

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

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Amplification de l'effet photoélectrique par le chlore</b>                  | <b>6</b>  |
| 1.1      | Profil de température d'une PDR en présence de chlore . . . . .                | 6         |
| 1.2      | Impact du chlore sur l'effet photoélectrique . . . . .                         | 7         |
| 1.3      | Modèle analytique - Chimie . . . . .   | 9         |
| 1.3.1    | Ion hydrogène . . . . .  | 9         |
| 1.3.2    | Ion chlore . . . . .   | 10        |
| 1.3.3    | Recombinaison de $H^+$ sur les grains . . . . .                                | 11        |
| 1.4      | Modèle analytique - Thermique . . . . .  | 12        |
| 1.4.1    | Chauffage net par effet photoélectrique sur les grains . . . . .               | 12        |
| 1.4.2    | Refroidissement par les raies d'émissions du gaz . . . . .                     | 12        |
| 1.4.3    | Couplage gaz-grains . . . . .  | 13        |
| 1.5      | Correction de l'effet photoélectrique par le code . . . . .                    | 13        |
| 1.6      | Prédiction de la température au bord de nuage . . . . .                        | 14        |
| 1.6.1    | Carte de température au bord du nuage . . . . .                                | 14        |
| 1.7      | A la recherche d'observables . . . . .   | 15        |
| 1.7.1    | Détermination d'un traceur . . . . .   | 15        |
| 1.7.2    | Choix de la raie [N] 5200Å . . . . .   | 16        |
| <b>2</b> | <b>Réduction de l'énergie d'activation des réactions avec <math>H_2</math></b> | <b>17</b> |

|                 |   |           |
|-----------------|---|-----------|
| <b>3</b>        | <b>Molécule H<sub>2</sub></b>   | <b>19</b> |
| 3.1             | Dissociation collisionnelle du H <sub>2</sub> (de Janev à Glover) . . . . . | 19        |
| 3.1.1           | Grilles de modèles - Bord atomique . . . . .                                | 20        |
| 3.1.2           | Grilles de modèles - Transition H/H <sub>2</sub> . . . . .                  | 21        |
| 3.1.3           | Etude d'un modèle particulier . . . . .                                     | 21        |
| 3.1.4           | Chauffage par exothermicité des réactions chimiques . . . . .               | 24        |
| <b>Annexe A</b> | <b>Impact du chlore</b>   | <b>30</b> |
| <b>Annexe B</b> | <b>H<sub>2</sub> excité</b>   | <b>33</b> |

## Introduction

Le sujet de cette étude traite du gaz et des poussières qui se trouvent entre les étoiles, c'est à dire le milieu interstellaire (MIS). On sait que la masse de la majorité des galaxies est sous forme de matière noire et que les baryons (qui représente 10% de leurs masses) sont responsables de l'aspect visible des galaxies. Dans notre Voie Lactée, la masse baryonique est principalement sous forme d'étoiles et seulement 10% est trouvé dans le milieu interstellaire. Bien que le MIS soit présent partout dans notre galaxie, 50% des particules sont confinés dans un disque *fin* autour du plan galactique. Les poussières représentent à peine 1% de la masse du milieu. Les 99% de gaz est constitué, en masse, à  $\sim 74\%$  d'Hydrogène,  $\sim 15\%$  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 donc un gigantesque nuage de gaz et de poussière qui enveloppe les étoiles de la galaxie et qui est intimement lié à leurs formations. 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 la naissance d'une étoile amorce 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.

Ces jeunes étoiles interagissent avec les nuages 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 influencés par le champ UV proche. Les observations Herschel et ALMA ont sondé la structure de ces régions et révolutionné notre compréhension des PDR [Goicoechea et al., 2016]. Après la naissance d'une étoile au sein d'un nuage moléculaire, la photoionisation du gaz proche de l'étoile crée un front d'ionisation qui s'expand vers le nuage moléculaire et comprime la PDR.

Ces couches du gaz sont contenues à des hautes pressions et chauffées par l'effet photoélectrique sur les grains ce qui permet à une chimie chaude de se développer. Elle initie la formation et l'excitation de traceurs importants comme le CO observé par Herschel [Joblin, C. et al., 2018]. Le flux UV des jeunes étoiles assurent ainsi la formation des espèces moléculaires au sein du nuage et l'excitation des raies observées. L'interprétation des raies d'émissions à l'aide des modèles PDR dépend directement de la température. Celle-ci est déterminée à partir des processus de chauffage et de refroidissement qui sont pourtant mal connus. L'objectif du stage est de revoir l'ensemble des processus thermiques qui se déroulent au sein des PDR afin de mieux interpréter les observations.

L'étude s'intéresse à des processus de chauffage qui peuvent dominer localement dans des zones du nuage et donc jouer un rôle clé dans la compréhension de certains traceurs. Il s'agit notamment du chauffage par pompage UV de la molécule  $H_2$ , du chauffage par exothermicité des réactions chimiques et du chauffage par les rayons cosmiques. Par ailleurs, je me suis attardé pendant une partie de mon stage sur la découverte d'une amplification de l'effet photo-électrique sur les grains induite par la chimie du chlore. L'effet photoélectrique sur les grains domine le bilan énergétique global dans les PDR et sera revu au cours de mon projet de thèse qui porte sur les grains interstellaires. L'étude est faite à l'aide du code PDR de Meudon [Le Petit et al., 2006] qui est un modèle complet de PDR qui résout le transfert de rayonnement à travers le gaz, la chimie du nuage et le bilan thermique. C'est un code 1D stationnaire qui permet de prédire les



FIGURE 1 – M17 ou nébuleuse du Cygne, elle est située à 5500 années lumières dans la constellation du Sagittaire. Le nuage moléculaire froid est creusé et chauffé par le champs de rayonnement UV intense émis par un amas de jeunes étoiles qui serait situé en haut à gauche. Le rouge représente l'émission du soufre, le vert l'hydrogène et le bleu l'oxygène. Crédits NASA/ESA/J. Hester (ASU)



FIGURE 2 – Nébuleuse de la Carène, « Montagne mystique ». Image composite des émissions de l'oxygène (en bleu), hydrogène et nitrogène (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 champs 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 qui vont s'accréter sur la surface de l'étoile.

intensités de raies observées.

# 1 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  $\text{H}_2\text{Cl}^+$ ,  $\text{HCl}$  et  $\text{HCl}^+$  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         | $\delta_X$                            | 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       |
| <b>Cl</b> | <b><math>1.8 \cdot 10^{-7}</math></b> | <b>13</b> |
| 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.

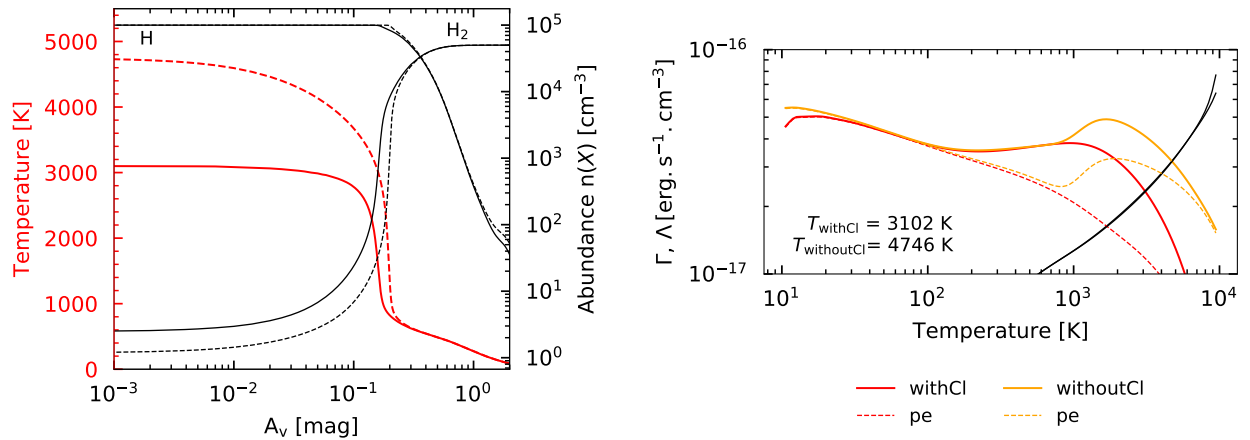
## 1.1 Profil de température d'une PDR en présence de chlore

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 3a) 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 3b 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 3b, 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 3b 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 3 – 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 que 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.

## 1.2 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-

tr  sur la Figure 4. Le champs de rayonnement UV, intense en bord de nuage atomique, photoionise le chlore et produit des ions  $\text{Cl}^+$  et des  lectrons. Le transfert de charge du  $\text{Cl}^+$  avec l'hydrog ne est une r action rapide qui permet au chlore de se rendre de nouveau disponible pour la photoionisation. Le chlore permet ainsi de ioniser indirectement l'hydrog ne. Par cons quent, la fraction  lectronique du gaz augmente.

Or on sait que l'effet photo lectrique sur les grains fonctionne d'autant plus que la fraction  lectronique dans le nuage est importante<sup>1</sup>. L'effet photo lectrique chauffe ainsi le gaz ce qui am liore l'efficacit  du transfert de charge du  $\text{Cl}^+$  avec l'hydrog ne. En d'autres termes, le chlore induit une r troaction positive de l'effet photo lectrique sur les grains. Cet emballement a tendance   chauffer le gaz   des temp ratures nettement plus fortes et ce malgr  la faible abondance du chlore.

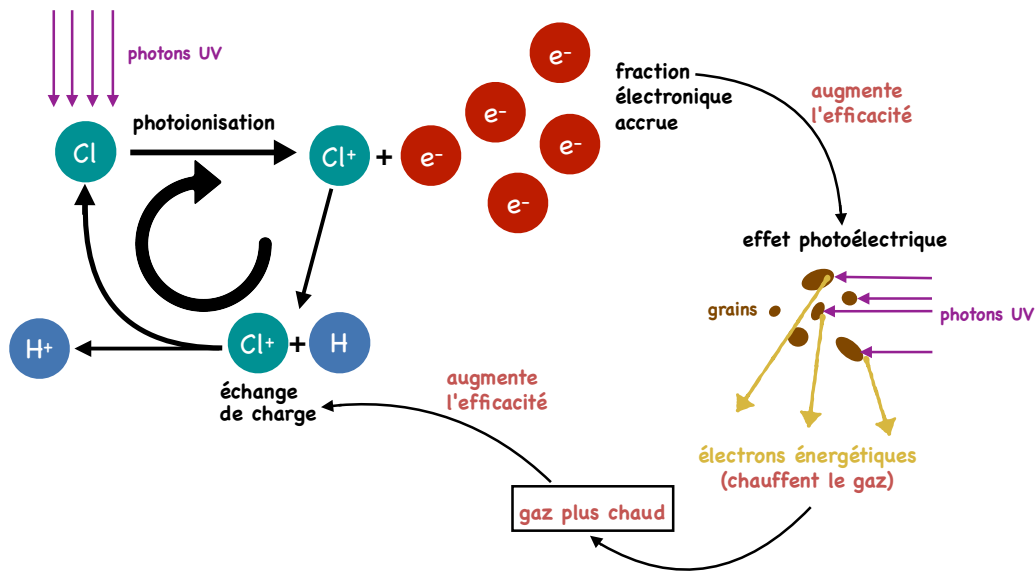


FIGURE 4 – Sch ma repr sentant l'impact du chlore sur la chimie du bord d'un nuage atomique

L'emballement de l'effet photo lectrique se produit   partir de 1000 K et est d    la formation d' lectrons par le chlore. De mani re g n rale, la formation d' lectrons en bord atomique de nuage est principalement assur e par la photoionisation du carbone et du soufre qui est ind pendante de la temp rature. Pourtant   partir de 1000 K, le transfert de charge devient suffisamment efficace pour que la fraction d' lectrons cr e e via le chlore devienne dominante devant celle de l'ionisation du carbone et du soufre et amorce la r troaction de l'effet photo lectrique. L'amplification d pend donc l' nergie d'activation du transfert de charge  $\text{Cl}^+ + \text{H} \rightarrow \text{Cl} + \text{H}^+$  qui vaut 6290 K.

