

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>I) Amplification de l'effet photoelectrique par le chlore</b>	<b>3</b>
I-1) Neufeld and Wolfire . . . . .	3
I-1-a) Profil des espèces dérivés du chlore . . . . .	3
I-1-b) $\text{radm}$ et $\text{ladm}$ . . . . .	4
I-1-c) run sur d'autres modèles . . . . .	4
I-2) Analyse du rôle du chlore . . . . .	4
I-3) Modèle analytique - Chimie . . . . .	5
I-3-a) Ion hydrogène . . . . .	5
I-3-b) Ion chlore . . . . .	6
I-3-c) Recombinaison de $\text{H}^+$ sur les grains . . . . .	6
I-4) Modèle analytique - Thermique . . . . .	7
I-4-a) Effet photoélectrique sur les grains . . . . .	8
I-4-b) Couplage gaz-grains . . . . .	8
I-4-c) Refroidissement par les raies d'émissions du $\text{C}^+$ et de $\text{O}$ . . . . .	8
I-4-d) Emission Lyman $\text{H}\alpha$ . . . . .	9
I-4-e) Recombinaison des électrons sur les grains . . . . .	9
I-5) Correction de l'effet photoélectrique par le code . . . . .	10
I-6) Prédiction de la température au bord de nuage . . . . .	10
I-6-a) Carte de température au bord du nuage . . . . .	11
I-7) A la recherche d'observables . . . . .	12
I-7-a) Choix de la raie $[\text{N}] \ 5200\text{\AA}$ . . . . .	13
I-8) Bonus . . . . .	14
I-8-a) Chauffage à l'entrée du nuage moléculaire . . . . .	14
<b>II) Molécule <math>\text{H}_2</math></b>	<b>19</b>
II-1) Construction d'un modèle . . . . .	19
II-1-a) Chauffage net par Rollig (1995) . . . . .	19
II-1-b) Chauffage par désexcitation collisionnelle . . . . .	19
II-1-c) Refroidissement par émission de photons . . . . .	19
II-1-d) Bialy et Sternberg (2019) . . . . .	19
II-1-e) Chauffage par photodissociation . . . . .	20
II-1-f) Absorption du rayonnement . . . . .	20
II-1-g) Extinction par les grains . . . . .	20
II-1-h) Comparaison avec le code PDR de Meudon . . . . .	20
II-2) Dissociation collisionnelle du $\text{H}_2$ (de Janev à Glover) . . . . .	21
II-2-a) Grilles de modèles - Bord atomique . . . . .	21
II-2-b) Grilles de modèles - Transition $\text{H}/\text{H}_2$ . . . . .	22
II-2-c) Etude d'un modèle particulier . . . . .	24

# I) Amplification de l'effet photoelectrique par le chlore

## I-1) Neufeld and Wolfire

### I-1-a) Profil des espèces dérivés du chlore

Les réseaux d'astrochimie de PDR ont tendance à négliger le chlore qui a une abondance mineure dans les nuages. Or des espèces dérivées du chlore ont été observées en absorption dans des nuages diffus ( $n \sim 10^2 \text{ cm}^{-3}$ ). Des raies de  $\text{H}_2\text{Cl}^+$ ,  $\text{HCl}$  et  $\text{HCl}^+$  excitées ont également été observées par Herschel dans plusieurs sources de la Galaxie et notamment dans le nuage moléculaire de la barre d'Orion [Neufeld et al., 2012, Neufeld and Wolfire, 2009]. On a tout d'abord cherché à reproduire les résultats de [Neufeld and Wolfire, 2009]. On a ajouté un nouveau fichier de chimie au code comportant les réseaux chimiques du Cl et du F et on a résolu une PDR avec les mêmes conditions physiques de l'article (1).

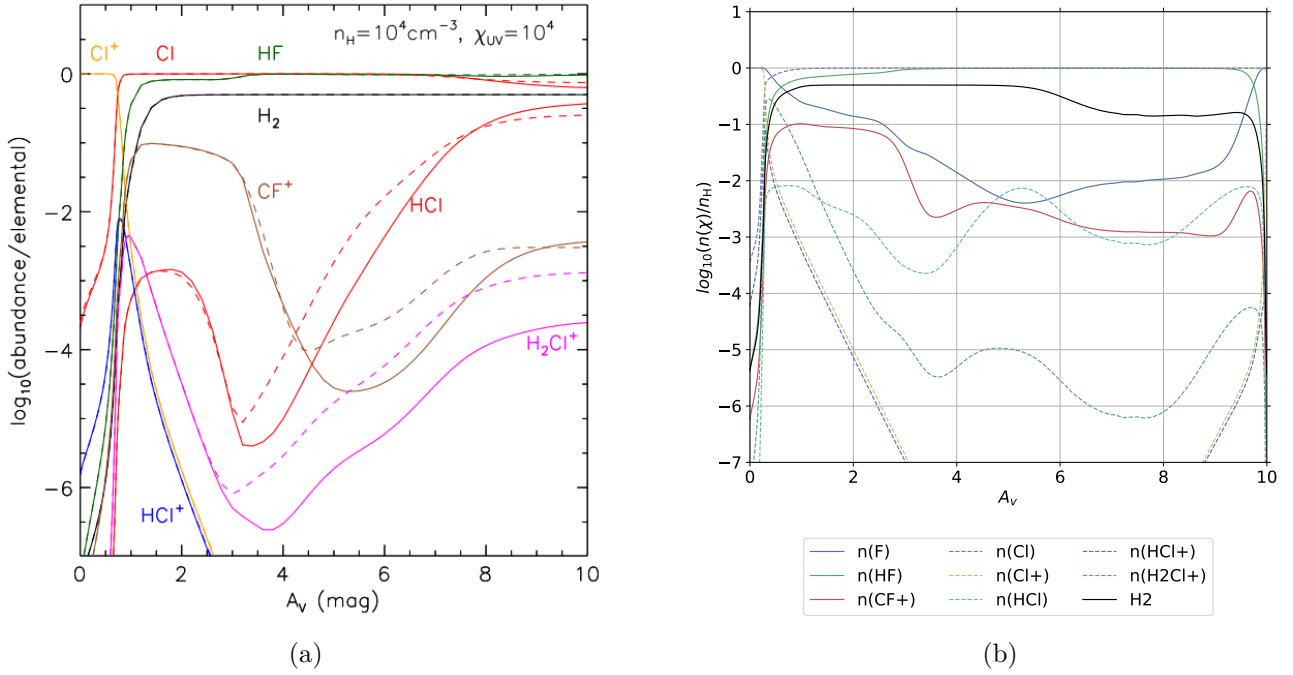


FIGURE 1 – Profil de densité pour un modèle isochore  $n_{\text{H}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi_{\text{UV}} = 10^4$ . La figure de gauche (a) est extraite de [Neufeld and Wolfire, 2009] où les profils sont obtenus à partir d'une version modifiée du code de [Kaufman et al., 2006]. Le trait plein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

On n'arrivait pas à avoir le même profil de température, on a alors imposé au code de suivre le profil de température montré dans l'article. On utilise un modèle à densité constante qui, dans cette version du code (1.5.2\_rev\_1900), ne peut former de  $\text{H}_2$  dans le nuage moléculaire. Pour parer cela, on a utilisé une réaction équivalente. On voit que l'on retrouve les allures des profils de densités. Les profils du Cl, Cl<sup>+</sup>, HCl, HF sont proches en ordre de grandeurs. Ceux du  $\text{H}_2\text{HF}^+$ ,  $\text{HCl}^+$ ,  $\text{CF}^+$  n'ont pas exactement les mêmes allures ni les mêmes valeurs.

### I-1-b) radm et ladm

### I-1-c) run sur d'autres modèles

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

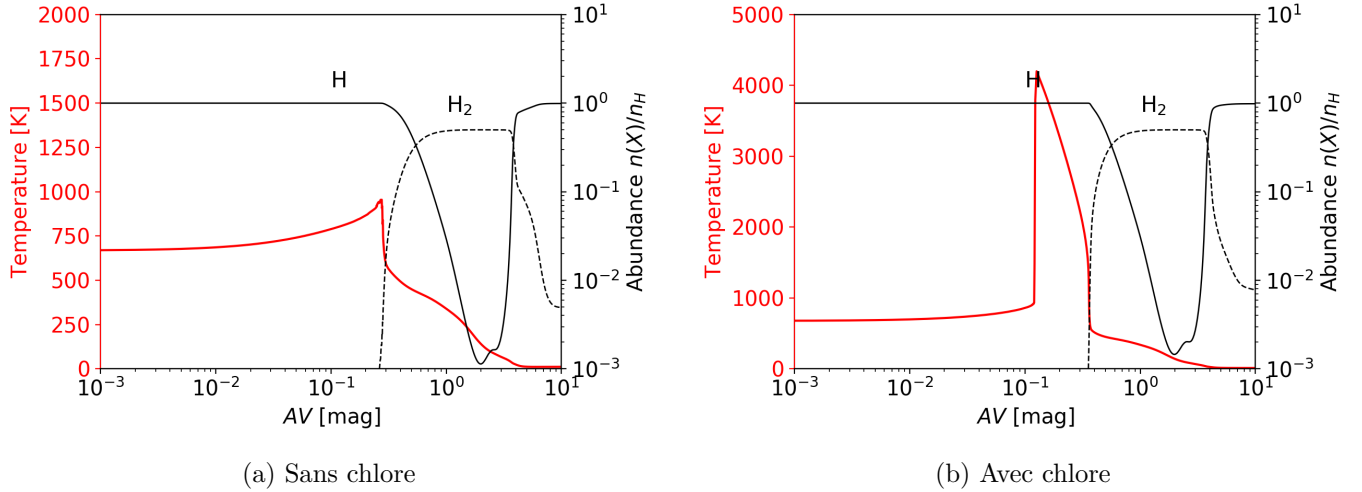


FIGURE 2

### I-2) Analyse du rôle du chlore

J'ai étudié les réactions chimiques principales qui se déroulent en bord de nuage atomique et démontré que le chlore joue le rôle de catalyseur de l'effet photoélectrique. Le mécanisme est illustré sur la Figure 3. Le champ de rayonnement UV, intense en bord de nuage atomique, photoionise le chlore et produit des ions  $Cl^+$  et des électrons. Le transfert de charge du  $Cl^+$  avec l'hydrogène est une réaction rapide qui permet au chlore de se rendre de nouveau disponible pour la photoionisation. Le chlore permet ainsi de ioniser indirectement l'hydrogène. Par conséquent, la fraction électronique du gaz augmente. Or on sait que l'effet photoélectrique sur les grains fonctionne d'autant plus que la fraction électronique dans le nuage est importante<sup>1</sup>. L'effet photoélectrique chauffe ainsi le gaz ce qui améliore l'efficacité du transfert de charge du  $Cl^+$  avec l'hydrogène. En d'autres termes, le chlore induit une rétroaction positive de l'effet photoélectrique sur les grains. Cet emballement a tendance à chauffer le gaz à des températures nettement plus fortes et ce malgré la faible abondance du chlore.

L'emballement de l'effet photoélectrique se produit à partir de 1000 K. Or la photoionisation du carbone et du soufre produit les électrons en bord de nuage atomique indépendamment de la température. Il existe une température où le transfert de charge devient suffisamment efficace pour que la fraction d'électrons créée

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

via le chlore devienne dominante devant celle de la ionisation du carbone et du soufre et amorce la rétro-action de l'effet photoélectrique. L'amplification dépend donc l'énergie d'activation du transfert de charge  $\text{Cl}^+ + \text{H} \rightarrow \text{Cl} + \text{H}^+$  qui vaut 6290 K.

