

Note de Stage
Observatoire de Meudon

Antoine Nasser

Printemps Été 2019

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

Table des matières

I) Amplification de l'effet photoelectrique par le chlore	3
1) Neufeld and Wolfire	3
a) Profil des espèces dérivés du chlore	3
b) radm et ladm	4
c) run sur d'autres modèles	4
2) Analyse du rôle du chlore	4
3) Modèle analytique - Chimie	5
a) Ion hydrogène	5
b) Ion chlore	6
4) Recombinaison de H^+ sur les grains	6
5) Modèle analytique - Thermique	7
a) Effet photoélectrique sur les grains	8
b) Couplage gaz-grains	8
c) Refroidissement par les raies d'émissions du C^+ et de O	9
d) Emission Lyman $\text{H}\alpha$	9
e) Recombinaison des électrons sur les grains	9
6) Prédiction de la température au bord de nuage	9
a) Carte de température (pas de PAH)	9
b) Grille de modèles	10
7) Utilisation de modèles particuliers	11
a) Régions denses et illuminées (cas 1 et 2)	12
b) Nouvelle carte de température	14
c) Régions peu denses (cas 3 et 4)	14
d) Région dense et peu illuminée (cas 5)	14
8) Traceurs impactés par le chlore	14
a) Diagrammes d'intensité	14
b) Profils de densités des traceurs	16
c) Cartes d'intensité	18
9) Bonus	20
a) Chauffage à l'entrée du nuage moléculaire	20
II) Pompage UV de la molécule H_2	20
1) Chauffage net par Rollig (1995)	22
a) Chauffage par désexcitation collisionnelle	22
b) Refroidissement par émission de photons	22
2) Bialy et Sternberg (2019)	23
a) Chauffage par désexcitation collisionnelle	23
b) Chauffage par photodissociation	23
3) Absorption du rayonnement	23
a) Shielding par le molécule H_2	23
b) Extinction par les grains	23
4) Comparaison avec le code PDR de Meudon	23
5) Dissociation collisionnelle du H_2 (de Janev à Glover)	24
a) Grilles de modèles - Bord atomique	24
b) Grilles de modèles - Transition H/H_2	25
c) Etude d'un modèle particulier	26

I) Amplification de l'effet photoelectrique par le chlore

1) Neufeld and Wolfire

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 H_2Cl^+ , HCl et HCl^+ excitées ont également été observées par Herschel dans plusieurs sources de la Galaxie et notamment dans le nuage moléculaire de la barre d'Orion [Neufeld et al., 2012, Neufeld and Wolfire, 2009]. On a tout d'abord cherché à reproduire les résultats de [Neufeld and Wolfire, 2009]. On a ajouté un nouveau fichier de chimie au code comportant les réseaux chimiques du Cl et du F et on a résolu une PDR avec les mêmes conditions physiques de l'article (1).

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

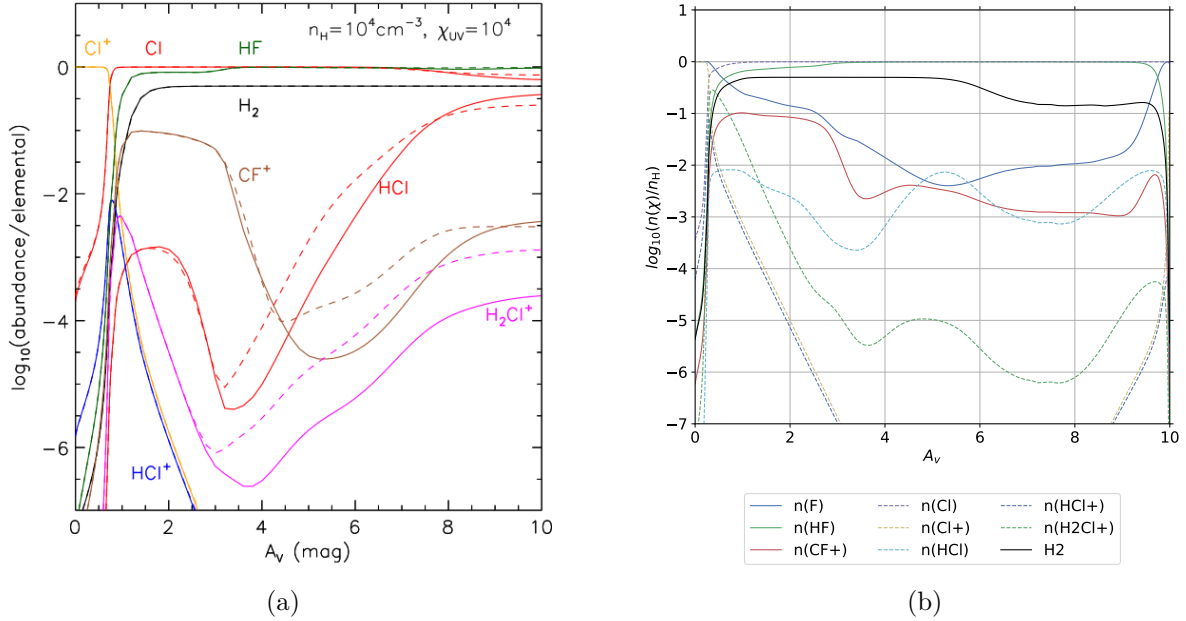


FIGURE 1 – Profil de densité pour un modèle isochore $n_{\text{H}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et $\chi_{\text{UV}} = 10^4$. La figure de gauche (a) est extraite de [Neufeld and Wolfire, 2009] où les profils sont obtenus à partir d'une version modifiée du code de [Kaufman et al., 2006]. Le trait plein est 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.

code (1.5.2_rev_1900), ne peut former de H_2 dans le nuage moléculaire. Pour parer cela, on a utilisé une réaction équivalente. On voit que l'on retrouve les allures des profils de densités. Les profils du Cl, Cl^+, HCl, HF sont proches en ordre de grandeurs. Ceux du H_2HF^+, HCl^+, CF^+ n'ont pas exactement les mêmes allures ni les mêmes valeurs.

b) radm et ladm

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 (2). 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 en situation de bistabilité thermique qui est un phénomène nouveau.

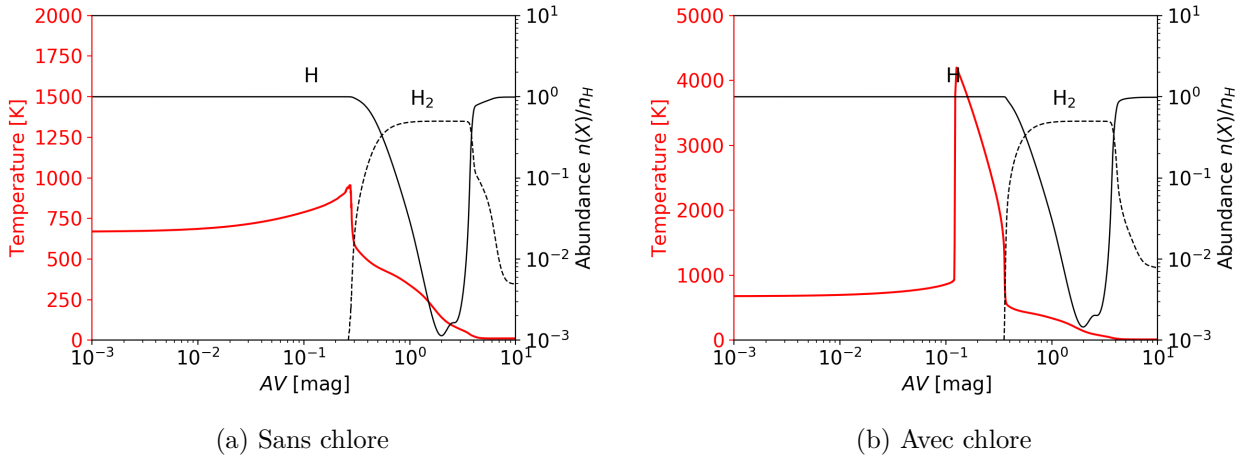


FIGURE 2

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 champs de rayonnement UV, intense en bord de nuage atomique, photoionise le chlore et produit des ions Cl^+ et des électrons. Le transfert de charge du Cl^+ avec l'hydrogène est une réaction rapide qui permet au chlore de se rendre de nouveau disponible pour la photoionisation. Le chlore permet ainsi de ioniser indirectement l'hydrogène. Par conséquent, la fraction électronique du gaz augmente. Or on sait que l'effet photoélectrique sur les grains fonctionne d'autant plus que la fraction électronique dans le nuage est importante¹. L'effet photoélectrique chauffe ainsi le gaz ce qui améliore l'efficacité du transfert de charge du Cl^+ avec l'hydrogène. En d'autres termes, le chlore induit une rétroaction positive de l'effet photoélectrique sur les grains. Cet emballement a tendance à chauffer le gaz à des températures nettement plus fortes et ce malgré la faible abondance du chlore.

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.

L'emballlement de l'effet photoélectrique se produit à partir de 1000 K. Or la photoionisation du carbone et du soufre produit les électrons en bord de nuage atomique indépendamment de la température. Il existe une température où le transfert de charge devient suffisamment efficace pour que la fraction d'électrons créée via le chlore devienne dominante devant celle de la ionisation du carbone et du soufre et amorce la 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 emballlement similaire à celui induit par le chlore.

3) Modèle analytique - Chimie

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

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

a) Ion hydrogène

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

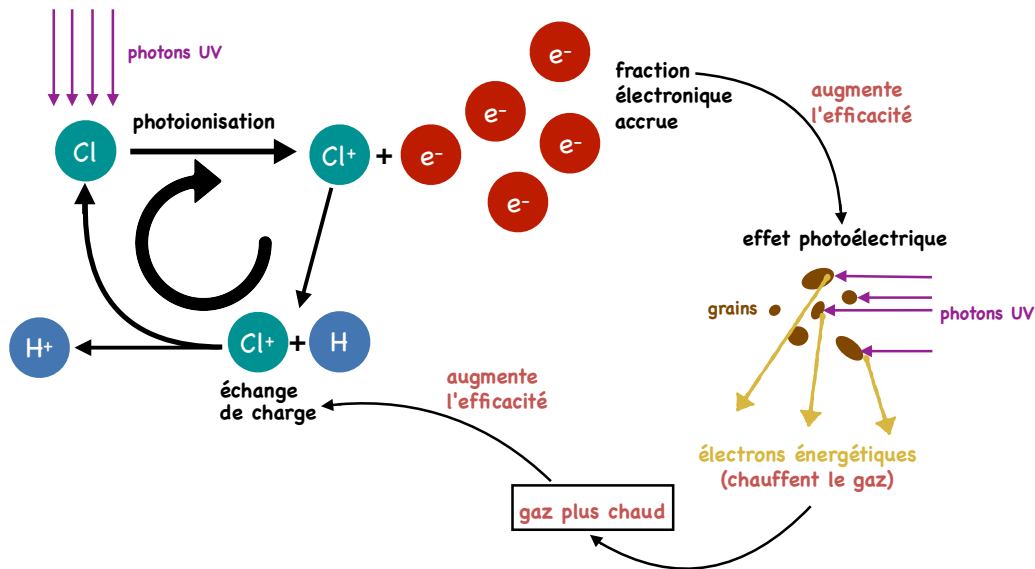
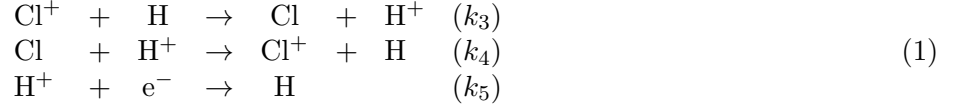


FIGURE 3 – Schéma représentant l'impact du chlore sur la chimie de bord de nuage atomique



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

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

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

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

avec,

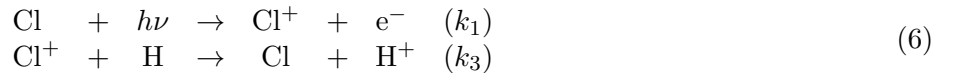
$$\delta_{Cl} = 1.810^{-7} = \frac{n(\text{Cl}) + n(\text{Cl}^+) + \dots}{n(\text{H}) + n(\text{H}^+) + 2n(\text{H}_2) + \dots} \approx \frac{1}{n_{\text{H}}}(n(\text{Cl}) + n(\text{Cl}^+)) \tag{4}$$

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

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

b) Ion chlore

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



Un travail similaire nous donne

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

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

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

4) Recombinaison de H^+ sur les grains

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

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

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

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

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

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

La fonction newton de la librairie `scipy.optimize` vient à bout de ce système. La densité d'électrons calculée 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 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 ?