Parmi les esp ces chimiques connues dans le milieu interstellaire, la carbone, le soufre, le silicium ou le fer ont  galement un potentiel de ionisation inf rieur   celui de l'hydrog ne (table 1). Pourtant aucun ne peut effectuer un transfert de charge avec l'hydrog ne qui est l'esp ce majoritaire en bord de nuage atomique. Seul le chlore peut  tre   l'origine, par le m canisme expliqu  plus haut, de l'emballement de l'effet photo lectrique.

1. Une forte densit  d' lectrons rend plus facile la recombinaison  lectronique des grains ce qui maintient le degr  d'ionisation des grains raisonnablement faible. Il est plus facile d'arracher un  lectron d'un grain neutre que d'un grain qui a d j   t  ionis .



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.

### 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

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

où  $G_0$  est l'intensité du champs UV en l'unité d'Habing ( $G_0 = 1.71\chi$ ) et  $\epsilon$  est l'efficacité en  $\text{s}^{-1}$  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.

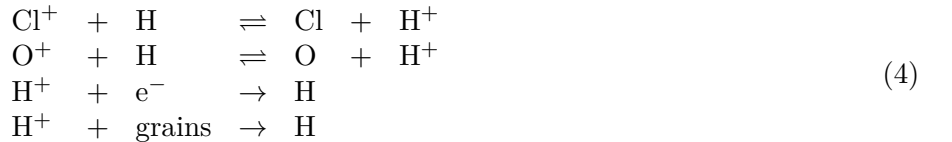
Les espèces qui contribuent à la production d'électrons en bord de nuage sont les ions hydrogène  $\text{H}^+$ , carbone  $\text{C}^+$  et soufre  $\text{S}^+$ . Le gaz est neutre, le bilan de charge donne donc :

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

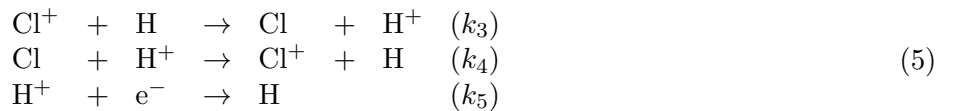
On peut supposer qu'en entrée de nuage atomique le carbone et le soufre sont totalement ionisés ce qui fournit une fraction d'électrons minimale<sup>2</sup> de  $10^{-4}$ . Aussi ne reste il qu'à déterminer une expression de la densité de protons  $\text{H}^+$  en fonction de la température.

#### 1.3.1 Ion hydrogène

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



Les réactions avec l'oxygène sont négligées car la formation et destruction de  $\text{H}^+$  par l'oxygène se compensent totalement en première approximation. De plus la prise en compte de la recombinaison de l'ion  $\text{H}^+$  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  $k_3, k_4, k_5$  en  $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$  et qui dépendent de la température. <nommer les coefficients en recommencant de 1 ?>




---

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  $n(\text{C}^+) = 1.32 \text{ cm}^{-3}$  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

$$\frac{d}{dt}n(H^+) = k_3n(Cl^+)n(H) - k_4n(Cl)n(H^+) - k_5n(H^+)n_e = 0 \quad (6)$$

En introduisant la fraction atomique de chlore  $\delta_{Cl}$ , fixée dans le gaz, et le bilan de charge (eq 3) on obtient une équation en  $n(H^+)$  :

$$-k_3n(Cl^+)n_H + \left( \frac{k_3k_4}{k_1}n_Hn(Cl^+) + k_5(n(C^+) + n(S^+)) \right)n(H^+) + k_5n(H^+)^2 = 0 \quad (7)$$

avec,

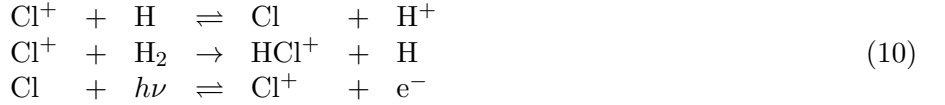
$$\delta_{Cl} = 1.8 \cdot 10^{-7} = \frac{n(Cl) + n(Cl^+) + \dots}{n(H) + n(H^+) + 2n(H_2) + \dots} \approx \frac{1}{n_H}(n(Cl) + n(Cl^+)) \quad (8)$$

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

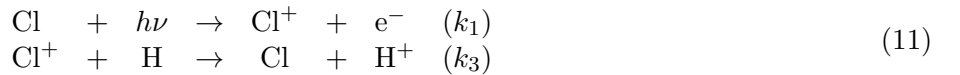
$$n(H^+) = -\frac{1}{2} \left( \frac{k_3k_4}{k_1k_5}n_Hn(Cl^+) + n(C^+) + n(S^+) \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left( \frac{k_3k_4}{k_1k_5}n_Hn(Cl^+) + n(C^+) + n(S^+) \right)^2 + 4\frac{k_3}{k_5}n_Hn(Cl^+)} \quad (9)$$

### 1.3.2 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'emballlement 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  $cm^{-3}s^{-1}$ .



Un travail similaire nous donne

$$k_1(\delta_{Cl}n_H - n(Cl^+)) - k_3n(Cl^+)n_H = 0 \quad (12)$$

Ce qui fait en posant  $A = \frac{k_1}{k_3n_H}$  :

$$n(Cl^+) = \frac{k_1\delta_{Cl}n_H}{k_1 + k_3n_H} = \frac{A}{1 + A}\delta_{Cl}n_H$$

(13)

### 1.3.3 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 5a et 5b 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]).

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

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 :

$$\frac{d}{dt} n(H^+) = k_3 n(Cl^+) n(H) - k_4 n(Cl) n(H^+) - k_5 n(H^+) n_e - \alpha n(H^+) n_H = 0 \quad (15)$$

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

$$x = n(H^+)(x) + n(S^+) + n(C^+) \quad (16)$$

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 PAH<sup>3</sup> 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 5a 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 5b).

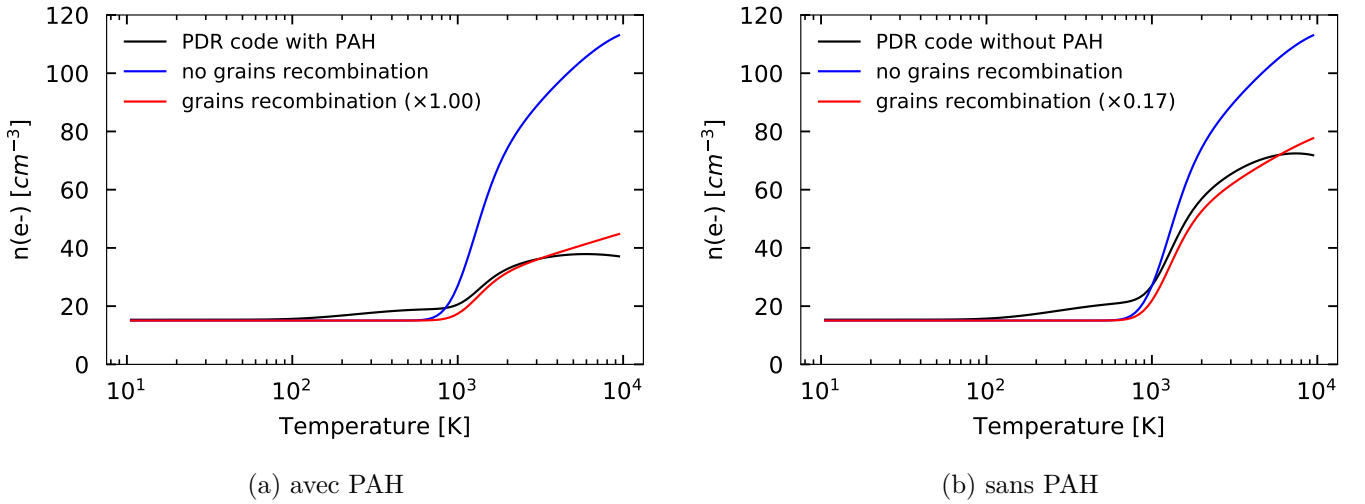


FIGURE 5 – Comparaison des profils de densité d'électrons en fonction de la température. Les courbes en rouge et bleu sont les densités d'électrons obtenue par le modèle semi-analytique tandis que celle en noir représente la densité d'électron calculé par le code PDR. Il est possible dans le code de choisir de prendre en compte ou non les PAH dans le nuage.

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].

## 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 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 [CII]  $158\mu m$ , [OI] $63\mu m$ , [OI] $6300\text{\AA}$  ([Röllig, M. et al., 2006])
- le couplage gaz-grain ([Hollenbach et al., 1991])
- l'émissions Lyman  $H\alpha$  ([Tielens, 2005]).

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

$$\begin{aligned}\Gamma &= \Gamma_{pe}^{net} \\ \Lambda &= \Lambda_{CII\ 158\mu m} + \Lambda_{OI\ 63\mu m} + \Lambda_{OI\ 146\mu m} + \Lambda_{g-g} + \Lambda_{H\alpha}\end{aligned}\tag{17}$$

### 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  $\Gamma_{pe}$ . 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  $\Lambda_{rec}$  [?]. Ces phénomènes dépendent principalement de l'intensité du champs de rayonnement  $\chi$  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] :

$$\Gamma_{pe} = 10^{-24} G_0 n_H \frac{2 \times 10^{-2}}{1 + 2 \times 10^{-4} (G_0 \sqrt{T}/n_e)} \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1}\tag{18}$$

$$\Lambda_{rec} = 3.49 \cdot 10^{-30} T^{0.944} \left( \frac{G_0 \sqrt{T}}{n_e} \right)^{0.735 T^{-0.068}} n_e n_H \quad \text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1}\tag{19}$$

avec  $G_0 = 1.71\chi$ .

### 1.4.2 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] $158\mu m$ , [OI] $62\mu m$  et [OI] $146\mu m$  et celle de [Tielens, 2005], (eq 2.62) pour l'émission  $H\alpha$

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

$$\Lambda_{\text{OI } 63\mu\text{m}} = 3.15 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \times \frac{e^{98/T} 3n_{\text{H}}(n_{\text{H}} + \beta n_{\text{cr01}})}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr01}})(3n_{\text{H}} + 5e^{228/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr12}}))} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (21)$$

$$\Lambda_{\text{OI } 146\mu\text{m}} = 1.35 \cdot 10^{-14} \times 8.46 \cdot 10^{-5} \times n(\text{O}) \times \frac{n_{\text{H}}^2}{n_{\text{H}}^2 + e^{98/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr01}})(3n_{\text{H}} + 5e^{228/T}(n_{\text{H}} + \frac{1}{2}n_{\text{cr12}}))} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (22)$$

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

$$\Lambda_{\text{H}\alpha} = 7.3 \cdot 10^{-19} n_e n_{\text{H}} e^{-118400/T} \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (23)$$

### 1.4.3 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].

$$\Lambda_{\text{g-g}} = 3.5 \cdot 10^{-34} \times \sqrt{T}(T - T_g)n_{\text{H}}^2 \quad \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (24)$$

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

$$T_g = 12.2 G_0^{0.2} \quad \text{K} \quad (25)$$

## 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  $T_{\text{eq}}$ ,  $\frac{d}{dT}(\Gamma - \Lambda)$  est négatif (positif).