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

### I-3) Modèle analytique - Chimie

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

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

#### I-3-a) Ion hydrogène

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

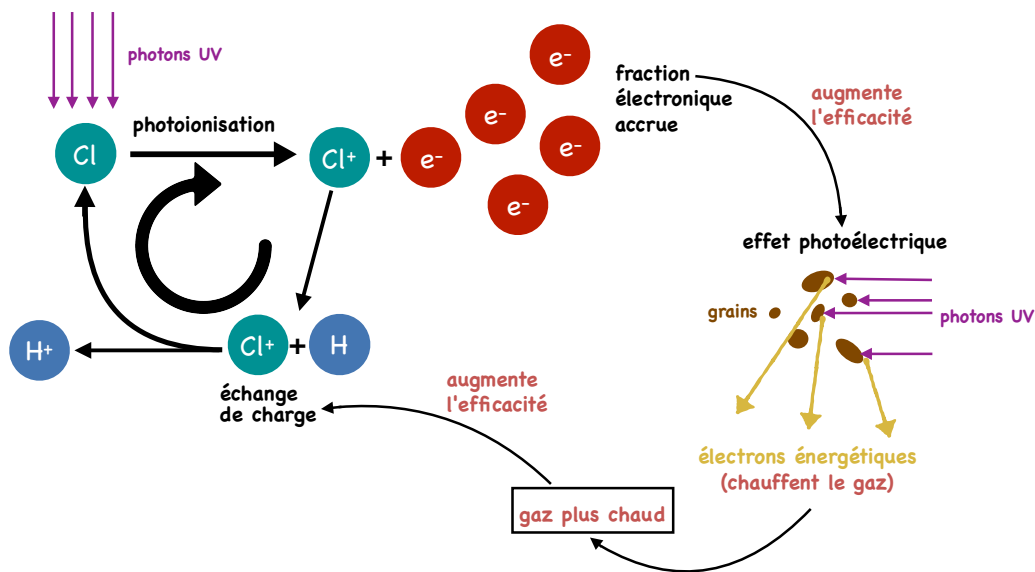
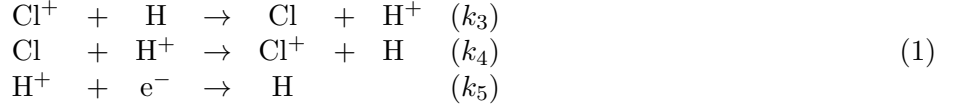


FIGURE 3 – Schéma représentant l'impact du chlore sur la chimie de bord de nuage atomique



A l'état stationnaire, le bilan de formation des ions  $\text{H}^+$  donne

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

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

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

avec,

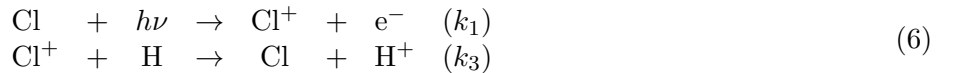
$$\delta_{Cl} = 1.810^{-7} = \frac{n(\text{Cl}) + n(\text{Cl}^+) + \dots}{n(\text{H}) + n(\text{H}^+) + 2n(\text{H}_2) + \dots} \approx \frac{1}{n_{\text{H}}}(n(\text{Cl}) + n(\text{Cl}^+)) \tag{4}$$

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

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

### I-3-b) Ion chlore

La recombinaison électronique de  $\text{Cl}^+$  reste négligeable devant le transfert de charge avec H pour des températures supérieures à 100K et la destruction par formation du  $\text{HCl}^+$  devient dominante dans la gamme de température 100 – 1000K. Négliger ces réactions donne une approximation correcte de la densité d'ion chlore pour les régimes de températures  $T \geq 1000$  K et garde l'emballage de l'effet photoélectrique. On considère ainsi les réactions ci-dessus :



Un travail similaire nous donne

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

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

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

### I-3-c) Recombinaison de $\text{H}^+$ sur les grains

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

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

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

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

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

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

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

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

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

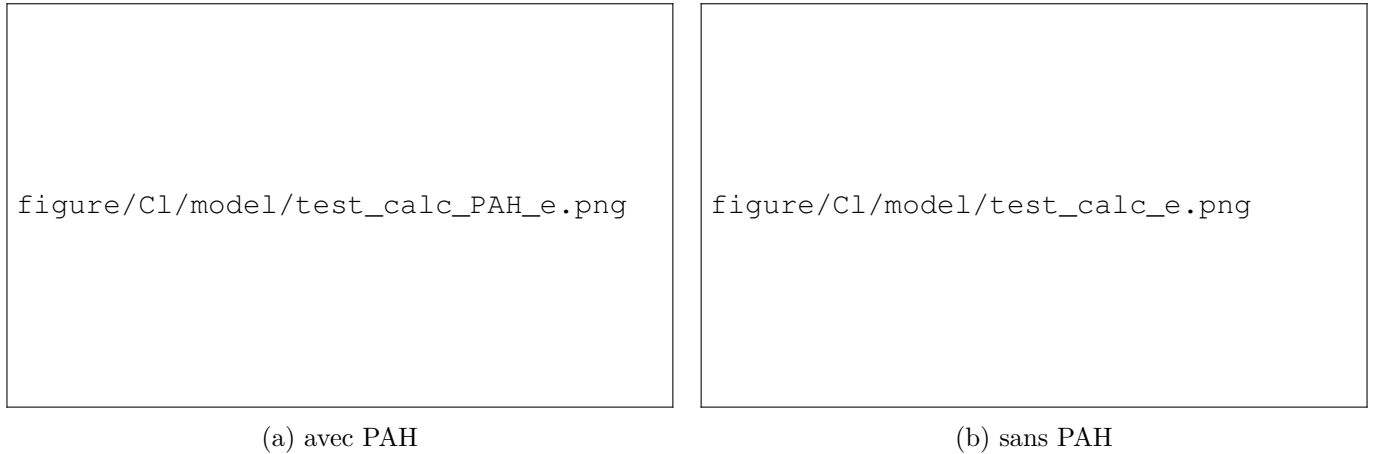


FIGURE 4 – Profil de la densité électronique calculé par le modèle. La formule proposée par [Weingartner and Draine, 2001] prend en compte la recombinaison sur les PAH. Avec la recombinaison, la prédiction de la densité d'électrons est bonne dans le cas avec PAH. Si on ne prend pas en compte les PAH,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

#### I-4) Modèle analytique - Thermique

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

- l'effet photoélectrique sur les grains ([Bakes and Tielens, 1994])

- le refroidissement par émission de raies de structure fine du [CII] 158 $\mu\text{m}$ , [OI]63 $\mu\text{m}$ , [OI]6300Å ([Röllig, M. et al., 2006])
- l'émissions Lyman  $H\alpha$  ([Tielens, 2005])
- le couplage gaz-grain ([Hollenbach et al., 1991a]).

On dénote  $\Gamma$  et  $\Lambda$  les taux de chauffage et refroidissement, respectivement, total. On a

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

#### I-4-a) Effet photoélectrique sur les grains

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

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

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

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

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

#### I-4-b) Couplage gaz-grains

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

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

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

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

#### I-4-c) Refroidissement par les raies d'émissions du $\text{C}^+$ et de O

[CII]158 $\mu\text{m}$ , provient de [Röllig, M. et al., 2006], Equation (A.2) ( $Z = 1$ )

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

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



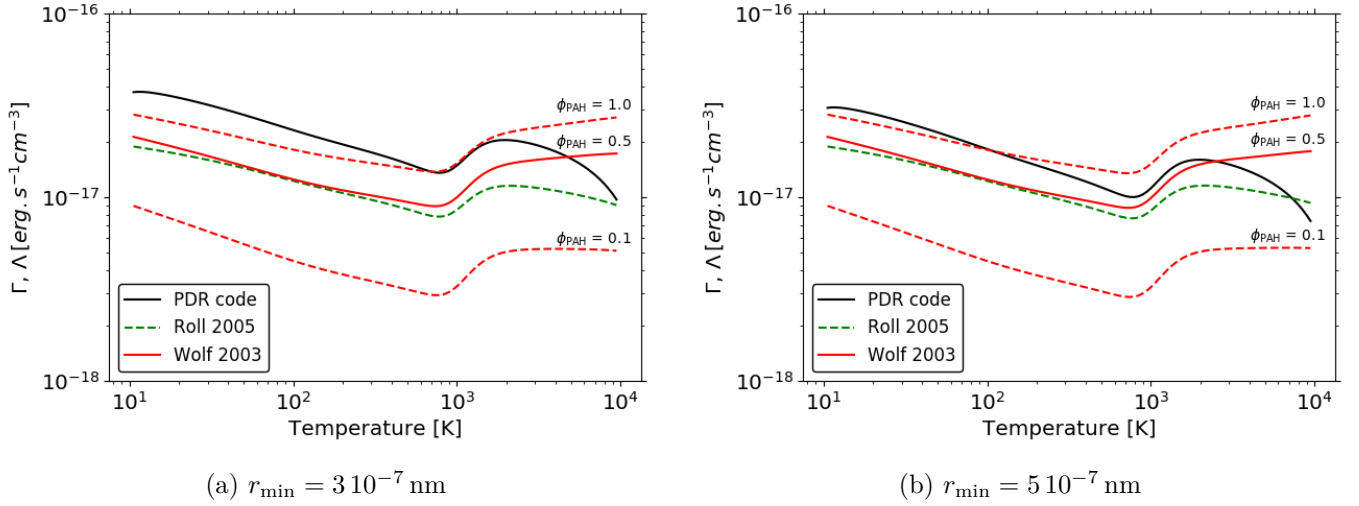


FIGURE 5 – Comparaison des formules de l'effet photoélectrique de [Röllig, M. et al., 2006] et [Wolfire et al., 2003] avec le code PDR pour différents  $r_{\min}$

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

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

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

#### I-4-d) Emission Lyman H $\alpha$

[Tielens, 2005], Eq 2.62

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

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

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

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

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

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

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

On compare le modèle thermo-chimique que l'on a construit à un modèle à densité constante résolu par le code PDR afin de vérifier que l'on obtient une température d'équilibre sensiblement égale.

Connaissant les expressions des termes de chauffages  $\Gamma$  et  $\Lambda$  et étant capable de calculer une densité d'électrons  $n_e$  en fonction de la température, on détermine les températures d'équilibre  $T_{eq}$  définies telles que  $\Gamma - \Lambda = 0$ . Un point d'équilibre est stable (instable) si autour de  $T_{eq}$ ,  $\frac{d}{dT}(\Gamma - \Lambda)$  est négatif (positif).

On trace sur la figure 6 les courbes de chauffage et de refroidissement au bord de nuage pour un modèle  $n_H = 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi = 10^4$ . On remarque que notre modèle retrouve bien l'emballement de l'effet photo-électrique à partir de 1000 K. Par ailleurs, on constate que le calcul de Rollig (eq 13) sous estime d'un facteur d'environ 3 l'effet photo-électrique calculé par le code. La solution chaude calculé par le modèle est 4000 K plus froide que celle obtenue par le code et est similaire à la température obtenue par un modèle ne comportant pas de chlore. Afin de pouvoir différencier les modèles qui sont impacté par l'instabilité par le chlore de ceux qui ne le sont pas, on corrige la formule de l'effet photoélectrique de Rollig d'un facteur 3. La température d'équilibre que l'on obtient alors est proche de la solution chaude obtenue par le code PDR (+1500 K). Dans la suite, le modèle utilisera toujours comme expression du chauffage par effet photoélectrique celle de Rollig multiplié d'un facteur 3.

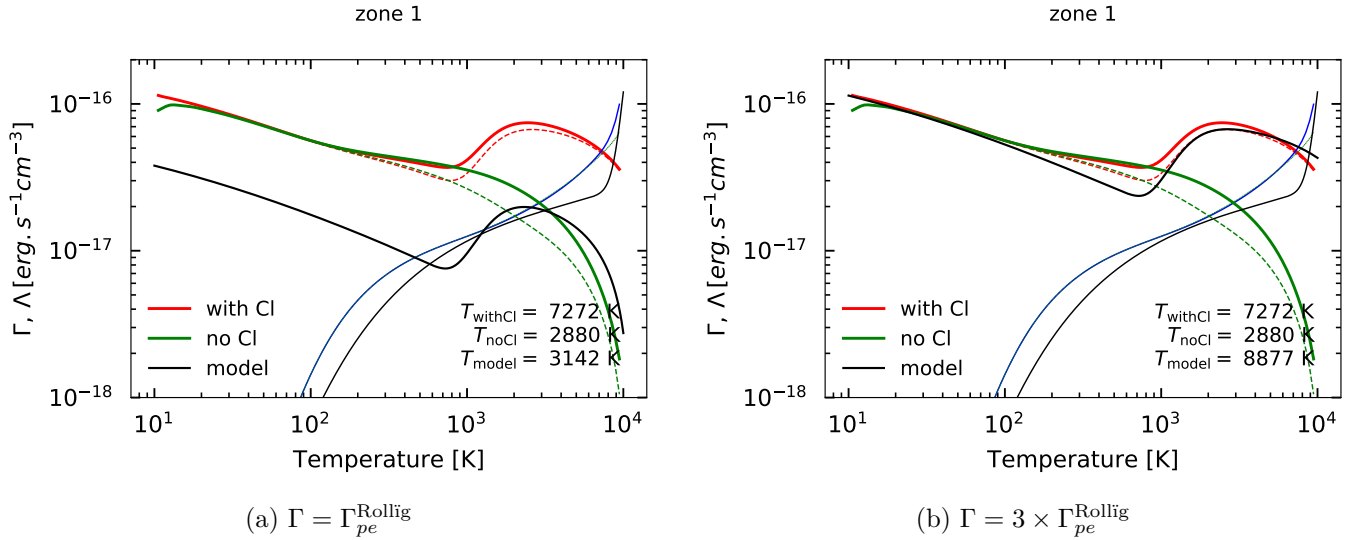


FIGURE 6 – Courbes de chauffage et refroidissement au bord atomique d'un modèle à densité constante ( $n_H = 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi = 10^4$ ). Le trait en pointillé rouge et vert représente l'effet photoélectrique pour les modèles comportant ou non du chlore. Le trait plein est le chauffage total. Dans ces conditions physique, le chauffage par la molécule  $H_2$ , qui n'est pas pris en compte dans le modèle, est moins intense que l'effet photoélectrique. 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, l'effet photoélectrique sur les grains, calculé grâce à la formule de Rollig. La courbe de refroidissement du modèle est en trait fin noir.

### I-6) Prédiction de la température au bord de nuage

A l'aide de ce modèle nous pouvons chercher dans quelles conditions ( $n_H$  et  $\chi$ ) les bords atomiques des PDR vivent l'instabilité provoqué 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  $n_H T = \text{cte}$ ).

