



HAL
open science

Nucléosynthèse dans les étoiles de la branche asymptotique: du coeur dégénéré à l'enveloppe circumstellaire

Emmanuel Dufour

► **To cite this version:**

Emmanuel Dufour. Nucléosynthèse dans les étoiles de la branche asymptotique: du coeur dégénéré à l'enveloppe circumstellaire. Astrophysique [astro-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2000. Français. NNT: . tel-00009195

HAL Id: tel-00009195

<https://theses.hal.science/tel-00009195>

Submitted on 7 May 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE DE DOCTORAT

PRÉSENTÉE PAR

Emmanuel Dufour

POUR OBTENIR LE TITRE DE

“DOCTEUR EN ASTROPHYSIQUE”

À L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER - GRENOBLE I

(Arrêtés ministériels du 5 juillet 1984 et du 30 mars 1992)

Nucléosynthèse dans les étoiles de la branche asymptotique: du coeur dégénéré à l'enveloppe circumstellaire.

DATE DE SOUTENANCE PUBLIQUE:

le 17 février 2000

COMPOSITION DU JURY :

M. Guy PELLETIER Président

M. Manuel FORESTINI Directeur de thèse

M^{me} Claudine KAHANE Co-directrice de thèse

M. Marcel ARNOULD Rapporteur

M. Raphaël BACHILLER Rapporteur

M. André MAEDER Examineur

M. Hans OLOFSON Examineur

Résumé

Les observations menées sur des étoiles à la phase AGB (Asymptotic Giant Branch) révèlent des éléments lourds à durée de vie inférieure à celle de la phase AGB. Ces éléments, dit “éléments s”, ont donc été synthétisés au sein de ces étoiles, puis transportés à la surface où ils sont observés. Pourtant, les modèles actuels ne prédisent pas ces éléments en assez grande quantité par rapport aux observations.

De plus, les étoiles de l’AGB qui présentent un rapport d’abondance $C/O > 1$ sont majoritairement de faibles luminosités. Or, c’est le “dredge-up” qui permet à l’étoile de devenir carbonée: l’enveloppe convective descend dans la zone de brûlage de l’Hydrogène et prélève ainsi du Carbone, produit plus bas dans l’étoile par le brûlage de l’Hélium, et amené à cet endroit par des languettes convectives, les “pulses thermiques”. Or, la faible profondeur des dredge-up rencontrés dans les modèles n’explique pas la proportion d’étoiles carbonées de faibles masses.

Afin d’aborder la totalité du problème, le code d’évolution stellaire de Grenoble a été amélioré pour modéliser au mieux la physique de ces étoiles (équation d’état, processus de mélange notamment). Des tests ont ensuite été réalisés pour déterminer l’influence de ces modifications sur les problèmes posés aux paragraphes ci-dessus. De plus, des observations d’enveloppes circumstellaires ont été effectuées pour pouvoir évaluer le nombre, le type et l’utilité des valeurs que l’on peut ainsi obtenir et leurs contraintes sur la nucléosynthèse. Enfin, la question de savoir si les abondances observées reflètent ou non les abondances synthétisées par l’étoile a été analysée grâce à un code de transfert de rayonnement.

Ces développements ont permis :

- de déterminer, dans un même code d’évolution stellaire, l’influence de différents facteurs physiques ou numériques, sur la profondeur du dredge-up. En particulier, il a été montré que la prise en compte d’un seul processus physique (l’overshooting) permet de modéliser un dredge-up plus profond, donc des étoiles plus carbonées, et simultanément de produire une poche de Carbone 13, propice à la nucléosynthèse d’éléments “s”.
- d’étendre les possibilités de modélisation du code: calcul du flash de l’Hélium pour les étoiles de faibles masses, calculs de tracés PMS (Pre Main Sequence) performants pour des étoiles à partir de $0.1 M_{\odot}$...
- de déterminer précisément un rapport isotopique $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ non solaire dans l’enveloppe circumstellaire de l’étoile carbonée CW Leo, rapport dépendant fortement du processus “s” et permettant de contraindre la masse de cette étoile.
- de déterminer le taux de perte de masse, \dot{M} et le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans des étoiles riches en ^{13}C , ce rapport étant sensible à tous les épisodes de nucléosynthèse et de mélange. L’incompatibilité des valeurs de \dot{M} et $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ à la phase AGB tend à montrer que ces étoiles pourraient ne pas appartenir à la branche asymptotique ou suggère de changer l’approche de la modélisation des phases stellaires évoluées.

Abstract

Observations of Asymptotic Giant Branch stars (AGB stars) reveal heavy elements with life times shorter than the AGB phase duration. These elements, called “s” elements, have been processed in these stars, and mixed up to the surface where they are observed. However, recent models don’t success in predicting the right amount of “s” elements compared to the observations.

In addition, AGB stars with abundance ratio $C/O > 1$ mainly have low luminosities. It’s the “dredge-up” phenomenon which is responsible for the carbon star formation: the convective envelope goes down in the Hydrogen burning shell and bring up some Carbon which has been processed lower in the Helium burning region and put there by the convective instabilities called “thermal pulses”. However, the depths of the modelled dredge-up are too low to explain the high ratio of carbon stars.

To have an overview of the whole problem, the stellar evolution code of Grenoble has been improved to model better the physics of these stars (equation of state, mixing processus in particular). Tests have been realized to determine the changes due to these improvements. Secondly, circumstellar observations have been performed to allow us to estimate what kind of quantities can be obtained and their utilities to constrain the nucleosynthesis. Finally, the fact that the circumstellar abundances are equal to the abundances processed by the star or not have been studied with a radiative transfer code.

Consequently, we have:

- determined, in the same stellar evolution code, the influence of different physical or numerical factors on the depth of the dredge-up. In particular, it has been showed that only one physical process (overshooting) is responsible for both a deeper dredge-up, so stars with a higher C/O ratio, and the production of a ^{13}C pocket, first stage for the nucleosynthesis of “s” elements.
- enlarged the capabilities of modelling of the code: computation of central Helium flash for low mass stars, computation of reliable PMS (Pre Main Sequence) tracks for stars down to $0.1 M_{\odot}$...
- determined precisely a non solar $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ isotopic ratio in the circumstellar envelope of the carbon star CW Leo, ratio very sensitive to the occurrence of “s” process and which allow to constrain the mass of this star.
- determined the mass loss rate, \dot{M} and the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio in ^{13}C enriched stars, this ratio being very sensitive to all the stages of nucleosynthesis or mixing. These two values, \dot{M} and $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, are not compatible and tend to prove that these stars could not belong to the asymptotic giant branch or that we should change our approach of the modelling of the evolved stellar phases.

Table des matières

I	ABC des AGB	1
1	Intérêts des étoiles de l'AGB	5
1.1	Structure	5
1.2	Phénomènes caractéristiques	7
1.3	Les objectifs de ce travail	8
1.3.1	Intérêt des étoiles de l'AGB	8
1.3.2	Objectifs retenus	8
2	Exploration des étoiles de l'AGB	11
2.1	Classification observationnelle	11
2.2	Structure de l'enveloppe circumstellaire	14
2.2.1	Généralités	14
2.2.2	Les différentes espèces moléculaires	16
2.2.3	Difficultés liées à la présence des poussières	17
2.3	Les observations radio	18
2.3.1	Avantage des observations radio	18
2.3.2	Interpréter les observations radios	20
3	Nucléosynthèse au sein des étoiles de l'AGB	23
3.1	Généralités	23
3.1.1	Différents processus	23
3.1.2	Processus de capture de neutrons	24
3.2	Particularités de la phase AGB	25
3.2.1	Mélange dans l'intercouche	25
3.2.2	Nucléosynthèse particulière	26
3.2.3	Influence du HBB	27
3.3	Incertitudes sur la nucléosynthèse	27
3.3.1	Taux de réactions	28
3.3.2	Perte de masse	28
3.3.3	DUP	32
4	Conclusion	35

II	Les moyens mis en place	37
1	Le code d'évolution stellaire de Grenoble: STAREVOL	41
1.1	Les équations implémentées	41
1.1.1	Généralités	41
1.1.2	Equations simplifiées	42
1.2	La physique du code	44
1.2.1	Le nucléaire	45
1.2.2	Transport de la chaleur	47
1.3	Résolution et numérique	48
1.3.1	La méthode Newton-Raphson	49
1.3.2	Accélération de la convergence	50
1.3.3	Le choix des variables	53
1.3.4	Structure du calcul	54
1.3.5	Le choix du pas de temps évolutif et la discrétisation	55
2	Changement d'équation d'état .	61
2.1	Généralités	61
2.1.1	Le plasma stellaire	61
2.1.2	Le cadre théorique	62
2.2	Les difficultés de l'implémentation	67
2.2.1	Conditions pour une "bonne" EOS	67
2.2.2	Difficultés physiques	69
2.2.3	Difficultés numériques	72
2.3	Choix pour la nouvelle équation d'état	73
2.3.1	Choix physiques	73
2.3.2	Validité de la méthode	74
2.3.3	La minimisation	76
2.4	Le changement de variable	77
2.4.1	L'idée et sa mise en oeuvre	77
2.4.2	Faisons les présentations	80
2.4.3	Résumé du changement de variable	82
2.5	L'implémentation	82
2.5.1	Algorithme	82
2.5.2	Description des paramètres	82
2.5.3	Les dérivées dans le code	89
2.5.4	Le modèle initial	90
2.6	Ionisation	91
2.6.1	Ionisation des "lourds", $Z_x > 1$	91
2.6.2	Ionisation de l'Hydrogène	95
2.6.3	Données atomiques	101
2.7	Calculs des composantes	104
2.7.1	Partie radiative	104
2.7.2	Partie électronique	105

2.7.3	Composante Ionique	110
2.8	Corrections au gaz parfait	113
2.8.1	Stratégie du calcul	114
2.8.2	Formes analytiques et approximations	115
2.8.3	Calcul des corrections	122
2.9	Quelques vérifications	125
2.9.1	Cohérence thermodynamique	125
2.9.2	Ionisation	125
2.9.3	Conséquences et test	125
3	Processus de mélange	129
3.1	Outils de diagnostic pour les instabilités	129
3.2	Le cas "standard": l'instabilité thermique	131
3.2.1	Instabilité thermique et composition	131
3.2.2	Instabilité thermique et instabilité dynamique	131
3.3	Instabilités et rotation	135
3.3.1	Prise en compte de la rotation	135
3.3.2	Rotation et mélange: un exemple	137
3.3.3	Conséquences "turbulentes" de la rotation	138
3.3.4	Résumé dans le plan $(\nabla_{int} \perp \nabla_{ext}, \frac{X\mu}{XT} \nabla \mu)$	141
3.4	Turbulence et limitations	142
3.4.1	Viscosité turbulente	143
3.4.2	Anisotropie et incompressibilité	143
3.4.3	Spectre	144
3.4.4	Critère d'apparition	145
3.5	Diffusion et traitement du mélange	145
3.5.1	Equations de la diffusion	146
3.5.2	Choix des coefficients de diffusion pour STAREVOL	148
3.5.3	Traitement Numérique	152
4	Observations radiométriques de raies moléculaires	153
4.1	Spécificités du domaine radio	153
4.1.1	Températures caractéristiques	153
4.1.2	Emission	157
4.2	Le "téléscope"	160
4.2.1	Mécanismes de l'émission-réception	161
4.2.2	Lobes de l'antenne	161
4.2.3	Caractéristiques du rayonnement reçu	163
4.3	Méthode de réception	165
4.3.1	Le filtrage	165
4.3.2	Incertitudes	167
4.3.3	Extraction du signal	168
4.3.4	Calibration	169

5	Transfert radiatif dans les enveloppes circumstellaires	173
5.1	Caractéristiques du transfert radiatif d'énergie	173
5.1.1	Paramètres de la propagation	174
5.1.2	Energétique du faisceau	176
5.2	Le couplage matière-rayonnement	177
5.2.1	Emission pure	177
5.2.2	Absorption pure	178
5.2.3	La diffusion	178
5.2.4	Réfraction	179
5.3	Quels choix faire Γ	180
5.3.1	Un problème complexe !	180
5.3.2	Simplifications physiques	180
5.3.3	Simplifications "mathématiques"	181
5.4	Les choix effectués	182
5.4.1	Hypothèses physiques pour le terme source	182
5.4.2	Ecriture retenue pour l'équation de transfert	183
5.4.3	Formulation spécifique en radio	184
5.4.4	Découplage	185
5.4.5	Organigramme - paramétrage	189
5.5	Implémentation du code de transfert radiatif	190
5.5.1	Structure de l'enveloppe	190
5.5.2	Calcul des populations	193
5.5.3	Méthode de calcul de la profondeur optique	200
III	Les résultats obtenus	205
1	Mesure du rapport isotopique du Chlore	209
1.1	Intérêt de cette observation	209
1.1.1	Les facteurs d'influence	209
1.1.2	Démarche employée	210
1.1.3	Spécificité du rapport isotopique du Chlore	210
1.2	"New isotopic ratio determinations in the envelope of IRC+10216 and s process" 211	
1.2.1	Résumé	211
1.2.2	Article	212
2	Rapports isotopiques du Carbone dans les étoiles de type "J"	221
2.1	Intérêt de la mesure	221
2.1.1	Petit historique	221
2.1.2	Difficultés d'interprétation pour les étoiles de type "J"	222
2.2	"Constraints on stellar evolution by modelling the observed $^{12}CO/^{13}CO$ ratios in three J-type stars"	223
2.2.1	Des rapports d'intensité aux rapports atomiques	223
2.2.2	Méthode d'ajustement des modèles	224
2.2.3	article	226

3	Une longue attente !	241
3.1	Un petit détour par les étoiles pré-séquence principale	241
3.1.1	Les étoiles pré-séquence principale , tests pour l'équation d'état	242
3.1.2	Résumé des principaux résultats	246
3.1.3	Article: "An internet server for update pre main sequence tracks of low- and intermediate-mass stars"	249
3.2	Tracés complets	257
3.2.1	La $3 M_{\odot}$	257
3.2.2	La $4.5 M_{\odot}$	259
3.2.3	La $6 M_{\odot}$	260
3.3	Flash de l'Hélium	262
4	Tests autour du troisième dredge-up	265
4.1	Présentation des différents tests prévus	265
4.1.1	Discretisation	265
4.1.2	Equation d'état	266
4.1.3	Tableau récapitulatif	268
4.2	Le pulse de référence	268
4.2.1	Caractéristiques	268
4.2.2	Nucléosynthèse	269
4.2.3	Discontinuités et zones convectives	271
4.3	Tableau comparatif	273
4.4	Détails des résultats	274
4.4.1	Constance de la profondeur du dredge-up	274
4.4.2	Réduction de la profondeur du dredge-up	275
4.4.3	Augmentation de la profondeur du dredge-up	275
	Conclusion	285
4.5	Résumé	285
4.5.1	Résultats observationels (étoiles J)	285
4.5.2	Résultats théoriques	285
4.6	Perspectives	286
	Remerciements	289
	Bibliographie	290
	Annexes	305
A	Résumé de quelques caractéristiques des étoiles selon leurs masses	305

B	La théorie de la longueur de mélange	309
B.1	Hypothèses simplificatrices de la "MLT"	309
B.2	Equations et inconnues	310
B.3	Solution	311
C	Espèces et réactions nucléaires dans le code	313
C.1	Espèces nucléaires suivies dans STAREVOL	313
C.2	Le réseau de réactions nucléaires utilisé dans STAREVOL	314
C.3	Les réactions de brûlage	320
D	Expression des quantités thermodynamiques du deuxième ordre	323
D.1	En version (T, ρ, Y_i)	323
D.1.1	Deux jeux de variables indépendantes	323
D.1.2	Relations dans le premier jeu de variables	324
D.1.3	Relations dans le deuxième jeu de variables	324
D.1.4	Changement de variable	325
D.1.5	Conclusion	325
D.2	En version $(T, \ln f, Y_i)$	326
D.2.1	Le changement de variable $\rho(f)$	326
D.2.2	Passage $A \perp \rightarrow C$ et c_P	326
D.2.3	Passage $B \perp \rightarrow C$ et c_V	327
D.2.4	Vers le gradient adiabatique	327
D.2.5	La vitesse du son	328
D.3	Calcul de χ_μ	328
D.4	Dérivées Newton-Raphson	331
E	Détails de l'implémentation de la nouvelle équation d'état	333
F	Petit formulaire physique et mathématique	345
F.1	Unités atomiques	345
F.2	Constantes fondamentales	345
F.3	Formules mathématiques utiles	346
F.3.1	Formule de Stirling:	346
F.3.2	Analyse vectorielle:	346
F.3.3	Dérivation de β :	346
F.3.4	Dérivées logarithmiques	346
F.3.5	Relations de changement de variables	347
G	Rappels d'électromagnétisme	349
G.1	Equations constitutives	349
G.2	Equations de base	349
G.3	Equations dérivées	349

Table des figures

Partie I	1
1.1 Structure d'une étoile de l'AGB	6
1.2 L'utilisation des rapports isotopiques comme diagnostics de la physique stellaire.	9
2.1 Classification spectrale des étoiles de l'AGB en fonction des signatures spectrales de certaines molécules et de certains rapports d'abondances. Les différentes échelles ont été placées les unes à coté des autres pour que des valeurs placées sur la même verticale soient approximativement physiquement compatibles.	12
2.2 L'intensité de l'émission de molécules oxygénées et carbonées comme indicateur du type de l'étoile, extrait de Bujarrabal <i>et al.</i> (1994).	13
2.3 Les critères de classification déduits de la figure I-2.2, extrait de Bujarrabal <i>et al.</i> (1994).	13
2.4 De l'étoile à l'enveloppe circumstellaire lointaine	14
2.5 Espèces moléculaires détectées dans l'enveloppe circumstellaire la plus étudiée: IRC+10216, extrait de Glassgold (1999). Une étoile en exposant signale les espèces détectées uniquement en infrarouge. C_2 a été détectée mais son abondance n'est pas déterminée.	16
2.6 Croissance hétérogène d'un grain sur de l'oxyde de Titane TiO_2 . A gauche: molécules participants à la croissance. A droite: composants existants dans le grain après sa formation. Extrait de Jeong <i>et al.</i> (1999)	17
2.7 Variété des "grains" attendus dans différents types d'enveloppes, extrait de Lodders & Fegley (1999). Les abondances sont données sur une échelle où $Si = 10^6$ atomes. Les marques CS et M réfèrent les grains observés respectivement dans des enveloppes d'étoiles de l'AGB et dans des météorites.	19
2.8 Problématique de l'interprétation des abondances mesurées dans les longueurs d'ondes millimétriques.	21
3.1 Captures de neutrons autour de la vallée de stabilité, d'après Audouze & Vauclair (1981).	24
3.2 Températures et pression de condensation des principaux grains attendus dans un environnement d'étoile de type "N" ($C/O=1.1$) pour C,N et O et solaire pour les autres éléments, extrait de Lodders & Fegley (1999)	30
3.3 Définition du paramètre mesurant la profondeur du dredge-up. La figure n'est, bien sur, pas à l'échelle et on y suppose par soucis de clarification que la base de l'enveloppe convective et la couche d'Hydrogène sont confondues.	33

Partie II	36
1.1 Importance de la correction souhaitée sur le facteur d'accélération de convergence en fonction de a et b	51
1.2 Valeurs des facteurs multiplicatifs corrigeant α suivant le "niveaux" de correction souhaité.	52
1.3 Organigramme général de STAREVOL	54
1.4 Influence de la composition sur ϵ_{grav} . Les deux figures du haut montrent deux profils d'Hélium séparés par un pas de temps et celle du bas montre le profil de ϵ_{grav} résultant.	57
1.5 Variation des profils d'abondances près des discontinuités	58
2.1 Schéma de principe pour le calcul d'une équation d'état	63
2.2 Répartition de différents effets physiques dans le plan (ρ, T) , extrait de Hansen & Kawaler (1993), pour un plasma d'Hydrogène pur.	68
2.3 Conditions thermodynamiques dans une étoile de l'AGB de 3 masses solaires.	69
2.4 La nouvelle variable $\ln f$ comme signature de la dégénérescence.	80
2.5 La masse volumique (en logarithme) dans le plan $(\eta_e, \log(T))$	83
2.6 Organigramme de la nouvelle équation d'état , partie I.	84
2.7 Organigramme de la nouvelle équation d'état , partie II.	85
2.8 Organigramme pour la calcul du modèle initial.	91
2.9 Le choix du niveau "zéro" pour les énergies.	103
2.10 Ionisation en fonction de la température dans une étoile de l'AGB de 3 masses solaires.	126
2.11 Ionisation en fonction de $\ln f$ dans une étoile de l'AGB de 3 masses solaires.	127
2.12 Conséquences et tests de la nouvelle équation d'état.	128
3.1 Fluctuations de température et de masse volumique en fonction des gradients de T et μ	133
3.2 Circulation méridienne dans une étoile en rotation, extrait de Rose (1998).	139
3.3 Domaines des différentes instabilités de rotation.	142
3.4 Dispersion du mouvement vertical des particules à différents endroits dans l'étoile, d'après Freytag <i>et al.</i> (1996).	148
4.1 Répartition angulaire de puissance dans une antenne en coordonnées cartésiennes	162
4.2 Schéma polaire général de la répartition de puissance d'une antenne (à droite) et détail des lobes secondaires (à gauche).	163
4.3 Entrées-sorties du mélangeur	166
5.1 Propagation de l'énergie d'un faisceau lumineux émis en E jusqu'en R.	174
5.2 Signification physique de la solution à l'équation de transfert	184
5.3 L'imbrication des paramètres physiques dans l'enveloppe	186
5.4 Organigramme du programme de transfert radiatif	190
5.5 Caractéristiques de l'enveloppe modélisée.	191
5.6 Méthode de calcul pour la profondeur optique.	202

2.1	Méthode suivie pour l'ajustement des 12 raies observées par source.	225
3.1	Conditions thermodynamiques dans une étoile pré-séquence principale de 0.2 masses solaires pour $t = 2.46 \cdot 10^9 yr$, $R_{eff} = 0.21 R_{\odot}$, $L = 5.97 \cdot 10^{L3} L_{\odot}$. . .	243
3.2	Corrections non-idéales pour des étoiles PMS de 0.1, 0.4, 0.7 et 1.0 M_{\odot} , juste après le brûlage du Béryllium 9 (les âges correspondants sont donnés dans le texte).	243
3.3	Variation des profils d'ionisation de l'Hydrogène pour des étoiles PMS de 0.1, 0.2, 0.4, 0.7 et 1.0 M_{\odot} (respectivement en trait plein, tiret, pointillé, tiret-point et longs tirets) juste après le brûlage du Béryllium 9 (les âges correspondants sont donnés dans le texte).	244
3.4	Zones d'ionisation partielle dans une étoile étoile pré-séquence principale de 7 M_{\odot} à $t \sim 2.27 \cdot 10^5 yr$, $L = 1357 L_{\odot}$, $R_{eff} = 11.35 R_{\odot}$	245
3.5	Profils de ρ et T dans une étoile étoile pré-séquence principale de 7 M_{\odot} à $t \sim 2.27 \cdot 10^5 yr$, $L = 1357 L_{\odot}$, $R_{eff} = 11.35 R_{\odot}$	245
3.6	Abondance des ions de l'Hydrogène (en bleu), de l'Hélium (en vert) dans une étoile étoile pré-séquence principale de 7 M_{\odot} à $t \sim 2.27 \cdot 10^5 yr$, $L = 1357 L_{\odot}$, $R_{eff} = 11.35 R_{\odot}$	246
3.7	Abondance du Néon dans une étoile étoile pré-séquence principale de 7 M_{\odot} à $t \sim 2.27 \cdot 10^5 yr$, $L = 1357 L_{\odot}$, $R_{eff} = 11.35 R_{\odot}$	247
3.8	Diagramme de Kippenhahn d'une étoile de 3 M_{\odot} avant (à gauche) et après (à droite) le premier dredge-up	257
3.9	Rapports C/O d'une étoile de 3 M_{\odot} au centre (à gauche) et en surface (à droite) au cours du temps. L'Oxygène est en bleu et le Carbone en vert. . . .	258
3.10	Rapports isotopiques du Carbone dans une étoile de 3 M_{\odot} au centre (à gauche) et en surface (à droite) au cours du temps. Le ^{12}C est en vert et le ^{13}C en bleu.	259
3.11	Diagramme de Kippenhahn de la phase TP-AGB d'une étoile de 4.5 M_{\odot} (à gauche) et agrandissement d'un pulse thermique (à droite, l'origine des temps a été prise à $t_0 = 1.58777 \cdot 10^8 yr$).	260
3.12	Diagramme de Kippenhahn d'une étoile de 6 M_{\odot} , après le premier dredge-up (à gauche), HBB et pulse avec DUP3 (à droite).	260
3.13	Rapports C/O d'une étoile de 6 M_{\odot} au centre et en surface	261
3.14	Rapports isotopique du Carbone dans une de 6 M_{\odot} au centre et en surface	262
3.15	Conséquences structurelles du flash de l'Hélium	263
4.1	Profil des gradients à la discontinuité H-He laissée par la couche en fusion de l'Hydrogène.	267

4.2	Réactions dominantes dans les couches en fusion d'une étoile de l'AGB de $3 M_{\odot}$. En haut à gauche, la couche en fusion d'Hélium. En haut à droite, la base de la couche en fusion d'Hydrogène. En bas à gauche et à droite respectivement le milieu et le sommet de la couche d'Hydrogène. La nature du vert présent dans la case des éléments indique son abondance. La répartition des niveaux de verts est effectuée sur 30 ordres de grandeur en fraction de masse, de 1 (vert sombre) à 10^{+30} (vert clair). Les flèches indiquent les flux de réaction. Leurs couleurs s'échelonnent de 1 (clair) à 10^{+20} (sombre) et leur taille est d'autant plus grande que la réaction participe à l'énergétique de l'étoile.	270
4.3	Réactions dominantes dans le pulse (en bas à gauche) et dans l'intercouche après le pulse (en bas à droite) dans une étoile de l'AGB de $3 M_{\odot}$. En haut, un graphe montre la structure en température du pulse.	271
4.4	Profils des abondances, des gradients et de l'opacité juste à l'apparition d'une petite zone convective avant le dredge-up sous l'enveloppe.	272
4.5	Profils des abondances et de ϵ_{grav} lorsque l'enveloppe convective pénètre une région de composition différente de la sienne.	275
4.6	Test LED: profils de l'abondance d'Hydrogène et du gradient de poids moléculaire moyen, ∇_{μ} , au moment de pénétration maximum de l'enveloppe (l'enveloppe est restée au-dessus de la couche d'Hydrogène).	276
4.7	Test ION: évolution temporelle des conditions thermodynamiques (T, ρ) à la base de l'enveloppe convective pour le modèle de référence (en haut) et le test TIM (en bas).	277
4.8	Test TIM: diagramme de Kippenhann du DUP3 de référence (droite) et de celui du test TIM (gauche).	278
4.9	Test DOV: évolution du profil des abondances de ^1H , ^4He , ^{13}C et ^{35}Cl chronologiquement de gauche à droite et de haut en bas.	280
4.10	Test MIX: structure du DUP3 de référence et de celui de MIX (respectivement à droite et à gauche). Le temps est compté en années à partir de $t = 4.83497 \cdot 10^8$ yr.	281
4.11	Test STA: structure du DUP3 de référence et de celui de STA (en haut, respectivement à droite et à gauche) et évolution temporelle des conditions thermodynamiques, ρ et T, à la base de l'enveloppe convective pour le modèle de référence (en bas) et le test STA (au milieu).	282

Annexes

305

A.1	Repères stellaires en masses (voir les commentaires dans le texte).	306
C.1	Les chaînes protons-protons.	320
C.2	Les cycles CNO, extraits de Arnould <i>et al.</i> (1996)	321
C.3	Les chaînes Néon-Sodium et Magnésium-Aluminium, extrait de Arnould <i>et al.</i> (1996)	321

Liste des tableaux

Partie I	1
2.1 Critère d'appartenance aux types C, S et M d'après la figure I-2.3.	13
Partie II	36
1.1 Description des itérations dans l'accélération de convergence	50
1.2 Paramètres de l'accélération de convergence	53
1.3 Contraintes de la discrétisation spatio-temporelle (en pourcentages)	60
2.1 Valeurs par défaut des paramètres internes à l'équation d'état	88
2.2 Définition des produits de rapports d'ionisation	94
5.1 Glossaire de la figure II-5.3	187
5.2 Paramètres de calcul pour le code de transfert radiatif	189
5.3 Les différents taux de collisions utilisables dans le code de transfert radiatif. .	200
Partie III	204
4.1 Les différents test menés concernant la profondeur du dredge-up	268
4.2 Tableau des caractéristiques du pulse de référence.	268
4.3 Tableau comparatif des pulses et dredge-up obtenus pour les différents test réalisés. Lorsque le calcul du pulse et donc de M_{pth}^+ n'a pas été fait, on a supposé $M_{pth}^+ = M_{pth}^+(ref)$ pour calculer ΔM_{dup}	274
Annexes	305

Première partie

ABC des AGB

La présentation de ce travail de thèse suivra le plan naturel consacré à tout projet. Cette première partie est destinée, à partir de ce que sont les étoiles de l'AGB, à identifier les objectifs intéressants à travailler. Cela permettra de chercher des moyens à mettre en place. Ils seront présentés dans la partie II et les résultats dans la partie III.

Dans cette première partie présentant le contexte du travail, nous avons choisi tout d'abord, d'examiner les caractéristiques des étoiles de l'AGB dans le chapitre I-1, pour montrer que premièrement ce projet devait être centré autour des abondances et que deuxièmement, il convenait d'utiliser une démarche qui couple les aspects "observation" et "modélisation". Chacun de ces aspects sera ensuite présenté respectivement dans les chapitres I-2 et I-3 avec les renseignements qu'il peut apporter concernant les abondances. Ce plan permettra d'ébaucher au chapitre I-4 les moyens à mettre en place pour atteindre les objectifs que l'on va retenir pour ce travail de thèse.

Chapitre 1

Intérêts des étoiles de l'AGB

Le but de ce chapitre est de montrer que, comme l'évolution chimique des étoiles de l'AGB se répercute fortement sur le milieu qui l'entoure, nous avons intérêt à nous concentrer sur l'étude de la nucléosynthèse de ces étoiles. Dans ce but, nous montrerons brièvement, à partir de la structure interne des étoiles de l'AGB, les principaux faits qui permettent à ces étoiles d'avoir, premièrement une nucléosynthèse riche et particulière et deuxièmement, d'avoir une forte influence chimique sur le milieu qui les entoure. Nous pourrions alors poser les bases de ce travail (objectifs, méthodes) pour pouvoir détailler ensuite, dans les chapitres suivants, les moyens à mettre en place.

1.1 Structure

Lorsque qu'une étoile dont la production d'énergie est assurée par le brûlage central de l'Hélium, épuise cet élément en son centre, elle va entrer dans une phase d'évolution rapide dont le temps caractéristique sera le temps de Kelvin-Helmoltz (temps caractéristique de variation de l'énergie potentielle gravitationnelle). L'évolution de la structure sera caractérisée par une contraction centrale et une dilatation de l'enveloppe. Dans le diagramme de Hertzsprung-Russel (DHR), l'étoile se dirige vers une branche quasiment verticale que l'on appellera "branche asymptotique des géantes" ou AGB (pour Asymptotic Giant Branch). Comme le gradient de température en milieu radiatif $\nabla_{rad} \sim T^{\pm 4}$ (voir équation II-1.19), la baisse de température consécutive à la dilatation entraîne une montée du gradient radiatif, notamment à la base de l'enveloppe convective et donc une extension vers le bas de l'enveloppe.

Dans les étoiles de plus de $4 M_{\odot}$, la baisse de température est telle que la couche où brûlait l'Hydrogène s'éteint. Or, c'est celle-ci qui arrête la descente de l'enveloppe convective. Les étoiles de plus de $4 M_{\odot}$ subissent donc une pénétration de l'enveloppe convective dans les anciennes couches de brûlage de l'Hydrogène: c'est le phénomène de "Dredge-up". Celui qui se déroule à ce moment-là de l'évolution des étoiles s'appelle "deuxième Dredge-up" car un épisode de drainage analogue a déjà eu lieu, quelque soit la masse de l'étoile, à la fin de la séquence principale. Le premier Dredge-up, cependant, ne pénètre pas la couche de brûlage de l'Hydrogène.

On notera que la phase AGB est divisée en deux parties. La phase E-AGB (E pour "Early") où les deux couches en fusion croissent en masse au fur et à mesure du brûlage. C'est

la couche d'Hydrogène qui fournit principalement l'énergie nécessaire à l'équilibre de l'étoile, $L_H \sim 90\%L_*$. La phase suivante est nommée TP-AGB (TP pour "Thermally Pulsing"). Ce nom sera expliqué dans la section suivante. La structure interne d'une étoile à la phase TP-AGB est schématisée sur la figure I-1.1.

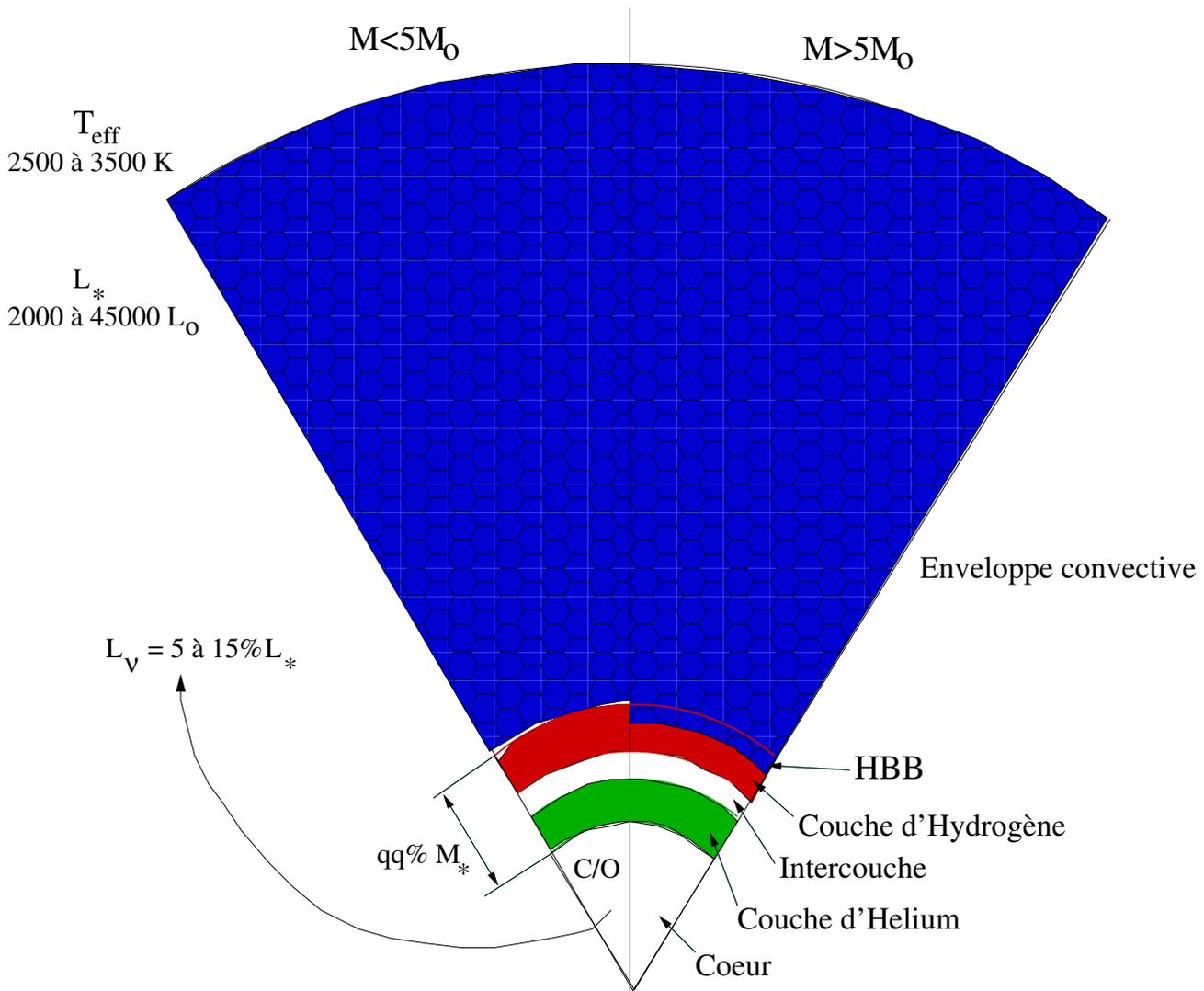


FIG. 1.1 – Structure d'une étoile de l'AGB

Les faits les plus remarquables caractérisant la structure d'une étoile de l'AGB sont les suivants:

- il y a une disproportion énorme en taille entre l'immense enveloppe convective et le coeur. La première, qui occupe plusieurs centaines de rayons solaires (99,99% de l'étoile) contient seulement 2 fois moins à 5 fois plus de masse que le coeur, qui lui est confiné dans une zone de quelques *millièmes* de rayon solaire avec une masse de 0.5 à $1.2 M_{\odot}$!
- il y a de même disproportion en masse entre les zones inertes nucléairement et celles qui permettent à l'étoile de maintenir un équilibre (rapport 3 pour 100 environ en masse). La production d'énergie concerne une zone de $0.1 M_{\odot}$ au plus et la couche d'Hydrogène, source majoritaire d'énergie est limitée à une masse maximum de $10^{+2} M_{\odot}$.
- enfin, le gradient de composition chimique est lui aussi remarquable. L'enveloppe convective

tive, dont le tiers supérieur est partiellement ionisé, possède une composition qui correspond grossièrement à la composition initiale de l'étoile (hormis l'influence des deux premiers Dredge-up), c'est-à-dire qu'elle reste principalement composée d'Hydrogène et d'Hélium. Cette zone surmonte une couche d'Hydrogène en fusion produisant de l'Hélium, elle-même située au-dessus d'une couche de transition où existent les produits de cette combustion. On trouve juste en-dessous la couche en fusion d'Hélium, plus épaisse, qui surmonte le coeur dégénéré de Carbone et d'Oxygène dont les proportions dépendent, à masse initiale donnée, du taux de la réaction $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$.

On comprend les difficultés de modélisation (notamment de discrétisation) qui peuvent résulter d'une telle stratification de la structure interne des étoiles de l'AGB .

1.2 Phénomènes caractéristiques

Après avoir exposé la structure des étoiles à la phase AGB, voyons les phénomènes qui vont les faire évoluer et qui font de ces objets des étoiles tout-à-fait particulières. En effet, dans les étoiles, la surface est le seul endroit où les mesures directes d'abondances sont possibles alors que les différents sites de nucléosynthèse sont profondément enfouis, dans les zones où la température est suffisamment importante. En règle générale, les produits de cette nucléosynthèse ne peuvent pas être transportés à la surface dans un temps du même ordre de grandeur que le temps caractéristique d'évolution de l'étoile.

La caractéristique principale des étoiles de l'AGB est justement d'enfreindre cette "règle": *les éléments juste produits peuvent être observés* grâce à une association de phénomènes propres à ces étoiles. Distinguons quatre caractéristiques:

- des instabilités thermiques récurrentes dans la couche d'Hélium, appelées *pulses thermiques*, qui donnent naissance à une languette convective. Celles-ci débutent à l'endroit du maximum de production d'énergie nucléaire dans la couche d'Hélium et s'étendent jusqu'à la couche en fusion d'Hydrogène. Ceci produit les conditions d'une nucléosynthèse très riche: haute température, production et destruction simultanée de protons, de neutrons et de particules α ... Ces pulses donnent leur nom à la phase TP-AGB (TP pour "Thermally pulsing"). Ils sont dus au fait que, lors du brûlage de l'Hélium, la production d'énergie nucléaire est proportionnelle à la puissance 40 de la température. Le taux avec lequel l'énergie est relâchée dans le milieu est donc bien plus important que celui qui l'évacue par diffusion radiative (Wallerstein *et al.* 1997).

- des descentes de l'enveloppe convective après le déroulement d'un pulse thermique, qui dans certains cas pénètrent la zone de combustion nucléaire de l'Hydrogène. Dans ce cas la matière de la couche en fusion, de composition très différente de celle de l'enveloppe, est instantanément mélangée par la convection dans toute l'enveloppe. Ce phénomène, qui revient à un drainage d'éléments lourds dans l'enveloppe de l'étoile, est alors baptisé *troisième Dredge-up* ou DUP3, par analogie avec les deux phénomènes similaires se produisant plus tôt dans l'évolution de l'étoile.

- le *Hot-bottom-burning* (HBB) qui consiste en un recouvrement partiel de la zone de brûlage de l'hydrogène et de l'enveloppe convective. Ce phénomène n'apparaît que lorsque la masse initiale de l'étoile est suffisamment importante ($M > 5 M_{\odot}$ environ) pour que la température à la base de l'enveloppe convective soit supérieure à celle qui permet le brûlage de l'Hydro-

gène ($T > 9 \cdot 10^6 K$). Les éléments produits à cet endroit sont donc instantanément mélangés jusqu'à la surface.

- et enfin, ces étoiles subissent une forte perte de masse depuis leur surface dont le taux augmente avec le temps. Cette forte éjection de matière permet à une enveloppe *circumstellaire* de se former, enveloppe qui contiendra les nouveaux éléments produits.

1.3 Les objectifs de ce travail

Les caractéristiques structurelles des étoiles de l'AGB, rapidement résumées ci-dessus, vont nous permettre de formuler les intérêts liés à l'étude de ces objets, puis les objectifs de recherche pour ce travail de thèse.

1.3.1 Intérêt des étoiles de l'AGB

Mentionnons que la phase AGB est traversée par plus de 80% des étoiles quittant la séquence principale. Cette grande proportion multiplie les conséquences de l'évolution individuelle d'une étoile de l'AGB pour les rendre visibles et significatives dans l'évolution d'une galaxie en entier. Ainsi,

- à cause de leurs fortes luminosités et de leurs âges avancés, les étoiles de l'AGB révèlent la structure et la dynamique de la galaxie.
- à cause de leur nombre et de leur principale caractéristique, qui est d'expulser dans le milieu interstellaire les éléments qu'elles synthétisent avec des temps caractéristiques inférieurs à leur durée de vie, les étoiles de l'AGB sont parmi les principaux acteurs de l'évolution de la composition chimique des galaxies.

Finalement, les étoiles de l'AGB sont des étoiles qui mettent en jeu des phénomènes physiques variés et complexes (nucléosynthèse unique, instabilités, mélange, ...) mais pour lesquels des contraintes observationnelles peuvent être trouvées relativement facilement. En effet, tous ces phénomènes physiques ont une influence sur les quantités relatives d'éléments synthétisés. *La mesure des abondances en surface de l'étoile et dans l'enveloppe circumstellaire constituent donc un test des modèles de nucléosynthèse et de mélange.* Pour toutes ces raisons, nous avons choisi de centrer ce travail sur les abondances.

1.3.2 Objectifs retenus

Concrètement, nous nous sommes fixé le but suivant:

Etre capable de faire des prédictions fiables en terme de rapports isotopiques et de trouver les contraintes observationnelles s'y rattachant.

Ce but se décline ensuite suivant plusieurs objectifs:

- poursuivre l'adaptation d'un code d'évolution stellaire aux spécificités de la phase AGB.
- déterminer les mécanismes favorables au troisième dredge-up.
- mener des observations radiométriques de raies moléculaires dans des enveloppes circumstellaires.

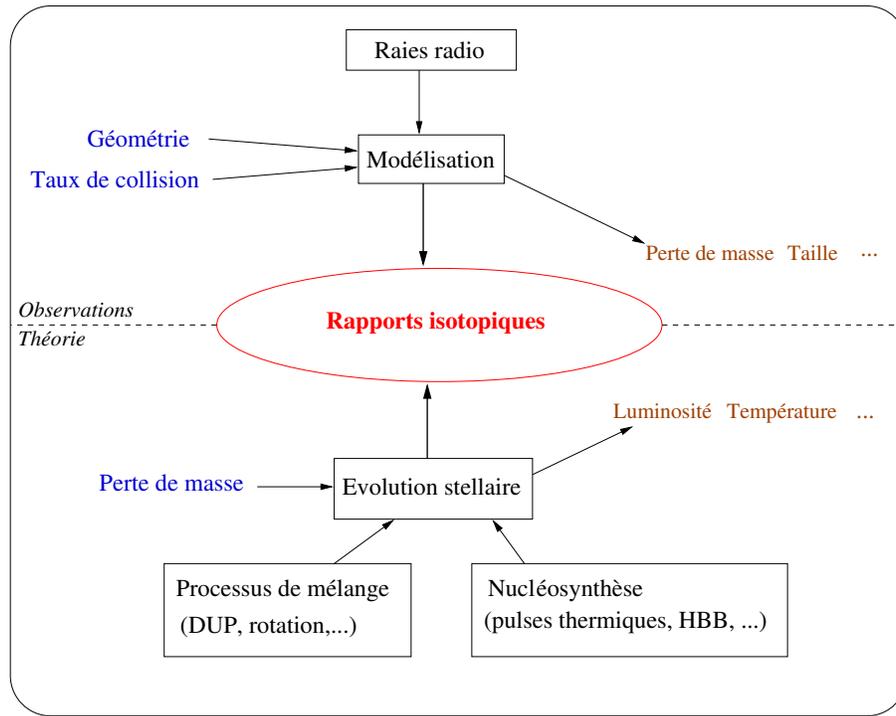


FIG. 1.2 – L'utilisation des rapports isotopiques comme diagnostics de la physique stellaire.

- les analyser avec les outils appropriés pour en extraire les contraintes (abondances moléculaires puis isotopiques) sur les processus physiques se déroulant au sein des objets observés.

En quoi les objectifs retenus permettront-ils d'atteindre ce but ? La figure I-1.2 schématise l'idée directrice. La suite de cette partie sera centrée sur l'exploration de ce schéma, c'est-à-dire destinée à expliquer les contraintes apportées par chacune des boîtes qui y figurent, les difficultés de modélisation ou d'observation associées ...

Chapitre 2

Exploration des étoiles de l'AGB

Nous allons donc commencer à commenter la figure I-1.2 par la partie observationnelle. C'est par l'observation que la première classification des étoiles de l'AGB a été faite. Nous la décrirons dans la première section. Nous exposerons ensuite la structure de l'enveloppe, cette fois-ci circumstellaire, car c'est d'elle que provient tout le rayonnement qui a permis d'établir cette classification. Puis, compte tenu de nos connaissances sur l'enveloppe circumstellaire, nous sélectionnerons plus particulièrement les observations radiométriques et montrerons leurs avantages pour les étoiles de l'AGB .

2.1 Classification observationnelle

La figure I-2.1 montre schématiquement, d'après Jaschek & Jaschek (1990), les caractéristiques spectrales définissant les différents types d'étoiles évoluées. Aucune des flèches portées sur ce schéma n'est fixée très précisément car les critères définissant chaque type ont évolué avec les années. Ces critères reposent sur la présence simultanée et corrélée dans tous les membres d'un même groupe, de plusieurs signatures spectrales précises. Cette analyse n'étant que statistique, les types qu'elle définit fluctuent suivant la qualité des observations, les corrélations calculées, ... Les flèches ne sont donc là que pour fixer les idées.

Les étoiles "C" et "O" sont les plus faciles à comprendre puisque ces dénominations sont fonctions du rapport d'abondance C/O observé. Pour les étoiles "C", les bandes de C_2 , CN , CH dominent le spectre alors que pour les étoiles "O", une présence marquée de TiO est requise. Les sous-classes "R" et "N" dépendent principalement de l'importance de C_2 dans le spectre. Les étoiles "S" sont celles qui présentent nettement la molécule ZrO , signe d'un enrichissement en éléments "S" (voir la section I-3.1). Précisons que la valeur "0" portée pour ZrO sur la figure 2.1 indique que la signature de cette molécule est absente du spectre. Les sous classes "SC", "CS" et "MS" indiquent toutes une appartenance aux types "S", mais associée à une présence forte du carbone ("CS"), de l'oxygène ("MS") correspondant aux types "C" ou "O". Le type "SC" est intermédiaire entre les deux. Les étoiles "J" sont des étoiles carbonées à forte proportion de ^{13}C . D'autres détails peuvent être trouvés dans Wallerstein *et al.* (1997).

Compte tenu du paragraphe précédent, une étoile est donc rangée dans cette classification sur la base d'observations de molécules, observations qui couvrent différents domaines spec-

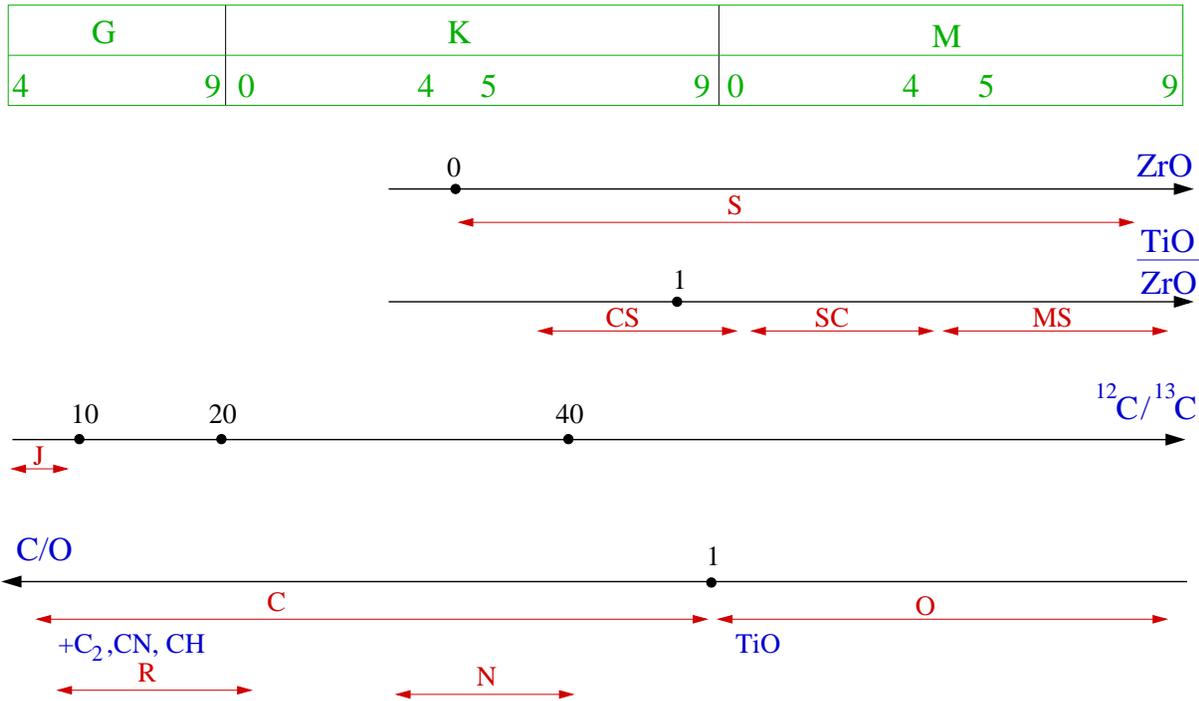


FIG. 2.1 – Classification spectrale des étoiles de l’AGB en fonction des signatures spectrales de certaines molécules et de certains rapports d’abondances. Les différentes échelles ont été placées les unes à côté des autres pour que des valeurs placées sur la même verticale soient approximativement physiquement compatibles.

traux. Par exemple, dans les étoiles de type M, les spectres visibles contiennent des bandes d’absorption des molécules oxygénées comme TiO, VO, OH, H₂O alors que les domaines infrarouge et radio présentent les signatures des molécules subsistant plus loin dans l’enveloppe de l’étoile : CO, qui contient la quasi totalité du Carbone, OH, SiO et H₂O par exemple. L’émission des Silicates et plus rarement leur absorption se superpose aussi au spectre infrarouge, vers 10 μm . Dans les étoiles de type C, se sont les molécules C₂, C₃, SiC₂, CN, CH,... qui montrent des bandes d’absorption dans le visible. Les grains les plus abondants sont les graphites et les grains de SiC qui se manifestent par une émission à 11.4 μm .