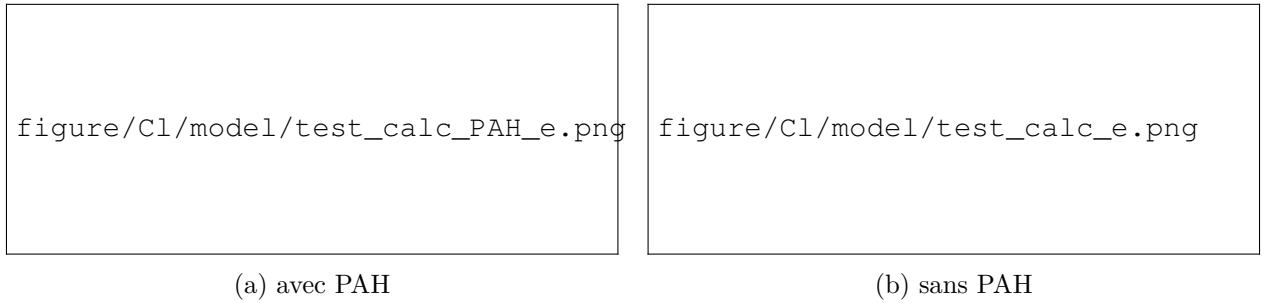


FIGURE 4 – Profil de la densité électronique calculé par le modèle. La formule proposée par [Weingartner and Draine, 2001] prend en compte la recombinaison sur les PAH. Avec la recombinaison, la prédiction de la densité d'électrons est bonne dans le cas avec PAH. Si on ne prend pas en compte les PAH,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

5) Modèle analytique - Thermique

On cherche la température d'équilibre du milieu dans différentes configurations de PDR. On considère dans ce modèle uniquement le chauffage par effet photoélectrique, le chauffage par H_2 qui joue principalement dans les régions hautes densités et faible champs de rayonnement sera traité plus tard. On cherche $\Gamma = \Lambda$ en fonction de la température avec

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

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 :

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

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

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

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

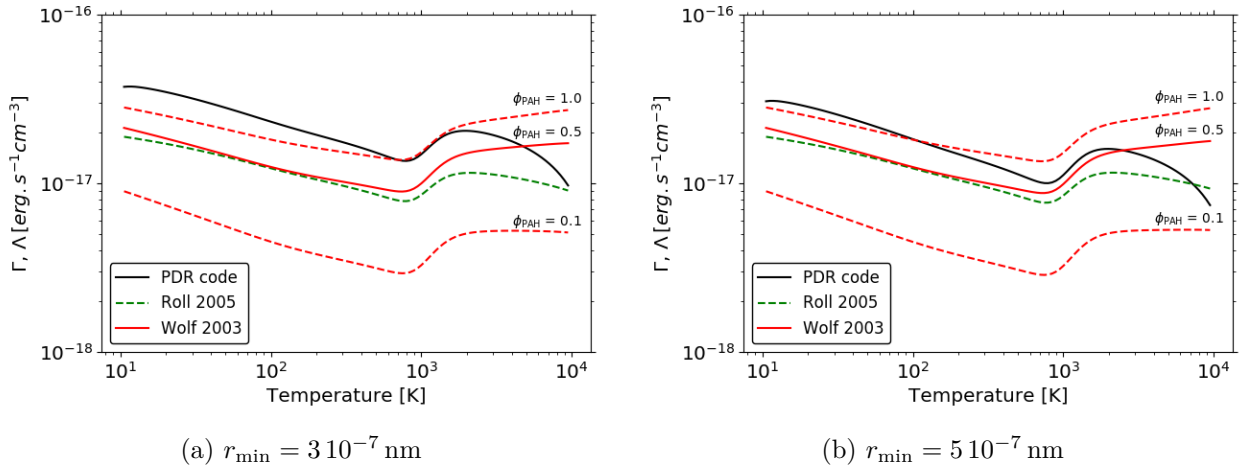


FIGURE 5 – Comparaison des formules de l'effet photoélectrique de [Röllig, M. et al., 2006] et [Wolfire et al., 2003] avec le code PDR pour différents r_{min}

b) Couplage gaz-grains

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\text{Avec } n_{\text{cr01}}(T) = \frac{1.66 \cdot 10^{-5}}{1.35 \cdot 10^{-11} T^{0.45}} \text{ et } n_{\text{cr12}}(T) = \frac{8.46 \cdot 10^{-5}}{4.37 \cdot 10^{-12} T^{0.66}}$$

d) Emission Lyman $H\alpha$

[Tielens, 2005], Eq 2.62

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

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].

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

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

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

6) Prédiction de la température au bord de nuage

a) Carte de température (pas de PAH)

Que fait le modèle ? Connaissant les expressions des termes de chauffages Γ et Λ et étant capable de calculer une densité d'électrons n_e en fonction de la température, il détermine les points T_{eq} tel 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 visualise sur la figure 6 la température maximale que peut atteindre le bord atomique de la PDR. On ne prend pas tout de suite en compte la recombinaison sur les grains. On voit que l'ajout du chlore

peut provoquer un emballement de la température pour les PDR denses et fortement illuminées (de type bar d'Orion). La bistabilité représenté en hachuré couvre presque la totalité de la solution chaude.

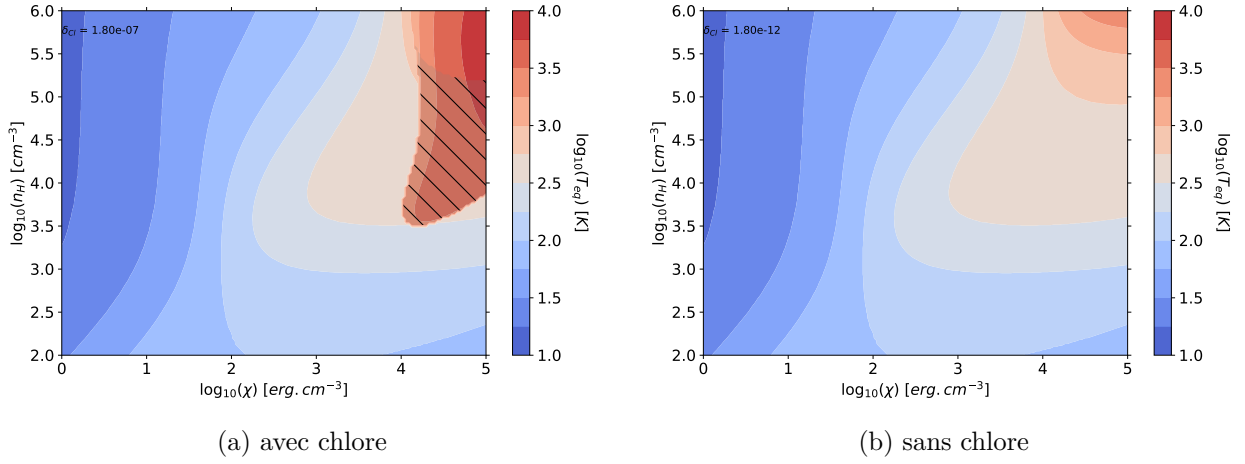


FIGURE 6 – Carte de température du bord atomique - pas de recombinaison du H^+ sur les grains

Si l'on prend en compte la recombinaison sur les grains, la prédiction des la densité d'électrons devient quantitativement proche de celle que calculerait le modèle. En retracant les cartes de températures (figure 7) on voit que la recombinaison sur les grains réduit légèrement vers les champs de rayonnement plus fort la solution chaude (faire une map du rapport).

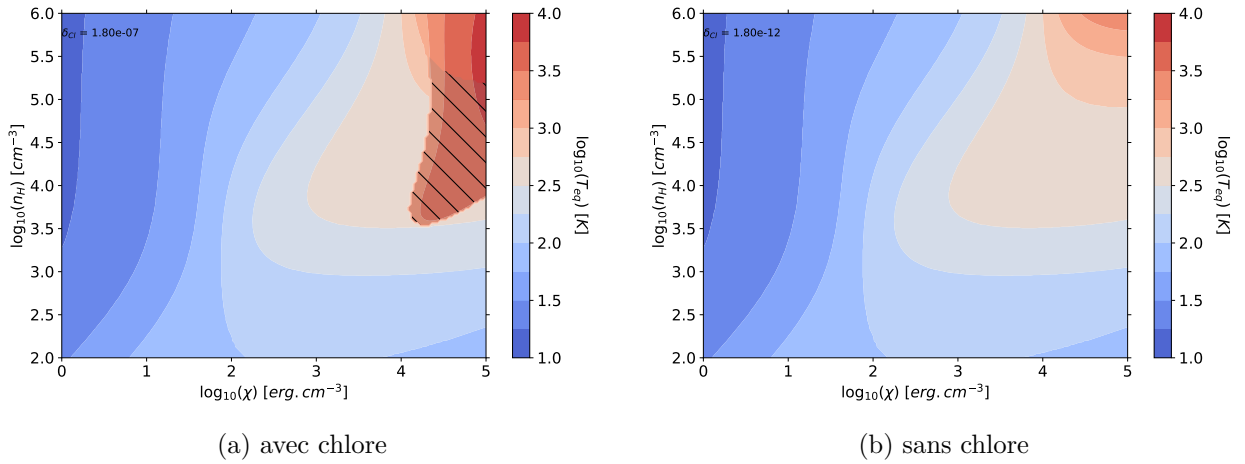


FIGURE 7 – Carte de température du bord atomique - prise en compte de la recombinaison du H^+ sur les grains

b) Grille de modèles

On a lancé des grilles de modèles de la version 1.5.2_rev_1900 du code PDR de Meudon avec et sans chlore et avons tracé la température de la deuxième cellule des calculs (8).

Les cartes sont différentes de celles prédites par le modèle. La région faible champs de rayonnement et haute densité est prédominée par le chauffage par la molécule H_2 qui n'est pas pris en compte dans le modèle. La quadrant grand n_H et grand G_0 et marqué par l'ajout du chlore. Une partie des modèles arrive

à atteindre la solution chaude créé par le chlore. La moitié basse densité et néanmoins sensiblement plus chaude que prédit par le modèle.

Que se passe t'il à faible densité ? Pourquoi n'a t on pas les tangentes horizontales de T ? pourquoi un point selle ? peut etre $H2$

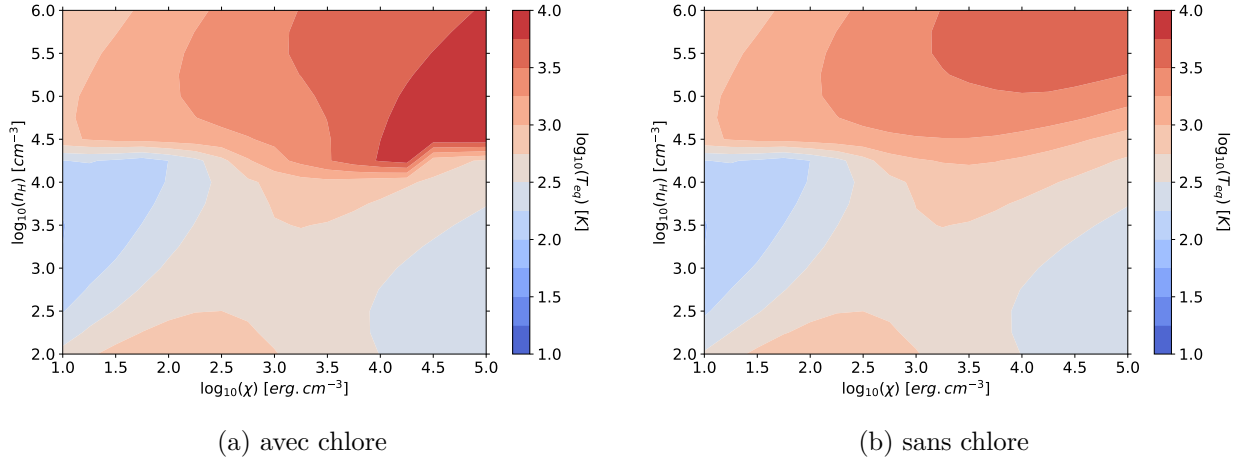


FIGURE 8 – Température en bord de nuage atomique calculé par le code PDR 1.5.2_rev_1900. Les PAH n'ont pas été inclus dans le .in

Lorsqu'il y a une instabilité le code PDR peut sauter sur la solution haute ou basse en s'enfonçant dans le nuage. C'est un petit défaut du code qui n'arrive pas à rester sur une branche de solution. Pour essayer de capter toutes les solutions concernées, on trace la température maximale en zone atomique (figure 9). Quelques modèles sont concernés et la zone chaude devient plus grande.

