

L'EFFET PHOTOÉLECTRIQUE SUR LES GRAINS INTERSTELLAIRES : impact de la structure fractale des grains par méthode Monte-Carlo

I- Description du projet

I-1 Contexte

Les régions de photodissociation (*photodissociation regions*, PDR) sont les régions du milieu interstellaire où une exposition à un spectre riche en photons UV conduit à un fort taux de dissociation des molécules interstellaires. Un exemple typique est celui de la Barre d'Orion (Fig.1) où l'étoile massive θ^1 Ori de l'amas du Trapèze (*Trapezium cluster*) irradie la surface de son nuage moléculaire parent. La structure et la composition de ces régions compactes et brillantes est régie par une multitude de processus physiques et chimiques (magnétohydrodynamique, transfert de rayonnement, interaction lumière-matière, chauffage/refroidissement du gaz et des grains de poussière, chimie en phase gazeuse et à la surface des grains, ...), faisant de ces régions un véritable laboratoire de la physique interstellaire.

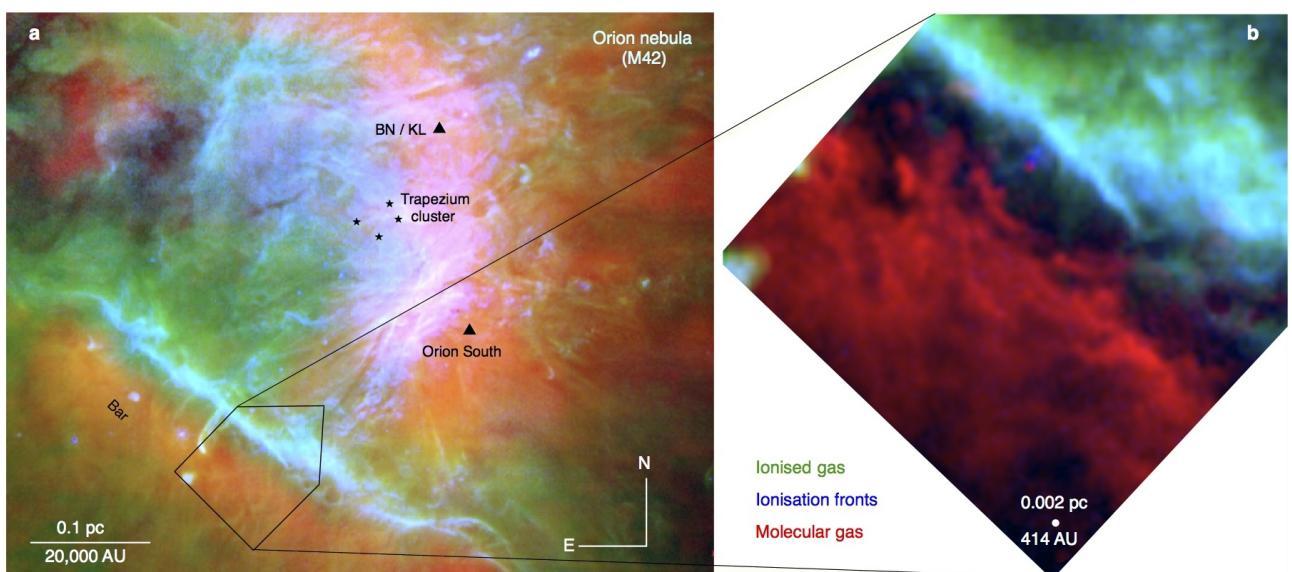


Figure 1 Multiphase view of the Orion nebula and molecular cloud. (a) Overlay of the HCO^+ ($J=3-2$) emission (red) tracing the extended Orion molecular cloud. The hot ionised gas surrounding the Trapezium stars is shown by the $[\text{S II}]$ $6,731 \text{ \AA}$ emission (green). The interfaces between the ionised and the neutral gas, the ionisation fronts, are traced by the $[\text{O I}]$ $6,300 \text{ \AA}$ emission (blue), both lines imaged with VLT/MUSE. The size of the image is $> 5.8' \times 4.6'$. (b) Close-up of the Bar region imaged with ALMA in the HCO^+ ($J=4-3$) emission (red). The black-shaded region is the atomic layer. From Goicoechea et al. (Nature, 2016)