On trace sur la figure 6a la courbe de chauffage et de refroidissement d'un bord atomique de nuage résolu par le code PDR. On trace également les courbes obtenues par notre modèle et on remarque qu'elles retrouvent l'emballement de l'effet photo-électrique à partir de 1000 K. Néanmoins, on constate que le calcul de Rollig (eq 18) 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.18) 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 détaillé 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.18, 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.

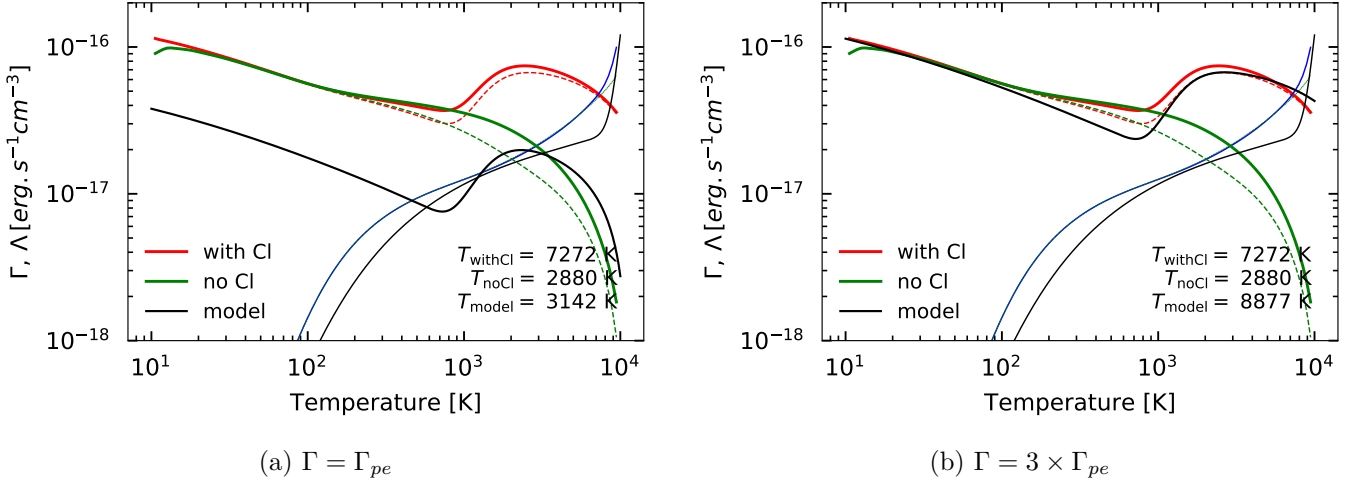


FIGURE 6 – Courbes de chauffage et refroidissement au bord atomique d’un modèle à densité constante ( $n_H = 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi = 10^4$ ). Le trait en pointillé rouge et vert représente l’effet photoélectrique pour le modèle comportant ou non du chlore. Le trait plein est le chauffage total. L’écart entre le trait plein et pointillé est 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.

## 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  $\chi$ ) 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  $\chi$ ). 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 7 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 8 sont calculées grâce au code PDR. La région chauffée par le chlore se réduit seulement aux régions denses et fortement illuminées ( $n_H \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi \geq 10^3$ ). Les régions moins denses ne sont pas aussi chaudes que 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.

Tout d’abord sur la figure 8b, on remarque l’existence d’un point-selle en température vers  $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi = 10^3$  qui est absent de la figure 7. Une analyse de cette région montre que l’augmentation de l’intensité du champs de rayonnement  $\chi$  dans les régions à basse densité accélère la recombinaison des électrons sur

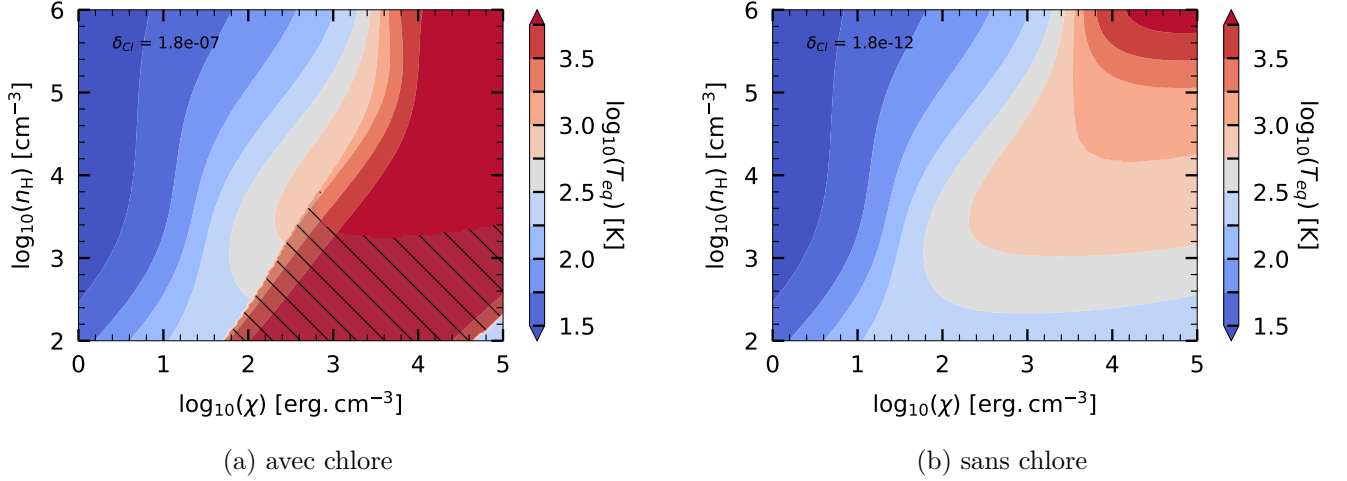


FIGURE 7 – Carte de température prédite par le modèle

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

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 18) et de recombinaisons des électrons sur les grains (eq 19) 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 9a, le code ne trouve que la solution basse température alors qu'il existe une solution chaude proche de 9000 K. Il peut arriver que le code saute d'une branche de solution à une autre comme c'est le cas sur le profil de température de la figure ???. 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 9b qui est un modèle dense ( $n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ,  $\chi = 10^{4.5}$ ) que l'effet photoélectrique est négligeable devant le chauffage par  $H_2$ .

## 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 8). En traçant les spectres d'émission donnés par le code nous constatons que les raies N,  $N^+$ , S, Si sont modifiées par la solution chaude (figure 10). La présence du chlore augmente les raies du N,  $N^+$  et Si d'un facteur 10 et du S d'un facteur 100. Bien que le chlore intensifie de manière

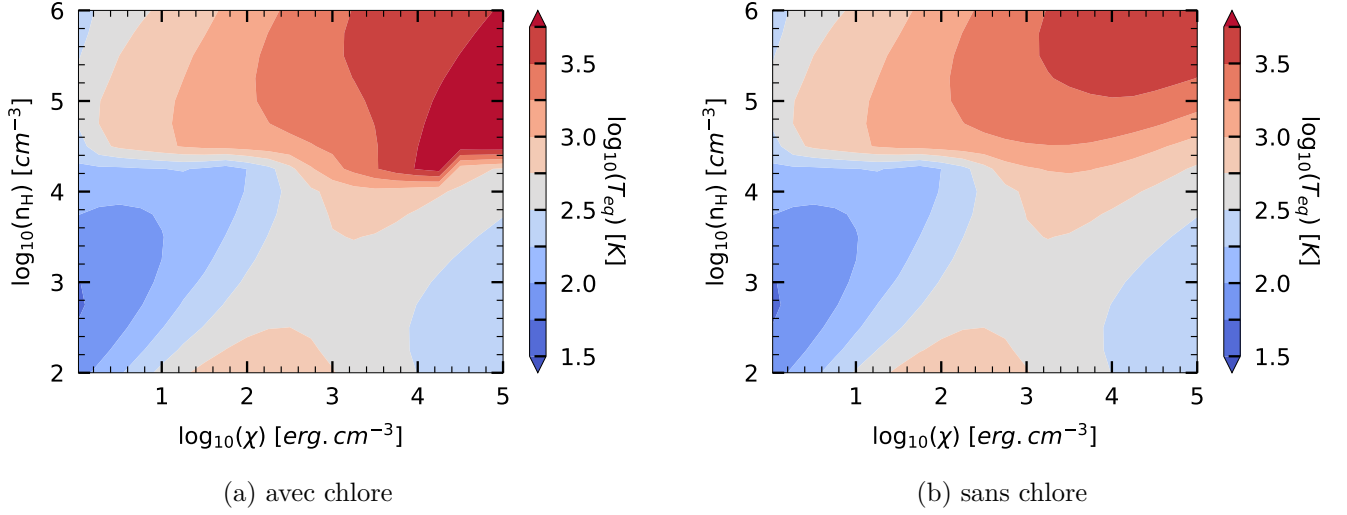


FIGURE 8 – Température en bord atomique de nuage calculé par le code PDR de Meudon

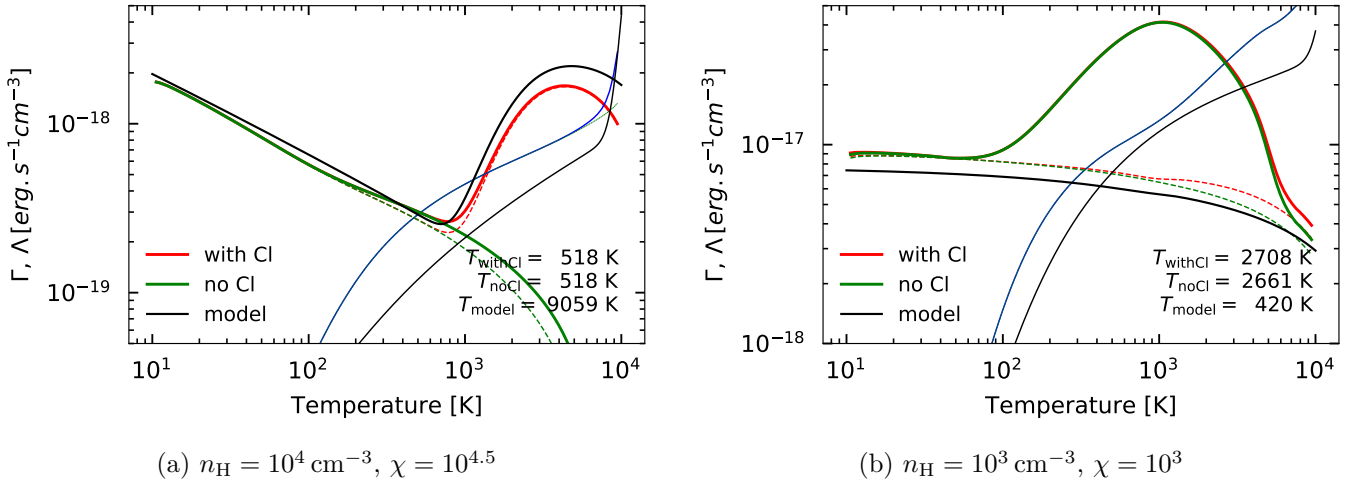


FIGURE 9 – Courbes de chauffage et refroidissement, au bord atomique de nuage, de modèles résolus par le code PDR de Meudon. Mêmes règles de couleurs que dans la figure 6a.

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<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>, ne sont pas affectées par la présence de chlore dans le nuage (figure 28) car il agit dans la zone atomique du nuage où les molécules ne sont pas formées.