Attention, le sursaut de température peut etre provoqué par la recombinaison électronique en bord de nuage moléculaire ! Il faut creuser l'origine de ce sursaut de température

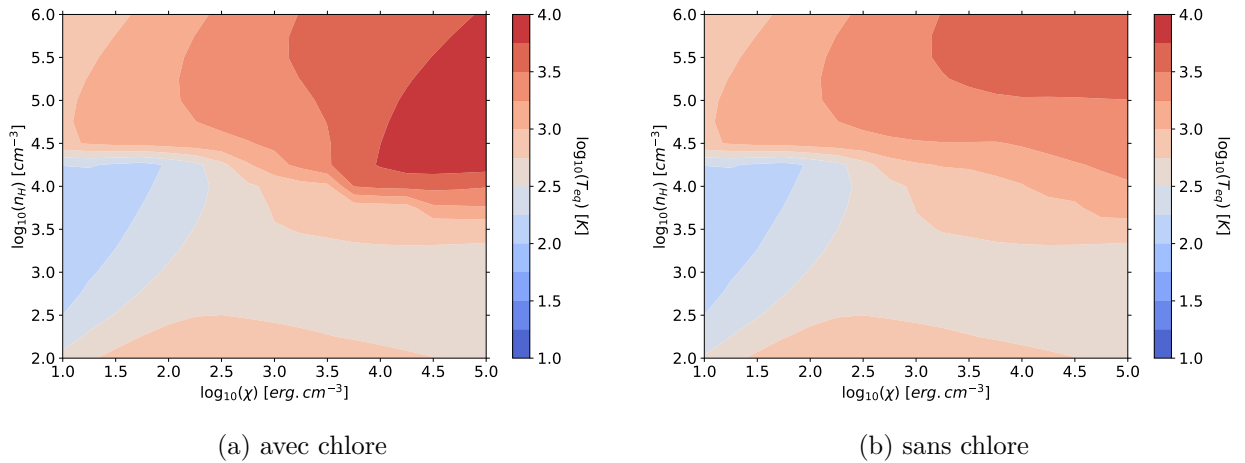


FIGURE 9 – Température maximale en zone atomique calculé par le code PDR 1.5.2_rev_1900

7) Utilisation de modèles particuliers

Pour étudier plus précisément le bord atomique on a extrait à partir des grilles calculé par le code (1.5.2_rev_1900) 5 modèles de PDR, avec ou sans chlore, ayant des conditions physiques différentes.

Les 5 cas correspondent aux noms des modèles : 1. d5p0r4p5, 2. d4p0r4p5, 3. d3p0r4p5, 4. d3p0r3p0, 5. d5p0r3p0. **Cl155_n** et **noCl155_n** correspondent à des modèles à densité constante avec ou sans chlore de la version 1.5.2_rev_1900.

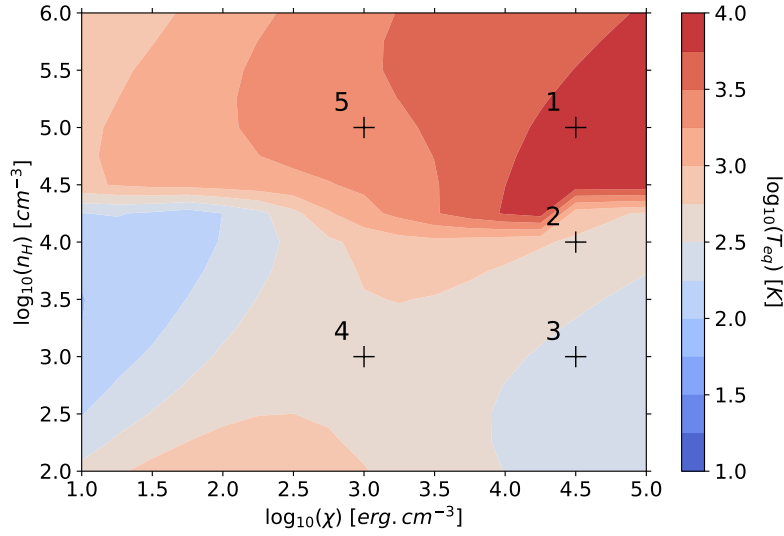


FIGURE 10 – Les croix situent dans l’espace des paramètres les modèles retenus

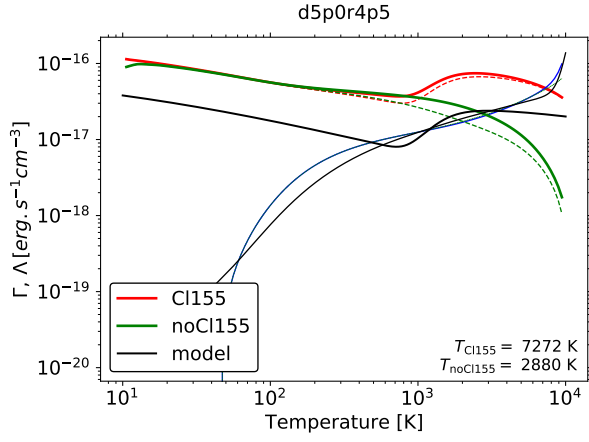
a) Régions denses et illuminées (cas 1 et 2)

On a tracé en trait plein rouge et vert les fonctions de chauffage calculés par le code pour les modèles avec et sans le chlore. En pointillé est représenté la colonne de l’effet photoélectrique. Le chauffage par H_2 est du même ordre de grandeur. L’emballage de la courbe de chauffage est gouverné par l’effet photoélectrique seulement. En bleu (trait plein et pointillé) sont tracé les fonctions de refroidissement pour les deux modèles. Le chlore n’a aucune action sur elles. En noir est représenté les courbes de chauffage et de refroidissement donné par le modèle du chlore que l’on a construit.

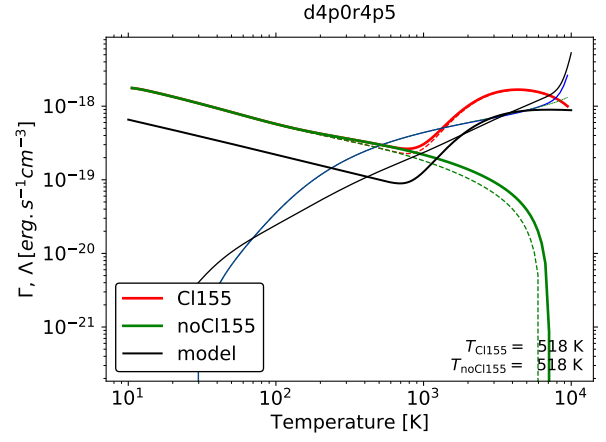
Pour le cas 1 (à gauche) les courbes de chauffage et refroidissement se coupe en un seul point d’intersection. Il n’y a pas de bistabilité. Le modèle (en noir) décellerait une bistabilité et une température d’équilibre plus froide que celle donnée par le code. Dans le cas 2 (à droite) on a la bistabilité et l’emballage provoqué par le chlore est net. Une fois de plus le modèle que l’on a construit sous estime le chauffage par effet photoélectrique et trouve des températures d’équilibre plus petite que celle calculé par le code. Si le code n’a pas réussi à trouver dans les deux la solution chaude, on est maintenant sur qu’une instabilité peut être provoqué dans ce type de PDR. Ces figures montrent un défaut de la formule de l’effet photoélectrique que l’on utilise ([Röllig, M. et al., 2006]) qui est qu’elle sous-estime environ d’un facteur 3 le chauffage calculé par le code². Ce facteur est présent dans les autres cas que l’on a tracé en annexe (a faire). Un second manque à la formule proposé par Rollig est la forme de la courbe qui s’estompe aux très hautes températures (regarder les explications physiques de pourquoi ca s’arrete quitte à proposer une formule bâtarde).

Si l’on corrige la formule de Rollig d’un facteur 3 en prenant un $\Gamma_{pe}^{Rollig*} = 3 \times \Gamma_{pe}^{Rollig}$ le modèle devient plus juste (figure 12 et colle aux courbes de chauffage calculé par le code. La formule reste néanmoins toujours trop grossière à très hautes températures.

2. A titre informatif, on a choisit dans les calculs $r_{min} = 1 \cdot 10^{-7} m$ et $r_{max} = 3 \cdot 10^{-5} m$ et pas de PAH.

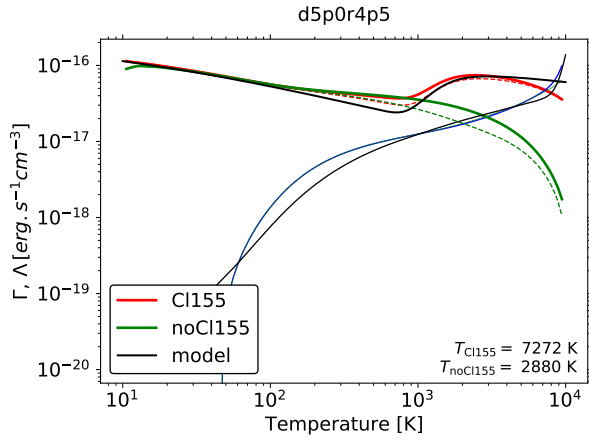


(a) cas 1

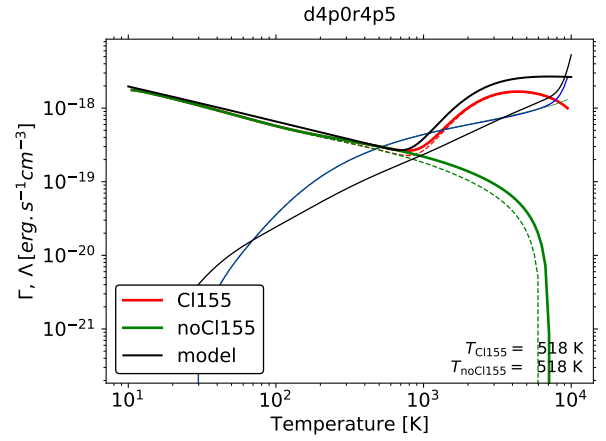


(b) cas 2

FIGURE 11 – Courbes de chauffage et refroidissement en fonction de la température (cas 1 et 2)



(a) cas 1



(b) cas 2

FIGURE 12 – Multiplication de l'effet photoélectrique d'un facteur 3

b) Nouvelle carte de température

Que devient le carte de température si l'on booste l'effet photoélectrique et prenons $\Gamma_{pe}^{\text{Rollig*}}$? On voit (figure 13) que le chlore agit impacte toutes les régions fortement illuminées et qu'il peut déclencher une instabilité dans les régions peu denses. (est ce que cela a un sens ?). On remarque que l'on obtient également des solutions plus chaudes pour les régions peu denses et fortement illuminé dans le cas sans chlore. On retrouve un peu mieux les solutions chaudes des la moitié basse densité des grilles. *Peut etre que le H2 va tout changer*

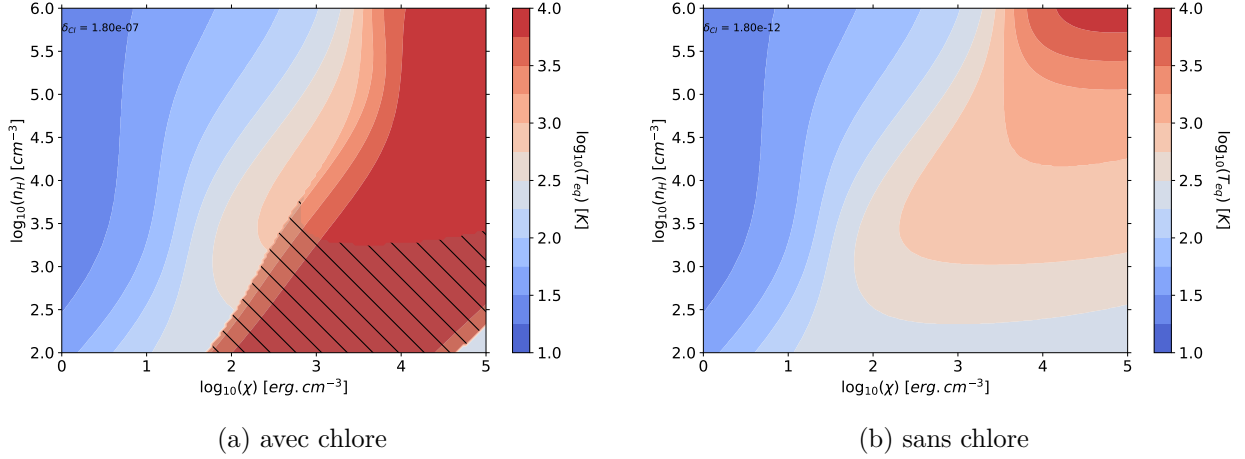


FIGURE 13 – Carte de température du bord atomique - pas de recombinaison du H^+ sur les grains

c) Régions peu denses (cas 3 et 4)

Pour ce type de PDR, l'ancienne prescription de l'effet photoélectrique dans le modèle ne nous permettait pas de prédire une augmentation de la température en bord de nuage des PDR. Or on voit sur la figure 14 que l'effet photoélectrique s'emballe également pour les PDR peu denses mais que les courbes ne parviennent pas à se couper pour des températures plus chaudes. Cela se joue à peu.

L'existence de deux solutions (une chaude et une froide) que l'on prédit avec les nouvelles cartes de température du modèle de chlore dans les régions basse densité sont, d'après le code PDR, plausibles. Ici encore, la formule de Rollig surestime l'effet photoélectrique aux hautes températures.