Pour déterminer la position d’une étoile évoluée dans cette classification, Bujarrabal *et al.* (1994) ont proposé une analyse basée sur l’observation du placement d’une étoile dans un diagramme, avec en abscisse une molécule typique des enveloppes carbonées et en ordonnée une molécule typique des enveloppes oxygénées. Ils ont déterminés les régions où se regroupent les différents types d’étoiles dans un tel diagramme, grâce à un échantillon d’une quarantaine d’étoiles de type connu, pour diverses molécules oxygénées (SiO et SO) et carbonées (HCN, HNC, SiS, HC₃N, CS). Ce moyen de classification évite les cas ambigus comme ceux existants avec les molécules HCN et CO, proposées par Zuckerman & Dyck (1986). La figure I–2.2 montre un exemple avec six transitions rotationnelles SiO(J=2→1,3→2), HCN(J=1→0), CS(3→2, 5→4) et SO(6,5→5,4). Les règles qui en ont été tirées sont présentées dans la figure I–2.3. Cette figure se lit comme indiqué dans le tableau I–2.1.

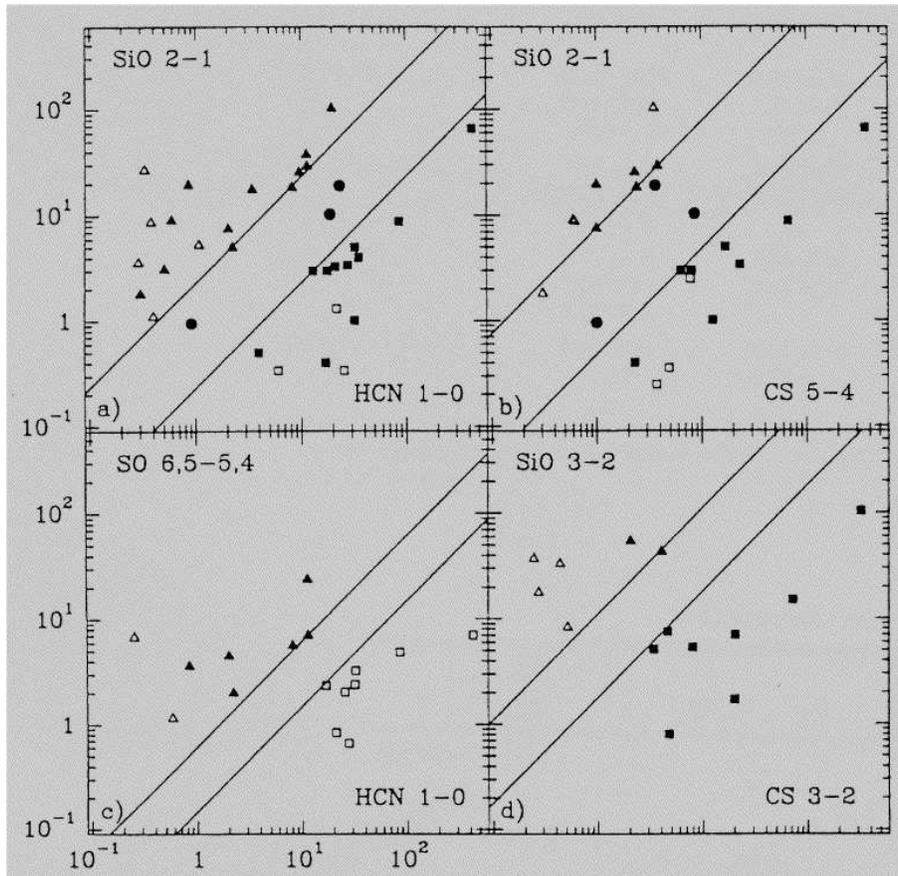


FIG. 2.2 – L'intensité de l'émission de molécules oxygénées et carbonées comme indicateur du type de l'étoile, extrait de Bujarrabal et al. (1994).

O-rich C-rich	HCN 1 → 0	HNC 1 → 0	HC ₃ N 10 → 9	SiS 5 → 4	CS 3 → 2	CS 5 → 4
SiO 2 → 1	> 2.3 < 0.23	> 45 < 2.6	> 30 < 3	> 6.8 < 4.1	> 7.2 < 0.88	> 7.5 < 0.48
SiO 3 → 2	> 2.8 < 0.33	> 66 < 5.5	> 50 < 5.1	> 8.1 < 8.1	> 11 < 1.8	> 8.3 < 0.66
SO 6,5 → 5,4	> 0.62 < 0.15	> 11 < 1.5	> 10 < 2.5	> 3.9 < 0.75	> 1.7 < 0.5	> 1.8 < 0.5

FIG. 2.3 – Les critères de classification déduits de la figure I-2.2, extrait de Bujarrabal et al. (1994).

Valeur du rapport SiO(2-1)/HCN(1-0)

Type C	0.23	Type S	2.3	Type M
--------	------	--------	-----	--------

TAB. 2.1 – Critère d'appartenance aux types C, S et M d'après la figure I-2.3.

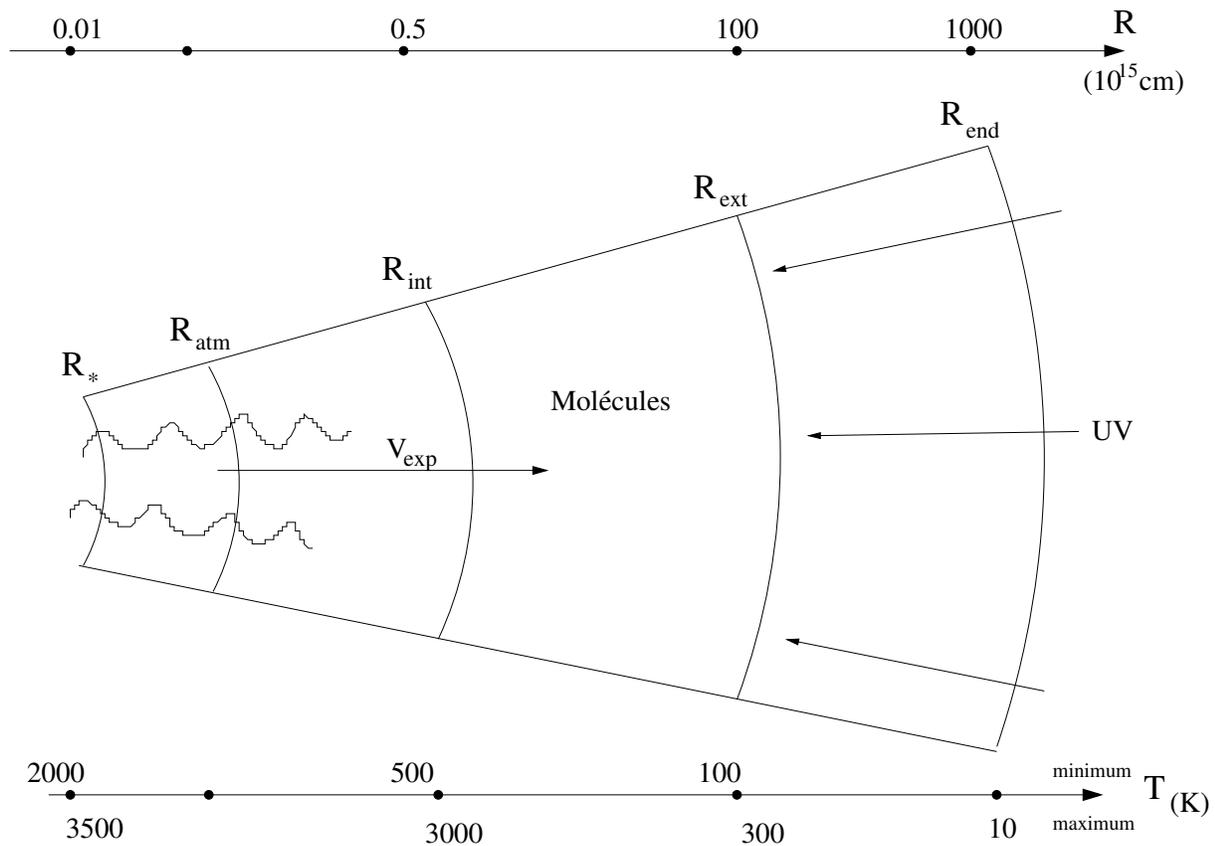


FIG. 2.4 – De l'étoile à l'enveloppe circumstellaire lointaine

2.2 Structure de l'enveloppe circumstellaire

En quoi la classification observationnelle effectuée au paragraphe précédent et donc l'observation des étoiles de l'AGB en général, apporte-t-elle des contraintes sur la nucléosynthèse ? Pour répondre à cette question, il faut savoir si le rayonnement qui transporte l'information rendant possible cette classification a pu subir des altérations. Celles-ci pourraient alors modifier l'information dont le rayonnement est initialement porteur sur son milieu d'origine. Il faut donc savoir quelles sont les caractéristiques du milieu où a été émis le rayonnement observé et celles des milieux qu'il a pu traverser.

2.2.1 Généralités

La figure I-2.4 donne un schéma de l'environnement de l'étoile, de la fin de son enveloppe convective jusqu'à l'enveloppe circumstellaire.

L'échelle du haut donne approximativement une idée des distances dans l'enveloppe et celle du bas une "fourchette" de températures à différents endroits (les minima se lisent au-dessus de l'axe et les maxima en-dessous). On distingue plusieurs parties sur ce schéma. Elles vont être détaillées maintenant.

L'atmosphère

Les régions externes de l'enveloppe convectives ($T > 3500K$) marquent le commencement de l'atmosphère. A ces températures, des molécules peuvent commencer à se former et ont une influence notable sur le spectre émergent, notamment dans le proche infrarouge (Olofsson 1999). Les paramètres importants déterminant la structure et la composition de l'atmosphère sont:

- la température et la gravité de surface.
- la géométrie de l'atmosphère.
- les opacités.
- l'écart à l'équilibre thermodynamique local (voir le chapitre II-4)
- la convection et son traitement mathématique (voir le chapitre II-1 et l'annexe D)

Les modèles sont difficiles à construire car ils sont d'autant plus réalistes qu'ils incorporent un grand nombre d'espèces avec le plus possible de raies. Les banques de données atomiques nécessaires sont colossales, les raies incluses se comptant en dizaines de milliers (Ohnaka & Tsuji 1996) et même en millions pour les molécules (Plez 1992).

L'atmosphère externe

Elle est le siège de tous les *phénomènes dynamiques*. En effet, dans cette zone, les pulsations de l'étoile centrale modulent la puissance émise et déposent de l'énergie mécanique dans les parties faiblement liées gravitationnellement à l'étoile. La distance caractéristique de variation de pression est bien plus grande que dans le cas hydrostatique et des ondes de chocs peuvent se développer, permettant, dans les parties les plus froides, aux grains de se former. La vitesse du gaz peut atteindre la vitesse d'échappement pour donner naissance au vent, voir au "super-vent" caractérisant certaines étoiles évoluées (Delfosse *et al.* 1997). Les difficultés de compréhension de cette région résident dans le fait que les interactions entre les effets physiques et chimiques sont complexes, non-linéaires et se déroulent sur des temps caractéristiques différents. En particulier la formation des grains est peu comprise alors qu'elle a des répercussions sur la structure thermique, mécanique et chimique de cette partie de l'atmosphère.

L'enveloppe circumstellaire interne

Dans l'enveloppe circumstellaire interne, on détecte encore les espèces photosphériques mais affectées par les réactions entre particules neutres et les interactions avec la poussière. Cette dernière est détectée notamment dans l'émission continue millimétrique (Lucas & Guélin 1999). Au delà de la zone de formation de la poussière, le gaz et la poussière évoluent séparément dans un état de quasi-équilibre thermodynamique local.

L'enveloppe circumstellaire externe

Cette zone se caractérise par une chimie beaucoup plus riche que dans l'enveloppe interne. Par exemple, une cinquantaine d'espèces sont détectées dans l'enveloppe externe de IRC+10216, la source carbonée la plus lumineuse et donc la plus étudiée. Dans cette zone, la chimie est dominée par les réactions de photodissociation provoquées par le rayonnement

10^{-3}	CO					
10^{-4}	C					
10^{-5}		C ₂ H ₂ *		HCN		
10^{-6}	CH ₄ *	C ₂ H	CN	SiS	CS	
10^{-7}		C ₄ H	HC ₃ N			
		C ₃ *	C ₃ N			
			HC ₅ N	SiC ₂	AlCl	
10^{-7}	SiH ₄ *	C ₆ H	HNC	SiO	AlF	
		C ₅ *				
	NH ₃	lC ₃ H	HC ₇ N	SiC	NaCN	
		cC ₃ H ₂	HC ₉ N	SiN	MgNC	
10^{-8}		C ₅ H	H ₂ C ₄		C ₂ S	
		C ₈ H	HC ₂ N		C ₃ S	
		C ₇ H	H ₂ C ₃	[C ₅ N]	MgCN	
10^{-9}		cC ₃ H		SiC ₄	H ₂ S	
					KCl	
10^{-10}	HCO ⁺					

FIG. 2.5 – Espèces moléculaires détectées dans l'enveloppe circumstellaire la plus étudiée: IRC+10216, extrait de Glassgold (1999). Une étoile en exposant signale les espèces détectées uniquement en infrarouge. C₂ a été détectée mais son abondance n'est pas déterminée.

interstellaire. Les molécules, dissociées petit à petit, créent des radicaux dont les réactions peuvent engendrer des espèces très spécifiques à l'enveloppe externe (Glassgold 1999). En particulier, le nombre d'espèces présentes est plus important à cet endroit de l'enveloppe qu'aux autres, notamment grâce à l'apparition des réactions associées aux molécules telles HCN et H₂C₂ (Lucas & Guélin 1999).

L'enveloppe circumstellaire détachée

Autour de quelques sources, des enveloppes détachées ont été observées: R Scl, U Ant, S Sct, TT Cyg, U Cam ... (Olofsson *et al.* (1990), Olofsson *et al.* (1996), Izumiura *et al.* (1996), Waters *et al.* (1994)). Elles sont la preuve de la variation du taux de perte de masse sur des échelles de temps à la fois courtes et longues. Parmi les effets permettant d'expliquer les variations sur de faibles échelles de temps, on note en particulier les oscillations mécaniques et les pulses thermiques.

2.2.2 Les différentes espèces moléculaires

La figure I-2.5 (extraite de Glassgold (1999)) montre la richesse de la chimie dans l'enveloppe de l'étoile CW Leo (IRC+10216). Les espèces ont été placées dans la figure I-2.5 par familles chimiques (horizontalement) et par ordre d'abondance (verticalement). L'abondance de CO étant très élevée, cette molécule s'auto-protège des ultraviolets interstellaires (Mamon *et al.* 1988). Elle se photodissocie donc très loin dans l'enveloppe et les espèces produites par

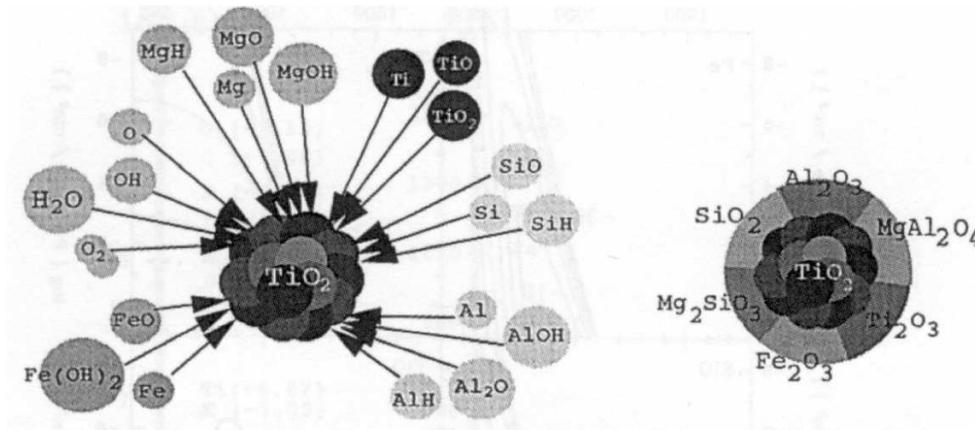


FIG. 2.6 – Croissance hétérogène d'un grain sur de l'oxyde de Titane TiO_2 . A gauche: molécules participant à la croissance. A droite: composants existants dans le grain après sa formation. Extrait de Jeong et al. (1999)

photodissociation sont peu nombreuses (première colonne). La deuxième colonne contient les molécules saturées. On peut dire qu'elles sont produites dans l'enveloppe interne car elles sont absentes des spectres infrarouges révélant la photosphère. Les multiples espèces produites par HCN et H_2C_2 sont portées dans les colonnes 4 et 6. Les dernières colonnes montrent les espèces comportant des éléments tels que Si et S . Dans la partie interne de l'enveloppe, ces espèces se condensent sur les grains alors qu'à l'extérieur, elles sont dissociées en ions qui provoquent des chaînes de réactions peuplant la dernière colonne.

En règle générale, les abondances des ions étant beaucoup plus faibles que celles des neutres (facteur 100 environ), ce sont les réactions chimie neutre-neutre qui dominent la chimie (Glassgold 1999).

Les hypothèses de bases des modèles de chimie interstellaire sont les suivantes: l'enveloppe est sphérique, homogène localement, stationnaire. Leur nécessité sera démontrée lorsque l'on montrera, au chapitre I-5, la complexité des couplages existants dans une enveloppe circumstellaire. Les éléments considérés sont le plus souvent C, N, O, Si, S mais les taux de réactions neutres-neutres ou ions-neutres qui sont nécessaires jusqu'à des températures de l'ordre de $30K$ sont la plupart du temps non mesurés et les interactions avec la poussière mal connues. Les conditions initiales sont souvent des paramètres des modèles.

2.2.3 Difficultés liées à la présence des poussières

Les quelques points qui suivent sont destinés à montrer la diversité des effets dus à la prise en compte de la poussière et la complexité que cela rajoute.

- la poussière est une source d'opacité supplémentaire qui requiert la connaissance précise de la formation des grains. Il n'y a pas un endroit précis où la poussière se forme mais une zone couvrant les régions de formation des différents grains. Par exemple pour SiC et les graphites, $T < 1700K$ et pour les silicates $T < 1200K$ (Zuckerman 1980).
- le gaz et la poussière ne sont pas forcément en équilibre ($T_{dust} \neq T_{gaz}$), ce qui oblige à décrire 2 fluides différents mais couplés.
- la poussière interagit avec les photons par pression de radiation.

La figure I-2.6 montre la diversité des espèces pouvant se condenser sur une molécule telle TiO_2 pour former des grains et la figure I-2.7 montre la grande diversité des grains qui peuvent ainsi se former.

2.3 Les observations radio

Les conditions physiques régnant dans les différentes parties de l'enveloppe circumstellaire étant différentes, les moyens d'observations s'y rattachant sont eux aussi différents. En examinant l'information apportée par les différentes longueurs d'ondes, nous avons retenu le domaine millimétrique comme bande de longueur d'onde la plus pertinente pour trouver les contraintes souhaitées sur la nucléosynthèse.

2.3.1 Avantage des observations radio

Les contraintes sur les étoiles de l'AGB sont obtenues principalement à partir de trois domaines de longueurs d'ondes qui nous donnent des renseignements différents.

- les observations infrarouges, voir par exemple Hashimoto (1998), révèlent la poussière dans les parties extérieures de l'enveloppe ou les raies moléculaires de vibration dans l'atmosphère de l'étoile.
- les longueurs d'ondes visibles, voir par exemple Lambert *et al.* (1986), renseignent sur les abondances photosphériques via les raies atomiques et moléculaires électroniques.
- les longueurs d'ondes millimétriques, caractéristiques des transitions de rotation des molécules, concernent l'enveloppe interne et externe.

Les observations dans le domaine radio sont les seules qui:

- peuvent utiliser les transitions rotationnelles des molécules (Kahane *et al.* (1992) ou Olofsson *et al.* (1993b)) pour donner des informations (chimie, géométrie et cinématique) sur une *large partie de l'enveloppe*, environ entre 3000K et 50K.
- nous permettent l'accès aux abondances lors de la fin de la phase AGB. En effet, le taux de perte de masse augmentant lors de la vie de l'étoile, l'enrichissement de la composition de l'enveloppe est maximum à la fin de la phase AGB. Or, c'est aussi le moment où l'enveloppe devient optiquement épaisse à beaucoup de longueurs d'ondes... mais pas aux ondes radios! Celles-ci nous donnent donc *accès à des abondances au moment où les modifications chimiques induites dans le milieu interstellaire sont maximum*.
- donnent des valeurs de rapports d'abondances très précises à molécules égales. En effet, l'utilisation simultanée de détecteurs récents et de molécules abondantes permettent l'obtention de rapports signal sur bruit élevés. De plus, les valeurs sont en général moins dépendantes du modèle utilisé pour les reproduire que les observations visibles qui demandent des modèles compliqués d'atmosphère comprenant des millions de raies.

De plus les observations radio ont une résolution spectrale suffisante pour permettre les mesures de rapports isotopiques des éléments lourds.

Element	Abundance ⁵	M-stars		C-stars	
		Formula	Mineral Name	Formula	Mineral Name
O	2.09×10 ⁷	oxides and silicates		silicates	
C	1.00×10 ⁷	—	—	TiC	titanium carbide M
		—	—	C	graphite CS, M
		—	—	SiC	silicon carbide CS, M
N	2.63×10 ⁶	—	—	TiN	osbornite
		—	—	AlN	aluminum nitride
Mg	1.02×10 ⁶	MgAl ₂ O ₄	spinel M	MgS	niningerite CS
		Mg ₂ SiO ₄	forsterite CS	MgAl ₂ O ₄	spinel M
		MgSiO ₃	enstatite CS	Mg ₂ SiO ₄	forsterite CS
Si	1.00×10 ⁶	Ca ₂ Al ₂ SiO ₇	gehlenite	MgSiO ₃	enstatite CS
		Mg ₂ SiO ₄	forsterite CS	SiC	silicon carbide CS, M
		MgSiO ₃	enstatite CS	FeSi	iron silicide
Fe	8.91×10 ⁵	Fe	iron metal	Mg ₂ SiO ₄	forsterite CS
		(Fe,Ni) ₃ P	schreibersite	MgSiO ₃	enstatite CS
		FeS	troilite	FeSi	iron silicide
S	4.47×10 ⁵	FeS	troilite	Fe	iron metal
		—	—	FeS	troilite
		—	—	CaS	oldhamite
Al	8.51×10 ⁴	Al ₂ O ₃	corundum CS, M	MgS	niningerite CS
		CaAl ₁₂ O ₁₉	hibonite	FeS	troilite
		CaAl ₄ O ₇	grossite	AlN	aluminum nitride
		Ca ₂ Al ₂ SiO ₇	gehlenite	Al ₂ O ₃	corundum CS, M
		MgAl ₂ O ₄	spinel M	MgAl ₂ O ₄	spinel M
		CaAl ₂ Si ₂ O ₈	anorthite	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	anorthite
Ca	6.46×10 ⁴	CaTiO ₃	perovskite	CaS	oldhamite
		CaAl ₁₂ O ₁₉	hibonite	CaAl ₇ Si ₂ O ₈	anorthite
		CaAl ₄ O ₇	grossite	—	—
		Ca ₂ Al ₂ SiO ₇	gehlenite	—	—
		CaAl ₂ Si ₂ O ₈	anorthite	—	—
Na	5.75×10 ⁴	NaAlSi ₃ O ₈	albite	NaAlSi ₃ O ₈	albite
Ni	5.01×10 ⁴	FeNi	kamacite & taenite	FeNi	kamacite & taenite
		(Fe,Ni) ₃ P	schreibersite	(Fe,Ni) ₃ P	schreibersite
Cr	1.35×10 ⁴	Cr in FeNi	alloy	FeCr ₂ S ₄	daubréelite
Mn	9.33×10 ³	Mn ₂ SiO ₄	rhodonite in olivine	(Mn,Fe)S	alabandite
P	8.13×10 ³	(Fe,Ni) ₃ P	schreibersite	(Fe,Ni) ₃ P	schreibersite
Cl	5.25×10 ³	Na ₄ [AlSiO ₄] ₃ Cl	sodalite	NaCl (?)	halite (?)
K	3.72×10 ³	KAlSi ₃ O ₈	orthoclase	KAlSi ₃ O ₈	orthoclase
Ti	2.40×10 ³	CaTiO ₃	perovskite	TiC	titanium carbide M
		—	—	TiN	osbornite

FIG. 2.7 – Variété des “grains” attendus dans différents types d’enveloppes, extrait de Lodders & Fegley (1999). Les abondances sont données sur une échelle où Si = 10⁶ atomes. Les marques CS et M réfèrent les grains observés respectivement dans des enveloppes d’étoiles de l’AGB et dans des météorites.

2.3.2 Interpréter les observations radios

La question générale qui se pose est la suivante:

Comment reconstruire les rapports d'abondances synthétisés dans les intérieurs stellaires à partir des rapports d'intensités de raies moléculaires provenant de l'enveloppe ?

En théorie, bon nombre d'effets peuvent avoir modifié les rapports que l'on observe. Il faudrait prendre en compte l'influence des *profondeurs optiques*, c'est-à-dire l'effet combiné de la masse volumique et de l'opacité. Celle-ci change en effet le rapport d'abondance en favorisant la molécule la plus optiquement mince. Il faudrait aussi prendre en compte l'influence de la *chimie* (qui modifie les abondances) et celle de la *poussière* (qui change les abondances par agrégations). Un seul de ces aspects nécessite une modélisation étendue (tous ces aspects interagissent) et complexe (taux de réaction inconnus, agrégation compliquée, opacités de diffusion par la poussière paramétrées...). Cette situation est récapitulée sur la figure I-2.8 pour le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$.

On y rappelle que les abondances relatives de ^{12}C et ^{13}C sont déterminées par la nucléosynthèse (voir I-3) à la température T_{nuc} correspondante et qu'elles sont éventuellement modifiées par des processus de mélange (ils seront explicités au chapitre II-3). Ces rapports deviennent observables à partir du moment où l'on franchit la "surface" de l'étoile définie par $T = T_{eff}$. Les atomes sont ensuite piégés dans des molécules ou dans la poussière lorsque celles-ci se forment, respectivement à T_{mol} et T_{dust} . Les abondances relatives seront donc observables grâce aux interactions matière-rayonnement. Elles seront fixées par le transfert radiatif qui fixe l'intensité du rayonnement observable et la chimie et les processus d'agrégation dans l'enveloppe, qui fixent la quantité de matière interagissant avec le rayonnement. Cette interaction prend fin lorsque les molécules se dissocient au rayon R_{ext} . La figure I-2.8 montre alors aussi les biais introduits par le télescope (détaillés au chapitre II-4): l'émission de fond de ciel caractérisée par T_{bg} , l'émission de l'atmosphère caractérisée par T_{atm} et l'émission du milieu environnant le télescope (cabine, récepteurs...), caractérisée par T_{amb} . Des modèles sont donc en général nécessaires pour remonter des valeurs observées des rapports isotopiques aux valeurs produites à l'intérieur de l'étoile. Deux remarques sont alors à faire:

- la première est que ces modèles sont paramétrés et donnent ainsi accès à des grandeurs caractéristiques de l'enveloppe autres que les abondances. En effet, le cas général de résolution couplée de toute la physique et la chimie de l'enveloppe étant trop complexe (voir le chapitre II-5), la modélisation est découplée et notamment, pour les différents effets décrits ci-dessus, on a besoin de fixer la géométrie et la cinématique du problème. Ceci nous permet d'ajuster sur les observations les quantités associées comme la taille de l'enveloppe ou le taux de perte de masse. Le principal avantage est que le jeu de valeurs obtenues pour ces grandeurs est alors cohérent avec les valeurs obtenues pour les abondances.
- la deuxième remarque est que l'on peut donner une liste de conditions qui permettent de s'affranchir de la modélisation complète des raies observées et ainsi de déduire de façon simple les rapports d'abondances produits par l'étoile à partir des rapport des

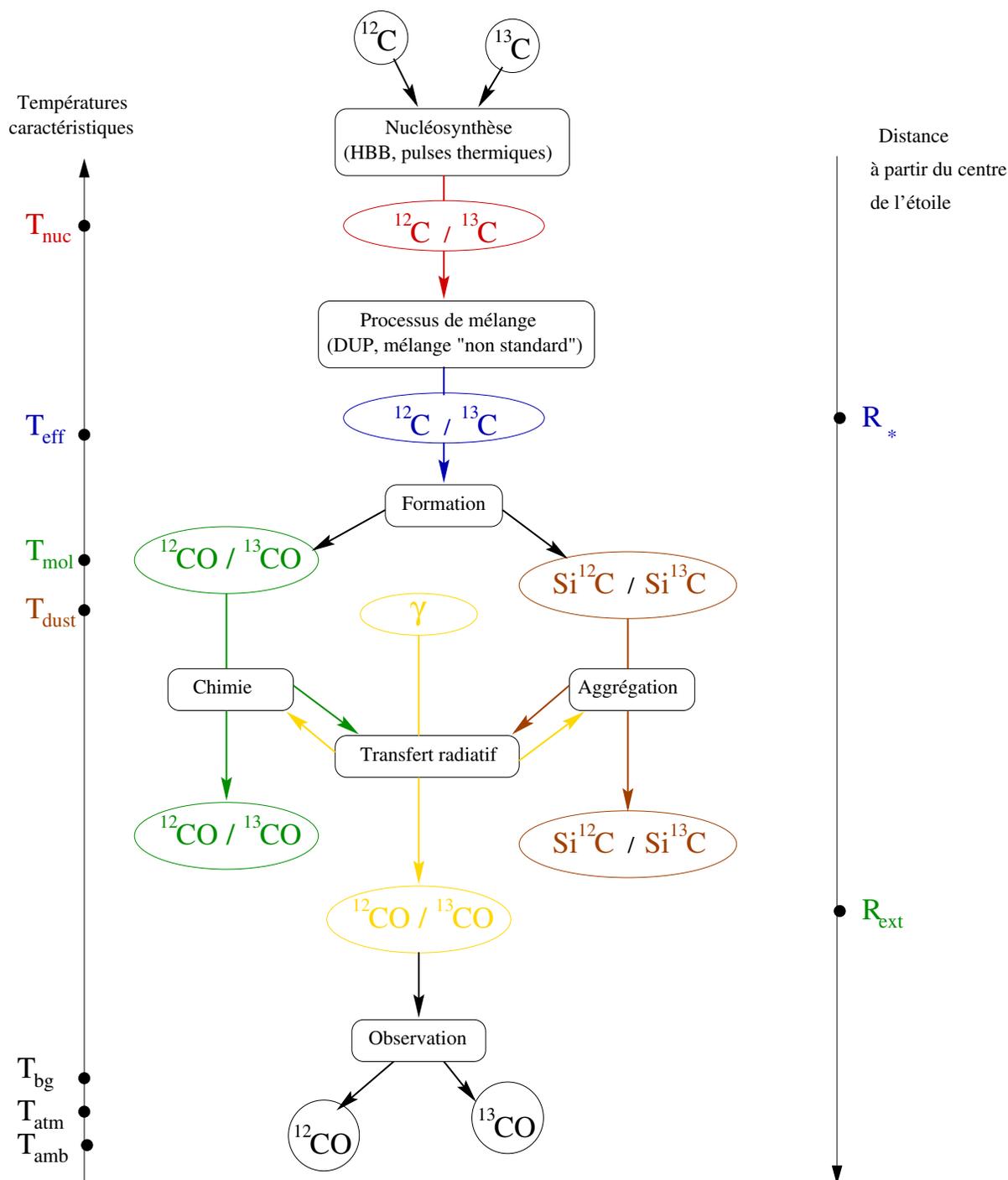


FIG. 2.8 – Problématique de l'interprétation des abondances mesurées dans les longueurs d'ondes millimétriques.

intensités des molécules observées (Kahane 1989):

- la distribution des deux molécules doit être similaire le long de la ligne de visée.
- les deux transitions ont même température d'excitation.
- les deux molécules doivent être optiquement minces.

Chapitre 3

Nucléosynthèse au sein des étoiles de l'AGB

La branche observation de la figure I-1.2 a été expliquée dans le chapitre précédent et nous avons vu en quoi l'utilisation d'observations radiométriques était liée à l'étude de la nucléosynthèse à la phase AGB et quelles contraintes elles apportent. Voyons maintenant ce que nous apporte la branche prédictive de la figure I-1.2, celle de la modélisation des rapports isotopiques. Celle-ci demande une connaissance des processus de nucléosynthèse de base (boîte en bas à droite de la figure I-1.2), et des facteurs qui influencent cette nucléosynthèse dans les étoiles de l'AGB (boîte en bas à gauche de la figure I-1.2). Ce sont les deux points que nous allons détailler ci-après.

3.1 Généralités

La nucléosynthèse a pour but d'expliquer la production des éléments chimiques dans l'univers. La nature et l'abondance des isotopes existants constituent donc des contraintes sur les processus de nucléosynthèse. On doit être capable de dire par quel(s) mécanisme(s) peut se former un élément existant et avec quelle abondance et ceci pour tous les éléments de la table de Mendéléïev.

3.1.1 Différents processus

Un certain nombre d'enchaînements de réactions nucléaires possibles aux températures atteintes dans les étoiles ont été identifiés, en particulier ceux très connus qui permettent de produire de l'Hélium: chaînes pp, cycles CNO, Néon-Sodium, Magnésium-Aluminium, (voir C) . Une revue générale des différents processus identifiés en astrophysique nucléaire est donnée dans Wallerstein *et al.* (1997)

Les observations réalisées dans des enveloppes circumstellaires d'étoiles de l'AGB ont montré dans l'atmosphère de l'étoile la présence d'isotopes instables de durée de vie inférieure à la durée de vie de l'étoile et même de la phase AGB, comme du Technécium par exemple (Merrill (1952) ou Lambert *et al.* (1986)) . Lorsqu'on représente les éléments dans un repère de coordonnées (N, Z) (voir figure I-3.1), ceux qui peuplent la diagonale de la figure sont regroupés autour d'une "ligne de stabilité" constituée des différents isotopes stables existants.

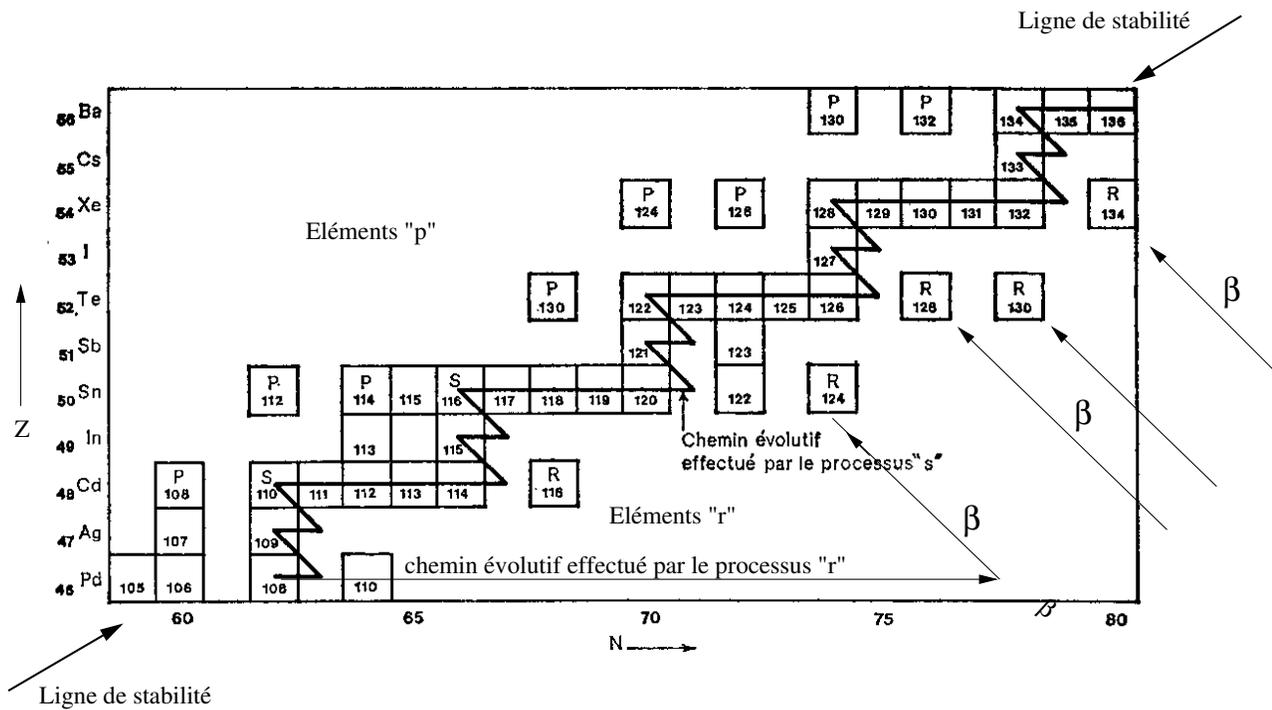


FIG. 3.1 – Captures de neutrons autour de la vallée de stabilité, d'après Audouze & Vauclair (1981).

Ceux qui sont situés en-dessous de cette diagonale sont plus riches que l'isotope principal de même nom en neutrons (éléments dits "s" ou "r") et ceux présents au-dessus sont plus riches que l'isotope principal de même nom en protons (éléments dits "p"). Alors que nous nous arrêterons à cette description pour les éléments "p" et "r", nous allons détailler un peu plus les processus permettant d'obtenir les éléments "s" car ce sont ces éléments qui ont été détectés dans les enveloppes circumstellaires d'étoiles de l'AGB.

3.1.2 Processus de capture de neutrons

Chaque réaction nucléaire sur un élément donné dépend de nombreux facteurs (abondances des particules réagissant, conditions physiques à l'endroit considéré, distributions en vitesse des particules...). Parmi toutes les réactions nucléaires entrant en compétition pour transformer un noyau donné, les facteurs décrits plus haut peuvent se combiner de telle façon que la capture de neutrons soit significative. Un des phénomènes limitant ces captures de neutrons est la désintégration β notamment. En effet, celle-ci ne dépend que du noyau considéré et a des temps caractéristiques très courts.

Si le flux de neutrons, $\phi_n = n_n \lambda_n$ (ces quantités sont définies au chapitre II-1) est assez important, le temps caractéristique d'une capture de neutron par un noyau caractérisé par (N, Z) , $\tau_n = \phi_n^{-1}$, peut être inférieur à celui de la désintégration β de ce noyau, τ_β . Il s'en suit une cascade de captures de neutrons qui fait évoluer le noyau de départ assez loin vers la droite sur la figure I-3.1 jusqu'à ce qu'une autre réaction nucléaire soit dominante. Il s'agit en l'occurrence de la réaction inverse, l'émission d'un neutron. Les captures de neutrons s'ar-

rêtent alors et il s'en suit une cascade de désintégrations β qui permettent de peupler les éléments marqués "r" sur la figure I-3.1. Cette série d'évènements possible si $\tau_n > \tau_\beta$ est appelée processus "r" et ne peut pas se dérouler dans les étoiles de l'AGB car des flux de neutrons trop importants sont requis. Le chemin évolutif effectué par un noyau subissant le processus "r" part de la ligne de stabilité et consiste en une horizontale vers la droite jusqu'à ce que le temps caractéristique de la désintégration β soit plus rapide que celui de la capture de neutron. A ce moment là, la suite du chemin est une longue ligne marquée d'un " β " pour rappeler qu'il s'agit de l'évolution d'un noyau qui subit de multiples désintégrations β .

Que se passe-t-il si le flux de neutrons n'est pas assez important ? Dans ce cas, une capture de neutron peut avoir lieu sur un élément stable mais alors, dès cette capture effectuée, si le temps caractéristique de désintégration de l'élément créé est inférieur au temps caractéristique de capture d'un autre neutron, alors il va se désintégrer plutôt que de capturer à nouveau un neutron. En pratique, cela arrive dès que l'on s'éloigne "un peu trop" de la ligne de stabilité. On obtient ainsi une série de captures / désintégrations qui est représentée sur la figure I-3.1 par un trait plein. Ce processus de synthèse a été baptisé "processus s". Il est efficace jusqu'au Bismuth car, pour les éléments plus lourds, la désintégration α devient dominante. Le chemin évolutif suivi par un noyau subissant le processus "s" est une suite de petits zig-zag comme celui partant du ^{120}Sn . La ligne horizontale est une capture de neutron suivie immédiatement d'une désintégration β et ainsi de suite.

3.2 Particularités de la phase AGB

Profitions de cette brève discussion sur la nucléosynthèse pour souligner que la nucléosynthèse dans les étoiles de l'AGB est tout-à-fait particulière étant donnée la structure de ces étoiles (voir la section I-1.1), où les variations d'abondances dans certaines couches sont importantes au cours du temps.

3.2.1 Mélange dans l'intercouche

En effet, dans la même région de l'étoile, l'intercouche, se succèdent plusieurs étapes:

- le dépôt des produits combustion de l'Hydrogène dans un milieu où le transport de la chaleur est radiatif.
- le mélange instantané, à haute température, des produits de combustion des couches de brûlage de l'Hydrogène et de l'Hélium est dû au développement d'une zone convective (pulse thermique) provenant de la couche (instable) de combustion de l'Hélium.
- une éventuelle descente de l'enveloppe convective (DUP3) qui homogénéise alors instantanément la composition de la partie de l'intercouche dans laquelle elle pénètre, en la mélangeant avec la composition de l'enveloppe convective. L'abondance des protons est alors globalement augmentée dans cette région.
- un brûlage des produits précédemment mélangés dans un milieu où le transport de la chaleur est redevenu radiatif.

La zone de l'intercouche est donc une zone de rencontre entre protons, particules α et neutrons, si ces derniers sont produits.

3.2.2 Nucléosynthèse particulière

Sans que ce soit exhaustif, nous allons exposer différentes séries de réactions nucléaires qui permettent de synthétiser des éléments, plus particulièrement à la phase AGB, en nous focalisant sur les captures de neutrons et la synthèse de l'Aluminium et du Fluor. Ces deux points sont en effet caractéristiques de la phase AGB.

Sources de neutrons

Deux sources principales de neutrons ont été identifiées dans les étoiles de l'AGB. Le ^{13}C par la réaction $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ et le ^{22}Ne par la réaction $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$. La principale différence entre ces deux réactions est leur température d'activation, qui sont respectivement de $T \sim 2 \cdot 10^8$ et $T > 3.5 \cdot 10^8 \text{K}$. Pour activer la production de neutrons, il faut donc qu'une des deux sources soit présente et que la température soit adaptée.

Au sein des pulses thermiques ces conditions sont réunies car l'Azote 14 présent dans la couche d'Hélium au moment du pulse subit alors la chaîne de réactions: $^{14}\text{N}(\alpha, \gamma)^{18}\text{F}(\beta^+)^{18}\text{O}(\alpha, \gamma)^{22}\text{Ne}$. Si la température est assez élevée dans le pulse, c'est-à-dire si la masse de coeur est au moins égale à $0.9 M_{\odot}$ environ d'après Wallerstein *et al.* (1997), la réaction de production des neutrons à partir du ^{22}Ne s'active. Si la masse de coeur (température) n'est pas assez importante, seules des quantités de ^{22}Ne inférieures au pourcent sont converties en ^{25}Mg . Dans les étoiles peu massives, seul le ^{13}C peut produire les neutrons permettant de reproduire les abondances observées d'éléments "s".

Cependant, la manière dont cette source de neutrons est activée n'est pas claire du tout. En effet, s'il est plus facile d'atteindre la température d'activation de la source ^{13}C parce qu'elle est plus faible, il faut aussi produire du Carbone 13. La réaction pressentie dans ce but est $^{12}\text{C}(p, \gamma)^{13}\text{N}(\beta^+)^{13}\text{C}$. Elle demande la présence de protons et de Carbone 12. Or la zone de probabilité maximum de rencontre pour ces deux éléments est l'intercouche. En effet, dans la couche en fusion d'Hydrogène, on trouve des protons mais le ^{12}C est détruit par le cycle CN. Plus bas, dans la couche d'Hélium, on produit du Carbone 12 mais il n'a pas plus de protons. C'est donc dans l'intercouche que l'on a le plus de chance de produire la source de neutrons. Le pulse, provenant de la couche d'Hélium ramène dans l'intercouche une grande quantité de ^{12}C . Le dredge-up paraît être le mécanisme idéal pour amener des protons puisqu'il homogénéise la composition des couches où il pénètre avec celle de l'enveloppe, riche en protons. Herwig *et al.* (1997) ont montré que le calcul du dredge-up avec overshooting (voir le chapitre II-3) permettait effectivement de faire apparaître une poche de Carbone 13. Straniero *et al.* (1995) ont montré de leur côté que si cette poche existe, elle est utilisée pour produire des neutrons localement c'est-à-dire dans la zone radiative pendant l'interpulse, et non pas homogénéisée dans le pulse suivant.

Notons aussi que des réactions de destruction des neutrons existent et doivent donc être prises en compte. Ainsi, l'Azote 14 et l'Aluminium 26, produits par le brûlage de l'Hydrogène, peuvent réagir avec les neutrons présents par $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$ et $^{26}\text{Al}(n, p)^{26}\text{Mg}$. Ces réactions

contribuent presque autant à l'énergétique de l'interpulse que les captures de neutrons d'après Forestini & Charbonnel (1997) (10% contre 12% pour les captures).

Fluor et Aluminium

La spécificité de l'intercouche, c'est-à-dire la présence simultanée de protons et de particules α , permet aussi de synthétiser des éléments comme le ^{19}F et le $^{26}\text{Al}^g$ (voir Forestini *et al.* (1991) et Forestini *et al.* (1992)).

En effet, le brûlage en couche de l'Hydrogène s'effectue dans des régions dont la température augmente avec le temps. Lorsque l'on atteint des températures supérieures à $6 \cdot 10^7 \text{K}$, une production significative d'Aluminium 26 est possible (Forestini *et al.* 1991) par la chaîne Mg-Al.

D'autre part, la production de ^{14}N à partir de la fermeture du cycle CN ou par la chaîne $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}(\beta^-)^{14}\text{N}$ utilisant les neutrons produits permet d'obtenir de l'Azote 15 par $^{14}\text{N}(\alpha, \gamma)^{18}\text{F}(\beta^+)^{18}\text{O}(p, \alpha)^{15}\text{N}$. Cet élément, injecté dans le pulse où les particules α sont assez nombreuses, est responsable de la synthèse de Fluor par les étoiles de l'AGB: $^{15}\text{N}(\alpha, \gamma)^{19}\text{F}$. Cette chaîne de réactions, met en jeu au même endroit des protons, des neutrons et des particules α . Ce n'est donc pas étonnant qu'on ne la trouve efficace que dans les pulses thermiques de la phase AGB.

3.2.3 Influence du HBB

Son influence est multiple du point de vue de la nucléosynthèse. Tout d'abord, il permet de brûler le Carbone 12 par le début du cycle CNO pour produire ^{13}C si la température à la base de l'enveloppe convective est supérieure à $40 \cdot 10^6 \text{K}$. ^{14}N peut également être produit à partir du ^{13}C si la température est assez élevée pour permettre au cycle CN de se poursuivre.

Les étoiles de l'AGB sont aussi un des sites où les abondances de Lithium peuvent être modifiées. Dans ce cas, le processus invoqué est celui de Cameron-Fowler. La nécessité de production de Lithium par les étoiles de l'AGB est basée au départ sur l'observation de ces étoiles dans les nuages de Magellan où des abondances 100 à 1000 fois supérieures à celles prédites ont été observées (Smith & Lambert 1990). C'est justement le HBB qui permet la production de Lithium 7 par le processus de Cameron-Fowler si la température à la base de l'enveloppe convective est supérieure à $40 \cdot 10^6 \text{K}$. Le chaîne de réactions permettant la synthèse de cet élément est la suivante $^3\text{He}(\alpha, \gamma)^7\text{Be}(\beta^+)^7\text{Li}$. Le problème est que le Béryllium 7 et le Lithium 7 sont détruits par les chaînes ppIII et ppII respectivement (voir annexe C). Le mécanisme de Cameron-Fowler consiste donc à mélanger rapidement, grâce aux mouvements convectifs, le ^7Be produit dans une région plus froide, pour permettre qu'au moins une partie du Béryllium se désintègre avant d'être brûlé par les chaînes pp.

D'autres conséquences du HBB sont exposées dans Lattanzio & Boothroyd (1997).

3.3 Incertitudes sur la nucléosynthèse

Dans la partie précédente, la boîte "nucléosynthèse" du schéma I-1.2 a été explicitée. Nous avons pu aussi, à plusieurs reprises, constater que le mélange jouait un grand rôle (DUP3,

HBB par exemple), ce qui justifie en partie la présence de la boîte ”processus de mélange” de la figure I–1.2. Nous allons reprendre ici les différents paramètres importants qui influencent la nucléosynthèse.

3.3.1 Taux de réactions

Le facteur le plus évident est l’incertitude que l’on peut avoir sur les taux de réactions nucléaires. Ce domaine de la physique constitutive d’une étoile sera brièvement discuté au chapitre II–1, notamment avec la publication récente d’une nouvelle compilation de taux de réactions, NACRE (Angulo *et al.* 1999).

3.3.2 Perte de masse

Un des phénomènes dont l’influence est critique à la phase AGB est la perte de masse. Nous expliquerons brièvement en quoi ce mécanisme est important, le mécanisme générateur le plus probable pour l’expliquer, les modèles mis en place pour comprendre ce phénomène et la paramétrisation souvent utilisée pour contourner la difficulté de ce problème.

Influence de la perte de masse

De nombreuses preuves observationnelles (voir par exemple Knapp *et al.* (1982), Spergel *et al.* (1983), Knapp & Morris (1985), Loup *et al.* (1993), Kwan & Webster (1993), Stanek *et al.* (1995)) existent pour confirmer l’existence d’une forte perte de masse autour des étoiles de l’AGB. Ce taux varie typiquement, d’une étoile à l’autre, de 10^{+8} à $10^{+4} M_{\odot} / \text{yr}$. Il varie aussi probablement le long de la phase AGB comme semble le montrer les observations d’enveloppes détachées (voir le chapitre I–2) et les modèles de vents les plus perfectionnés comme Hoëfner (1999) ou Fleischer *et al.* (1999). Il est important de bien modéliser cette perte de masse pour la raison fondamentale que c’est elle qui fixe le taux de disparition de l’enveloppe, c’est-à-dire la masse présente à chaque instant au-dessus des couches en fusion. Elle va donc déterminer la température dans les couches de brûlage et par là même la durée de vie de la phase TP-AGB, c’est-à-dire le nombre de pulses avec leur luminosité maximum, le nombre de troisième dredge-up, la luminosité et la masse atteintes à la fin de la phase AGB. En se rappelant que les abondances synthétisées dépendent de la température (à travers les taux de réaction) mais aussi du nombre de pulses et de DUP3, on se rend compte de l’influence critique que la perte de masse peut avoir aussi sur la nucléosynthèse.

Mécanisme générateur

Sans faire appel au champ magnétique, deux principaux mécanismes de génération de perte de masse sont discutés (Lamers & Cassinelli 1999).

- la génération par ondes acoustiques: si une zone convective est proche de la photosphère de l’étoile, alors des ondes acoustiques peuvent être créées et se propager vers l’extérieur en traversant la photosphère. Celles-ci produisent une pression supplémentaire dans l’atmosphère qui dépend de la densité et de l’amplitude des ondes. Le gradient de cette pression additionnelle est une force qui peut expliquer la perte de masse.