### 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 observée depuis la Terre par MUSE.



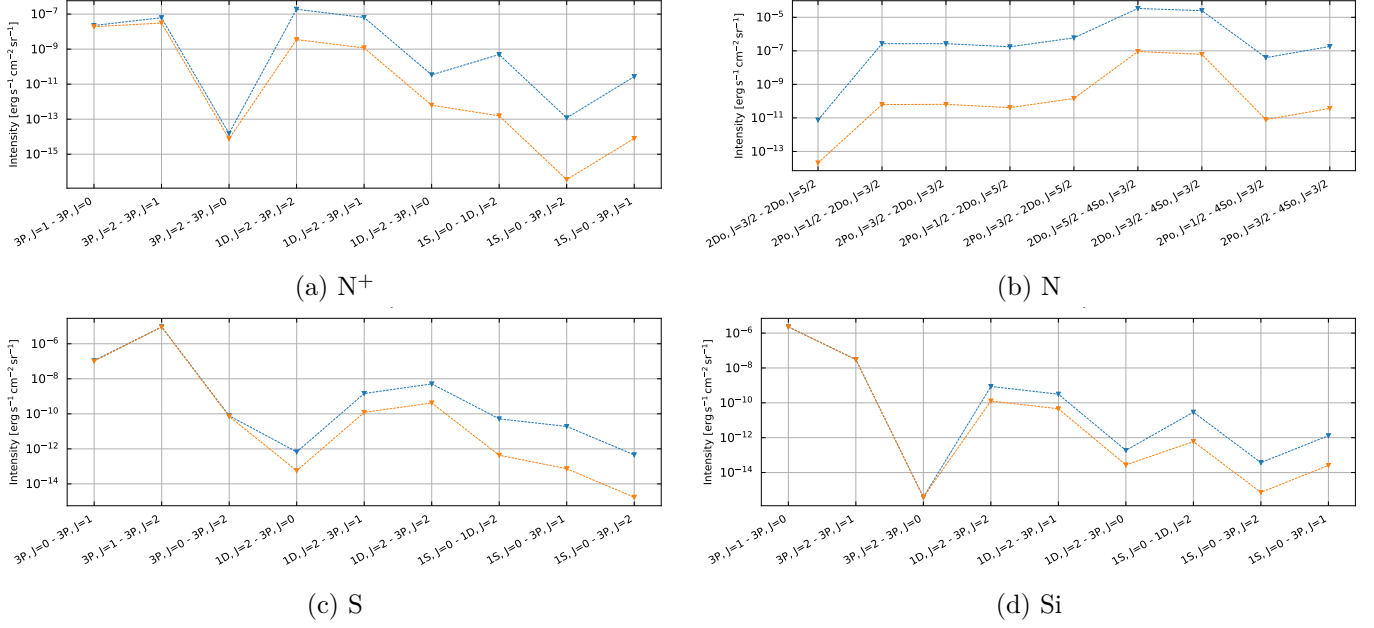


FIGURE 10 – Diagramme d'intensité des traceurs modifiés par l'ajout du chlore.

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.

La figure 11 représente le rapport d'intensité de la raie  $[N] 5200\text{\AA}$  des grilles de modèle contenant du chlore ou ne contenant pas de chlore. On constate que les régions dont les bords atomiques qui subissent l'emballlement de l'effet photoélectrique (figure 8) ont des intensités de raies jusqu'à  $10^6$  fois plus grande. Tenter d'observer cette raie permettrait a 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 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.

## 2 Réduction de l'énergie d'activation des réactions avec $H_2$

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

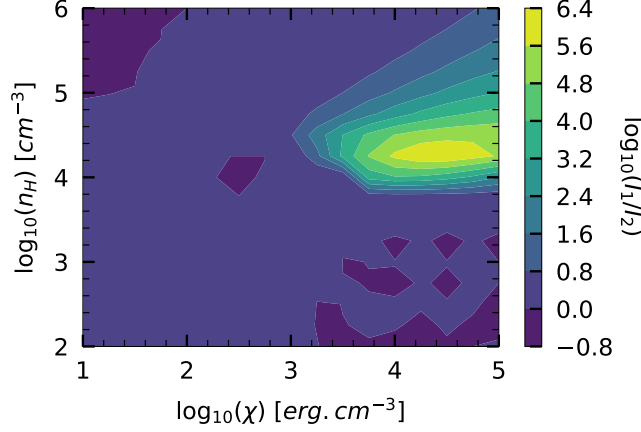


FIGURE 11 – Rapport des intensités de grilles de modèles contenant, ou non, du chlore a refaire + schéma des front de ionisations + aller jusqu'à  $10^0$

[Joblin, C. et al., 2018],  $H_2$  ou  $H_2O$ . C'est un phénomène déjà bien connu pour la formation du  $CH^+$  (eq 26) [Herráez-Aguilar et al., 2014, Zanchet et al., 2013].



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

Les différences les plus importantes que l'on observe sur les spectres d'émissions sont pour la molécule du CO (figure 12), du  $H_2$  (figure 29) et  $H_2O$  (figure 30). Or, on sait jusqu'à présent que le CO est principalement formé à partir du  $CH^+$  et que le calcul précis du taux de formation du  $CH^+$  par le  $C^+$  (eq. 26) est déjà connu dans le code. L'analyse de la chimie montre que la voie de formation du CO par OH est devenue efficace ce qui contribue à former davantage de CO ( $\times 10$ ) et à intensifier ses raies. Le schéma 13 rassemble les réactions servant à former la molécule. Par ailleurs, la découverte de cette nouvelle voie de formation par OH est un résultat important.

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  $H_2O$  ( $\times 10$ ) ainsi que ses raies d'émissions (figure 30). 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 ( $\times 2$ ) <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 permis de découvrir une nouvelle voie de formation du CO et de déceler d'autres espèces susceptibles de réagir avec le  $H_2$  comme N. Enfin, on a montré qu'une connaissance plus fine de la chimie

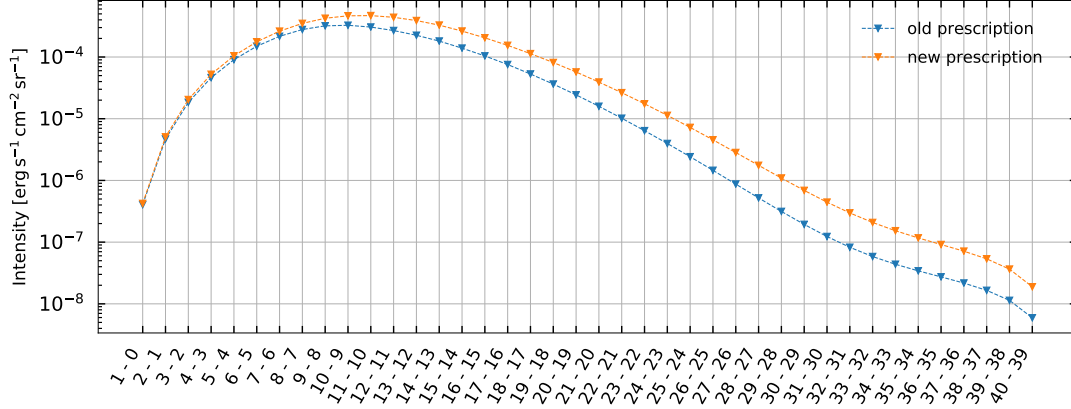


FIGURE 12 – Diagramme d’intensité du CO avec la nouvelle prescription  
Seules les transitions rotationnelles du CO ont été écrites (toutes s’effectuent à  $v = 0$ ). Un modèle isobare a été choisi ( $P = 2.8 \cdot 10^8 \text{ cm}^3 \text{ K}$  et  $\chi = 3.1 \cdot 10^4$ ).

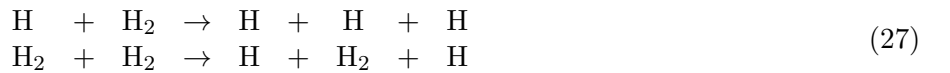
FIGURE 13 – Réseau de formation du CO

impliquant la molécule  $\text{H}_2$  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 $\text{H}_2$

#### 3.1 Dissociation collisionnelle du $\text{H}_2$ (de Janev à Glover)

La destruction du  $\text{H}_2$  dans les nuages interstellaire s’effectue soit par photodissociation soit par réactions chimiques. Les dissociations collisionnelles (eq. 27) sont des réactions de destruction du  $\text{H}_2$  mal connues alors qu’elles interviennent dans du gaz chaud, ce qui est le cas du bord atomique de la PDR jusqu’à la transition  $\text{H}/\text{H}_2$ .



Il existe plusieurs prescriptions qui tentent d’estimer les valeurs des taux de dissociation collisionnelle du  $\text{H}_2$  (eq 27) en fonction de la température et des niveaux de la molécule. Connaître leurs taux de réaction est important car ils changent la densité de  $\text{H}_2$  à travers le nuage ce qui a un impact sur le chauffage par  $\text{H}_2$  et donc la température du gaz. Deux prescriptions possibles ont été retenue dans le code : celle de Glover et Mac Low [Glover and Mac Low, 2007] et celle de Janev [Janev et al., 2003]. Par ailleurs on a constaté que la prescription de Glover calcule des taux de dissociation très faible 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  $n_{\text{H}}$  et le champ de rayonnement de l’étoile proche  $\chi$ ). On représente une donnée - la température au bord de nuage, la température et l’ $A_{\text{v}}$  de la transition  $\text{H}/\text{H}_2$  ou le processus thermique

dominant au bord du nuage - à travers la grille et étudions quelques modèles particuliers afin de comprendre profondément les changements sur le code. On étudie d'abord des modèles à densités constantes qui sont plus 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  $n_H T = \text{cte}$ ).

### 3.1.1 Grilles de modèles - Bord atomique

Sur la figure 14, la température en bord de nuage atomique est représentée. On constate qu'elle est sensiblement similaire selon que l'on utilise la prescription de Janev ou de Glover à l'exception des PDR denses et fortement illuminées ( $n_H \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi \geq 10^3$ ) qui sont légèrement plus chaudes. En visualisant sur la figure 15a la différence des cartes de température, on comprend que la prescription de Glover a tendance à chauffer les bords atomiques de l'ensemble des PDR de +200 K et peut augmenter la température jusqu'à +800 K pour les PDR denses et fortement illuminées.

