, de l'ordre de $10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$,

au dessus duquel les raies sont expérimentalement mesurables. Par conséquent on peut considérer seulement certaines raies du spectre de N. En revanche, les raies du CS, H₂O, H₂, ne sont pas affectées par la présence de chlore dans le nuage (figure A.3) car il agit dans la zone atomique du nuage où les molécules ne sont pas formés.

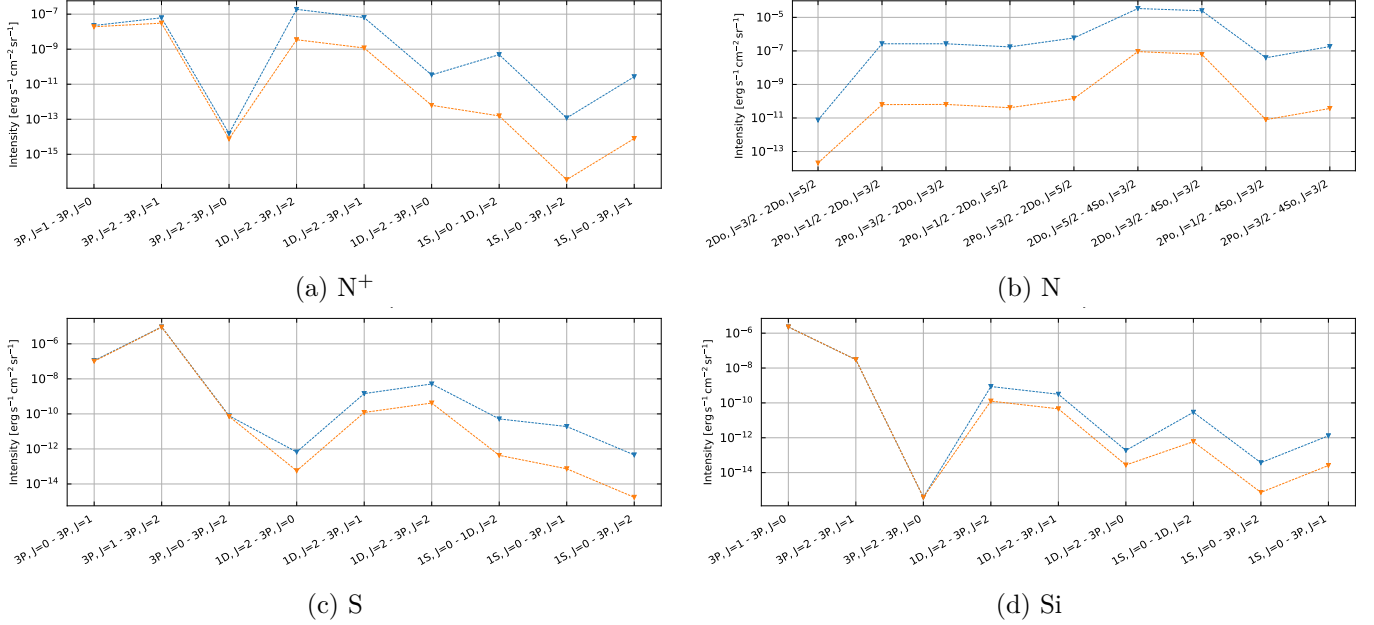


FIGURE I.8 – Diagramme d'intensité des traceurs modifiés par l'ajout du chlore.

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 figures sont affichés en plus grande taille dans l'annexe.

I.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 $\text{Eu} = 2D_{5/2}^0 \rightarrow \text{El} = 4S_{3/2}^0$ correspondant à la longueur d'onde 5200Å. Cette raie est dans le domaine du visible et pourrait être observée depuis la Terre par MUSE¹⁰.

La figure I.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 I.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

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

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

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

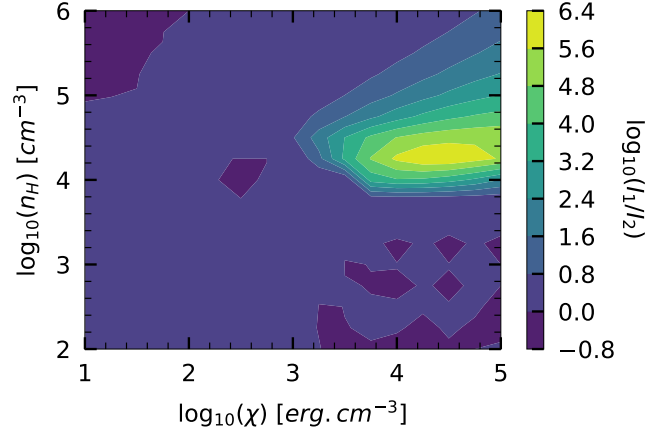


FIGURE I.9 – Rapport d'intensité de la raie [N] $Eu = 2D_{5/2}^0$

Conclusion

Bien que le chlore se trouve en faible abondance dans le gaz interstellaire, on a démontré qu'il peut provoquer une augmentation de la température de plus de 1000 K dans les bords atomiques des nuages. Ce chauffage est provoqué par l'existence d'une bistabilité thermique pour les PDR fortement illuminées. C'est un phénomène nouveau difficile à observer car l'on manque de traceurs atomiques qui ne sont pas masqué par la région photoionisée. Enfin, le passage de la solution froide à la solution chaude provoque une dilatation du gaz. Il serait alors intéressant d'étudier l'impact du chlore dans un code dynamique comme le code Hydra [Bron et al., 2018].

II Effet du pompage UV de la molécule H_2

Ces photons sont absorbés dans la zone atomique par les poussières et la molécule H_2 . La photodissociation arrive dans 10-15% des cas. L'absorption d'un photon passe la molécule dans ses états électroniques excités (Transitions de Lyman ou Werner, $11 < h\nu < 13.6\text{eV}$) puis, par émission spontanée, se désexcite dans le continuum vibrationnel. Néanmoins, dans 85-90% des cas, le H_2 excité va émettre un photon et descendre sur un niveau fondamental ro-vibrationnellement excité ($J \geq 0$, $v > 0$). La figure II.1 illustre niveaux électroniques de H_2 . L'excitation de H_2 par un photon FUV vers des états électroniques excités suivie d'une émission emmenant la molécule sur un état fondamental ro-vibrationnellement excité est le pompage UV de la molécule. Ce mécanisme crée une fraction importante de H_2 excité ce qui a un impact sur le chauffage du gaz.

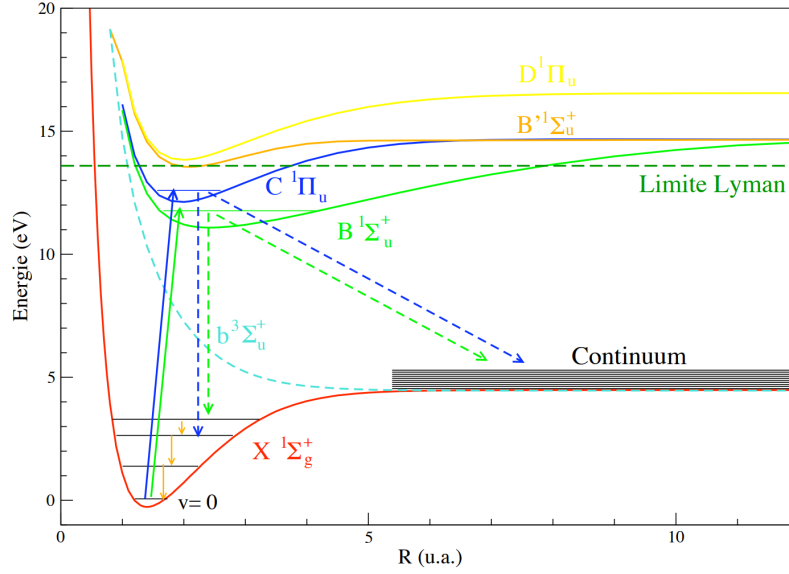


FIGURE II.1 – Potentiel effectif de la molécule H_2

L'état fondamentale $X^1\Sigma_g^+$ et les quatre premiers niveaux électroniques excités ont été tracé : $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $B'^1\Sigma_u^+$ et $D^1\Pi_u$. La limite de Lyman marque l'énergie maximale un photon FUV peut avoir dans une PDR.

Dans l'optique du stage, nous sommes intéressé au mécanisme de chauffage par H_2 . Pour l'étudier, il est nécessaire de pouvoir estimer finement les profils de densités de la molécule ainsi que de connaître les propriétés de ses populations excitées.

II.1 Réduction de la barrière d'activation par H_2

Une réaction chimique peut avoir une barrière d'activation (ou énergie d'activation) qui correspond à l'énergie qui doit être apporté aux réactifs pour initier la réaction (figure II.2). De nombreuses réactions permettant la formation de traceurs importants en ont comme $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$ (4537 K), $O + H_2 \rightarrow OH + H$ (3241 K) ou bien $N + H_2 \rightarrow NH + H$ (16 607 K). Or une partie de l'énergie nécessaire à la réaction peut être prélevée dans l'énergie interne des réactifs ce qui abaisse la barrière d'activation. Par pompage UV, une proportion importante du H_2 se trouve dans ses états excités ce qui a tendance à favoriser les réactions impliquant la molécule. C'est un phénomène déjà bien connu pour la formation du CH^+ par H_2 [Herráez-Aguilar et al., 2014, Zanchet et al., 2013].