Un élément majeur dans la modélisation des PDR est l'équilibre thermique du gaz, qui découle des processus de refroidissement, dominés par le rayonnement des raies de structure fine de l'oxygène atomique ($\lambda=63 \mu\text{m}$) et du carbone ionisé (C^+ , $\lambda=158 \mu\text{m}$), et de chauffage. Celui-ci est dominé par le chauffage photoélectrique dû aux grains de poussière interstellaire : l'absorption d'un photon UV par un grain peut conduire, par effet photoélectrique, à l'éjection d'un électron à grande vitesse ; celui-ci, au fil des collisions avec les atomes et molécules du gaz, transfert son énergie cinétique au gaz, ce qui correspond bien à un processus de chauffage.

Le chauffage photoélectrique est traditionnellement modélisé sur la base du travail de Bakes & Tielens (ApJ, vol. 427, p.822, 1994) où les grains de poussière sont idéalisés par des sphères de graphite. Il est pourtant bien établi que les grains de poussière présents dans les nuages moléculaires denses, comme dans les PDR, pourraient présenter une structure fractale, ce qui pourrait affecter l'efficacité du chauffage photoélectrique.

I-2 Objectif du projet

Ce projet consiste à modéliser simplement le chauffage photoélectrique sur un grain de structure fractale exposé à un rayonnement UV. Les étudiants utiliseront un script python fourni pour générer des modèles de grain en 2D. Ils devront développer un programme en python afin de calculer la distribution de vitesse des électrons émis par le grain. On pourra alors reproduire les calculs en faisant varier les propriétés fractales des grains et discuter de l'impact sur l'efficacité du chauffage photoélectrique.

II- Environnement de développement

Le projet sera principalement réalisé en python. Python sera également utilisé en aval du programme principal pour tracer les graphes, et en amont pour générer des grains fractales.

III- Description des livrables

Programme python :

- Entrée : Fichier ASCII contenant un tableau de 0 et de 1 (entiers). La première ligne devra contenir 2 entiers donnant les dimensions (lignes,colonnes) du tableau.
- Sortie : fichier ASCII contenant la liste des valeurs d'énergie des photo-électrons en eV, à raison d'une valeur par ligne. Si aucun photo-électron n'est émis, on utilisera les valeurs -1 pour indiquer que le photon UV n'a pas été absorbé, -2 pour indiquer que l'absorption du photon n'a pas donné lieu à l'effet photoélectrique, et -3 pour indiquer que le photo-électron s'est recombiné avec le grain avant de s'échapper.

IV- Description des tâches à réaliser

Lire l'intégralité des étapes avant de commencer le projet. En phase de développement du programme, on pourra commencer par considérer un grain très simple, par exemple rond ou carré, pour lequel les résultats peuvent être calculés analytiquement, afin de comparer à vos résultats numériques.

III-1 Générer les grains

Utiliser le script python `GenGrain.py` pour générer un fichier ASCII contenant une matrice de 0 et de 1. Cette matrice représente une image 2D du grain, les 1 (resp. les 0) représentant les pixels de l'image occupés par le grain (resp. non occupés par le grain). Constateter que de multiples exécutions du script conduisent à des grains de géométries différentes, mais avec des propriétés fractales similaires. Ces propriétés sont paramétrées par 2 valeurs que vous pouvez choisir en début de script. Explorer l'évolution des géométries des grains en fonction des valeurs prises par ces paramètres.

III-2 Modéliser l'effet photoélectrique

Créer un programme python afin de modéliser l'effet photoélectrique. Votre programme devra comporter les étapes suivantes :

- a) Chercher les valeurs numériques utiles dans l'article de Bakes & Tielens.
- b) Charger le grain dans un tableau.
- c) Tirer au hasard la position initiale d'un photon UV (voir la librairie python `random`) .
Pour simplifier, on fera partir tous les photons de la première colonne de pixels.
- d) Tirer au hasard l'énergie E du photon. On supposera simplement un spectre blanc entre 3 et 15 eV.
- e) Identifier le point d'entrée du photon dans le grain. Pour simplifier, on supposera que tous les photons voyagent le long d'une ligne de pixels, comme si le grain était éclairé par une étoile lointaine dans la direction des lignes de la matrice.