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

La figure 7 représente la température d'équilibre maximale calculée par notre modèle. On constate que les bords atomiques des régions fortement illuminées augmentent chauffent de plusieurs milliers de Kelvin en présence de chlore le nuage. Il apparaît également des instabilités thermiques dans les régions diffuses et fortement illuminées ( $n_H \leq 10^4 \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi \geq 10^2$ ).

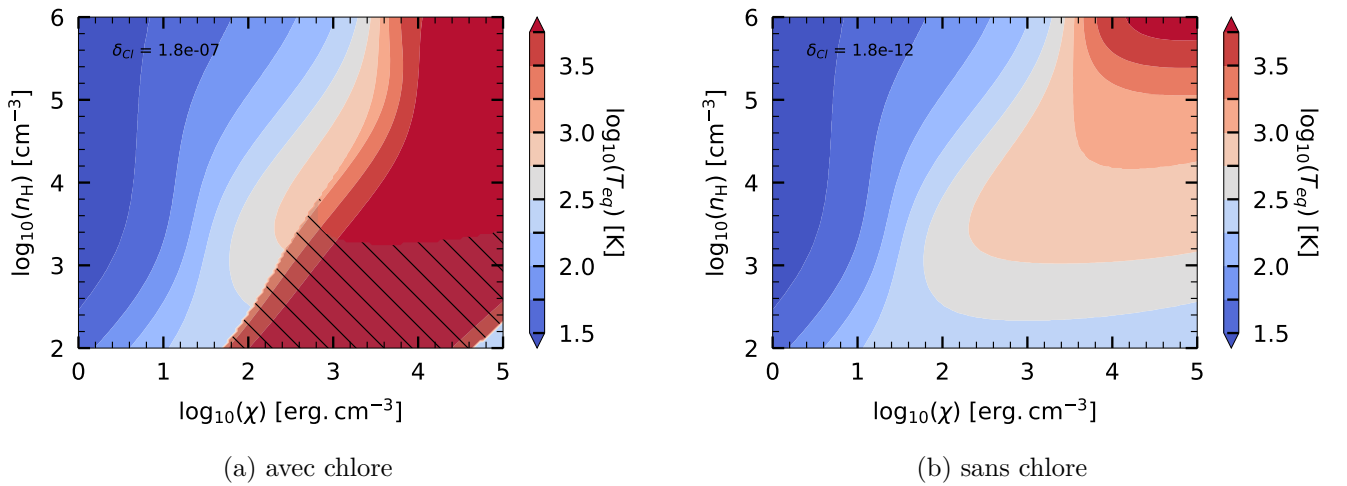


FIGURE 7 – Carte de température prédite par le modèle

La zone hachurés sur la figure (a) signifie qu'il existe également une solution instable.

Les cartes de température calculés grâce au code PDR (figure 8) réduisent la zone concernée par l'emballement du chauffage, induit par le chlore, seulement aux régions denses et fortement illuminées ( $n_H \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi \geq 10^3$ ).

Néanmoins, on ne parvient pas à retrouver les températures annoncées par le modèle dans les régions moins denses. Cette différence est causée, dans une certaine mesure, par la formule de l'effet photoélectrique qui a été choisi et de la méthode de résolution du code PDR.

Sur la figure 8b on remarque l'existence d'un point-selle en température vers  $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi = 10^3$  qu'y est absent sur la figure 7. Une analyse de cette région montre, que d'après le code dans les régions à basse densité, si l'on augmente l'intensité du champs de rayonnement  $\chi$  alors la recombinaison des électrons sur les grains devient progressivement plus efficace que l'effet photoélectrique pur ce qui refroidit le gaz. Les formules de l'effet photoélectrique (eq 13) et de la recombinaisons des électrons sur les grains (eq 21) que l'on a choisis reproduisent mal ce phénomène. Le gaz, dans le modèle, est alors plus chaud. <discussion sur la remonté quand nh diminue>.

Pour trouver la température d'équilibre, le code PDR de Meudon cherche le zéro de la fonction  $T \rightarrow (\Gamma - \Lambda)(T)$  par dichotomie. Il obtiendra, dans le cas d'une bistabilité, une des solutions stables sans savoir laquelle est la plus chaude. En effet, sur la figure 9a, le code de Meudon trouve la solution basse température alors qu'il existait une solution chaude proche de 9000 K. Une amélioration que pourrait subir le 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. Cela permettrait de ne plus avoir des profils de température tel que celui de la figure 2.

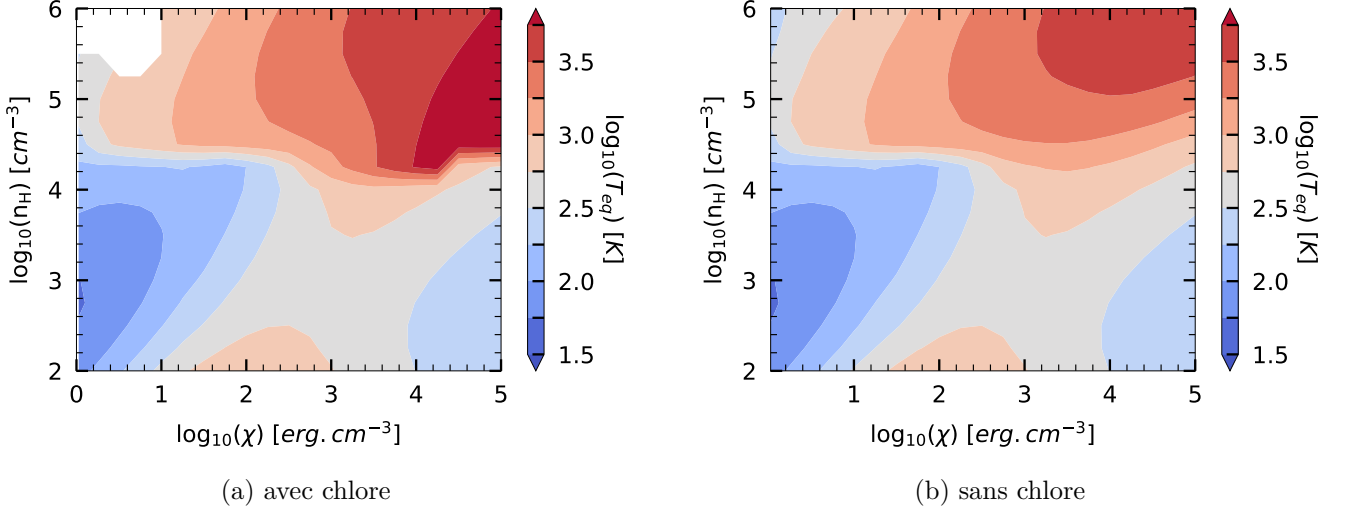


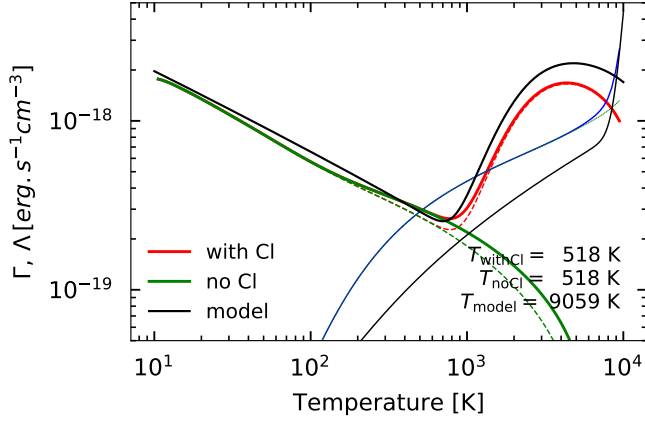
FIGURE 8 – Température en bord atomique de nuage calculé par le code PDR de Meudon

Enfin, l'absence du  $H_2$  dans le modèle thermico-chimique a un impact important sur la température car il chauffe efficacement le gaz par pompage UV dans les régions denses et est également capable de refroidir par désexcitation collisionnelle. On voit sur la figure 9b où l'effet photoélectrique est devant le chauffage par  $H_2$ . La molécule imprime la carte de température dans les régions diffuses et peu illuminées ainsi que dans les régions denses.

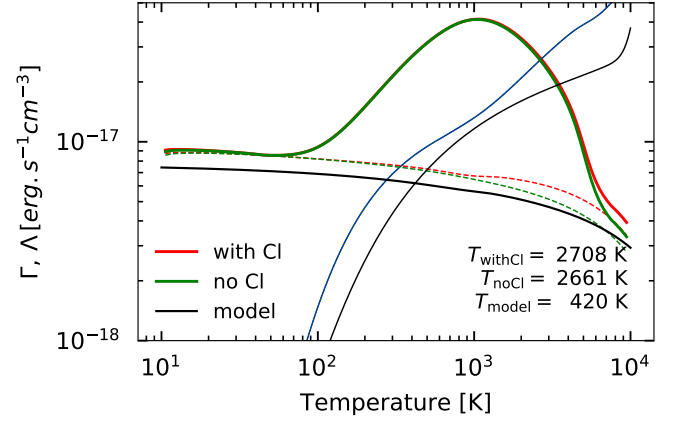
### I-7) A la recherche d'observables

Nous avons pu prouver l'existence et expliquer le fonctionnement d'une instabilité provoquée par le chlore dans le bord atomique d'une PDR. Il est nécessaire de trouver des traceurs impactés ou des signatures dans les spectres d'émissions.

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. Le chlore opère un grand changement sur certaines raies mais il y a néanmoins un "seuil" d'observabilité des modèles PDR qui est de l'ordre de  $10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ . Seules certaines raies du N sont supérieures à ce seuil. Les raies des autres traceurs, CS,  $H_2O$ ,  $H_2$ , ne deviennent pas plus intenses avec la solution chaude, certaines diminuent même (figure 11).

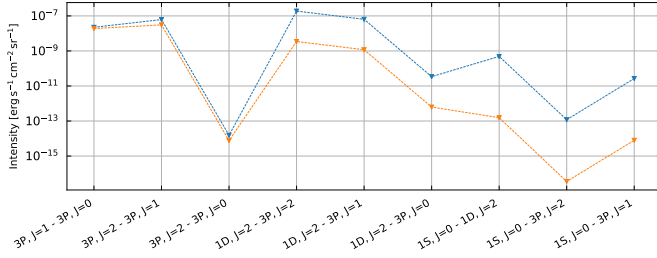


(a)  $n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ,  $\chi = 10^{4.5}$  (zone 2)

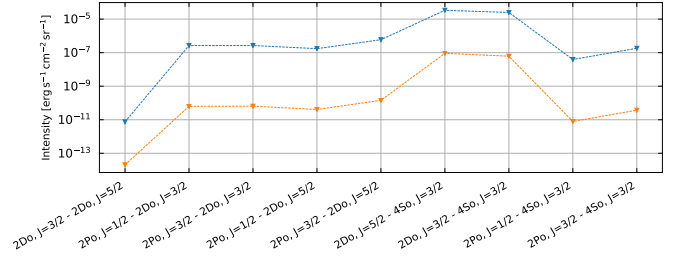


(b)  $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$ ,  $\chi = 10^3$  (zone 5)

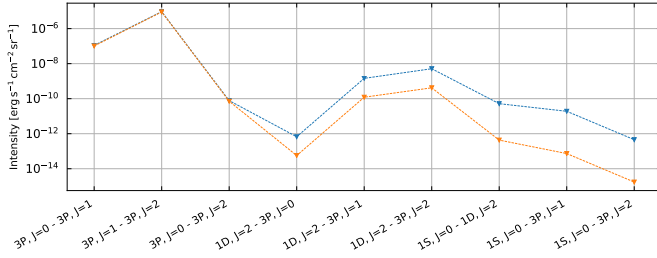
FIGURE 9 – Courbes de chauffage et refroidissement, au bord atomique de nuage, de modèles résolus par le code PDR de Meudon. Mêmes règles de couleurs que dans la figure 6.