- la génération par radiation: cette classe de mécanismes générateurs, dans laquelle l'énergie des radiations émises par l'étoile centrale est transmise à la matière, se divise en deux sous-classes, la perte de masse générée par le continu et celle générée par les raies. Dans la première sous-classe, la radiation est absorbée par les grains qui se forment. La température de l'atmosphère doit donc être suffisamment faible. L'allusion au continu dans le nom de cette classe de vents ("continuum driven winds") s'explique par le fait que la poussière absorbe dans une grande gamme de longueurs d'ondes. Cette sous-classe est encore appelée "dust driven winds". Dans la deuxième sous-classe, ce sont les raies des espèces présentes qui absorbent l'énergie émise par l'étoile centrale.

Le mécanisme le plus utilisé pour expliquer le phénomène de perte de masse à la phase AGB est centré sur la poussière. Tout d'abord, il y a transmission d'énergie et de quantité de mouvement à la poussière vraisemblablement par deux mécanismes: les pulsations de l'étoile associées à la phase AGB qui créent des ondes de choc dans les zones où la poussière se forme, et le rayonnement provenant de l'étoile. L'énergie acquise sert dans un deuxième temps à créer la perte de masse. En effet, l'énergie est absorbée principalement en provenance de l'étoile (radialement) alors qu'elle est réémise approximativement isotropiquement. Il y a donc globalement une accélération résultante dans la direction radiale. De plus, alors que la poussière gagne de la quantité de mouvement, ses collisions avec le gaz vont augmenter et elle peut alors entraîner le gaz avec elle dans son mouvement d'échappement.

Un tel modèle de vent est donc très complexe à établir car il demande de coupler trois fluides (gaz, poussière et rayonnement) dans une zone où il y a propagation d'ondes acoustiques et agrégation des grains. Cela impose de résoudre une équation transfert d'énergie pour les grains pour obtenir leur température d'équilibre radiatif et de déterminer leur température de condensation ou de sublimation. La première dépend de la température effective de l'étoile, de la distance à l'étoile et de l'opacité des grains (nature, géométrie, densité, température). La deuxième dépend de la pression ou de la densité et de la nature des poussières (voir figure I-3.2). La taille atteinte par les grains dépend des équations de collisions avec le gaz ambiant dont la composition doit elle-même être obtenue par un modèle de chimie circumstellaire.

La valeur du taux de perte de masse dépendant de la luminosité de l'étoile, il est donc normal qu'à la phase AGB, ce taux varie très fortement à chaque pulse thermique. L'étoile montre en effet à ce moment-là des variations importantes de luminosité. Les échelles de temps pour ces variations en fonction de la masse et de la métallicité de l'étoile sont données dans Forestini & Charbonnel (1997).

Modélisation de la perte de masse

Les modèles mis en place vont des plus simples aux plus complexes en retenant plus ou moins d'approximations. Récemment, une revue a été faite des tous les types de modèles existants (Fleischer *et al.* 1999) en distinguant 5 niveaux de complexité:

- les "modèles" les plus anciens consistaient en des ajustements de superpositions de lois de corps noirs aux spectres observés.
- calcul de transfert radiatif utilisant comme entrées la luminosité, la densité et la température effective de l'étoile et les propriétés de la poussière (tailles et températures de condensation ...).

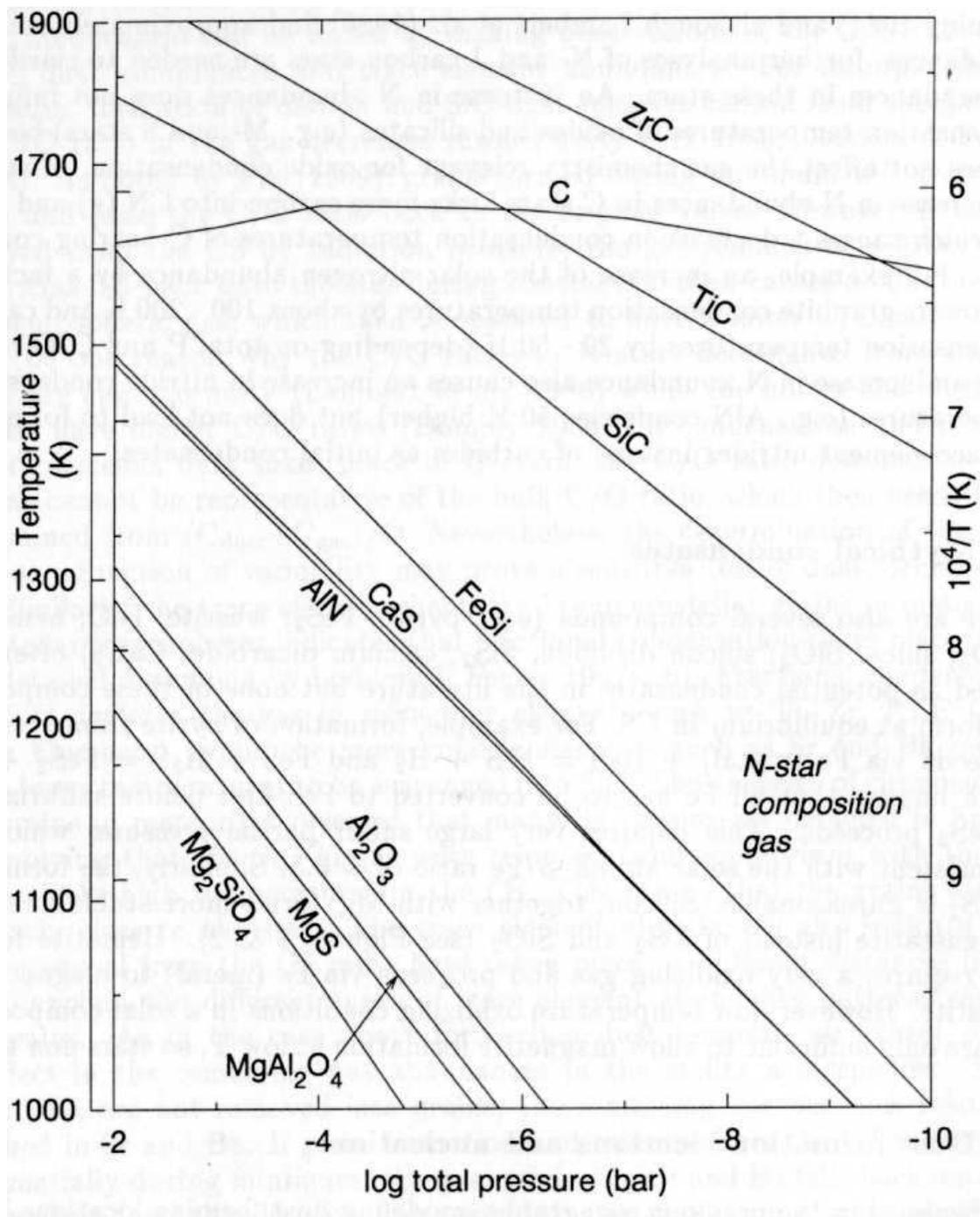


FIG. 3.2 – Températures et pression de condensation des principaux grains attendus dans un environnement d'étoile de type "N" ($C/O=1.1$) pour C,N et O et solaire pour les autres éléments, extrait de Lodders & Fegley (1999)

- calcul d'état stationnaires hydrodynamiques en couplant une équation mécanique au transfert radiatif. On peut décrire les trois composantes (gaz, poussière et photons) et les entrées sont la luminosité, la température effective et la masse effective, le taux de perte de masse et les propriétés de la poussière.
- calcul de modèles hydrodynamiques dépendant du temps, souvent effectués en géométrie sphérique et donnant l'intensité spécifique en fonction de la longueur d'onde et du temps en tout point de la source. Les propriétés de la poussières (distribution de la taille des grains, opacité, composition) sont supposées connues.
- calculs hydrodynamiques complètement auto-cohérents, dans lesquels les propriétés de la poussières sont déduites du modèle. Les entrées sont uniquement les grandeurs concernant l'étoile.

Quels que soient les modèles utilisés et les approximations faites, la vitesse du vent peut être mise sous la forme générale suivante (Lamers & Cassinelli 1999):

$$v^\alpha(r) = v_*^\alpha + (v_\infty^\alpha \perp v_*^\alpha) \left(1 \perp \frac{R_*}{r}\right)^\beta \quad (3.1)$$

où v_* est la vitesse en $r = R_*$ et v_∞ est la vitesse dite "terminale" lorsque $r \rightarrow \infty$. D'après Loup *et al.* (1993), on a typiquement $v_\infty = 5 \rightarrow 25 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$. De plus, Netzer & Elitzur (1993) trouvent par exemple dans un cas simple (opacité grise pour la poussière et différence de vitesse nulle entre poussière et gaz): $\alpha = 2, \beta = 1$ et $v_\infty^2 \perp v_s^2 = \frac{\langle \chi \rangle L_*}{2\pi R_s c}$ où $\langle \chi \rangle$ est l'opacité totale (absorption plus diffusion) moyenne des grains et R_s est à la distance à laquelle la vitesse est sonique.

Paramétrisation

Compte tenu des difficultés présentées pour avoir un taux de perte de masse cohérent avec l'étoile modélisée, les taux utilisés en évolution stellaire sont le plus souvent paramétrés. Lors des phases précédant la phase AGB, les phases RGB et HeB, l'étoile subit aussi une perte de masse mais son expression est simplement paramétrée par Reimers (1975):

$$\dot{M} = 4 \cdot 10^{-13} \eta_R \frac{LR}{M} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{3} < \eta_R < 3 \quad (3.2)$$

où L, R et M sont la luminosité, le rayon et la masse de l'étoile *en unités solaires* et η_R un coefficient ajustable. D'après (Bloeker 1995), cette loi ne peut pas être appliquée pour les étoiles de l'AGB. En effet, les températures effectives lors des phases RGB et HeB sont suffisamment élevées pour que la formation de la poussière soit très faible. Le taux paramétré par Reimers (1975) ne tient donc pas compte de la poussière alors qu'elle est supposée être au centre du mécanisme d'éjection de matière pour les étoiles de l'AGB. Vassiliadis & Wood (1993) ont empiriquement établi une corrélation entre le taux de perte de masse des étoiles de l'AGB et la période fondamentale de leurs pulsations, P_0 , en utilisant un échantillon d'étoiles

variables. Les relations obtenues sont:

$$\dot{M} = \min\left(\frac{L}{cv_{exp}}, 10^{\pm 11.4 + 0.0125 P_0}\right) \quad \text{si } M < 2.5 M_{\odot} \quad (3.3)$$

$$\dot{M} = \min\left(\frac{L}{cv_{exp}}, 10^{\pm 11.4 + 0.0125 (P_0 \pm 100(\bar{M} \pm 2.5))}\right) \quad \text{si } M > 2.5 M_{\odot} \quad (3.4)$$

$$v_{exp} = \pm 13.5 + 0.056 P_0 \quad (km/s) \quad (3.5)$$

$$\log(P_0) = \pm 2.07 + 1.94 \log(\bar{R}) \pm 0.9 \log(\bar{M}) \quad (3.6)$$

$\frac{L}{cv_{exp}}$ est la valeur de la perte de masse correspondant au transfert maximum de quantité de mouvement entre photons et matière lors de diffusions uniques. Les relations donnant v_{exp} et P_0 , elles aussi empiriques, sont extraites de Wood (1990) et les quantités surmontées d'une barre sont exprimées en unités solaires (voir annexe A). Une revue de l'effet des différents paramétrages de taux de perte de masse sur les prédictions des modèles d'évolution des étoiles de l'AGB a été effectuée par Bloeker (1995).

Nous avons donc choisi d'utiliser la prescription de Vassiliadis & Wood (1993) pour tout ce travail de thèse et de nous focaliser sur le dernier point influençant la nucléosynthèse, discuté ci-dessous.

3.3.3 DUP

Le troisième dredge-up présenté en I-3.2.1 comme un des facteurs de mélange dans l'intercouche a des répercussions évidentes sur la nucléosynthèse. Nous allons voir dans un premier temps quelles sont ces répercussions et comment on quantifie l'influence du DUP3, puis nous aborderons les incertitudes qui affectent les prévisions des rapports isotopiques sur la partie théorique du schéma I-1.2.

Le paramètre de quantification du dredge-up

La profondeur du dredge-up influe sur la quantité de protons injectés dans l'intercouche et donc sur la future nucléosynthèse à cet endroit. De même, les valeurs des rapports isotopiques de surface des éléments plus lourds que l'Hélium seront d'autant plus modifiées que le dredge-up est profond et fréquent. En particulier, l'abondance de surface du ^{12}C est la plus claire signature du troisième dredge-up. Il est amené dans l'intercouche par le pulse précédent et est transmis dans l'enveloppe par le DUP3. Le schéma I-1.2 permet de visualiser que la modélisation de ce phénomène influe sur les rapports prédits et que les rapports observés permettent de contraindre les quantités de matière ramenées dans l'enveloppe lors des DUP3 successifs. La profondeur du dredge-up est mesurée par un paramètre dont la signification est évidente sur la figure I-3.3.

$$\lambda_{dup} \stackrel{def}{=} \frac{\Delta M_{dup}}{\Delta M_H} \quad (3.7)$$

Pendant l'interpulse, au fur et à mesure du brûlage nucléaire, le coeur croît en masse et les couches se déplacent vers l'extérieur de l'étoile. Ainsi, en particulier, la couche d'Hydrogène se déplace en masse d'une quantité ΔM_H . Cette masse limitée par la couche d'Hydrogène change de composition puisqu'elle subit la transformation de l'Hydrogène en Hélium. Après le

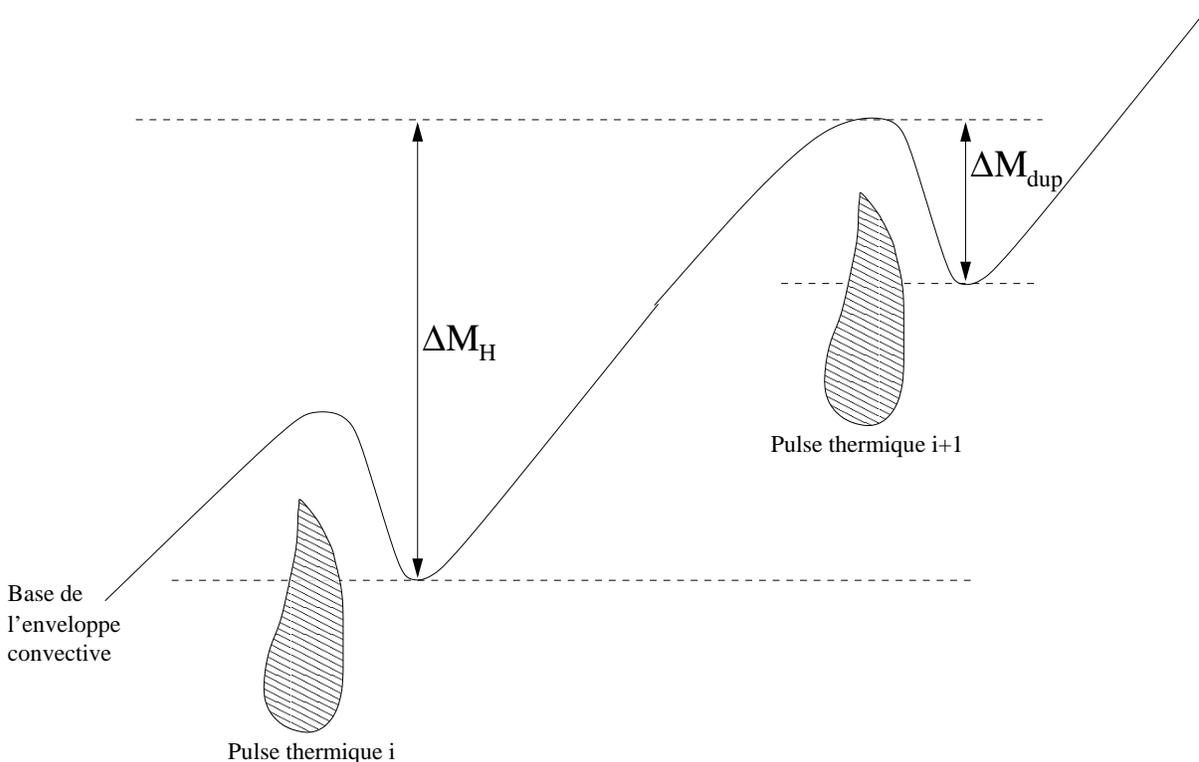


FIG. 3.3 – Définition du paramètre mesurant la profondeur du dredge-up. La figure n'est, bien sûr, pas à l'échelle et on y suppose par soucis de clarification que la base de l'enveloppe convective et la couche d'Hydrogène sont confondues.

pulse, lorsque le DUP3 se produit, la couche d'Hydrogène s'éteint et l'enveloppe descend dans cette matière fraîchement synthétisée, d'une quantité ΔM_{dup} en masse. D'après la formule I-3.7, λ_{dup} représente donc la fraction de matière synthétisée pendant l'interpulse précédent qui va être diluée dans l'enveloppe convective au moment du DUP3. Un troisième dredge-up est dit "complet" s'il atteint des zones mélangées par le pulse thermique précédent.

Incertitudes sur le dredge-up

Pourquoi se concentrer sur l'influence du dredge-up plutôt que sur celle d'un pulse thermique par exemple; la température de ce dernier influençant directement la nucléosynthèse dans l'intercouche? La réponse réside dans le fait que la modélisation du troisième dredge-up est beaucoup plus délicate que celle d'un pulse thermique.

En effet, c'est un *fait* que parmi les différents codes d'évolution stellaire capables de suivre la phase TP-AGB, pour une même étoile initiale, alors que les pulses sont reproduits de façon très similaire, il existe de grandes disparités pour les profondeurs des DUP3 modélisés. Dépendant de la physique incluse dans les calculs, de la masse des étoiles modélisées, de leur métallicité, du taux de perte de masse utilisé du paramétrage de la convection, certains auteurs n'obtiennent pas de DUP3, d'autres l'obtiennent avec des profondeurs trop faibles par rapport aux observations ou d'autres encore, récemment, on pu le modéliser correctement quantitativement. Parmi les derniers travaux, les effets utilisés par les auteurs pour modéliser ce phénomène varient. Par exemple, Straniero *et al.* (1997), utilisant la théorie de la longueur de mélange standard pour la convection (voir l'annexe D), rapporte la modification

de la profondeur du troisième dredge-up simplement en modifiant la résolution spatiale ou temporelle des modèles calculés.

Frost & Lattanzio (1996) et Frost (1997) ont montré l'importance des différents traitements numériques utilisés mais aussi celle de la modélisation de la convection et du mélange. Toute la difficulté réside dans le fait que le DUP3 consiste en l'extension vers l'intérieur de l'étoile de la base de l'enveloppe convective dans une zone où la composition change fortement. Deux facteurs sont importants (Lattanzio 1998):

- le moment et la méthode utilisée pour réaliser le mélange dans l'organigramme de résolution de la structure et de l'évolution stellaire
- le critère utilisé pour déterminer les frontières convectives (voir le chapitre II-3).

Des tests partiels ont été effectués concernant ces deux points. La recherche de la frontière convective peut être fixée grâce à un critère (Schwarzschild, Ledoux, voir le chapitre II-3) donnant lieu éventuellement à des zones de mélange partiel comme de l'overshooting, ou la semi-convection (voir le chapitre II-3). Cette frontière peut aussi être recherchée itérativement (voir Frost & Lattanzio (1996) ou Boothroyd & Sackmann (1988a)) par des algorithmes aussi variés que le sont les codes dans lesquels ils ont été développés. Forestini & Charbonnel (1997) ont testé l'influence d'un mélange dépendant du temps (non instantané) des zones convectives et Herwig *et al.* (1997) et Mowlavi (1999) ont implémenté un algorithme diffusif pour traiter l'overshooting (voir le chapitre II-3).

De plus, la théorie classique de la convection étant paramétrée par une quantité nommée "longueur de mélange", Λ , divers auteurs (Wood (1981), Boothroyd & Sackmann (1988b), Vassiliadis & Wood (1993), Mowlavi (1999)) rapportent une augmentation de la masse mélangée lorsque Λ augmente, alors que celle-ci dépend aussi des codes d'évolution utilisés.

Une difficulté supplémentaire réside dans la comparaison des résultats publiés par les différents codes existants. En effet, le même test fait dans deux codes différents peut mener à des résultats différents car tout le reste du code n'est pas égal par ailleurs. Ainsi, Mowlavi (1999) ne retrouve pas la sensibilité dans la résolution spatiale et temporelle montrée par Straniero *et al.* (1997). Il est donc difficile d'isoler les facteurs généraux permettant d'augmenter la profondeur du dredge-up par comparaison des différents travaux.

Ces remarques sur les incertitudes liées au troisième dredge-up et l'influence que ce phénomène a sur la nucléosynthèse explique le deuxième objectif qui a été choisi dans la section I-1.3.2.

Chapitre 4

Conclusion

Comme le montre la figure I-1.2, les approches observationnelles et théoriques sont complémentaires. Il est très important de développer une *approche couplée* pour les étoiles de l'AGB. D'un côté, seule une modélisation fiable des étoiles de l'AGB peut permettre à un observateur de confronter les prédictions théoriques avec ses données. Le terme "fiable" signifie que l'on est capable d'isoler les facteurs d'incertitudes (nature et façon d'implémenter les processus physiques pertinents) sur les valeurs des rapports prédits. D'un autre côté, seules des données précises peuvent être utilisées par des théoriciens pour donner une interprétation fiable en terme d'évolution stellaire. Elles permettent aussi d'améliorer la fiabilité des modèles en contraignant les processus physiques opérant dans les étoiles de l'AGB.

En utilisant cette démarche, ce travail de thèse, centré sur les quatre objectifs de la section I-1.3.2, se propose d'explorer les deux branches de la figure I-1.2. Les moyens mis en place pour atteindre ces deux objectifs seront présentés dans le détail dans la partie II. Ils sont synthétisés pour chaque objectif comme suit:

Pour adapter davantage le code d'évolution stellaire aux spécificités de la phase AGB, il faut:

- revoir la discrétisation spatio-temporelle.
- changer l'équation d'état.
- optimiser le temps de calcul (ce n'est pas nécessaire, mais seulement souhaitable).
- incorporer la physique du mélange nécessaire.

Ces moyens seront développés aux chapitres II-1 et II-2.

Pour déterminer les mécanismes facilitant le troisième dredge-up, il faut:

- isoler les tests pertinents concernant le numérique ou la physique du code.
- calculer un pulse suivi d'un troisième dredge-up.
- mener à bien les tests avec le même code toutes choses égales par ailleurs.

Ces moyens seront développés aux chapitres III-4 et III-3.

Pour mener des observations radiométriques d'enveloppes circumstellaires, il faut:

- isoler les rapports isotopiques les plus contraignants.
- trouver les molécules et les sources adaptées à la mesure de ces rapports.

Ces moyens seront développés aux chapitres II-4 et III-1.

Pour analyser les observations avec les outils appropriés afin d'en extraire des contraintes,
il faut:

- identifier les phénomènes modifiant les quantités contraignantes.
- modéliser ces phénomènes.
- comparer les quantités modélisées à partir des observations avec celles prédites.

Ces moyens seront développés aux chapitres II-5 et III-2.

Deuxième partie

Les moyens mis en place

Les objectifs de ce travail de thèse étant fixés, il faut maintenant développer Les outils qui lui permettront d'aboutir. Comme toute modélisation d'étoiles, celle des étoiles de l'AGB passe par l'utilisation d'un code d'évolution stellaire. Il conviendra donc de le présenter et d'expliquer quels changements ont dû être réalisés pour qu'il soit le plus performant possible sur la branche asymptotique. Le premier chapitre présentera le code en général, le deuxième la nouvelle équation d'état implémentée et le troisième, les processus de mélanges incorporés.

Par ailleurs, pour pouvoir comparer le résultat des observations avec les prédictions théoriques, il y a un obstacle à surmonter. La modélisation réalisée par un code d'évolution stellaire s'arrête dans l'atmosphère de l'étoile. Or, les observations effectuées, qui seront décrites au chapitre 4, sont bien plus extérieures: les rapports isotopiques observés ne sont donc pas ceux modélisés. En particulier, ces derniers ont pu changer pour plusieurs causes qui ont été détaillées au chapitre I-2 de la première partie. Si le code d'évolution stellaire fait le lien du coeur dégénéré autour duquel se déroule les réactions nucléaires, jusqu'à l'atmosphère de l'étoile, un programme de transfert radiatif doit être utilisé pour connecter l'atmosphère à l'enveloppe lointaine que l'on observe. Le dernier chapitre lui sera consacré.

Chapitre 1

Le code d'évolution stellaire de Grenoble: STAREVOL

Sommaire

1.1	Les équations implémentées	41
1.2	La physique du code	44
1.3	Résolution et numérique	48

Dans ce chapitre, une description du code d'évolution stellaire utilisé est donnée. Je ne développerai pas ici l'équation d'état et les processus de mélange "non standards" (c'est-à-dire produits par d'autres causes qu'une instabilité thermique); un chapitre leur sera consacré plus tard. Par contre les changements du code réalisés pendant ma thèse, mais moins fondamentaux, sont inclus dans ce chapitre.

1.1 Les équations implémentées

1.1.1 Généralités

Un code d'évolution stellaire doit être capable de décrire un plasma autogravitant multi-composante dans lequel peuvent se dérouler des réactions nucléaires. Celui de Grenoble est un code hydrodynamique lagrangien à une dimension.

Le qualificatif "hydrodynamique" insiste sur le fait que l'on peut suivre parfaitement des phases hors de l'équilibre mécanique car les termes d'accélération sont inclus dans les équations résolues.

Rappelons que la description lagrangienne d'un fluide consiste à calculer dans l'espace et le temps les caractéristiques de certaines "particules" (petits éléments de masse) qui se meuvent avec le fluide, par opposition à la description eulérienne où l'on s'intéresse à l'évolution des caractéristiques en certains points fixes de l'espace. Dans le cas eulérien, les quantités se réfèrent alors à différents éléments de masse qui passent aux points fixes pendant le temps d'observation. Dans le cas lagrangien, la position \vec{r} d'un élément de fluide dépend du temps. La variable indépendante d'espace choisie en vision lagrangienne n'est donc pas la position \vec{r} mais comme elle dépend de l'élément de masse considéré, on lui préfère la variable $m_r = \int_0^r \rho dV$ qui, elle, est constante pour un élément de masse donné. C'est ce choix de variables, (m_r, t) , qui caractérise la vision lagrangienne plutôt qu'une dérivation totale ou partielle, notation

mathématique souvent utilisée avec confusion. En effet, m_r et t étant indépendants, on a $\frac{dm_r}{dt} = 0$ et on peut donc indifféremment écrire pour une variable X , $\frac{\partial X}{\partial t}$ ou $\frac{dX}{dt}$, sachant que l'on a $X(m_r, t)$. Dans ce jeu de variables, la vitesse lagrangienne des éléments de fluide est $\vec{u}_{lag} = \frac{D\vec{r}}{Dt}$, la notation "D" pour la dérivation indiquant seulement que l'on est en vision lagrangienne, c'est-à-dire que \vec{r} dépend de t et m_r , sans que l'on ait besoin d'écrire $\vec{r}(m_r, t)$. Dans le cas eulérien, la vitesse, comme toutes les autres variables, est définie en certains points fixes et varie au cours du temps car différentes "particules de fluide" passent en ce point au cours du temps: $\vec{u}_{eul}(\vec{r}, t)$ avec \vec{r} et t indépendants. Les dérivées temporelles totales lagrangiennes et eulériennes sont liées par la relation classique:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{d}{dt} + \vec{u}_{lag} \cdot \nabla \quad (1.1)$$

Enfin, si l'on suppose une étoile à symétrie sphérique, une description à une dimension suffit pour reconstituer toute l'étoile. Un certain nombre de processus physique qui ne peuvent pas se réduire à une seule dimension sont nécessairement approximés dans ce cadre (convection, mélanges "non standards", accréation ...).

1.1.2 Equations simplifiées

Les équations nécessaires à la description du plasma sont les équations bilans exprimant la conservation, la production ou le transport de certaines grandeurs physiques: la masse, la quantité de mouvement, l'énergie et la composition principalement. A priori toutes ces équations ont la forme suivante:

$$\frac{d(\rho x)}{dt} + \text{div}(\vec{J}_x) = \rho \sigma_x \quad (\text{microscopique}) \quad (1.2)$$

$$\frac{dX}{dt} + \Phi_X = \Sigma_X \quad (\text{macroscopique}) \quad (1.3)$$

$$\text{avec } X = \int_M x dm, \quad \Sigma_X = \int_M \sigma_x dm, \quad \text{et } \Phi_X = \oint_S \vec{J}_x \cdot d\vec{S} \quad (1.4)$$

Dans ces équations, x est une quantité vectorielle ou scalaire massique (dimension $[x] M^{\pm 1}$), \vec{J}_x est le courant de cette quantité (dimension $[x] L^{\pm 2} T^{\pm 1}$) comme par exemple $x\vec{v}$, σ_x est sa production massique (dimension $[x] M^{\pm 1} T^{\pm 1}$) et \mathcal{S} est la surface fermée entourant la masse M , permettant de calculer le flux Φ . Mais compte tenu de l'approximation à une dimension et de l'écriture lagrangienne, ces équations se réécrivent sous forme simplifiée.

Ainsi l'évolution et la structure de l'étoile sont décrites en donnant six variables caractérisant le plasma: la vitesse (lagrangienne), la position, l'énergie émise, la température, la masse volumique et la composition. Chacune de ces variables dépend de deux grandeurs indépendantes: l'élément de masse m_r et l'instant t . Le choix de ces variables n'est pas unique; d'autres codes utilisent par exemple P comme variable mécanique au lieu de ρ (voir Straniero *et al.* (1997), ...). De plus, d'autres variables peuvent être ajoutées comme par exemple le moment cinétique spécifique. Mais le suivi de la rotation de l'étoile n'étant pas souhaité pour l'instant, cette quantité n'est pas prise en compte et l'on conserve seulement six variables. On doit donc utiliser six équations:

(1) La définition de la vitesse:

$$\vec{u}_{lag} = \frac{d\vec{r}}{dt} \quad (1.5)$$

(2) L'équation de conservation de la masse:

$$\frac{dr}{dm_r} = \frac{1}{4\pi r^2 \rho} \quad (1.6)$$

(3) L'équation de conservation de la quantité de mouvement:

$$\frac{du_{lag}}{dt} = 4\pi r^2 \frac{dP}{dm_r} + g \quad (1.7)$$

La pression P étant donné par une équation d'état $P(\rho, T, Y_i)$, les Y_i étant les fractions molaires d'abondances (voir section II-2.1.1) et le champ de gravité par la répartition de la masse, $g = \frac{Gm_r}{r^2}$, issue du théorème de Gauss, $div(\vec{g}) = 4\pi G\rho$, écrits en symétrie sphérique. Les effets de viscosité sont négligés.

(4) L'équation de conservation de l'énergie:

$$\frac{dl_r}{dm_r} = \epsilon_{nuc} \perp \epsilon_\nu + \epsilon_{grav} \quad (1.8)$$

où l'on choisit de caractériser "l'énergie" de la masse dm_r par la luminosité (puissance) émise à sa surface, l_r . ϵ_{nuc} est la puissance massique produite par les réactions nucléaires et ϵ_ν la puissance massique emportée par les neutrinos. Ces deux quantités sont calculées grâce à la partie "nucléaire" du code (voir la section II-1.2.1). ϵ_{grav} est la puissance massique tirée du changement de l'énergie interne du plasma ou du travail contre les forces extérieures comme la gravité. Sa valeur,

$$\epsilon_{grav} \stackrel{def}{=} \perp \frac{dq}{dt} \quad (1.9)$$

est donnée par l'équation d'état (voir le chapitre II-2) et trois façons analytiques différentes mais équivalentes d'écrire cette quantité ont été implémentées:

$$dq = Tds \quad (1.10)$$

$$dq = du + Pdv \quad (1.11)$$

$$dq = c_P T (d \ln T \perp \nabla_{ad} d \ln P) \quad (1.12)$$

Par la suite, les quantités extensives, notées en minuscules, seront massiques. c_P est la chaleur spécifique à pression constante et $\nabla_{ad} \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial \ln T}{\partial \ln P} \right|_q$ est le gradient de température existant dans un milieu adiabatique (à chaleur, q , constante).

(5) L'équation de transport de la chaleur:

$$\frac{dT}{dm_r} = \frac{1}{4\pi r^2} \left(g + \frac{du}{dt} \right) \frac{T}{P} \nabla \quad (1.13)$$

Ecrite sous cette forme, cette équation n'est qu'une réécriture du gradient de température, $\frac{dT}{dr}$ en utilisant ∇ , le gradient logarithmique de température exprimé par rapport à la pression. Il est défini par:

$$\nabla \stackrel{def}{=} \frac{d \ln T}{d \ln P} \quad (1.14)$$

et en utilisant la vision lagrangienne: T dépend de m_r au lieu de r . Pour que cette équation soit utile à la résolution du système, il faut qu'elle relie au moins deux des variables à trouver.

En se référant à la thermodynamique hors équilibre (de Groot & Mazur 1984), l'évolution d'un système dont n grandeurs caractéristiques évoluent couplées est décrite par la dérivée temporelle de son entropie. Elle s'écrit $\frac{dS}{dt} = \sum_i J_i X_i$ où J_i sont les flux reliés aux grandeurs caractéristiques et X_i , les "forces thermodynamiques" associées. Dans le cas d'un fluide, on relie les courants (de chaleur, J_q , et des espèces, J_i), aux forces thermodynamiques (gradients des potentiels chimiques, π_i , de la température, et forces extérieures sur chaque espèce F_i) grâce aux équations phénoménologiques (de Groot & Mazur 1984):

$$J_Q = -\frac{L_{qq}}{T^2} \nabla T - \sum_{k=1}^{n+1} \frac{L_{qk}}{T} [\nabla(\pi_k - \pi_n) - (F_k - F_n)] + \sum_{i=1}^n h_i J_i \quad (1.15)$$

$$J_i = -\frac{L_{iq}}{T^2} \nabla T - \sum_{k=1}^{n+1} \frac{L_{ik}}{T} [\nabla(\pi_k - \pi_n) - (F_k - F_n)] \quad (1.16)$$

Les coefficients L sont les "coefficients phénoménologiques", n est le nombre d'espèces présentes et les gradients potentiels chimiques se calculent à température constante. La quantité h_i est l'enthalpie spécifique de l'espèce i . Si l'on suppose que le gradient de température est le terme dominant faisant évoluer le courant de chaleur, on retrouve la loi de Fourier qui relie le flux de chaleur $\Phi_Q = \int J_q dS$ au gradient de température. La relation avec la luminosité est ensuite toute trouvée car on a $l_r = \frac{\Phi_Q}{4\pi r^2}$ et que l'échange de chaleur est une des façons de modifier l'énergie d'un système. On s'attend donc à ce que ∇ soit relié à la variable d'énergie l_r avec un coefficient de proportionnalité qui sera la conductivité thermique du milieu: λ . Sa valeur dépend du mode de transmission de la chaleur: conduction, radiation ou convection.

(6) L'équation d'évolution des fractions molaires Y_i :

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{1}{\rho r^2} \frac{d}{dr} \left(\rho r^2 D \frac{dY_i}{dr} \right) + \sum_k (r_{ki} - r_{ik}) \quad (1.17)$$

Deux processus physiques différents font évoluer la composition: d'une part les réactions nucléaires qui transforment une espèce en une autre en libérant de l'énergie et d'autre part la migration des espèces (flux de matière) due à différentes forces thermodynamiques. Le premier terme du membre de droite de cette équation concerne ces processus de mélanges, D étant le coefficient de diffusion. Le deuxième terme est une somme des taux de réaction nucléaires créant ou détruisant cette espèce (voir II-1.2.1). La variable d'abondance choisie pour cette équation est l'abondance molaire (voir section II-2.1.1). Ce choix demande que la condition $\frac{d\rho}{dt} = 0$ soit vérifiée (fluide incompressible).

1.2 La physique du code

Les équations posées nécessitent le calcul de certaines grandeurs faisant appel à des domaines particuliers de la physique:

- Physique atomique pour les opacités dans l'équation II-1.13
- Physique nucléaire pour les taux de réaction nucléaire ou la quantité ϵ_{nuc} dans les équations II-1.17 ou II-1.8
- Equation d'état pour la pression, le gradient adiabatique ou la quantité ϵ_{grav} dans les équation II-1.7, II-1.8 ou II-1.13.

- Processus de transport de la matière ou de la chaleur dans les équation II–1.17 ou II–1.13

Cette "physique constitutive" des équations de la structure et de l'évolution stellaire sera présentée en deux parties. Les parties contenant de la physique entièrement revues ou ajoutées pendant ma thèse afin de mieux les adapter aux AGB seront présentées dans des chapitres à part (équation d'état et mélanges). Pour les autres, en particulier pour la révision de la partie numérique du code, une brève présentation sera faite ici.

1.2.1 Le nucléaire

Choix effectués

Le problème spécifique du nucléaire est de choisir

- les différentes espèces à suivre en fonction des différentes phases évolutives que l'on souhaite calculer avec le code. En effet, suivre l'abondance du Deutérium à la phase AGB est inutile puisqu'il a déjà brûlé à la phase pré-séquence principale mais prendre en compte le Néon est essentiel car la nucléosynthèse d'éléments "lourds" tels que l'Aluminium, le Sodium le font intervenir. Une description générale de la nucléosynthèse se déroulant à chaque phase d'une étoile est donnée dans Mowlavi 1997 ou Forestini & Charbonnel (1997).
- les réactions nucléaires qui ne font intervenir que deux particules incidentes, du type $X + a \rightarrow Y + b$, sont les seules considérées et seront notées plus simplement $X(a, b)Y$. Parmi ces réactions, il faut sélectionner celles qui sont pertinentes à la phase calculée et qui relient les éléments suivis. En effet, compte tenu des conditions thermodynamiques dans les intérieurs stellaires, certains canaux de sortie ne seront jamais utilisés et pourront être négligés pour gagner du temps de calcul.

L'annexe C donne la liste des noyaux dont l'abondance est suivie et des réactions prises en compte dans le code. De plus, les réactions de brûlage du deutérium, des chaînes protons-protons, Mg-Al, Ne-Na et cycles CNO y sont brièvement rappelés. La taille conséquente du réseau ainsi que le nombre d'éléments suivis sont particulièrement bien adaptés à la nucléosynthèse très particulière se déroulant à la phase AGB qui est rappelée dans la partie I car celle-ci implique une grande variété d'éléments, de l'Hydrogène jusqu'aux éléments plus lourds que le Fer, créés par captures de neutrons. Et c'est justement à cause de la synthèse de ces éléments lourds que le suivi de l'abondance des neutrons est important à la phase AGB. Alors que le dernier élément suivi dans le code de Grenoble est le Chlore, le "processus s" (voir le chapitre I–3) se poursuit jusqu'au Bismuth. Afin de modéliser les effets de cette production d'éléments lourds sans suivre leurs abondances individuelles, le code de Grenoble utilise un élément "heavy" qui contient la fraction de masse des éléments stables plus lourds que le Chlore. En effet, on doit pouvoir suivre en particulier:

- l'évolution de la quantité de neutrons libres. Celle-ci influera sur l'abondance des éléments plus légers que "heavy" qui réalisent aussi des captures de neutrons.
- la quantité d'énergie relâchée par ces captures. Celle-ci est importante de part son impact sur l'énergétique de l'étoile à travers l'équation II–1.8.

Dans ce but, les captures subies par l'élément "heavy" (donc tous les éléments plus lourds que le Chlore) sont modélisées avec une section efficace et une énergie de réaction moyenne.

La physique nucléaire

Une fois ces choix "tactiques" effectués, il faudra calculer les taux de différentes réactions nucléaires (nombre de réactions par seconde) couplant les éléments suivis dans le code, l'énergie libérée sous forme de neutrinos par chaque réaction $Q_{X(a,b)Y}^\nu$ et l'énergie totale produite $Q_{X(a,b)Y}^{tot}$. On pourra ainsi calculer la puissance libérée par l'ensemble du nucléaire, ϵ_{nuc} , puis soustraire la partie perdue sous forme de neutrinos, évacuée quasi instantanément par rapport au temps caractéristique d'atteinte de l'équilibre thermique. Sans revenir dans le détail sur le formalisme de calcul (voir plutôt Forestini (1999)), on rappellera simplement que le taux correspondant à la réaction $X(a,b)Y$ s'écrit:

$$r_{X(a,b)Y} = \lambda_{X(a,b)Y} \frac{n_X n_a}{1 + \delta(X \perp a)} \quad (1.18)$$

où $\lambda_{X(a,b)Y} = \langle \sigma v \rangle = \int_0^\infty \sigma(E) v(E) f(E) dE$ est la somme des contributions au taux de réaction de toutes les particules X et a , pondérées par leur énergie E dans le référentiel de leur centre de masse; $\delta(X \perp a) = 1$ si $X = a$, 0 sinon. Les quantités intégrées sont de gauche à droite respectivement la section efficace, la vitesse et la distribution en énergie des particules réagissant, dans le référentiel de leur centre de masse. C'est ensuite à la physique nucléaire de fournir les mesures ou calculs de sections efficaces utiles.

A ce propos, les principales difficultés résident dans le fait que l'énergie thermique des particules en présence dans une étoile ne leur permet pas de franchir la barrière coulombienne due à leur charge. Les réactions nucléaires ont donc lieu par effet "tunnel". De telles conditions de basse énergie sont difficiles à mesurer en laboratoire car elles nécessitent le comptage d'un nombre d'évènements très faibles. Elles sont donc dans de nombreux cas remplacées par des extrapolations des données à plus haute énergie. De plus, lorsque l'énergie des particules incidentes dans le référentiel de leur centre de masse correspond à l'énergie d'états quasi stationnaires du noyau formé, la section efficace s'accroît notablement. Pour avoir un taux de réaction réaliste, il faut décrire suffisamment de ces "résonances" et donc avoir une connaissance suffisante des états quasi stationnaires des noyaux. Récemment, une compilation de taux de réactions, NACRE (Nuclear Astrophysics Compilation of REaction rates), a été publiée (Angulo *et al.* 1999) et a été incorporée au code de Grenoble. Les principaux avantages de cette compilation (voir Leroy (1999)) sont qu'elle prend en compte l'ensemble des données *récentes* existantes sous une forme facilement exploitable dans un code d'évolution stellaire, qu'elle présente des *références* pour toutes les données nucléaires de base (énergies de résonances, spins, parités ...) et les traitements *statistiques* effectués.

Enfin, le code contient une section de calcul des "facteurs d'écran". En effet, la présence d'électrons libres dans le plasma stellaire écran la charge réelle des noyaux interagissants. Le potentiel Coulombien résultant en est modifié et par la même, le taux de réaction. Spécialement pour une étoile de l'AGB, cette correction aux taux ne peut pas être négligée car la dégénérescence électronique des zones de brûlage d'Hélium est tout à fait significative ($\eta_e > 0.5$), et la haute densité des électrons ne fait que renforcer la modification des taux. Ces

facteurs d'écran sont calculés avec le formalisme de Dewitt *et al.* (1973) et Graboske *et al.* (1973) dans les trois régimes généralement distingués: écrantage faible, moyen ou fort.

1.2.2 Transport de la chaleur

Intuitivement, on comprend bien que l'on doit suivre le transport de la chaleur dans l'étoile pour pouvoir évaluer sa structure thermique. Or la modélisation du flux de chaleur dans l'étoile nécessite de pouvoir dire premièrement quel est son mode de propagation et deuxièmement quelle est la structure thermique de l'étoile résultant de cette propagation. Les trois modes possibles sont la conduction (collisions de proche en proche), la radiation (propagation de photons) et la convection (mouvements macroscopiques et cycliques de matière induisant un transport de chaleur). La conduction et la radiation sont les plus simple à modéliser car ils existent tout le temps, dans tous les milieux, mais avec plus ou moins d'importance. Au contraire, la convection est un mode de transport turbulent qui se développe suite à une instabilité. Ce n'est pas un transport de matière existant tout le temps mais qui serait plus ou moins important par rapport aux autres modes de transport. La convection est soumise à un critère dichotomique: "il y a" ou "il n'y a pas" de convection. La question de l'apparition ou non de la convection sera différée au chapitre sur les processus de mélange.

Examinons les cas limites pour définir les quantités importantes.

Lorsque la totalité du flux de chaleur est évacuée par radiation et/ou conduction, la structure thermique résultante est décrite par définition par le "gradient radiatif":

$$\nabla_{rad} = \frac{3}{16\pi ac\mathcal{G}} \frac{\kappa l_r P}{r^2 m_r T^4} \quad (1.19)$$

où κ est l'opacité totale du milieu (conductive et radiative) moyennée (sur les fréquences), dite "opacité de Rosseland". Ces quantités sont issues de la physique atomique puisqu'elles doivent prendre en compte tous les processus d'interaction entre la matière et le rayonnement possible de 3000K à 10⁹K environ! Cela comprend des millions de transitions "bound-bound" (raies atomiques et moléculaires), les états de diffusions ("free-free") sur les grains ou sur les ions, de l'absorption par les grains, de la diffusion des électrons et des photons sur les ions, etc. Ces valeurs dépendent donc de la température et de la masse volumique du milieu mais aussi de sa composition. Des interpolations à trois dimensions sont donc nécessaires dans les tables d'opacités. Nous utilisons actuellement les opacités OPAL de Rogers & Iglesias (1992) au-dessus d'une température paramétrable dans le domaine [6000K,12000K]. L'interpolation est réalisée grâce aux routines fournies par le groupe OPAL, qui ont été adaptées au code de Grenoble. Pour les calculs d'étoiles de faibles masses (réalisés pour tester l'équation d'état, voir le chapitre II-2) ces tables ont dû être extrapolées jusqu'à $\log(\frac{\rho}{\rho_\odot}) = 4.0$ où $T_n \stackrel{def}{=} \frac{T}{10^n}$. Le mode de transport radiatif étant presque toujours inexistant dans ces étoiles, ces extrapolations ont un effet négligeable (D'Antona & Mazzitelli 1996). A basse température, ce sont les opacités atomiques et moléculaires fournies par Alexander & Ferguson (1994) qui sont utilisées. Les opacités conductives sont calculées avec exactement la même composition que les opacités radiatives grâce aux données de Itoh *et al.* (1983) et Mitake *et al.* (1984). Les diffusions électrons-électrons, ions-ions et électrons-ions sont prises en compte, ainsi que les électrons relativistes.

Inversement, on peut imaginer un cas où la convection serait le seul mode présent de transport de la chaleur. Ce cas est purement académique car lorsqu'un globule convectif de matière se déplace, il continue à émettre des photons. Ces "pertes radiatives" font que le transport de la chaleur n'est pas purement convectif. Toutefois dans ce dernier cas, le milieu ambiant se structurerait avec $\nabla = \nabla_{ad}$ car le transport radiatif de la chaleur serait fait à chaleur constante (!) c'est-à-dire que ce transport radiatif serait nul.

Si la convection intervient dans l'étoile, une partie seulement du flux de chaleur est transportée par radiation. Dans ce cas, le gradient de température produisant ce flux radiatif est appelé gradient convectif ∇_{conv} et est nécessairement inférieur à ∇_{rad} mais supérieur à ∇_{ad} . Sa valeur dépend du flux de chaleur emporté par les globules convectifs, ∇_{glob} .

La description la plus fréquemment utilisée pour décrire la convection dans un code d'évolution stellaire est dite "théorie de la longueur de mélange" (MLT pour "Mixing Length Theory"). C'est en quelque sorte une théorie décrivant "en moyenne" les effets de la convection qui est un phénomène au minimum bidimensionnel. La "longueur de mélange", Λ , qui paramètre cette théorie, est la distance (exprimée en hauteur caractéristique de variation de la pression, H_P) parcourue par un globule convectif avant de se désagréger dans le milieu ambiant. Comme on a

$$H_P \stackrel{def}{=} \perp \frac{dr}{d \ln P} \quad (1.20)$$

alors $\alpha \stackrel{def}{=} \frac{\Lambda}{H_P}$ est le paramètre qui doit être calibrée de façon à ce que les caractéristiques (luminosité, rayon) actuellement observables du Soleil soient fidèlement reproduites. Certains arguments permettent cependant de penser que cette valeur pourrait être différente suivant la phase évolutive que traverse l'étoile où l'endroit où l'on se place dans l'étoile (Canuto 1990) ou Siess & Livio (1997). Pratiquement, la valeur du gradient prenant en compte tous les modes de transport, ∇ , est obtenue en résolvant un système de cinq équations (Kippenhahn & Weigert 1990) qui peut être réduit à un polynôme du troisième degré. Le code de Grenoble comprend le calcul du gradient thermique par cette méthode, avec résolution analytique ou numérique de l'équation du troisième degré. On peut aussi décrire la stratification des zones convectives en utilisant H_ρ . En effet d'autres versions existent de la MLT dans lesquelles on utilise la hauteur caractéristique de variation de la masse volumique, H_ρ comme unité pour la longueur de mélange. Des essais comparatifs ont été effectués en exprimant α en fonction de H_ρ ou H_P . Ils ont été réalisés dans la zone d'ionisation partielle de l'Hydrogène d'une étoile de trois masses solaires. La principale différence réside dans le fait que la méthode utilisant H_ρ donne une suradiabaticité (écart du gradient réel au gradient adiabatique, $\nabla \perp \nabla_{ad}$) beaucoup plus faible que dans le cas de H_P . L'annexe B donne un résumé des hypothèses de base de la MLT.

1.3 Résolution et numérique

La méthode utilisée pour résoudre les équations de structure et d'évolution présentées plus haut est une méthode dite "aux différences finies". Elle consiste à remplacer les équations physiques à résoudre par des équations approchées (discretisées) ayant les mêmes solutions

mathématiques. Dans le code utilisé, les solutions sont cherchées par une méthode de relaxation (itérative) appelée méthode Newton-Raphson .

1.3.1 La méthode Newton-Raphson .

Si l'on appelle \vec{x} le vecteur des variables dépendants de m_r et t , chaque équation décrite plus haut peut se mettre sous la forme $F_i(\vec{x}) = 0, i = 1 \dots 6$ en mettant tous les termes du coté gauche de l'égalité. Résoudre le système revient à trouver le vecteur \vec{x} qui annule simultanément les F_i c'est-à-dire le vecteur $\vec{F} = (F_1, F_2, \dots, F_6)$. La méthode Newton-Raphson consiste, à partir d'un premier vecteur supposé être la solution, \vec{x}^i , à améliorer ce vecteur en réalisant un développement de Taylor des fonctions F_i autour de ce point initial. Ainsi

$$\vec{F}(\vec{x}) = \vec{F}(\vec{x}^i) + \frac{d\vec{F}}{d\vec{x}}(\vec{x}^i) \cdot (\vec{x} - \vec{x}^i) \tag{1.21}$$

En écrivant que l'on veut trouver $\vec{x} = \vec{x}^{i+1}$ tel que $\vec{F}(\vec{x}^{i+1}) = \vec{0}$ et en posant $d\vec{x}^i = \vec{x}^{i+1} - \vec{x}^i$, l'équation II-1.21 permet de trouver le vecteur $d\vec{x}$:

$$d\vec{x} = \perp[A]^{-1} \cdot \vec{B} \tag{1.22}$$

$$\text{avec } \vec{B} = \vec{F}(\vec{x}^i) \tag{1.23}$$

$$\text{et } [A]_{mn} = \left. \frac{\partial F_m}{\partial x_n} \right|_{x_l \neq n} (\vec{x}^i) \tag{1.24}$$

Le vecteur $\vec{x}^{i+1} = \vec{x}^i + d\vec{x}$ vérifie le système de départ avec plus de précision que \vec{x}^i . Pour l'obtenir, il "suffit" d'inverser la matrice $[A]$, matrice des dérivées des équations en \vec{x}^i . Cela implique donc de connaître toutes ces dérivées alors que certaines ne seraient pas calculées sinon car elles ne sont pas nécessaires à la connaissance de la structure de l'étoile. Par exemple, alors que la dérivée de la pression par rapport à la température est une quantité nécessaire au calcul du gradient adiabatique dans le formalisme utilisé à Grenoble (voir le chapitre II-2) et sera donc calculée de toute façon, la dérivée de la chaleur spécifique à pression constante n'est rendue nécessaire que par sa contribution à la matrice $[A]$ dans l'équation II-1.8 (ϵ_{grav}) ou dans l'équation II-1.13 (∇). Ces quantités sont utiles *uniquement* pour la convergence du modèle. Le procédé d'amélioration de la solution est ensuite itéré jusqu'à ce que la correction appliquée à la solution courante pour chacune des variables soit négligeable par rapport à sa valeur absolue.