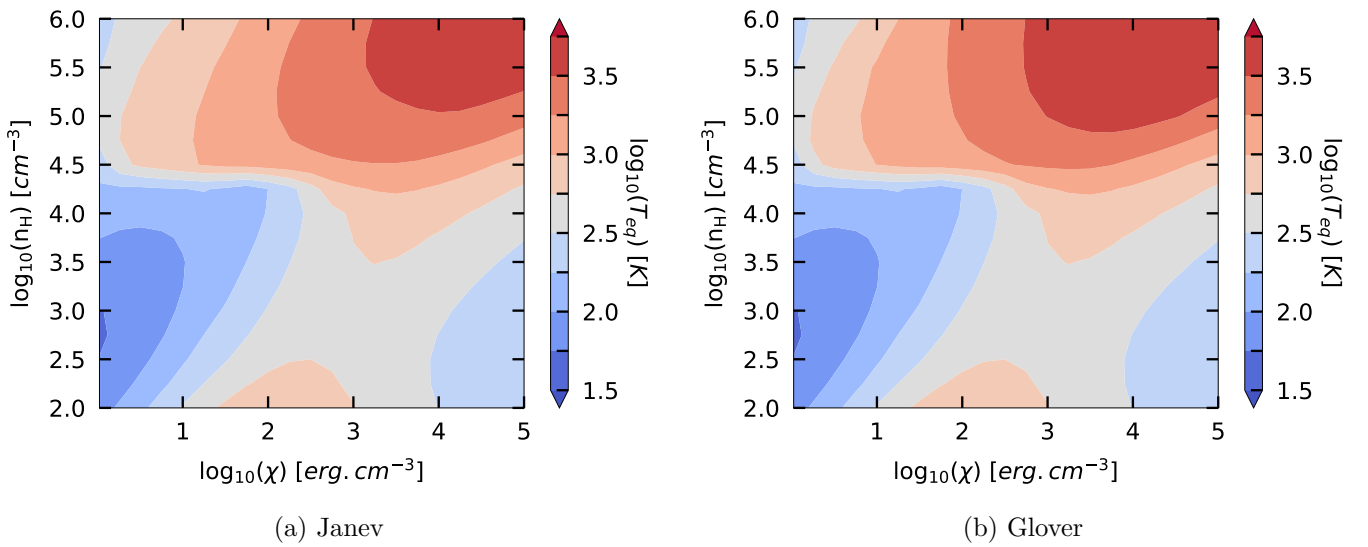
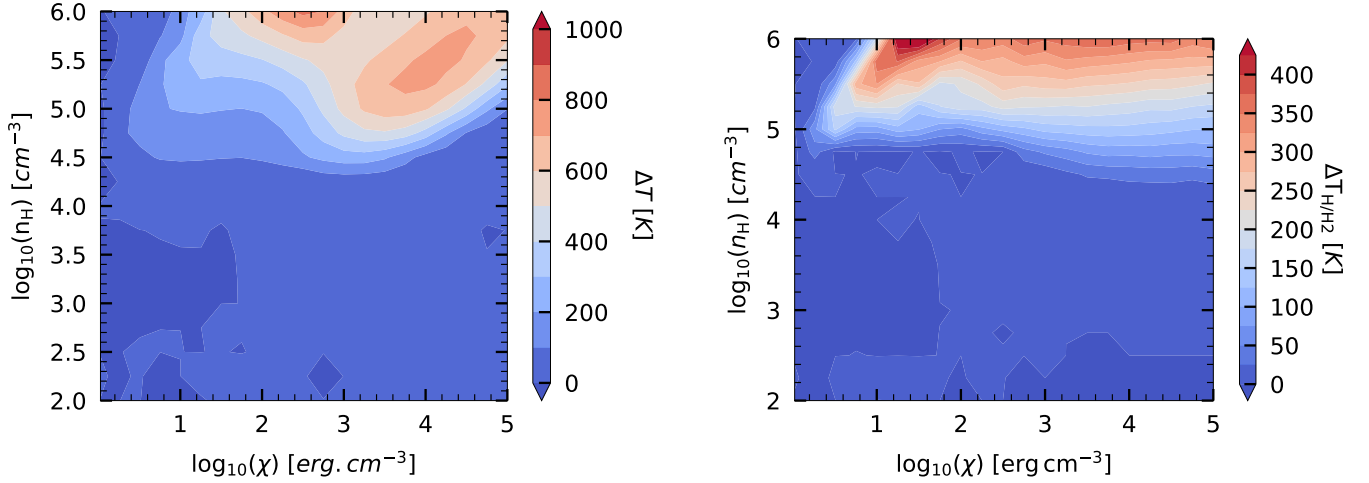


FIGURE 14 – Comparaison des température en bord atomique de nuage pour des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

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

On constate sur la figure 16 que le chauffage par  $H_2$  reste dominant dans les bords atomique des PDR denses quelque soit la prescription que l'on utilise. En revanche, les processus de refroidissements (figure 17) varient pour les PDR denses et faiblement illuminées ( $n_H \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi \leq 10^3$ ). L'utilisation des taux de dissociation de Glover tue le refroidissement par les réactions chimiques ce qui est normal car les réactions de dissociation du  $H_2$  (eq 27) sont des réactions endothermiques très efficaces.



(a) Différence de température au bord

(b) Différence de température à la transition H/H<sub>2</sub>

FIGURE 15 – Différence de température aux bords de nuage et aux transitions H/H<sub>2</sub> de modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover (les cartes ne sont pas en harmonie)

### 3.1.2 Grilles de modèles - Transition H/H<sub>2</sub>

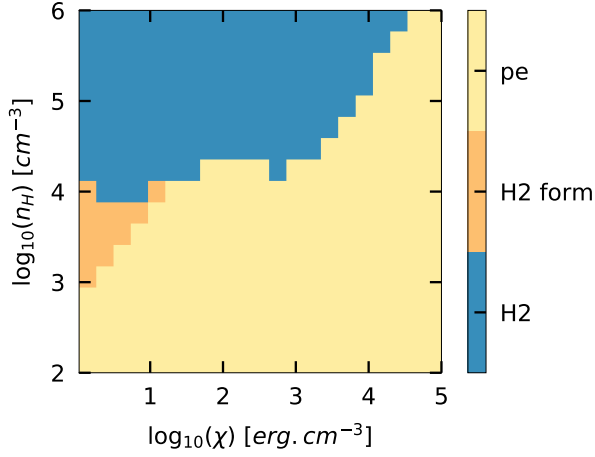
La transition H/H<sub>2</sub> marque la frontière entre le milieu atomique et moléculaire du nuage. Elle survient une fois que le H<sub>2</sub>, jusqu'à là détruit dans la zone atomique par les photons UV, parvient à se former en suffisamment grande quantité pour que l'hydrogène soit majoritairement 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/H<sub>2</sub> ont un impact sur les observables puisque que c'est dans la phase moléculaire que de nombreux traceurs tels que le H<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>O ou HCN se forment et sont excités (par...le H<sub>2</sub> excité ou les grains?).

Les figures 18 et 19 montrent les températures et les  $A_v$  des transitions de chaque modèles. Alors que la position de la transition dans le nuage reste sensiblement identique (figure 19) en passant de la prescription de Janev à celle de Glover, la température dépasse le seuil limite de 600 K et atteint les 1000 K (figure 18).

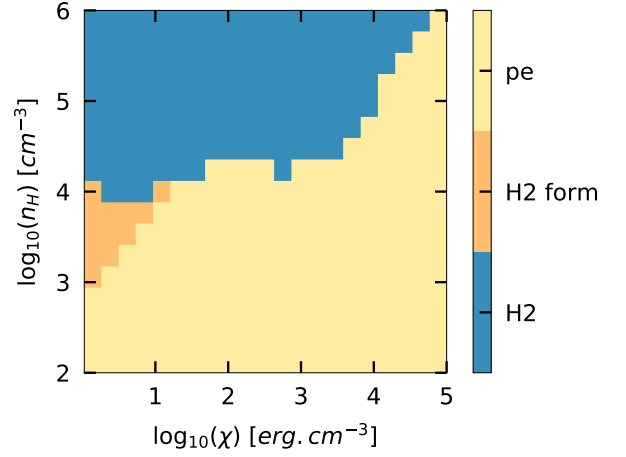
### 3.1.3 Etude d'un modèle particulier

On cherche à comprendre dans cette section pourquoi la température à la transition H/H<sub>2</sub> 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 20a) montre immédiatement une augmentation locale de la température - une bosse - commençant à un  $A_v \approx 0.1 \text{ mag}$  et finissant à  $A_v \approx 0.4 \text{ mag}$  accompagnée d'une augmentation de la densité de H<sub>2</sub>.

La figure 21 trace les taux de chauffages en fonction de l'extinction. On constate, qu'avec la prescription de Glover, les réactions chimiques chauffent le gaz de manière aussi intense que l'effet photoélectrique ce qui peu commun dans les PDR. Afin de comprendre l'origine de la bosse de température, on a tracé à  $A_v \approx 0.2 \text{ mag}$ , soit au milieu de la bosse, les courbes de chauffages et de refroidissements en fonction de la température (figure 22). L'équilibre thermique du gaz est déterminée par l'intersection de la courbe de chauffage et de refroidissement total. A première vue, les allures des courbes sont très différentes. En passant



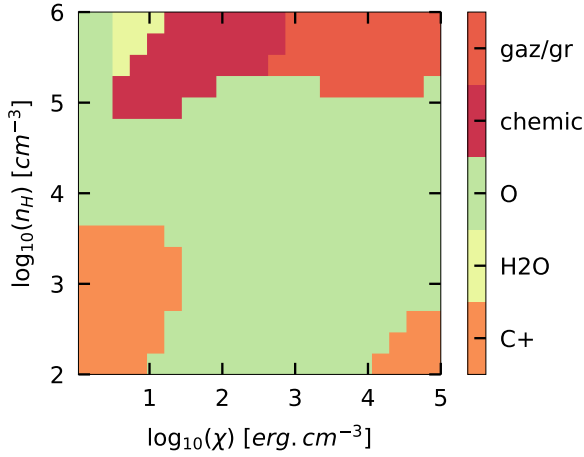
(a) Janev



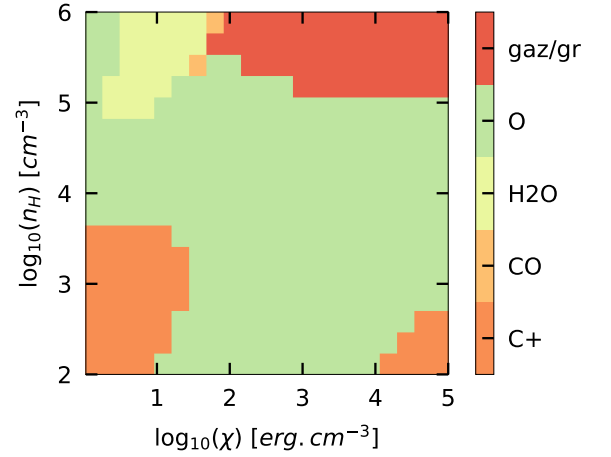
(b) Glover

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

Le chauffage par effet photoélectrique sur les grains est désigné ici sous l'abréviation "pe". "H2" désigne le chauffage par pompage UV de la molécule H<sub>2</sub> et "H2 form" la formation de la molécule sur les grains.



(a) Janev



(b) Glover

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

Les noms "O", "H<sub>2</sub>O", "CO" et "C<sup>+</sup>" désignent des processus de refroidissement par désexcitation collisionnelles des espèces O, H<sub>2</sub>O, CO et C<sup>+</sup> 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.

de la prescription de Janev à celle de Glover, on voit qu'un nouveau processus de chauffage intervient entre 100 K et 1000 K. Il s'agit des réactions chimiques qui se mettent à chauffer le gaz de manière plus efficace (figure 23).

Une étude préliminaire montre que la recombinaison électronique du CH<sub>3</sub><sup>+</sup> 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<sub>2</sub> permettant de rendre le bilan d'exothermicité des réactions chimiques positif et de former plus facilement du H<sub>2</sub> qui va devenir un agent refroidissant efficace. On le

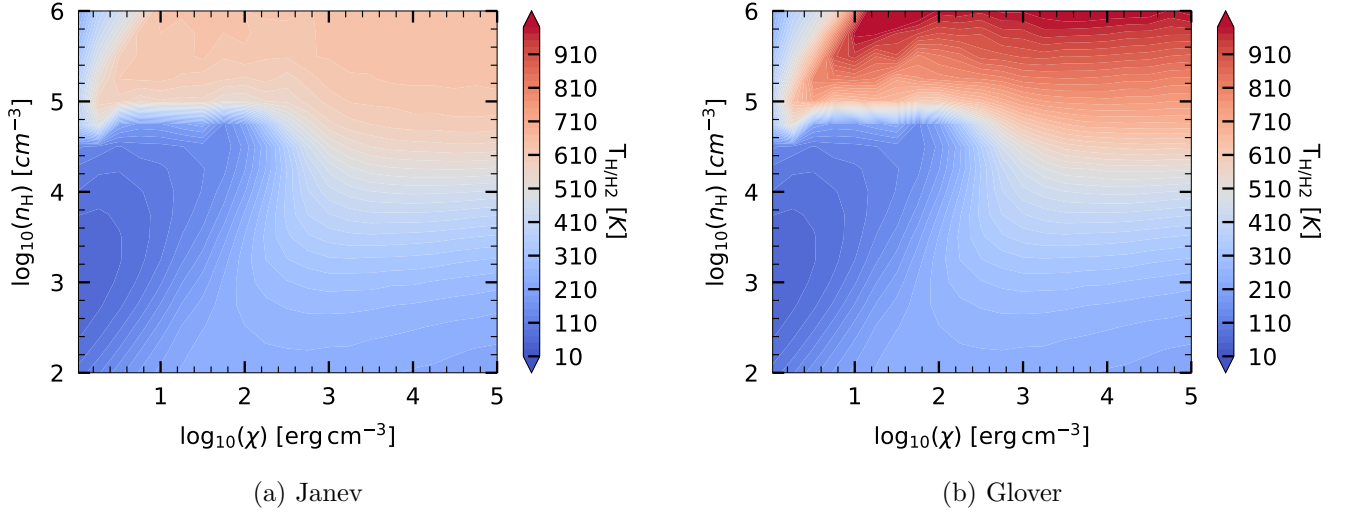


FIGURE 18 – Comparaison des température à la transition H/H<sub>2</sub> des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