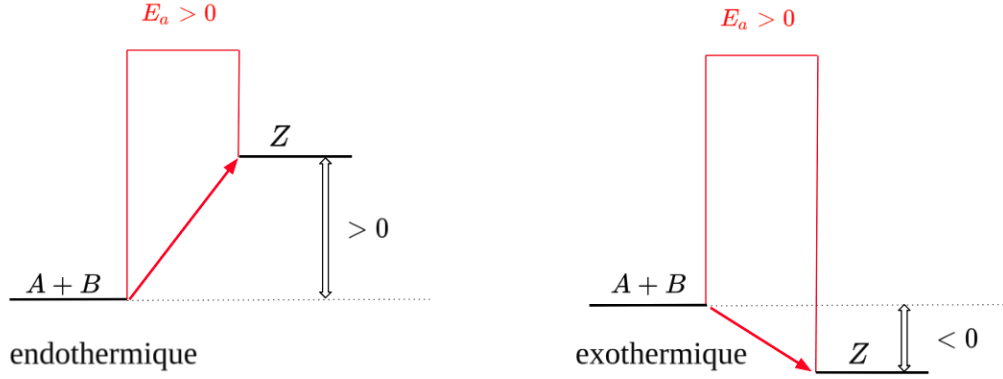


FIGURE II.2 – Diagramme d'énergie d'une réaction chimique ($A + B \rightarrow Z$) ayant une énergie d'activation non nulle

Il faut alors calculer un nouveau taux de réaction qui prend en compte l'énergie E_i que peut fournir chaque niveaux i de H₂. Le nouveau tauc k' est de la forme :

$$k(T) = Ae^{-E_a/k_B T} \rightarrow k(T)' = \frac{1}{n_{tot}} \sum_i A_i n_i e^{-(E_a - E_i)/k_B T} \quad (28)$$

Cependant, réaliser un tel calcul de manière précise est coûteux car il demande de connaître les taux de réactions d'une espèce avec chacune des populations excitées de la molécule H₂. On les connaît déjà pour C⁺ réagissant avec H₂ car $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$ est la voie de formation majeure du CO [Joblin, C. et al., 2018]. Dans le but de mieux expliquer les raies d'émissions, on cherche à comprendre comment ce nouveau calcul des coefficients de réaction modifie les voies de formations des traceurs clés des PDR. Pour les espèces autres que le C⁺, le code PDR fait une approximation de la nouvelle prescription. Si elle provoque des changements majeurs dans la chimie et les raies d'émissions des traceurs, il sera alors intéressant de demander un calcul précis de ces taux.

Les différences les plus importantes que l'on observe sur les diagrammes d'intensités sont pour la molécule CO (figure II.3), H₂ (figure B.1) et H₂O (figure B.2). 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⁺ 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 de la figure II.4 rassemble les réactions servant à former la molécule. Par ailleurs, la découverte de cette nouvelle voie de formation par OH est un résultat important.

En comparant les réseaux chimiques du modèle avec la nouvelle prescription on trouve que la réaction $O + H_2 \rightarrow OH + H$, devenue efficace, augmente la densité de H₂O ($\times 10$) ainsi que ses raies d'émissions (figure B.2). On constate également que la réaction $N + H_2 \rightarrow NH + H$ devient importante. La densité du NH augmente ($\times 10^3$) de même que celle du HCN ($\times 2$) et de NO ($\times 2$). 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 permis de confirmer l'importance d'une voie de formation alternative 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

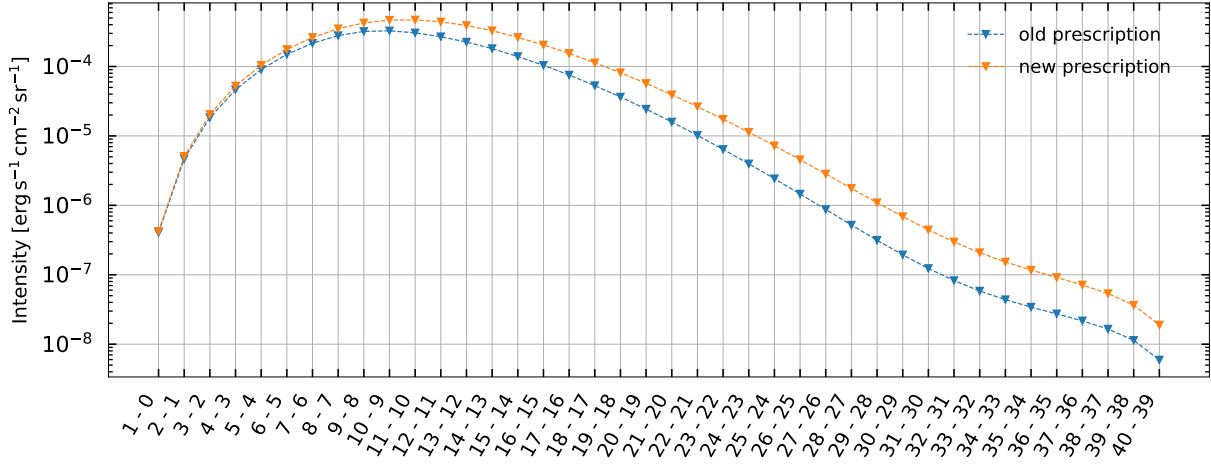


FIGURE II.3 – Diagramme d'intensité du CO avec la nouvelle prescription
Seules les transitions rotationnelles du CO ont été écrites (toutes s'effectuent à $v = 0$). Un modèle isobare a été choisi ($P = 2.8 \cdot 10^8 \text{ cm}^3 \text{ K}$ et $\chi = 3.1 \cdot 10^4$).

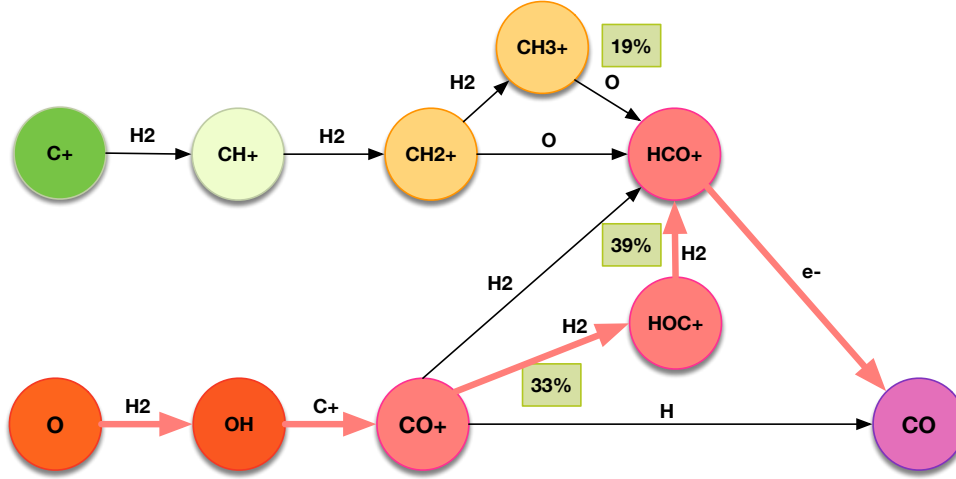
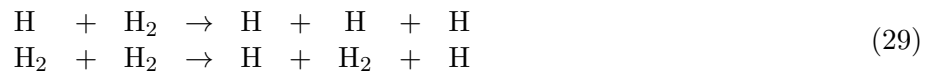


FIGURE II.4 – Nouveau réseau de formation du CO

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.

II.2 Dissociation collisionnelle du H_2

Une autre voie de destruction rapide du H_2 autre que la photodissociation est la dissociation collisionnelle (eq. II.2.3). Les taux de réaction de ces voies sont mal connus alors qu'elles sont efficaces dans tous le nuage.



Il existe plusieurs prescriptions qui tentent d'estimer ces taux en fonction de la température. Deux

ont été retenus dans le code : celle de Glover et Mac Low [Glover and Mac Low, 2007] et celle de Janev [Janev et al., 2003]. On constate par ailleurs que la prescription de Glover obtient des taux de dissociation très faibles devant ceux de Janev ce qui peut changer radicalement la composition du nuage. Nous avons étudié les modifications qu'apportait la prescription de Glover par rapport à Janev puis avons choisi de garder celle qui correspondait le mieux aux observations.