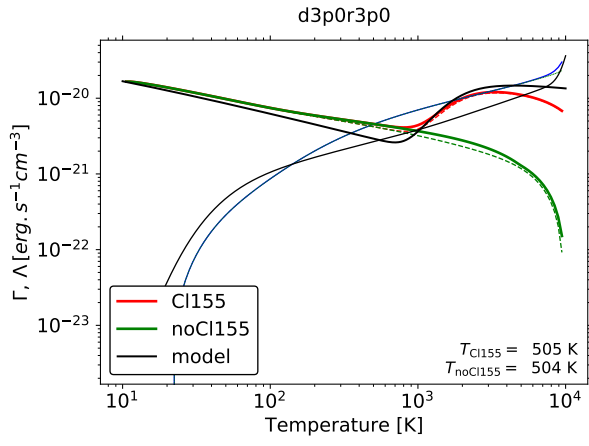
d) Région dense et peu illuminée (cas 5)

Dans cette région, l'effet photoélectrique (en pointillé) reste à plat et la fonction de chauffage est dominée par le chauffage par la molécule H_2 qui s'emballe dans une plage de température intermédiaire (figure 15). Il n'y pas d'instabilité provoqué par le chlore, cette observation motive l'étude portant sur le chauffage par la molécule H_2 .

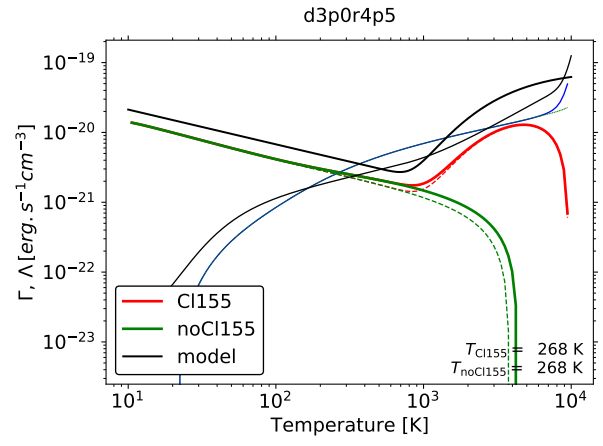
8) Traceurs impactés par le chlore

a) Diagrammes d'intensité

On trace à partir des modèles précédents les diagrammes d'intensité des principaux traceurs des PDR. On cherche à trouver des signatures dans les spectres ou des raies singulières impactées par le chlore.



(a) cas 3



(b) cas 4

FIGURE 14 – Courbes de chauffage et refroidissement régions basses densités

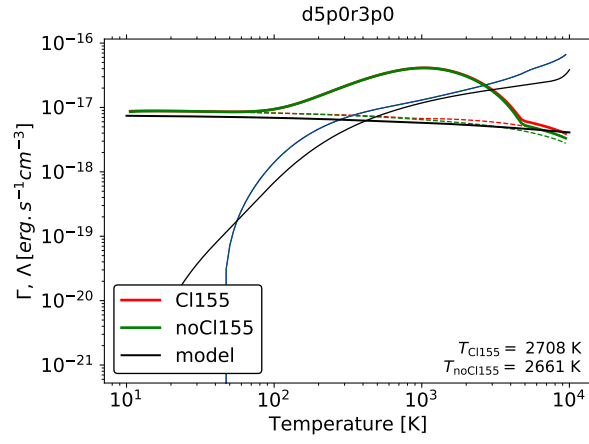


FIGURE 15 – cas 5

L'ajout du chlore augmente certaines des N, N⁺, S, Si comme on le voit sur la figure (Figure 16). La solution chaude avec chlore peut avoir des raies d'un facteur 10 fois plus importante. Le changement le plus remarquable est l'azote atomique. Les traceurs pas impactés sont CS, H₂O, H₂ et le CO. L'ajout du chlore diminue même l'intensité de certaines raies tels que celles du CS ou H₂O Enfin (annexe) les diagrammes d'excitations pour les modèles 3-4-5 ne sont nullement impactés par l'ajout du chlore : ce qui voudrait dire que l'impact du chlore serait confiné dans la région que l'on a déterminé.

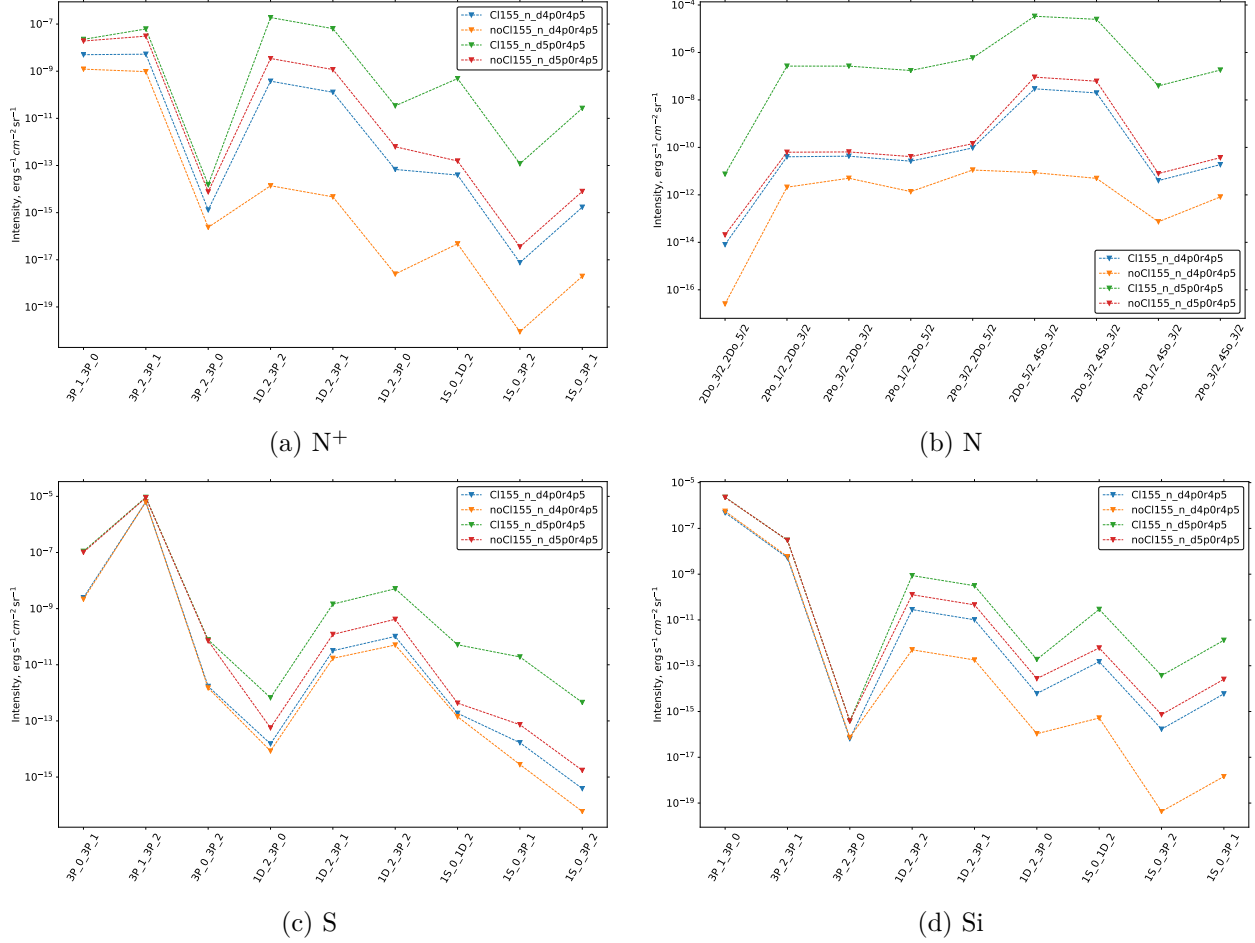
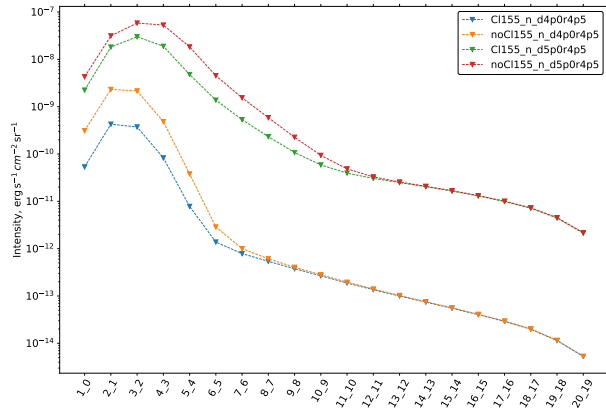


FIGURE 16 – Diagramme d'excitation des traceurs modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (1.5.2_rev_1900)

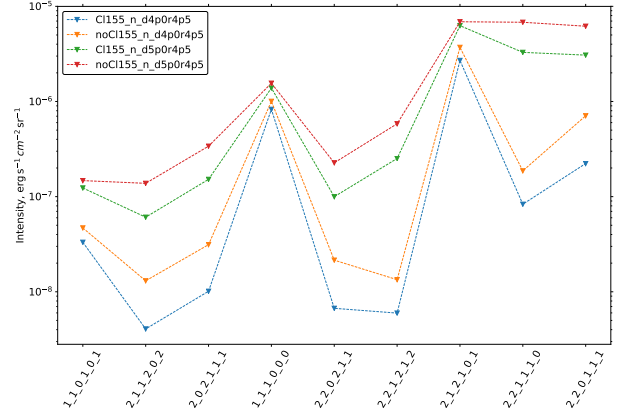
b) Profils de densités des traceurs

Pour comprendre les changements causé par le chlore sur les raies des traceurs, on a tracé les profils de densités et températures des traceurs dans le nuage figures 18 et 19. On remarque que pour le N, la densité en bord atomique, reste identique tandis que pour le N⁺, S et Si leurs densités augmentent d'un facteur $\times 2$ à $\times 6$ en plus de l'augmentation de température. Ces raies seraient excités principalement dans les bords atomiques de la PDR et sont touché par l'ajout du chlore. Les autres espèces (CS, H₂O, H₂ et CO) ne semblent pas impacté par le chlore (hormis CS d'un facteur $\times 2$).

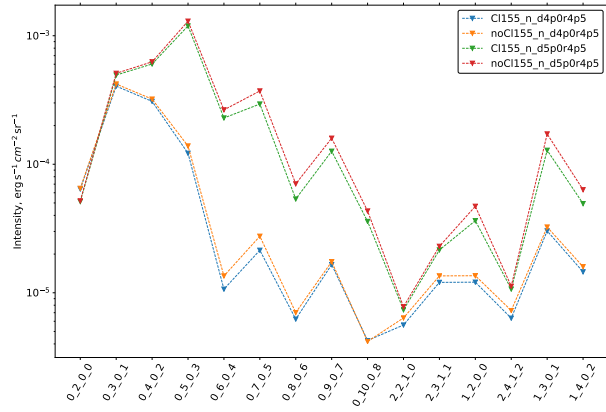
Attention, on voit les profils s'effondrer à partir de $A_V \geq 4$ qui est du à un défaut du code dans le cas



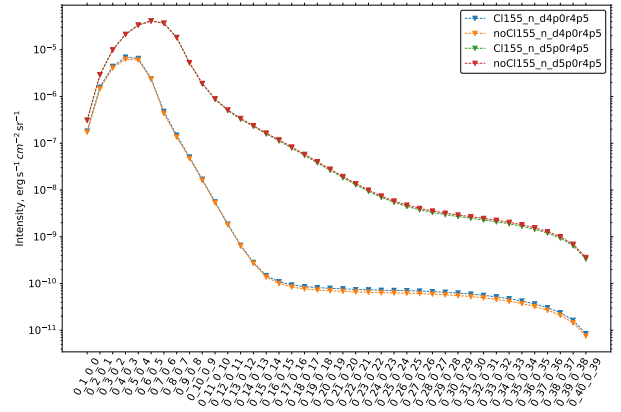
(a) CS



(b) H₂O



(c) H₂



(d) CO

FIGURE 17 – Diagramme d'excitation des traceurs peu modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (1.5.2_rev_1900)

des modèles à densités constantes qui ne peut plus calculer la formation de H_2 au sein du nuage moléculaire.