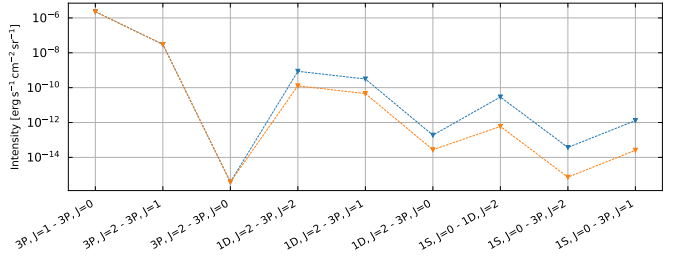
(a)  $N^+$



(b)  $N$



(c)  $S$



(d)  $Si$

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

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

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

Il a été dit précédemment que, d'après le code PDR, il serait possible d'observer seulement des raies du N. On a choisit la raie la plus intense qui est la transition  $El=2Do, J=5/2 \rightarrow El=4So, J=3/2$  correspondant à la longueur d'onde 5200A.. sonde visible <à finir>

On voit sur la figure 14 que lorsque l'on a du chlore, l'intensité de la raie atteint est de l'ordre de  $10^{-3} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  et que l'on a une signature de la solution chaude proposée par le chlore. Néanmoins la

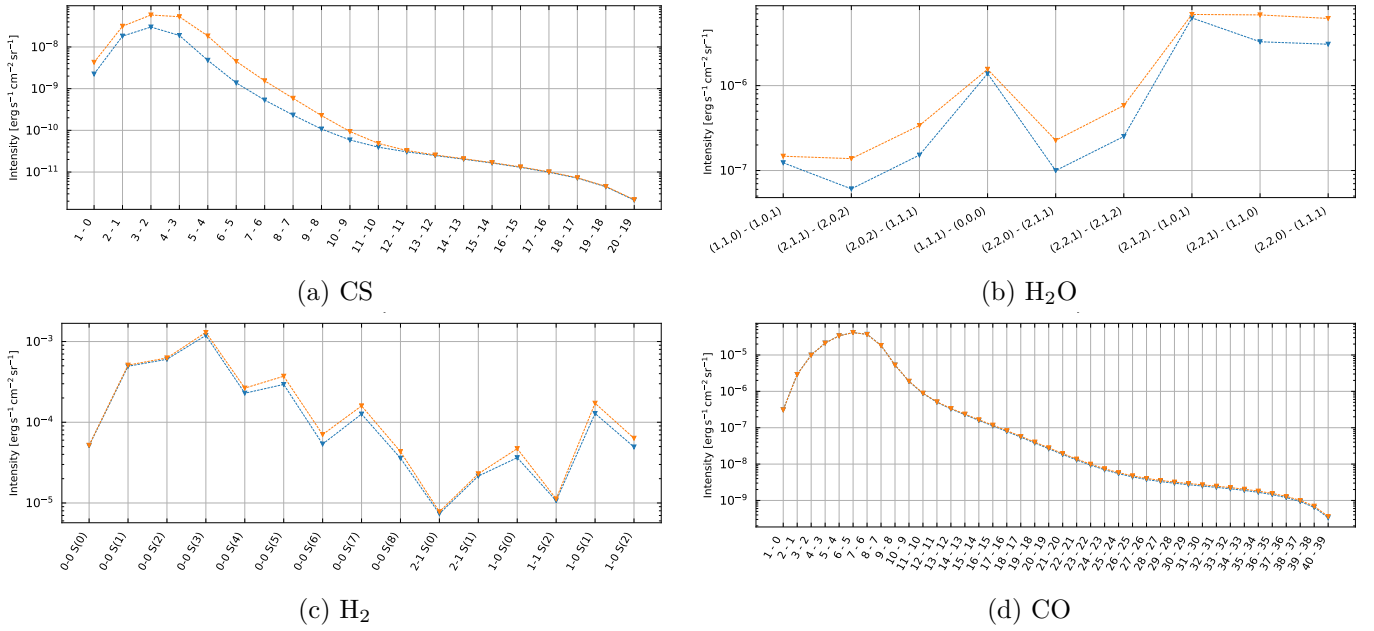


FIGURE 11 – (ANNEXE) Diagramme d'excitation des traceurs peu modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (même convention que la figure 10). Pour la molécule CO, les transitions rotationnelles ont été écrites (toutes s'effectuent à  $v = 0$ ).

taille de la zone concernée est petite et il est difficile de bien situer les observations dans l'espace des paramètres. Un autre problème, qui n'est pas des moindres, est que les modèles de PDR commencent après la partir ionisé de l'hydrogène et que le potentiel de ionisation de l'azote est de 14.6 eV ce qui signifie que la transition  $N^+/N$  se fait devant le nuage. Dans le code, l'azote est excité par collision avec les espèces majoritaires du nuage qui sont  $H, H^+, H_2, He$  et  $e^-$  (PXDR\_COLSPÉ). La fraction électronique en bord atomique de nuage, dans le cas d'un emballage lié au chlore, est d'un facteur  $10^{-4}$ - $10^{-3}$  alors qu'il est d'un facteur 1 dans la partie ionisé du nuage. Cette augmentation de l'intensité de la raie sera masqué par le front  $N^+/N$ .

Il faudrait donc trouver des traceurs qui ont des potentiels de ionisations inférieures à celui de l'hydrogène et qui s'activerait uniquement en bord atomique. Enfin on a tracé les diagrammes d'excitations avec des modèles à densités constantes qui corrobore rarement avec les données. Il faudrait lancer des grilles isobares et voir ce qu'il en est.

## I-8) Bonus

### I-8-a) Chauffage à l'entrée du nuage moléculaire

Il arrive qu'en entrée du nuage moléculaire, la température du gaz augmente de manière irrégulière. Dans cette région, l'effet photoélectrique devient encore plus efficace en raison de l'augmentation de la fraction électronique du nuage. La recombinaison sur les grains est d'autant plus rapide que la fraction électronique est grande.

On a remarqué que pour une PDR avec  $n_H = 10^{3.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi = 10^{4.5}$ , la température augmentait en pic avant le nuage moléculaire (figure 16). On cherche à comprendre quel phénomène est à l'origine de l'augmentation de la température? Pourquoi le taux de  $H_2$  diminue t il en même temps? Pourquoi prendre en compte les nouveaux taux de collisions accentue ce phénomène? Qu'est ce qui provoque la montée?

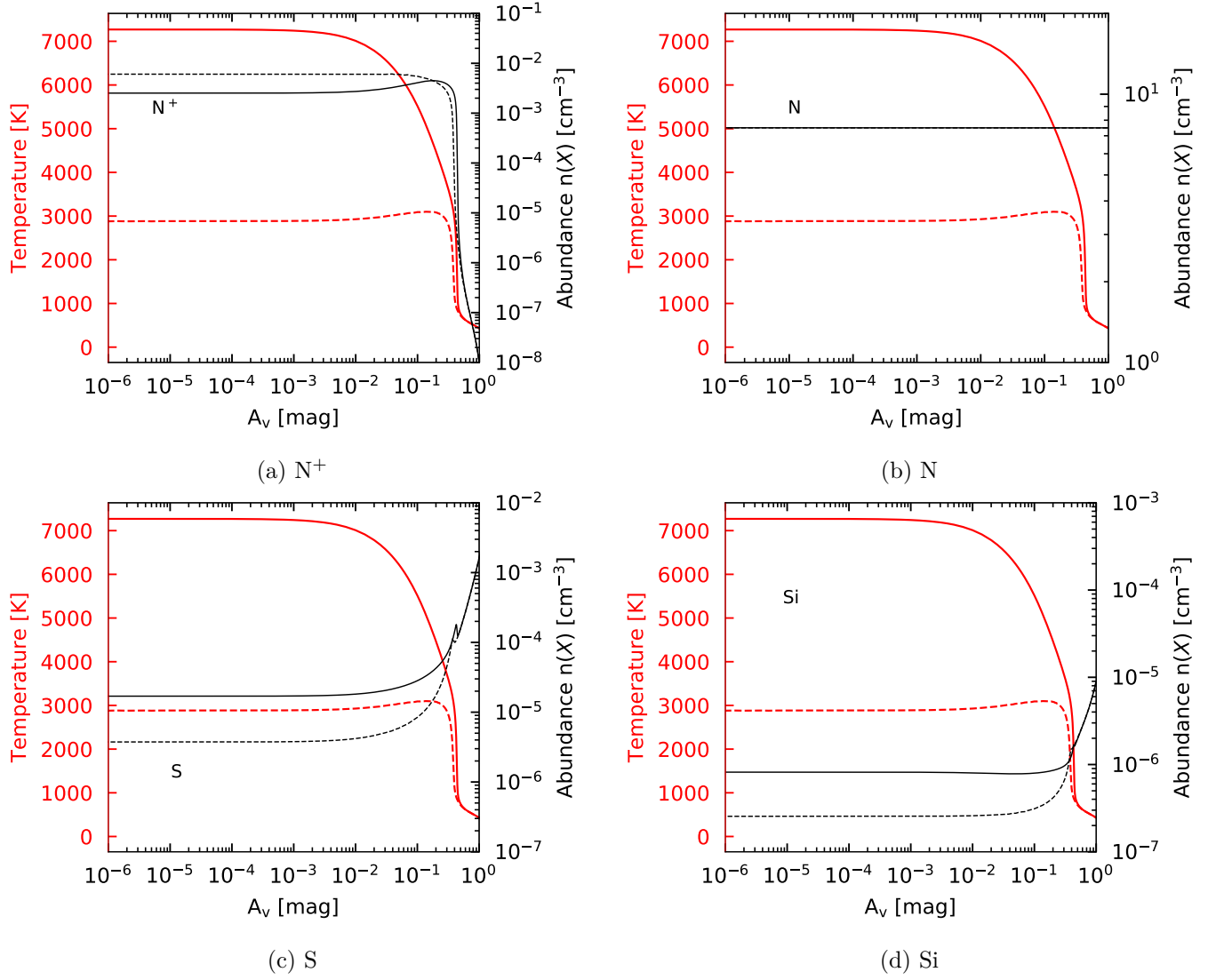


FIGURE 12 – (ANNEXE) Profils de densité des traceurs modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (1.5.2\_rev\_1900)

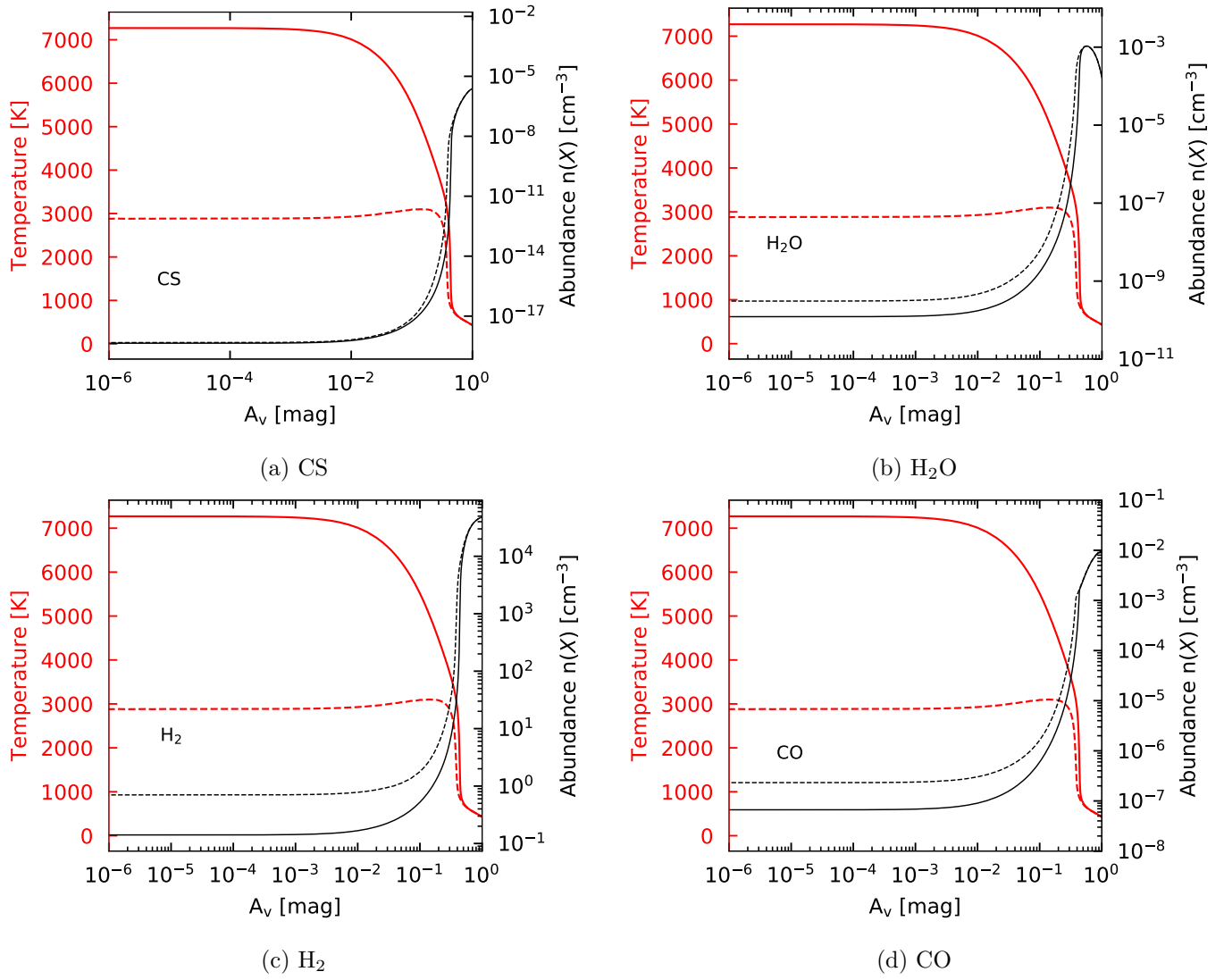
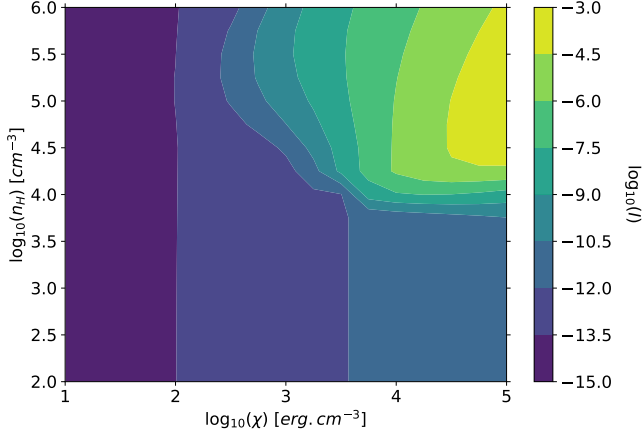
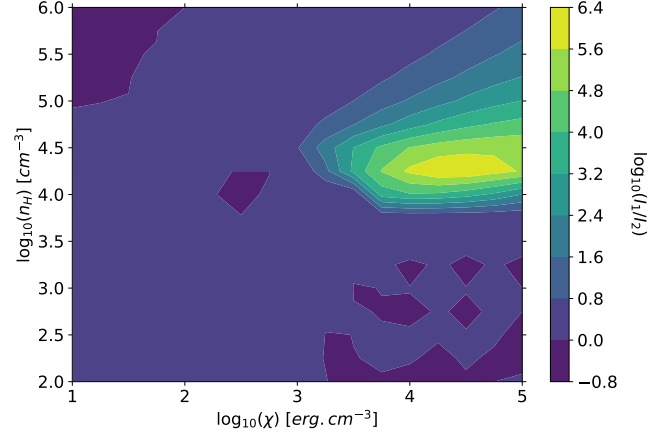