II.2.1 Grilles de modèles - Bord atomique

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

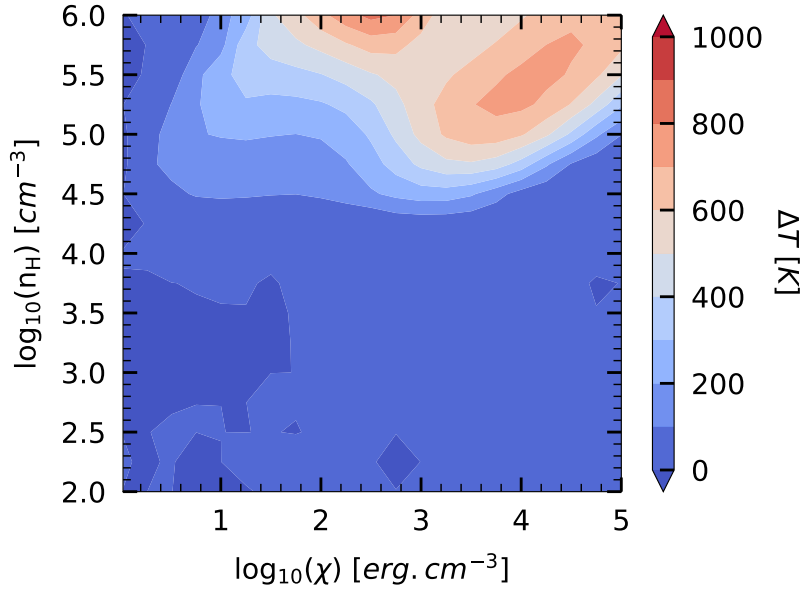


FIGURE II.5 – Différence de température aux bords de nuage entre des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

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 aux 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.

On constate sur la figure C.2 que le chauffage par H₂ reste dominant dans les bords atomiques des PDR denses quelque soit la prescription que l'on utilise. En revanche, les processus de refroidissements (figure C.3) varient pour les PDR denses et faiblement illuminés ($n_{\text{H}} \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi \leq 10^3$). L'utilisation de la prescription de Glover tue le refroidissement par les réactions chimiques ce qui est en fait prévisible car les réactions de dissociation collisionnelle du H₂ (eq II.2.3) sont des réactions endothermiques très efficaces.

II.2.2 Grilles de modèles - Transition H/H₂

La transition H/H₂ marque la frontière entre le milieu atomique et moléculaire du nuage. Elle survient une fois que le H₂, jusque là détruit dans la zone atomique par les photons UV, parvienne 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 H₂, CO, H₂O ou HCN se forment et sont excités par le gaz encore chaud.

Les figures II.6 et C.4 montrent les températures et les A_v des transitions de chaque modèle. Alors que la position de la transition dans le nuage reste sensiblement identique (figure C.4) en passant de la prescription de Janev à celle de Glover, la température parvient à dépasser un plateau à 600 K et atteint les 1000 K (figure II.6).

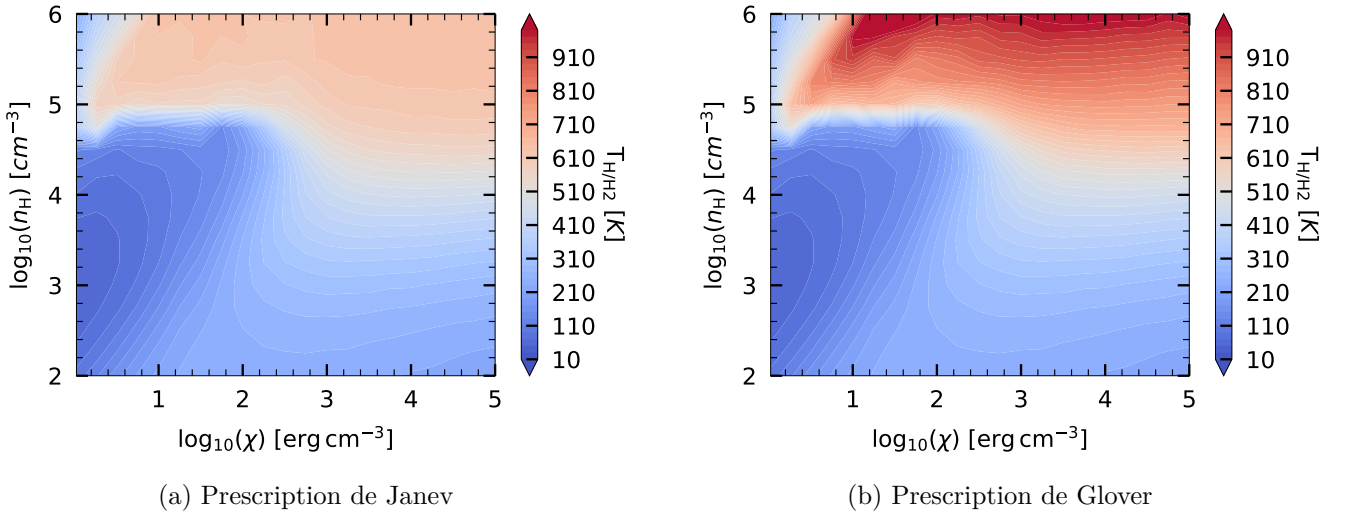


FIGURE II.6 – Comparaison des température à la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

II.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 $n_{\text{H}} = 10^{5.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$ qui subit une augmentation de +300 K à la frontière. Le profil de température (figure II.7a) montre 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 II.8 trace les taux de chauffages en fonction de l'extinction. On constate, qu'avec la prescription de Glover, les réactions chimiques chauffent le gaz de manière aussi intense que l'effet photoélectrique ce qui est peu commun dans les PDR. Afin de comprendre l'origine de 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 la température (figure II.9). L'équilibre thermique du gaz est déterminée par l'intersection de la courbe de chauffage et de refroidissement total. A première vue, les allures des courbes sont très différentes. En passant de la prescription de Janev à celle de Glover, on voit qu'un nouveau processus de chauffage intervient entre

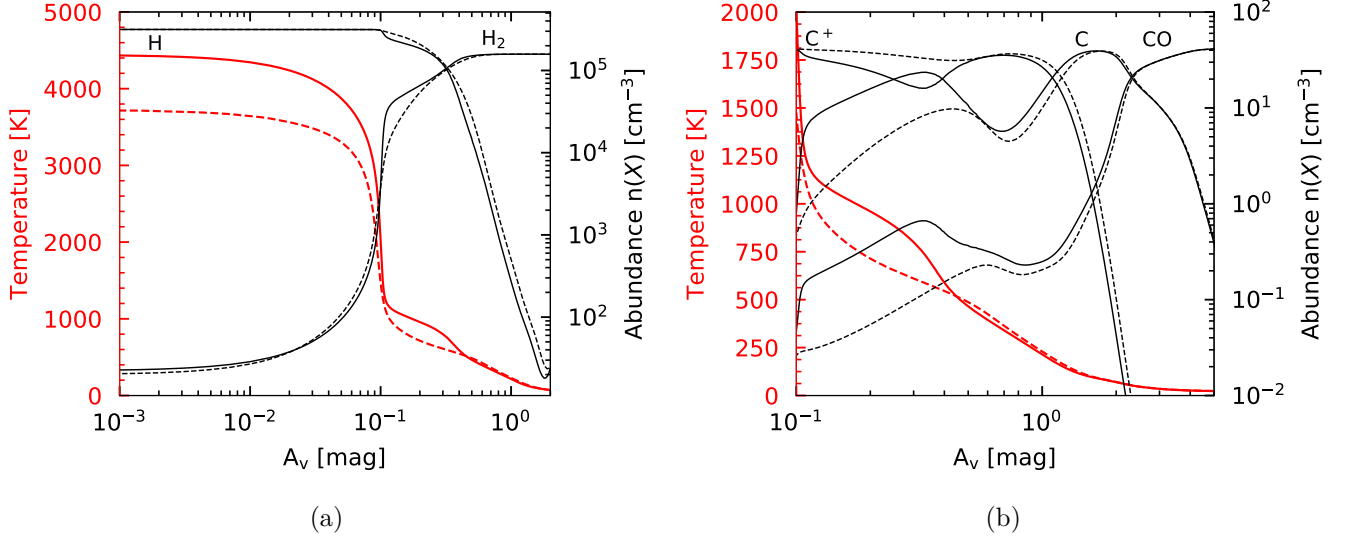
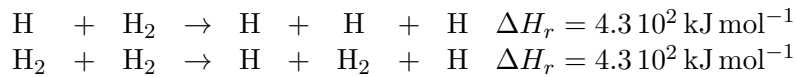
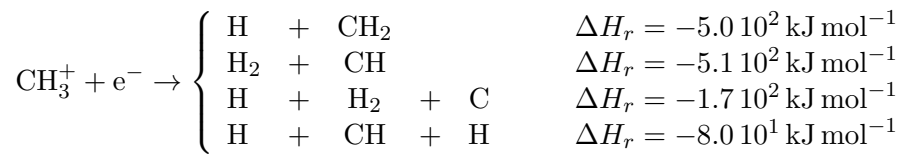


FIGURE II.7 – Profils de densités de H et H₂ (a) et C⁺, C et CO (b) d'un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$). Le trait plein correspond au calcul utilisant la prescription de Glover et les trait pointillés celle de Janev.

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

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



L'augmentation de température est provoquée par le changement d'allure de la courbe de refroidissement total ce qui déplace le point d'équilibre vers des températures plus chaudes. La conséquence de cette « bosse » de température est importante. Plus de CO chaud parvient à se former après la transition H/H₂ donnant des raies (figure C.5) plus intenses. Les raies $8 \leq J \leq 15$ doublent leur intensités tandis que les raies $J \geq 15$ augmente d'un facteur 10 ce qui est majeur. On retrouve l'allure des raies du CO observée par [Goicoechea et al., 2016] ce qui n'était pas le cas avant. La figure II.10 trace les diagrammes d'intensités pour une grille de modèle. On remarque que la prescription de Glover augmente les raies d'émissions du CO des PDR denses fortement illuminées. Par la suite, on gardera cette prescription dans le code PDR.