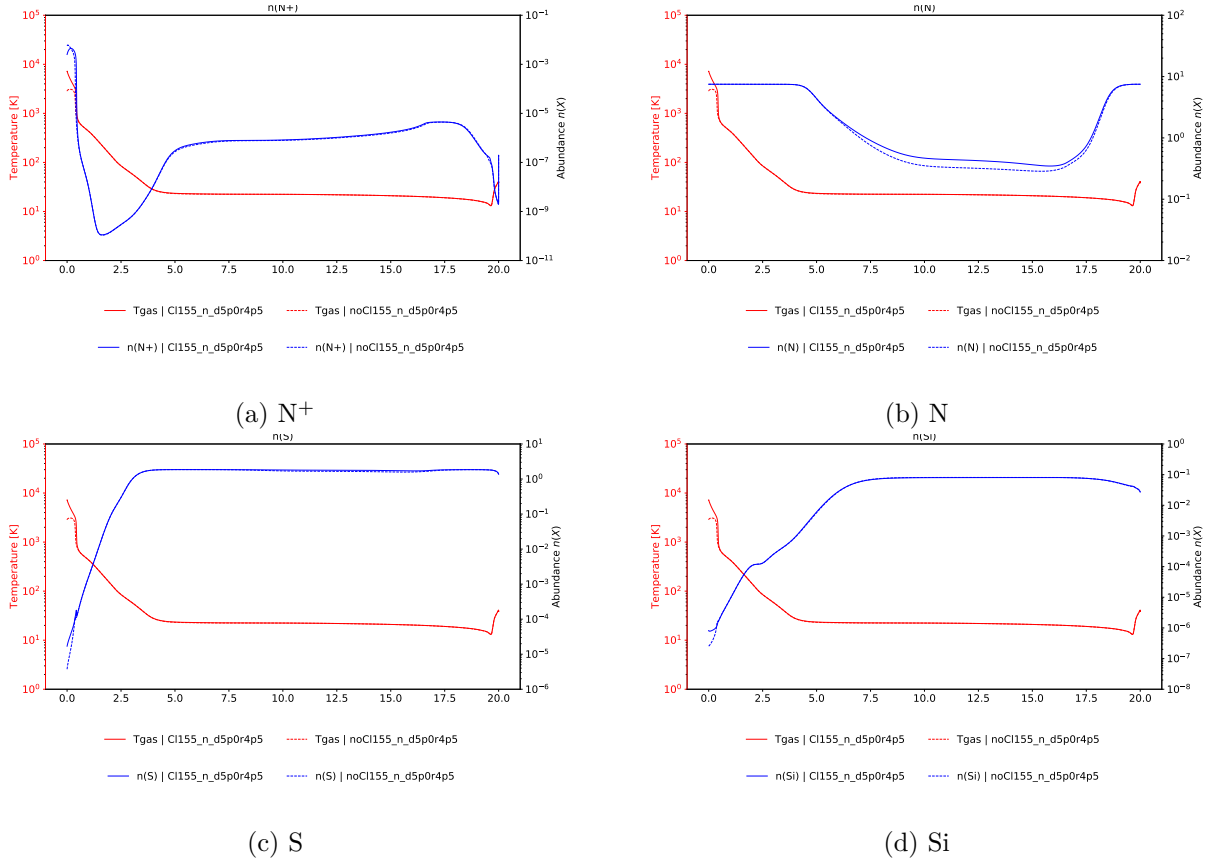
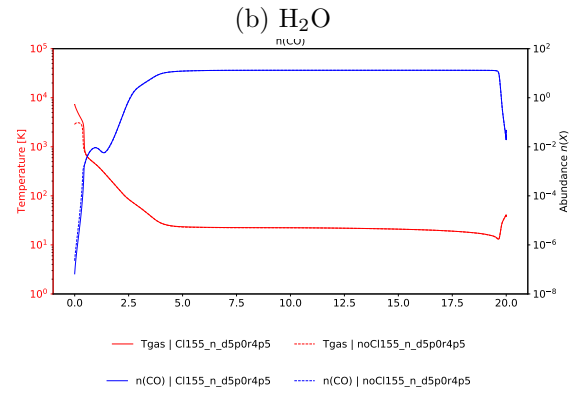
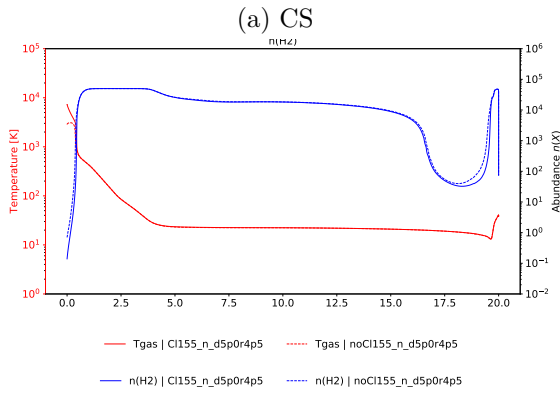
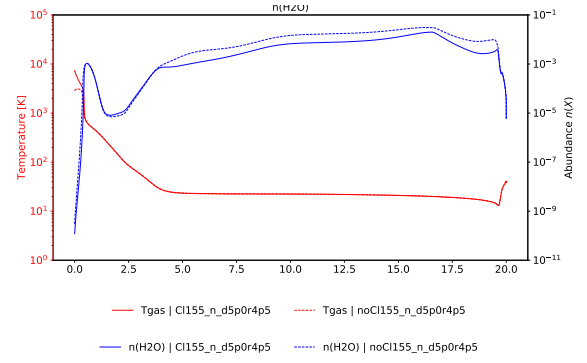
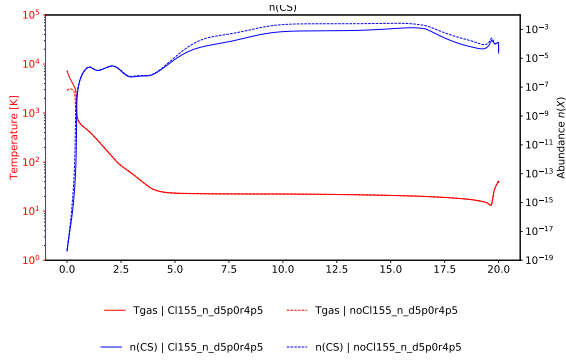


FIGURE 18 – Profils de densité des traceurs modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (1.5.2_rev_1900)

c) Cartes d'intensité

Les raies que l'on espère pouvoir observer doivent être intenses (supérieur à un "seuil" d'observabilité $\sim 10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$), sensible l'ajout du chlore et appartenir aux domaines de longueurs d'ondes observées. La raie la plus prometteuse est la raie $[N]5200.257\text{\AA}$ correspondant à la transition $(El=2Do, J=5/2) \rightarrow (El=4So, J=3/2)$. On voit sur la figure 20 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 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_COLSP). 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

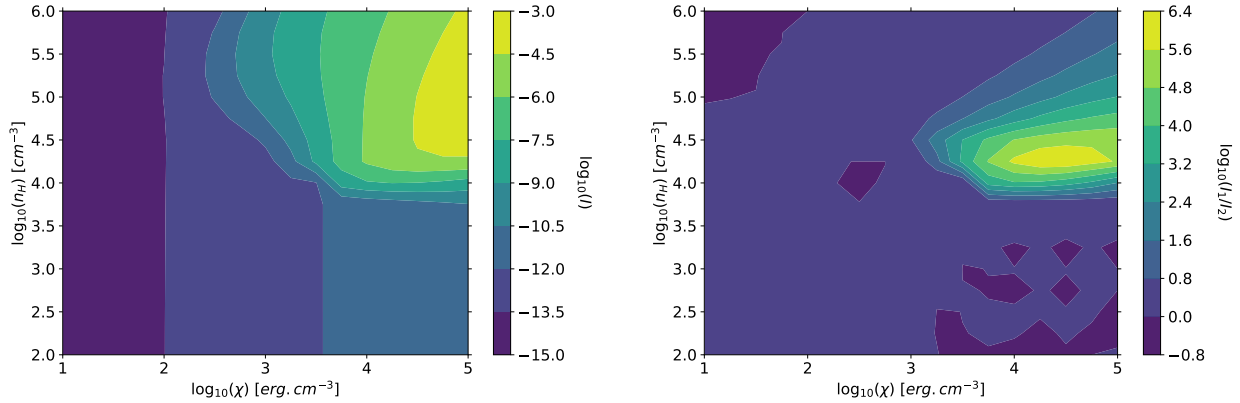


(c) H₂

(d) CO

FIGURE 19 – Profil des densités des traceurs peu modifiés par l'ajout du chlore dans le code PDR (1.5.2_rev_1900)

modèles à densités constantes qui corrobore rarement avec les données. Il faudrait lancer des grilles isobares et voir ce qu'il en est.



(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 20

9) Bonus

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 22). On cherche à comprendre quel phénomène est à l'origine de l'augmentation de la température? Pourquoi le taux de H2 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? Pourquoi ça s'arrête : lorsque la température du gaz est trop élevé, les états ro-vibrationnelles de H2 sont remplis et se desexcitent en émettant des photons. On le voit sur la figure 22 ou le chauffage par H2 cessent de chauffer.

On a tracé une figure comparant la température, la densité de molécules H2 et la densité d'électrons à l'entrée du nuage moléculaire (23). 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).

II) Pompage UV de la molécule H2

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

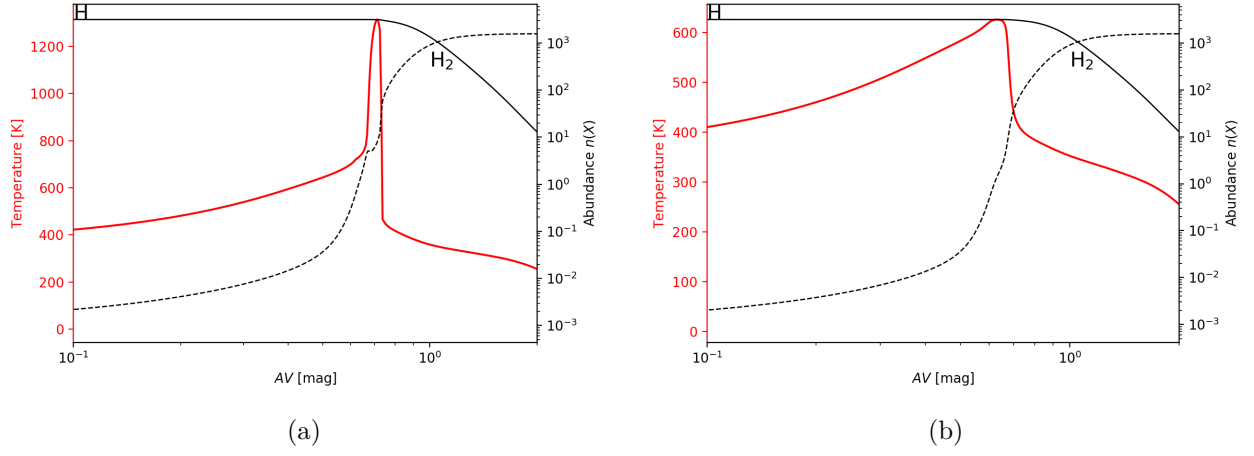


FIGURE 21 – Profil de température et de densités de H et H₂. A l'entrée du nuage la température augmente accompagné d'une légère diminution de la densité de H₂. Cet effet est accentué sur (a) qui prend en compte les nouveaux taux de collision de H₂.

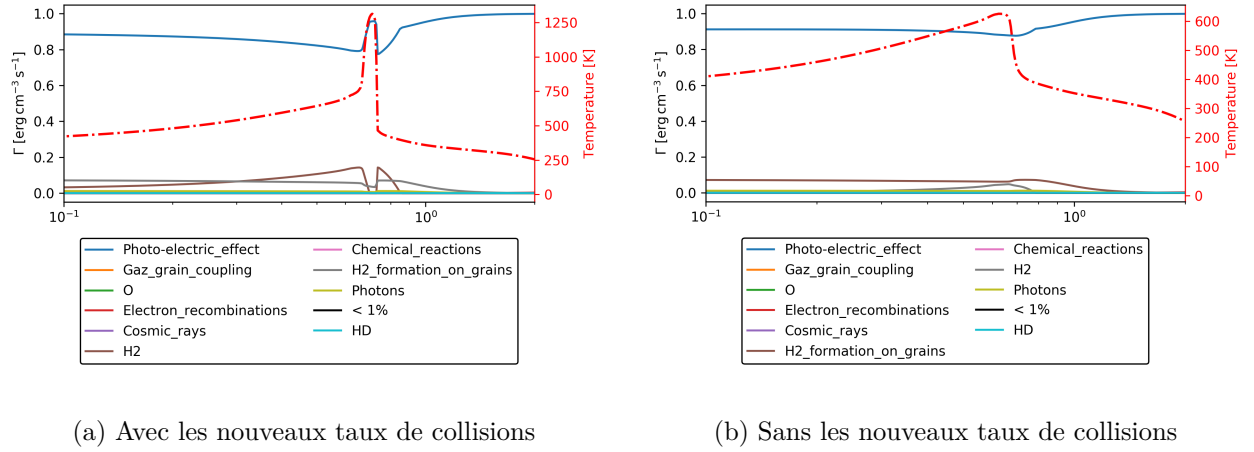


FIGURE 22 – Taux de chauffage (en relatif) en fonction de l'extinction. Dans les deux situations le chauffage par effet photo-électrique est le phénomène dominant pendant l'irrégularité tandis que le chauffage par H₂ devient refroidisseur. Cet effet est accentué si l'on prend en compte les nouveaux taux de collisions.

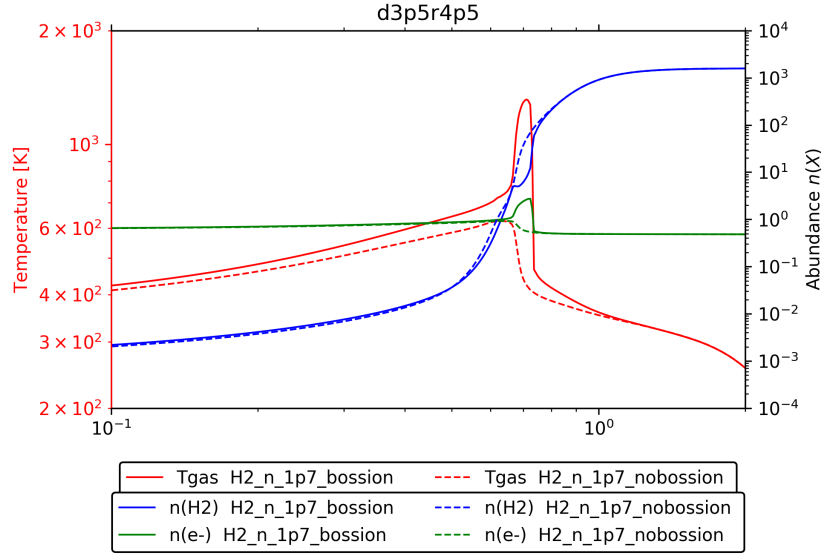


FIGURE 23

1) Chauffage net par Rollig (1995)

a) 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 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.

b) 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 $\Lambda_{H_2} < 0$.