Apparaît alors une autre difficulté de ce schéma numérique: il peut ne pas converger, converger lentement ou même converger en passant dans des "domaines" où le vecteur \vec{x} n'est pas physique. On risque d'obtenir au cours des itérations des débordement des tables d'opacités ou des abondances négatives par exemple. Pour éviter ces inconvénients, il est prévu une méthode de contrôle de la convergence qui consiste à ne pas appliquer la totalité de la correction trouvée $d\vec{x}$ mais à réaliser l'affectation suivante:

$$\vec{x}^{i+1} = \vec{x}^i + [\alpha] \cdot d\vec{x} \tag{1.25}$$

où $[\alpha]$ est une matrice diagonale dont les éléments vérifient $0 < [\alpha]_{ii} \leq 1$. Ainsi, en ajustant les valeurs des coefficients $[\alpha]_{ii}$, on peut diminuer les risques de divergence ou d'arrêt intempestif lors du processus itératif. Par exemple, à l'apparition d'un pulse thermique, la correction

relative $\frac{dl_r}{l_r}$ peut atteindre 10^4 lors des premières itérations. A ce moment-là, l’ajustement d’un petit α permettra de corriger seulement faiblement l_r pour éviter un 10^8 “destructeur”! Ainsi, on convergera quand même, un peu plus lentement, mais sans arrêt. La procédure de choix de la matrice $[\alpha]$ a été entièrement révisée durant ma thèse car pour effectuer des calculs à la phase AGB, le code doit être optimisé en temps. En effet, ces étoiles sont déjà longues à modéliser par nature à cause de leur nucléosynthèse complexe, gourmande en temps de calcul, de leur stratification en composition, nécessitant beaucoup de couches numériques et des instabilités qui s’y déroulent. Dans certains cas, on peut être amené à calculer une étoile de l’AGB avec un pas de temps de quelques minutes qui va demander ... quelques minutes pour être calculé. Du calcul quasiment en temps réel!

Pour optimiser, il faut donc soit diminuer le temps de calcul de la physique à chaque itérations, soit diminuer le nombre d’itérations. La révision de l’équation d’état (détaillée au chapitre II-2), initialement rendue nécessaire pour des raisons physiques, a eu des retombées bénéfiques sur le temps de calcul. Elle se révélait être en effet la partie de la physique constitutive de l’étoile la plus gourmande en temps de calcul. Pour améliorer le nombre d’itérations, c’est une révision de la procédure d’accélération de la convergence qui a été choisie.

1.3.2 Accélération de la convergence

La problématique de la routine d’accélération de convergence se résume grossièrement comme suit: si $[\alpha]_{jj}$ est trop grand, on a beaucoup de chance de converger vite mais avec beaucoup de risques d’arrêt. Au contraire, si α est trop petit, on a beaucoup de chance de converger efficacement mais en un temps très long. La méthode choisie a été la suivante: se donner un certain nombre paramétrable d’itérations, I, lors desquelles les $[\alpha]_{jj}$ sont constants et faibles. Cela permet d’observer le comportement de la convergence. On obtient alors pour chaque variable x_j contrainte par le schéma Newton-Raphson, les valeurs données dans le tableau II-1.1, où un exemple est détaillé pour I=4.

Numéro de l’itération	Facteur d’accélération $\hat{\alpha}_{jj}$	Correction relative dx_j/x_j
i-3	$\alpha^{i\perp 3}$	$\delta^{i\perp 3}$
i-2	$\alpha^{i\perp 2}$	$\delta^{i\perp 2}$
i-1	$\alpha^{i\perp 1}$	$\delta^{i\perp 1}$
i	α^i	δ^i

TAB. 1.1 – Description des itérations dans l’accélération de convergence

Les indices ”jj” ont été omis pour plus de clarté et l’exposant indique à quelle itération se réfère la valeur α_{jj} .

Comme la correction relative varie sur de nombreux ordres de grandeurs, typiquement entre 10^4 et 10^{+15} , on définit la valeur moyenne des corrections relatives sur I itérations en prenant des logarithmes: $\overline{\ln \delta} = \frac{1}{I} \sum_{j=i\perp I+1}^{j=i} \ln |\delta^j|$. Deux critères ont été ensuite choisis pour calculer α^{i+1} :

- Le nombre $a = \overline{\ln \delta} \perp \ln |\delta_i|$ caractérise la *rapidité* de la convergence. Plus la convergence est rapide et plus la moyenne sera éloignée de la valeur de la dernière correction. Dans

ce cas, a est très positif.

- Le nombre $b = \overline{\ln \delta} \perp \ln |\tilde{\delta}|$ où $\tilde{\delta}$ est un nombre fixé au début des itérations. Il trace l'efficacité de la convergence. Si par exemple, on choisit $\tilde{\delta} = 10^{\pm 1}$, b négatif signalera une convergence efficace, c'est-à-dire qui entraîne les corrections en-dessous de $10^{\pm 1}$, considérée comme valeur "charnière" entre difficultés et facilités de convergence. Nous avons opté pour $\tilde{\delta} = \delta_1$ car cette valeur indique si les corrections diminuent ou augmentent par rapport à la valeur de départ.

Le choix de l'importance de la correction à apporter à α pour obtenir α^{i+1} est fait qualitativement dans le graphe II-1.1, en fonction de a et b . ϵ est un paramètre qui fixe la taille du

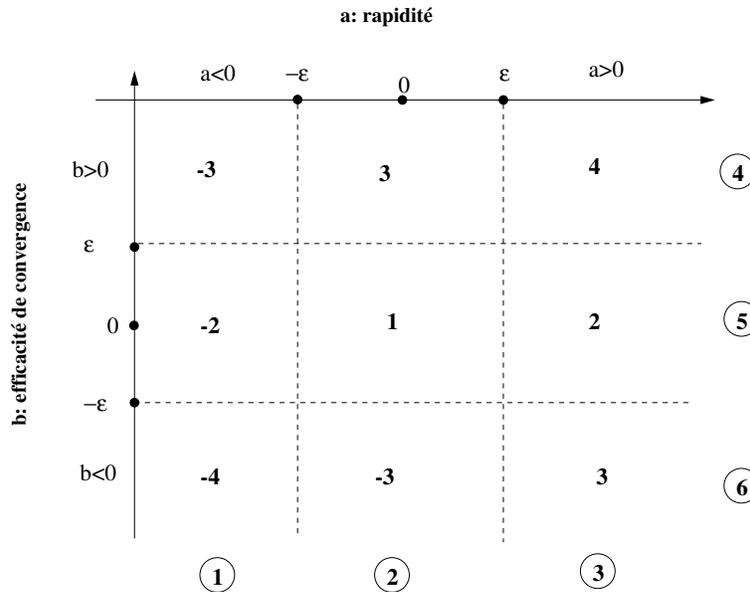


FIG. 1.1 – Importance de la correction souhaitée sur le facteur d'accélération de convergence en fonction de a et b .

domaine central autour de 0 pour les valeurs de a et b . Si un domaine contient un nombre positif, cela indique que l'on souhaite que α augmente. Si le nombre est négatif, on souhaite diminuer α . Plus la valeur absolue du nombre est grande et plus la valeur de α doit changer rapidement. Par exemple, lorsque a et b sont tous deux négatifs, cela signifie que les corrections sont grandes et que la divergence est rapide! Il faut donc très fortement diminuer α , d'où le nombre $\perp 4$. A la lecture de cette figure, 7 degrés de corrections pour α (de -4 à 4) doivent être quantifiés. Pour cela, on choisit trois entiers tels que: $1 < k < l < f$, f étant le facteur de correction maximum. Cela signifie qu'aux niveaux les plus élevés (4 et -4) de correction, α sera divisé ou multiplié par f . Aux niveaux 3 et -3, c'est le facteur f/k qui sera utilisé et aux niveaux de corrections 2 et -2, f/l . Pour le niveau intermédiaire, noté 1 sur le schéma II-1.1, la valeur du facteur multiplicatif est 1: α est inchangé. Ces valeurs sont résumées dans le schéma II-1.2. Reste maintenant à trouver une fonction $g(a, b)$ donnant continuellement un facteur multiplicatif à appliquer à α et qui respecte les valeurs énoncées dans la figure II-1.1. Une telle fonction ne peut pas être continue étant donné les corrections souhaitées dans cette figure. Le choix qui a été fait est donc le suivant: calculer indépendamment deux corrections, $g_1(a)$ à b constant et $g_2(b)$ à a constant, puis de faire la moyenne de ces deux tendances. Cela correspond aux 6 domaines cerclés sur le schéma II-1.1.

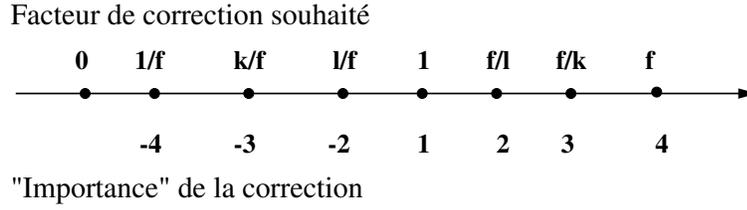


FIG. 1.2 – Valeurs des facteurs multiplicatifs corrigeant α suivant le "niveau" de correction souhaité.

Sur chacun des six domaines visibles sur cette figure, les fonctions g_1 ou g_2 ont des valeurs et des variations différentes. Il faut trouver deux types de fonctions: l'un possédant un maximum ou un minimum autour de 0 pour les domaines 1 et 3 et un autre monotone mais possédant un point d'inflexion autour de 0 (hypothèse supplémentaire pour assurer une zone où α ne change pas trop vite) pour les autres domaines.

On utilise pour les domaines 1 et 3 des fonctions gaussiennes du type:

$$g(x) = (g(0) \pm g(\pm\infty))e^{\pm \frac{x^2}{d}} + g(\pm\infty) \quad (1.26)$$

où l'infini doit avoir le même signe que x et les valeurs de $g(0)$ et $g(\pm\infty)$ sont données par le graphe II-1.2. Ainsi pour le domaine 1 par exemple, on a:

$$g_2(x) = \left(\frac{l}{f} \pm \frac{k}{f}\right) e^{\pm \frac{x^2}{d}} + \frac{k}{f} \quad x > 0 \quad (1.27)$$

$$g_2(x) = \left(\frac{l}{f} \pm \frac{1}{f}\right) e^{\pm \frac{x^2}{d}} + \frac{1}{f} \quad x < 0 \quad (1.28)$$

d reste un paramètre à ajuster pour maîtriser la vitesse de variation de α dans le domaine.

Pour les autres domaines, la fonction utilisée est:

$$g(x) = \frac{\left[\frac{(g(\infty) \pm g(0))(g(\pm\infty) \pm g(\infty))}{g(0) \pm g(\pm\infty)}\right]}{e^{d \cdot x^3} + \frac{g(\infty) \pm g(0)}{g(0) \pm g(\pm\infty)}} + g(\infty) \quad (1.29)$$

où, encore une fois, d (réel positif) permet de contrôler la pente de la courbe. Par exemple, dans le domaine 5, la fonction utilisée est

$$g_1(x) = \left[\frac{\left(\frac{f}{l} \pm 1\right)\left(\frac{l}{f} \pm \frac{f}{l}\right)}{1 \pm \frac{f}{l}}\right] \left(e^{d \cdot x^3} + \frac{\frac{f}{l} \pm 1}{1 \pm \frac{l}{f}}\right)^{\pm 1} + \frac{f}{l} \quad (1.30)$$

Le facteur multiplicatif, $g(a, b)$, modifiant l'accélération de la convergence est ensuite appliquée une fois toutes les ν itérations. Si l'on choisit $\nu > 1$, cela permet d'avoir le temps pour voir l'effet du nouveau α sur la série de ν itérations suivantes. En pratique toutefois, dans des situations où la convergence est difficile (naissance d'un pulse thermique par exemple) attendre plusieurs itérations pour diminuer α est un "luxe" qui peut coûter cher! Cela peut provoquer des arrêts du processus itératif qui sont bien souvent évités avec $\nu = 1$.

Pour finir, rappelons les différents paramètres permettant de régler l'accélération de convergence dans le tableau II-1.2 en y reportant es valeurs utilisées pour le moment .

Notons aussi que la valeur finale de α est de toute façon comprise entre deux extremum posés au départ du calcul et indépendants de la procédure d'accélération de la convergence.

Paramètre	Utilité	Valeur
I	Nombre d'itérations utilisées pour examiner la qualité de la convergence au moyen de a et b	4
f	Facteur correctif maximum applicable sur α	3.8
k	Diminue f pour obtenir un facteur correctif plus faible	2.0
l	Diminue encore f pour obtenir un facteur correctif encore plus faible	3.5
ϵ	Définit un domaine autour de 0 en a et b où le facteur correctif ne change pas beaucoup	0.5
d	Contrôle la vitesse de variation du facteur correctif en fonction de a et b	1.0/0.8
ν	le facteur correctif est pris en compte 1 itération toutes les ν	1

TAB. 1.2 – Paramètres de l'accélération de convergence

L'application de cette procédure permet de converger typiquement en 8 itérations et lors du maximum d'un pulse thermique en 12 à 16 itérations. Enfin, les paramètres optimaux ne sont pas nécessairement les mêmes pour toutes les phases évolutives car la nature et le comportement des variables influençant la convergence changent avec celles-ci.

1.3.3 Le choix des variables

Le numérique influe lui aussi sur le choix des variables. Une variable de masse volumique par exemple peut être implémentée sous différentes écritures: $\ln(\rho)$, $\frac{\rho}{\rho_0}$, ... Les difficultés que l'on peut rencontrer et qui sont liées aux valeurs prise par la variable sont les suivantes:

- une variable qui passe à 0 peut provoquer des erreurs "division par 0"
- on ne peut pas prendre la logarithme d'une variable qui peut devenir négative
- il vaut mieux une variable dont l'étendue de variation est faible et les valeurs "pas trop grandes". Cela évite une matrice Newton-Raphson mal équilibrée, source d'instabilités numériques ou des erreurs par atteintes d'infinis.

Pour modéliser les étoiles de l'AGB, les variables les plus importantes, celles qui guident la convergence, sont la température et la luminosité puisqu'un pulse thermique est une instabilité thermique. Nous avons donc choisi de changer la variable de température, T , en $\ln(T)$ ("lnT" par la suite) car le logarithme diminue l'amplitude de variation de la température et que les valeurs prises par la température doivent toujours être strictement positives. Cela a permis d'éviter une des sources d'arrêt de la convergence dues à des "températures négatives" pendant le processus itératif. Ce changement de variable ne peut pas être appliqué à la luminosité car celle-ci peut prendre des valeurs négatives. En effet, des paires neutrinos/anti-neutrinos sont émis dans le coeur dégénéré des étoiles de l'AGB alors qu'il n'y a pas de combustion nucléaire centrale. Il en résulte localement une perte d'énergie et donc une lu-

miniosité négative. Si un changement de variable avait été réalisé, il aurait fallu implémenter une formule plus compliquée qui aurait entraîné des modifications complexes des dérivées. Une modification majeure des dérivées ayant déjà eu lieu suite à un changement de variable sur ρ (voir le chapitre II-2), nous avons choisi de ne pas modifier la luminosité pour l'instant en conservant la variable l_r . La variable remplaçant ρ sera nommée $\ln f$.

1.3.4 Structure du calcul

La figure II-1.3 montre l'organisation générale du code.

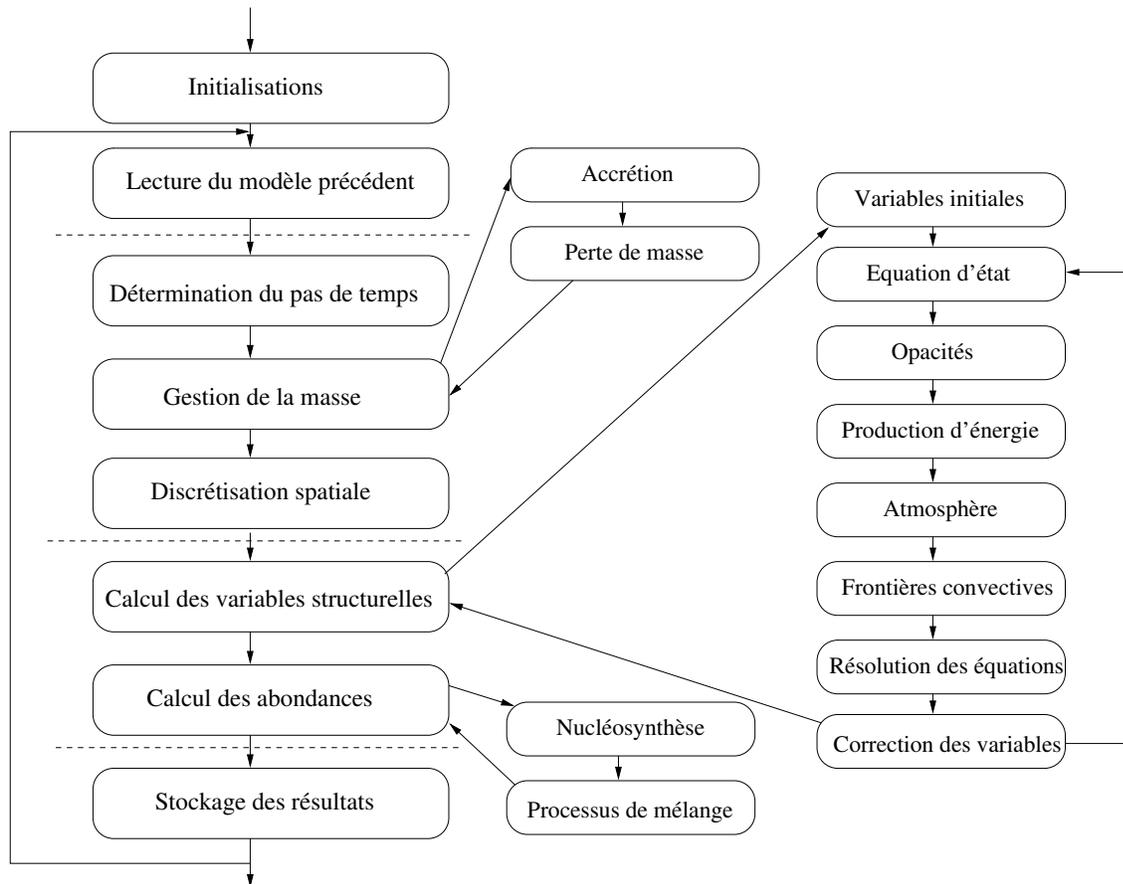


FIG. 1.3 – Organigramme général de STAREVOL

Découplages

Le choix le plus important qui a été fait est de découpler le calcul des variables structurelles ($r, u, \ln f, \ln T, l_r$) et des variables de composition, les Y_i . Cela suppose que les dérivées temporelles des abondances sont nulles pendant le calcul de la structure de l'étoile et que les dérivées temporelles des variables structurelles sont nulles pendant le calcul des abondances. Cette supposition est cohérente avec l'équation II-1.17 qui demandait que $\frac{d\rho}{dt} = 0$. Cette équation ne sera donc pas résolue itérativement avec les cinq autres. Cela va alléger considérablement la taille de la matrice Newton-Raphson à inverser puisqu'il y a 55 éléments dont l'abondance est suivie!

De plus, l'équation II–1.17 est séparée en deux parties; chacune étant résolue séparément. Cette séparation n'est possible que si les temps caractéristiques de mélange (convection ou transport lent) et d'évolution nucléaire des abondances sont très différents. Dans le cas contraire, les deux équations suivantes doivent être résolues de manière couplées. La première concerne le nucléaire pur:

$$\frac{dY_Z}{dt} = \rho \mathcal{N} \sum_{a,b,X,Y} (r'_{X(a,b)Z} \perp r'_{Z(a,b)Y}) \quad (1.31)$$

où les r' sont les taux de réactions écrits II–1.18 desquels on a extrait la quantité $\rho \mathcal{N}$, \mathcal{N} étant la constante d'Avogadro (voir annexe F). Le membre de droite est linéarisé pour pouvoir écrire le système sous la forme simplifiée

$$\frac{d\vec{Y}}{dt} = [R] \cdot \vec{Y} \quad (1.32)$$

La solution est trouvée en découpant le pas de temps d'évolution des variables structurelles en "sous pas de temps". Ainsi, sur ces petits pas de temps, les abondances sont considérées comme constantes avec une bonne approximation. La deuxième concerne les processus de mélange:

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{1}{\rho r^2} \frac{d}{dr} \left(\rho r^2 D \frac{dY_i}{dr} \right) \quad (1.33)$$

Ils sont traités à travers une équation de diffusion qui sera résolue en découpant aussi le pas de temps d'évolution de la structure en "sous pas de temps". C'est le coefficient de diffusion, D , qui contient les informations relatives à la cause physique du mélange. Il sera détaillé dans le chapitre II–3 ainsi que l'origine de l'équation II–1.33.

1.3.5 Le choix du pas de temps évolutif et la discrétisation

Ces deux points font ici l'objet d'un petit paragraphe car, notamment lors des calculs de DUP, Straniero *et al.* (1997) ont montré que l'échantillonnage temporel et spatial d'un modèle d'étoile pouvait avoir des conséquences sur l'apparition ou non d'un troisième DUP. Ce point sera rediscuté au chapitre III–4.

Pas de temps

Le pas de temps d'évolution de la structure est choisi en évaluant la variation temporelle des variables dépendantes, $x_i(m_r, t)$, lors du précédent processus itératif, dont le pas de temps, Δt^\perp , est connu. On contraint alors le pas de temps suivant, Δt^+ , en imposant:

$$\frac{\Delta x_i^+}{x_i} = \frac{\Delta x_i^\perp}{x_i} \frac{\Delta t^+}{\Delta t^\perp} < \tau_i \quad (1.34)$$

Les variables retenues pour contraindre le pas de temps sont les suivantes: $\ln T$, $\ln f$, Y_H , Y_{He} , Y_C . Elles ont été choisies car, suivant les phases évolutives, c'est toujours une de ces variables qui varie le plus et donc contraint le mieux l'évolution de la structure de l'étoile. De plus, lors des phases de contractions (détectées automatiquement), le temps de Kelvin-Helmoltz (ou temps de chute libre) multiplié par un facteur paramétrable sert aussi de contrainte temporelle.

La discrétisation

La grille utilisée possède un nombre de points *variable*. Ceux-ci sont ajoutés ou supprimés en fonction de certains critères. Pour avoir une résolution suffisante dans la structure de l'étoile mais aussi pour que les équations discrétisées soient bien représentatives des équations physiques (Le Pourhiet 1988), toutes les variables contraintes par le schéma Newton-Raphson sont utilisées pour déterminer le placement des points. Ainsi, on demande que:

$$\sigma_i^{min} \leq \frac{y_i(k+1) \pm y_i(k)}{y_i(k)} \leq \sigma_i^{max} \quad (1.35)$$

Une couche sera ajoutée si la partie droite de cette condition n'est pas vérifiée pour une variable ou une couche sera supprimée si la partie gauche de cette condition n'est pas vraie pour toutes les variables. Suivant les cas, y est directement une variable des équations de la structure stellaire mais cela peut aussi être le logarithme d'une variable par exemple. Cela évite d'avoir à moduler σ suivant la valeur de la variable utilisée si celle-ci a un domaine de variations très important.

Chaque intervention dans la grille perturbe le modèle car il faut, lors de l'addition d'une couche par exemple, définir les valeurs des variables dans la nouvelle couche par des moyennes sur les couches adjacentes. De nombreux choix de formules sont possibles (moyennes arithmétiques, géométriques, sur deux couches, sur trois couches, ...). Le modèle est donc perturbé car ces couches ne vérifient pas exactement les équations de la structure stellaire; elles n'ont pas encore convergées. Nous avons été attentif aussi à une grande cohérence dans la gestion de la grille en traitant le retrait et l'ajout d'une même grandeur de la même façon. De plus de nombreux tests ont été réalisés pour mesurer l'impact de ce genre de modifications. Nous avons retenu différents points:

- calcul de moyennes pondérées par la masse entre la couche modifiée et sa voisine encore non modifiée.
- utilisation de moyennes géométriques de ces moyennes pondérées pour toutes les variables thermodynamiques et de moyennes arithmétiques sinon.
- conservation de la masse de chaque élément lors d'une modification des abondances dans la grille.
- répartition de la masse d'une couche supprimée ou ajoutée de telle façon à modifier un minimum de couches (2 la plupart du temps) à chaque remaniement de la grille. Cela évite de modifier les variables dans trop de couches car, ces variables ne vérifiant pas les équations de la structure stellaires, elles sont sources de difficultés de convergence, d'autant plus qu'elles sont nombreuses.
- minimisation des sauts numériques lors du recalcul des valeurs prises par les variables dans les couches modifiées.

Les abondances

Suite à l'incorporation de la nouvelle équation d'état, les divers grandeurs thermodynamiques (u, s, ρ, \dots) se sont révélées très sensibles aux variations de composition dans l'étoile. En effet, si les abondances ont une faible résolution, le profil d'Hydrogène par exemple montre des petits plateaux, notamment aux endroits où l'abondance varie le plus, dans les coudes

au-dessus et en-dessous de la couche en fusion d'Hydrogène. Au modèle suivant, ces petits plateaux pourraient se déplacer et provoquer des variations temporelles locales (sur les bords du plateau) très importantes. Cela se traduirait par des pics importants dans le profil de ϵ_{grav} . En effet, les figures II-1.4 montre l'influence de la composition sur la quantité ϵ_{grav} . Les deux figures de gauche montrent le profil d'abondance de l'Hélium séparés par un pas

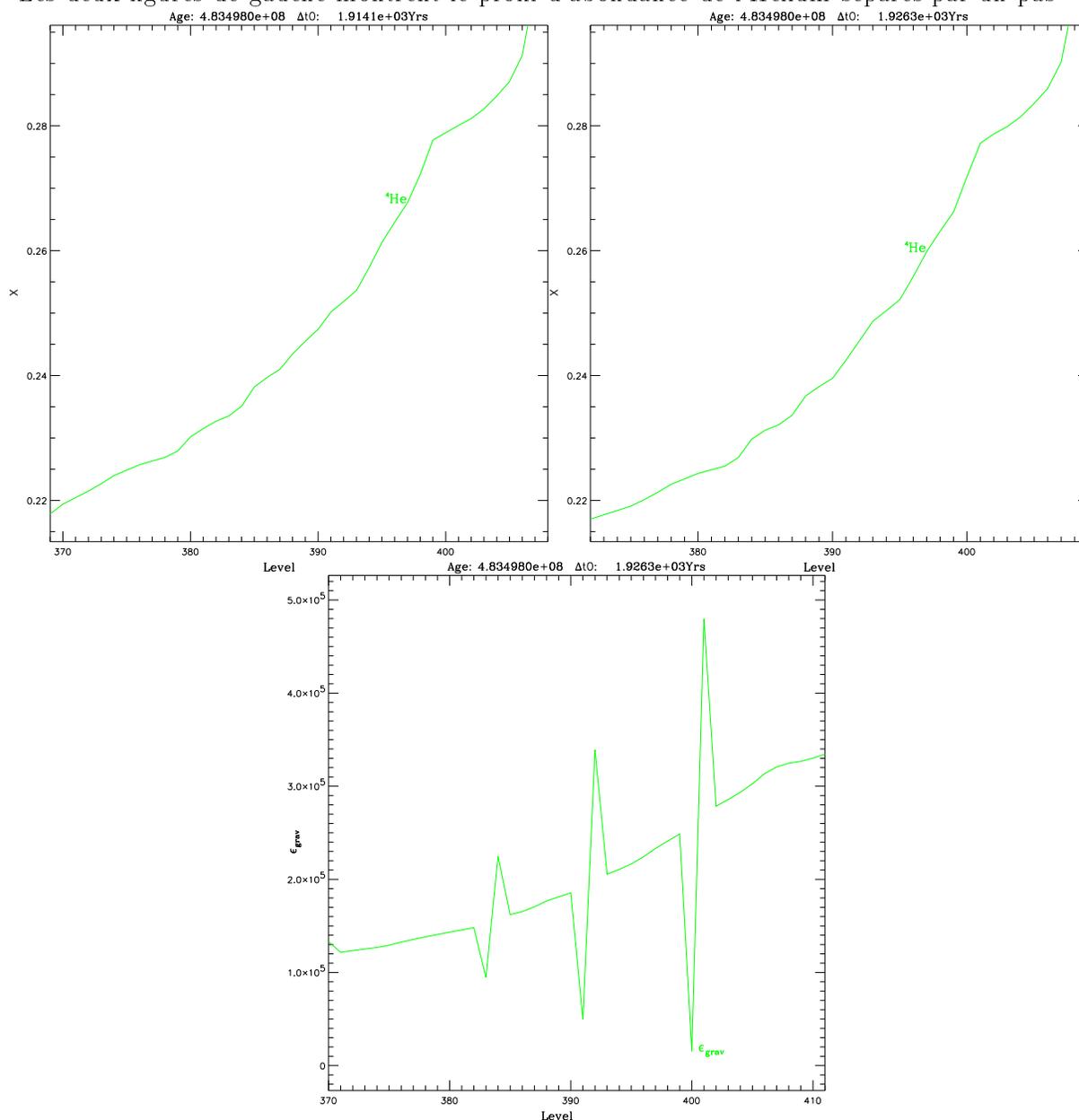


FIG. 1.4 – Influence de la composition sur ϵ_{grav} . Les deux figures du haut montrent deux profils d'Hélium séparés par un pas de temps et celle du bas montre le profil de ϵ_{grav} résultant.

de temps. On remarquera que la rupture de pente présente à la couche 399 s'est décalée à la couche 401 au pas de temps suivant. De même, les deux petites ruptures en 380 et 387 se sont décalées de quelques couches pour venir en 383 et 391. Le profil de ϵ_{grav} montre exactement à ces trois emplacements des variations discontinues très fortes ayant toutes trois la même forme. La figure II-1.5 simule la translation du profil d'abondance remarquée en II-1.4 mais avec un petit plateau d'abondance pour se placer dans un cas simple.

Il suffit de faire tendre ce plateau vers une couche pour retrouver la situation réelle.

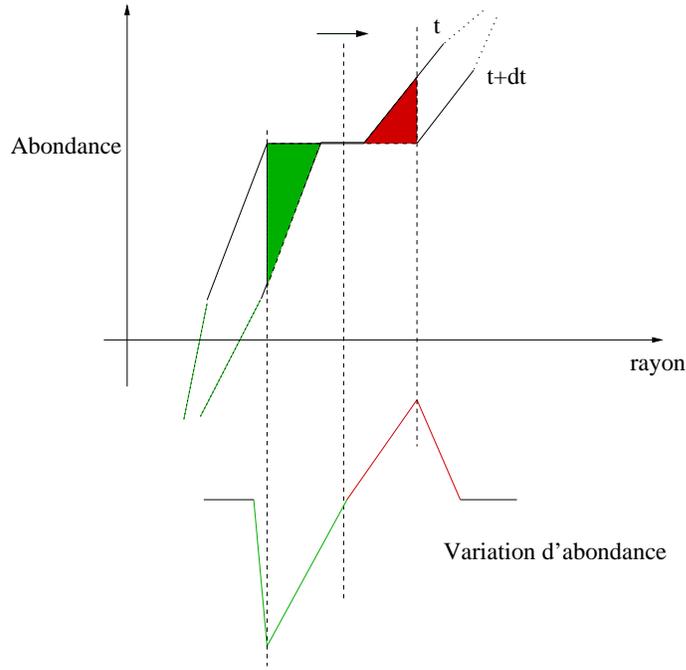


FIG. 1.5 – Variation des profils d'abondances près des discontinuités

Lorsque l'on calcule couche à couche la variation d'abondance, la forme obtenue est caractérisée par deux pics successifs, l'un négatif là où l'abondance a diminué et l'autre positif, là où elle a augmenté. C'est la forme identifiée sur le profil de ϵ_{grav} . Si l'on définit cette quantité avec la relation II-1.12 et que l'on examine l'équation II-2.299 pour évaluer les dépendances en les abondances, on s'aperçoit que l'on a :

$$\begin{aligned} \epsilon_{grav} dt &\sim \perp ds \\ &\propto d \left(\ln \rho \sum_i \alpha_i \right) + d \left[\sum_i \alpha_i \ln(\alpha_i) \right] + d[\alpha_i \ln(n_{Q_i})] \end{aligned}$$

Le premier terme ne varie qu'au travers de ρ , quasiment constant dans la situation de la figure II-1.4. On évalue le dernier terme en ordre de grandeur dans un cas très favorable ($T = 10^9 K$) grâce à la définition II-2.30 et alors $\ln(n_{Q_i}) \sim 10^{14}$, ce qui rend toujours négligeable le produit $\alpha_i \ln(n_{Q_i})$. On peut donc finalement écrire que la partie de ϵ_{grav} sensible à la composition varie de la façon suivante :

$$\epsilon_{grav} dt \sim \sum_i \{ [\ln(\alpha_i) + 1] d\alpha_i \} \quad (1.36)$$

Les pics mis en évidence sur la figure II-1.5 se répercutent donc directement sur ϵ_{grav} . Ces pics, en modifiant le profil de luminosité par l'équation II-1.8 pouvaient se répercuter sur le gradient radiatif (voir l'équation II-1.19) en faisant apparaître au cours de la convergence des zones convectives numériques en grand nombre ! Un des changements importants réalisés sur la gestion du placement des couches durant ma thèse a donc été de prendre en compte les abondances dans la contrainte II-1.35. Utilisant le fait que la gamme des valeurs prises par les abondances varie de 10^{-30} à 1 en fraction de masse et que c'est notamment lorsque les abondances varient le plus que l'on a besoin d'une bonne résolution, nous avons choisi d'adapter les valeurs des coefficients σ suivant les valeurs présent par les variables Y_i .

L'algorithme retenu pour le recalcul des abondances, vérifiant les conditions générales définies au paragraphe précédent, est le suivant:

- Par convention, on nomme indice dans la suite la couche modifiée (ajoutée ou supprimée) par la lettre i et on renomme toutes les couches adjacentes par rapport à celle-ci, $i \pm 1, i + 1, \dots$.
- Lorsqu'on supprime une couche, la masse de la couche est répartie également dans les deux couches adjacentes et la fraction de masse de chaque élément est recalculée dans ces couches par la formule suivante:

$$X_{i+1} = \frac{X_{i+1}dm_{i+1} + 0.5X_idm_i}{dm_{i+1} + 0.5dm_i} \quad \text{et} \quad X_{i-1} = \frac{X_{i-1}dm_{i-1} + 0.5X_idm_i}{dm_{i-1} + 0.5dm_i} \quad (1.37)$$

- Lorsque l'on ajoute une couche, on introduit dans la nouvelle couche la moitié de la masse de la couche immédiatement inférieure qui, elle, est donc divisée par un facteur deux. Les fractions de masses sont recalculées par la formule:

$$X_{i-1} = X_{i-1} \pm Q \quad \text{et} \quad X_i = X_i + Q \quad (1.38)$$

$$\text{avec } Q = \frac{1}{3} \min(|X_{i-1}|, |X_{i-2} \pm X_{i-1}|, |X_{i+1} \pm X_{i-1}|) \frac{X_{i-2} \pm X_{i+1}}{|X_{i-2} \pm X_{i+1}|} \quad (1.39)$$

Ce calcul permet d'avoir un gradient de composition le plus constant possible de la couche $i \pm 2$ à la couche $i + 1$.

Résumé des contraintes numériques

Des valeurs indicatives des facteurs τ_i et σ_i généralement utilisés (ils sont paramétrables) sont données dans le tableau II-1.3.

Comme on peut le voir, dans la pratique, les contraintes spatiales sont bien évaluées avec des moyennes notées, $\langle x \rangle$. Une case vide indique que la contrainte n'existe pas. Sauf indications contraires dans la colonne "observations", les quantités σ contraignent les variables comme indiqué en II-1.35.

Variable utilisée	Contrainte		Observations
	Temporelle	Spatiale	
$\ln T$	$\tau \in \{1..10\}$	$\sigma^{min} = 0.15, \sigma^{max} = 0.05$	contrainte spatiale sur $\delta(\langle \ln T \rangle)$ $\tau = 1$ pour un pulse par exemple
$\ln f$	$\tau \in \{1..10\}$	$\sigma^{min} = 0.15, \sigma^{max} = 0.05$	contrainte spatiale sur $\delta(\langle \ln f \rangle)$
l_r		$\sigma^{min} = 0.15, \sigma^{max} = 0.05$	contrainte spatiale sur $\delta(\ln(l_r))$
Y_i	$\tau = 5$	$\sigma^{max} = 15$ $\sigma^{max} = 4$ $\sigma^{max} = 2$ $\sigma^{max} = 0.5$	τ séparable pour H, He et C $10^{\pm 5} < X < 0.1$ $0.1 < X < 0.35$ $0.35 < X < 0.75$ $0.75 < X < 1$
P		$\sigma^{min} = 0.15, \sigma^{max} = 0.05$	contrainte spatiale sur $\delta(\ln(\langle P \rangle))$
τ_{KH}	50		contrainte temporelle: $\Delta t^+ \leq 50\% \tau_{KH}$
dm		$\sigma^{min} = 0.3, \sigma^{max} = 0.9$	contrainte spatiale sur $\frac{dm}{M_*}$ dm et M_* sont la masse d'une couche et de l'étoile
$\epsilon_{nuc} \perp \epsilon_\nu$		$\sigma^{max} = 0.25$	contrainte spatiale sur $\ln(\delta(\epsilon_{nuc} \perp \epsilon_\nu))$

TABLE 1.3 – Contraintes de la discrétisation spatio-temporelle (en pourcentages)

Chapitre 2

Changement d'équation d'état .

Sommaire

2.1	Généralités	61
2.2	Les difficultés de l'implémentation	67
2.3	Choix pour la nouvelle équation d'état	73
2.4	Le changement de variable	77
2.5	L'implémentation	82
2.6	Ionisation	91
2.7	Calculs des composantes	104
2.8	Corrections au gaz parfait	113
2.9	Quelques vérifications	125

L'équation d'état est au coeur des équations de la structure et de l'évolution stellaire. Elle permet d'obtenir la pression, P , dans l'équation du mouvement II-1.7, de calculer un des termes qui permet à l'étoile d'évoluer dans l'équation II-1.8, ϵ_{grav} , et détermine les frontières convectives grâce au gradient adiabatique, ∇_{ad} (voir l'équation II-1.13 et le chapitre II-3). Après avoir présenté quelques généralités concernant l'équation d'état, nous verrons les difficultés qui se présentent dans le contexte stellaire et nous utiliserons alors un changement de variable pertinent, notamment pour la phase AGB et les étoiles de très faibles masses. Les dernières parties détailleront l'implémentation de cette nouvelle équation d'état, les différents tests que nous lui avons fait subir et les futurs développements possibles.

2.1 Généralités

Nous allons présenter ici les notations et le formalisme choisis ainsi que les exigences physiques que nous pouvons avoir pour une équation d'état, notamment pour modéliser au mieux la phase AGB.

2.1.1 Le plasma stellaire

Pour les espèces chimiques présentes dans le plasma, nous utiliserons les notations suivantes:

A_X et Z_X seront respectivement le nombre de masse et le nombre atomique de l'élément chimique X . Quand celui-ci n'est pas déterminé, l'indice sera omis. Seront nommées "espèces nucléaires" (pas d'électrons liés) les espèces prises dans l'ensemble $\{^A X\} = \{^2\text{H}, ^4\text{He}, \dots\}$.

De même, une "espèce atomique" (possédant des électrons liés) appartiendra à l'ensemble $\{X^{i+}\} = \{H, C^{3+}, H_2^+, \dots\}$, i étant la charge effective de l'espèce: $0 < i < Z_X$ pour les cations. Pour les abondances, Nb_X sera un nombre de particules et M_X la masse d'une de ces particules. Un exposant "mol" indiquera qu'il s'agit de moles.

Rappelons les deux quantités sans dimensions utilisées comme notations usuelles:

- $X_X \stackrel{def}{=} \frac{m_X}{m}$ est la fraction de masse de l'élément X dans un volume V choisi de masse m.
- $Y_X \stackrel{def}{=} \frac{X_X}{A_X}$ est la fraction molaire de ce même élément. En effet, la masse de m_X peut s'écrire comme le produit du nombre de moles par la masse molaire: $m_X = Nb_X^{mol} \cdot M_X^{mol}$. Or, moyennant quelques hypothèses données à l'annexe F.1, $M_X^{mol} = A_X \cdot 1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$. On obtient donc $Y_X = Nb_X^{mol}/m$.

Ces notations étant classiquement plus utilisées pour les "espèces nucléaires", nous utiliserons pour les abondances des "espèces atomiques" les notations suivantes:

- La densité numérique (nombre volumique de particules) est définie par:

$$n_X \stackrel{def}{=} \frac{Nb_X}{V} \quad (2.1)$$

- $N_X \stackrel{def}{=} \frac{Nb_X}{m}$ est le "nombre massique" de particules.
- Voici maintenant une notation très pratique dans toute la suite de ce chapitre, $\alpha_X = uma \cdot N_X$, où uma est l'unité de masse atomique (voir annexe F.1). Cette quantité sans dimension est comparable aux fractions molaires y_X car on a $\alpha_X = \frac{1}{\mathcal{N}} \cdot \frac{Nb_X}{m} = \frac{Nb_X^{mol}}{m}$, où \mathcal{N} est la constante d'Avogadro.
- Enfin, une quantité classique qui sera très peu utilisée dans ce chapitre est le "poids moléculaire moyen particulière", μ_X . On devrait d'ailleurs plutôt dire "masse moyenne par mole de particule X", ce qui se noterait symboliquement $\mu_X \stackrel{def}{=} \frac{m}{Nb_X^{mol}}$. La signification de cette quantité est la suivante: plus μ_X est grand dans la masse test considérée, moins la fraction numérique de particules X est importante. On peut encore exprimer la signification physique de μ autrement: si dans cette masse m il n'y avait que des particules X, μ_X serait leur masse molaire pour que la masse totale soit inchangée. On a $\mu_X = M_X^{mol}$ dans le cas où il n'y a *réellement* que des particules X dans le plasma. Avec cette définition, on a très simplement $\mu_X = \frac{m}{\mathcal{N}} \frac{\mathcal{N}}{Nb_X^{mol}} = \frac{m\mathcal{N}}{Nb_X} = \frac{m}{V} \frac{V\mathcal{N}}{Nb_X} = \frac{\rho\mathcal{N}}{n_X}$ et

$$\mu_X = \alpha_X^{-1} \quad (2.2)$$

Remarquons que $\rho \stackrel{def}{=} \frac{m}{V}$ entraîne, d'après les définitions ci-dessus, que l'on a aussi $\rho = \frac{n_X}{N_X}$ pour tout X. Si on utilise le volume spécifique, v , c'est-à-dire le volume de l'unité de masse, alors on peut le définir par $v \stackrel{def}{=} \frac{1}{\rho}$.

2.1.2 Le cadre théorique

La démarche générale de l'EOS

La figure II-2.1 schématise la démarche théorique utilisée pour calculer une équation d'état et les quelques pages qui suivent ont pour but d'introduire petit à petit toutes ces

constituants. Les quantités thermodynamiques requises par les équations de structure et

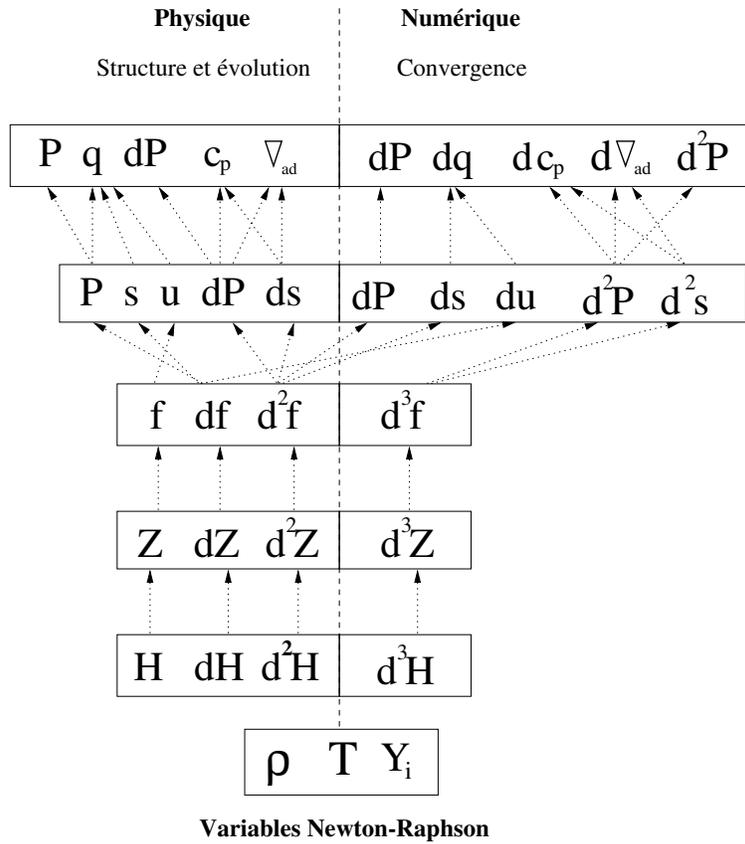


FIG. 2.1 – Schéma de principe pour le calcul d'une équation d'état

d'évolution stellaire figurent tout en haut. Celles portées à gauche de la ligne pointillée verticale sont nécessaires pour calculer la structure de l'étoile, celles à sa droite permettent au modèle de converger (voir le chapitre II-1). Un dx représente la dérivée de la grandeur x par rapport aux variables indépendantes (portées dans le cadre le plus bas) à partir desquelles toutes les autres sont calculées. Une flèche en pointillée de a vers b signifie "a permet de calculer b". La pression est nécessaire pour l'équation du mouvement, la quantité de chaleur (voir expressions II-1.10 à II-1.12) pour le bilan d'énergie, les dérivées de la pression entrent dans le calcul du gradient convectif à travers la quantité

$$Q \stackrel{def}{=} \frac{\left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_{\rho}}{\left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \right|_T} \quad (2.3)$$

et aussi dans le critère d'apparition de la convection (voir le chapitre II-3). Les grandeurs c_P ou ∇_{ad} dans l'expression de la quantité de chaleur, q , le calcul de ∇_{conv} et le critère d'apparition de la convection.

Toutes les quantités nécessaires à l'établissement des équations de la structure et de l'évolution stellaire peuvent s'obtenir par le calcul de seulement deux variables: P et s et leurs dérivées par rapport à T et ρ (deuxième ligne de la figure). Suivant l'écriture choisie pour ϵ_{grav} (voir équation II-1.10 à II-1.12), u sera nécessaire à l'écriture de q mais sera déduit d'une combinaison de s et de f , l'énergie libre de Helmholtz, qui doit elle-même être calculée

pour obtenir P et s . Les relations utilisées sont les suivantes:

$$u = f + Ts \quad (2.4)$$

$$\nabla_{ad} = \frac{1}{k} \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \Big|_T \quad (2.5)$$

$$c_p = \perp k \left(\frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \Big|_T \right)^{\perp 1} \quad (2.6)$$

$$\text{avec } k = \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \Big|_{\rho} \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \Big|_T \perp \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \Big|_T \frac{\partial s}{\partial \ln T} \Big|_{\rho} \quad (2.7)$$

Nous parlerons de quantités thermodynamique d'ordre n lorsque cette quantité fait intervenir les dérivées n -ième de f . La relation liant f et u est en fait la définition de l'énergie libre:

$$f \stackrel{def}{=} u \perp Ts \quad (2.8)$$

Les deux autres relations sont dérivées dans l'annexe D.

Les deux quantités fondamentales P et s sont définies à partir de l'énergie libre par les relations classiques de thermodynamique:

$$P = \perp \frac{df}{dV} \Big|_{T, N_i} \quad (2.9)$$

$$s = \perp \frac{df}{dT} \Big|_{V, N_i} \quad (2.10)$$

L'énergie libre vient elle-même de la fonction de partition *canonique* du système considéré:

$$f = \perp kT \ln(Z) \quad (2.11)$$

$$Z = \hat{T}r(e^{\perp \beta \hat{H}}) \quad (2.12)$$

Enfin, la fonction de partition canonique du système est une description de tous les états accessibles par le système et contient donc toute la physique microscopique nécessaire. C'est l'opérateur "Hamiltonien", \hat{H} , qui joue ce rôle, supplée par l'opérateur "Nombre de particules", \hat{N} , si l'on se place dans l'ensemble grand canonique. Le cas le plus général, la fonction de partition grand canonique est aussi définie par une trace (voir Luo (1994)):

$$\mathcal{Z} = \hat{T}r(e^{\perp \beta \hat{H} + \eta \hat{N}}) \quad (2.13)$$

$$\beta \stackrel{def}{=} \frac{1}{kT} \quad (2.14)$$

$$\eta \stackrel{def}{=} \beta \pi \quad (2.15)$$

où, π est le potentiel chimique de l'espèce considérée. Ce "retour" aux sources est primordial car c'est par lui que l'on peut appréhender la variété et l'exactitude de la physique incluse dans les grandeurs calculées par l'équation d'état. En effet, les domaines du plan (ρ, T) traversés par une étoile sont très variés suivant l'âge de l'étoile et l'endroit où l'on se place dans sa structure. On peut facilement passer du gaz parfait au gaz complètement ionisé fortement couplé par le potentiel coulombien et du gaz moléculaire neutre au gaz fortement dégénéré ionisé par pression. Cette diversité des conditions physiques rencontrées impose de vérifier prudemment la validité de l'équation d'état en faisant bien apparaître les hypothèses simplificatrices utilisées.

Description microscopique du plasma

Lorsque l'on veut calculer une équation d'état, il faut commencer par choisir dans le plasma un nombre Ξ d'espèces élémentaires, chacune d'abondance N_ξ , avec

$$N_{\text{tot}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\xi=1}^{\Xi} N_\xi \quad (2.16)$$

Le système est alors caractérisé par ses états propres: $|\phi_k\rangle$, d'énergie E_k et nombre de particules, N_k , donnés par les opérateurs "hamiltonien", $\hat{\mathcal{H}}$, et "nombre de particules", $\hat{\mathcal{N}}$:

$$\hat{H}|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle \quad (2.17)$$

$$\hat{N}|\phi_k\rangle = N_k|\phi_k\rangle \quad (2.18)$$

Ces états propres consistent en deux ensembles d'espèces différentes:

- Les "états liés", constitués d'assemblages des espèces élémentaires, par exemple H^+ , H_2 , CO , C^{6+} ...
- Les "états libres" ou "états de diffusion", constitués des espèces élémentaires restées libres, par exemple, e^- , p^+ , ^{13}C , ...