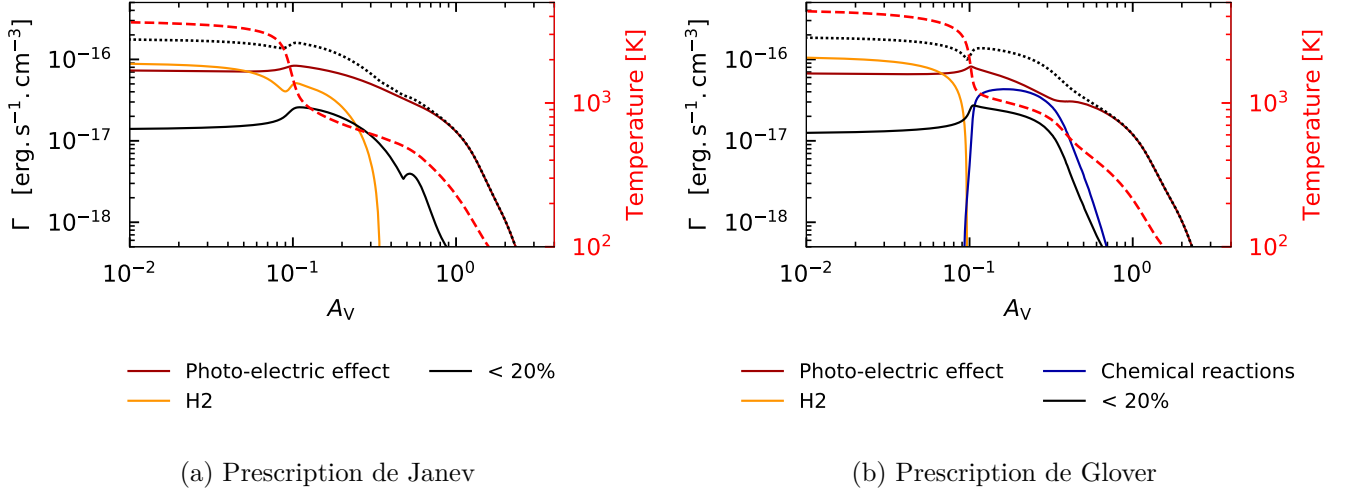


FIGURE II.8 – Profils des taux de chauffages d’un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Janev ou de Glover. La température (axe de droite) est représentée en tiret rouge. Le taux de chauffage total est en pointillé noir.

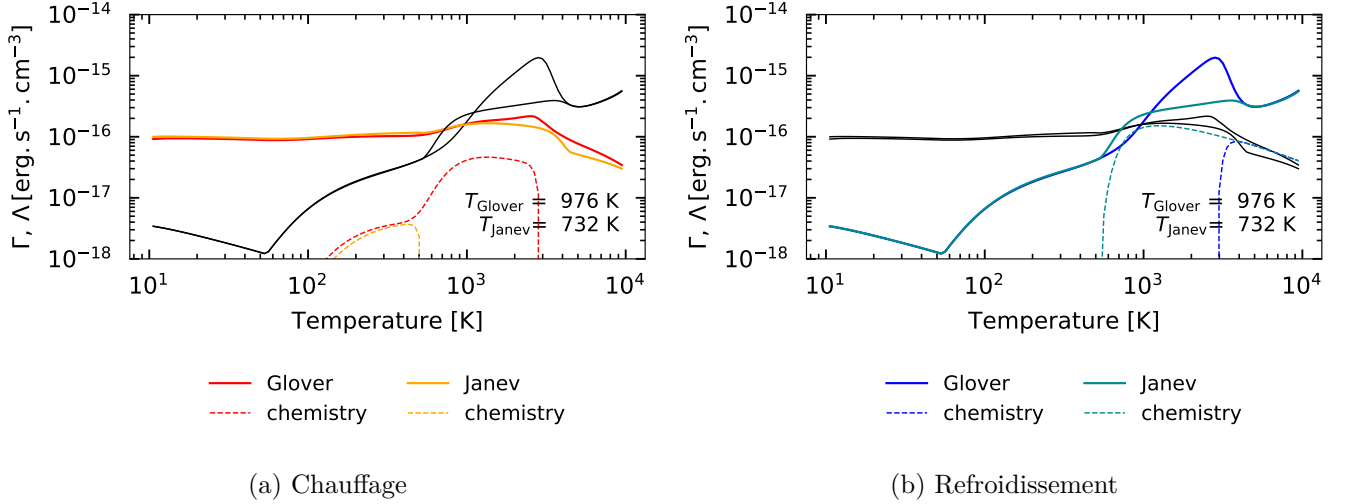


FIGURE II.9 – Efficacité du chauffage des réactions chimiques en fonction de la température pour un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$). Les courbes en rouge et jaune sur la figure (a) représente les processus de chauffage tandis que celles en noires les courbes de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

II.3 Nouveaux taux de collisions de H_2

On a vu dans les sections précédentes qu’une nouvelle chimie du H_2 pouvait avoir un impact fort sur les profils de densités et de températures. Nous cherchons maintenant à affiner la physique qui décrit le phénomène de chauffage par H_2 . La desexcitation collisionnelle des populations de H_2 s’effectue principalement par collisions avec l’atome d’hydrogène. Afin de calculer le taux de chauffage, le code PDR effectue le bilan des transitions collisionnelles des niveaux de H_2 . Il dépend directement des taux de collision k_{ij} qui donnent la probabilité d’une transitions de l’état i à l’état j par collisions avec un atome H. On connaissait ces k_{ij} seulement pour les états peu énergétiques du H_2 ($J \leq 15$). De récents calculs de chimie semi-classique

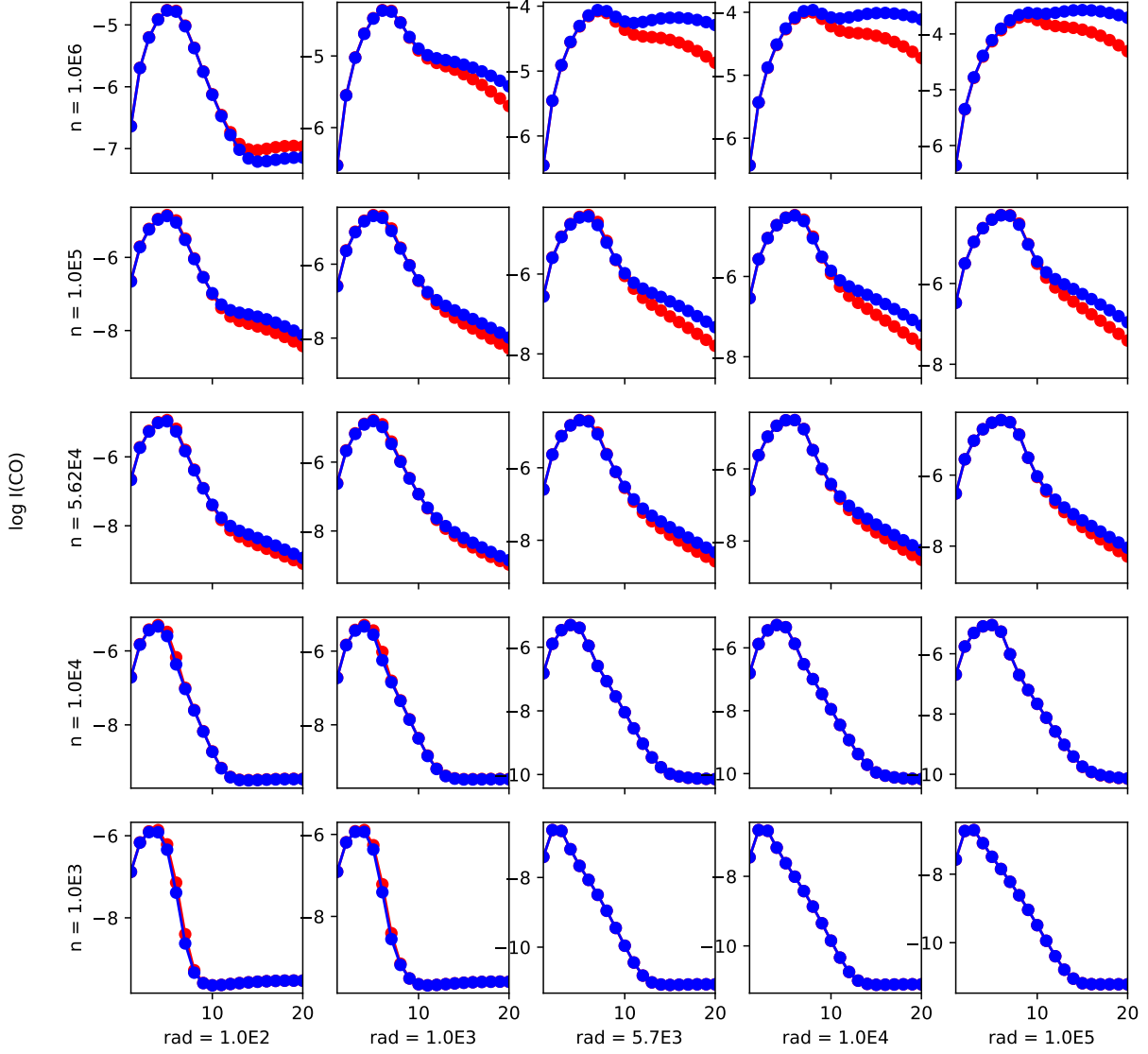


FIGURE II.10 – Raies d'émissions du CO pour une grille de à densité constante. Les lignes en rouge sont les modèles utilisant la prescription de Janev tandis que celles en bleues utilisent la prescription de Glover. Les 20 premières transitions sont représentées.

ont permis d'estimer avec précision les taux de collisions de H_2 avec l'atome H jusqu'à des niveaux très énergétiques [Bossion et al., 2018].