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

2) Bialy et Sternberg (2019)

a) Chauffage par désexcitation collisionnelle

[Bialy and Sternberg, 2019] (A12) considère que 9 photons sur 10 permettent d'avoir du H_2 excité.

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

D_0 est le taux de photodissociation ($P \approx 10D_0$, 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 $\chi = 10^5$

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

b) Chauffage par photodissociation

$$\Gamma_{H_2 \text{ pd}} = D_0 \chi E_{\text{pd}} n(H_2) \quad (27)$$

3) Absorption du rayonnement

a) Shielding par le molécule H_2

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

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

avec $x = N(H_2)/5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ et $b_5 = b/10^5 \text{ cm s}^{-1}$. L'écrantage affecte la formation et destruction de la molécule. Je multiplie la fonction f_{shield} au champs de rayonnement χ . On obtient ainsi un nouveau taux de chauffage :

$$\Gamma_{H_2^*} = n_{H_2} \frac{\chi P f_{\text{shield}}}{1 + \frac{A_{\text{eff}} + f_{\text{shield}} \chi D_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{eff}} n}} \Delta E \text{ erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (28)$$

On fait de même pour le taux de refroidissement.

b) 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 $\tau_d = N_H \sigma_d$ donné par [Sternberg et al., 2014] Eq 20. Ainsi,

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

4) Comparaison avec le code PDR de Meudon

On récupère du code le taux de refroidissement Λ_{PDR} par la molécule H_2 qui peut être positif ou négatif. Le taux prend en compte du chauffage par desexcitation collisionnelle et du refroidissement ro-vibrationnelle

(émission). Il ne prend pas en compte de la photodissociation (qui chauffe). On veut étudier le chauffage, on appelle Γ_{PDR} la partie négative du taux ($\Lambda_{\text{PDR}} < 0$) et on le compare aux de chauffage nets.

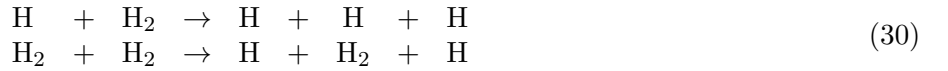
$$\begin{aligned}\Gamma_{\text{Rollig net}} &= \Gamma_{\text{H}_2^*} + \Lambda_{\text{H}_2} \\ \Gamma_{\text{BS net}} &= \Gamma_{\text{H}_2 \text{ pump}} + \Gamma_{\text{H}_2 \text{ pd}}\end{aligned}\tag{29}$$

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 H_2 (figure ?? [Le Petit et al., 2006]).

5) Dissociation collisionnelle du H_2 (de Janev à Glover)

La destruction du H_2 dans les nuages interstellaire s'effectue soit par photodissociation soit par réactions chimiques. Les dissociations collisionnelles (eq. 30) sont des réactions de destruction du H_2 mal connues alors qu'elles interviennent dans du gaz chaud, ce qui est le cas du bord atomique de la PDR jusqu'à la transition H/H_2 .



Il existe plusieurs prescriptions qui tentent d'estimer les valeurs des taux de dissociation collisionnelle du H_2 (eq 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_2 à travers le nuage ce qui a un impact sur le chauffage par H_2 et donc la température du gaz. Deux prescriptions possibles ont été retenu dans le code : celle de Glover et Mac Low (article) et celle de Janev (article). Par ailleurs on a constaté que la prescription de Janev calcule des taux de dissociation très faible (d'un facteur 10^{-50}) devant ceux de Glover ce qui change radicalement la chimie du nuage. Afin de n'en garder qu'une, nous avons comparé les effets de ces prescriptions sur l'ensemble des PDR.

Pour étudier globalement les PDR, on utilise des grilles de modèles qui explorent l'espace des paramètres (pression P , densité n_{H} et le champ de rayonnement de l'étoile proche χ). On représente une donnée - la température au bord de nuage, la température et l' A_{v} de la transition H/H_2 ou le processus thermique dominant au bord du nuage - à travers la grille et étudions quelques modèles particuliers afin de comprendre profondément les changements sur le code. On étudie d'abord des modèles à densités constantes qui sont plus facile à interpréter (la pression et la température suivent les mêmes variations $P \propto T$) que les modèles isobares (la densité et la température varient de manière inversement proportionnelle $n_{\text{H}}T = \text{cte}$).

a) Grilles de modèles - Bord atomique

Sur la figure 24, 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 25a 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.

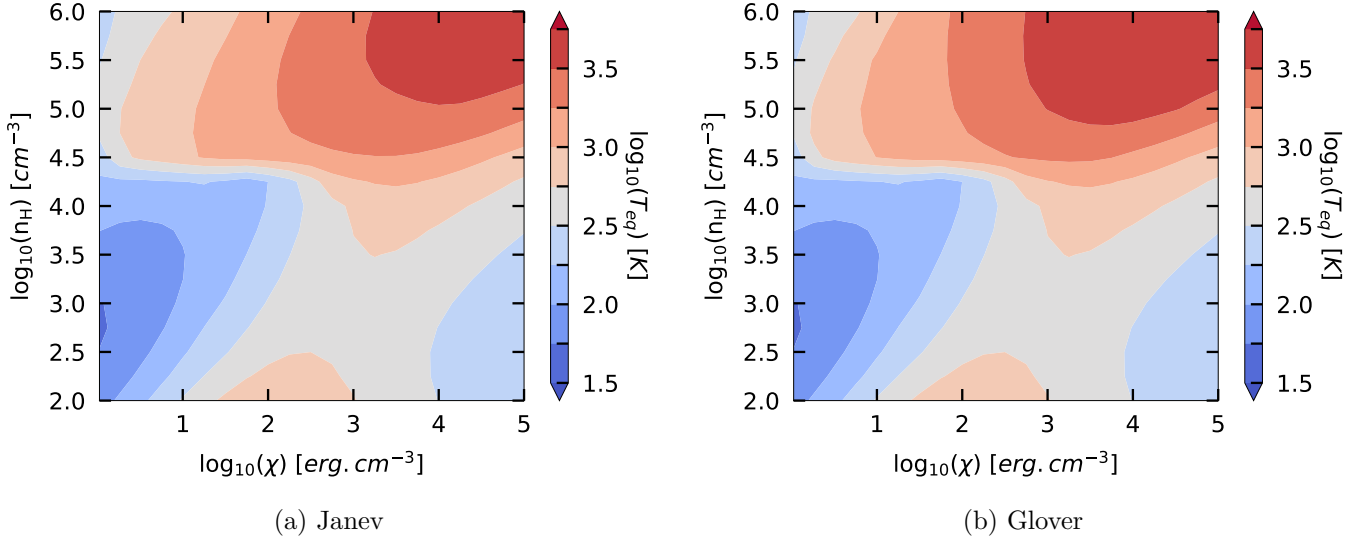


FIGURE 24 – Comparaison des température en bord atomique de nuage pour des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

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

On constate sur la figure 26 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 27) 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 30) sont des réactions endothermiques très efficaces.

b) Grilles de modèles - Transition H/H_2

La transition H/H_2 marque la frontière entre le milieu atomique et moléculaire du nuage. Elle survient une fois que le H_2 , 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 $n(H) = 2n(H_2)$. La température et l' A_v auxquelles s'effectuent la transition H/H_2 ont un impact sur les observables puisque que c'est dans la phase moléculaire que de nombreux traceurs tels que le H_2 , CO, H_2O ou HCN se forment et sont excités (par...le H_2 excité ou les grains?).

Les figures 28 et 29 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 29) 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 28).

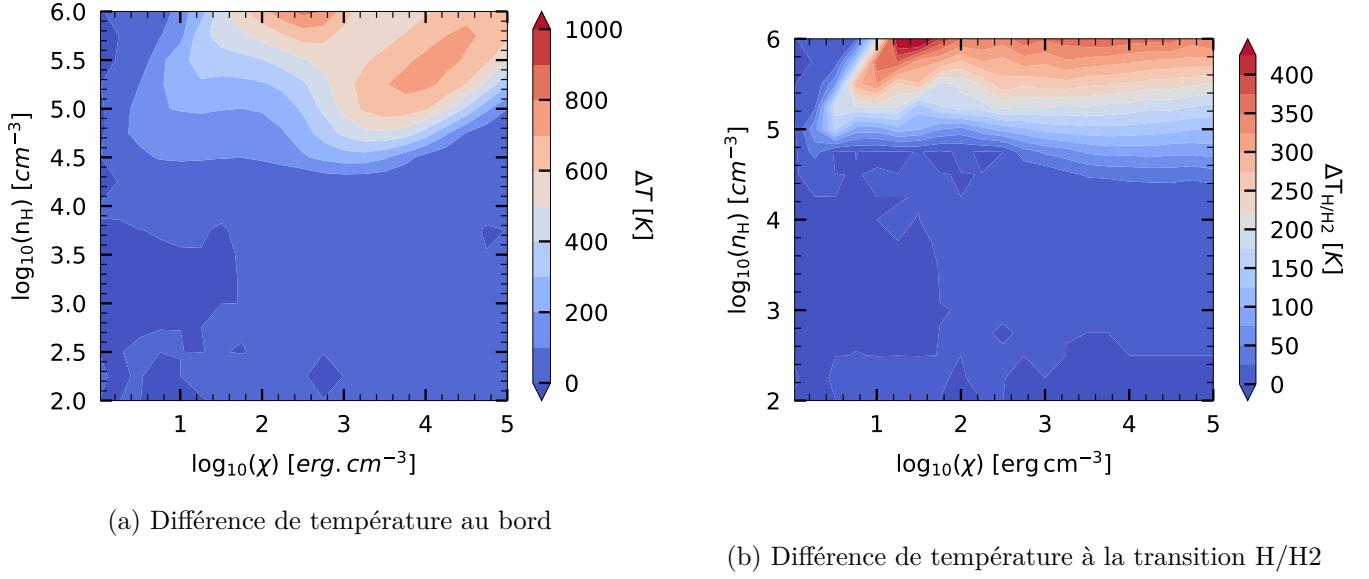


FIGURE 25 – Différence de température aux bords de nuage et aux transitions H/H₂ de modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover (les cartes ne sont pas en harmonie)

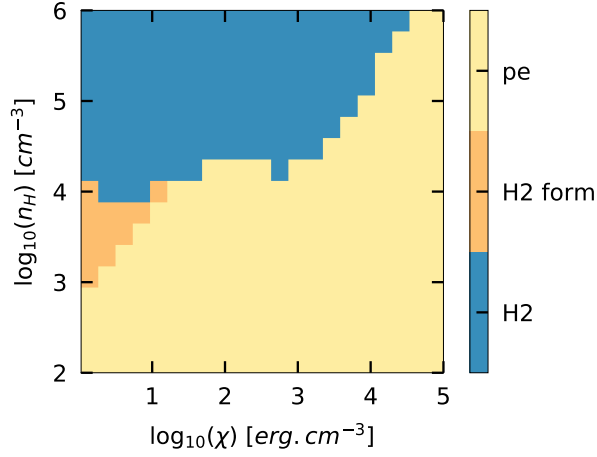
c) Etude d'un modèle particulier

On cherche à comprendre dans cette section pourquoi la température à la transition H/H₂ devient plus forte en utilisant la prescription de Glover. On a choisit un modèle à $n_H = 10^{5.5} \text{ cm}^{-3}$ et $\chi = 10^4$ qui subit une augmentation de +300 K à la frontière. Le profil de température (figure 30a) montre immédiatement une augmentation locale de la température - une bosse - commençant à un $A_V \approx 0.1 \text{ mag}$ et finissant à $A_V \approx 0.4 \text{ mag}$ accompagnée d'une augmentation de la densité de H₂.

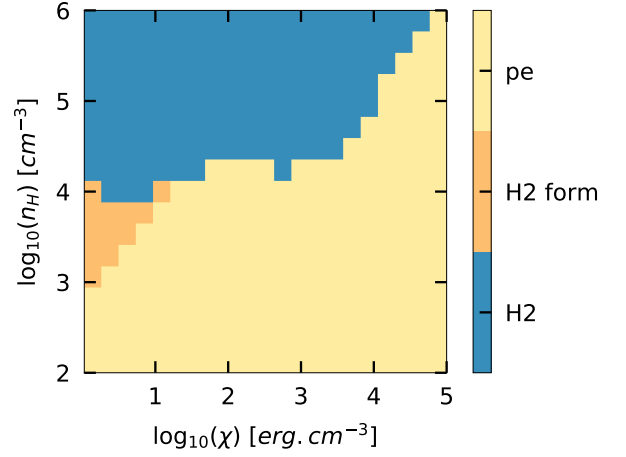
La figure 31 trace les taux de chauffages en fonction de l'extinction. On constate, qu'avec la prescription de Glover, les réactions chimiques chauffent le gaz de manière aussi intense que l'effet photoélectrique ce qui peu commun dans les PDR. Afin de comprendre l'origine de la bosse de température, 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 32). 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 33).