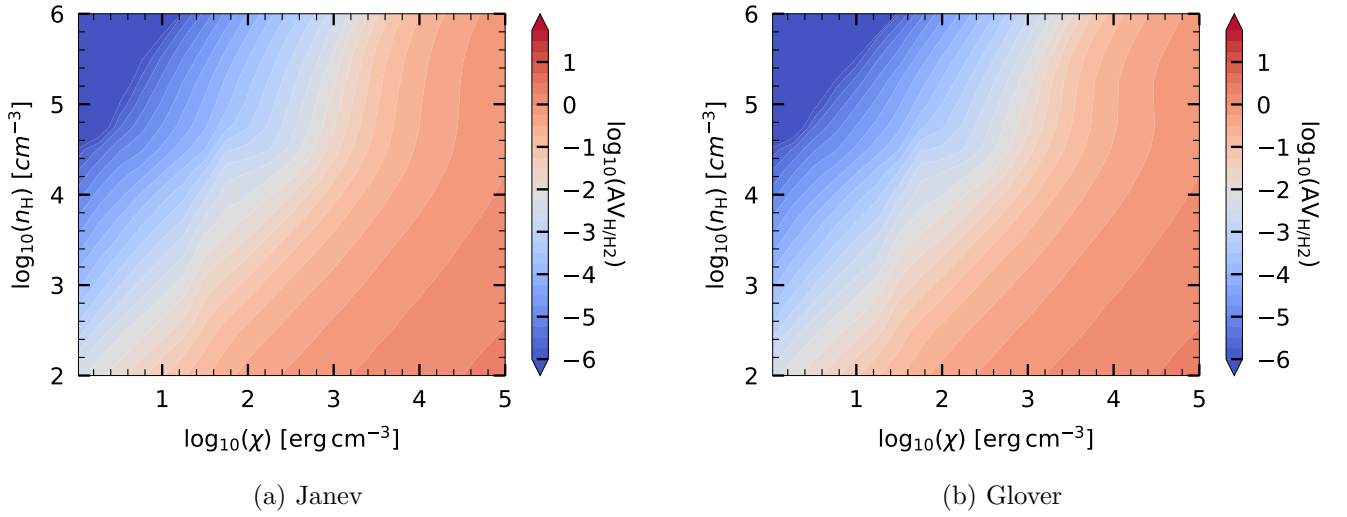


FIGURE 19 – Comparaison des  $A_v$  de la transition H/H<sub>2</sub> des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

visualise simplement sur la figure 22.

L'augmentation de température est provoquée par le changement d'allure de la courbe de refroidissement total ce qui déplace le point d'équilibre vers des températures plus chaudes. La conséquence immédiate de cette bosse de température s'observe sur les diagrammes d'intensité du CO (figure 24). Les raies  $8 \leq J \leq 15$  doublent leur intensités tandis que les raies  $J \geq 15$  augmente d'un facteur 10 ce qui est important. <phrase sur la transition C+/C/CO ?>. On constate enfin que cette augmentation locale de température impacte les raies d'émissions du CO des PDR denses.

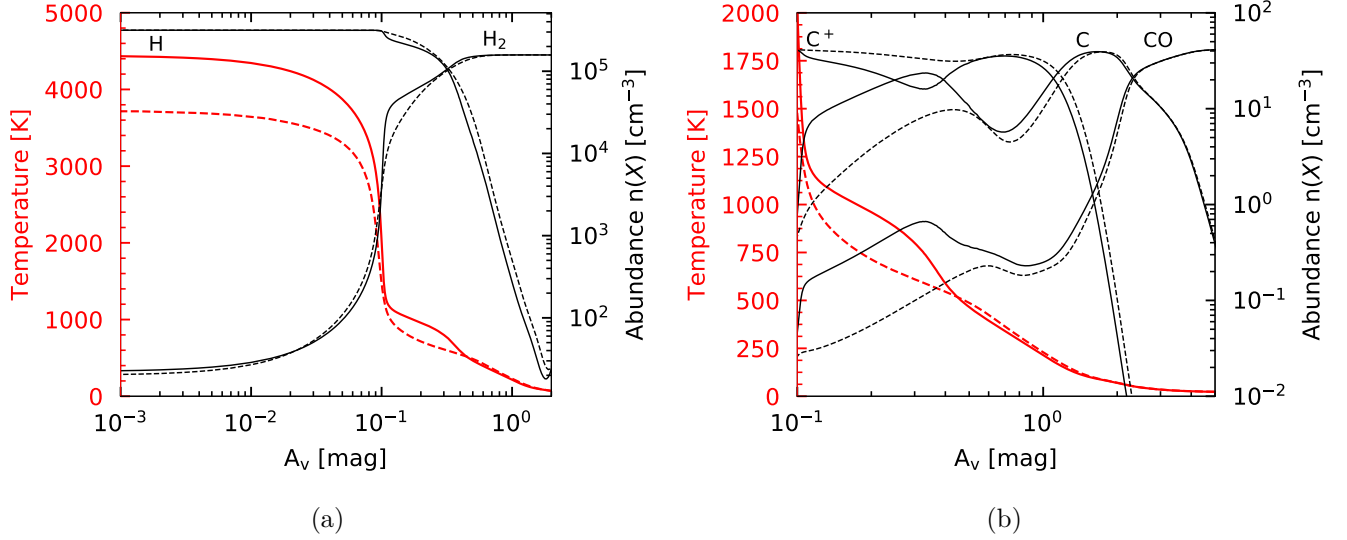


FIGURE 20 – Profils de densités de H et H<sub>2</sub> (a) et C<sup>+</sup>, C et CO (b) d'un modèle à densité constante ( $n_{\text{H}} = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ). Le trait plein correspond au calcul utilisant la prescription de Glover et les trait pointillés celle de Janev.

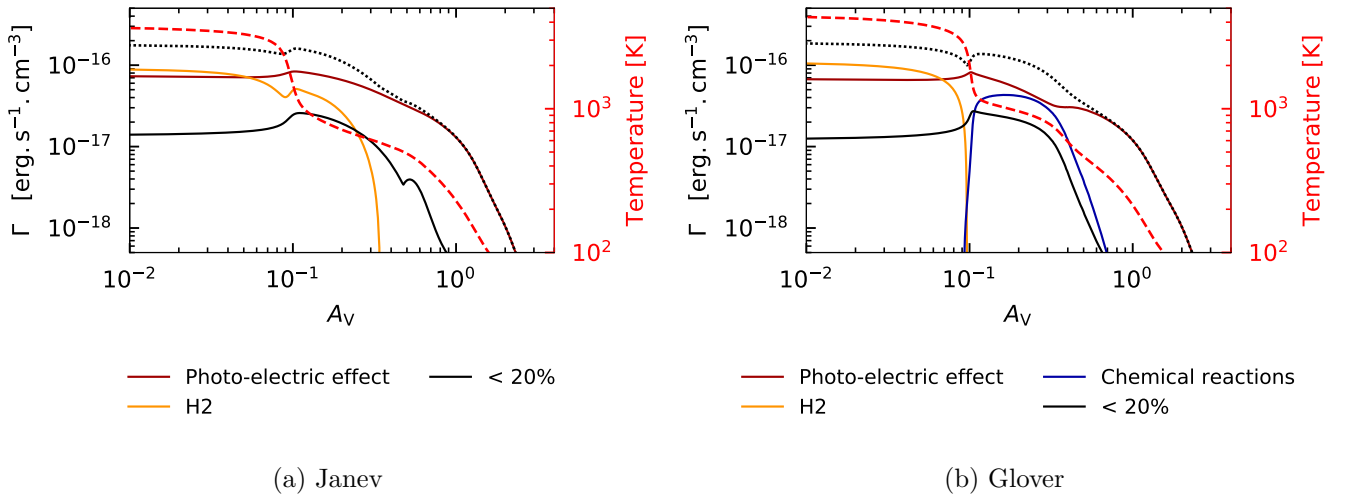
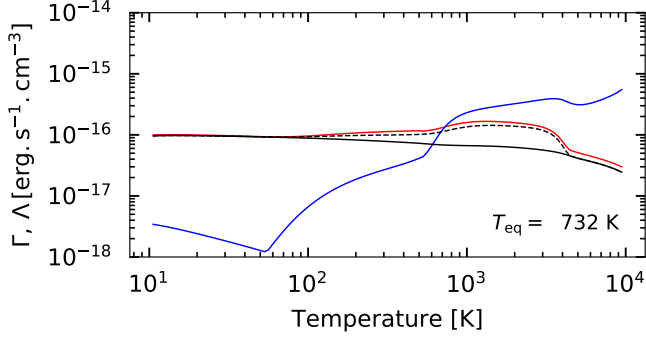


FIGURE 21 – (ANNEXE) Profils des taux de chauffages d'un modèle à densité constante ( $n_{\text{H}} = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ) utilisant la prescription de Janev ou de Glover. La température (axe de droite) est représentée en tiret rouge. Le taux de chauffage total est en pointillé noir.

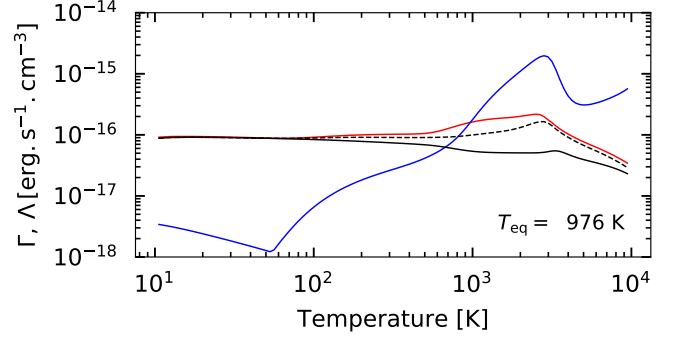
### 3.1.4 Chauffage par exothermicité des réactions chimiques