L'analyse complète des changements qu'opère le calcul du taux de chauffage avec les nouveaux taux de collisions est incomplète. Néanmoins, une étude rapide, qui nécessite d'être achevée, a montré que l'utilisation des nouveaux taux de collisions intensifiait le chauffage par H_2 . En effet la figure II.11a montre la différence des température au bord atomique des PDR entre des modèles utilisant les nouveaux de collisions ou non. Il y a un chauffage nette des bords atomiques des nuages de +100 K. Par ailleurs la différence très importante vers $n_{\text{H}} \sim 10^4 \text{ cm}^{-3}$ suggère l'existence d'une instabilité thermique due au chauffage par H_2 mais celle-ci était déjà connue. En revanche la comparaison (figure ??) des températures maximales atteintes le gaz montre une différence importante pour les régions fortement illuminées. Le profil de température sur la figure II.12a montre un pic raide (+800 K) accompagné d'une diminution de la densité de H_2 peu avant la transition H/ H_2 ($A_{\text{V}} \approx 0.7 \text{ mag}$). L'allure des taux de chauffage en fonction de la température au niveau du pic (figure II.12b) traduit l'existence d'une nouvelle instabilité dont l'origine nous est encore inconnue.

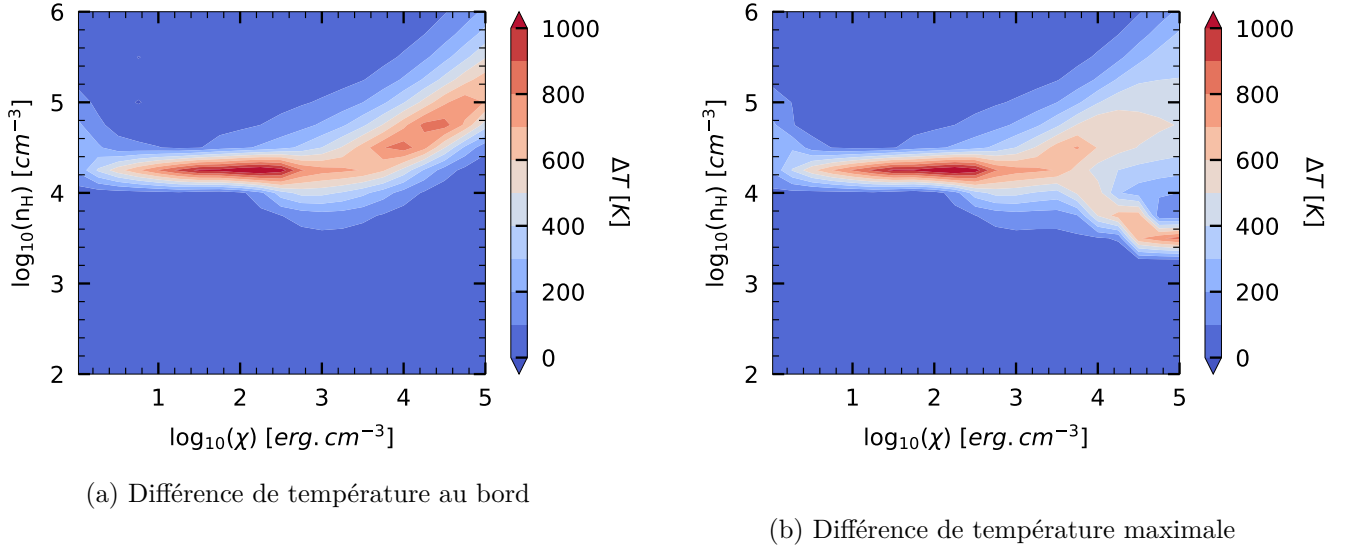
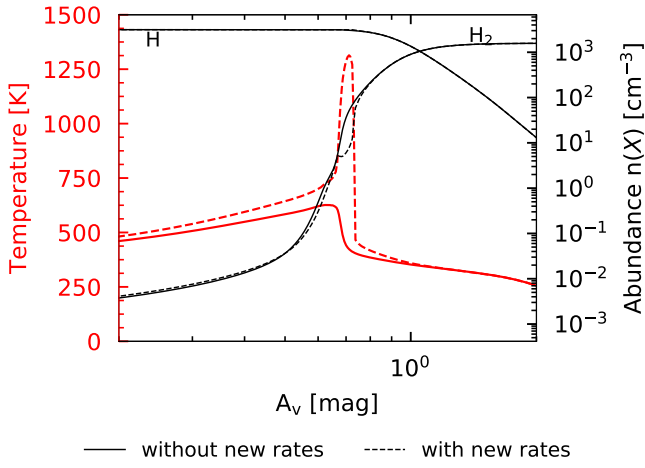
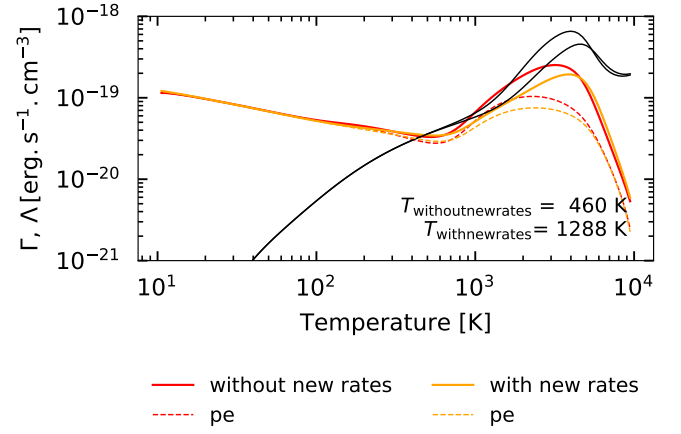


FIGURE II.11 – Différence de température aux bords de nuage et maximale de entre modèles utilisant les nouveaux taux de collisions de H_2 .



(a) Profils de densité et température



(b) Taux de chauffage total

 FIGURE II.12 – Profil de densité de H et H₂ et température d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ cm⁻³ et $\chi = 10^4$).

Conclusion

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.
- [Bossion et al., 2018] Bossion, D., Scribano, Y., Lique, F., and Parlant, G. (2018). Ro-vibrational excitation of H₂ by H extended to high temperatures. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 480(3) :3718–3724.
- [Bron et al., 2018] Bron, E., Agúndez, M., Goicoechea, J. R., and Cernicharo, J. (2018). Photoevaporating PDR models with the Hydra PDR Code. arXiv e-prints, page arXiv :1801.01547.
- [Draine, 2011] Draine, B. T. (2011). Physics of the interstellar and intergalactic medium. "Princeton University Press".
- [Glover and Mac Low, 2007] Glover, S. C. O. and Mac Low, M.-M. (2007). Simulating the Formation of Molecular Clouds. I. Slow Formation by Gravitational Collapse from Static Initial Conditions. , 169(2) :239–268.
- [Goicoechea et al., 2016] Goicoechea, J. R., Pety, J., Cuadrado, S., Cernicharo, J., Chapillon, E., Fuente, A., Gerin, M., Joblin, C., Marcelino, N., and Pilleri, P. (2016). Compression and ablation of the photo-irradiated molecular cloud the orion bar. Nature, 537 :207.
- [Herráez-Aguilar et al., 2014] Herráez-Aguilar, D., Jambrina, P. G., Menéndez, M., Aldegunde, J., Warmbier, R., and Aoiz, F. J. (2014). The effect of the reactant internal excitation on the dynamics of the c+ + h₂ reaction. Phys. Chem. Chem. Phys., 16 :24800–24812.
- [Hollenbach et al., 1991] Hollenbach, D. J., Takahashi, T., and Tielens, A. G. G. M. (1991). Low-density photodissociation regions. , 377 :192–209.
- [Janev et al., 2003] Janev, R. K., Reiter, D., and Samm, U. (2003). Collision processes in low-temperature hydrogen plasmas. Technical report, Germany. Juel-4105.
- [Joblin, C. et al., 2018] Joblin, C., Bron, E., Pinto, C., Pilleri, P., Le Petit, F., Gerin, M., Le Bourlot, J., Fuente, A., Berne, O., Goicoechea, J. R., Habart, E., Köhler, M., Teyssier, D., Nagy, Z., Montillaud, J., Vastel, C., Cernicharo, J., Röllig, M., Ossenkopf-Okada, V., and Bergin, E. A. (2018). Structure of photodissociation fronts in star-forming regions revealed by herschelservations of high-j co emission lines. A&A, 615 :A129.
- [Jones, A. P. et al., 2017] Jones, A. P., Köhler, M., Ysard, N., Bocchio, M., and Verstraete, L. (2017). The global dust modelling framework themis. A&A, 602 :A46.
- [Le Petit et al., 2006] Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., and Roueff, E. (2006). A Model for Atomic and Molecular Interstellar Gas : The Meudon PDR Code. , 164(2) :506–529.
- [Lequeux, 2012] Lequeux, J. (2012). Le Milieu interstellaire. SAVOIRS ACTUELS. EDP Sciences.
- [Neufeld et al., 2012] Neufeld, D. A., Roueff, E., Snell, R. L., Lis, D., Benz, A. O., Bruderer, S., Black, J. H., De Luca, M., Gerin, M., Goldsmith, P. F., Gupta, H., Indriolo, N., Le Bourlot, J., Le Petit, F., Larsson, B., Melnick, G. J., Menten, K. M., Monje, R., Nagy, Z., Phillips, T. G., Sandqvist, A., Sonnentrucker, P., van der Tak, F., and Wolfire, M. G. (2012). HERSCHEL OBSERVATIONS OF INTERSTELLAR CHLORONIUM. The Astrophysical Journal, 748(1) :37.
- [Neufeld and Wolfire, 2009] Neufeld, D. A. and Wolfire, M. G. (2009). The Chemistry of Interstellar Molecules Containing the Halogen Elements. , 706 :1594–1604.