La somme des abondances de ces espèces est la valeur propre N_k et leur énergie totale est E_k . Ces états sont déterminés par la physique du système, inscrite dans l'opérateur "hamiltonien":

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}} \hat{h}_i + \hat{U}(1, \dots, N_{\text{tot}}) \quad (2.19)$$

Détaillons son contenu:

- \hat{U} est l'énergie potentielle à N_{tot} particules. Elle contient les termes d'interaction. On aura par exemple :

$$\hat{U} = \hat{U}_{\text{chargé} \perp \text{chargé}} + \hat{U}_{\text{neutre} \perp \text{neutre}} + \hat{U}_{\text{neutre} \perp \text{chargé}} \quad (2.20)$$

C'est \hat{U} qui va "configurer" les différents états accessibles par le système, ce qui lui vaut son nom: \hat{U} est le terme de *configuration*.

- Les \hat{h}_i sont les opérateurs "hamiltoniens" associés à chaque particule élémentaire. Ils s'écrivent par définition $\hat{h}_i \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{T}}_i + \hat{\mathcal{W}}_i$. Le premier opérateur, $\hat{\mathcal{T}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i}$, étant l'énergie cinétique de la particule, ce terme est appelé terme de *translation*. Compte tenu de la structure interne des particules, on incorpore la physique que l'on veut prendre en compte dans $\hat{\mathcal{W}}$, l'énergie potentielle de la particule. Cet opérateur est donc un terme de *structure interne*. Ainsi, suivant la nature de la particule élémentaire, on peut être amené à considérer des termes de rotation ou de vibration moléculaire, l'interaction des atomes dans la molécule, l'interaction entre les électrons et les noyaux, les couplages spins-orbites, ... Enfin, *si le couplage entre ces termes est négligeable* (termes internes indépendants des vitesses par exemple), cela revient à découper le hamiltonien d'une particule comme suit:

$$\hat{h}_i = \hat{h}_i^{\text{trans}} + \hat{h}_i^{\text{rot}} + \hat{h}_i^{\text{vib}} + \hat{h}_i^{\text{elec}} + \hat{h}_i^{\text{fin}} + \hat{h}_i^{\text{hyperfin}} + \dots \quad (2.21)$$

Description macroscopique du plasma

Pour résoudre le problème posé au paragraphe précédent, connaître les états propres du système, plusieurs choix sont à faire.

Tout d'abord, deux approches se sont développées.

La première, l'approche "physique" (Rogers (1973), Rogers (1981), Rogers (1984), Rogers (1986)), consiste à prendre comme espèces élémentaires les électrons, les photons et les noyaux présents dans le plasma. Les "états liés" sont alors les ions qui peuvent se former avec des abondances et des énergies déterminées par la résolution de l'équation de Schrödinger à N_{tot} particules par des techniques statistiques quantiques à N corps. Citons les méthodes de développements de la fugacité (Rogers & Young 1997) ou les simulations Monte-Carlo quantiques (Magro *et al.* 1996). Cette approche est très proche de la réalité mais n'a pas pu être appliquée dans tous les régimes (basse température, haute densité par exemple) car les méthodes de résolution actuelles ne convergent pas dans ce domaine (Saumon *et al.* 1995). La deuxième, l'approche "chimique", consiste à prendre comme particules élémentaires un certain nombre d'états liés, supposés exister, choisis au départ pour leur pertinence. Ainsi, Saumon *et al.* (1995) choisit-il (H, H⁺, H₂, e⁻, γ) pour décrire un plasma pur d'Hydrogène, supposant à priori, que (H⁻, H₂⁺, H₃⁺) sont d'effets négligeables pour le calcul de l'équation d'état.

Ces approches s'appuient fortement sur des travaux expérimentaux ou théoriques (calculs ab initio) pour déterminer les potentiels $H_2^- - H_2$, $H_2 - H$, ... suivant la distance. Dans Saumon *et al.* (1999), des expériences de compression de Deutérium et d'Helium par chocs réalisés au laboratoire national "Lawrence" de Livermore, servent pour contraindre les potentiels interparticulaires dans des conditions de densité encore jamais atteints.

Ensuite, il faut choisir l'ensemble statistique le plus approprié. La encore deux choix sont possibles.

Le choix le plus général est de se placer dans l'ensemble grand canonique. On y utilise une statistique quantique adaptée au calcul de n'importe quelle particule, fermion ou boson. Le potentiel thermodynamique associé à \mathcal{Z} est le grand potentiel:

$$\Omega \stackrel{def}{=} P v \quad (2.22)$$

$$N = \left. \frac{\partial \ln \Omega}{\partial \eta} \right|_{\rho, T} \quad (2.23)$$

Ce choix s'effectue lorsque l'on veut calculer les abondances à l'intérieur de l'ensemble statistique, à partir du grand potentiel, en prenant donc en compte la nature (éventuellement quantique) des particules. Luo (1994) a choisi cette méthode couplée à un point de vue "chimique".

L'autre méthode consiste en quelque sorte à découpler le calcul des grandeurs thermodynamiques de celui des états propres des espèces, en supposant que ces dernières sont *fixées*. C'est alors la fonction de partition canonique qu'il convient d'utiliser avec son potentiel associé, l'énergie libre, f . Dans l'ensemble canonique, c'est la statistique de Maxwell-Boltzman qui s'applique, c'est-à-dire une statistique quasi-classique où chaque particule est censée occuper une extension spatiale h^3 dans un espace des phases continu. Lorsque des phénomènes

purement quantiques apparaissent (recouvrements de fonctions d'ondes par exemple), les particules perdent leurs identités, les abondances ne peuvent plus être fixées, la statistique de Maxwell-Boltzman ne peut plus s'appliquer: l'ensemble canonique n'est plus approprié. Hormis cette restriction, les abondances sont calculées en supposant que des transformations (réactions chimiques, d'ionisation ...) s'opèrent entre les espèces élémentaires, à ρ et T constants, en minimisant l'énergie libre.

Le passage d'une description à l'autre peut être déduit simplement de l'expression de l'énergie interne dans l'ensemble grand canonique:

$$dU = Tds \perp PdV + \sum_{\xi=1}^{\Xi} \pi_{\xi} d N_{\xi} \quad (2.24)$$

En divisant par dm pour obtenir des grandeurs par unité de masse, on a:

$$u = Ts \perp \frac{P}{\rho} + \sum_{\xi=1}^{\Xi} \pi_{\xi} N_{\xi} \quad (2.25)$$

Puis, en introduisant la définition de η (équation II-2.34) et celle de f et ω (équations II-2.8 et II-2.22):

$$f = \Omega + \sum_{\xi=1}^{\Xi} \pi_{\xi} N_{\xi} \quad (2.26)$$

d'où

$$\ln(Z) = \ln(\mathcal{Z}) + \sum_{\xi=1}^{\Xi} \eta_{\xi} N_{\xi} \quad (2.27)$$

2.2 Les difficultés de l'implémentation

Le but de cette section est de lister les différentes conditions à remplir pour une équation d'état et les points à améliorer lors de la modification de l'équation d'état du code d'évolution stellaire.

2.2.1 Conditions pour une "bonne" EOS

Plusieurs conditions doivent être satisfaites.

- Les modèles employés étant toujours des approximations, les quantités physiques calculées doivent cependant être *valides*, c'est à dire par exemple que l'énergie libre calculée par le modèle utilisé doit être égale à la valeur exact: $f^{approx} = f^{exact}$. Cette condition dépend de l'adéquation entre la physique incluse dans le modèle et les conditions (ρ, T) dans lesquelles on utilise l'équation d'état . La figure II-2.2 montre par exemple les domaines d'influence dans le plan (ρ, T) de différents effets physique pour un plasma d'Hydrogène pur.

Chaque ligne pleine représente une frontière dans le plan (ρ, T) séparant une zone où un effet physique peut être négligé d'une zone où on ne peut plus le faire. Autour de chaque ligne, l'effet physique testé est noté du coté où il domine. La ligne pointillée délimite la

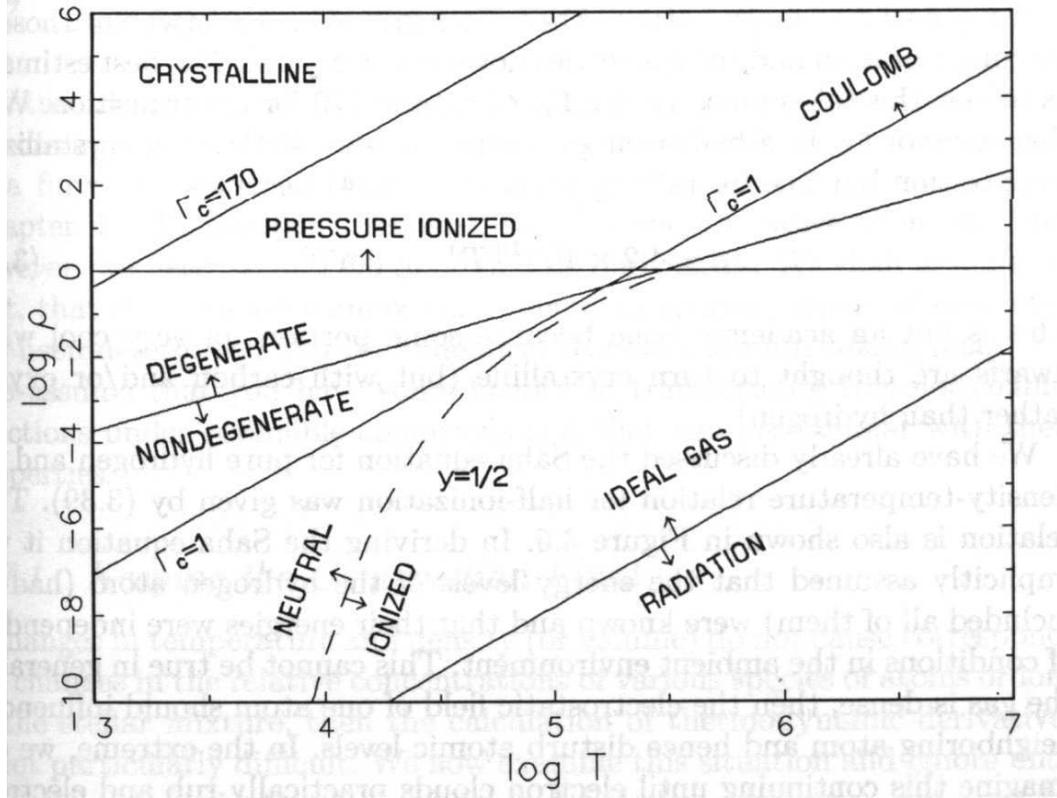


FIG. 2.2 – Répartition de différents effets physiques dans le plan (ρ, T) , extrait de Hansen & Kawaler (1993), pour un plasma d'Hydrogène pur.

zone d'ionisation radiative de l'Hydrogène par l'équation de Saha (voir au chapitre II-2, l'équation II-2.45 et la partie II-2.6.1), en prenant pour critère $y \stackrel{def}{=} \frac{N_{H^+}}{N_H} = \frac{1}{2}$. La ligne marquée "PRESSURE IONIZED" montre la limite à partir de laquelle l'Hydrogène est ionisé par les collisions. Les effets des corrélations dues au potentiel de Coulomb sont quantifiés par le paramètre de couplage Γ_c (voir la partie II-2.8). Lorsque celui-ci vaut environ 1, les effets coulombiens deviennent importants. Enfin, la ligne séparant "IDEAL GAS" de "RADIATION", indique la frontière sur laquelle ces deux composantes contribuent à égalité à la pression dans le plasma.

La figure II-2.3 montre les conditions typiques (ρ, T) du coeur et de la surface d'une étoile de l'AGB de trois masses solaires et la contribution de la radiation à la pression, quantifiée par la quantité $\beta \stackrel{def}{=} \frac{P_{rad}}{P}$. Ainsi, si $\beta = 0$, le plasma est composé de photons uniquement ($P = P_{rad}$) alors que si $\beta \sim 1$, on a $P_{rad} \sim 0$.

On constate que les effets de dégénérescence électronique sont importants dans le coeur, que l'ionisation collisionnelle (ou par pression) ne peut pas être négligée, de même que les effets coulombiens. De plus, il faut tenir compte de la pression de radiation, notamment pour une zone de l'étoile représentée sur la figure de droite: juste sous la base de l'enveloppe convective. Il s'agit en effet de l'endroit juste au-dessus des zones de nucléosynthèse où les photons s'accumulent. A cet endroit, ils contribuent sur cet exemple à hauteur de 60% à la pression totale.

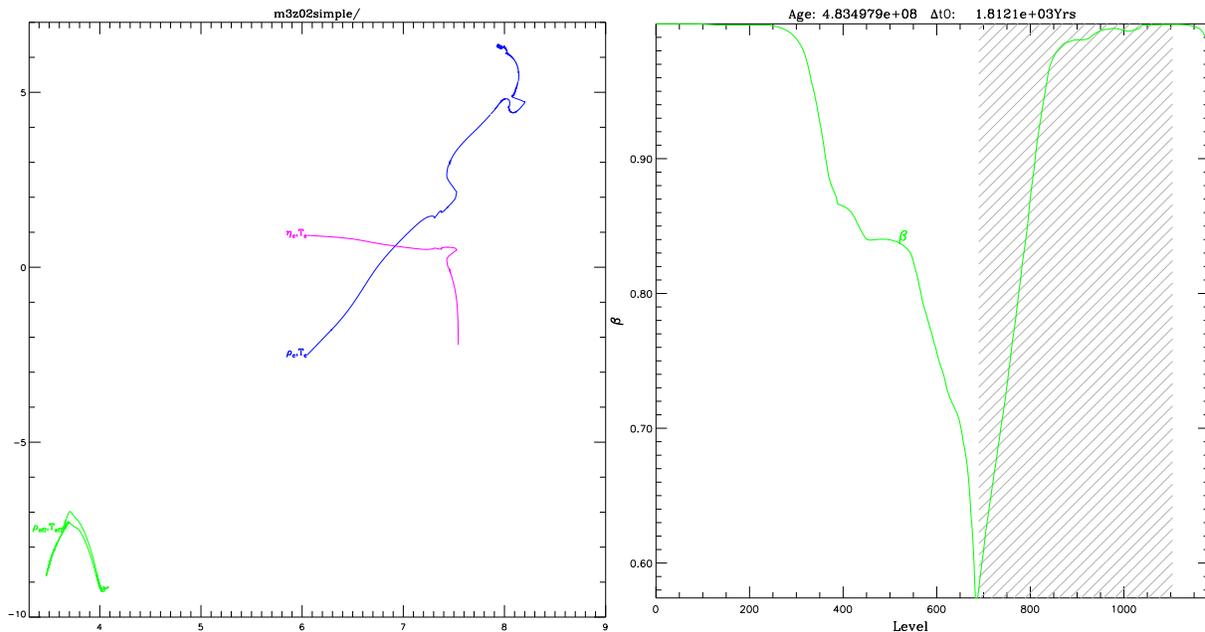


FIG. 2.3 – Conditions thermodynamiques dans une étoile de l'AGB de 3 masses solaires.

- La *stabilité* est un autre élément à prendre en compte:

$$\left. \frac{\partial P}{\partial V} \right|_T < 0 \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_V > 0 \quad (2.28)$$

La première condition assure que si l'on augmente la pression sur le système à température constante, son volume va bien diminuer et non augmenter. De même, la deuxième condition assure bien que si l'on fournit de la chaleur à un système à volume constant, sa température augmente et non l'inverse.

- La *cohérence* demande simplement que des relations analytiques de thermodynamique soient vérifiées par les quantités approximées. Par exemple, il faut avoir cohérence entre la description microscopique du plasma incluse dans les fonctions de partition interne à une particule et celle décrivant les interactions entre les particules. Ce point est discuté en détail dans la section suivante. Il faut aussi pouvoir vérifier le fait que les quantités (P, s, u) dérivent d'une seule et même grandeur, l'énergie libre. Ceci impose de vérifier les relations de Maxwell:

$$\left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_V = \left. \frac{\partial s}{\partial V} \right|_T \quad (2.29)$$

2.2.2 Difficultés physiques

Voyons les motivations qui nous ont amené à changer l'équation d'état pour améliorer la modélisation de la phase AGB. Elles peuvent se ranger en deux grandes catégories: l'optimisation du temps de calcul et une meilleure validité de la physique. Expliquons tout d'abord brièvement la façon d'obtenir la dégénérescence du milieu et les états d'ionisation car ces quantités se révéleront être à la base de l'équation d'état que nous avons implanté.

Dégénérescence

Cette quantité peut se calculer pour toutes les espèces élémentaires du plasma qui sont des fermions. Elle indique en quelque sorte le taux de remplissage des états quantiques dispo-

nibles. Dire par exemple que "l'Hydrogène est dégénéré" signifie que tous les états de basse énergie de l'Hydrogène sont occupés. Si l'on veut rajouter une particule dans le plasma, il va falloir lui communiquer une très grande énergie pour aller peupler des états supérieurs. Une "pression" est associée à cette dégénérescence puisqu'elle est capable de bloquer un processus de peuplement de l'Hydrogène (ionisation, réactions nucléaires, ...) qui ne serait pas assez énergétique. Il est donc important de savoir en tenir compte pour adopter une relation $P(\rho, T)$ adaptée (Cox & Giuli 1984). La dégénérescence peut se quantifier comme suit:

$$\theta_x = \frac{n_x}{n_{Q_x}} \quad \text{avec} \quad n_{Q_x} = \left(\frac{2\pi m_x kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (2.30)$$

où n_{Q_x} est la densité quantique, c'est-à-dire la densité numérique résultant du peuplement total des niveaux disponibles à une température T . Ce rapport varie entre 0 (pas d'espèce x du tout) et 1 (espèce x complètement dégénérée). D'après ce critère, l'espèce élémentaire qui "dégénère" la plus facilement est celle de masse la plus faible, c'est-à-dire les électrons. La densité numérique de fermions en fonction du nombre d'états occupés s'obtient par une méthode statistique dans l'espace des phases:

$$d\text{Nb}_e(p) = 2f(p)g(p)dp \quad (2.31)$$

où

$$g(p) = \frac{d\text{Nb}}{dp} = 4\pi p^2 \frac{V}{h^3} \quad (2.32)$$

$$f(p) = \left(e^{\beta E(p) \pm \eta_e} + 1 \right)^{\pm 1} \quad (2.33)$$

sont respectivement la densité d'états dans l'espace des phases et la probabilité d'occupation d'un état d'impulsion p par des fermions en fonction de la température et de leur paramètre de dégénérescence. Ce dernier est lui-même défini par

$$\eta_x \stackrel{\text{def}}{=} \pi_x \cdot \beta \quad (2.34)$$

pour une espèce x avec $\beta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{kT}$, π_x étant le potentiel chimique défini par

$$\pi_x \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial f}{\partial N_x} \right|_{\rho, T} \quad (2.35)$$

Ce rapport sans dimension compare l'énergie libre d'une particule x à son énergie cinétique moyenne après thermalisation. On obtient pour les électrons:

$$n_e = \frac{8\pi}{h^3} \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{e^{\beta E(p) \pm \eta_e} + 1} \quad (2.36)$$

On adimensionne ensuite n_e en utilisant la relation relativiste liant p et l'énergie cinétique et les quantités qui suivent:

$$E(p) = \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4} \pm m_e c^2 \quad (2.37)$$

$$T^* = \frac{kT}{m_e c^2} \quad (2.38)$$

$$p^* = \frac{p}{m_e c} \quad (2.39)$$

$$E^* = \frac{E}{m_e c^2} \quad (2.40)$$

On a donc finalement:

$$n_e = \frac{8\pi}{\lambda_c^3} I_{n_e} \quad (2.41)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c}, \text{ longueur d'onde de Compton} \quad (2.42)$$

$$I_{n_e} = \int_0^\infty \frac{(p^*)^2 dp^*}{e^{\frac{E^*}{p^*} \perp \eta_e} + 1} \quad (2.43)$$

$$(p^*)^2 = (E^*)^2 + 2E^* \quad (2.44)$$

Dans l'ancienne version du code de Grenoble où ρ est une entrée de l'équation d'état, c'est cette intégrale, I_{n_e} , qui doit être inversée pour obtenir η_e , le degré de dégénérescence du milieu, connaissant T et n_e . Les trois inconvénients majeurs du traitement de la dégénérescence peuvent maintenant être cités:

- L'utilisation d'une relation $P(\rho, T)$ spécifique aux milieux totalement non dégénéré puis d'une autre en milieu totalement dégénéré pour prendre en compte la pression de dégénérescence impose un *critère* pour passer d'une relation à l'autre. Ce traitement est peu satisfaisant. En outre, cette discontinuité peut poser des problèmes de convergence dans l'étoile, à l'endroit où elle a lieu.
- Le calcul d'une équation d'état en milieu partiellement dégénéré n'étant pas fait, les propriétés thermodynamiques sont nécessairement fortement approximées dans de telles régions, alors qu'elles correspondent pourtant aux conditions réelles au sein des étoiles de l'AGB.
- L'inversion de la relation II-2.41 demande une procédure numérique très coûteuse en temps de calcul.

La quantité n_e nécessaire à l'inversion est obtenu par le calcul de l'ionisation.

L'ionisation

Le calcul de l'ionisation s'effectue sur base des équations de Saha (Kippenhahn & Weigert 1990) qui donnent les rapports d'abondances de l'ion $X^{(i+1)+}$ par rapport à l'ion X^{i+} :

$$\frac{n_{X^{(i+1)+}}}{n_{X^{i+}}} n_e = 2 \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} \frac{\omega_{X^{(i+1)+}}}{\omega_{X^{i+}}} e^{\perp \chi_{X^{i+}}/kT} \quad (2.45)$$

Dans cette équation, $\chi_{X^{i+}}$ est le potentiel d'ionisation de X^{i+} et le gaz d'électrons est considéré comme non dégénéré (pour plus de détail, voir la section II-2.6.1). ω a été choisi pour représenter la fonction de partition *interne*. Les difficultés d'implémentation peuvent maintenant être décrites:

- Cette relation n'étant pas valable pour les milieux où les électrons sont dégénérés, on ne pouvait pas l'utiliser dans les zones où l'on prend une relation $P(\rho, T)$ dégénérée. Ces zones, correspondant au coeur d'une étoile de l'AGB par exemple, sont des zones où de toutes façons les éléments sont totalement ionisés. Comme un critère sert alors à déclarer artificiellement le milieu complètement ionisé, il existe des zones de transitions où l'ionisation partielle est mal suivie. De plus, cela peut induire des difficultés de convergence dans l'étoile aux endroits où ce critère s'applique pour la première fois.

- Le suivi des ions de l'Hydrogène de l'Helium et des éléments C,N,O impose la résolution de 28 équations du type de II–2.45, complétées par une équation de conservation de la charge pour obtenir les 28 rapports d'ionisation et la densité numérique d'électrons. Ces équations fortement non linéaires sont résolues par une méthode Newton-Raphson qui coûte beaucoup en temps de calcul.

Remarquons enfin que la forte densité numérique d'électrons dans un coeur d'étoile comme le Soleil à $7.5 \cdot 10^9 \text{ans}$ où l'on a $T = 1.78 \cdot 10^9 \text{K}$ et $n_e = 8.73 \cdot 10^{25} \text{cm}^{-3}$ ne permet pas d'ioniser totalement l'Hydrogène lorsqu'on utilise l'équation de Saha II–2.45. En effet, le rapport d'ionisation $n_{\text{H}^+}/n_{\text{H}}$ vaut seulement environ 2.08! Effectivement, dans ce domaine de densité, l'ionisation n'est pas radiative mais collisionnelle. Si l'on souhaite pouvoir décrire plus profondément dans l'étoile un milieu partiellement ionisé, on devra prendre en compte l'ionisation par pression, puisque c'est elle qui permet d'ioniser la matière dans ces régions. Tenir compte de ces effets d'interactions revient à dire que le gaz n'est plus parfait. On se référera donc à ce terme d'ionisation par pression comme un terme "non parfait" ou "non idéal".

Energie gravothermale

Enfin, la quantité ϵ_{grav} a fait l'objet d'une controverse concernant la cohérence de son écriture (Wood 1981). La question étant de savoir si la relation II–1.9 comprenaient ou non une variation due aux abondances. Cette question est d'importance lorsque l'on arrive au dredge-up car à ce moment là, la convection va faire *remonter* des éléments plus lourds que ceux du milieu ambiant en pénétrant les anciennes couches de combustion du pulse thermique. Cela implique donc un travail contre la gravité qui est du strictement aux variations d'abondances et qui doit être pris en compte dans le bilan énergétique de l'étoile à travers ϵ_{grav} . C'est une autre difficulté qu'il nous faudra surmonter avec la nouvelle équation d'état. Une autre question à résoudre sera de savoir si les trois écritures possibles pour ϵ_{grav} , II–1.10, II–1.11 et II–1.12 sont équivalentes numériquement ou pas. En effet, les difficultés peuvent ne pas être liées seulement à des problèmes physiques mais aussi à des problèmes d'implémentation.

2.2.3 Difficultés numériques

Tout d'abord, les dérivées des quantités thermodynamiques incluses dans les équations de la structure et de l'évolution stellaire sont calculées numériquement. C'est-à-dire que l'on effectue au moins 3 fois le calcul de l'équation d'état. La première en entrant (ρ, T) permet d'obtenir les grandeurs thermodynamiques. La deuxième est faite avec le couple $(\rho + d\rho, T)$ et l'on évalue les variations des quantités thermodynamiques par rapport au premier passage pour calculer leurs dérivées par rapport à ρ . Le dernier calcul est fait pour obtenir, de la même façon, les dérivées par rapports à T . Cette démarche a deux inconvénients: elle multiplie le temps passé dans l'équation d'état par 3 et elle ne donne pas des dérivées très performantes et stables pour la méthode Newton-Raphson (voir la section II–1.3.1).

Le fait d'utiliser comme équation d'état des raccords de relations $P(\rho, T)$ et $u(\rho, T)$ variables dans différents domaines du plan (ρ, T) suivant les conditions de dégénérescence ou de corrélation du gaz, n'assure pas la cohérence physique de l'équation d'état et peut donc générer des couple (P, u) non physiques (voir section II–2.2).

2.3 Choix pour la nouvelle équation d'état

Conscients des difficultés présentes dans l'ancienne équation d'état, les choix que nous avons effectués pour le code de Grenoble lors de sa révision pour le calcul d'étoiles de l'AGB sont les suivants:

2.3.1 Choix physiques

Une approche chimique a été choisie car elle est plus facilement paramétrable, ce qui permet de mieux adapter le code à des phases spécifiques sans trop ni complexifier ni allonger les calculs. Les différents points suivants permettront d'atteindre l'objectif de "validité" demandé à la section II-2.2.

Nous avons décidé de prendre comme "espèces élémentaires" obligatoirement les états liés suivants de l'Hydrogène: (H, H⁺, H⁻, H₂) auxquels on ajoute (e⁻, γ), toujours présents dans le plasma. La molécule de di-hydrogène est importante compte tenu des conditions de surface des étoiles de l'AGB et donc aussi des étoiles de la phase pré-séquence-principale (PMS, autre thématique d'évolution stellaire au laboratoire). L'ion négatif de l'hydrogène est suivi car il est sensible à la dégénérescence du milieu et il est une des sources majoritaires d'opacité dans l'atmosphère du Soleil par exemple (voir Kippenhahn & Weigert (1990) par exemple). Or on aimerait avoir une plus grande cohérence entre le calcul des opacités et l'équation d'état utilisée.

Les états d'ionisation des autres espèces nucléaires suivies sont *tous calculables* (de l'Helium au Chlore) de façon paramétrée. En effet, à la phase AGB, des éléments lourds tels que le Néon, les éléments C,N,O ont des abondances pouvant devenir très importantes, notamment dans les régions de brûlage nucléaire où se déroulent les pulses thermiques. Le suivi de leur ionisation modifiant le nombre d'électrons dans le plasma, le poids moléculaire moyen change et les propriétés structurales aussi (pour le gaz parfait, $P = \frac{\rho RT}{\mu}$ par exemple). Les régions du pulse thermique étant instables, de petits effets peuvent avoir de lourdes conséquences. La suppression des transitions d'ionisation permettra de supprimer une des coupures "physiques" de l'ancienne équation d'état. La méthode implémentée devra par contre réaliser un compromis entre calculs complets et rapidité de calcul car la croissance du nombre d'ions à calculer avec le numéro atomique est une factorielle!

Une autre coupure "physique" de l'ancien calcul concernait la dégénérescence électronique alors même que cette grandeur joue un rôle important pour l'évacuation de l'énergie produite par les pulses thermiques. En effet, un milieu dégénéré est fortement conducteur et favorise donc l'évacuation de l'énergie. Mais surtout, la base des pulses est partiellement dégénérée, ce qui les rend très sensibles. Notre souhait est donc de pouvoir suivre la dégénérescence électronique du milieu, comme la figure II-2.2 nous y engage. Par contre les autres fermions (ions, atomes, molécules) présents dans le plasma sont supposés n'être *jamais dégénérés*. En pratique, ces cas extrêmes ne se rencontrent jamais dans les intérieurs stellaires jusqu'à la phase AGB.

Un changement de variable très astucieux dans l'énergie libre présenté par Pols *et al.* (1995) permet à la fois le calcul d'un milieu toujours partiellement dégénéré de façon fiable pour les électrons et celui d'un milieu toujours partiellement ionisé de manière rapide. Il a

donc été adopté et sera présenté à la section II-2.66.

De plus, toutes les quantités (y compris celles nécessaires à la convergence) et la minimisation de f seront calculés *analytiquement* de manière à économiser du temps de calcul. Par ailleurs, les dérivées Newton-Raphson seront alors plus complètes et plus stables et guideront mieux la convergence.

Les effets non-idéaux pris en compte seront les effets d'écrantage de Coulomb et l'ionisation par pression. Le premier effet correspond à un abaissement de la charge effective des noyaux à cause de la présence d'électrons libres autour. Le deuxième décrit l'ionisation collisionnelle. La figure II-2.2 montre que la modélisation de ces deux effets est à prendre en compte pour les étoiles de l'AGB .

2.3.2 Validité de la méthode

Nous avons choisi de travailler dans l'ensemble canonique pour les ions, atomes et molécules puisqu'ils sont considérés non-dégénérés et de minimiser leur énergie libre pour obtenir leurs abondances d'équilibre. Cette technique assure forcément la vérification des relations de Maxwell (voir section II-2.2) quel que soit le modèle physique qui sous-tend l'énergie libre. Les électrons et les photons seront traités dans l'ensemble grand-canonique, notamment pour pouvoir suivre la dégénérescence électronique.

Approximations

La méthode de minimisation, moyennant quelques hypothèses résumées ci-dessous (Fontaine *et al.* 1977) pour passer du hamiltonien à l'énergie libre, permet d'avoir une expression facilement modulable et donc évolutive pour cette dernière. Le hamiltonien général utilisée est de la forme:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{h}^{conf} + \sum_{i=1}^{N_{tot}} (\hat{h}_i^{trans} + \hat{h}_i^{int}) \quad (2.46)$$

où l'on a séparé les contributions translationnelles, de configuration et interne (voir section II-2.1.2). Les hypothèses successives qui sont faites pour obtenir f sont les suivantes:

- La somme discrète (trace) définissant la fonction de partition quantique est approximée par une fonction de partition quasi-classique en remplaçant la sommation sur des états quantiques supposés très denses par une intégrale dans l'espace des phases des N_{tot} particules. Ainsi, l'équation II-2.11 devient-elle:

$$Z = \int g(p_i, r_i) \cdot \left(\prod_{i=1}^{N_{tot}} e^{\perp \beta h_i^{trans}} \right) \cdot \left(\prod_{i=1}^{N_{tot}} \sum_q e^{\perp \beta h_{i,q}^{int}} \right) \cdot e^{\perp \beta h^{conf}} \left(\prod_{i=1}^{N_{tot}} dp_i dr_i \right) \quad (2.47)$$

La sommation sur q est une somme sur tous les nombre quantiques associés au niveau d'énergie interne E_i qui peut être dégénéré.

- Les termes d'énergie potentielle sont supposés ne pas dépendre des vitesses. La fonction de partition purement translationnelle est donc factorisable. On obtient:

$$Z = \left[\int_0^\infty \prod_{i=1}^{N_{tot}} \left(e^{\perp \beta h_i^{trans}} dp_i \right) \right] \left[\int_0^\infty \prod_{i=1}^{N_{tot}} \left(\sum_q e^{\perp \beta h_{i,q}^{int}} \right) e^{\perp \beta E^{conf}} \prod_{i=1}^{N_{tot}} dr_i \right] \quad (2.48)$$

- On approche le terme de configuration qui est un terme d'interaction à N_{tot} corps par des sommes d'interactions à deux corps.
- On suppose que le terme d'interactions internes aux espèces élémentaires ne dépend pas de la position de ces espèces. Ceci permet de factoriser le terme "interne".
- De plus les N_ξ particules de chaque espèce élémentaire sont supposées indiscernables. On transforme donc le produit de N_{tot} particules en Ξ produits de N_ξ espèces élémentaires identiques.

Une réécriture simple de la fonction de partition donne:

$$Z = Z^{conf} \prod_{\xi=1}^{\Xi} \left(\frac{1}{N_\xi!} Z_\xi^{trans} Z_\xi^{int} \right) \quad (2.49)$$

avec les différentes contributions suivantes:

$$Z_\xi^{trans} = (z_\xi^{trans})^{N_\xi} \quad \text{et} \quad z_\xi^{trans} = \int_0^\infty g(p_\xi) \exp(\pm \beta \hat{h}_\xi^{trans}) dp_\xi \quad (2.50)$$

$$Z_\xi^{int} = (z_\xi^{int})^{N_\xi} \quad \text{et} \quad z_\xi^{int} = \sum_q g(E_\xi) e^{\pm \beta \hat{h}_{\xi,q}^{int}} \quad (2.51)$$

$$Z^{conf} = \int_0^\infty \exp \left(\pm \beta \sum_{k < j}^{N_{tot}} u(r_k, r_j) \right) \prod_{i=1}^{N_{tot}} dr_i \quad (2.52)$$

Cohérence

En utilisant la définition de f (équation II-2.8), on obtient effectivement une forme "agréable" pour f :

$$f = f^{conf} + f^{parfait} \quad (2.53)$$

$$\text{où } f^{parfait} = \sum_{\substack{\text{ions} \\ \gamma, e^\pm}} (f_\xi^{trans} + f_\xi^{int}) \quad (2.54)$$

De nombreuses remarques doivent cependant être faites sur cette expression concernant les critères de "validité" et de "cohérence" établis à la section II-2.2.

- Le terme de configuration est encore appelé terme "non-parfait" car il contient les interactions entre les différentes espèces élémentaires. Or c'est l'absence de ces dernières qui définit le "gaz parfait".
- Les états d'énergie d'une espèce élémentaire libre sont en nombre infini. Le terme Z_ξ^{int} diverge et donc f_ξ^{int} diverge aussi. En fait, la prise en compte des interactions avec les particules environnantes ne modifie pas seulement la dynamique du gaz mais aussi la structure interne de ses constituants. Une molécule CO par exemple étant polarisée, elle crée un potentiel dans lequel les électrons d'un atome d'Hélium sont plongés. Les niveaux d'énergie de ceux-ci seront donc décalés par la présence de cette molécule par rapport à leurs positions lorsque l'atome est isolé. Ainsi, au fur et à mesure que l'interaction croît, les états liés de l'Hélium iront jusqu'à prendre une énergie positive, en conséquence de quoi la fonction de partition interne de cette espèce élémentaire sera naturellement tronquée. Elle ne diverge plus et peut être utilisée. Notons que les potentiels décrits dans le terme de configuration et le terme interne pour rendre la

fonction de partition associée convergente doivent évidemment être cohérents l'un avec l'autre (des exemples sont donnés dans Graboske *et al.* (1969)).

- Compte tenu de l'influence du potentiel externe sur les niveaux d'énergies internes, l'approximation faite plus haut qui consiste à supposer le hamiltonien "interne" indépendant de la position des particules, n'est justifiée que si le potentiel externe perturbe faiblement les niveaux d'énergie par rapport à leur valeur de départ. Cette approximation n'est donc plus valide à haute densité où les interactions sont fortes. Dans ces conditions d'ailleurs, la description du potentiel externe par une somme de potentiels à deux corps n'est plus valide non plus. *Cependant, cette situation peut être surmontée par l'utilisation de potentiels à deux corps "effectifs", ajustés sur des potentiels expérimentaux ou des équation d'état plus complètes (Saumon et al. 1999)* C'est cette méthode qui a été utilisée pour construire les termes non-parfait de la nouvelle équation d'état. Reste ensuite à rendre cohérent ce nouveau potentiel extérieur avec les potentiels internes utilisés, c'est-à-dire à en tirer les conséquences pour tronquer la fonction de partition interne. Ce point sera abordé dans la section suivante.
- Les seuls degrés de liberté internes considérés ici seront les degrés de liberté électroniques, exception faite de l'espèce élémentaire H_2 pour laquelle rotation et vibration sont pris en compte. Nous utiliserons donc pour la fonction de partition interne:

$$z^{int} = z^{elec} \cdot z^{rot} \cdot z^{vib} \quad (2.55)$$

où z^{elec} est souvent décomposée pour faire apparaître la fonction de partition électronique "astrophysique", z_a^{elec} . Ainsi la partie électronique est souvent approximée par son terme d'ordre zéro (choix fait par défaut dans cette équation d'état):

$$z^{elec} = g^0 e^{\perp \beta E^0} z^a \quad (2.56)$$

$$avec \quad z^a = 1 + \sum_{i>0} \frac{g^i}{g^0} e^{\perp \beta (E^i \perp E^0)} \quad (2.57)$$

Pour les ions de l'Hydrogène et de l'Hélium, les fonctions de partition de Irwin (1981) et Irwin (1987) sont utilisées dans le code. Leurs formes polynomiales les rend très facilement incorporables, notamment pour calculer leur dérivées par rapport à la température.

2.3.3 La minimisation

Graboske *et al.* (1969) fournissent la méthode à mettre en oeuvre:

- Ecrire l'énergie libre en fonction de T et ρ , les N_ξ étant fixés.
- Résoudre un système de j équations découlant des conditions:

$$df_j = \sum_i \left. \frac{\partial f}{\partial N_i} \right|_{T,\rho} dN_i = 0 \quad (2.58)$$

$$\sum_i \nu_{ij} dN_i = 0 \quad (2.59)$$

pour les j réactions de coefficients stœeckométriques ν_{ij} se déroulant dans le plasma. On obtient alors les abondances d'équilibre.

- Les quantités thermodynamiques de base peuvent alors être calculées par les relations II-2.9.

Hummer & Mihalas (1988) donnent dans ce schéma de minimisation une façon de quantifier la cohérence des potentiels externes et internes discutée précédemment. En effet, pour un gaz parfait ($f^{conf} = 0$) d'une seule espèce, on obtient après minimisation :

$$E_i + kT[1 + \ln(N_i)] = \text{constante} \quad \text{soit} \quad N_i = g_i e^{\perp\beta E_i} \quad (2.60)$$

Si l'on incorpore un terme de configuration dans l'énergie libre l'équation est modifiée de la façon suivante :

$$E_i + \left. \frac{\partial f}{\partial N_i} \right|_{T,\rho} + kT[1 + \ln(N_i)] = \text{constante} \quad \text{soit} \quad N_i = g_i e^{\perp\beta \left(E_i + \left. \frac{\partial f}{\partial N_i} \right|_{T,\rho} \right)} \quad (2.61)$$

Dans ce cadre, la fonction de partition associée peut se visualiser de façons différentes :

$$Z^{int} = \sum_i g_i e^{\perp\beta \left(E_i + \left. \frac{\partial f}{\partial N_i} \right|_{T,\rho} \right)} \quad (2.62)$$

$$\text{ou} \quad Z^{int} = \sum_i h_i e^{\perp\beta E_i} \quad \text{avec} \quad h_i = g_i e^{\perp\beta \left. \frac{\partial f}{\partial N_i} \right|_{T,\rho}} \quad (2.63)$$

La première équation exprime le décalage des niveaux d'énergie du aux effets non-idéaux alors que la deuxième considère que c'est le poids statistique de l'état qui est modifié. Si l'on recalcule l'énergie libre à partir de l'expression II-2.62 pour la fonction de partition interne, on s'aperçoit que le terme de configuration dans l'énergie libre doit aussi être corrigé :

$$(f')^{conf} = f^{conf} \perp \sum_i \left. \frac{\partial f^{conf}}{\partial \ln N_i} \right|_{T,\rho} \quad (2.64)$$

Cette méthode qui rend cohérents les termes d'interaction interne et externe s'appelle la méthode des probabilités d'occupation parce que l'on considère que ce sont les poids statistiques qui doivent être modifiés.

2.4 Le changement de variable

La nouvelle équation d'état utilisée repose sur la mise en oeuvre d'un changement de variable initialement présenté par Pols *et al.* (1995). Le but de cette section est d'en donner une description et une justification physique.

2.4.1 L'idée et sa mise en oeuvre

Idée générale

L'idée principale de ce changement de variable est la nécessité de bien décrire la dégénérescence. *Pourrait-on remplacer la variable d'état ρ , contrainte par le processus Newton-Raphson du code, par une variable décrivant la dégénérescence ?* Pour solutionner cette question, il faut examiner l'énergie libre qui nous permet d'extraire toute la thermodynamique du plasma et voir si la donnée d'un autre couple que (ρ, T) permet de la calculer. En introduisant dans

la relation II-2.25 les définitions de f (équation II-2.8) et de la dégénérescence (équation II-2.34), on a alors:

$$f = kT \sum_{\xi=1}^{\Xi} \eta_{\xi} N_{\xi} \pm \frac{P}{\rho} \quad (2.65)$$

Les paramètres de dégénérescence apparaissent directement dans l'énergie libre. En particulier, on peut écrire $f(\eta_e, T)$ plutôt que $f(\rho, T)$, à condition de trouver le changement de variable $\rho(\eta_e, T)$. Comme on utilise le paramètre de dégénérescence *électronique*, on est tenté, pour trouver ce changement de variable, d'écrire:

$$\rho(\eta_e, T) = \frac{uma \cdot n_e(\eta_e, T)}{\alpha_e(\eta_e, T, y_x)} \quad (2.66)$$

Précisons les deux facteurs de ce changement de variable.

Le dénominateur

Le dénominateur contient toute la physique de l'ionisation. En effet, la quantité α_e s'obtient successivement par une relation de conservation de la charge, une relation de conservation des espèces nucléaires et l'écriture des équations de Saha généralisées:

$$\alpha_e = \sum_{X=1}^{\Xi} \sum_{q=0}^{Z_X} q \alpha_{X^{q+}} \quad (2.67)$$

$$y_x = \sum_{q=0}^{Z_X} \alpha_{X^{q+}} \quad (2.68)$$

$$\frac{\alpha_{X^{(q+1)+}}}{\alpha_{X^{q+}}} = \frac{Z_{X^{(q+1)+}}}{Z_{X^{q+}}} \exp(\pm \eta_e \pm \beta \chi_{X^{q+}}) \quad (2.69)$$

L'écriture de ces équations sera justifiée et détaillée à la section II-2.6.1.

Le numérateur

Le numérateur contient toute la physique du gaz d'électrons dégénérés. L'équation II-2.41 définit le numérateur de II-2.66 sous la forme d'une intégrale de η_e et T . C'est cette intégrale qui a donné naissance aux intégrales de Fermi-Dirac généralisées. En effet, ces dernières sont définies par

$$I_k(\eta, \gamma) = \int_0^{\infty} \sqrt{1 + \frac{x\gamma}{2}} \left(\frac{x^k}{e^{x \pm \eta} + 1} \right) dx \quad \text{où } k > 1 \quad (2.70)$$

En posant $E^*/T^* = x$ et en faisant le changement de variable $p^* \rightarrow x$, qui mène à $dp^* = \frac{\gamma x + 1}{\sqrt{\gamma x + 2}} \sqrt{\frac{2}{x}} dx$, on obtient après quelques manipulations:

$$I_{n_e} = \sqrt{2} \gamma^{3/2} [I_{1/2}(\eta_e, T^*) + \gamma I_{3/2}(\eta_e, T^*)] \quad (2.71)$$

Ecartant l'intégration numérique de ces quantités à chaque pas de temps et pour chaque couches pour économiser le temps de calcul, celles-ci peuvent être calculées par deux autres méthodes:

- Soit par une interpolation bilinéaire dans une table de valeurs des intégrales de Fermi-Dirac calculées auparavant et une fois pour toute. Cette méthode est incluse dans le

code. Elle a le mérite de pouvoir être très précise mais cela demande alors une table assez resserrée et donc gigantesque. De plus, il peut toujours y avoir des sorties de la table. Dans ce cas là, on utilise la deuxième méthode et des difficultés de convergence peuvent apparaître à l'endroit dans l'étoile où le changement de méthode s'effectue.

- Soit par des ajustements analytiques des intégrales I_{n_e} directement. C'est la méthode présentée par Eggleton *et al.* (1973). Elle est basée sur une analyse du comportement de cette intégrale dans les régimes asymptotiques faite par Chandrasekhar en 1939. On a

$$I_{n_e} \sim (T^*)^{3/2} e^{\eta_e} \sum_{ij} a_{ij} e^{i\eta_e} (T^*)^j \quad \eta_e \ll \pm 1, \quad T^* \ll 1 \quad (2.72)$$

$$I_{n_e} \sim (T^*)^3 e^{\eta_e} \sum_{ij} b_{ij} e^{i\eta_e} (T^*)^{\pm j} \quad \eta_e \ll \pm 1, \quad T^* \gg 1 \quad (2.73)$$

$$I_{n_e} \sim (T^* \eta_e)^{3/2} \sum_{ij} c_{ij} \eta_e^{\pm 2i} (T^* \eta_e)^j \quad \eta_e \gg 1, \quad T^* \ll 1 \quad (2.74)$$

$$I_{n_e} \sim (T^* \eta_e)^3 \sum_{ij} d_{ij} \eta_e^{\pm 2i} (T^* \eta_e)^{\pm j} \quad \eta_e \gg 1, \quad T^* \gg 1 \quad (2.75)$$

Ces développements sont des polynômes de deux variables prises parmi e^{η_e} , $T^{\pm 1}$, $\eta_e^{\pm 1}$ et $T\eta_e^{\pm 1}$. L'idée est donc de réécrire ces développements en utilisant deux variables f et g fonctions de η_e et T qui auraient des développements asymptotiques similaires mais en une seule variable à la fois. Dans ce cas, les développements présentés en II-2.72 deviennent alors simplement des polynômes en f et g . On construit alors un polynôme général en (f, g) de degré (d_f, d_g) quelconque mais qui a les mêmes comportements asymptotiques que I_{n_e} . Les coefficients du polynômes serviront "seulement" à ajuster celui-ci pour qu'il colle à I_{n_e} non plus seulement sur les cas limites mais sur le plus grand domaine (η_e, T) possible avec une bonne précision. Suivant Eggleton *et al.* (1973), nous prenons:

$$I_{n_e} = \frac{f}{(1+f)^{d_f+1}} \frac{g^{3/2}}{(1+g)^{d_g \pm 3/2}} \sum_{i=0}^{d_f} \sum_{j=0}^{d_g} n_{ij} f^i g^j \quad (2.76)$$

$$g = T^* \sqrt{1+f} \quad (2.77)$$

$$\frac{d\eta_e}{d \ln f} = \sqrt{1+f} \quad (2.78)$$

Cette méthode, utilisée par défaut dans la nouvelle équation d'état a le mérite d'être commode d'utilisation pour calculer les dérivées (jusqu'à l'ordre 3!) de n_e en fonction de (f, g) , puisque les fonctions à dériver sont des polynômes. Nous avons utilisé l'ajustement de degré $d_f = d_g = 3$ car il assure une précision de $10^{\pm 3}$ et surtout, il assure une cohérence thermodynamique totale pour les quantités thermodynamiques électroniques (voir Eggleton *et al.* (1973)).

Conclusion

Suite à l'utilisation des ajustements pour le calcul de I_{n_e} dans la nouvelle équation d'état, ce n'est pas η_e qui a été choisi comme variable indépendante mais f . En effet, la solution retenue pour la définition de f , contrainte par l'équation différentielle II-2.76, est:

$$\eta_e = \ln(f) + 2(\sqrt{1+f} \pm \ln(1 + \sqrt{1+f})) \quad (2.79)$$

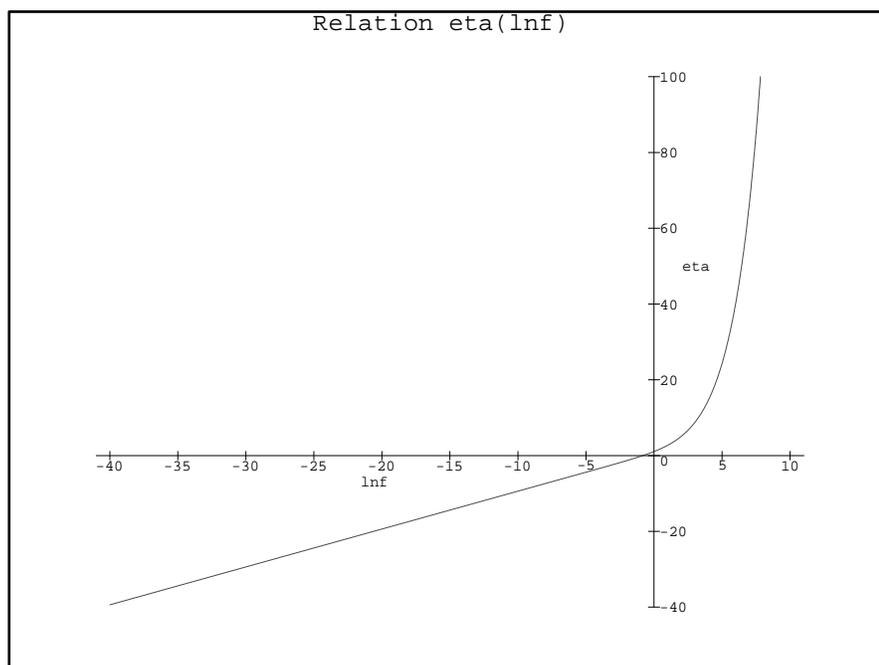


FIG. 2.4 – La nouvelle variable $\ln f$ comme signature de la dégénérescence.

Comme nous sommes intéressés par le calcul de η_e , nous pourrions être tenté de l'utiliser directement pour remplacer ρ . Or les intégrales définissant I_{n_e} , nécessaires au calcul de ρ sont fonctions de f et g . Nous serions donc obligés de procéder à l'inversion de l'équation II-2.79. Cela ferait forcément appel à une méthode de type Newton-Raphson, très coûteuse en temps de calcul. Il vaut donc mieux utiliser f comme variable d'état, sachant que la relation II-2.79 nous donne η_e . Cependant, pour des raisons numériques (voir section II-1.3.3), ce n'est finalement pas f qui sera notre nouvelle variable, mais $\ln(f)$, notée dans toute la suite $\ln f$.

2.4.2 Faisons les présentations

Il est important, avant de calculer avec cette nouvelle variable, de se faire une idée de sa signification. La figure II-2.4 montre $\ln f(\eta_e)$. On remarque globalement que le graphe est monotone et croissant et qu'il passe "presque" par le point origine. Les valeurs négatives de η_e (milieux non dégénérés) correspondront donc aussi à des valeurs négatives de $\ln f$, et inversement $\ln f$ largement au dessus de 0 indiquera un fort η_e , et donc un milieu dégénéré. On peut y ajouter deux valeurs particulières couvrant un large domaine de η_e :

$\eta_e(\ln f = \pm 40.6137) = \pm 40.0000$ pour les faibles valeurs de η_e et

$\eta_e(\ln f = 5.99396) = 40.0000$ pour les milieux dégénérés.