## Conclusion

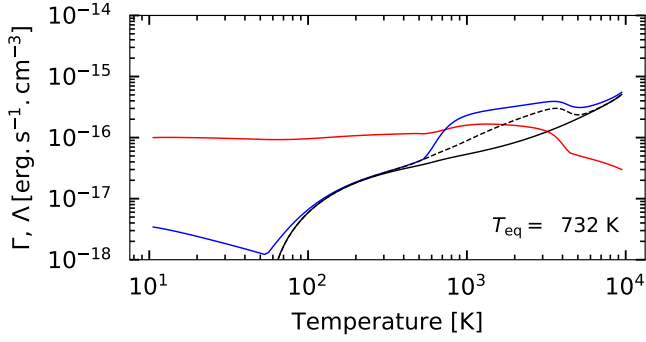




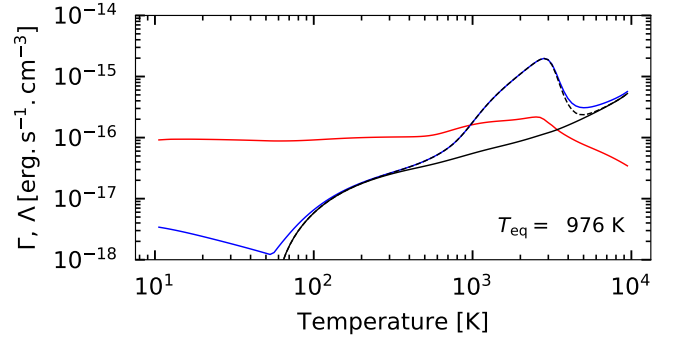
(a) Janev



(b) Glover



(c) Janev



(d) Glover

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

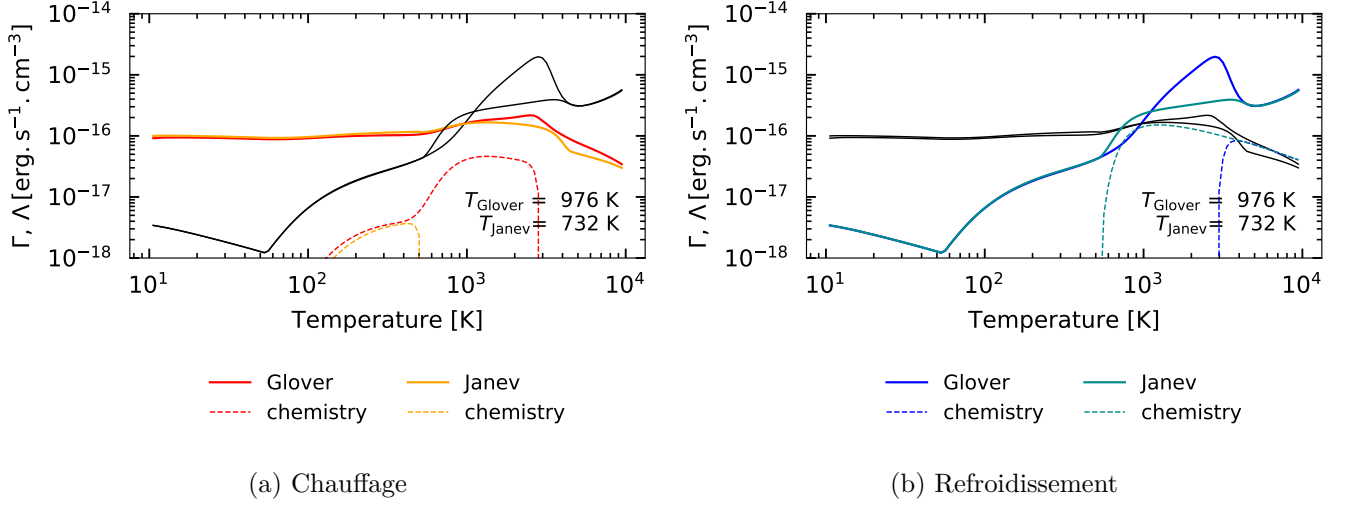


FIGURE 23 – Efficacité du chauffage des réactions chimiques en fonction de la température pour un modèle à densité constante ( $n_H = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ). Les courbes en rouge et jaune sur la figure (a) représentent les processus de chauffage tandis que celles en noires les courbes de refroidissement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

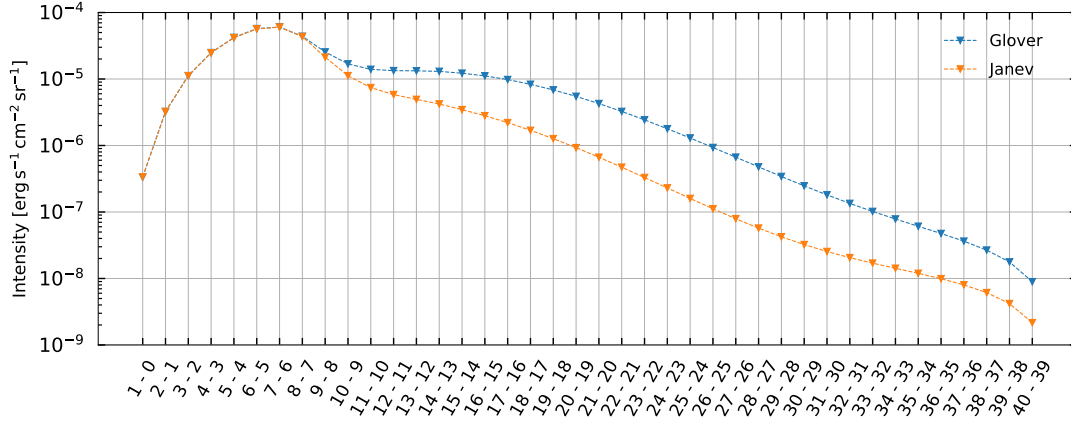


FIGURE 24 – Raies d'émissions du CO pour un modèle à densité constante ( $n_H = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ) utilisant la prescription de Glover ou bien celle de Janev. Les transitions écrites sur l'axe des abscisses signifient les transitions des niveaux rotationnels de la molécule CO.

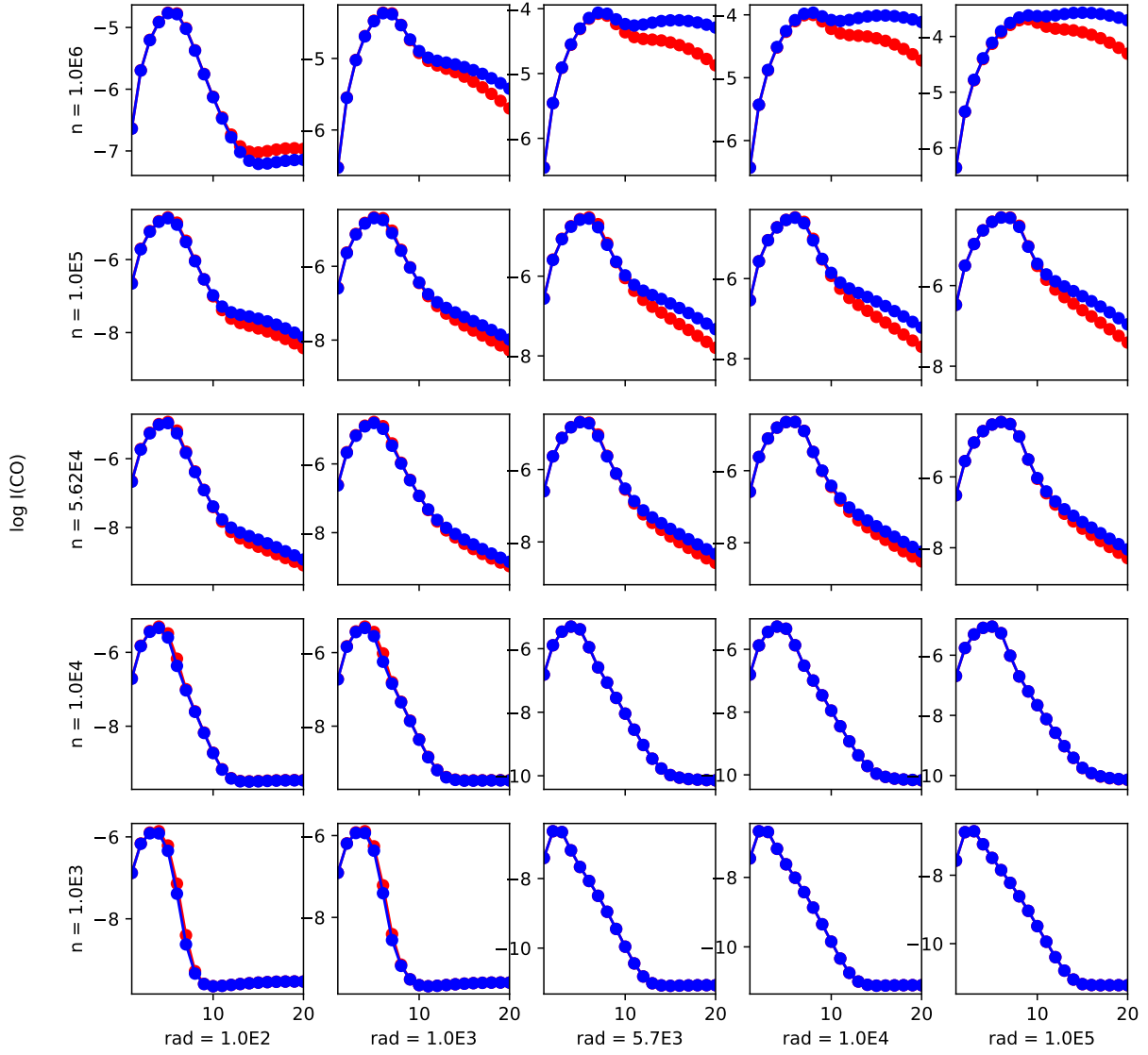


FIGURE 25 – Raies d'émissions du CO pour une grille de à densité constante. Les lignes en rouge sont les modèles utilisant la prescription de Janev tandis que celles en bleues utilisent la prescription de Glover. Les 20 premières transitions sont représentées.

## Références

- [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.
- [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  $\text{c} + \text{h}_2$  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 hercules observations of high-j co emission lines. A&A, 615 :A129.
- [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.
- [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).  $\text{H}_2(v = 0,1) + \text{C}^+(\text{}^2\text{P}) \rightarrow \text{H} + \text{CH}^+$  State-to-state Rate Constants for Chemical Pumping Models in Astrophysical Media. , 766(2) :80.