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

Appendices

A Impact du chlore

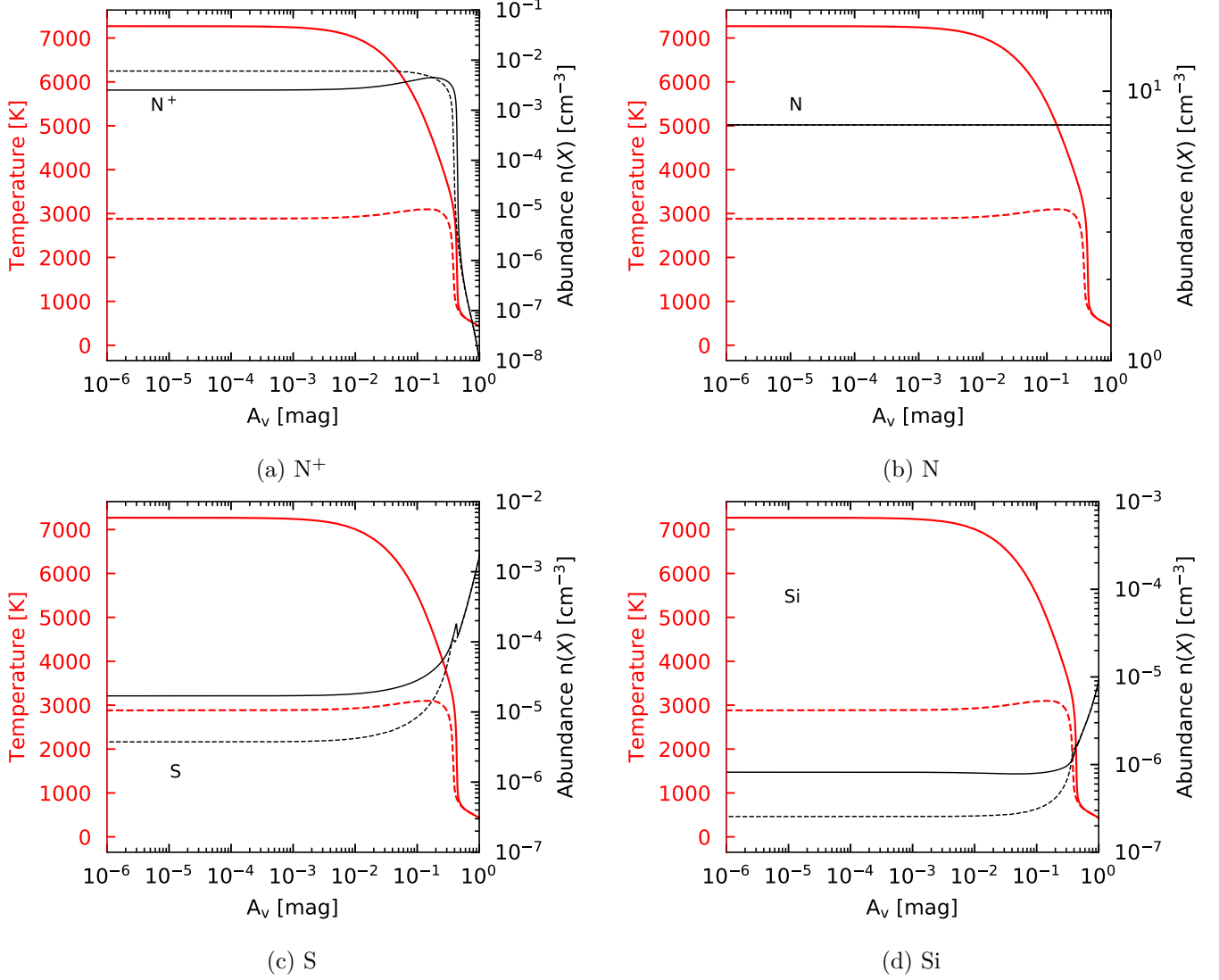


FIGURE A.1 – (ANNEXE) Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore. Il est représenté en trait plein les profils du modèle avec le chlore et en trait pointillé le modèle ne contenant pas de chlore. La température est en rouge et la densité en noir.

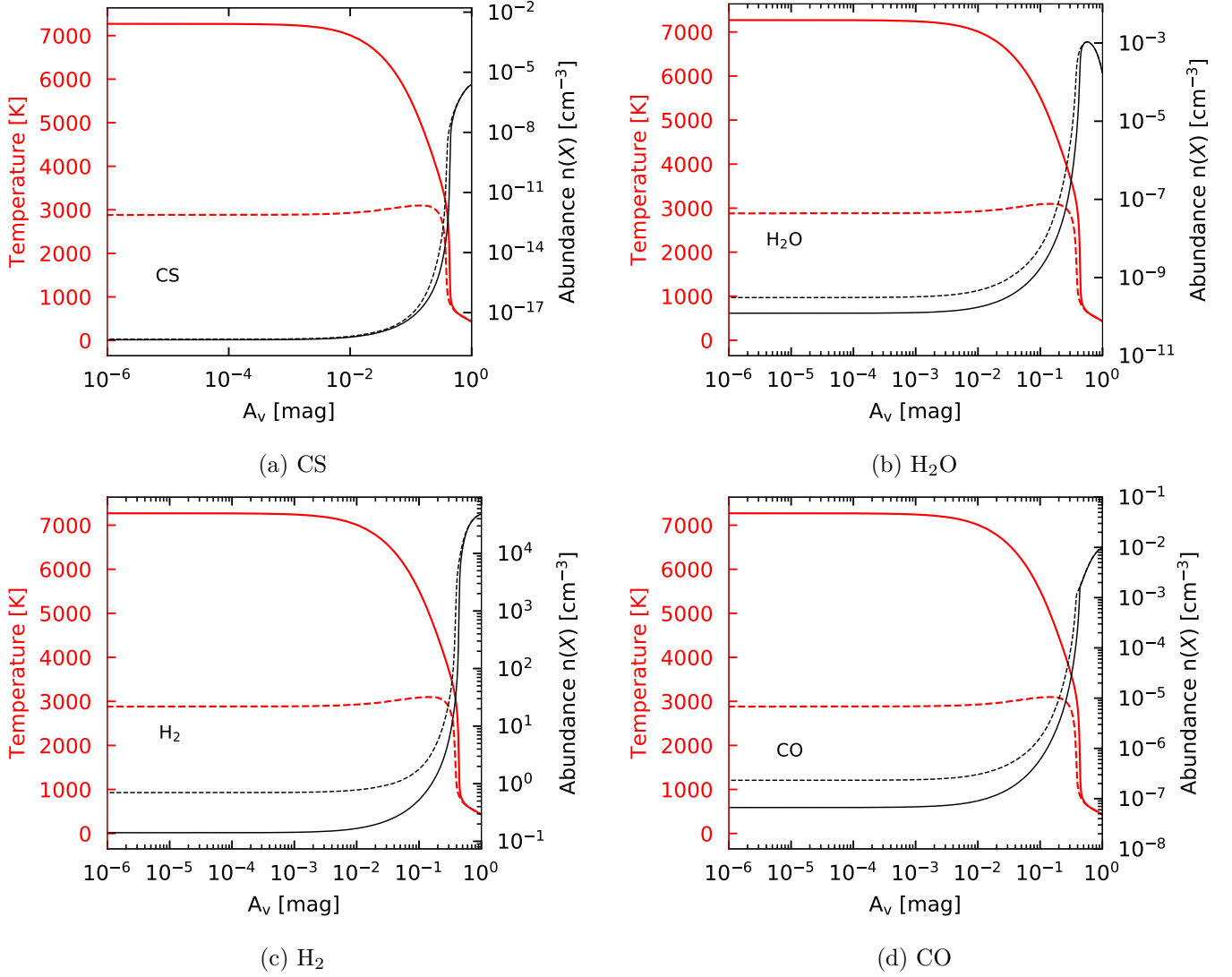


FIGURE A.2 – ((ANNEXE)) Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore. Mêmes conventions que pour la figure A.1.