On note aussi que la dépendance pour les valeurs négatives est linéaire alors qu'elle est exponentielle pour les valeurs positives. Ceci peut se confirmer en prenant les limites de l'expression II-2.79. Pour cela, réécrivons II-2.79 comme suit:

$$\eta_e = 2\sqrt{1+f} + \ln\left(\frac{\sqrt{1+f} \pm 1}{\sqrt{1+f} + 1}\right) \quad (2.80)$$

Le passage de cette écriture à celle de II-2.79 se fait en multipliant et en divisant la fraction dans le ln par $\sqrt{1+f} + 1$. On obtient alors:

$$\eta_e = 2\sqrt{f}\sqrt{1+1/f} + \ln\left(\frac{\sqrt{1+1/f} \pm \sqrt{1/f}}{\sqrt{1+1/f} + \sqrt{1/f}}\right) \quad (2.81)$$

On en tire les limites désirées:

$$\lim_{f \rightarrow \infty} (\eta_e) = e^{\frac{1}{2} \ln f + \ln 2} \quad (2.82)$$

$$\lim_{f \rightarrow \pm \infty} (\eta_e \pm \ln f) = 2 \pm 2 \ln 2 \sim 0.6137 \quad (2.83)$$

Donc, à forte dégénérescence, c'est f qui varie comme η_e et à faible dégénérescence, c'est $\ln f$ qui s'identifie à η_e (à un petit écart près). Dans ce dernier cas, la relation de changement de variable $\rho(\ln f)$ peut être simplifiée. Tentons pour cela de trouver une approximation de n_e à faible dégénérescence.

Considérons un *gaz parfait d'électrons* ($f^{conf} = 0, \Xi = 1, N_\xi = N_e$). Les expressions II-2.49 et II-2.11, valables pour un gaz non-dégénéré (voir discussion à la section II-2.1.2), donnent donc pour f la formule suivante:

$$f = kTN_x \left[\ln\left(\frac{N_x}{Z_x^{trans} Z_x^{int}}\right) \pm 1 \right] \quad (2.84)$$

où l'on a utilisé la formule de Stirling F.3. On calcule alors le potentiel chimique des électrons en utilisant la définition II-2.35. D'où:

$$\pi_x = kT \ln\left(\frac{N_x}{Z_x^{trans} Z_x^{int}}\right) \quad (2.85)$$

On utilise ce résultat pour les électrons avec $z_e^{int}=2$ (états de spin). D'autre part, le calcul de l'intégrale définissant la fonction de partition de translation, l'équation II-2.50, dans laquelle on inclue la relation II-2.32 donne

$$Z_x^{trans} = v n_{Q_x} \quad (2.86)$$

la relation II-2.30 définissant n_{Q_x} . En introduisant ces fonctions de partition dans II-2.35 et en utilisant la définition II-2.34, on a la relation cherchée:

$$n_e = 2 n_{Q_e} e^{\eta_e} \quad (2.87)$$

Enfin, en remplaçant II-2.83, II-2.87 dans II-2.66, on trouve:

$$\ln f = \ln(\mu_e) + \frac{3}{2} \ln(T) \pm \ln(\rho) \pm \zeta \quad (2.88)$$

avec

$$\zeta = \frac{e^2 u m a}{2} \left(\frac{2\pi m_e k}{h^2}\right)^{3/2} \sim 18.0277 ucgs \sim 11.1199 uSI \quad (2.89)$$

Cette dernière relation est bien plus commode pour se donner une idée du contenu physique de $\ln f$. Retenons de cette relation que la variable $\ln f$ contient l'information relative à l'ionisation, ce qui n'est pas évident a priori pour une variable de dégénérescence.

2.4.3 Résumé du changement de variable

Le changement de variable général $\rho(\ln f, T, y_X)$ est donc défini par l'ensemble des relations suivantes: l'équation II-2.66 dont les deux facteurs sont définis en fonction de η_e , T et y_X par les équations II-2.67 et II-2.41. On doit y adjoindre II-2.79 pour fermer le système.

La figure II-2.5 montre les valeurs de ρ données par cette relation de changement de variable dans le plan (η_e, T) pour une mixture solaire (Grevesse & Sauval 1998) comprenant le suivi de l'ionisation de H, He, C, N, O et Ne.

Ce changement de variable d'état est d'ampleur puisque toutes les dérivées des équations de la structure et de l'évolution des étoiles devront être réécrites non plus en fonction de ρ mais en fonction de $\ln f$. ρ devient une variable "secondaire", issue des valeurs des variables indépendantes $(r, u, l_r, T, \ln f, y_X)$. Les avantages de ce changement sont principalement dans le fait qu'il supprime *tous* les calculs anciennement itératifs, pour la dégénérescence et l'ionisation notamment. En effet, *l'utilisation de $\ln f$ permet de résoudre analytiquement l'ionisation de n'importe laquelle des espèces nucléaires.*

2.5 L'implémentation

Cette section a pour but de préciser toutes les conséquences du changement de variable décrit plus haut et donc de présenter la façon dont l'équation d'état a été implémentée et paramétrée.

2.5.1 Algorithme

Les figures II-2.6 et II-2.7 donne l'organigramme de la nouvelle équation d'état. L'équation d'état doit être initialisée par un appel préliminaire aux calculs avec l'argument `flag=0`. Dans ce cas, les procédures `initpar`, `initcons` et `initnbion` sont effectuées pour initialiser respectivement les paramètres de calcul, les constantes physiques et numériques et les caractéristiques des différents éléments possibles dans le plasma.

Les procédures "EOS_FOD" et "EOS_SOD" sont des répliques l'une de l'autre mais la première calcule les dérivées premières analytiquement (FOD pour First Order Derivatives) alors que la deuxième (SOD pour Second Order Derivatives) calcule aussi les dérivées secondes analytiquement (voir figure II-2.6).

D'autre part, l'équation d'état a été scalarisée pour être optimisée sur les machines utilisées au laboratoire. Aussi, la première chose faite est une grande boucle sur les couches de telle manière à ce que les quantités calculées soient toutes des scalaires (voir figure II-2.7). La reformulation des entrées consiste en un recalcul des entrées sous des formes variées servant dans l'équation d'état. Par exemple, pour la température, on utilise aussi bien T , $\ln(T)$, $kT/M_e c^2$, $1/kT$, $13.6eV/kT$,...

2.5.2 Description des paramètres

Les entrées dont a besoin l'équation d'état sont:

- le nombre d'éléments chimiques présents dans le plasma, `nbz`, et le nombre d'espèces

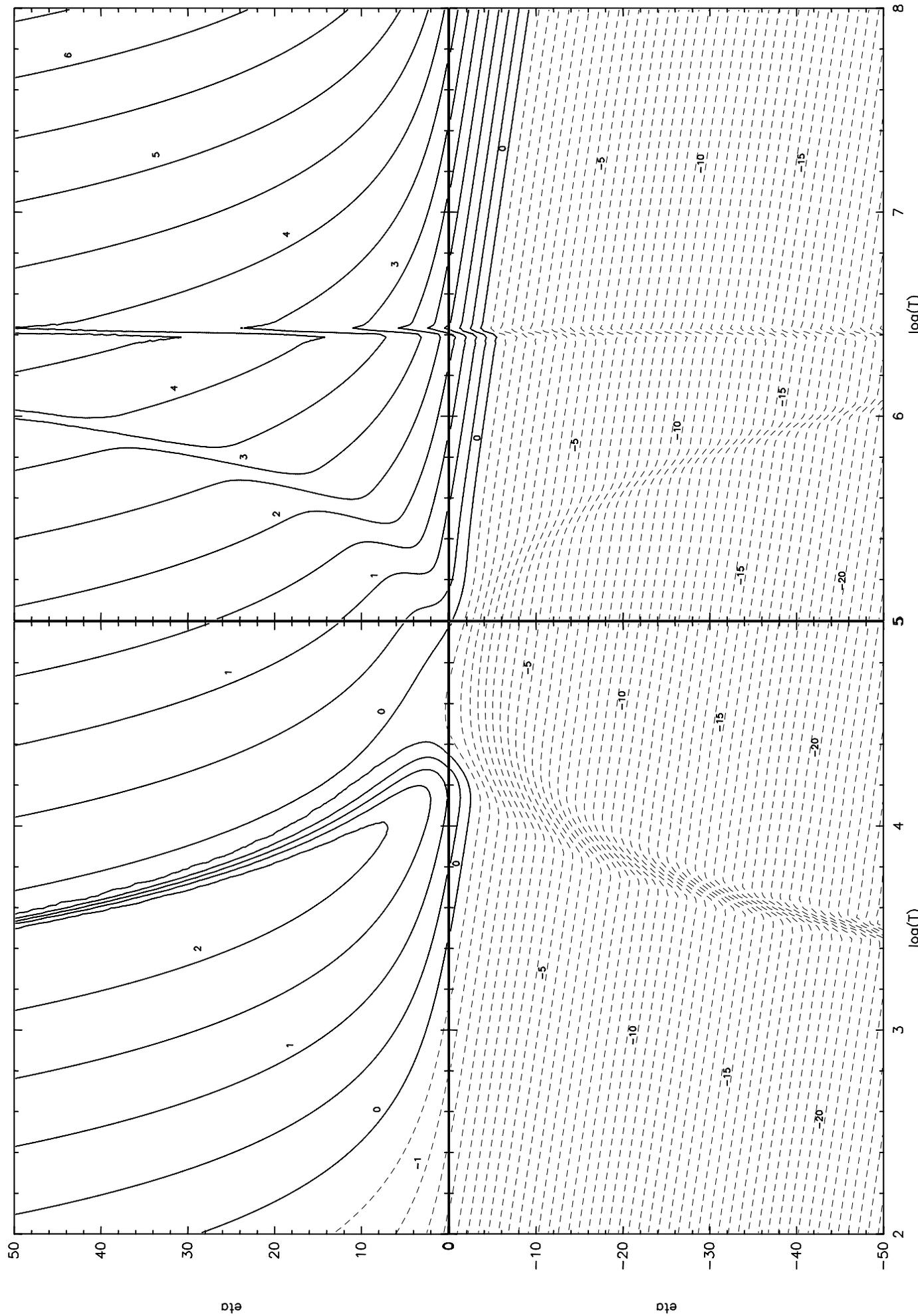


FIG. 2.5 – La masse volumique (en logarithme) dans le plan $(\eta_e, \log(T))$

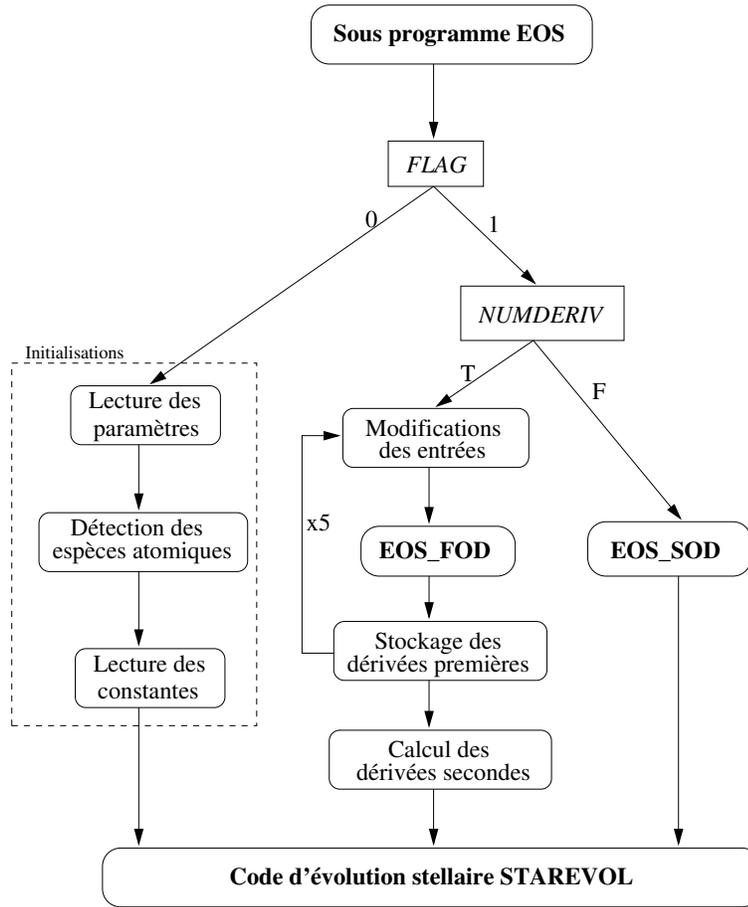


FIG. 2.6 – Organigramme de la nouvelle équation d'état , partie I.

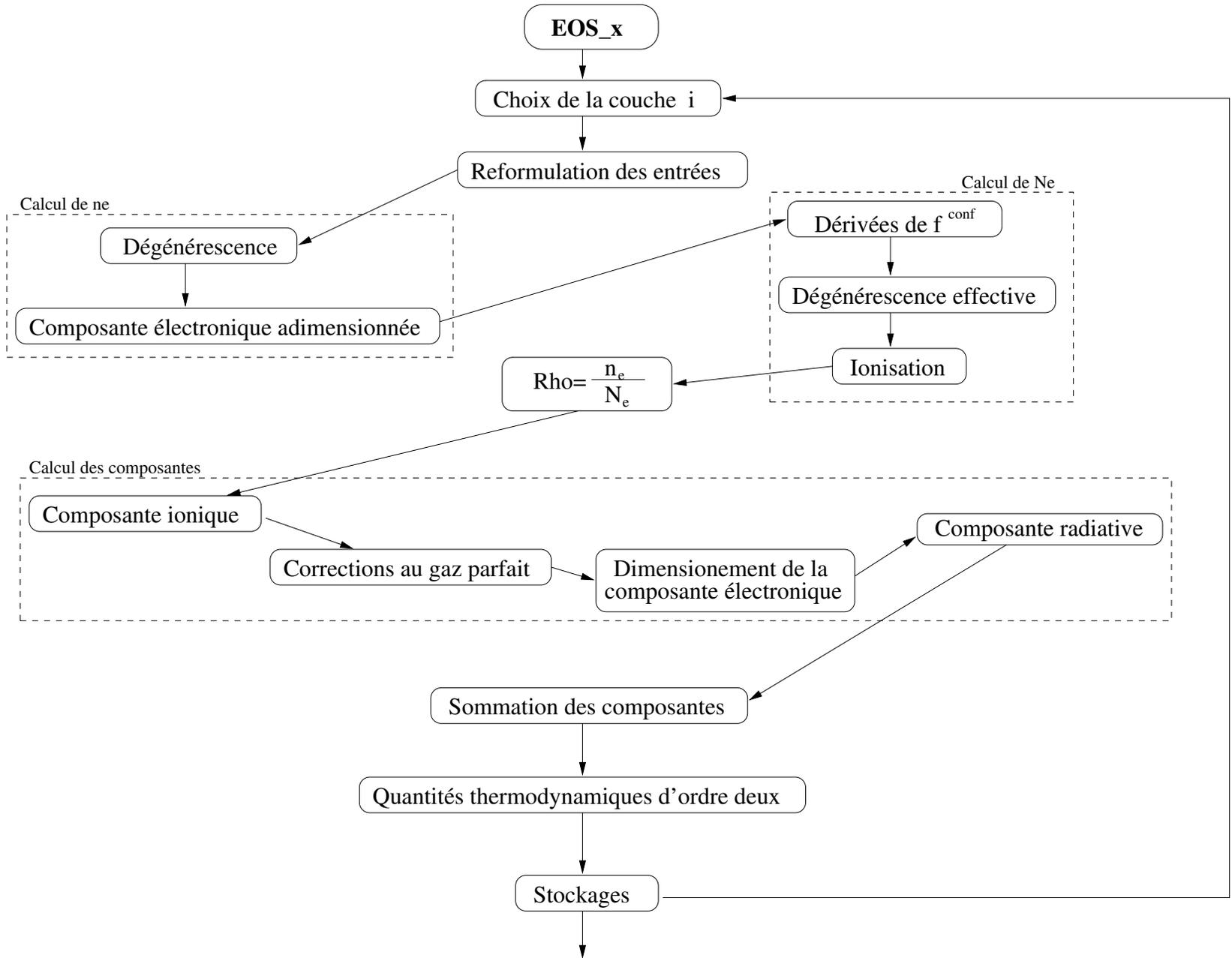
nucléaires suivies, **nsp**. Le maximum est fixé pour le moment à **nbzmax**= 21. Les éléments chimiques sont alors numérotés de 1 à **nbz** avec l'indice *i*.

- le nombre de couches maximum **nsh** et le nombre de couches utilisées dans l'étoile, **nmod**.
- deux tableaux **anuc**(1 ... **nsp**) et **znuc**(1 ... **nsp**) donnant les caractéristiques, numéros et masses atomiques, des **nsp** espèces nucléaires du plasma.
- deux tableaux **xsp**(1 ... **nsh**,1..**nsp**) et **ysp**(1 ... **nsh**,1 ... **nsp**) donnant les fractions massiques et molaires des espèces nucléaires. Ces tableaux seront lus de **nspmin** à **nspmax** seulement. L'Hydrogène doit être en **nspmin** et l'élément "heavy" (voir section II–1.2.1) en **nspmax**.
- les valeurs de la température et de $\ln f$ sous forme de tableaux **T**(1 ... **nsh**) et **lnf**(1 ... **nsh**).
- Les valeurs de certaines constantes physiques ou mathématiques de base données en annexe F.

Le paramétrage de l'équation d'état , basé sur la valeur de booléens, est le suivant:

- Intégrales de Fermi-Dirac :
approxFermiDirac: s'il est "faux" ce booléen enclenche l'utilisation des Fermi-dirac tabulées (voir section II–2.4.1), sinon on utilise des ajustements analytiques polynomiaux d'ordre 4.

FIG. 2.7 – Organigramme de la nouvelle équation d'état , partie II.



– Hydrogène:

compH2: déclenche le calcul de l'espèce H_2 s'il est vrai.

compHm: déclenche le calcul de l'espèce H^- s'il est vrai.

– Ionisation:

totioniz: S'il est vrai ce booléen impose que les éléments dont l'ionisation n'est pas calculée soit considérés comme *partout totalement ionisés*. Dans le cas contraire, ils sont partout totalement neutres.

ionized(1 ... nbzmax): l'ionisation de l'élément $1 < i < nbzmax$ est calculée si ce booléen est vrai. **Tlimioni:** Pour toute couche dans laquelle $T > Tlimioni$, les éléments dont l'ionisation est calculée sont considérés arbitrairement comme totalement ionisés. La possibilité de couper l'ionisation à une certaine température a été conservée pour pouvoir comparer les nouveaux calculs aux anciens et aussi pouvoir estimer l'influence de l'ionisation par pression.

– Effets non-idéaux:

compionpres: s'il est vrai, ce booléen enclenche le calcul de l'ionisation par pression. ATTENTION, ne pas le prendre en compte entraîne des recombinaisons dans les coeurs stellaires (voir section II-2.2.2)!

compcoulshiel: s'il est vrai, ce booléen enclenche le calcul des effets d'écrantage de Coulomb.

fapprocoul: ce booléen maîtrise une approximation sur **lnf**, obligatoirement faite pour le calcul de l'ionisation par pression, mais non nécessaire lors du calcul des effets coulombiens. Si ce booléen est vrai l'approximation est faite pour le calcul de l'écrantage de Coulomb. Sinon, elle n'est pas faite et alors certaines dérivées quatrièmes de grandeurs secondaires sont mises à 0 (voir section II-2.8).

– Fonctions de partition:

ATTENTION, une fonction de partition doit *obligatoirement* être choisie si **compH2** est vraie alors que pour les ions atomiques, si aucuns choix n'est fait, la fonction de partition par défaut est réduite au poids statistique de son niveau fondamental.

vardyaZH2: Utilisation de la fonction de partition de Vardya (1969) pour H_2 s'il vaut "vrai" (et uniquement si **compH2** est vrai).

irwinZH2: Utilisation de la fonction de partition de Irwin (1987) pour H_2 s'il vaut "vrai" (et uniquement si **compH2** est vrai).

compZH0: Utilisation de la fonction de partition de Irwin (1981) non constante pour H et H^+ s'il vaut "vrai".

compZHe: Utilisation de la fonction de partition de Irwin (1981) non constante pour He et tous ses ions s'il vaut "vrai".

compZCNO: Utilisation de fonctions de partition non constantes pour les éléments C,N,O s'il vaut "vrai" (pas encore opérationnel).

– Masses atomiques:

compavmass: Commande le calcul de la masse des éléments chimiques. Si **compavmass** est faux la masse de l'élément $1 < i < nbzmax$ est la masse de l'isotope principal de cet élément chimique. Si **compavmass** est vrai, la masse choisie est une moyenne

sur tous les isotopes, pondérée par leurs abondances:

$$M_x = \frac{\sum_{A_x} X_{A_x}}{\sum_{A_x} Y_{A_x}} \quad (2.90)$$

– Calcul des dérivées Newton-Raphson :

eosderiv: Si ce booléen est vrai, les dérivées Newton-Raphson sont calculées numériquement, sinon elles sont calculées analytiquement.

approxod: Si ce booléen est vrai, certains termes dans le calcul analytique des dérivées Newton-Raphson sont négligés et/ou calculés à partir de l'énergie interne et non du couple (P, s) .

– Impressions en cours de calcul:

checkcomposition: Déclenche l'impression des différentes espèces chimiques détectées et de leurs caractéristiques: numéros atomiques, masses atomiques, . . .

checkparacard: Contrôle l'impression de la carte des paramètres de l'équation d'état dans un fichier dont le numéro, **nbfich**, passe en argument dans la routine d'initialisation des paramètres appelée **initpar**.

checkanatum: Ce booléen permet de contrôler l'égalité des dérivées Newton-Raphson dans le cas d'un calcul numérique et d'un calcul analytique. Il provoque le calcul successif de l'équation d'état par les deux méthodes sur la première itération du modèle, puis l'arrêt des calculs. Pour chaque méthode, un fichier de nom "[**prefix**]_{analytique.dat}" et "[**prefix**]_{numerique.dat}" est créé et contient des grandeurs et leurs dérivées censées être égales lors du calcul par les deux méthodes. ATTENTION, ce booléen est prioritaire sur **printinfile**, ce qui veut dire que la mise à "vrai" du premier annule l'action du second.

printinfile: C'est un entier qui peut prendre trois valeurs. S'il est différent de 0, un grand nombre de fichiers sont créés pour sauvegarder des quantités intermédiaires (ionisation, . . .) et les résultats du calcul de l'équation d'état. Trois routines en "GREG", logiciel graphique local, ont été construites pour exploiter ces fichiers. Pour **printinfile**=3, une série de fichier est créé à chaque *itération* du modèle stellaire avec le nom "[**prefix**]_[numéro d'itération]". Pour **printinfile**=2, les fichiers sont créés seulement à la première itération avant un "STOP" général. Pour 1, les fichiers sont créés à la dernière itération du modèle avec le nom "[**prefix**]_[numéro de modèle]".

prefix: chaîne de 5 caractères entrant dans la composition du nom de sauvegarde des résultats intermédiaires de l'équation d'état.

Tous les paramètres décrits dans cette section sont internes à l'équation d'état et la table 2.1 donne leurs valeurs par défaut. Toutefois, par commodité, dix d'entre eux peuvent être contrôlés par STAREVOL. Il s'agit de ceux pour lesquels la troisième colonne de la table 2.1 comporte l'indication "STAREVOL". Cette mention est complétée par "-A" lorsque ce paramètre est *Ajustable* à chaque calcul dans la carte de paramètres sans avoir à recompiler le code d'évolution stellaire. Si une valeur suit la mention "STAREVOL", c'est que la valeur de ce paramètre est *fixée* (dans la procédure rmodpar) lors de la compilation de STAREVOL.

Nom de la variable	Fonction	Valeur par défaut
approxFermiDirac	Intégrales de Fermi-Dirac: polynômes	TRUE
compH2	Prendre en compte α_{H_2}	STAREVOL-A
compHm	Prendre en compte α_H	STAREVOL-A
totioniz	Eléments non suivis: totalement ionisés	STAREVOL/TRUE
ionized(1)	Ionisation de l'élément 1	TRUE
ionized(2)	Ionisation de l'élément 2	STAREVOL-A
ionized(3)	Ionisation de l'élément 3	FALSE
ionized(4)	Ionisation de l'élément 4	FALSE
ionized(5)	Ionisation de l'élément 5	FALSE
ionized(6)	Ionisation de l'élément 6	STAREVOL-A
ionized(7)	Ionisation de l'élément 7	STAREVOL-A
ionized(8)	Ionisation de l'élément 8	STAREVOL-A
ionized(9)	Ionisation de l'élément 9	FALSE
ionized(10)	Ionisation de l'élément 10	STAREVOL-A
ionized(11)	Ionisation de l'élément 11	FALSE
ionized(12)	Ionisation de l'élément 12	FALSE
ionized(13)	Ionisation de l'élément 13	FALSE
ionized(14)	Ionisation de l'élément 14	FALSE
ionized(15)	Ionisation de l'élément 15	FALSE
ionized(16)	Ionisation de l'élément 16	FALSE
ionized(17)	Ionisation de l'élément 17	FALSE
ionized(18)	Ionisation de l'élément 18	FALSE
ionized(19)	Ionisation de l'élément 19	FALSE
ionized(20)	Ionisation de l'élément 20	FALSE
ionized(21)	Ionisation de l'élément 21	FALSE
Tlimioni	Coupure dans l'ionisation	STAREVOL/1.0d99
compionpres	Ionisation par pression	STAREVOL-A
compcoulshiel	Ecrantage de Coulomb	TRUE
fapprocoul	Approximation dans le traitement de l'écrantage	FALSE
vardyaZH2	Vardya pour ω_{H_2}	FALSE
irwinZH2	Irwin pour ω_{H_2}	TRUE
compZH0	fonction de partition non constantes pour H	STAREVOL-A
compZHe	fonction de partition non constantes pour He	STAREVOL-A
compZCNO	fonction de partition non constantes pour CNO	FALSE
compavmass	calcul des masses atomiques par moyenne	TRUE
eosderiv	Dérivées Newton-Raphson: numériques	STAREVOL-A
approxsod	dérivées Newton-Raphson numériques: approximations	FALSE
checkcomposition	Composition: vérification	FALSE
checkparacard	Paramétrage: vérification	TRUE
checkananum	Analytique/numérique: vérification	FALSE
printinfile	Impression de quantités dans des fichiers	FALSE
prefix	Préfixe de sauvegarde	"essai"

TAB. 2.1 – Valeurs par défaut des paramètres internes à l'équation d'état

2.5.3 Les dérivées dans le code

Une modification dans les variables dépendantes de m_r et t induit des modifications dans l'ensemble du code d'évolution stellaire. Tout d'abord, l'équation d'état étant modifiée, les grandeurs thermodynamiques, P et ∇_{ad} par exemple, sont maintenant calculées en fonction de $\ln f$ et T , et, de même, leurs dérivées sont elles aussi calculées par rapport à $\ln f$ et T .

La question que l'on s'est posé était: peut-on remplacer systématiquement ρ par $\ln f$ dans tout le code? Pour y répondre, nous avons distingué trois catégories de quantités.

- les quantités thermodynamiques, toutes déjà écrites en fonction du nouveau jeu de variable, ainsi que leurs dérivées.
- les autres grandeurs de la physique constitutive qui, elles, sont liées physiquement à ρ et continueront forcément à être calculées en fonction de cette variable (les opacités ou la production de neutrinos par exemple). Pour les dérivées de ces quantités, toujours calculées en ρ , nous avons appliqué le changement de variable découlant des deux relations suivantes explicitées en annexe F: l'égalité de la différentielle de la quantité quelconque x pour tout jeu de variables choisi et l'expression de la différentielle de ρ dans le jeu de variable $(\ln f, \ln T)$.

On obtient donc pour les dérivées la relation de passage suivante:

$$\left. \frac{\partial x}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} = \left. \frac{\partial x}{\partial \rho} \right|_{\ln T} \left. \frac{\partial \rho}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} \quad (2.91)$$

$$\left. \frac{\partial x}{\partial \ln T} \right|_{\ln f} = \left. \frac{\partial x}{\partial \ln T} \right|_{\rho} + \left. \frac{\partial x}{\partial \rho} \right|_{\ln T} \left. \frac{\partial \rho}{\partial \ln T} \right|_{\ln f} \quad (2.92)$$

Ce système linéaire doit être inversé pour obtenir la relation utile:

$$\left. \frac{\partial x}{\partial \rho} \right|_{\ln T} = \left. \frac{\partial x}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} \cdot \left(\left. \frac{\partial \rho}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} \right)^{\perp 1} \quad (2.93)$$

$$\left. \frac{\partial x}{\partial \ln T} \right|_{\rho} = \left. \frac{\partial x}{\partial \ln T} \right|_{\ln f} \perp \left. \frac{\partial x}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} \cdot \left. \frac{\partial \rho}{\partial \ln T} \right|_{\ln f} \cdot \left(\left. \frac{\partial \rho}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} \right)^{\perp 1} \quad (2.94)$$

- les dérivées de grandeurs "mixtes" (contenant des variables thermodynamiques et autres), calculées pour la méthode Newton-Raphson (voir section II-1.3.1), sont du type $R(x, \rho, \ln T)$, où x représente une variable dépendant de $(\rho, \ln T)$. Les dépendances en d'autres variables Newton-Raphson (l_r, u, \dots) n'ont pas été marquées car on s'intéresse ici seulement au changement des dérivées de la quantité R par rapport à ρ et T . Leurs dérivées s'écrivaient dans l'ancien système de variable:

$$\left. \frac{\partial R}{\partial \rho} \right|_{\ln T} = \left. \frac{\partial R}{\partial x} \right|_{\rho, \ln T} \left. \frac{\partial x}{\partial \rho} \right|_{\ln T} + \left. \frac{\partial R}{\partial \rho} \right|_{\ln T, x} \quad (2.95)$$

$$\left. \frac{\partial R}{\partial \ln T} \right|_{\rho} = \left. \frac{\partial R}{\partial x} \right|_{\rho, \ln T} \left. \frac{\partial x}{\partial \ln T} \right|_{\rho} + \left. \frac{\partial R}{\partial \ln T} \right|_{\rho, x} \quad (2.96)$$

Dans le nouveau jeu de variables, on a pour $R(x, \rho, \ln T)$ où cette fois x et ρ dépendent de $(\ln f, \ln T)$:

$$\left. \frac{\partial R}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} = \left. \frac{\partial R}{\partial x} \right|_{\rho, \ln T} \left. \frac{\partial x}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} + \left. \frac{\partial R}{\partial \rho} \right|_{\ln T, x} \left. \frac{\partial \rho}{\partial \ln f} \right|_{\ln T} \quad (2.97)$$

$$\left. \frac{\partial R}{\partial \ln T} \right|_{\ln f} = \left. \frac{\partial R}{\partial x} \right|_{\rho, \ln T} \left. \frac{\partial x}{\partial \ln T} \right|_{\ln f} + \left. \frac{\partial R}{\partial \rho} \right|_{\ln T, x} \left. \frac{\partial \rho}{\partial \ln T} \right|_{\ln f} + \left. \frac{\partial R}{\partial \ln T} \right|_{\rho, x} \quad (2.98)$$

En comparant les deux jeux d'expressions, on constate donc qu'il suffira de remplacer ρ par "lnf" et d'ajouter les termes contenant les dérivées de ρ par rapport à lnf et $\ln T$ qui n'existaient pas auparavant.

2.5.4 Le modèle initial

Comme dans toute résolution de systèmes d'équations différentielles, se pose la question des conditions initiales. En évolution stellaire, la condition initiale "standard" est un modèle d'étoile complètement mécanique. En effet, on choisit une équation d'état particulière (polytropique), où P dépend d'une puissance ρ , de telle façon à ce qu'elle ferme le système constitué de l'équation de conservation de la masse et de l'équation du mouvement. C'est le fameux "polytrope". Une fois ce système simplifié résolu, on ajoute une condition d'ionisation, qui est souvent la complète ionisation, et une condition de transport, qui est souvent la convection adiabatique, pour obtenir les autres quantités nécessaires à définir le système: l_r, T, \dots . Pour plus de détails, voir Clayton (1983).

Le problème fondamental qui se pose avec le changement de variable effectué, c'est que la valeur de ρ dans le polytrope ne nous est plus d'aucune utilité! Il nous faut la valeur de lnf ... *Que peut bien valoir la dégénérescence électronique dans une étoile en effondrement, alors que celle-ci est justement considérée le plus souvent avec une très bonne approximation comme non dégénérée!*

Deux solutions sont envisageables. La première: imaginer un nouveau modèle initial d'étoile, une sorte de nouveau polytrope en variable lnf. Coûteux en temps et incertain dans sa réalisation, cette première solution a été momentanément écartée. La deuxième est de conserver le polytrope standard mais de calculer lnf à partir des quantités qu'il fournit. Nous allons pour cela utiliser la relation II-2.88, valable en milieu non-dégénéré. Mais le calcul pur et simple de lnf ne suffit pas car un passage dans l'équation d'état avec ce lnf et T ne redonnerait pas la masse volumique du polytrope. Nous avons vérifié qu'il était en général impossible de converger avec ce modèle trop différent du précédent. Ce que nous cherchons là est un jeu de variables $(\ln f, T, \rho)$ cohérent thermodynamiquement pour la nouvelle équation d'état. Le principe est d'imposer les valeurs de ρ et T du polytrope et de calculer la valeur de lnf qui redonnera ce ρ en laissant varier μ_e , c'est-à-dire en modifiant l'ionisation du polytrope. C'est tout à fait réaliste car c'est l'ionisation qui change le plus entre le modèle d'équation d'état polytropique et le modèle complet. La figure II-2.8 montre l'organisation de ce petit calcul qui a abouti à la création d'un petit programme annexe. On évalue, à partir du jeu de variables $(\ln f, T)$ initial le μ_e donné par l'équation d'état complète. En fonction de l'écart au μ_e initial, on corrige lnf en supposant ρ et T constants. L'inversion de l'équation d'état, $\ln f(\rho, T)$ nécessaire à la correction de lnf est en fait identifiée par simplicité à l'équation II-2.88 dans laquelle on a $\Delta \rho = \Delta T = 0$ et donc $\Delta \ln f = \Delta \ln \mu_e$. Le processus s'arrête lorsque la correction appliquée à lnf est suffisamment petite devant sa valeur absolue ou lorsque la masse volumique donnée par l'équation d'état complète et suffisamment proche de la valeur donnée par le polytrope. Cette méthode peut aussi être utilisée lorsque l'on veut passer d'une condition d'ionisation à une autre pour les éléments dont on ne suit pas l'ionisation (toujours totalement ionisé ou toujours neutres). Par exemple, dans un modèle où seuls Hydrogène et Helium sont ionisés, les autres éléments chimiques étant considérés comme toujours totale-

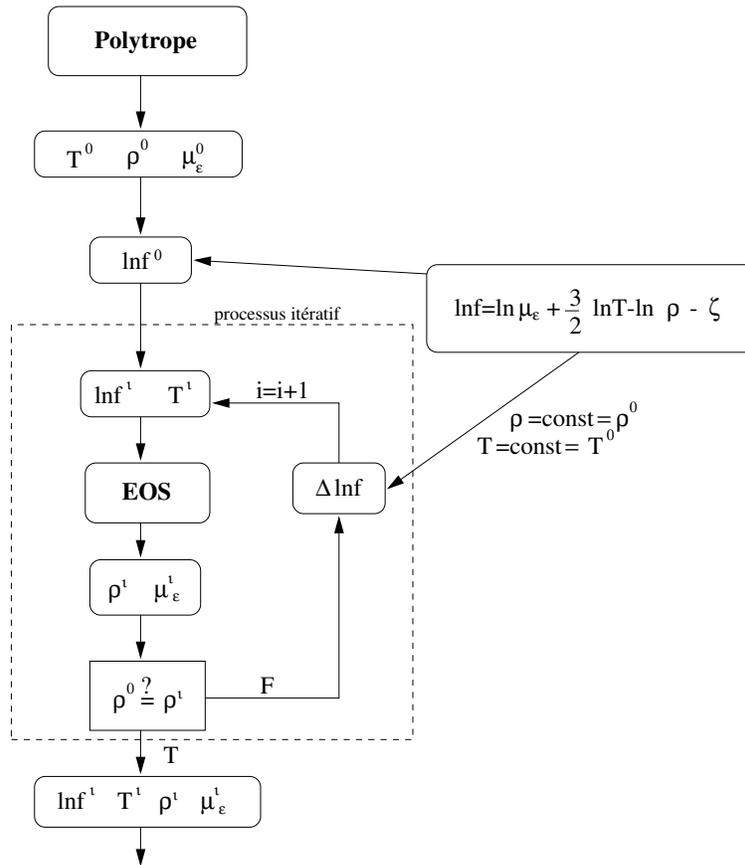


FIG. 2.8 – Organigramme pour la calcul du modèle initial.

ment ionisés, si l'on veut brutalement suivre l'ionisation des éléments C,N et O, on aura dans l'atmosphère de l'étoile un brutal retrait d'électrons qui peut empêcher la convergence. On utilisera l'algorithme de la figure II-2.8 pour corriger $\ln f$ en fonction de la modification de μ_e induite par les changements d'ionisation, à ρ et T constants. Ce nouveau modèle, même s'il n'est pas exact, est toujours suffisamment proche de la réalité pour permettre la convergence.

2.6 Ionisation

La partie sur l'ionisation est primordiale car la quantité d'électrons libres qu'elle revient à calculer, et représentée par α_e ou μ_e , est présente dans toute la thermodynamique. Elle intervient directement dans le calcul de ρ (voir relation II-2.66) mais aussi dans le calcul de la pression des ions et dans les corrections (voir parties II-2.7.2 et II-2.8).

2.6.1 Ionisation des "lourds", $Z_x > 1$

Rapports d'ionisation en formalisme $(\ln f, \ln T)$

Chaque réaction d'ionisation est de la forme:



La condition de minimisation de l'énergie libre (équation II-2.58) permet d'écrire:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial N_{X^{i+}}} \right|_{\rho, T} = \left. \frac{\partial f}{\partial N_{X^{(i+1)+}}} \right|_{\rho, T} + \left. \frac{\partial f}{\partial N_{e^-}} \right|_{\rho, T} \quad (2.100)$$

D'après la définition du potentiel chimique, II-2.35, cela peut se réécrire:

$$\pi_{X^{i+}} = \pi_{X^{(i+1)+}} + \pi_{e^-} \quad (2.101)$$

Par ailleurs, on utilise l'expression II-2.53 de l'énergie libre pour réécrire II-2.100. Ce qui donne:

$$\left. \frac{\partial f^{parfait}}{\partial N_{X^{i+}}} \right|_{\rho, T} + \left. \frac{\partial f^{conf}}{\partial N_{X^{i+}}} \right|_{\rho, T} = \left. \frac{\partial f^{parfait}}{\partial N_{X^{(i+1)+}}} \right|_{\rho, T} + \left. \frac{\partial f^{conf}}{\partial N_{X^{(i+1)+}}} \right|_{\rho, T} + \left. \frac{\partial f^{parfait}}{\partial N_{e^-}} \right|_{\rho, T} + \left. \frac{\partial f^{conf}}{\partial N_{e^-}} \right|_{\rho, T} \quad (2.102)$$

Comparée à II-2.101, on sépare le potentiel chimique en deux composantes:

$$\pi_x = \pi_x^0 + \Delta \pi_x \quad (2.103)$$

$$\text{avec } \pi_x^0 \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial f^{parfait}}{\partial N_x} \right|_{\rho, T} \quad (2.104)$$

$$\text{et } \Delta \pi_x \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial f^{conf}}{\partial N_x} \right|_{\rho, T} \quad (2.105)$$

où π_x^0 est le potentiel chimique d'un gaz parfait ($f^{conf} = 0$) et $\Delta \pi_x$, la correction due aux effets non-idéaux. En utilisant les expressions du potentiel chimique pour un gaz parfait non dégénéré pour les ions (équation II-2.35) et plus généralement la définition de la dégénérescence II-2.34 pour les électrons, on obtient:

$$kT \ln \left(\frac{N_{X^{i+}}}{Z_{X^{i+}}} \right) + \Delta \pi_{X^{i+}} = kT \ln \left(\frac{N_{X^{(i+1)+}}}{Z_{X^{(i+1)+}}} \right) + \Delta \pi_{X^{(i+1)+}} + \pi_e + \Delta \pi_e \quad (2.106)$$

puis

$$\ln \left(\frac{N_{X^{i+}}}{Z_{X^{i+}}} \right) + \Delta \eta_{X^{i+}} = \ln \left(\frac{N_{X^{(i+1)+}}}{Z_{X^{(i+1)+}}} \right) + \Delta \eta_{X^{(i+1)+}} + \eta_e + \Delta \eta_e \quad (2.107)$$

où l'on a pris la définition standard du paramètre de dégénérescence:

$$\Delta \eta_x \stackrel{def}{=} \beta \cdot \Delta \pi_x = \beta \left. \frac{\partial f^{conf}}{\partial N_x} \right|_{T, \rho} \quad (2.108)$$

Finalement, en prenant l'exponentielle de II-2.107, l'équation correspondant à la réaction chimique II-2.99 est:

$$\frac{\alpha_{X^{(i+1)+}}}{Z_{X^{(i+1)+}}} = \frac{\alpha_{X^{i+}}}{Z_{X^{i+}}} e^{\perp \eta_e^{eff}} \quad (2.109)$$

où l'on a:

$$\eta_e^{eff} = \eta_e + \Delta \eta_e \quad (2.110)$$

$$Z_{X^{q+}} = z_{X^{q+}}^{trans} \cdot z_{X^{q+}}^{int} \cdot e^{\perp \Delta \eta_{X^{q+}}} \quad (2.111)$$

$$z_{X^{q+}}^{int} = z_{X^{q+}}^{elec} \cdot z_{X^{q+}}^{rot} \cdot z_{X^{q+}}^{vib} \quad (2.112)$$

$$z_{X^{q+}}^{elec} = g_{X^{q+}}^0 \cdot e^{\perp \beta E_{X^{q+}}^0} \cdot z_{X^{q+}}^a \quad (2.113)$$

$z^a_{X^{q+}}$ étant définie par la relation II-2.56. Les effets non idéaux ont donc pour effet de changer les valeurs relatives des fonctions de partition des ions par un facteur $\exp(\perp\Delta \eta_{X_{i+}})$ et aussi de changer les rapports d'ionisation en remplaçant η_e par η_e^{eff} .

En supposant maintenant que la masse des électrons est négligeable dans les ions, les fonctions de partitions translationnelles de X^{i+} et $X^{(i+1)+}$ sont égales et se simplifient (voir II-2.86). Restent donc seulement les fonctions de partitions internes des ions:

$$\frac{\alpha_{X^{(i+1)+}}}{\alpha_{X^{i+}}} = \frac{h_{X^{(i+1)+}{}^0} \cdot e^{\perp\beta} E_{X^{(i+1)+}{}^0} \cdot \omega_{X^{(i+1)+}}}{h_{X^{i+}{}^0} \cdot e^{\perp\beta} E_{X^{i+}{}^0} \cdot \omega_{X^{i+}}} e^{\perp\eta_e^{eff}} \quad (2.114)$$

Où l'on a posé:

$$h_{X^{(i+1)+}{}^0} = g_{X^{(i+1)+}{}^0} \cdot e^{\perp\Delta} \eta_{X_{i+}} \quad (2.115)$$

$$\text{et } \omega_{X^{i+}} = z_{X^{q+}}{}^a \cdot z_{X^{q+}}{}^{rot} \cdot z_{X^{q+}}{}^{vib} \quad (2.116)$$

Finalement, on obtient les rapports d'ionisation corrigés des effets non idéaux, chacun caractérisés par la charge de l'ion placé au numérateur, $i+1$, et le symbole de l'élément chimique, X:

$$R_X^{i+1} \stackrel{def}{=} \frac{\alpha_{X^{(i+1)+}}}{\alpha_{X^{i+}}} = \frac{h_{X^{(i+1)+}{}^0} \cdot \omega_{X^{(i+1)+}}}{h_{X^{i+}{}^0} \cdot \omega_{X^{i+}}} e^{\perp\eta_e^{eff} \perp\beta} (E_{X^{(i+1)+}{}^0} \perp E_{X^{i+}{}^0}) \quad (2.117)$$

Calcul des abondances

Lors des processus d'ionisation, la quantité de chaque élément chimique est conservée. On utilise donc comme contrainte la conservation de l'espèce chimique X:

$$y_X = \sum_{q=0}^{Z_X} \alpha_{X^{q+}} \quad (2.118)$$

Dans la somme, on peut décider de factoriser $\alpha_{X^{k+}}$ pour faire apparaître les rapports d'ionisation. D'où

$$y_X = \alpha_{X^{k+}} \left[\sum_{i=0}^{k\perp 1} \left\{ \prod_{j=i}^{k\perp 1} \left(\frac{1}{R_X^{j+1}} \right) \right\} + 1 + \sum_{i=k+1}^{Z_X} \left\{ \prod_{j=k}^{i\perp 1} (R_X^{j+1}) \right\} \right] \quad (2.119)$$

Par exemple, on peut s'en convaincre pour l'ion C^{2+} :

$$y_C = \alpha_{C^{2+}} \left[\frac{\alpha_{C^{0+}}}{\alpha_{C^{1+}}} \frac{\alpha_{C^{1+}}}{\alpha_{C^{2+}}} + \frac{\alpha_{C^{1+}}}{\alpha_{C^{2+}}} + 1 + \frac{\alpha_{C^{3+}}}{\alpha_{C^{2+}}} + \frac{\alpha_{C^{4+}}}{\alpha_{C^{3+}}} \frac{\alpha_{C^{3+}}}{\alpha_{C^{2+}}} \right. \\ \left. + \frac{\alpha_{C^{5+}}}{\alpha_{C^{4+}}} \frac{\alpha_{C^{4+}}}{\alpha_{C^{3+}}} \frac{\alpha_{C^{3+}}}{\alpha_{C^{2+}}} + \frac{\alpha_{C^{6+}}}{\alpha_{C^{5+}}} \frac{\alpha_{C^{5+}}}{\alpha_{C^{4+}}} \frac{\alpha_{C^{4+}}}{\alpha_{C^{3+}}} \frac{\alpha_{C^{3+}}}{\alpha_{C^{2+}}} \right] \quad (2.120)$$

On écrit donc pour résoudre l'ionisation:

$$\alpha_{X^{k+}} = \frac{y_X}{\Phi_X^{k+1}} \quad (2.121)$$

$$\text{avec } \Phi_X^{k+1} \stackrel{def}{=} 1 + \sum_{i=0}^{k\perp 1} (P_{k\perp i, i+1})^{\perp 1} + \sum_{i=k+1}^{Z_X} P_{i\perp k, k+1} \quad (2.122)$$

où la quantité $P_{m,a}$ est un produit de m rapports d'ionisation successifs commençant par a :

$$P_{m,a} \stackrel{def}{=} \prod_{i=a}^{m+a-1} R_X^i \quad (2.123)$$

Par exemple, pour le Lithium ($Z_{Li}=3$), on a quatre abondances à déterminer: (Li^0 , Li^+ , Li^{2+} , Li^{3+}). On a donc trois rapports d'ionisation possibles dont les produits sont regroupés comme montré dans le tableau II-2.2.

$P_{m,a}$	$m=1$	$m=2$	$m=3$
$a=1$	R_{Li}^1	$R_{Li}^1 R_{Li}^2$	$R_{Li}^1 R_{Li}^2 R_{Li}^3$
$a=2$	R_{Li}^2	$R_{Li}^2 R_{Li}^3$	
$a=3$	R_{Li}^3		

TABLE. 2.2 – Définition des produits de rapports d'ionisation

Ce qui donne pour les fonctions Φ :

$$\Phi_{Li}^1 = 1 + R_{Li}^1 + R_{Li}^1 R_{Li}^2 + R_{Li}^1 R_{Li}^2 R_{Li}^3 \quad (2.124)$$

$$\Phi_{Li}^2 = (R_{Li}^1)^{\perp 1} + 1 + R_{Li}^2 + R_{Li}^2 R_{Li}^3 \quad (2.125)$$

$$\Phi_{Li}^3 = (R_{Li}^1 R_{Li}^2)^{\perp 1} + (R_{Li}^2)^{\perp 1} + 1 + R_{Li}^3 \quad (2.126)$$

$$\Phi_{Li}^4 = (R_{Li}^1 R_{Li}^2 R_{Li}^3)^{\perp 1} + (R_{Li}^2 R_{Li}^3)^{\perp 1} + (R_{Li}^3)^{\perp 1} + 1 \quad (2.127)$$

Dérivées premières

D'après II-2.117 les dérivées des rapports d'ionisation sont:

$$\left. \frac{\partial \ln R_X^i}{\partial \ln x} \right|_y = \left. \frac{\partial \ln z_{X^{i+a}}}{\partial \ln x} \right|_y \perp \left. \frac{\partial \ln z_{X^{(i-1)+a}}}{\partial \ln x} \right|_y \perp \left. \frac{\partial \eta_e^{eff}}{\partial \ln x} \right|_y + (E_{X^{i+0}} \perp E_{X^{(i-1)+0}}) \beta \delta(x \perp T) \quad (2.128)$$

où $\delta(x \perp T)$ vaut 1 si $x=T$, 0 sinon.

Les dérivées de la dégénérescence effective sont calculées comme suit:

$$\left. \frac{\partial \eta_e^{eff}}{\partial \ln x} \right|_y = \left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y + \left. \frac{\partial \Delta \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.129)$$

avec d'après II-2.78:

$$\left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y = \sqrt{1+f} \delta(x \perp f) \quad (2.130)$$

Les dérivées de la correction de dégénérescence seront calculées dans la partie II-2.8. On a utilisé de plus pour II-2.128 la relation suivante II-F.9 présentée dans l'annexe F. Ce résultat permet de calculer les dérivées des produits $P_{m,a}$:

$$\left. \frac{\partial \ln P_{m,a}}{\partial \ln x} \right|_y = \sum_{i=a}^{m+a-1} \left. \frac{\partial \ln R_X^i}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.131)$$

, puis celles de la fonction Φ :

$$\left. \frac{\partial \Phi_X^{k+1}}{\partial \ln x} \right|_y = \sum_{i=k+1}^{Z_X} P_{i \perp k, k+1} \left. \frac{\partial \ln P_{i \perp k, k+1}}{\partial \ln x} \right|_y \perp \sum_{i=0}^{k \perp 1} (P_{k \perp i, i+1})^{\perp 1} \left. \frac{\partial \ln P_{k \perp i, i+1}}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.132)$$

Et enfin, pour les abondances:

$$\left. \frac{\partial \alpha_{X^{i+}}}{\partial \ln x} \right|_y = \perp \frac{\alpha_{X^{i+}}}{\Phi_X^{k+1}} \left. \frac{\partial \Phi_X^{k+1}}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.133)$$

Dérivées secondes

En dérivant une fois de plus l'équation II-2.128, on obtient:

$$\frac{\partial^2 \ln R_X^i}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \ln z_{X^{i+}}}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{\partial^2 \ln z_{X^{(i-)+}}}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{\partial^2 \eta_e^{eff}}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp (E_{X^{i+}} \perp E_{X^{(i-)+}}) \beta \delta(x \perp T) \delta(y \perp T) \quad (2.134)$$

où

$$\frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{f}{2\sqrt{1+f}} \delta(x \perp f) \delta(y \perp f) \quad (2.135)$$

D'où pour les dérivées secondes des $P_{m,a}$:

$$\frac{\partial^2 \ln P_{m,a}}{\partial \ln x \partial \ln y} = \sum_{i=a}^{m+a \perp 1} \frac{\partial^2 \ln R_X^i}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.136)$$

Pour Φ , on a alors:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi_X^{k+1}}{\partial \ln x \partial \ln y} = & \sum_{i=k+1}^{Z_X} \left[P_{i \perp k, k+1} \left(\left. \frac{\partial \ln P_{i \perp k, k+1}}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial \ln P_{i \perp k, k+1}}{\partial \ln y} \right|_x + \frac{\partial^2 \ln P_{i \perp k, k+1}}{\partial \ln x \partial \ln y} \right) \right] \\ & + \sum_{i=0}^{k \perp 1} \left[(P_{k \perp i, i+1})^{\perp 1} \left(\left. \frac{\partial \ln P_{k \perp i, i+1}}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial \ln P_{k \perp i, i+1}}{\partial \ln y} \right|_{\ln x} \perp \frac{\partial^2 \ln P_{k \perp i, i+1}}{\partial \ln x \partial \ln y} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.137)$$

Et finalement pour les abondances:

$$\frac{\partial^2 \alpha_{X^{i+}}}{\partial \ln x \partial \ln y} = \alpha_{X^{i+}} \left(\frac{2}{(\Phi_X^{k+1})^2} \left. \frac{\partial \Phi_X^{k+1}}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial \Phi_X^{k+1}}{\partial \ln y} \right|_x \perp \frac{1}{\Phi_X^{k+1}} \frac{\partial^2 \Phi_X^{k+1}}{\partial \ln x \partial \ln y} \right) \quad (2.138)$$

2.6.2 Ionisation de l'Hydrogène

L'Hydrogène ne peut pas entrer dans le cadre des calculs du paragraphe précédent car on a choisi d'incorporer des espèces comme H^+ et H_2 , dont les réactions de formation ne s'identifient pas exactement à II-2.99.