FIGURE 13 – (ANNEXE) Profil des densités des traceurs peu modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (1.5.2\_rev\_1900)





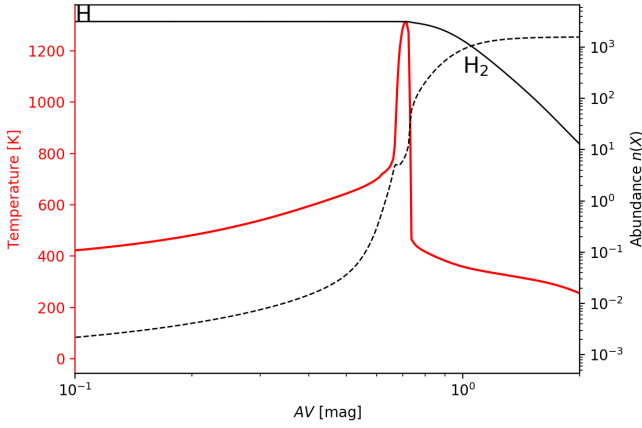
(a) Emissivité de la raie [N] 5200.257A d'une grille de modèle avec Chlore.



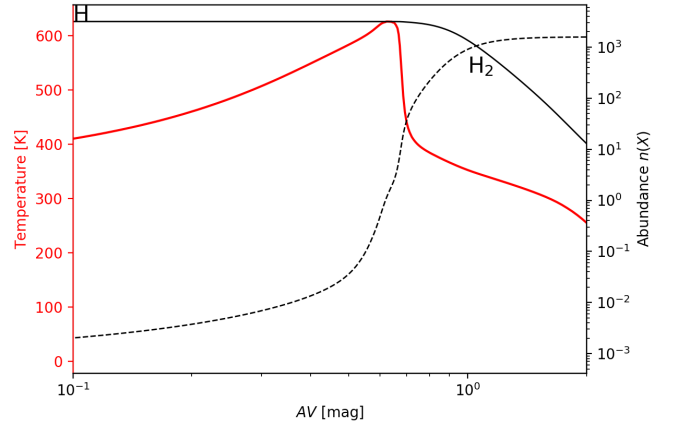
(b) Rapport des émissivités dans le cas avec ou sans chlore des grilles de modèles

FIGURE 14

Pourquoi ça s'arrête : lorsque la température du gaz est trop élevée, les états ro-vibrationnelles de H2 sont remplis et se desexcitent en émettant des photons. On le voit sur la figure 16 ou le chauffage par H2 cessent de chauffer.



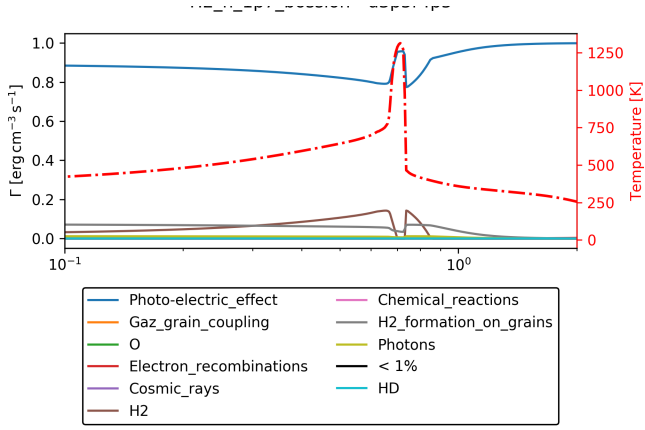
(a)



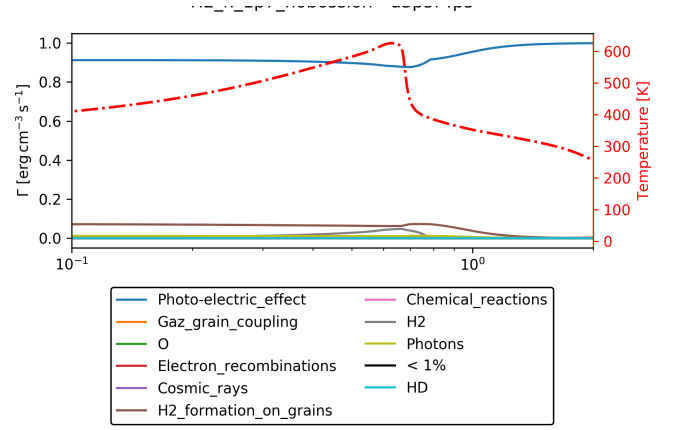
(b)

FIGURE 15 – Profil de température et de densités de H et H<sub>2</sub>. A l'entrée du nuage la température augmente accompagné d'une légère diminution de la densité de H<sub>2</sub>. Cet effet est accentué sur (a) qui prend en compte les nouveaux taux de collision de H<sub>2</sub>.

On a tracé une figure comparant la température, la densité de molécules H<sub>2</sub> et la densité d'électrons à l'entrée du nuage moléculaire (17). Ce pic abrupte est du à la prise en compte des taux de collisions. On observe aussi une montée (moindre) avec Janev et Glover sans les nouveaux taux (modèles densités constantes).



(a) Avec les nouveaux taux de collisions



(b) Sans les nouveaux taux de collisions

FIGURE 16 – Taux de chauffage (en relatif) en fonction de l’extinction. Dans les deux situations le chauffage par effet photo-électrique est le phénomène dominant pendant l’irrégularité tandis que le chauffage par  $H_2$  devient refroidisseur. Cet effet est accentué si l’on prend en compte les nouveaux taux de collisions.

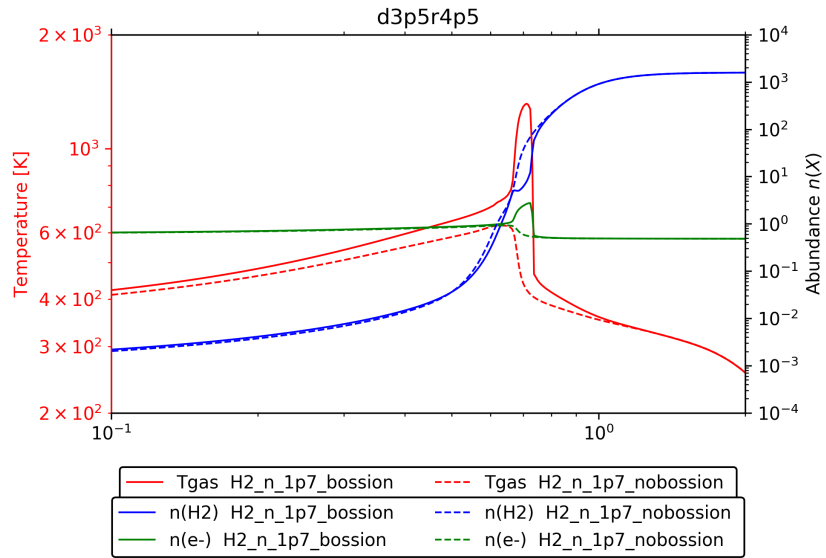


FIGURE 17

## II) Molécule H<sub>2</sub>

On cherche dans un premiers temps des expressions permettant d'estimer le chauffage par pompage UV de la molécule H<sub>2</sub> calculé par le code.

### II-1) Construction d'un modèle

#### II-1-a) Chauffage net par Rollig (1995)

#### II-1-b) Chauffage par désexcitation collisionnelle

Eq (10) ou (C.3).

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

$$\Gamma_{H_2^*} = n_{H_2} \frac{\chi P}{1 + \frac{A_{\text{eff}} + \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}} n}} \Delta E \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (23)$$

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

#### II-1-c) Refroidissement par émission de photons

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

$$\Lambda_{H_2} = -\Delta E_{1,0} \gamma_{1,0} e^{-\Delta E_{1,0}/kT} n_H n_{H_2} \frac{A_{1,0} + \chi D_1}{\gamma_{1,0} n_H + A_{1,0} + \chi D_1} \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (24)$$

#### II-1-d) Bialy et Sternberg (2019)

Chauffage par désexcitation collisionnelle

[Bialy and Sternberg, 2019] (A12) considère que 9 photons sur 10 permettent d'avoir du H<sub>2</sub> excité.

$$\Gamma_{H_2 \text{ pump}} = 9 D_0 \chi E_{\text{pump}} n(H_2) \times \frac{1}{1 + \frac{n_{\text{crit}}}{n_H}} \text{ erg cm}^{-3} \text{s}^{-1} \quad (25)$$

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

$$\frac{A_{\text{eff}} + \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}}} \approx 2.9 \cdot 10^6 / \sqrt{T/1000\text{K}} \text{ cm}^{-3} \quad ! \sim n_{\text{crit}} \quad (26)$$

### II-1-e) Chauffage par photodissociation

$$\Gamma_{\text{H}_2 \text{ pd}} = D_0 \chi E_{\text{pd}} n(\text{H}_2) \quad (27)$$

### II-1-f) Absorption du rayonnement

Shielding par le molécule  $\text{H}_2$

On utilise la fonction fitté (Eq.37) par [Draine and Bertoldi, 1996] pour calculer le *shielding* de la molécule  $\text{H}_2$  sur le taux d'excitation par pompage  $\chi P$ .

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

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

$$\Gamma_{\text{H}_2^*} = n_{\text{H}_2} \frac{\chi P f_{\text{shield}}}{1 + \frac{A_{\text{eff}} + f_{\text{shield}} \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}} n}} \Delta E \text{ erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (28)$$

On fait de même pour le taux de refroidissement.

### II-1-g) Extinction par les grains

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

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

### II-1-h) Comparaison avec le code PDR de Meudon

On récupère du code le taux de refroidissement  $\Lambda_{\text{PDR}}$  par la molécule  $\text{H}_2$  qui peut être positif ou négatif. Le taux prend en compte du chauffage par desexcitation collisionnelle et du refroidissement ro-vibrationnelle (émission). Il ne prend pas en compte de la photodissociation (qui chauffe). On veut étudier le chauffage, on appelle  $\Gamma_{\text{PDR}}$  la partie négative du taux ( $\Lambda_{\text{PDR}} < 0$ ) et on le compare aux de chauffage nets.

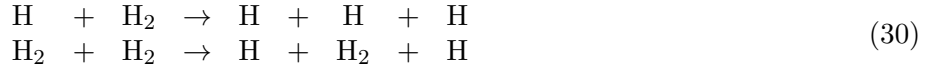
$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{Rollig net}} &= \Gamma_{\text{H}_2^*} + \Lambda_{\text{H}_2} \\ \Gamma_{\text{BS net}} &= \Gamma_{\text{H}_2 \text{ pump}} + \Gamma_{\text{H}_2 \text{ pd}} \end{aligned} \quad (29)$$

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

L'approximation FGK est une méthode qui calcule le spectre du champs de rayonnements à travers le nuage qui prend en compte l'absorption dans le continuum et le carbone. Il prend également en compte l'écrantage de la molécule  $\text{H}_2$  (figure ?? [Le Petit et al., 2006]).

## II-2) Dissociation collisionnelle du H<sub>2</sub> (de Janev à Glover)

La destruction du H<sub>2</sub> dans les nuages interstellaires s'effectue soit par photodissociation soit par réactions chimiques. Les dissociations collisionnelles (eq. 30) sont des réactions de destruction du H<sub>2</sub> mal connues alors qu'elles interviennent dans du gaz chaud, ce qui est le cas du bord atomique de la PDR jusqu'à la transition H/H<sub>2</sub>.