- f) Tirer au hasard la distance d_a parcourue dans le grain par le photon avant d'être absorbé. Cette distance suit une distribution de probabilité exponentielle $P=\exp(-d_a/l_a) / l_a$, où l_a est la distance dite d'atténuation, i.e. la distance caractéristique d'absorption. En déduire le pixel dans lequel le photon est absorbé. Seule la distance parcourue dans le matériau doit être comptabilisée. Si la distance l_a est supérieure à la longueur du grain de long de la trajectoire du photon, il n'y a pas d'absorption.
- g) Tirer au hasard si un électron est éjecté. On supposera que la probabilité d'ionisation (appelée rapport de branchement, ou *ionisation yield*) est décrite par $Y=0.5 (1+\text{Th}[(E-E_0)/2])$, où $E_0=8$ eV.
- h) Si un électron est éjecté, tirer au hasard la distance d_e parcourue par l'électron dans le matériau avant de recombiner avec le grain. Cette distance suit une distribution de probabilité exponentielle $P=\exp(-d_e/l_e) / l_e$, où l_e est la distance dite d'échappement, i.e. la distance caractéristique de recombinaison de l'électron avec le grain. Tirer au hasard la direction dans laquelle l'électron est éjecté. En déduire si l'électron s'échappe du grain.
- i) L'énergie cinétique de l'électron éjecté est $E_e = E - E_i$ où E_i est l'énergie d'ionisation du grain. Stocker cette valeur dans un fichier ASCII.

N.B. : Plus le nombre d'électrons est grand, mieux la distribution sera caractérisée. On aura donc intérêt, dans la mesure où les temps de calculs restent raisonnables, à tirer un maximum de photons UV.

III-3 Exploiter les résultats

Créer un script python afin de lire les valeurs d'énergie des photo-électrons, et représenter leur distribution, par exemple par un histogramme. Pour discuter de l'effet de la structure fractale des grains, on pourra comparer (par exemple) :

- les distributions obtenues pour plusieurs grains différents mais de mêmes propriétés fractales
- les distributions obtenues pour un grain fractal et un grain sphérique (circulaire, en 2D...)
- les distributions obtenues pour plusieurs grains ayant des propriétés fractales différentes.
- les distributions obtenues pour plusieurs grains de tailles différentes mais de mêmes propriétés fractales

III-4 Bonus

Si le projet devait être achevé trop rapidement, voici quelques développements supplémentaires possibles :

- Relaxer les simplifications sur la position initiale du photon et sa direction ;
- Remplacer le spectre des photons UV par un spectre stellaire réaliste ;
- Passer en 3D

V- Notions physiques nécessaires au projet

Notions physiques : ionisation, recombinaison, interaction lumière-matière

Notions statistiques : distributions de probabilité.

VI- Description des algorithmes à utiliser pour réaliser le projet

Pour la majeure partie de ce projet, le développement devrait se baser essentiellement sur le bon sens. Le tirage aléatoire suivant une distribution non-uniforme mérite en revanche d'être présenté ici.

Pour tirer aléatoirement une valeur x suivant une distribution de probabilité $f(x)$ à partir d'un générateur de nombres aléatoires uniforme, il est possible de procéder ainsi :

1. Tirer une valeur de x avec le générateur uniforme

2. Tirer un nombre aléatoire u entre 0 et 1 avec un générateur uniforme
3. Si $u < f(x)$, conserver x , sinon reprendre les deux étapes, jusqu'à ce que $u < f(x)$.

Il est conseillé de développer votre générateur non-uniforme dans un programme à part, et de le tester en traçant la distribution des nombres générés. La distribution devrait tendre vers l'allure de $f(x)$ pour les grands nombres de tirages.

Référent : J. Montillaud