Rapports d'ionisation

Pour H^+ :

on retrouve exactement le même format de réaction et on a donc la même expression pour le rapport d'ionisation:

$$R_{\text{H}^+} = \frac{\alpha_{\text{H}^+}}{\alpha_{\text{H}^0}} = \frac{h_{\text{H}^+}^0 \omega_{\text{H}^+}}{h_{\text{H}^0}^0 \omega_{\text{H}}} e^{\perp \eta_e^{eff} \perp \beta (E_{\text{H}^+}^0 \perp E_{\text{H}}^0)} \quad (2.139)$$

Pour H^- :



En minimisant l'énergie libre comme en II-2.100, cette équation bilan donne pour le rapport d'ionisation:

$$R_{\text{H}^-} = \frac{\alpha_{\text{H}^-}}{\alpha_{\text{H}^0}} = \frac{h_{\text{H}^-}^0 \omega_{\text{H}^-}}{h_{\text{H}^0}^0 \omega_{\text{H}}} e^{\eta_e^{eff} \perp \beta (E_{\text{H}^-}^0 \perp E_{\text{H}}^0)} \quad (2.141)$$

Notons que R_{H^-} dépend de η_e^{eff} et non de $-\eta_e^{eff}$ comme pour les autres rapports.

Pour H_2 :



La minimisation de l'énergie libre conduit à:

$$2\pi_H + \Delta\pi_H = \pi_{\text{H}_2} + \Delta\pi_{\text{H}_2} \quad (2.143)$$

puis, en suivant la méthode de la section II-2.6.1, a

$$\frac{N_{\text{H}}^2}{N_{\text{H}_2}} = \frac{z_{\text{H}}^2}{z_{\text{H}_2}} \quad (2.144)$$

Explicitons les différents termes des fonctions de partition:

$$z_{\text{H}}^2 = (h_{\text{H}}^0 z_{\text{H}}^{\text{trans}} \omega_{\text{H}} e^{\perp E_{\text{H}}^0 \beta})^2 \quad (2.145)$$

$$z_{\text{H}_2} = z_{\text{H}_2}^{\text{trans}} \Omega_{\text{H}_2} = v n_{\text{H}_2}^{\circ} \Omega_{\text{H}_2} \quad (2.146)$$

où v est le volume spécifique et Ω_{H_2} la fonction de partition interne de la molécule H_2 corrigée des effets non-idéaux (voir équation II-2.111). Ceci donne, en approximant $M_{\text{H}_2} = 2 M_{\text{H}}$ (on néglige l'énergie de liaison de la molécule par rapport à sa masse):

$$\frac{N_{\text{H}}^2}{N_{\text{H}_2}} = v \left(\frac{1}{2}\right)^{3/2} n_{\text{H}}^{\circ} \frac{g_{\text{H}}^0 z_{\text{H}}^{\text{a}}}{\Omega_{\text{H}_2}} e^{\perp 2 E_{\text{H}}^0 \beta} \quad (2.147)$$

Au moment du calcul, $\rho = 1/v$ n'est pas connu car il est déterminé par II-2.66 où intervient α_e ; quantité que l'on cherche précisément par l'ionisation. Pour pouvoir calculer le rapport, on fait apparaître n_e en divisant par N_e . Par ailleurs, n_e est connu puisqu'il ne dépend que de T et $\ln f$ (voir section II-2.4.1). D'où:

$$R_{\text{H}_2} \stackrel{def}{=} \frac{\alpha_{\text{H}_2} \alpha_e}{\alpha_{\text{H}}^2} = 2^{3/2} \frac{\Omega_{\text{H}_2}}{g_{\text{H}}^0 z_{\text{H}}^{\text{a}} n_{\text{H}}^{\circ}} \frac{n_e}{n_{\text{H}}^{\circ}} e^2 E_{\text{H}}^0 \beta \quad (2.148)$$

Résolution

A cause du calcul de l'espèce H_2 , le calcul de l'abondance des électrons est couplé à la résolution de l'ionisation pour l'Hydrogène. Pour trouver les cinq abondances (quatre pour les espèces de l'Hydrogène et une de plus pour les électrons), il nous faut donc cinq équations. Or, nous avons défini pour le moment trois rapports d'ionisation. Les deux relations manquantes seront donc les deux équations de conservation des protons et des électrons. Ce qui donne:

$$R_{H_2} = \frac{\alpha_e \alpha_{H_2}}{\alpha_H^2} \quad (2.149)$$

$$R_H^+ = \frac{\alpha_{H^+}}{\alpha_H} \quad (2.150)$$

$$R_H^- = \frac{\alpha_{H^-}}{\alpha_H} \quad (2.151)$$

$$y_H = \alpha_H + 2 \alpha_{H_2} + \alpha_{H^+} + \alpha_{H^-} \quad (2.152)$$

$$\alpha_e = \alpha_{H^+} + \alpha_{H^-} + \alpha_e^Z \quad (2.153)$$

$\alpha_e^Z = \alpha_e^{Zs} + \alpha_e^{Zns}$ est la quantité d'électrons fournie par l'ionisation des "lourds" ($Z_X > 1$). Cette quantité se détaille en deux parties. La première résultant des éléments dont l'ionisation est suivie:

$$\alpha_e^{Zs} = \sum_{X \text{ suivis}} \sum_{q=1}^{Z_X} q \alpha_{X^{q+}} \quad (2.154)$$

La deuxième résulte des éléments non suivis. Elle dépend de l'hypothèse d'ionisation faite sur ces éléments et contrôlée par un booléen de la carte de paramètre, **totioniz**. Ils sont soit toujours totalement ionisés et alors

$$\alpha_e^{Zns} = \sum_{X \text{ nonsuivis}} Z_X y_X \quad (2.155)$$

soit toujours neutres et on a

$$\alpha_e^{Zns} = 0 \quad (2.156)$$

A partir des équations de conservation, on écrit α_{H_2} et α_e .

$$\alpha_{H_2} = \frac{y_H + S \alpha_H}{2} \quad (2.157)$$

$$\alpha_e = \alpha_e^Z + D \alpha_H \quad (2.158)$$

avec

$$S \stackrel{def}{=} 1 + R_H^+ + R_H^- \quad (2.159)$$

$$D \stackrel{def}{=} R_H^+ + R_H^- \quad (2.160)$$

En remplaçant ces expressions dans le rapport de formation de H_2 , on a:

$$R_{H_2} = \left(\frac{y_H + S \alpha_H}{2} \right) \left(\frac{\alpha_e^Z + D \alpha_H}{\alpha_H^2} \right) \quad (2.161)$$

Ce qui mène à une équation du second degré en α_H :

$$(SD + 2 R_{H_2}) \alpha_H^2 + (S \alpha_e^Z + y_H D) \alpha_H + y_H \alpha_e^Z = 0 \quad (2.162)$$

Cette équation est résolue trivialement par le calcul de son discriminant. Reste ensuite à trouver prudemment la solution physique puisqu'il peut y avoir deux solutions réelles ou aucunes suivant les cas. La partie "numérique" est importante dans cette résolution. En effet, la quantité D et le facteur devant le terme du premier degré de l'équation II-2.162 sont des différences. Lorsque les deux termes de la différence sont du même ordre de grandeur, la différence peut prendre des valeurs non significatives. On remarque en particulier que ces différences interviennent dans les deux équations définissant α_{H_2} et α_e à partir de α_{H} , II-2.157. La reconstruction de ces deux abondances à partir de α_{H} devra donc être très prudente. On peut poser comme condition:

$$\alpha_{\text{H}_2} > 0 \quad \text{et} \quad \alpha_e > 0 \quad (2.163)$$

D'où les conditions suivantes sur α_{H} :

$$\alpha_{\text{H}} > \frac{y_{\text{H}}}{S} \quad \text{car} \quad S > 1 \quad (2.164)$$

$$\alpha_{\text{H}} > \frac{\perp \alpha_e^z}{D} \quad \text{si} \quad D > 0 \quad (2.165)$$

$$\alpha_{\text{H}} < \frac{\perp \alpha_e^z}{D} \quad \text{si} \quad D < 0 \quad (2.166)$$

On a bien évidemment aussi:

$$0 < \alpha_{\text{H}} < y_{\text{H}} \quad (2.167)$$

On écrit donc la condition "physique" imposée à la solution de l'équation II-2.162 comme suit:

$$0 < \alpha_{\text{H}} < \min \left(y_{\text{H}}, \frac{\alpha_e^z}{|D|}, \frac{y_{\text{H}}}{S} \right) \quad (2.168)$$

Notons une dernière fois l'importance des différences numériques, cette fois-ci dans le calcul du discriminant: $\Delta = b^2 \perp 4ac$. Les solutions sont obtenues à partir de $\sqrt{\Delta}$. Or quand $b^2 \sim 4ac$, Δ peut être "faussement" négatif étaient en-dessous de la précision de la machine. Dans ce cas là, la solution est calculée par un développement limité à l'ordre deux en $4ac/b^2$. Une fois la valeur de α_{H} obtenue, les autres abondances sont calculées par les relations II-2.157, II-2.150 et II-2.151.

Dérivées premières

Pour obtenir les dérivées premières des abondances, on prend la dérivée $\frac{\partial}{\partial \ln x} \Big|_y$ du système d'équations II-2.149 à II-2.153. D'où:

$$\alpha_e \frac{\partial \alpha_{\text{H}_2}}{\partial \ln x} \Big|_y + \alpha_{\text{H}_2} \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln x} \Big|_y = \alpha_{\text{H}}^2 \frac{\partial R_{\text{H}_2}}{\partial \ln x} \Big|_{\ln y} + 2 R_{\text{H}}^2 \alpha_{\text{H}} \frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.169)$$

$$\frac{\partial \alpha_{\text{H}^+}}{\partial \ln x} \Big|_y = R_{\text{H}}^+ \frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y + \alpha_{\text{H}} \frac{\partial R_{\text{H}}^+}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.170)$$

$$\frac{\partial \alpha_{\text{H}^-}}{\partial \ln x} \Big|_y = R_{\text{H}}^- \frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y + \alpha_{\text{H}} \frac{\partial R_{\text{H}}^-}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.171)$$

$$0 = \frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y + \frac{\partial \alpha_{\text{H}^+}}{\partial \ln x} \Big|_y + \frac{\partial \alpha_{\text{H}^-}}{\partial \ln x} \Big|_y + 2 \frac{\partial \alpha_{\text{H}_2}}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.172)$$

$$\frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln x} \Big|_y = \frac{\partial \alpha_{\text{H}^+}}{\partial \ln x} \Big|_y \perp \frac{\partial \alpha_{\text{H}^-}}{\partial \ln x} \Big|_y + \frac{\partial \alpha_e^z}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.173)$$

Les dérivées des abondances nucléaires sont nulles par hypothèse du découplage entre structure et abondances (voir chapitre II-1). Après avoir ordonné ce nouveau système, on obtient une équation du type:

$$[A] \cdot d\vec{\alpha} = \vec{B}, \quad (2.174)$$

où $d\vec{\alpha}$ est le vecteur dérivée des abondances, $\vec{\alpha} = (\alpha_{\text{H}}, \alpha_e, \alpha_{\text{H}_2}, \alpha_{\text{H}^-}, \alpha_{\text{H}^+})$ et $[A]$, la matrice à diagonaliser pour résoudre II-2.174:

$$[A] = \begin{pmatrix} 2 R_{\text{H}_2} \alpha_{\text{H}} & -\alpha_{\text{H}_2} & -\alpha_e & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -1 \\ -R_{\text{H}^-} & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -R_{\text{H}^+} & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

avec le second membre

$$\vec{B} = \left(\perp \alpha_{\text{H}}^2 \frac{\partial R_{\text{H}_2}}{\partial \ln x} \Big|_y, 0, \frac{\partial \alpha_e^z}{\partial \ln x} \Big|_y, \alpha_{\text{H}} \frac{\partial R_{\text{H}^-}}{\partial \ln x} \Big|_y, \alpha_{\text{H}} \frac{\partial R_{\text{H}^+}}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \quad (2.175)$$

Pour être cohérent avec l'écriture analytique de la solution des abondances donné au paragraphe précédent, on ne cherchera à déterminer ici que la dérivée de α_{H} . Les autres dérivées seront reconstruites à partir des relations exprimées dans II-2.174. On effectue la combinaison suivante des lignes L_i de $[A]$ et \vec{B} pour obtenir $\frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y$:

$$L_1 \leftarrow L_1 + \frac{\alpha_e}{2} L_2 + \alpha_{\text{H}_2} L_3 \pm \left(\frac{\alpha_e}{2} + \alpha_{\text{H}_2} \right) L_4 \pm \left(\frac{\alpha_e}{2} \pm \alpha_{\text{H}_2} \right) L_5$$

La solution complète du système est alors:

$$\frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y = \frac{2 \alpha_{\text{H}_2} B_3 + 2 \alpha_{\text{H}}^2 B_2 \pm (\alpha_e + 2 \alpha_{\text{H}_2}) B_4 \pm (\alpha_e \pm 2 \alpha_{\text{H}_2}) B_5}{4 R_{\text{H}_2} \alpha_{\text{H}} + \alpha_e + (\alpha_e + 2 \alpha_{\text{H}_2}) R_{\text{H}^-} + (\alpha_e \pm 2 \alpha_{\text{H}_2}) R_{\text{H}^+}} \quad (2.176)$$

$$\frac{\partial \alpha_{\text{H}^+}}{\partial \ln x} \Big|_y = B_5 + R_{\text{H}^+} \frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.177)$$

$$\frac{\partial \alpha_{\text{H}^-}}{\partial \ln x} \Big|_y = B_4 + R_{\text{H}^-} \frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.178)$$

$$\frac{\partial \alpha_{\text{H}_2}}{\partial \ln x} \Big|_y = \pm \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \alpha_{\text{H}^-}}{\partial \ln x} \Big|_y + \frac{\partial \alpha_{\text{H}^+}}{\partial \ln x} \Big|_y + \frac{\partial \alpha_{\text{H}}}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \quad (2.179)$$

$$\frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln x} \Big|_y = B_3 + \frac{\partial \alpha_{\text{H}^+}}{\partial \ln x} \Big|_y \pm \frac{\partial \alpha_{\text{H}^-}}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.180)$$

en utilisant les composantes B_i du second membre.

Reste maintenant à exprimer les dérivées des rapports d'ionisation et autres quantités qui rentrent dans le calcul de ce second membre:

Pour α_{H^+} et α_{H^-} , on a:

$$\frac{\partial R_{\text{H}^\pm}}{\partial \ln x} \Big|_y = R_{\text{H}^\pm} \left(\frac{\partial \ln z_{\text{H}^\pm}}{\partial \ln x} \Big|_y \pm \frac{\partial \ln z_{\text{H}^\pm}^a}{\partial \ln x} \Big|_y \pm \pm \frac{\partial \eta_e^{eff}}{\partial \ln x} \Big|_y + (E_{\text{H}^\pm}^0 \pm E_{\text{H}}^0) \beta \delta(x \pm T) \right) \quad (2.181)$$

Et pour α_{H_2} :

$$\frac{\partial R_{\text{H}_2}}{\partial \ln x} \Big|_y = R_{\text{H}_2} \left(\frac{\partial \ln \Omega_{\text{H}_2}}{\partial \ln x} \Big|_y \pm \frac{\partial \ln z_{\text{H}}^a}{\partial \ln x} \Big|_y + \frac{\partial \ln n_e}{\partial \ln x} \Big|_y \pm \frac{3}{2} \pm 2 E_{\text{H}}^0 \beta \right) \delta(x \pm T) \quad (2.182)$$

On a utilisé pour établir cette expression la propriété suivante qui découle de II-2.30:

$$\left. \frac{\partial \ln n_e^{\circ}}{\partial \ln x} \right|_y = \frac{3}{2} \delta(x \perp T) \quad (2.183)$$

Il faut encore la dérivée du nombre d'électrons fournis par les "lourds", explicitée d'après la relation II-2.154:

$$\left. \frac{\partial \alpha_e^z}{\partial \ln x} \right|_y = \sum_{q=1}^{Z_x} q \left. \frac{\partial \alpha_{X_{q+}}}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.184)$$

les abondances des éléments dont l'ionisation est non suivie étant considérées comme constantes.

Dérivées secondes

La méthode pour trouver les dérivées secondes est la même que pour les dérivées premières: on dérive une fois de plus le système II-2.169 à II-2.173. On retrouve un système linéaire exprimé comme II-2.174 avec la particularité que la matrice $[A]$ est *exactement la même*. Seul le second membre, \vec{B} , change. On applique donc la même combinaison de ligne pour trouver la solution et on obtient:

$$\frac{\partial^2 \alpha_H}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{B_1 + \frac{\alpha_e}{2} B_4 + \alpha_{H_2} B_5 \perp (-\frac{\alpha_e}{2} + \alpha_{H_2}) B_3 \perp (\frac{\alpha_e}{2} \perp \alpha_{H_2}) B_2}{2 R_{H_2} \alpha_H + \frac{\alpha_e}{2} + (\frac{\alpha_e}{2} + \alpha_{H_2}) R_{H^-} + (\frac{\alpha_e}{2} \perp \alpha_{H_2}) R_{H^+}} \quad (2.185)$$

$$\frac{\partial^2 \alpha_{H^+}}{\partial \ln x \partial \ln y} = R_{H^+} \frac{\partial^2 \alpha_H}{\partial \ln x \partial \ln y} + B_2 \quad (2.186)$$

$$\frac{\partial^2 \alpha_{H^-}}{\partial \ln x \partial \ln y} = R_{H^-} \frac{\partial^2 \alpha_H}{\partial \ln x \partial \ln y} + B_3 \quad (2.187)$$

$$\frac{\partial^2 \alpha_H}{\partial \ln x \partial \ln y} = \perp \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \alpha_{H^+}}{\partial \ln x \partial \ln y} + \frac{\partial^2 \alpha_{H^-}}{\partial \ln x \partial \ln y} + \frac{\partial^2 \alpha_H}{\partial \ln x \partial \ln y} \right) \quad (2.188)$$

$$\frac{\partial^2 \alpha_H}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \alpha_{H^+}}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{\partial^2 \alpha_{H^-}}{\partial \ln x \partial \ln y} + B_5 \quad (2.189)$$

les B_i étant les composantes du second membre:

$$\begin{aligned} B_1 &= \left. \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln y} \right|_x \left. \frac{\partial \alpha_{H_2}}{\partial \ln x} \right|_y \perp 2 \alpha_H \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial \ln y} \right|_x \left. \frac{\partial R_{H_2}}{\partial \ln x} \right|_y \perp \alpha_H^2 \left. \frac{\partial R_{H_2}}{\partial \ln x} \right|_{\ln y} \\ &\perp 2 R_{H_2} \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial \ln y} \right|_x \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial \ln x} \right|_y + \left. \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial \alpha_{H_2}}{\partial \ln y} \right|_x \perp 2 \alpha_H \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial R_{H_2}}{\partial \ln y} \right|_x \\ B_2 &\frac{\partial R_{H^+}}{\partial \ln x} \left|_y \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial \ln y} \right|_x + \alpha_H \frac{\partial^2 R_{H^+}}{\partial \ln x \partial \ln y} + \left. \frac{\partial R_{H^+}}{\partial \ln y} \right|_x \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial \ln x} \right|_y \\ B_3 &\frac{\partial R_{H^-}}{\partial \ln x} \left|_y \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial \ln y} \right|_x + \alpha_H \frac{\partial^2 R_{H^-}}{\partial \ln x \partial \ln y} + \left. \frac{\partial R_{H^-}}{\partial \ln y} \right|_x \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial \ln x} \right|_y \end{aligned} \quad (2.190)$$

$$B_4 = 0$$

$$B_5 = \frac{\partial^2 \alpha_e^z}{\partial \ln x \partial \ln y}$$

Ceci conduit, pour les rapports d'ionisation, à

$$\frac{\partial^2 \ln R_H^{\pm}}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \ln z_{H^{\pm}^a}}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{\partial^2 \ln z_H^a}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \pm \frac{\partial^2 \eta_e^{eff}}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.191)$$

$$\perp (E_{H^{\pm}^0} \perp E_H^0) \beta \delta(x \perp T) \delta(y \perp T) \quad (2.192)$$

$$\frac{\partial^2 \ln R_{H_2}}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \ln \Omega_{H_2}}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{\partial^2 \ln z_H^a}{\partial \ln x \partial \ln y} + \frac{\partial^2 \ln n_e}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.193)$$

Compte tenu de l'obtention des dérivées premières sous forme logarithmique (voir II-2.182 et II-2.181), le calcul des dérivées $\frac{\partial^2 \ln}{\partial \ln s \partial \ln y}$ est plus rapide que celui des $\frac{\partial^2}{\partial \ln x \partial \ln y}$. Une relation de passage facilement démontrable (voir II-F.10 à l'annexe F) est ensuite appliquée.

2.6.3 Données atomiques

Plusieurs sortes de données atomiques sont nécessaires au calcul de l'ionisation: fonctions de partition, poids statistiques des niveaux d'énergie, valeurs des niveaux d'énergie non perturbés. Nous ne parlerons pas ici des poids statistiques qui ne demandent aucun choix particulier. Voici quelques commentaires concernant deux données atomiques parmi l'ensemble des données atomiques qui nécessitent un choix dans la nouvelle équation d'état .

Fonctions de partition

Les différentes hypothèses se rattachant au calcul des fonctions de partition sont les suivantes:

- Les fonctions de partitions astrophysiques (électroniques) sont supposées valoir 1 par défaut, c'est à dire que l'on assimile la fonction de partition à son terme fondamental: $g_{X^{q+}}^{\circ} E_{X^{q+}}^{\circ}$.
- La supposition précédente n'est pas faite pour H_2 où l'on prend en compte tous les niveaux électroniques, les niveaux de vibration et de rotation.
- Des fonctions de partition non constantes (Irwin 1987) pour les ions de l'Hydrogène et de l'Hélium sont aussi utilisables dans cette équation d'état car ces éléments sont les plus abondants.
- Le terme configurationnel, moyennant quelques approximations décrites dans la section II-2.8, est mis sous une forme où il ne dépend pas des abondances ioniques. On a donc $h_X^{\circ} = g_X^{\circ}$. La seule correction subsistant est $\Delta\eta_e$. Cette correction sur les électrons peut d'ailleurs s'interpréter comme une correction sur les ions car l'expression des rapports d'ionisation II-2.117 permet d'écrire:

$$\begin{aligned} \alpha_{X^{q+}} &= R_X^{q+} R_X^{(q-1)+} \dots R_X^{\circ} \alpha_{X^{\circ}} \\ &= \frac{h_{X^{q+}}^{\circ} \omega_{X^{q+}}}{h_{X^{\circ}}^{\circ} \omega_{X^{\circ}}} \exp [\pm q \eta_e^{eff} \pm (E_{X^{q+}}^{\circ} \pm E_{X^{\circ}}^{\circ})\beta] \alpha_{X^{\circ}} \end{aligned} \quad (2.194)$$

puis en utilisant la conservation de l'espèce X (équation II-2.118),

$$\alpha_{X^{q+}} = y_X \frac{h_{X^{q+}}^{\circ} \omega_{X^{q+}} \exp [\pm q \eta_e^{eff} \pm (E_{X^{q+}}^{\circ} \pm E_{X^{\circ}}^{\circ})\beta]}{Z_X \sum_{k=0} h_{X^{k+}}^{\circ} \omega_{X^{k+}} \exp [\pm k \eta_e^{eff} \pm (E_{X^{k+}}^{\circ} \pm E_{X^{\circ}}^{\circ})\beta]} \quad (2.195)$$

que l'on peut réécrire:

$$\alpha_{X^{q+}} = y_X \frac{G_{X^{q+}} \exp [\pm q \eta_e \pm (E_{X^{q+}}^{\circ} \pm E_{X^{\circ}}^{\circ})\beta]}{Z_X \sum_{k=0} G_{X^{k+}} \exp [\pm k \eta_e \pm (E_{X^{k+}}^{\circ} \pm E_{X^{\circ}}^{\circ})\beta]} \quad (2.196)$$

avec

$$G_{X^{i+}} = h_{X^{i+}}^0 \omega_{X^{i+}} e^{\perp i \Delta \eta_e} \quad (2.197)$$

On reconnaît au dénominateur la fonction de partition associée aux différents états d'ionisation de l'espèce X et on voit bien que les poids statistiques de chaque état définis par II-2.197 sont modifiés par la correction électronique.

Deux descriptions différentes de fonctions de partition non constantes ont été implémentées dans le code. Elle peuvent être la source de petites incohérences physiques entre les potentiels internes et externes utilisés car elles ont été calculées indépendamment de cette équation d'état. Si les auteurs ont tronqué leurs fonctions de partition avec des corrections non-idéales, ces dernières ont toutes les chances de décrire les mêmes effets physiques que cette équation d'état mais de façon différente, rompant avec les conditions de cohérence totale exposée par Hummer & Mihalas (1988) et repris à la section II-2.3.3.

La plus ancienne, de Vardya (1960) et Webbink (1975), a été écrite pour H_2 . On a :

$$\Omega_{H_2} = 6608.8 \zeta(T) (D_{H_2} \beta)^{\perp 5/2} e^{D_1 \beta \perp (D_2 \beta)^2 + (D_3 \beta)^3} \quad (2.198)$$

$$\zeta(T) = 1 \perp (1 + \beta D_{H_2}) e^{\perp D_{H_2} \beta} \quad (2.199)$$

avec les valeurs numériques suivantes :

$D_{H_2} = 4.48 eV$, l'énergie de formation de H_2 , et $D_1 = 0.448 eV$, $D_2 = 0.1562 eV$, $D_3 = 0.0851 eV$. En pratique, on a même besoin des dérivées *troisième* des fonctions de partitions car leurs dérivées premières interviennent déjà dans l'entropie des ions (voir partie II-2.7.3).

En utilisant la relation II-F.9, on a pour ζ :

$$\left. \frac{\partial \ln \zeta}{\partial \ln x} \right|_y = \perp \frac{(D_{H_2} \beta)^2 e^{\perp D_{H_2} \beta}}{\zeta} \delta(x \perp T) \quad (2.200)$$

$$\frac{\partial^2 \ln \zeta}{\partial \ln x \partial \ln y} = \left(D_{H_2} \beta \perp 2 \perp \left. \frac{\partial \ln \zeta}{\partial \ln x} \right|_y \right) \left. \frac{\partial \ln \zeta}{\partial \ln x} \right|_{\ln y} \delta(x \perp T) \delta(y \perp T) \quad (2.201)$$

$$\frac{\partial^3 \ln \zeta}{\partial \ln x \partial \ln y \partial \ln z} = \left(\left. \frac{\partial \ln \zeta}{\partial \ln x} \right|_y \right)^{\perp 1} \left(\frac{\partial^2 \ln \zeta}{\partial \ln x \partial \ln y} \right)^2 \quad (2.202)$$

$$+ \left. \frac{\partial \ln \zeta}{\partial \ln x} \right|_y \left(\perp D_{H_2} \beta \perp \frac{\partial^2 \ln \zeta}{\partial \ln x \partial \ln y} \right) \delta(x \perp T) \delta(y \perp T) \delta(z \perp T) \quad (2.203)$$

puis pour $z_{H_2}^{int}$:

$$\left. \frac{\partial \ln \Omega_{H_2}}{\partial \ln x} \right|_y = \left(\perp D_1 \beta + 2(D_2 \beta)^2 \perp 3(D_3 \beta)^3 + \frac{5}{2} + \left. \frac{\partial \ln \zeta}{\partial \ln x} \right|_y \right) \delta(x \perp T) \quad (2.204)$$

$$\frac{\partial^2 \ln \Omega_{H_2}}{\partial \ln x \partial \ln y} = \left(D_1 \beta \perp 4(D_2 \beta)^2 + 9(D_3 \beta)^3 + \frac{\partial^2 \ln \zeta}{\partial \ln x \partial \ln y} \right) \delta(x \perp T) \delta(y \perp T) \quad (2.205)$$

$$\frac{\partial^3 \ln \Omega_{H_2}}{\partial \ln x \partial \ln y \partial \ln z} = \left(\perp D_1 \beta + 8(D_2 \beta)^2 \perp 27(D_3 \beta)^3 + \frac{\partial^3 \ln \zeta}{\partial \ln x \partial \ln y \partial \ln z} \right) \quad (2.206)$$

$$\delta(x \perp T) \delta(y \perp T) \delta(z \perp T) \quad (2.207)$$

Cette forme de la fonction de partition a été ajustée de manière à être valable jusqu'à $T = 25000 K$.

La plus récente, écrite habilement par Irwin (voir Irwin (1981) pour les ions de H et He, et Irwin (1987) pour H₂), est de la forme:

$$\ln \omega_X = \sum_{i=1}^5 a_i (\ln T)^i \quad (2.208)$$

Les dérivées sont donc immédiatement:

$$\left. \frac{\partial \ln \omega_X}{\partial \ln x} \right|_y = \sum_{i=1}^5 i a_i (\ln T)^{i-1} \delta(x \perp T) \quad (2.209)$$

$$\frac{\partial^2 \ln \omega_X}{\partial \ln x \partial \ln y} = \sum_{i=2}^5 i(i-1) a_i (\ln T)^{i-2} \delta(x \perp T) \delta(y \perp T) \quad (2.210)$$

$$\frac{\partial^3 \ln \omega_X}{\partial \ln x \partial \ln y \partial \ln z} = \sum_{i=3}^5 i(i-1)(i-2) a_i (\ln T)^{i-3} \delta(x \perp T) \delta(y \perp T) \delta(z \perp T) \quad (2.211)$$

Ces fonctions de partition sont valables jusqu'à $T = 16000K$. Pour la plupart des conditions rencontrées, la température maximum de validité est atteinte à un endroit dans l'étoile où l'abondance de H₂ est complètement négligeable. La suppression brutale du calcul de cette espèce n'a alors aucune incidence sur le modèle. Pour les faibles masses cependant, il a été nécessaire d'augmenter cette température limite pour assurer une bonne convergence des modèles. Ceci concerne une région très limitée dans l'étoile à l'intérieur de laquelle H₂ "tombe" très vite à 0.

Niveaux d'énergie

Pour saisir les niveaux d'énergie, la convention suivante a été prise: *les espèces totalement ionisées ont une énergie nulle*. Au fur et à mesure qu'une espèce totalement ionisée se lie, elle relâche de l'énergie chimique dans le milieu environnant et passe donc à une énergie inférieure. C'est la convention atomique habituelle: pour les électrons liés, l'énergie est négative. La figure II-2.9 schématise cette convention. Ce choix est important car cette énergie relâchée dans

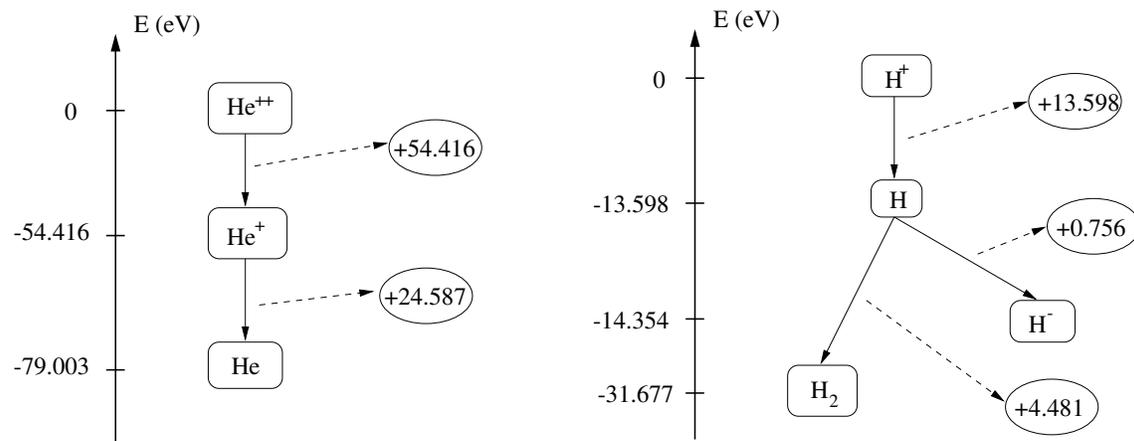


FIG. 2.9 – Le choix du niveau "zéro" pour les énergies.

le milieu doit être prise en compte dans l'énergie interne des ions (voir partie II-2.7.3) mais dans la limite où seules les variations d'énergie interne ont un sens physique.

2.7 Calculs des composantes

Cette partie est destinée à préciser le modèle utilisé pour l'énergie libre de chacune des différentes composantes du plasma et à calculer les deux quantités nécessaires (P et s) ainsi que leurs dérivées. Les trois composantes du plasma correspondent aux ions, aux électrons et aux photons. Une composante supplémentaire sert à modéliser les interactions entre ces particules. On aura donc pour l'énergie libre totale du système:

$$f^{tot} = f^{rad} + f^{elec} + f^{ions} + f^{conf} \quad (2.212)$$

Dans tout cette partie, on utilisera les définitions II-2.9 et II-2.4. De plus, x et y symboliseront une variable parmi $(\ln f, \ln T)$. Enfin, $\delta(x \perp T)$ vaudra 1 si $x = T$, 0 sinon. Les dérivées secondes ne seront pas nécessaires pour l'énergie interne car cette grandeur ne sert qu'à travers ϵ_{grav} . Seules ses dérivées premières sont à calculer pour le schéma Newton-Raphson .

2.7.1 Partie radiative

La principale caractéristique des photons est qu'il sont des bosons. Compte tenu du fait que les bosons peuvent être empilés sans restriction dans un même état quantique, il n'y a rien de surprenant à ce que le paramètre de dégénérescence des photons soit toujours nul. Il n'y a aucun empêchement possible au peuplement d'un état et aucune pression associée. Si on utilise ce fait dans la fonction de partition grand canonique II-2.13 pour calculer f_γ en se rappelant que $p = \frac{h\nu}{c}$ et $E = h\nu$, alors on a:

$$f^{rad} = \frac{aT^4}{3\rho} \quad \text{avec} \quad a = \frac{4\sigma}{c} \quad (2.213)$$

On a donc trivialement pour l'entropie, la pression et l'énergie interne:

$$P_{rad} = \frac{a}{3} T^4 \quad (2.214)$$

$$s_{rad} = \frac{4aT^3}{3\rho} \quad (2.215)$$

$$u_{rad} = \frac{aT^4}{\rho} \quad (2.216)$$

$$(2.217)$$

Leurs dérivées premières sont:

$$\left. \frac{\partial P_{rad}}{\partial \ln x} \right|_y = 4P_{rad} \delta(x \perp T) \quad (2.218)$$

$$\left. \frac{\partial s_{rad}}{\partial \ln x} \right|_y = s_{rad} \left(3\delta(x \perp T) \perp \left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln x} \right|_y \right) \quad (2.219)$$

$$\left. \frac{\partial u_{rad}}{\partial \ln x} \right|_y = u_{rad} \left(4\delta(x \perp T) \perp \left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln x} \right|_y \right) \quad (2.220)$$

Et leurs dérivées secondes:

$$\frac{\partial^2 P_{rad}}{\partial \ln x \partial \ln y} = 16 P_{rad} \delta(y \perp T) \delta(x \perp T) \quad (2.221)$$

$$\frac{\partial^2 s_{rad}}{\partial \ln x \partial \ln y} = S_{rad} \left[\left(3\delta(x \perp T) \perp \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \left(3\delta(y \perp T) \perp \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln y} \Big|_x \right) \right] \quad (2.222)$$

$$\perp \frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.223)$$

2.7.2 Partie électronique

Tout comme dans la partie II-2.2.2, les autres quantités thermodynamiques du gaz d'électrons doivent être calculées. Elles vont être calculées par une méthode similaire à celle qui a permis de déterminer n_e . Même si l'on utilise pas directement l'énergie libre, cette méthode analytique donne exactement les mêmes résultats. En effet, les ajustements utilisés pour (s_e, P_e, n_e) ont été calculés avec la contrainte de vérifier analytiquement les relations de Maxwell, ce qui assure la cohérence thermodynamique. De plus,, on remarquera que lors du calcul des intégrales utilisées pour déterminer (s_e, P_e, n_e) , aucune hypothèse restrictive n'est faite concernant la dégénérescence ou le degré de relativité du gaz d'électron.

Adimensionnement des quantités thermodynamiques

On a

$$dP_e = \frac{1}{3} p v d n_e \quad (2.224)$$

$$d u_e^v = E d n_e \quad (2.225)$$

où une quantité portant l'exposant v est volumique. En utilisant $\beta_v \stackrel{def}{=} v/c$ pour la vitesse, $E = \gamma m_e c^2$ pour l'énergie cinétique et en reconnaissant le facteur relativiste $\gamma \stackrel{def}{=} \frac{1}{\sqrt{1-\beta_v^2}} = E^*$ (voir aussi la section II-2.2.2 pour les définitions des quantités étoilées), on a $v = \beta_v c = \frac{p^*}{\sqrt{1+(p^*)^2}}$. EN utilisant aussi l'équation II-2.36 pour n_e , on peut écrire:

$$P_e = \frac{8\pi M_e c^2}{\lambda_c^3} I_{p_e} \quad (2.226)$$

$$I_{p_e} = \frac{1}{3} \int_0^\infty \frac{(p^*)^3 dE^*}{e^{\frac{E^*}{T^*} \perp \eta_e} + 1} \quad (2.227)$$

et:

$$u_e^v = \frac{8\pi M_e c^2}{\lambda_c^3} I_{u_e} \quad (2.228)$$

$$I_{u_e} = \int_0^\infty \frac{E^*(p^*)^2 dp^*}{e^{\frac{E^*}{T^*} \perp \eta_e} + 1} \quad (2.229)$$

avec toujours les relations:

$$I_{p_e} = \frac{\sqrt{2}}{3} \gamma^{5/2} (2F_{3/2}(\eta_e, \gamma) + \gamma F_{5/2}(\eta_e, \gamma)) \quad (2.230)$$

$$I_{u_e} = \sqrt{2} \gamma^{5/2} (F_{3/2}(\eta_e, \gamma) + \gamma F_{5/2}(\eta_e, \gamma)) \quad (2.231)$$

$$(2.232)$$

Pour rester cohérent avec le fait que c'est l'entropie et non l'énergie interne qui nous sert de grandeur thermodynamique de base, ce n'est pas l'intégrale I_{u_e} qui va être calculée par les ajustements polynomiaux de Eggleton *et al.* (1973), mais une intégrale permettant de calculer l'entropie.

On définit ainsi I_{q_e} telle que

$$q_e^v = \rho q_e = \frac{8\pi M_e c^2}{\lambda_c^3} I_{q_e} \quad (2.233)$$

$$\text{avec } q_e \stackrel{def}{=} u_e + \frac{P_e}{\rho} \perp 2kTN_e \sqrt{1+f} \quad (2.234)$$

En introduisant cette définition dans la relation II-2.25 écrite pour les électrons, on trouve pour l'entropie électronique:

$$s_e = kN_e \left(\frac{q_e}{kTN_e} + 2\sqrt{1+f} \perp \eta_e \right) \quad (2.235)$$

En faisant apparaître la variable g définie en II-2.77 et en adimensionnant, on obtient:

$$s_e^* \stackrel{def}{=} \frac{s_e}{kN_e} = \left[\sqrt{1+f} \left(\frac{I_{q_e}}{g I_{n_e}} + 2 \right) \perp \eta_e \right] \quad (2.236)$$

C'est l'intégrale I_{q_e} qui est ajustée par Pols *et al.* (1995) et qui sert à calculer l'entropie réduite, s_e^* . L'énergie interne se déduit alors par la relation II-2.25 écrite de manière appropriée. Il faut en effet successivement l'écrire par unité de volume en multipliant par ρ , adimensionner en divisant par $\frac{8\pi M_e c^2}{\lambda_c^3}$, remarquer que $kN_e = R \alpha_e$ et l'on obtient:

$$I_{u_e} = \frac{u_e}{\alpha_e RT} = T^* I_{n_e} \left(s^* \perp \frac{I_{p_e}}{T^* I_{n_e}} \perp \eta_e \right) \quad (2.237)$$

Dérivées de n_e

A une constante près, dériver n_e revient à dériver I_{n_e} (voir II-2.41). L'expression II-2.76 donnant la forme analytique du fit pour I_{n_e} , on réécrit:

$$I_{n_e} = K^n \cdot S^n \quad (2.238)$$

$$\text{avec } K^n = \frac{f}{(1+f)^{d_f+1}} \frac{g^{3/2}}{(1+g)^{d_g+3/2}} \quad (2.239)$$

$$\text{et } S^n = \sum_{i=0}^{d_f} \sum_{j=0}^{d_g} n_{ij} f^i g^j \quad (2.240)$$

Il faut donc maintenant calculer les dérivées premières et secondes de ces quantités pour obtenir celle de n_e . On remarque que

$$S_g^n \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial S^n}{\partial \ln g} \right|_f = \sum_{i,j=0}^{d_f, d_g} j n_{ij} f^i g^j \quad (2.241)$$

$$S_f^n \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial S^n}{\partial \ln f} \right|_g = \sum_{i,j=0}^{d_f, d_g} i n_{ij} f^i g^j \quad (2.242)$$

$$S_{gg}^n \stackrel{def}{=} g^2 \frac{\partial^2 S^n}{\partial g \partial g} = \sum_{i,j=0}^{d_f, d_g} j(j-1) n_{ij} f^i g^j \quad (2.243)$$

$$S_{ff}^n \stackrel{def}{=} f^2 \frac{\partial^2 S^n}{\partial f \partial f} = \sum_{i,j=0}^{d_f, d_g} i(i-1) n_{ij} f^i g^j \quad (2.244)$$

$$S_{fg}^n \stackrel{def}{=} gf \frac{\partial^2 S^n}{\partial f \partial g} = \sum_{i,j=0}^{d_f, d_g} j i n_{ij} f^i g^j \quad (2.245)$$

A partir de là, on utilise les dérivées de g calculées d'après II-2.77:

$$\left. \frac{\partial \ln g}{\partial \ln T} \right|_f = 1 \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial \ln g}{\partial \ln f} \right|_T = \frac{f}{2(f+1)} \quad (2.246)$$

pour obtenir les dérivées de I_{n_e} par un système de changement de variables entre les variables (f,T) et (f,g) (voir aussi annexe F):

$$\left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln T} \right|_f = \left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln g} \right|_f \left. \frac{\partial \ln g}{\partial \ln T} \right|_f \quad (2.247)$$

$$\left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln f} \right|_T = \left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln f} \right|_T + \left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln f} \right|_g \left. \frac{\partial \ln g}{\partial \ln f} \right|_T \quad (2.248)$$

Ce qui donne:

$$\left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln T} \right|_f = \frac{3}{2} + \left(\frac{3}{2} - d_g \right) \frac{g}{g+1} + \frac{S_g^n}{S^n} \quad (2.249)$$

$$\left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln f} \right|_T = 1 + \frac{S_f^n}{S^n} + \frac{f}{f+1} \left(\frac{1}{2} \left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln T} \right|_f - d_f - 1 \right) \quad (2.250)$$

Pour obtenir les dérivées secondes, on remarque que:

$$\left. \frac{\partial \ln S_g^n}{\partial \ln g} \right|_f = 1 + \frac{S_{gg}^n}{S_g^n} \quad (2.251)$$

$$\left. \frac{\partial \ln S_f^n}{\partial \ln g} \right|_f = \frac{S_{fg}^n}{S_f^n} \quad (2.252)$$

$$\left. \frac{\partial \ln S_f^n}{\partial \ln f} \right|_g = 1 + \frac{S_{ff}^n}{S_f^n} \quad (2.253)$$

et, en dérivant les équations II-2.249 et II-2.250, on obtient:

$$\frac{\partial^2 \ln I_{n_e}}{\partial \ln T \partial \ln T} = \left(\frac{3}{2} \pm d_g\right) \frac{g}{(1+g)^2} + \frac{S_g^n}{S^n} \left(1 + \frac{S_{gg}^n}{S_g^n} \pm \frac{S_g^n}{S^n}\right) \quad (2.254)$$

$$\frac{\partial^2 \ln I_{n_e}}{\partial \ln T \partial \ln f} = \frac{f}{2(f+1)} \frac{\partial^2 \ln I_{n_e}}{\partial \ln T \partial \ln T} + \frac{S_{fg}^n}{S^n} \pm \frac{S_f^n S_g^n}{(S^n)^2} \quad (2.255)$$

$$\frac{\partial^2 \ln I_{n_e}}{\partial \ln T \partial \ln f} = \frac{S_f^n}{S^n} \left[1 \pm \frac{S_{ff}^n}{S_f^n} + \frac{S_f^n}{S^n} + \left(\frac{S_{fg}^n}{S_f^n} \pm \frac{S_g^n}{S^n}\right) \left(\frac{f}{2(f+1)}\right)\right] + \quad (2.256)$$

$$\frac{f}{(f+1)^2} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln T} \Big|_f \pm d_f \pm 1\right] + \left(\frac{f}{2(f+1)}\right) \frac{\partial^2 \ln I_{n_e}}{\partial \ln f \partial \ln T} \quad (2.257)$$

Finalement, pour n_e et ses dérivées:

$$n_e = \frac{8\pi}{\lambda_c^3} I_{n_e} \quad (2.258)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial \ln x} \Big|_y = n_e \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (2.259)$$

$$\frac{\partial^2 n_e}{\partial \ln x \partial \ln y} = n_e \left[\frac{\partial^2 \ln I_{n_e}}{\partial \ln x \partial \ln y} + \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln x} \Big|_y \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln y} \Big|_x \right] \quad (2.260)$$

Dérivées de P_e

L'intégrale définissant I_{p_e} est de la même forme que celle de n_e en II-2.76:

$$I_{p_e} = \frac{f}{(1+f)^{d_f+1}} \frac{g^{5/2}}{(1+g)^{d_g \pm 3/2}} \sum_{i=0}^{d_f} \sum_{j=0}^{d_g} p_{ij} f^i g^j \quad (2.261)$$

On la réécrit :

$$I_{p_e} = K^P \cdot S^P \quad (2.262)$$

$$\text{avec } K^P = gK^n \quad (2.263)$$

$$\text{et } S^P = S^n \quad (2.264)$$

Le guillemet entre S_p et S_n exprime le fait que ces deux quantités ont exactement la même forme polynomiale mais avec des coefficients différents, p_{ij} au lieu de n_{ij} . On utilisera cette propriété de la façon suivante:

$$I_{p_e} = g \bar{I}_{n_e} \quad (2.265)$$

où \bar{I}_{n_e} est égal à I_{n_e} mais en remplaçant les coefficients n_{ij} par les coefficients p_{ij} . Les expressions des dérivées de \bar{I}_{n_e} seront donc exactement les mêmes que celles de I_{n_e} mais en remplaçant aussi les coefficients n_{ij} par les p_{ij} . Reste donc à calculer les dérivées de I_{p_e} grâce

aux relations II-2.265 et II-2.246. On a très simplement:

$$\left. \frac{\partial \ln I_{p_e}}{\partial \ln f} \right|_T = \frac{f}{2(f+1)} + \left. \frac{\partial \ln \bar{I}_{n_e}}{\partial \ln f} \right|_T \quad (2.266)$$

$$\left. \frac{\partial \ln I_{p_e}}{\partial \ln f} \right|_T = 1 + \left. \frac{\partial \ln \bar{I}_{n_e}}{\partial \ln T} \right|_f \quad (2.267)$$

$$\frac{\partial^2 \ln I_{p_e}}{\partial \ln f \partial \ln f} = \frac{f}{2(f+1)^2} + \frac{\partial^2 \ln \bar{I}_{n_e}}{\partial \ln f \partial \ln f} \quad (2.268)$$

$$\frac{\partial^2 \ln I_{p_e}}{\partial \ln T \partial \ln T} = \frac{\partial^2 \ln \bar{I}_{n_e}}{\partial \ln T \partial \ln T} \quad (2.269)$$

$$\frac{\partial^2 \ln I_{p_e}}{\partial \ln f \partial \ln T} = \frac{\partial^2 \ln \bar{I}_{n_e}}{\partial \ln f \partial \ln T} \quad (2.270)$$

Puis d'après la relation II-2.226, on obtient:

$$P_e = \frac{8\pi M_e c^2}{\lambda_c^3} I_{p_e} \quad (2.271)$$

$$\left. \frac{\partial P_e}{\partial \ln x} \right|_y = P_e \left. \frac{\partial \ln I_{p_e}}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.272)$$

$$\frac{\partial^2 P_e}{\partial \ln x \partial \ln y} = P_e \left[\frac{\partial^2 \ln I_{p_e}}{\partial \ln x \partial \ln y} + \left. \frac{\partial \ln I_{p_e}}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial \ln I_{p_e}}{\partial \ln y} \right|_x \right] \quad (2.273)$$

Dérivées de s_e

La relation II-2.236 définit l'entropie réduite à partir de la quantité adimensionnée I_{q_e} . C'est cette quantité qui est ajustée. On a:

$$I_{q_e} = \frac{f}{(1+f)^{d_f+2}} \frac{g^{5/2}}{(1+g)^{d_g+3/2}} \sum_{i=0}^{d_f} \sum_{j=0}^{d_g} q_{ij} f^i g^j \quad (2.274)$$