Il existe plusieurs prescriptions qui tentent d'estimer les valeurs des taux de dissociation collisionnelle du H<sub>2</sub> (eq 30) en fonction de la température et des niveaux de la molécule. Connaître leurs taux de réaction est important car ils changent la densité de H<sub>2</sub> à travers le nuage ce qui a un impact sur le chauffage par H<sub>2</sub> et donc la température du gaz. Deux prescriptions possibles ont été retenues dans le code : celle de Glover et Mac Low (article) et celle de Janev (article). Par ailleurs on a constaté que la prescription de Glover calcule des taux de dissociation très faible (d'un facteur 10<sup>-50</sup> bof) devant ceux de Janev ce qui change radicalement la chimie du nuage. Afin de n'en garder qu'une, nous avons comparé les effets de ces prescriptions sur l'ensemble des PDR.

Pour étudier globalement les PDR, on utilise des grilles de modèles qui explorent l'espace des paramètres (pression P, densité  $n_{\text{H}}$  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<sub>v</sub> de la transition H/H<sub>2</sub> ou le processus thermique dominant au bord du nuage - à travers la grille et étudions quelques modèles particuliers afin de comprendre profondément les changements sur le code. On étudie d'abord des modèles à densités constantes qui sont plus faciles à interpréter (la pression et la température suivent les mêmes variations  $P \propto T$ ) que les modèles isobares (la densité et la température varient de manière inversement proportionnelle  $n_{\text{H}}T = \text{cte}$ ).

### II-2-a) Grilles de modèles - Bord atomique

Sur la figure 18, la température en bord de nuage atomique est représentée. On constate qu'elle est sensiblement similaire selon que l'on utilise la prescription de Janev ou de Glover à l'exception des PDR denses et fortement illuminées ( $n_{\text{H}} \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi \geq 10^3$ ) qui sont légèrement plus chaudes. En visualisant sur la figure 19a la différence des cartes de température, on comprend que la prescription de Glover a tendance à chauffer les bords atomiques de l'ensemble des PDR de +200 K et peut augmenter la température jusqu'à +800 K pour les PDR denses et fortement illuminées.

Cette différence est principalement due à l'amélioration du chauffage par pompage UV de la molécule H<sub>2</sub>. Il devient en effet plus efficace de former du H<sub>2</sub> dans les bords atomiques des nuages grâce aux taux calculés par Glover. Le chauffage par pompage UV étant d'autant plus efficace que la densité de H<sub>2</sub> 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<sub>2</sub> et la quantité de photons UV deviennent importantes (hum le refroidissement par les raies également nan?).

On constate sur la figure 20 que le chauffage par H<sub>2</sub> reste dominant dans les bords atomiques des PDR denses quelque soit la prescription que l'on utilise. En revanche, les processus de refroidissements (figure 21) varient pour les PDR denses et faiblement illuminées ( $n_{\text{H}} \geq 10^{4.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi \leq 10^3$ ). L'utilisation des taux de dissociation de Glover tue le refroidissement par les réactions chimiques ce qui est normal car les réactions de dissociation du H<sub>2</sub> (eq 30) sont des réactions endothermiques très efficaces.

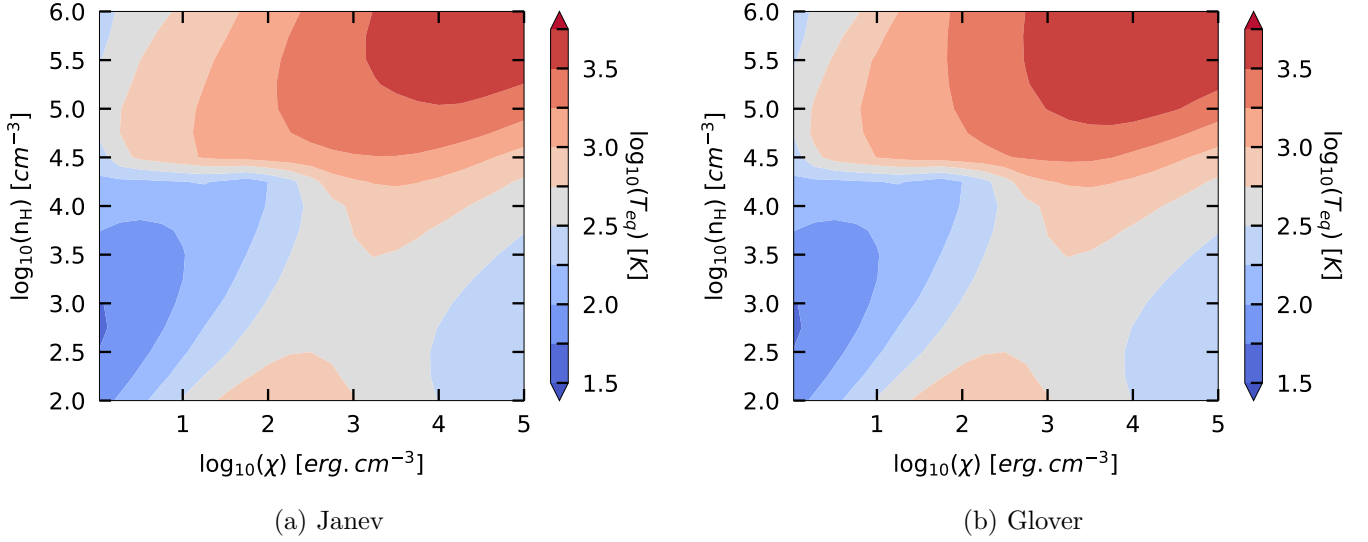


FIGURE 18 – Comparaison des température en bord atomique de nuage pour des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

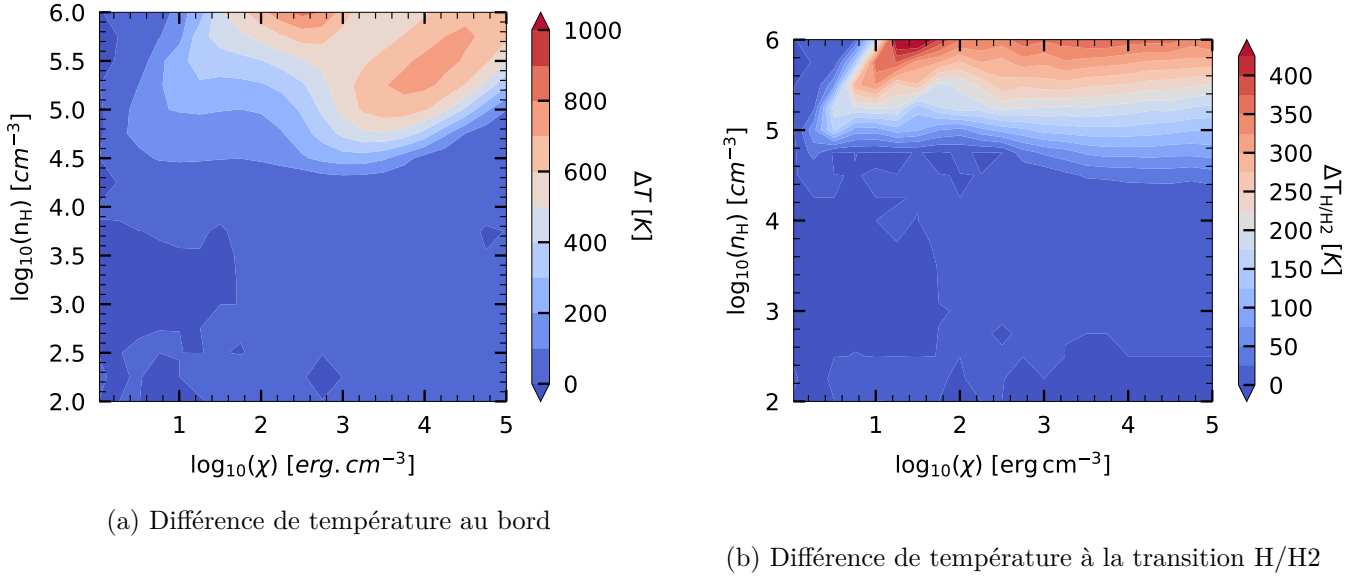
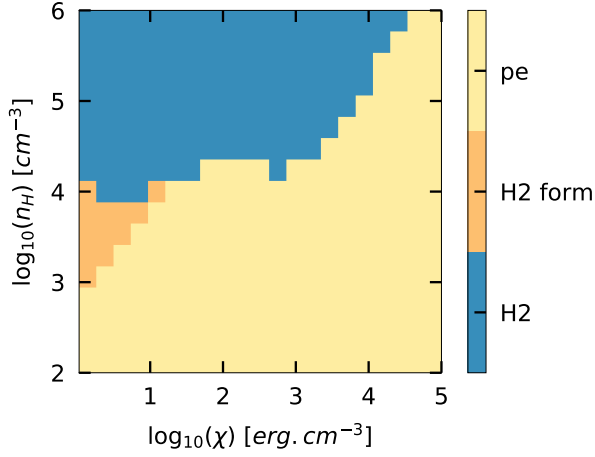


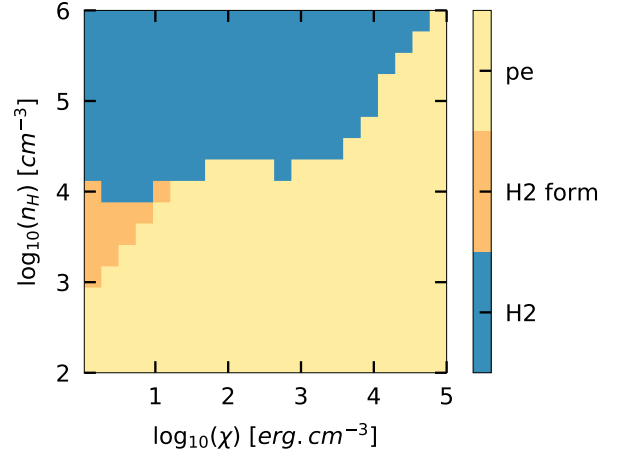
FIGURE 19 – Différence de température aux bords de nuage et aux transitions H/H<sub>2</sub> de modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover (les cartes ne sont pas en harmonie)

## II-2-b) 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?).

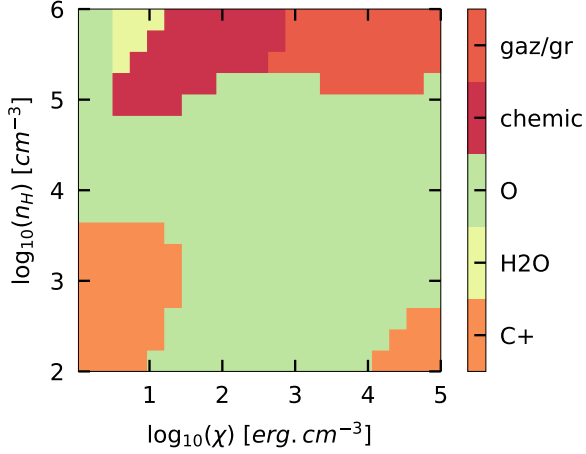


(a) Janev

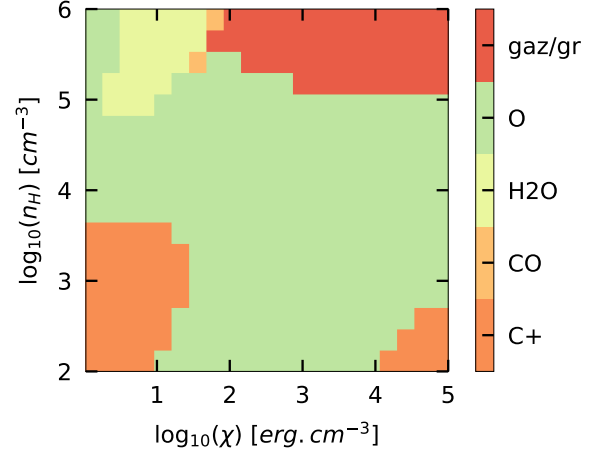


(b) Glover

FIGURE 20 – 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 21 – 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.

Les figures 22 et 23 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 23) 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 22).