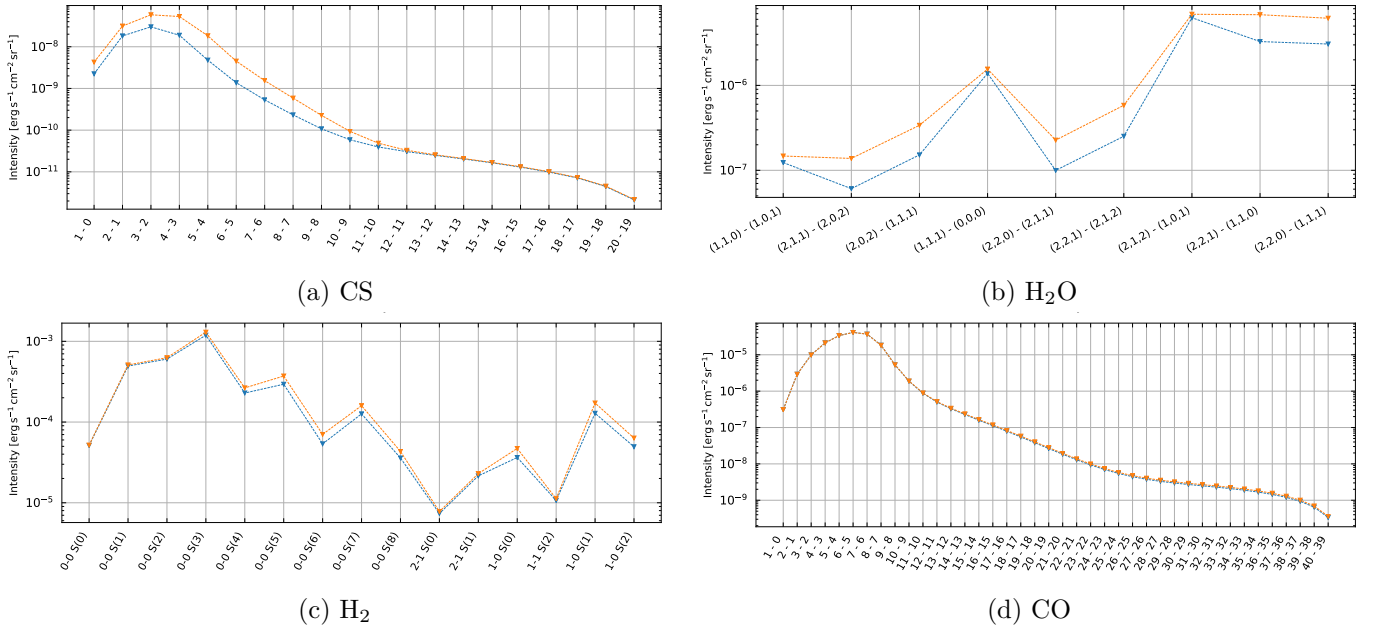


FIGURE A.3 – (ANNEXE) Diagramme d'excitation des traceurs peu modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (même convention que la figure I.8). Pour la molécule CO, les transitions rotationnelles ont été écrites (toutes s'effectuent à $v = 0$).

B H₂ excité

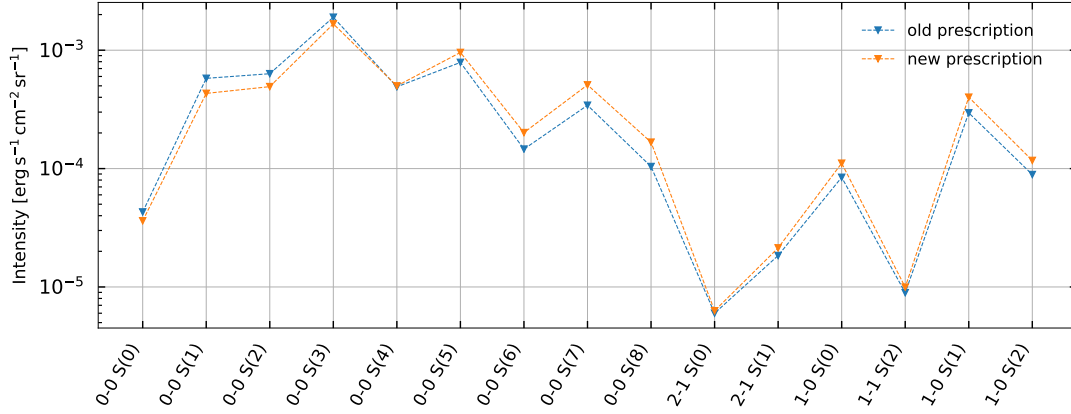


FIGURE B.1 – Diagramme d'excitation du H₂

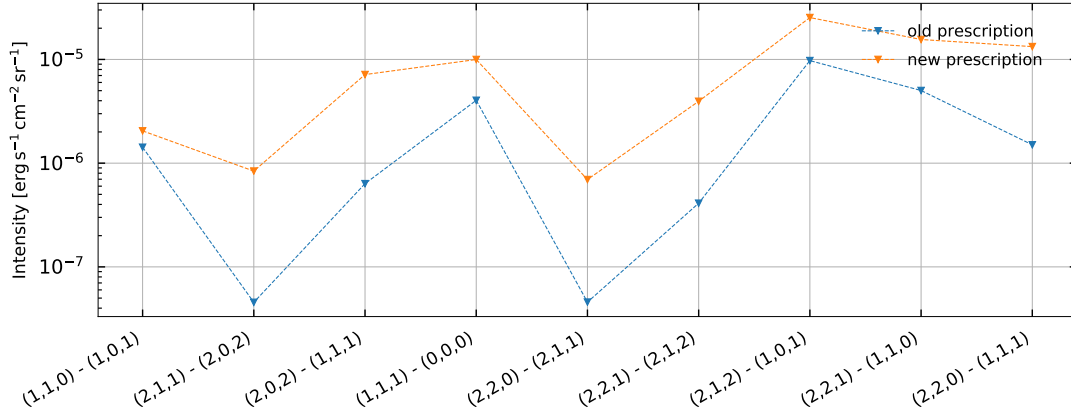


FIGURE B.2 – Diagramme d'excitation du H₂O

C Impact de la prescription de Glover

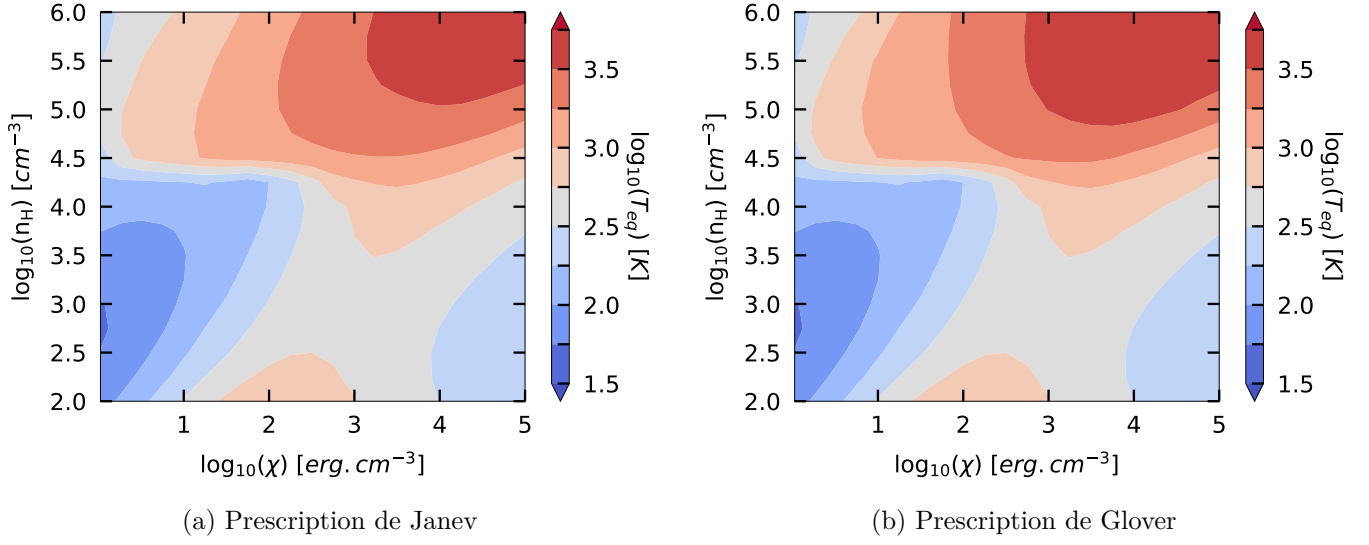


FIGURE C.1 – Comparaison des température en bord atomique de nuage pour des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