Une étude préliminaire montre que la recombinaison électronique du CH_3^+ est la réaction exothermique prédominante dans le chauffage du gaz aux réactions chimiques. Le passage de la prescription de Janev à celle de Glover a pour effet de tuer la destruction du H₂ permettant de rendre le bilan d'exothermicité des réactions chimiques positif et de former plus facilement du H₂ qui va devenir un agent refroidissant efficace. On le visualise simplement sur la figure 32.

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 34). 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



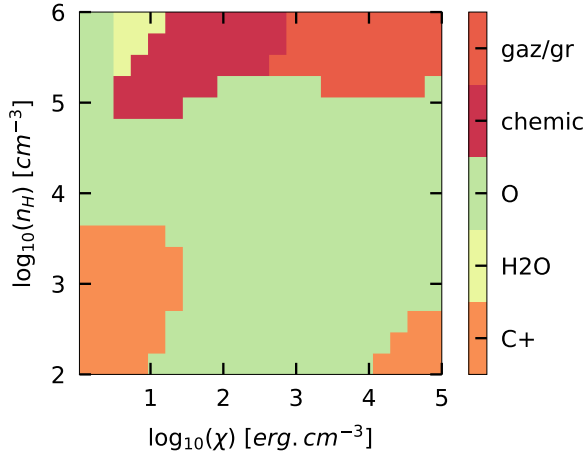
(a) Janev



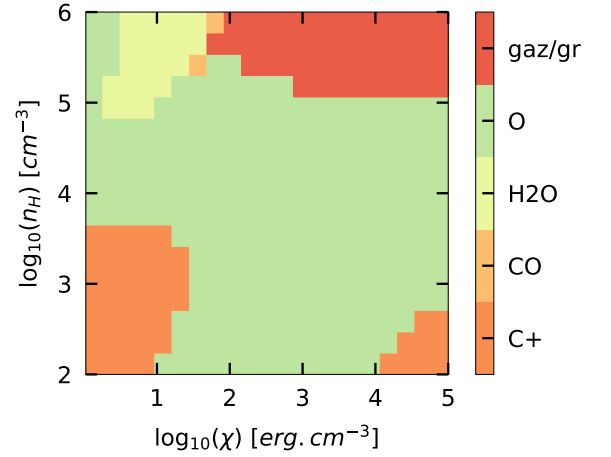
(b) Glover

FIGURE 26 – Processus de chauffage dominant en bord de région atomique

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



(a) Janev



(b) Glover

FIGURE 27 – Processus de refroidissement dominant en bord de région atomique

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

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.

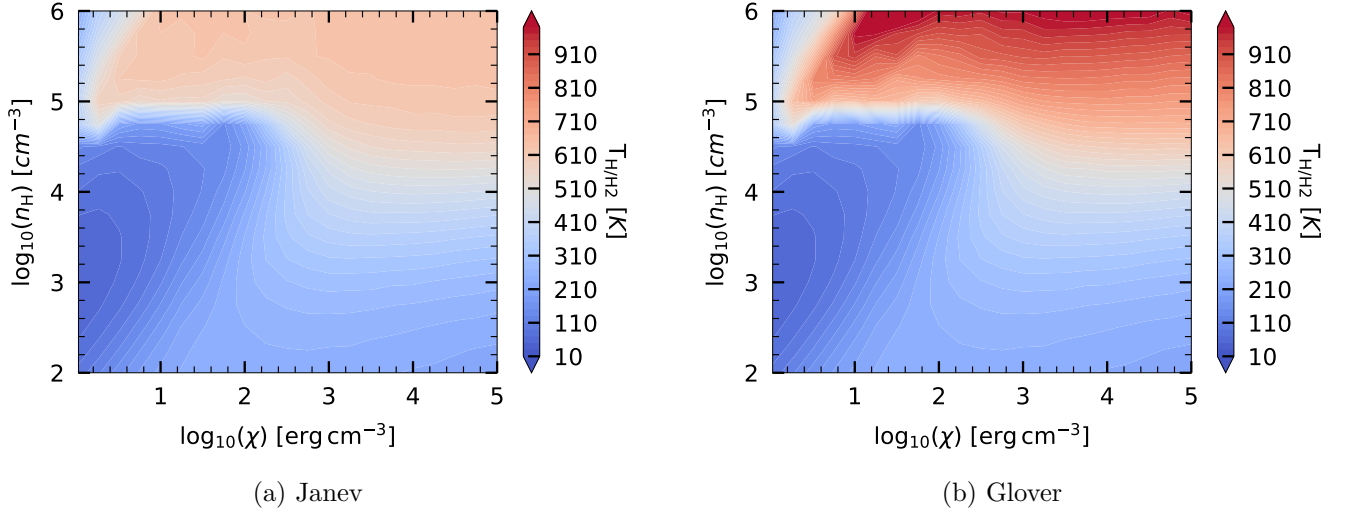


FIGURE 28 – Comparaison des température à la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

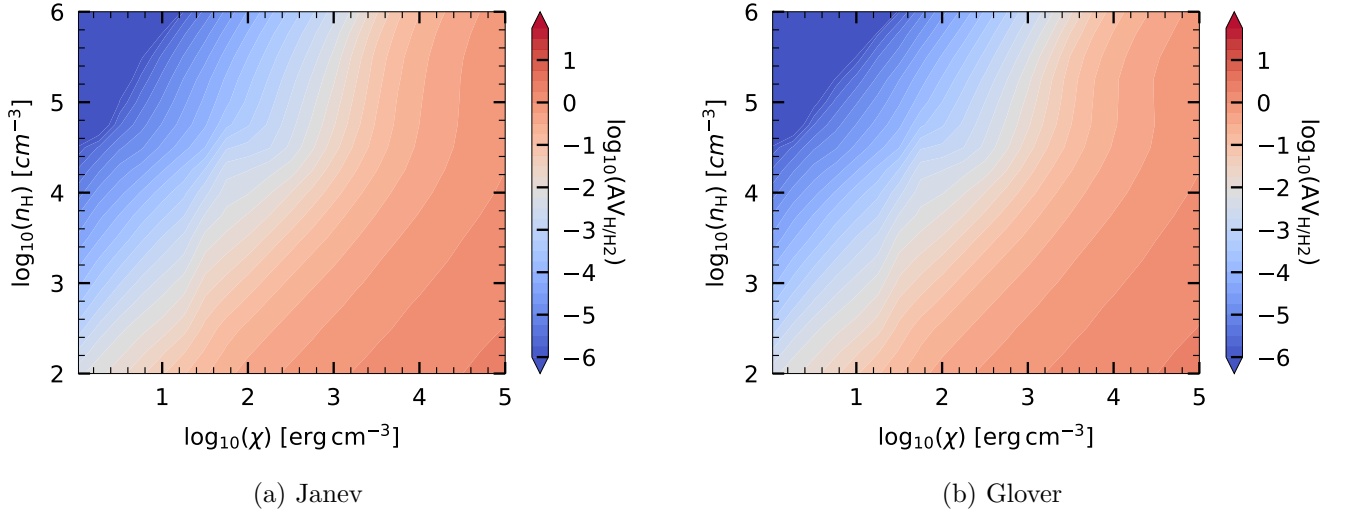


FIGURE 29 – Comparaison des A_v de la transition H/H₂ des modèles utilisant la prescription de Janev et de Glover

- [Bialy and Sternberg, 2019] Bialy, S. and Sternberg, A. (2019). Thermal Phases of the Neutral Atomic Interstellar Medium – from Solar Metallicity to Primordial Gas. [arXiv e-prints](#), page arXiv :1902.06764.
- [Draine, 2011] Draine, B. T. (2011). [Physics of the interstellar and intergalactic medium](#). "Princeton University Press".
- [Draine and Bertoldi, 1996] Draine, B. T. and Bertoldi, F. (1996). Structure of Stationary Photodissociation Fronts. , 468 :269.
- [Hollenbach et al., 1991] Hollenbach, D. J., Takahashi, T., and Tielens, A. G. G. M. (1991). 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 H₂ Emission from Massive Star-forming Regions. , 644 :283–299.

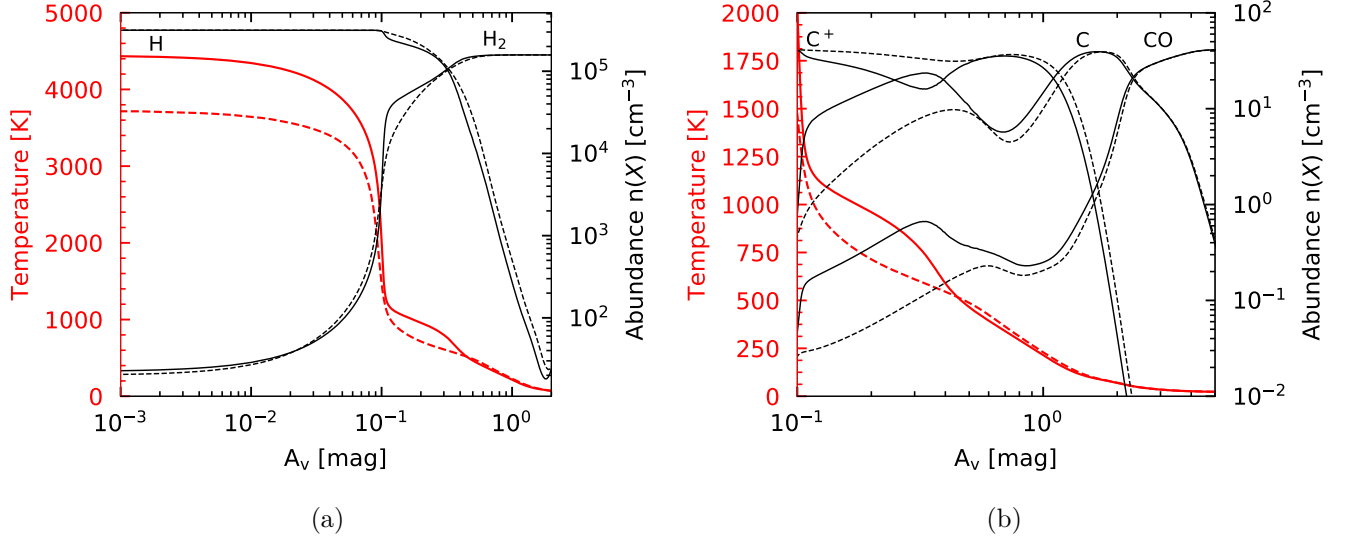


FIGURE 30 – Profils de densités de H et H₂ (a) et C⁺, C et CO (b) d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$). Le trait plein correspond au calcul utilisant la prescription de Glover et les trait pointillés celle de Janev.

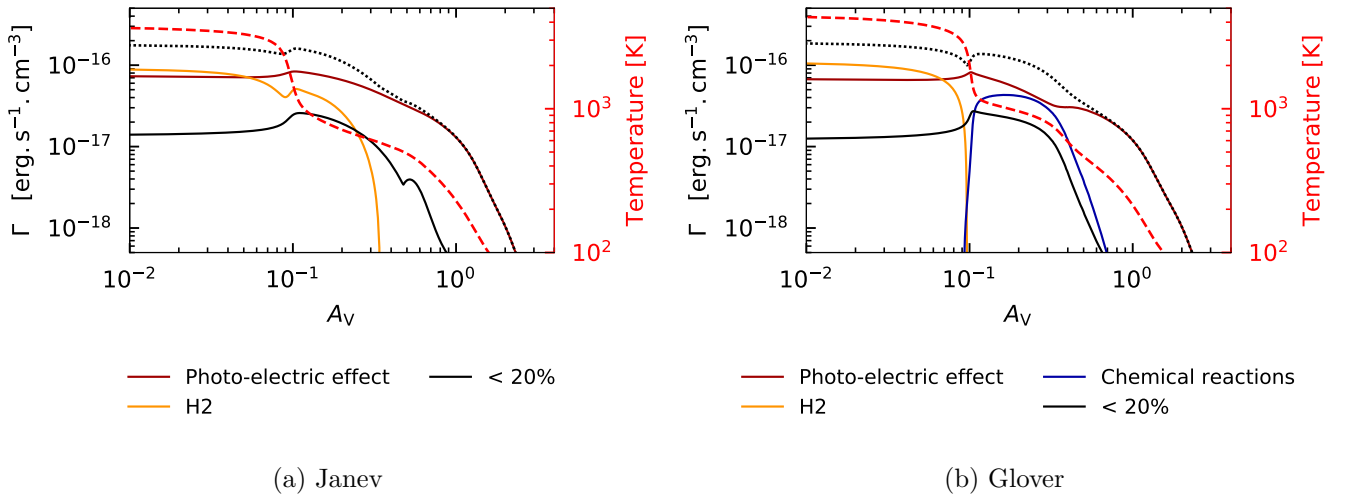


FIGURE 31 – (ANNEXE) Profils des taux de chauffages d'un modèle à densité constante ($n_{\text{H}} = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Janev ou de Glover. La température (axe de droite) est représentée en tiret rouge. Le taux de chauffage total est en pointillé noir.