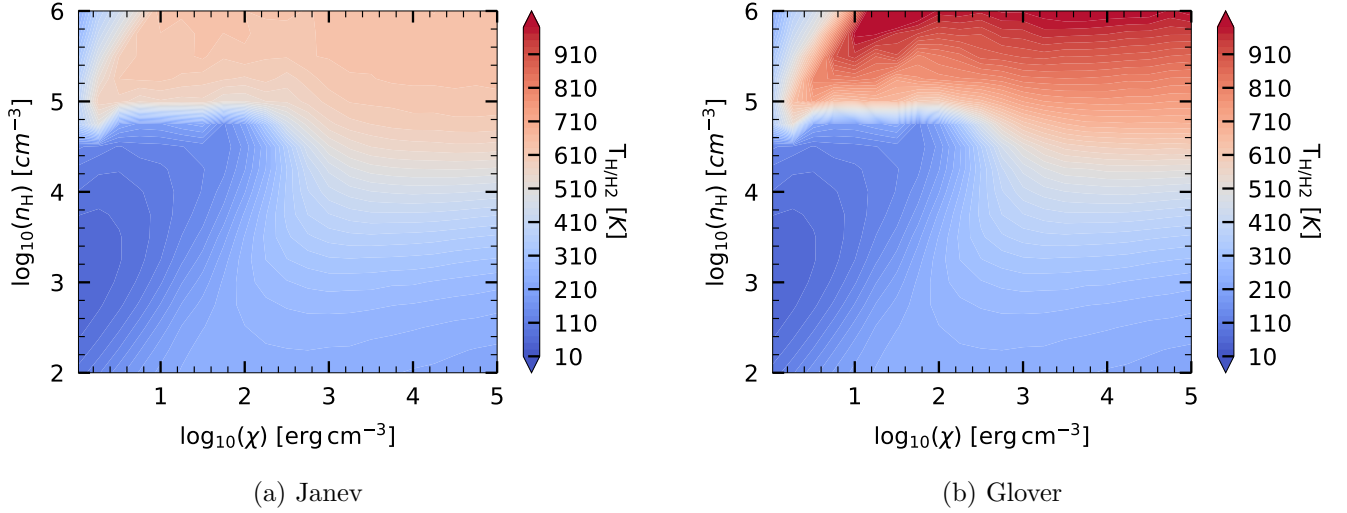


FIGURE 22 – Comparaison des température à la transition H/H<sub>2</sub> des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

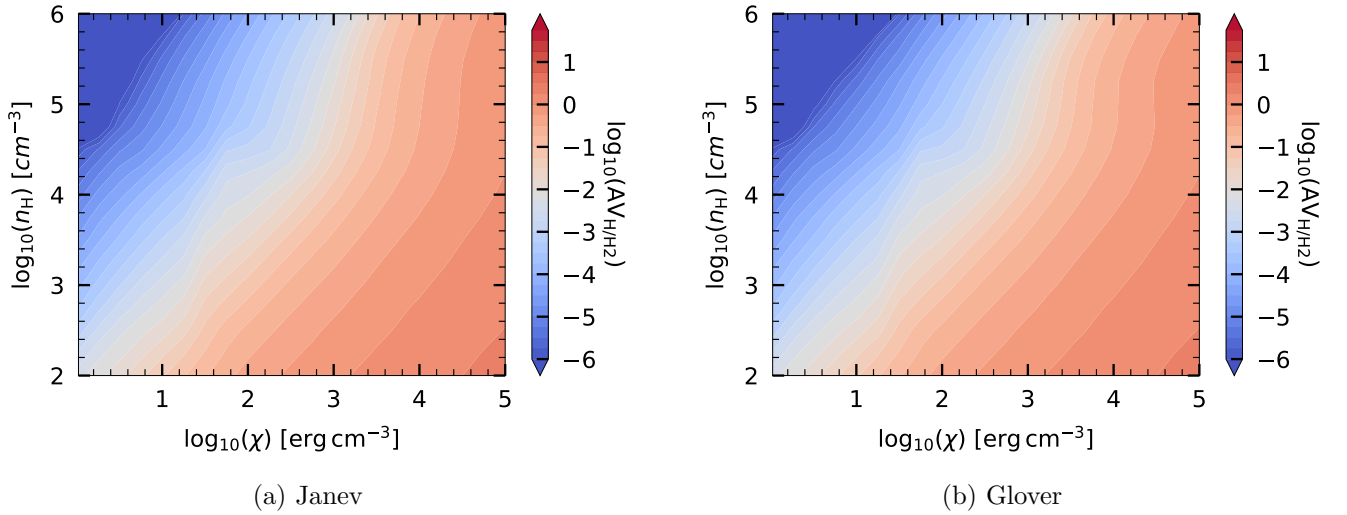


FIGURE 23 – Comparaison des  $A_v$  de la transition H/H<sub>2</sub> des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

### II-2-c) 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  $n_H = 10^{5.5} \text{ cm}^{-3}$  et  $\chi = 10^4$  qui subit une augmentation de +300 K à la frontière. Le profil de température (figure 24a) 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 25 trace les taux de chauffages en fonction de l'extinction. On constate, qu'avec la prescription de Glover, les réactions chimiques chauffent le gaz de manière aussi intense que l'effet photoélectrique ce qui peu commun dans les PDR. Afin de comprendre l'origine de la bosse de température, on a tracé à  $A_v \approx 0.2 \text{ mag}$ , soit au milieu de la bosse, les courbes de chauffages et de refroidissements en fonction de



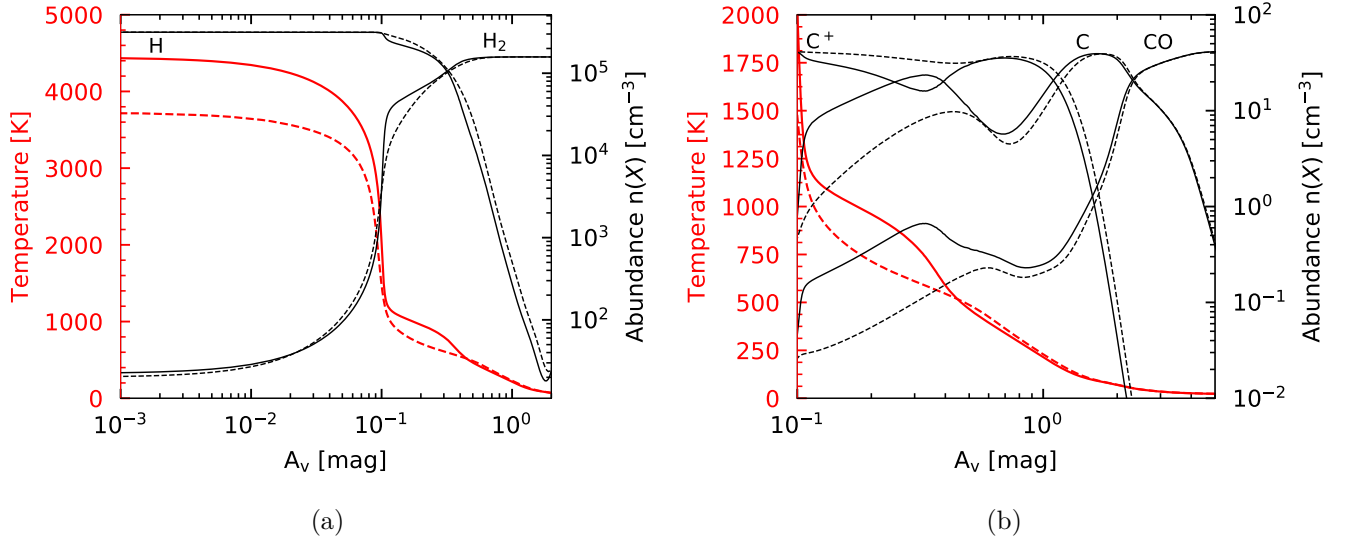


FIGURE 24 – Profils de densités de H et H<sub>2</sub> (a) et C<sup>+</sup>, C et CO (b) d'un modèle à densité constante ( $n_{\text{H}} = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ). Le trait plein correspond au calcul utilisant la prescription de Glover et les trait pointillés celle de Janev.

la température (figure 26). L'équilibre thermique du gaz est déterminée par l'intersection de la courbe de chauffage et de refroidissement total. A première vue, les allures des courbes sont très différentes. En passant de la prescription de Janev à celle de Glover, on voit qu'un nouveau processus de chauffage intervient entre 100 K et 1000 K. Il s'agit des réactions chimiques qui se mettent à chauffer le gaz de manière plus efficace (figure 27).

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 visualise simplement sur la figure 26.

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 28). Les raies  $8 \leq J \leq 15$  doublent leur intensités tandis que les raies  $J \geq 15$  augmentent d'un facteur 10 ce qui est important. <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.

## Références

- [Bakes and Tielens, 1994] Bakes, E. L. O. and Tielens, A. G. G. M. (1994). The Photoelectric Heating Mechanism For Very Small Graphitic Grains and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *The Astrophysical Journal*, 427 :822.
- [Bialy and Sternberg, 2019] Bialy, S. and Sternberg, A. (2019). Thermal Phases of the Neutral Atomic Interstellar Medium – from Solar Metallicity to Primordial Gas. *arXiv e-prints*, page arXiv :1902.06764.

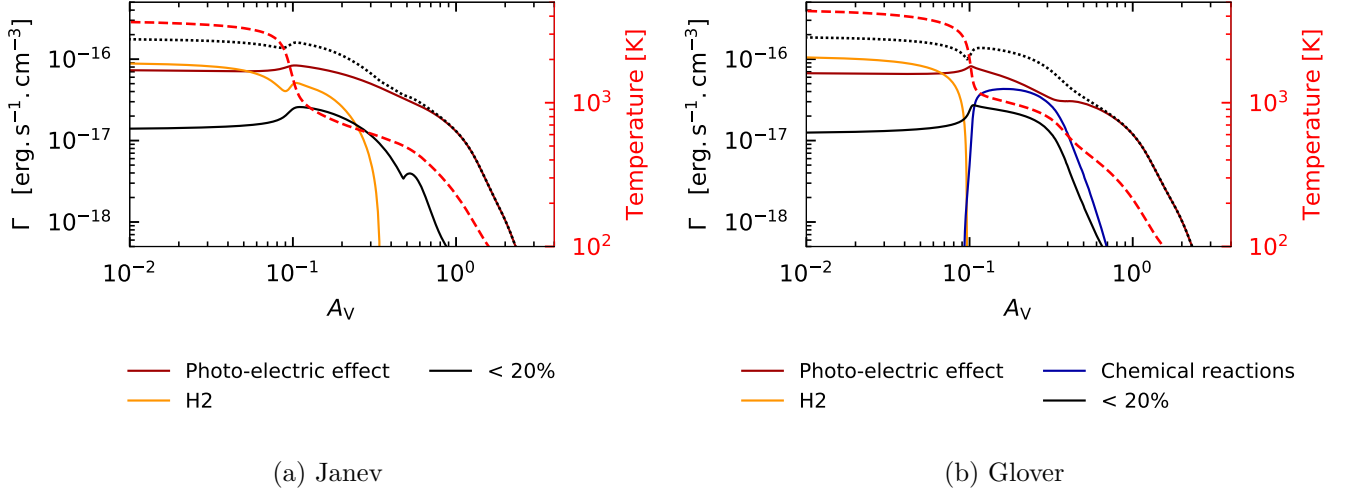


FIGURE 25 – (ANNEXE) Profils des taux de chauffages d'un modèle à densité constante ( $n_{\text{H}} = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ) utilisant la prescription de Janev ou de Glover. La température (axe de droite) est représentée en tiret rouge. Le taux de chauffage total est en pointillé noir.

- [Draine, 2011] Draine, B. T. (2011). Physics of the interstellar and intergalactic medium. "Princeton University Press".
- [Draine and Bertoldi, 1996] Draine, B. T. and Bertoldi, F. (1996). Structure of Stationary Photodissociation Fronts. , 468 :269.
- [Hollenbach et al., 1991a] Hollenbach, D. J., Takahashi, T., and Tielens, A. G. G. M. (1991a). Low-density photodissociation regions. , 377 :192–209.
- [Hollenbach et al., 1991b] Hollenbach, D. J., Takahashi, T., and Tielens, A. G. G. M. (1991b). Low-density photodissociation regions. , 377 :192–209.
- [Kaufman et al., 2006] Kaufman, M. J., Wolfire, M. G., and Hollenbach, D. J. (2006). [Si II], [Fe II], [C II], and H<sub>2</sub> Emission from Massive Star-forming Regions. , 644 :283–299.
- [Le Petit et al., 2006] Le Petit, F., Le Bourlot, J., Roueff, E., and Nehmé, C. (2006). A model for atomic and molecular interstellar gas : The meudon pdr code. The Astrophysical Journal Supplement Series, 164.
- [Neufeld et al., 2012] Neufeld, D. A., Roueff, E., Snell, R. L., Lis, D., Benz, A. O., Bruderer, S., Black, J. H., De Luca, M., Gerin, M., Goldsmith, P. F., Gupta, H., Indriolo, N., Le Bourlot, J., Le Petit, F., Larsson, B., Melnick, G. J., Menten, K. M., Monje, R., Nagy, Z., Phillips, T. G., Sandqvist, A., Sonnentrucker, P., van der Tak, F., and Wolfire, M. G. (2012). HERSCHEL OBSERVATIONS OF INTERSTELLAR CHLORONIUM. The Astrophysical Journal, 748(1) :37.
- [Neufeld and Wolfire, 2009] Neufeld, D. A. and Wolfire, M. G. (2009). The Chemistry of Interstellar Molecules Containing the Halogen Elements. , 706 :1594–1604.
- [Röllig, M. et al., 2006] Röllig, M., Ossenkopf, V., Jeyakumar, S., Stutzki, J., and Sternberg, A. (2006). [cii] 158 emission and metallicity in photon dominated regions. A&A, 451(3) :917–924.
- [Sternberg et al., 2014] Sternberg, A., Petit, F. L., Roueff, E., and Bourlot, J. L. (2014). H i-TO-h2transitions AND h i COLUMN DENSITIES IN GALAXY STAR-FORMING REGIONS. The Astrophysical Journal, 790(1) :10.
- [Tielens, 2005] Tielens, A. G. G. M. (2005). The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium. Cambridge University Press.