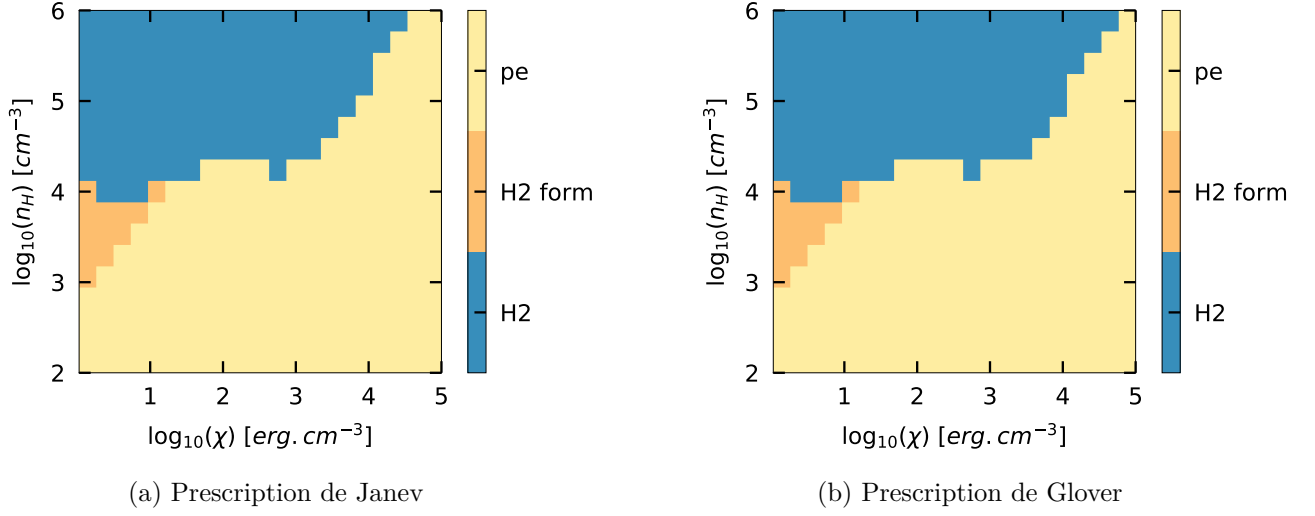


FIGURE C.2 – Processus de chauffage dominant en bord de région atomique
 Le chauffage par effet photoélectrique sur les grains est désigné ici sous l'abréviation "pe". "H2" désigne le chauffage par pompage UV de la molécule H₂ et "H2 form" la formation de la molécule sur les grains.

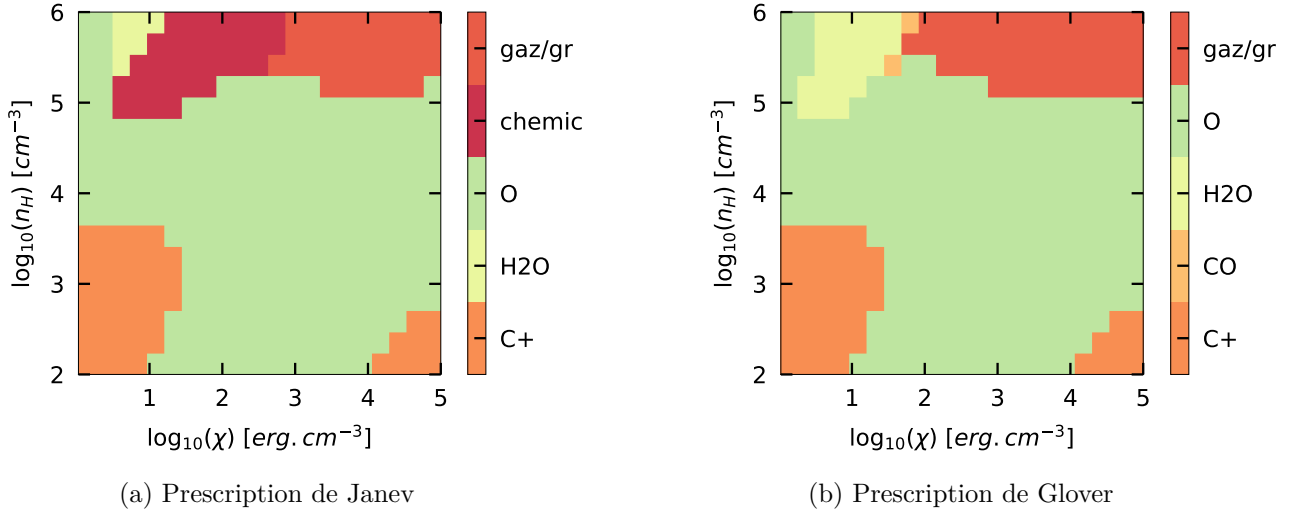


FIGURE C.3 – Processus de refroidissement dominant en bord de région atomique
 Les noms "O", "H₂O", "CO" et "C⁺" désignent des processus de refroidissement par émission des espèces O, H₂O, CO et C⁺ respectivement. "gaz/gr" réfère à la thermalisation du gaz avec les grains du nuage généralement plus froid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

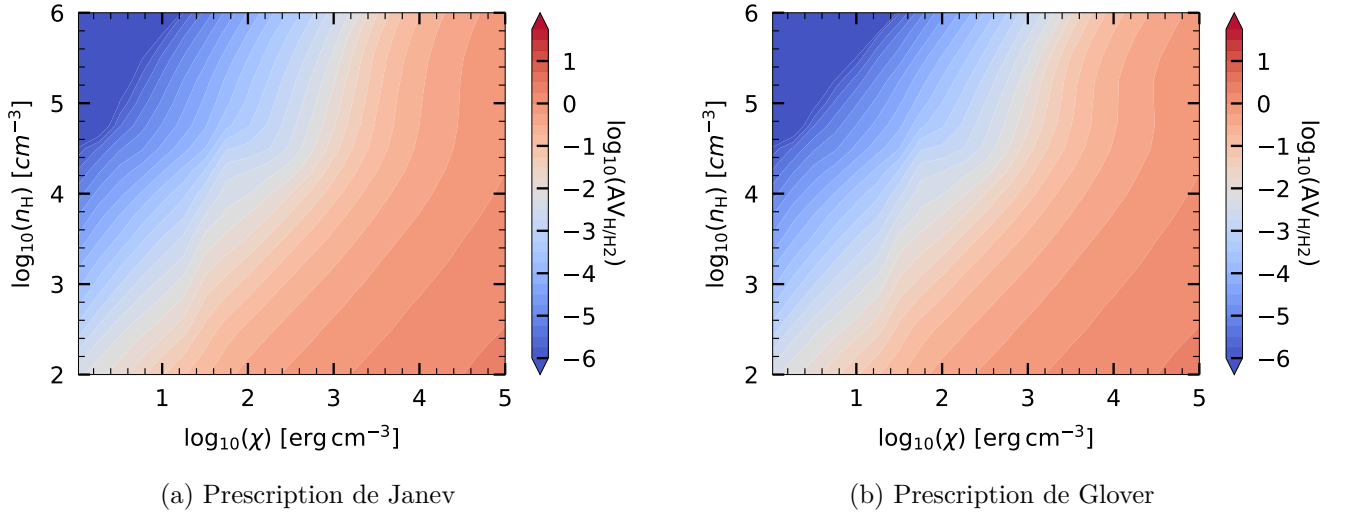


FIGURE C.4 – Comparaison des A_V de la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Jansev et de Glover

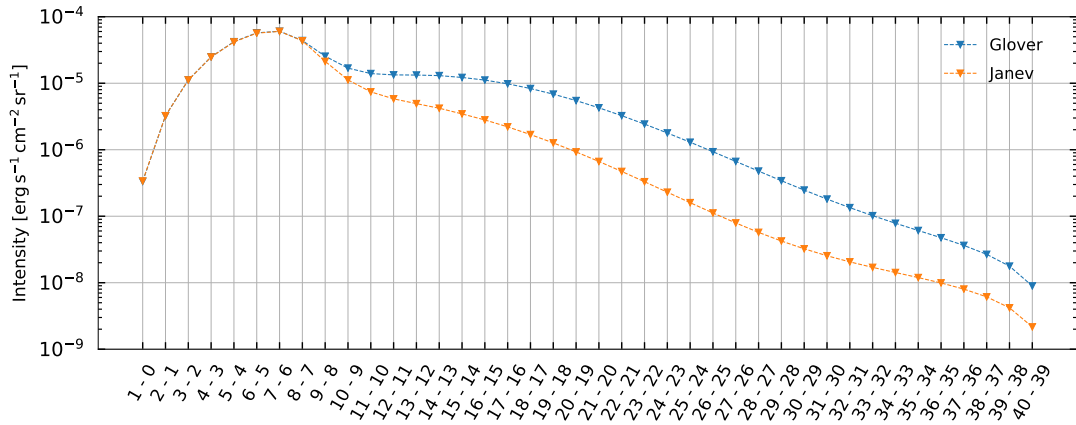


FIGURE C.5 – Raies d'émissions du CO pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Glover ou bien celle de Jansev. Les transitions écrites sur l'axe des abscisses signifient les transitions des niveaux rotationnels de la molécule CO.