[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.

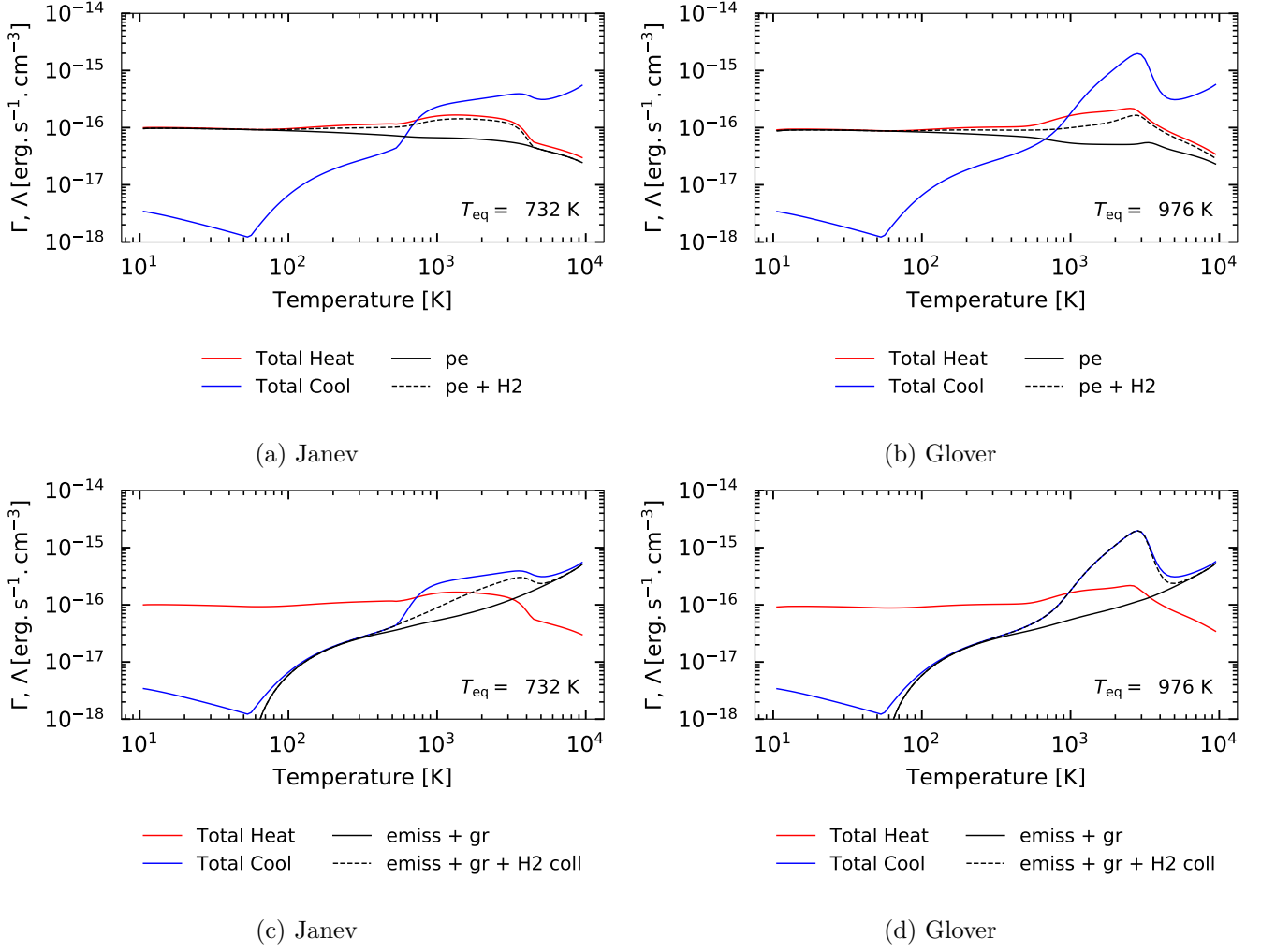


FIGURE 32 – (ANNEXE) Taux de chauffages et de refroidissements en fonction de la température à A_V de 0.2 mag pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$).

- [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.
- [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.

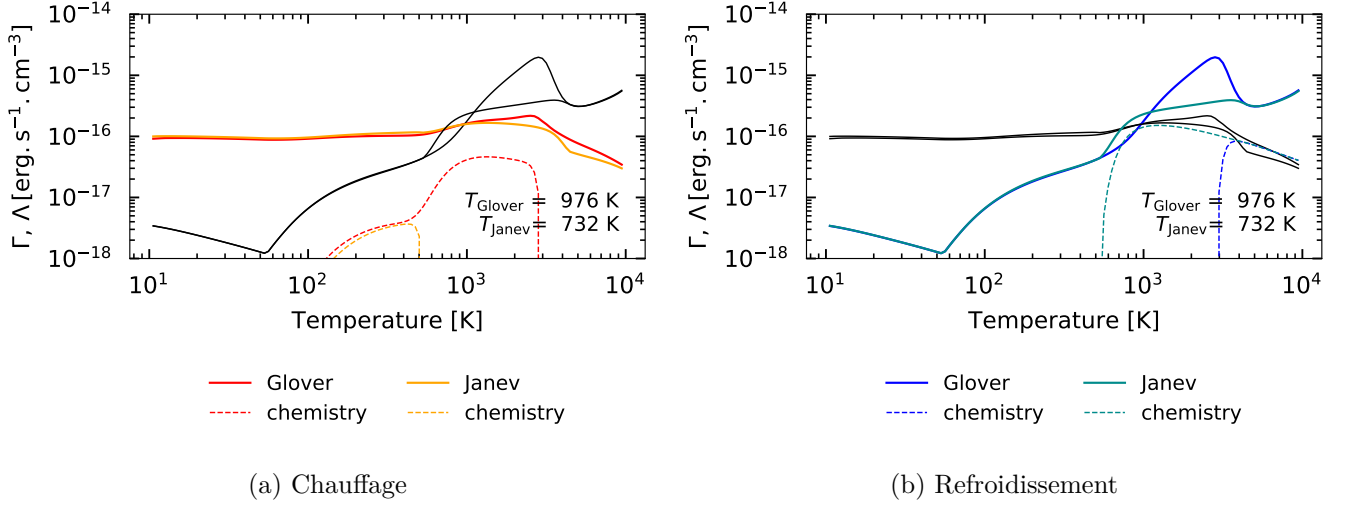


FIGURE 33 – Efficacité du chauffage des réactions chimiques en fonction de la température pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$). Les courbes en rouge et jaune sur la figure (a) représente les processus de chauffage tandis que celles en noires les courbes de refroidissement total. Sur la figure (b), les courbes en bleu et bleu clair représentent le refroidissement alors que celles en noires le chauffage.

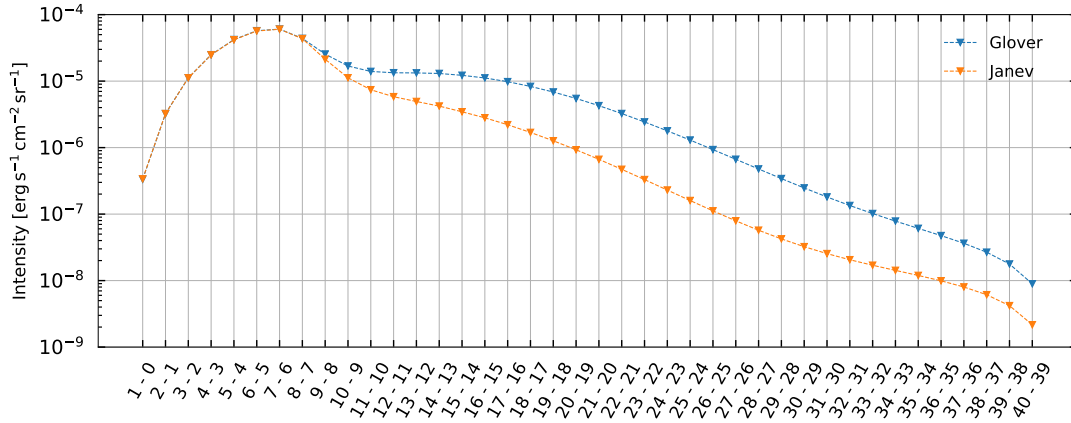


FIGURE 34 – Raies d'émissions du CO pour un modèle à densité constante ($n_H = 10^{5.5}$ et $\chi = 10^4$) utilisant la prescription de Glover ou bien celle de Janev. Les transitions écrites sur l'axe des abscisses signifient les transitions des niveaux rotationnels de la molécule CO.

[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.

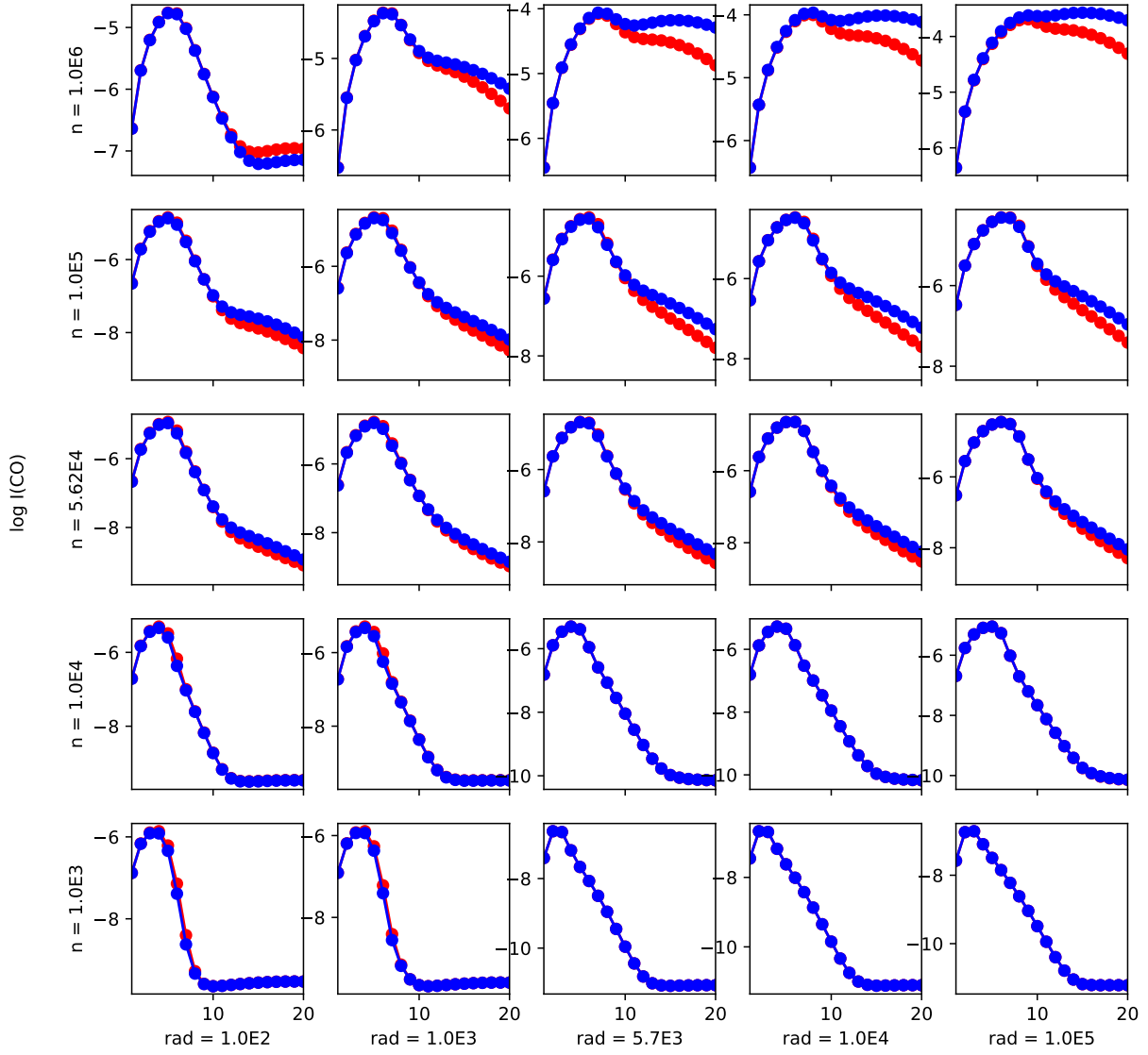


FIGURE 35 – Raies d'émissions du CO pour une grille de à densité constante. Les lignes en rouge sont les modèles utilisant la prescription de Janev tandis que celles en bleues utilisent la prescription de Glover. Les 20 premières transitions sont représentées.