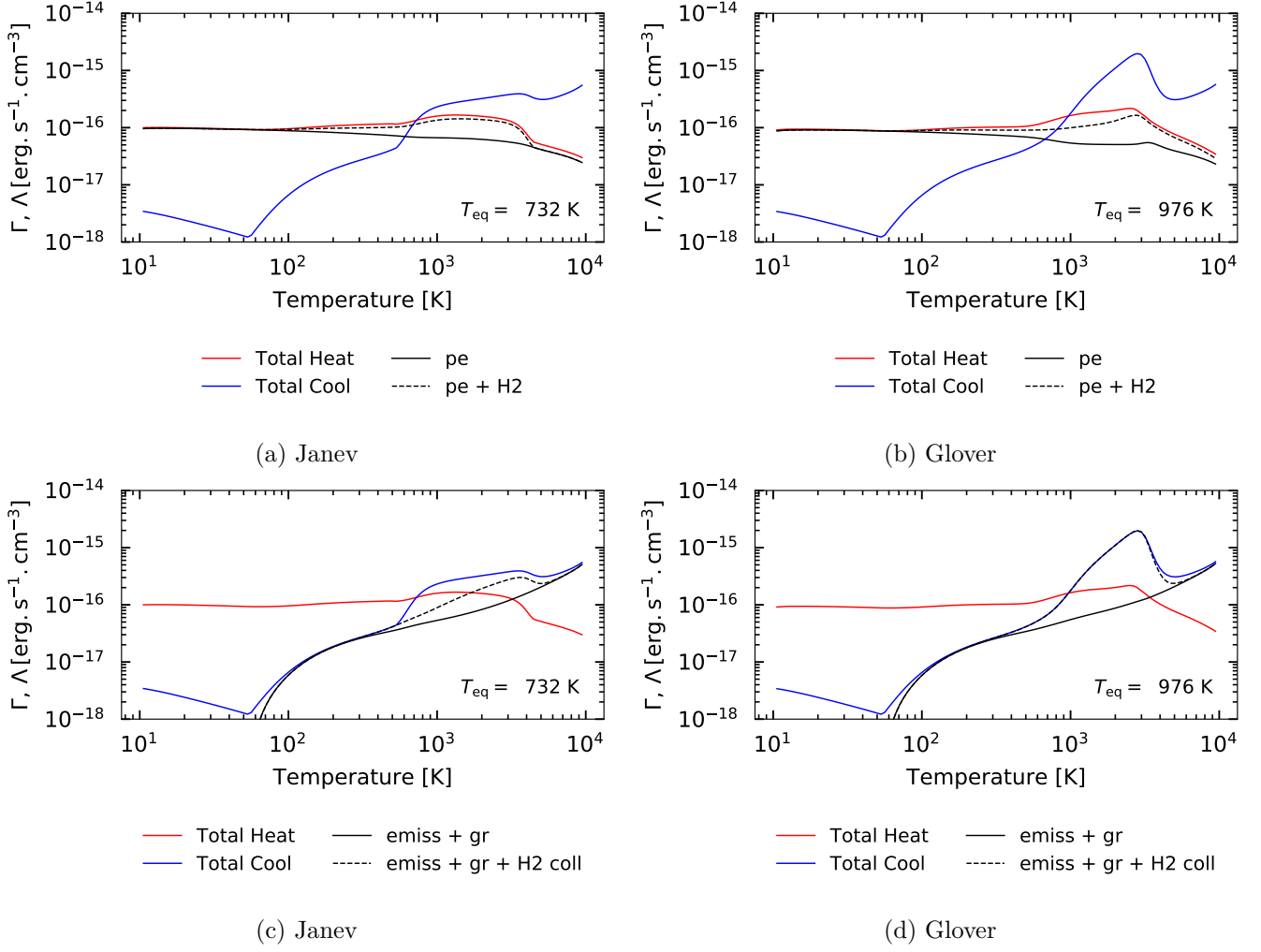


FIGURE 26 – (ANNEXE) Taux de chauffages et de refroidissements en fonction de la température à  $A_V$  de 0.2 mag pour un modèle à densité constante ( $n_{\text{H}} = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ).

- [Weingartner and Draine, 2001] Weingartner, J. C. and Draine, B. T. (2001). Electron-ion recombination on grains and polycyclic aromatic hydrocarbons. *The Astrophysical Journal*, 563(2) :842–852.
- [Wolfire et al., 1995] Wolfire, M. G., Hollenbach, D., McKee, C. F., Tielens, A. G. G. M., and Bakes, E. L. O. (1995). The neutral atomic phases of the interstellar medium. , 443 :152–168.
- [Wolfire et al., 2003] Wolfire, M. G., McKee, C. F., Hollenbach, D., and Tielens, A. G. G. M. (2003). Neutral atomic phases of the interstellar medium in the galaxy. *The Astrophysical Journal*, 587(1) :278–311.

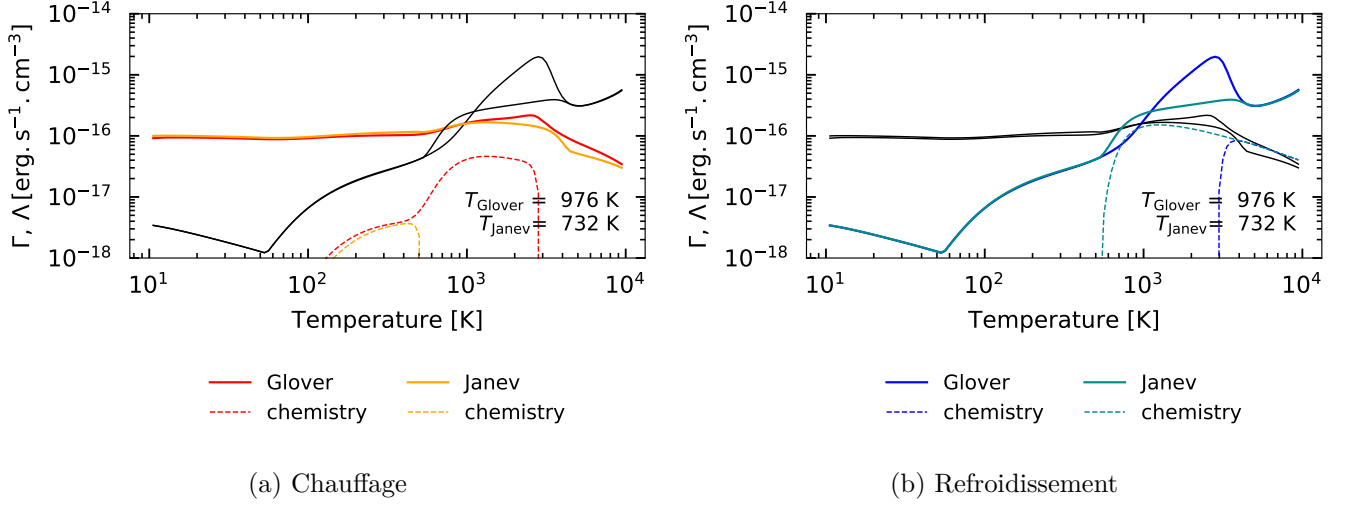


FIGURE 27 – Efficacité du chauffage des réactions chimiques en fonction de la température pour un modèle à densité constante ( $n_H = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ). Les courbes en rouge et jaune sur la figure (a) représente les processus de chauffage tandis que celles en noires les courbes de refroidissement total. Sur la figure (b), les courbes en bleu et bleu clair représentent le refroidissement alors que celles en noires le chauffage.

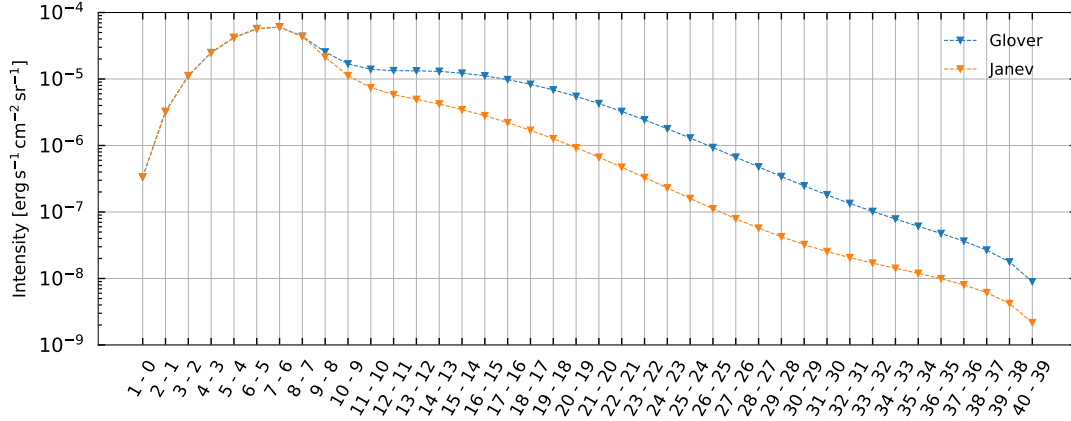


FIGURE 28 – Raies d'émissions du CO pour un modèle à densité constante ( $n_H = 10^{5.5}$  et  $\chi = 10^4$ ) utilisant la prescription de Glover ou bien celle de Janev. Les transitions écrites sur l'axe des abscisses signifient les transitions des niveaux rotationnels de la molécule CO.

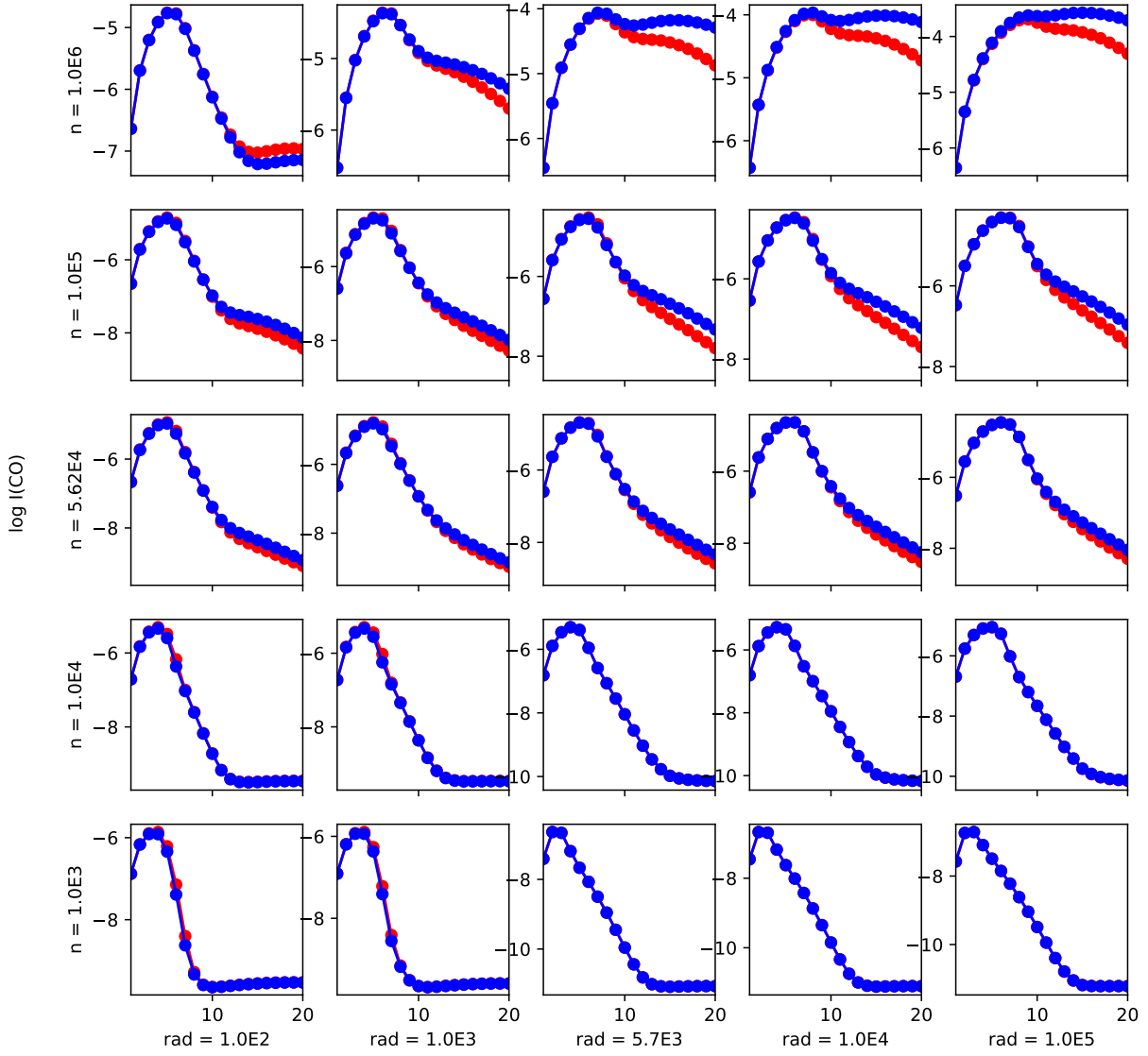


FIGURE 29 – Raies d'émissions du CO pour une grille de à densité constante. Les lignes en rouge sont les modèles utilisant la prescription de Janev tandis que celles en bleues utilisent la prescription de Glover. Les 20 premières transitions sont représentées.