# Appendices

## A Impact du chlore

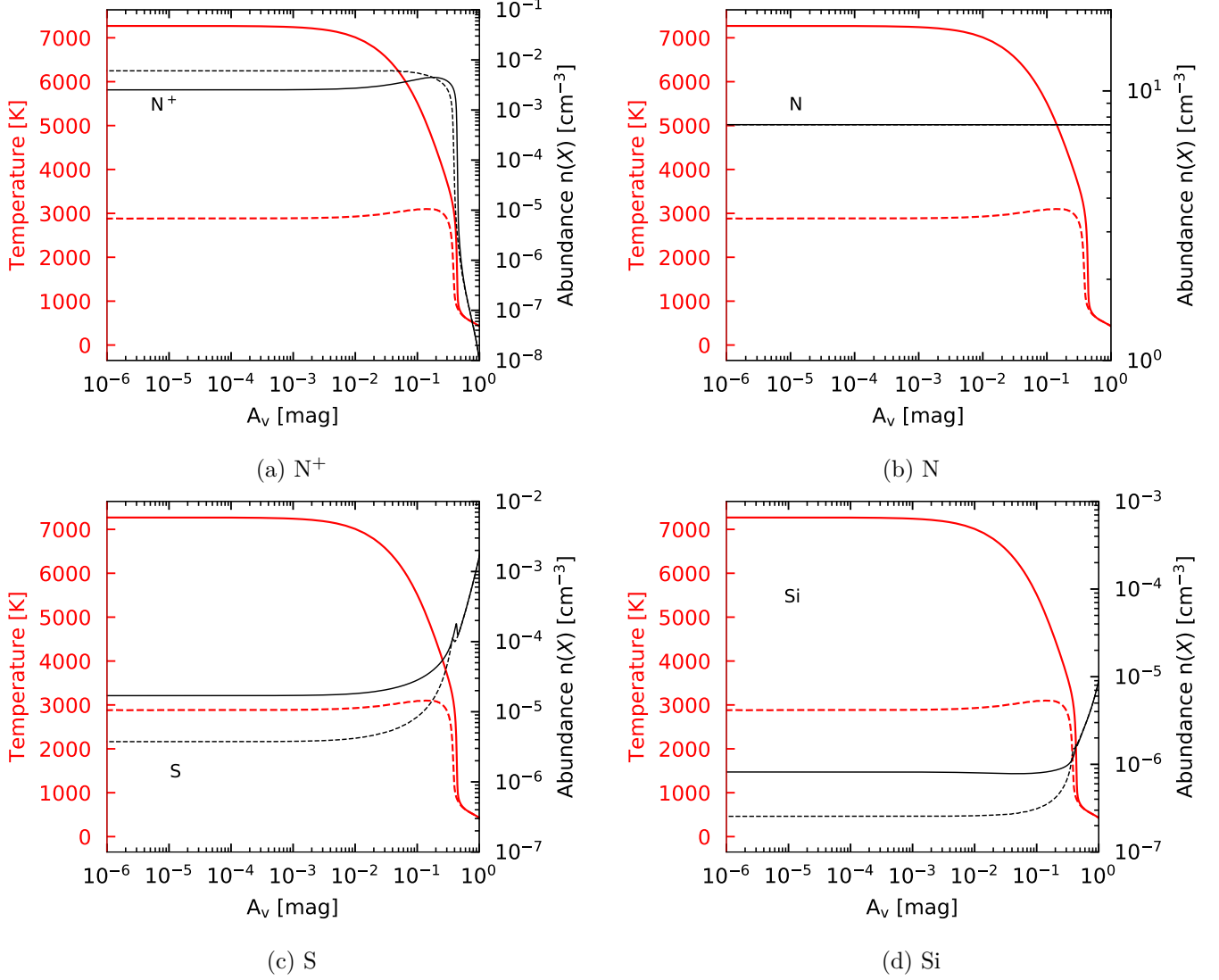
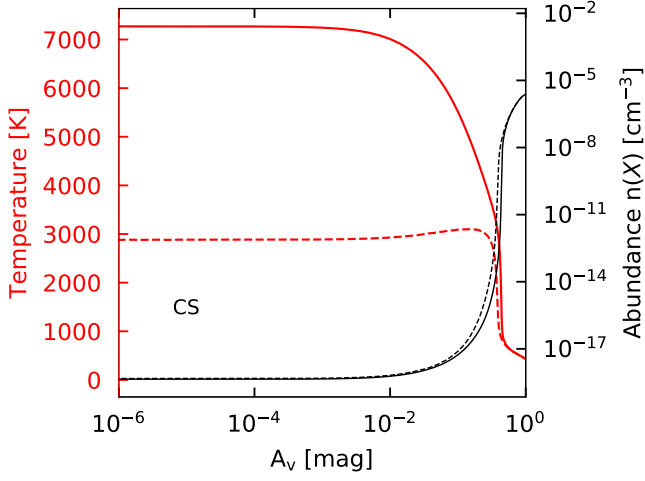
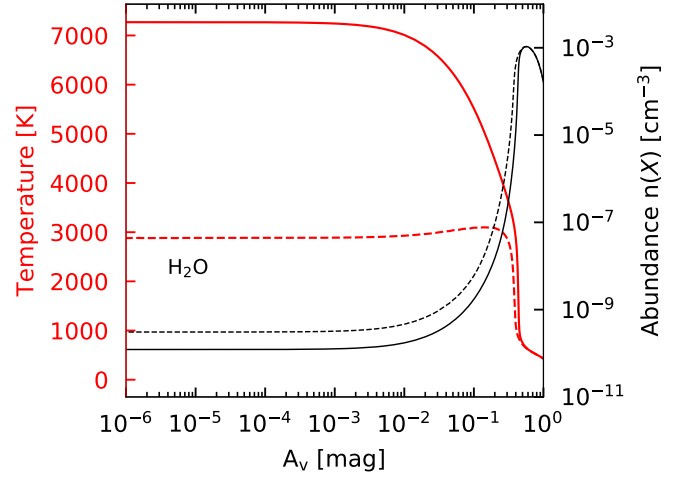


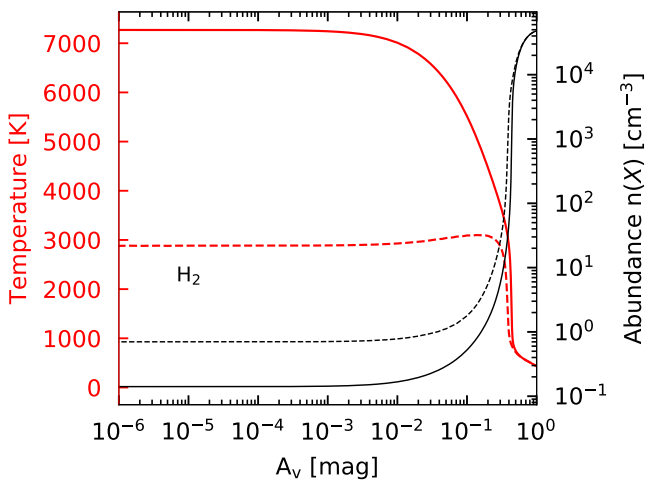
FIGURE 26 – (ANNEXE) Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore. Il est représenté en trait plein les profils du modèle avec le chlore et en trait pointillé le modèle ne contenant pas de chlore. La température est en rouge et la densité en noir.



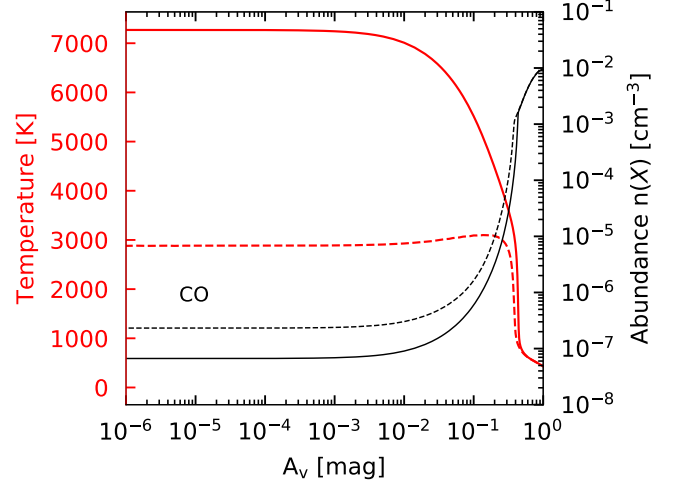
(a) CS



(b) H<sub>2</sub>O

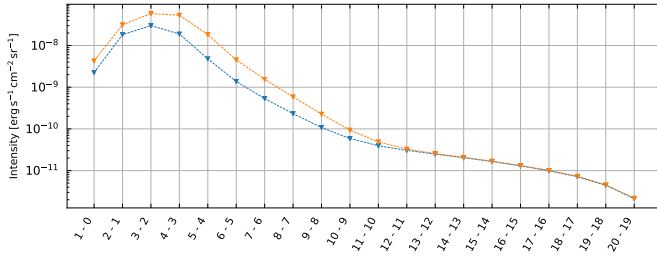


(c) H<sub>2</sub>

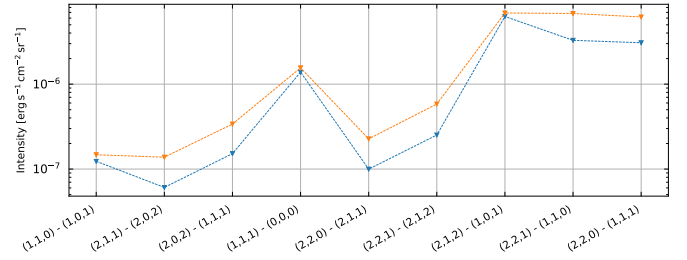


(d) CO

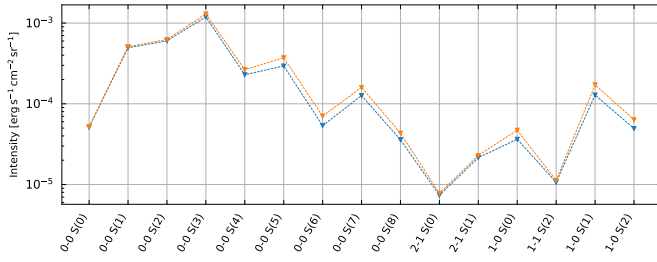
FIGURE 27 – ((ANNEXE) Profils de densité des traceurs impactés par l'ajout du chlore. Mêmes conventions que pour la figure 26.



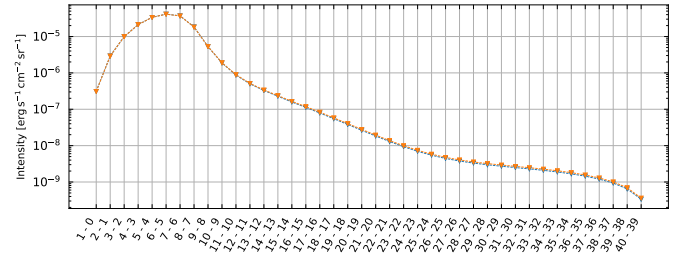
(a) CS



(b) H<sub>2</sub>O



(c) H<sub>2</sub>



(d) CO

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



## B H<sub>2</sub> excité

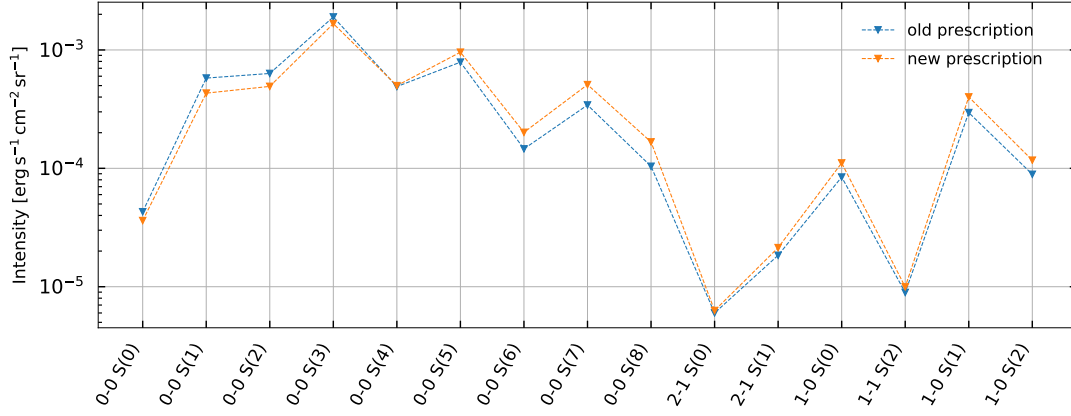


FIGURE 29 – Diagramme d'excitation du H<sub>2</sub>

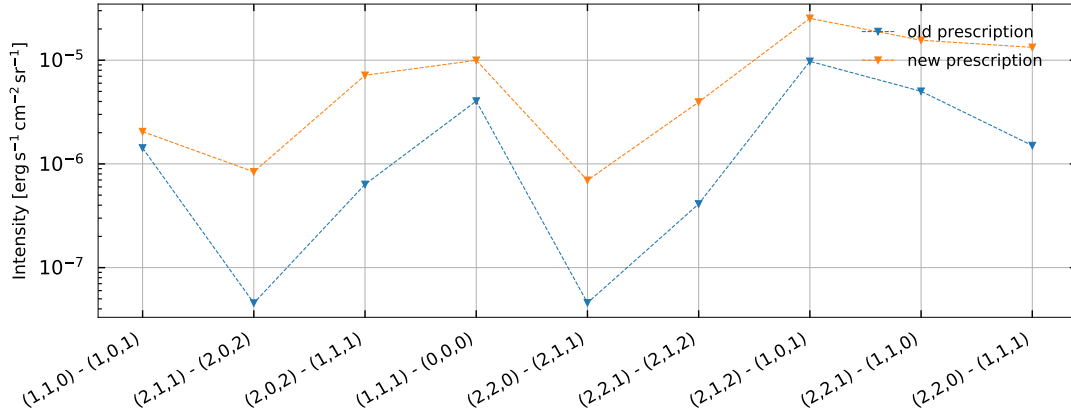


FIGURE 30 – Diagramme d'excitation du H<sub>2</sub>O