On remarque cette fois-ci en comparant avec II-2.76 que:

$$I_{q_e} = \frac{g}{f+1} \hat{I}_{n_e} \quad (2.275)$$

où \hat{I}_{n_e} a exactement la même forme analytique que I_{n_e} mais avec les coefficients q_{ij} au lieu de n_{ij} . En introduisant cette forme pour I_{q_e} dans la relation II-2.236 qui permet d'obtenir l'entropie réduite, on écrit simplement:

$$s_e^* = q_e^* + 2\sqrt{1+f} \perp \eta_e \quad (2.276)$$

$$q_e^* = \frac{\hat{I}_{n_e}}{I_{n_e} \sqrt{1+f}} \quad (2.277)$$

C'est donc les dérivées de q_e^* qu'il faut écrire pour avoir les dérivées de s_e^* , sachant que les dérivées de \hat{I}_{n_e} auront exactement les mêmes expressions que celles de I_{n_e} mais en remplaçant les coefficients n_{ij} par les coefficients q_{ij} on a

$$\left. \frac{\partial \ln q_e^*}{\partial \ln x} \right|_y = \left. \frac{\partial \ln \hat{I}_{n_e}}{\partial \ln x} \right|_y \perp \left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln x} \right|_y \perp \frac{f}{2(1+f)} \delta(x \perp f) \quad (2.278)$$

$$\frac{\partial^2 \ln q_e^*}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \ln \hat{I}_{n_e}}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{\partial^2 \ln I_{n_e}}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{f}{2(1+f)^2} \delta(x \perp f) \delta(y \perp f) \quad (2.279)$$

où $\delta(x \perp A)$ vaut 1 si $x=A$, 0 sinon. L'équation II-2.236 donne alors les dérivées de s_e^* :

$$\left. \frac{\partial s_e^*}{\partial \ln x} \right|_y = q_e^* \left. \frac{\partial \ln q_e^*}{\partial \ln x} \right|_y \perp \frac{1}{\sqrt{1+f}} \delta(x \perp f) \quad (2.280)$$

$$\frac{\partial^2 s_e^*}{\partial \ln x \partial \ln y} = q_e^* \left(\left. \frac{\partial \ln q_e^*}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial q_e^*}{\partial \ln y} \right|_x + \frac{\partial^2 q_e^*}{\partial \ln x \partial \ln y} \right) \quad (2.281)$$

$$+ \frac{f}{2(f+1)^{3/2}} \delta(x \perp f) \delta(y \perp f) \quad (2.282)$$

Finalement, l'entropie massique s'obtient à partir de la définition II-2.236 de l'entropie réduite:

$$\left. \frac{\partial s_e}{\partial \ln x} \right|_y = \alpha_e RT \left. \frac{\partial s_e^*}{\partial \ln x} \right|_y + s_e^* T \left. \frac{\partial s_e^*}{\partial \ln x} \right|_y + s_e \delta(x \perp T) \quad (2.283)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 s_e}{\partial \ln x \partial \ln y} = RT & \left[\left. \frac{\partial s_e^*}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln y} \right|_x + \left. \frac{\partial s_e^*}{\partial \ln y} \right|_x \left. \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln x} \right|_y + \frac{\partial^2 s_e^*}{\partial \ln x \partial \ln y} + \frac{\partial^2 \alpha_e}{\partial \ln x \partial \ln y} \right] \\ & + \left[\alpha_e \left. \frac{\partial s_e^*}{\partial \ln x} \right|_y + s_e^* \left. \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln x} \right|_y + \left. \frac{\partial s_e^*}{\partial \ln y} \right|_x \delta(y \perp T) \right] \delta(x \perp T) \end{aligned} \quad (2.284)$$

Dérivées de u_e

u_e et ses dérivées s'obtiennent à partir de la quantité adimensionnée I_{u_e} d'après la relation II-2.228. I_{u_e} et ses dérivées se calculent à partir des dérivées des autres grandeurs électroniques déjà calculées, en utilisant la relation II-2.237. On a donc:

$$\left. \frac{\partial I_{u_e}}{\partial \ln f} \right|_T = \sqrt{1+f} + \left. \frac{\partial I_{s_e}}{\partial \ln f} \right|_T + \frac{I_{p_e}}{I_{n_e} T^*} \left(\left. \frac{\partial I_{n_e}}{\partial \ln f} \right|_T \perp \left. \frac{\partial I_{p_e}}{\partial \ln f} \right|_T \right) \quad (2.285)$$

$$\left. \frac{\partial I_{u_e}}{\partial \ln T} \right|_f = \left. \frac{\partial I_{s_e}}{\partial \ln T} \right|_f + \frac{I_{p_e}}{I_{n_e} T^*} \left(\left. \frac{\partial I_{n_e}}{\partial \ln T} \right|_f \perp \left. \frac{\partial I_{p_e}}{\partial \ln T} \right|_f + 1 \right) \quad (2.286)$$

Puis la relation II-2.237 permet de déduire:

$$\left. \frac{\partial u_e}{\partial \ln x} \right|_y = RT \left(I_{u_e} \left. \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln x} \right|_y + \alpha_e \left. \frac{\partial I_{u_e}}{\partial \ln x} \right|_y \right) + u_e \delta(x \perp T) \quad (2.287)$$

2.7.3 Composante Ionique

Nous traiterons ici du mélange d'ions présents dans le plasma. Il sera toujours considéré comme un mélange parfait de gaz parfaits non dégénérés. Les relations II-2.53 où II-2.84 donnent donc l'énergie libre de ce mélange:

$$f_{ion} = kT \sum_{ions} N_i \left[\ln \left(\frac{N_i}{Z_i^{trans} Z_i^{int}} \right) \perp 1 \right] \quad (2.288)$$

Dans toute cette section, l'indice i court sur tous les ions présents dans le plasma. Les abondances N_i sont calculées par minimisation de l'énergie libre à masse volumique et température constante (voir section II-2.6.1). Enfin, on écrit la fonction de partition interne sous la forme:

$$Z_i^{int} = g_i^0 \omega_i e^{\perp E_i^0 \beta} \quad \text{où} \quad \omega_i = Z_i^a Z_i^{rot} Z_i^{vib} \quad (2.289)$$

ω contient les fonctions de partitions internes considérées dans le cadre de notre équation d'état : niveaux électroniques, de vibration et de rotation. E_i^0 est l'énergie du niveau électronique fondamental de l'espèce i . Par ailleurs, on utilise II-2.86 pour expliciter la fonction de partition translationnelle. Ce qui donne pour l'énergie libre :

$$f_{ion} = RT \sum_{ions} \alpha_i \left[\ln \left(\frac{\rho \alpha_i \mathcal{N}}{n_{Q_i} \omega_i} \right) \pm 1 + \beta E_i^0 \right] \quad (2.290)$$

Pression

Comme les fonctions de partition ne dépendent pas de la masse volumique (ou du volume), les relations II-2.9 et II-2.290 donnent trivialement la pression :

$$P_{ion} = \rho RT \sum_{ions} \alpha_i \quad (2.291)$$

Les dérivées premières sont données par :

$$\left. \frac{\partial P_{ion}}{\partial \ln x} \right|_y = P_{ion} \left[\left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln x} \right|_y + \delta(x \perp T) + \frac{1}{\sum_i \alpha_i} \sum_i \left. \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \right|_y \right] \quad (2.292)$$

$$\left. \frac{\partial^2 P_{ion}}{\partial \ln x \partial \ln y} \right|_x = P_{ion} \left[\left. \frac{\partial \ln P_{ion}}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial \ln P_{ion}}{\partial \ln y} \right|_x + \frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial \ln x \partial \ln y} \right] \quad (2.293)$$

$$+ \frac{1}{\sum_i \alpha_i} \sum_i \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \ln x \partial \ln y} \pm \frac{1}{\left(\sum_i \alpha_i \right)^2} \sum_i \left. \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \right|_y \sum_i \left. \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln y} \right|_x \quad (2.294)$$

Remarquons que la somme sur les abondances ioniques peut se simplifier en utilisant II-2.152 :

$$\begin{aligned} & \sum_i \alpha_i \\ &= \sum_X \sum_{q=0}^{Z_X} \alpha_{X^{q+}} \\ &= \alpha_{H^+} + \alpha_{H^-} + \alpha_{H_2} + \alpha_H + \sum_{"X>H"} \sum_{q=0}^{Z_X} \alpha_{X^{q+}} \\ &= y_H \pm \alpha_{H_2} + \sum_{"X>H"} y_X \end{aligned}$$

En prenant en compte le fait que $\sum_X y_X = \text{constante}$, on a :

$$\sum_i \alpha_i = \pm \alpha_{H_2} + \sum_X y_X \quad (2.295)$$

$$\sum_i \left. \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \right|_y = \pm \left. \frac{\partial \alpha_{H_2}}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.296)$$

$$\sum_i \left. \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \ln x \partial \ln y} \right|_x = \pm \left. \frac{\partial^2 \alpha_{H_2}}{\partial \ln x \partial \ln y} \right|_x \quad (2.297)$$

Entropie

On remarque que les α_i sont constants pendant la dérivation de II-2.290 car $\alpha_i = \mathcal{N} N_i$ et que les N_i sont constants dans la définition de l'entropie à partir de l'énergie libre (voir

équation II-2.9). On obtient:

$$s_{ion} = R \sum_i \left\{ \alpha_i \left[\frac{5}{2} + \frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln T} \Big|_v \perp \ln \left(\frac{\alpha_i \rho \mathcal{N}}{n_{Q_i} \omega_i} \right) \right] \right\} \quad (2.298)$$

ce que l'on réécrit comme suit pour l'implémenter le plus simplement possible:

$$s_{ion} = R \left\{ \left[\frac{5}{2} \perp \ln \mathcal{N} \perp \ln \rho \right] \sum_i \alpha_i \perp \sum_i \alpha_i \ln(\alpha_i) + \sum_i \alpha_i \left[\ln(n_{Q_i}) + \ln \omega_i + \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \Big|_v \right] \right\} \quad (2.299)$$

Pour la dérivée première, on a après quelques calculs:

$$\begin{aligned} \frac{\partial s_{ion}}{\partial \ln x} \Big|_y &= R \left\{ \sum_i \alpha_i \left[\frac{\partial}{\partial \ln x} \left(\frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln T} \Big|_v \right) \Big|_y + \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln x} \Big|_y \right] \right. \\ &\quad + \sum_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \Big|_y \left[\frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \Big|_v + \ln \omega_i + \ln n_{Q_i} \right] \\ &\quad \perp \sum_i \frac{\partial(\alpha_i \ln \alpha_i)}{\partial \ln x} \Big|_y + \left(\frac{3}{2} \delta(x \perp T) \perp \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \left(\sum_i \alpha_i \right) \\ &\quad \left. + \left(\frac{5}{2} \perp \ln \mathcal{N} \perp \ln \rho \right) \left(\sum_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.300)$$

Ainsi, les dérivées secondes valent:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 s_{ion}}{\partial \ln x \partial \ln y} &= R \left\{ \perp \sum_i \alpha_i \frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial \ln x \partial \ln y} + \sum_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \Big|_y \left(\frac{3}{2} \delta(x \perp T) \perp \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \right. \\ &\quad + \sum_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln y} \Big|_x \left(\frac{3}{2} \delta(y \perp T) \perp \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln y} \Big|_x \right) + \left(\frac{5}{2} \perp \ln \mathcal{N} \perp \ln \rho \right) \sum_i \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \ln x \partial \ln y} \\ &\quad + \sum_i \alpha_i \left[\frac{\partial^2}{\partial \ln x \partial \ln y} \left(\frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \Big|_v \right) + \frac{\partial^2 \ln \omega_i}{\partial \ln x \partial \ln y} \right] \\ &\quad + \sum_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln y} \Big|_x \left[\frac{\partial}{\partial \ln x} \left(\frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \Big|_v \right) \Big|_y + \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln x} \Big|_y \right] \\ &\quad + \sum_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \Big|_y \left[\frac{\partial}{\partial \ln y} \left(\frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \Big|_v \right) \Big|_x + \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln y} \Big|_x \right] \\ &\quad + \sum_i \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \ln x \partial \ln y} \left[\frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \Big|_v + \ln \omega_i + \ln n_{Q_i} \right] \\ &\quad \left. \perp \sum_i \frac{\partial(\alpha_i \ln \alpha_i)}{\partial \ln x} \Big|_y \right\} \end{aligned} \quad (2.301)$$

Avec pour la fonction x

$\ln(x)$:

$$\frac{\partial(\alpha_i \ln \alpha_i)}{\partial \ln x} \Big|_y = \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \Big|_y (\ln \alpha_i + 1) \quad (2.302)$$

$$\frac{\partial^2(\alpha_i \ln \alpha_i)}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial \ln x \partial \ln y} (\ln \alpha_i + 1) + \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \Big|_y \frac{\partial \ln \alpha_i}{\partial \ln y} \Big|_x \quad (2.303)$$

Energie interne

D'après sa définition (équation II-2.4) en fonction de f et s , on a pour l'énergie interne:

$$u_{ion} = \frac{3}{2}RT \sum_i \alpha_i + \sum_i \left(\alpha_i \left. \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \right|_v \right) + \mathcal{N} \sum_i (\alpha_i E_i^0) \quad (2.304)$$

Compte tenu de la convention adoptée pour les énergies des niveaux atomiques (voir section II-2.6.1), le dernier terme de l'équation ci-dessus est nul en milieu totalement ionisé. Nous avons soustrait la quantité constante $\sum_X (y_X E_{X^{0+}}^0)$ à u_{ion} pour modifier ce choix arbitraire de telle façon à ce que le dernier terme de l'équation ci-dessus soit nul en milieu totalement neutre. Cela revient à attribuer le niveau zéro d'énergie à chaque niveau fondamental des atomes ou à opérer un changement global de l'énergie interne de l'étoile. Ceci est toujours possible car ce n'est pas l'énergie interne mais sa dérivée temporelle qui intervient dans les équations de la structure stellaire (voir équation II-1.9). La quantité ajoutée n'a donc aucun impact mais nous permettra simplement de comparer les nouvelles valeurs de l'énergie internes à celle données par l'ancienne équation d'état.

Finalement:

$$u_{ion} = RT \left[\frac{3}{2} \sum_i \alpha_i + \sum_i \left(\alpha_i \left. \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \right|_v \right) + \beta \sum_X \sum_{q=0}^{Z_X} \alpha_{X^{q+}} (E_{X^{q+}}^0 - E_{X^0}^0) \right] \quad (2.305)$$

Les dérivées sont les suivantes:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u_{ion}}{\partial \ln x} \right|_y &= RT \left\{ \frac{3}{2} \left(\delta(x \perp T) \sum_i \alpha_i + \sum_i \left. \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \right|_y \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_i \alpha_i \left[\left. \frac{\partial}{\partial \ln x} \left(\left. \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \right|_v \right) \right|_y + \left. \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln T} \right|_v \delta(x \perp T) \right] \right. \\ &\quad \left. + \sum_X \sum_{q=0}^{Z_X} \frac{\partial \alpha_i}{\partial \ln x} \right|_y \left[\left. \frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln T} \right|_v + \beta (E_{X^{q+}}^0 - E_{X^0}^0) \right] \right\} \quad (2.306) \end{aligned}$$

2.8 Corrections au gaz parfait

L'énergie libre de configuration, composante essentielle du plasma pour la phase AGB notamment, a été reprise de Pols *et al.* (1995) avec une amélioration dans la cohérence des approximations effectuées. Elle se compose de deux parties ayant la même forme adimensionnée:

$$f^{conf} = f_{IP} + f_{EC} \quad (2.307)$$

$$f_{IP} = \perp \alpha_e RT f_{IP}^*(x, y) \quad (2.308)$$

$$f_{EC} = \perp \alpha_e RT f_{EC}^*(x, y) \quad (2.309)$$

$$\text{avec } x = \frac{u_m a}{n_e} \quad (2.310)$$

$$\text{et } y = \frac{13.6eV}{kT(eV)} \quad (2.311)$$

Les indices "IP" et "EC" se réfèrent respectivement à l'ionisation par pression et à l'écrantage de Coulomb. Le premier effet est la prise en compte de l'énergie transférée par les collisions

comme source d'ionisation. Le deuxième rend compte de l'influence des électrons libres qui se regroupent autour des noyaux positifs et abaissent en conséquence leur charge réelle lorsqu'on se place suffisamment loin. Ces deux phénomènes sont fonctions de la température et de la densité électronique, représentés par x et y .

Dans toute cette section, on adoptera la notation simplificatrice suivante:

$$Q_i = \left. \frac{\partial Q(j)}{\partial \ln i} \right|_{j \neq i} \quad (2.312)$$

2.8.1 Stratégie du calcul

Le principe du calcul des corrections est le suivant:

A partir de la forme choisie pour f^{conf} , on doit calculer par les formules II-2.9 les corrections à P et s dues aux effets non idéaux et, à partir de la définition II-2.108, la correction à la dégénérescence due à ces mêmes effets qui va modifier l'ionisation (voir section II-2.6.1). Ces corrections sont calculées par définition en variables (α_e, T, ρ) . On aura donc besoin du changement de variable permettant de passer dans le jeu (x, y) , qui est le système de variables dans lequel est écrit f^{conf} . Le passage $(\alpha_e, T, \rho) \rightarrow (x, y)$, s'obtient à partir des définitions de x et y (équations II-2.310 et II-2.311):

$$\left. \frac{\partial}{\partial \ln \alpha_e} \right|_{T, V} = \left. \frac{\partial}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.313)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial \ln T} \right|_{\alpha_e, V} = \perp \left. \frac{\partial}{\partial \ln y} \right|_x \quad (2.314)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial \ln V} \right|_{\alpha_e, T} = \left. \frac{\partial}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.315)$$

$$(2.316)$$

Une fois ces corrections obtenues, nous aurons besoin de leurs dérivées par rapports aux variables contraintes par le processus Newton-Raphson: $\ln f$ et $\ln T$. Un autre changement de variable sera alors nécessaire: $(x, y) \rightarrow (\ln f, \ln T)$:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \ln T} \right|_f = \left. \frac{\partial}{\partial \ln x} \right|_y x_T \perp \left. \frac{\partial}{\partial \ln y} \right|_x \quad (2.317)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial \ln f} \right|_T = \left. \frac{\partial}{\partial \ln x} \right|_y x_f \quad (2.318)$$

où l'on a utilisé les notations abrégées:

$$x_T = \left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln T} \right|_f \quad \text{et} \quad x_f = \left. \frac{\partial \ln I_{n_e}}{\partial \ln f} \right|_T \quad (2.319)$$

quantités calculées à la section II-2.7.2.

Cette stratégie nécessite de connaître exactement la forme analytique des fonctions f_{IP}^* et f_{EC}^* pour calculer leurs dérivées par rapports à (x, y) . Ces fonctions comportant des approximations, elles imposent certaines précautions d'emploi avec les corrections qu'elles permettent de calculer. Nous commencerons donc par expliciter ces approximations avant de rentrer dans les calculs des corrections proprement dit.

2.8.2 Formes analytiques et approximations

Ecrantage de Coulomb

La fonction f_{EC}^* utilisée est la suivante:

$$f_{\text{EC}}^* = \langle Z \rangle \frac{a_1 \Gamma}{\left[\left(\frac{\Gamma}{\Gamma + a_3} \right)^{1/a_2} + \left(a_1 \sqrt{\frac{3}{\Gamma}} \right)^{1/a_2} \right]^{a_2}} \quad (2.320)$$

$$\text{avec } \Gamma = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} e^2 \beta n_e^{1/3} \langle Z \rangle^{1/2/3} Q \quad (2.321)$$

$$Q = \left(\frac{1}{N_e^{\text{tot}}} \sum_i \frac{X_i Z_i^2}{M_i} + \theta_e \right) \quad (2.322)$$

$$\theta_e = \left. \frac{\partial \ln n_e}{\partial \eta_e} \right|_T \quad (2.323)$$

$$\langle Z \rangle = \frac{N_e}{N_0} \quad (2.324)$$

$$N_e^{\text{tot}} = \sum_i Z_i N_i \quad (2.325)$$

$$N_0 = \sum_i N_i \quad (2.326)$$

N_0 trace la quantité de matière présente par unité de masse dans le plasma. N_e^{tot} est le nombre d'électrons libres dans un plasma totalement ionisé. Γ est le paramètre d'interaction coulombienne, défini comme le rapport de l'énergie caractéristique d'interaction coulombienne à l'énergie thermique. La difficulté des effets coulombiens est que leur expression analytique dépend du régime dans lequel on se trouve. Une "régime" est caractérisé par un couple (Γ, η_e) , c'est-à-dire les degrés de corrélation et de dégénérescence du plasma. Cela explique que le facteur θ_e , compris entre 0 et 1, suivant la valeur de η_e , apparaissent dans l'expression de f_{EC}^* . L'avantage de l'expression analytique utilisée est qu'elle est ajustée sur les différentes expressions disponibles dans la littérature pour des régimes extrêmes. Les coefficients choisis:

$$a_1 = 0.89752, a_2 = 0.768 \quad \text{et} \quad a_3 = 0.208$$

réalisent la jonction entre

- le modèle à corrélations faibles, $\Gamma < 0.3$, (Mihalas *et al.* (1988), Graboske *et al.* (1969)) valable aussi pour tout η_e grâce à l'incorporation de θ_e . Ce modèle redonne l'approximation de Debye-Hückel à faible dégénérescence, prend en compte la taille finie des ions et utilise un plasma multi-espèces.
- le modèle à fortes corrélations (jusqu'à $\Gamma = 300$ en phase solide) réalisé par Slattery *et al.* (1980) grâce à des simulations Monte-Carlo d'un plasma à une espèce (ce qui est une approximation par rapport aux plasmas envisagés dans notre cas).

Pour simplifier la prise en compte des effets coulombiens, deux approximations permettent de ne prendre en compte que les électrons dans l'expression analytique de f_{EC}^* :

- on suppose que f_{EC}^* ne dépend que de la moyenne des paramètres d'interaction coulombienne de chaque espèce, ce qui permet d'écrire:

$$f_{\text{EC}} = \perp RT \sum_i \alpha_i f_{\text{EC}}^*(\Gamma_i) = \perp RT f_{\text{EC}}^*(\langle \Gamma \rangle) \sum_i \alpha_i \quad (2.327)$$

où l'on prend comme paramètre d'interaction moyen la valeur donnée par II-2.321.

- On utilise $N_e \sim N_e^{\text{tot}}$, ce qui n'est strictement valable qu'en milieu totalement ionisé. Cela permet d'écrire:

$$\langle Z \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N_e}{N_0} \sim \frac{N_e^{\text{tot}}}{N_0} \quad (2.328)$$

$$\langle Z^2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sum_i N_i Z_i^2}{N_e} \sim \frac{\sum_i N_i Z_i^2}{N_e^{\text{tot}}} \quad (2.329)$$

Contrairement à Pols *et al.* (1995), où le terme θ^e était approximé, ce facteur est calculé à partir de n_e , lui-même calculé à la section II–2.7.2. Cependant, comme le calcul des corrections demande de connaître les dérivées troisièmes de f_{EC}^* (voir section II–2.8.3), cela demanderait de calculer les dérivées *quatrième de* n_e car f_{EC}^* dépend de θ_e ! Pour être cohérent le calcul des dérivées troisième a été effectué comme pour toutes les autres quantités, mais les dérivées quatrième sont mises à zéro. Au pire, ceci retarde un peu la convergence du modèle et au mieux, l'empêche de diverger à cause de dérivées trop bruyantes numériquement ou trop peu précises (on se rappellera que n_e est approximé par un polynôme d'ordre 4!). En introduisant la variable $\ln f$ dans la définition de θ^e , on obtient pour lui-même et ses dérivées:

$$\theta^e = \frac{x_f}{\sqrt{1+f}} \quad (2.330)$$

$$\left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln x} \right|_y = \frac{x_{ff}}{x_f \sqrt{1+f}} \perp \frac{f}{2(1+f)^{3/2}} \quad (2.331)$$

$$\left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln y} \right|_x = \left. \frac{\partial \ln \theta^e}{\partial \ln x} \right|_y x_T \perp \frac{x_{fT}}{\sqrt{1+f}} \quad (2.332)$$

$$\frac{\partial^2 \theta^e}{\partial \ln x \partial \ln x} = \frac{1}{x_f} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+f}} \left[\frac{x_{fff}}{x_f} \perp \left(\frac{x_{ff}}{x_f} \right)^2 \perp \frac{f}{2(f+1)^2} \right] \perp \frac{f}{2(f+1)} \left. \frac{\partial \ln \theta^e}{\partial \ln x} \right|_y \right\} \quad (2.333)$$

$$\frac{\partial^2 \theta^e}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \ln \theta^e}{\partial \ln x \partial \ln x} x_T \perp \frac{1}{\sqrt{1+f}} \left(\frac{x_{fT}}{x_f} \perp \frac{x_{ff} x_T}{x_f^2} \right) \quad (2.334)$$

$$\frac{\partial^2 \theta^e}{\partial \ln y \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \theta^e}{\partial \ln y \partial \ln x} x_T + \left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln x} \right|_y \left(\frac{x_{fT} x_T}{x_f} \perp x_{TT} \right) \perp \frac{1}{\sqrt{1+f}} \left(\frac{x_{fT} x_T}{x_f} \perp x_{fTT} \right) \quad (2.335)$$

$$(2.336)$$

Les dérivées d'ordre 3 n'ont pas été reportées ici car ce sont les premières qui ne sont pas exactes mais approximées. En effet, elles contiennent des dérivées d'ordre 4 de x , qui sont supposées nulles.

Toutes les dérivées de f_{EC}^* sont calculées comme suit:

$$\left. \frac{\partial f_{\text{EC}}^*}{\partial \ln a} \right|_b = \frac{d f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma} \left. \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln a} \right|_b \quad (2.337)$$

avec :

$$\left. \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln x} \right|_y = \frac{1}{3} + \frac{1}{Q} \left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.338)$$

$$\left. \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln y} \right|_x = 1 + \frac{1}{Q} \left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln y} \right|_x \quad (2.339)$$

$$\frac{\partial^2 \ln \Gamma}{\partial \ln a \partial \ln b} = \frac{1}{Q} \frac{\partial^2 \theta^e}{\partial \ln a \partial \ln b} \perp \frac{1}{Q^2} \left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln a} \right|_b \left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln b} \right|_a \quad (2.340)$$

$$\frac{\partial^3 \ln \Gamma}{\partial \ln a \partial \ln b \partial \ln c} = \frac{1}{Q} \left(\frac{\partial^3 \theta^e}{\partial \ln a \partial \ln b \partial \ln c} \perp \frac{1}{Q} \left. \frac{\partial^2 \theta^e}{\partial \ln a \partial \ln b} \right|_{d \neq c} \left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln c} \right|_{d \neq b} \perp 2 \left. \frac{\partial \theta^e}{\partial \ln b} \right|_{d \neq b} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \ln a \partial \ln c} \right) \quad (2.341)$$

où a et b sont pris parmi $\ln f$ et $\ln T$. Pour que le calcul des dérivées soit plus facile, on écrit f_{EC}^* sous la forme suivante :

$$f_{\text{EC}}^* = \frac{a_1 \langle Z \rangle \Gamma}{D^{a_2}} \quad (2.342)$$

$$\text{avec } D = B + C \quad (2.343)$$

$$B = (A\Gamma)^{1/a_2} \quad (2.344)$$

$$A = \frac{1}{\Gamma + a_3} \quad (2.345)$$

$$C = \left(a_1 \sqrt{\frac{3}{\Gamma}} \right)^{1/a_2} \quad (2.346)$$

Les dérivées de f_{EC}^* s'obtiendront alors à partir de celles de D qui demandent celles de B et C :

$$\frac{d \ln B}{d \ln \Gamma} = \frac{a_3}{a_2} A \quad (2.347)$$

$$\frac{d^2 \ln B}{d \ln \Gamma^2} = \perp A \frac{d \ln B}{d \ln \Gamma} \Gamma \quad (2.348)$$

$$\frac{d^3 \ln C}{d \ln \Gamma^3} = \frac{\perp 1}{2a_2} \quad (2.349)$$

$$(2.350)$$

Ce qui donne pour les dérivées de D par rapport à Γ :

$$D_\gamma = B \frac{d \ln B}{d \ln \Gamma} + C \frac{d \ln C}{d \ln \Gamma} \quad (2.351)$$

$$D_{\gamma\gamma} = B \frac{d \ln B}{d \ln \Gamma} \left(\frac{d \ln B}{d \ln \Gamma} A \Gamma \right) + C \left(\frac{d \ln C}{d \ln \Gamma} \right)^2 \quad (2.352)$$

$$D_{\gamma\gamma\gamma} = B \frac{d \ln B}{d \ln \Gamma} \left[\left(\frac{d \ln B}{d \ln \Gamma} \right)^2 \perp 3A\Gamma \frac{d \ln B}{s \ln \Gamma} + A^2 \Gamma (\Gamma \perp a_3) \right] + C \left(\frac{d \ln C}{d \ln \Gamma} \right)^3 \quad (2.353)$$

Puis pour f_{EC}^* :

$$\frac{d \ln f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma} = 1 \perp a_2 \frac{D_\gamma}{D} \quad (2.354)$$

$$\frac{d^2 f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma^2} = f_{\text{EC}}^* \left\{ \left(\frac{d \ln f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma} \right)^2 \perp a_2 \left[\frac{D_{\gamma\gamma}}{D} \perp \left(\frac{D_\gamma}{D} \right)^2 \right] \right\} \quad (2.355)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^3 f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma^3} &= 3 \frac{d^2 f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma^2} \frac{d \ln f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma} \perp 2 f_{\text{EC}}^* \left(\frac{d \ln f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma} \right)^3 \\ &+ a_2 f_{\text{EC}}^* \left[3 \frac{D_\gamma D_{\gamma\gamma}}{D^2} \perp 2 \left(\frac{D_\gamma}{D} \right)^3 \perp \frac{D_{\gamma\gamma\gamma}}{D} \right] \end{aligned} \quad (2.356)$$

Ces calculs préliminaires permettent d'appliquer la relation II-2.337 et de calculer les dérivées secondes et troisièmes:

$$\frac{\partial^2 f_{\text{EC}}^*}{\partial \ln a \partial \ln b} = \frac{d^2 f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma^2} \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln a} \Big|_b \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln b} \Big|_a + \frac{d f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma} \frac{\partial^2 \ln \Gamma}{\partial \ln a \partial \ln b} \quad (2.357)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \ln \Gamma}{\partial \ln a \partial \ln b \partial \ln c} &= \frac{d^3 f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma^3} \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln a} \Big|_{d \neq a} \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln b} \Big|_{d \neq b} \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln c} \Big|_{d \neq c} \\ &+ \frac{d^2 f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma^2} \left[\frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln a} \Big|_{d \neq a} \frac{\partial^2 \ln \Gamma}{\partial \ln b \partial \ln c} + \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln b} \Big|_{d \neq b} \frac{\partial^2 \ln \Gamma}{\partial \ln c \partial \ln a} + \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln c} \Big|_{d \neq c} \frac{\partial^2 \ln \Gamma}{\partial \ln b \partial \ln a} \right] \\ &+ \frac{d f_{\text{EC}}^*}{d \ln \Gamma} \frac{\partial^3 \ln \Gamma}{\partial \ln a \partial \ln b \partial \ln c} \end{aligned} \quad (2.358)$$

Ionisation par pression

La fonction utilisée est la suivante:

$$g_{IP} = e^{\perp \left(\frac{c_1}{x} \right)^{c_2}} \left[y + \eta_e + c_3 \ln \left(1 + \frac{x}{c_4} \right) \right] \quad (2.359)$$

Cette forme analytique a été choisie uniquement pour avoir le bon comportement global sur l'ionisation des espèces. Pour quantifier l'effet d'ionisation par pression, on utilise le volume, V_1 , supposé sphérique, occupé par *une* particule en écrivant à partir de la définition de n_x (équation II-2.1): $1 = n_x V_{1x} = n_x \frac{4\pi}{3} \langle r_x \rangle^3$. On a donc pour la distance moyenne entre les électrons: $\langle r_e \rangle \sim n_e^{\perp 1/3}$. Pour contraindre le comportement de l'ionisation, on compare cette distance caractéristique à la taille d'un atome caractérisée par le rayon de Bohr, r_B . Cela donne (d'après Pols *et al.* (1995) et Kippenhahn & Weigert (1990)):

- Si $\langle r_e \rangle \ll r_B$: les collisions sont peu fréquentes et les corrections d'ionisation par pression sont donc négligeables. Le poids statistiques des niveaux d'énergie doit être inchangé. L'ionisation radiative domine: T et η_e contrôlent l'ionisation.
- Si $\langle r_e \rangle \gg r_B$: les collisions sont très nombreuses et ce sont elles qui dominent l'ionisation par rapport aux transitions radiatives. Le terme de correction sur la dégénérescence doit donc être suffisamment négatif pour que les rapports d'ionisation soient très grands. *Quelque soit T , η_e^{eff} contrôle l'ionisation.* Lorsque ce terme diminue pour assurer cette condition, ρ doit être monotone pour éviter une transition de phase non physique. Cette monotonie n'est pas complètement atteinte par la forme analytique utilisée (voir Pols *et al.* (1995) pour plus de détails).
- Dans le régime intermédiaire, $\langle r_e \rangle \sim r_B$: les deux effets sont semblables et se compensent de telle façon que les rapports d'ionisation deviennent *indépendants de T et η_e^{eff}* et égaux au rapport des poids statistiques de leur niveau fondamental.

On se rend compte que la forme analytique de g_{IP}^* n'est donc pas très précise. Elle l'est juste assez pour qu'un ajustement de ce terme correctif soit pertinent sur une équation plus complète physiquement. Pols *et al.* (1995) se sont servi d'un mélange de fractions de masse $X_H = 0.7$ et $X_{He} = 0.2$ de l'équation d'état MHD (pour Mihalas, Hummer, Dappen, voir Mihalas *et al.* (1988)). Si l'on s'éloigne de ces valeurs, l'ajustement est donc théoriquement faux. Cependant, la forme du fit est trop qualitative pour que l'influence de la composition empêche un comportement correct de l'ionisation par pression (Pols, communication privée). On a

$$c_1 = 3, c_2 = 0.25, c_3 = 2, c_4 = 0.03$$

L'ionisation est donc bien décrite mais les termes correctifs de pression et d'entropie qui en découlent ne sont pas contraint par l'ajustement réalisé pour g_{IP}^* . On doit donc vérifier que les corrections des grandeurs thermodynamiques, découlant de f_{IP}^* et dûes au fait que le milieu peut s'ioniser, s'annulent bien lorsque le milieu est totalement ionisé, à T et ρ constants. Dans ce cas là, les paramètres d'entrée de g_{IP} sont $y = y^{tot}$ et $x = x^{tot} = \text{uma } \rho N_e^{tot}$. Pour vérifier cette condition, on pose:

$$f_{IP}^* = g_{IP}(x, y) \perp g_{IP}^{tot}(x^{tot}, y^{tot}) \quad (2.360)$$

On obtient alors bien $f_{IP}^* = 0$ en milieu totalement ionisé quand $x = x^{tot}$ et $y = y^{tot}$. Cette correction a un effet pervers. En effet, la fonction g_{IP} fait intervenir η_e . Que vaudra la dégénérescence dans un milieu totalement ionisé? Cette question demanderait d'inverser $x(\eta_e)$ pour obtenir $\eta_e(x)$, ce qui, on s'en souvient (voir II-2.41 et II-2.310) n'est pas aisé et demande beaucoup de temps de calcul. On utilise donc pour calculer f_{IP}^* une expression $f(x, y)$ valable uniquement dans les régimes largement dégénérés, ce qui est le domaine d'application de l'ionisation par pression:

$$f = 1.75575A(1+A)^{1/3} \quad (2.361)$$

$$A = 0.61315xy^{3/2} \quad (2.362)$$

Pour être cohérent dans le calcul de f_{IP}^* , on utilise cette approximation dans g_{IP}^{tot} où cela est nécessaire mais aussi dans $g_{IP}(x, y)$. Cependant, contrairement à Pols *et al.* (1995), nous avons choisis de ne pas appliquer d'autres approximation en conservant la relation $\eta_e(f)$ complète (voir II-2.79). Le calcul des dérivées de f_{IP}^* par rapport à f et T , en utilisant les

relations II-2.317 et II-2.318, demandera donc de connaître:

$$\left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln x} \right|_y = \frac{1 + \frac{4}{3}A}{1 + A} \quad (2.363)$$

$$\left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln y} \right|_x = \frac{3}{2} \left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.364)$$

$$\frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln x \partial \ln x} = \frac{A}{3(1 + A) \left(1 + \frac{4}{3}A\right)} \quad (2.365)$$

$$\frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{3}{2} \frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln x \partial \ln x} \quad (2.366)$$

$$\frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln y \partial \ln y} = \frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.367)$$

$$\frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln y \partial \ln x} = \frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln x \partial \ln x} \quad (2.368)$$

$$\frac{\partial \ln^3 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln x} = \frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln x \partial \ln x} \left(\frac{3}{A} + 4A \right) \quad (2.369)$$

$$\frac{\partial \ln^3 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial \ln^3 \ln f}{\partial \ln y \partial \ln y \partial \ln y} = \frac{\partial \ln^3 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln y \partial \ln y} \frac{\partial \ln^3 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln x} \quad (2.370)$$

Remarquons que les dérivées croisées secondes ne sont pas égales car ce sont des dérivées logarithmiques. Un facteur constitué du rapport des dérivées premières permet de passer de

l'une à l'autre (voir II–F.12 à l'annexe F). D'où pour les dérivées de η_e par rapport à x et y :

$$\left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y = \sqrt{1+f} \left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.371)$$

$$\left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln y} \right|_x = \frac{3}{2} \left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.372)$$

$$\frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln x} = \left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y \left(\frac{f}{2(1+f)} \left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln x} \right|_y + \frac{\partial \ln^2 f}{\partial \ln x \partial \ln x} \right) \quad (2.373)$$

$$\frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{3}{2} \frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln x} \quad (2.374)$$

$$\frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln y \partial \ln y} = \frac{3}{2} \frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.375)$$

$$\frac{\partial^3 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln x} = \left(\left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y \right)^{\perp 1} \left(\frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln x} \right)^2 \quad (2.376)$$

$$+ \left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y \left[\frac{\partial \ln^3 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln x} \frac{\partial \ln^2 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x} \right] \quad (2.377)$$

$$+ \left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln x} \right|_y \frac{f}{2(f+1)} \left(\frac{1}{1+f} \left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln x} \right|_y + \frac{\partial \ln^2 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x} \right) \quad (2.378)$$

$$\frac{\partial^3 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln y} = \frac{3}{2} \left(\left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y \right)^{\perp 1} \left(\frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln x} \right)^2 + \quad (2.379)$$

$$\left. \frac{\partial \eta_e}{\partial \ln x} \right|_y \left[\frac{\partial \ln^3 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln x} \frac{\partial \ln^2 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x} \right] \quad (2.380)$$

$$+ \left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln x} \right|_y \frac{f}{2(f+1)} \left(\frac{1}{1+f} \left. \frac{\partial \ln f}{\partial \ln x} \right|_y + \frac{\partial \ln^2 \ln f}{\partial \ln x \partial \ln x} \right) \quad (2.381)$$

$$\frac{\partial^3 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln y \partial \ln y} = \frac{3}{2} \frac{\partial^3 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.382)$$

$$\frac{\partial^3 \eta_e}{\partial \ln y \partial \ln y \partial \ln y} = \frac{3}{2} \frac{\partial^3 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln y \partial \ln y} \quad (2.383)$$

On peut ensuite calculer facilement les dérivées de g_{IP} en posant:

$$g_{IP} = A \cdot B \quad (2.384)$$

$$A = e^{\perp E} \quad (2.385)$$

$$E = \left(\frac{c_1}{x} \right)^{c_2} \quad (2.386)$$

$$B = y + \eta_e + c_3 \ln D \quad (2.387)$$

$$D = 1 + \frac{x}{c_4} \quad (2.388)$$

On détermine les dérivées des variables intermédiaires pour obtenir celles de g_{IP} :

$$\frac{\partial^n E}{d \ln x^n} = (\perp c_2)^n E \quad (2.389)$$

$$A_x = c_2 A E \quad (2.390)$$

$$A_{xx} = c_2 A_x (E \perp 1) \quad (2.391)$$

$$A_{xxx} = c_2 [A_{xx} (E \perp 1) \perp c_2 A_x E] \quad (2.392)$$

$$\left. \frac{\partial \ln D}{\partial \ln x} \right|_y = \perp \frac{x D}{c_4} \quad (2.393)$$

$$\frac{\partial \ln^2 D}{\partial \ln x \partial \ln x} = D \left. \frac{\partial \ln D}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.394)$$

$$\frac{\partial^3 D}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln x} = \left. \frac{\partial \ln D}{\partial \ln x} \right|_y D \left(D + \left. \frac{\partial \ln D}{\partial \ln x} \right|_y \right) \quad (2.395)$$

$$B_{x^n} = \frac{\partial^n \eta_e}{d \ln x^n} \perp c_3 \frac{\partial^n D}{d \ln x^n} \quad (2.396)$$

$$B_{y^n} = y + \frac{\partial^n \eta_e}{d \ln y^n} \quad (2.397)$$

$$B_{xy} = \frac{\partial^2 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.398)$$

$$B_{xxy} = \frac{\partial^3 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.399)$$

$$B_{xyy} = \frac{\partial^3 \eta_e}{\partial \ln x \partial \ln y \partial \ln y} \quad (2.400)$$

$$(2.401)$$

Ce qui donne:

$$\left. \frac{\partial g_{IP}}{\partial \ln a} \right|_b = B_a A + A_a B \quad (2.402)$$

$$\frac{\partial^2 g_{IP}}{\partial \ln a \partial \ln b} = B_{aa} A + A_a B_b + A_b B_a + A_{aa} B \quad (2.403)$$

$$\frac{\partial^3 g_{IP}}{\partial \ln a \partial \ln b \partial \ln c} = B_{abc} A + A_a B_{bc} + A_b B_{ac} + A_c B_{ab} \quad (2.404)$$

$$+ B_a A_{bc} + B_b A_{ac} + B_c A_{ab} + A_{abc} B \quad (2.405)$$

2.8.3 Calcul des corrections

Dans toute cette partie, on essaiera de trouver les corrections des grandeurs thermodynamiques à partir de: $f^* = f_{IP}^* + f_{EC}^*$ et de ses dérivées, maintenant connues.

Vers la dégénérescence effective ...

A partir de la définition II-2.108, et en utilisant la relation de changement de variable II-2.313, on a:

$$\Delta \eta_e = \perp \left[f^* + \left. \frac{\partial f^*}{\partial \ln x} \right|_y \right] \quad (2.406)$$

A partir de cette expression et des changements de variables II-2.317 et II-2.318, on obtient les dérivées de la correction de dégénérescence:

$$\left. \frac{\partial \Delta \eta_e}{\partial \ln T} \right|_f = A \perp B x_T \quad (2.407)$$

$$\left. \frac{\partial \Delta \eta_e}{\partial \ln f} \right|_T = \perp B x_f \quad (2.408)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \eta_e}{\partial \ln f \partial \ln f} = \perp B x_{ff} \perp x_f^2 B_x \quad (2.409)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \eta_e}{\partial \ln T \partial \ln T} = (A_x + B_y) x_T \perp A_y \perp x_T^2 B_x \perp x_{TT} B \quad (2.410)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta \eta_e}{\partial \ln f \partial \ln T} = \perp x_{fT} \perp x_f x_T B_x + x_f A_y \quad (2.411)$$

où nous avons pris les notations abrégées:

$$A = \left. \frac{\partial f^*}{\partial \ln y} \right|_x + \frac{\partial^2 f^*}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.412)$$

$$B = \left. \frac{\partial f^*}{\partial \ln x} \right|_y + \frac{\partial^2 f^*}{\partial \ln x \partial \ln x} \quad (2.413)$$

On notera donc que les dérivées de $\Delta \eta_e$ font intervenir *les dérivées troisièmes* de la fonction f^* .

Correction à la pression

A partir de la définition II-2.9, et en utilisant la relation de changement de variable II-2.315, on calcule d'abord des corrections à la pression adimensionnées:

$$\Delta P^* \stackrel{def}{=} \frac{P_{cor}}{RT} = \perp x \left. \frac{\partial f^*}{\partial \ln x} \right|_y \quad (2.414)$$

Ce qui permet de calculer les dérivées adimensionnées:

$$\Delta P_f^* \stackrel{def}{=} \frac{1}{RT} \left. \frac{\partial P_{cor}}{\partial \ln f} \right|_T = x \left. \frac{\partial \Delta \eta_e}{\partial \ln f} \right|_T \quad (2.415)$$

$$\Delta P_T^* \stackrel{def}{=} \frac{1}{RT} \left. \frac{\partial P_{cor}}{\partial \ln T} \right|_f = \Delta P^* \perp x \left[x_T B \perp \frac{\partial^2 f^*}{\partial \ln x \partial \ln y} \right] \quad (2.416)$$

$$\Delta P_{ff}^* \stackrel{def}{=} \frac{1}{RT} \frac{\partial^2 P_{cor}}{\partial \ln f \partial \ln f} = x \left(\frac{\partial^2 \Delta \eta_e}{\partial \ln f \partial \ln f} + x_f \left. \frac{\partial \Delta \eta_e}{\partial \ln f} \right|_T \right) \quad (2.417)$$

$$\Delta P_{fT}^* \stackrel{def}{=} \frac{1}{RT} \frac{\partial^2 P_{cor}}{\partial \ln f \partial \ln T} = \Delta P_f^* + x \left[\frac{\partial^2 \Delta \eta_e}{\partial \ln f \partial \ln T} + x_T \left. \frac{\partial \Delta \eta_e}{\partial \ln f} \right|_T \right] \quad (2.418)$$

$$\begin{aligned} \Delta P_{TT}^* \stackrel{def}{=} \frac{1}{RT} \frac{\partial^2 P_{cor}}{\partial \ln T \partial \ln T} &= \Delta P_T^* (2 + x_T) \perp \Delta P^* (x_T + 1) \\ &\perp x \left\{ \left[B_x x_T \perp \frac{\partial^3 f^*}{\partial \ln x \partial \ln x \partial \ln y} \perp B_y \right] x_T \right. \\ &\left. + B x_{TT} + \frac{\partial^3 f^*}{\partial \ln y \partial \ln y \partial \ln x} \right\} \end{aligned} \quad (2.419)$$

Il suffit alors de remultiplier chaque terme adimensionné par RT pour obtenir les corrections P_{cor} et leurs dérivées.

Correction à l'entropie

Les corrections à l'entropie sont calculées aussi sous forme réduite à partir de la définition II-2.9 et du changement de variable II-2.314:

$$\Delta s^* \stackrel{def}{=} \frac{s_{cor}}{R \alpha_e} = f^* \perp \frac{\partial f^*}{\partial \ln y} \Big|_x \quad (2.420)$$

Les dérivées sont alors:

$$\frac{\partial \Delta s^*}{\partial \ln f} \Big|_T = x_f C \quad (2.421)$$

$$\frac{\partial \Delta s^*}{\partial \ln T} \Big|_f = x_T C + D \quad (2.422)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta s^*}{\partial \ln f \partial \ln f} = x_f^2 C_x + x_{ff} C \quad (2.423)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta s^*}{\partial \ln T \partial \ln T} = x_T^2 C_x + x_{TT} C \perp 2x_{TC} \perp D_y \quad (2.424)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta s^*}{\partial \ln f \partial \ln T} = x_T x_f C_x \perp x_f C_y + x_{fT} C \quad (2.425)$$

où l'on a abrégé:

$$C = \frac{\partial f^*}{\partial \ln x} \Big|_y + \frac{\partial^2 f^*}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (2.426)$$

$$D = \frac{\partial^2 f^*}{\partial \ln y \partial \ln y} + \frac{\partial f^*}{\partial \ln y} \Big|_x \quad (2.427)$$

$$(2.428)$$

Les dérivées de l'entropie sont dimensionnées par les relations suivantes à partir de la définition II-2.420 et où a et b représentent respectivement f et T :

$$\frac{\partial s_{cor}}{\partial \ln a} \Big|_b = R \left[\alpha_e \frac{\partial \Delta s^*}{\partial \ln a} \Big|_b + \Delta s^* \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln a} \Big|_b \right] \quad (2.429)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 s_{cor}}{\partial \ln a \partial \ln b} &= R \left[\alpha_e \frac{\partial^2 \Delta s^*}{\partial \ln a \partial \ln b} + \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln a} \Big|_b \frac{\partial \Delta s^*}{\partial \ln b} \Big|_a \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln b} \Big|_a \frac{\partial \Delta s^*}{\partial \ln a} \Big|_b + \Delta s^* \frac{\partial^2 \alpha_e}{\partial \ln a \partial \ln b} \right] \end{aligned} \quad (2.430)$$

Correction à l'énergie interne

La définition de u en fonction de f et s donne:

$$\Delta u^* \stackrel{def}{=} \frac{u_{cor}}{RT \alpha_e} = \perp \frac{\partial f^*}{\partial \ln y} \Big|_x \quad (2.431)$$

d'où les dérivées

$$\frac{\partial u_{cor}}{\partial \ln f} \Big|_T = RT \left[\Delta u^* \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln f} \Big|_T \perp \alpha_e x_f \frac{\partial^2 f^*}{\partial \ln x \partial \ln y} \right] \quad (2.432)$$

$$\frac{\partial u_{cor}}{\partial \ln T} \Big|_f = RT \left[\Delta u^* \frac{\partial \alpha_e}{\partial \ln T} \Big|_f \perp \alpha_e \left(x_T \frac{\partial^2 f^*}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{\partial^2 f^*}{\partial \ln y \partial \ln y} \right) + u_{cor} \right] \quad (2.433)$$

2.9 Quelques vérifications

2.9.1 Cohérence thermodynamique

Un des test effectué a été de vérifier que la relation de Maxwell:

$$\left. \frac{\partial s}{\partial V} \right|_T = \left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_V \quad (2.434)$$

était bien vérifiée par les grandeurs totales obtenues. La relation ci-dessus a été réécrite

$$\rho T \left. \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \right|_T + P \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_\rho = 0 \quad (2.435)$$

en passant du volume spécifique à ρ et en dérivées logarithmiques. Puis, en utilisant le changement de variable $(\rho, \ln T) \rightarrow (\ln f, \ln T)$ (équation II-2.91), on obtient:

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T + \frac{P}{\rho T} \left(\left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_f \left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \right|_T + \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln f} \right|_T \left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right|_f \right) = 0 \quad (2.436)$$

Cette relation a pu être vérifiée dans tout le plan $(\eta_e, \log T)$ présenté en II-2.5 à la précision de la machine près.

2.9.2 Ionisation

Les figures II-2.10 et II-2.11 présentent l'ionisation des abondances H , H^+ , H^- , H_2 de l'Hydrogène, et de celles de tous les ions des espèces C,N,O et du Neon dans une AGB de 3 masses solaires avec $Z = 0.02$. L'ordonnée est la fraction molaire de l'élément et l'abscisse, soit la température, soit la dégénérescence ($\ln f$). On remarquera que certains éléments (Helium ou Carbone par exemple) n'ont pas un comportement monotone en fonction de la température. C'est du au fait que la température n'est pas monotone mais présente un pic pour redescendre dans le coeur de l'étoile. Ceci se produit aussi pour $\ln f$ car cette fonction peut avoir une petite inversion dans les couches externes de l'étoile. De plus, on note entre $1 \cdot 10^7 K$ et $2 \cdot 10^7 K$ un saut dans toutes les abondances de C,N,O et Ne. C'est parce que l'on atteint la couche en fusion d'Helium: il suffit de regarder la figure d'ionisation de l'Helium pour s'en convaincre. On passe de $Y_{He} = 0.075 (X_{He} = 0.3)$ à $Y_{He} \sim 0.25 (X_{He} \sim 1)$. La zone d'ionisation partielle en fonction de la dégénérescence est beaucoup plus resserrée qu'en fonction de la température. Les zones d'ionisations partielles du Néon et du Carbone ont été agrandie pour s'en rendre compte: les profil sont extrêmement piqués notamment autour de $\ln f = \pm 13$.

2.9.3 Conséquences et test

En guise de résumé, la figure 2.12 montre les différentes modifications apportées par l'incorporation de la nouvelle équation d'état dans l'ensemble du code d'évolution stellaire (en vert):

- la nécessité de connaître les dérivées Newton-Raphson a demandé le calcul analytique des dérivées thermodynamiques jusqu'à l'ordre 4.
- il a fallu estimer la dégénérescence dans les modèles polytropiques utilisés comme modèles initiaux.

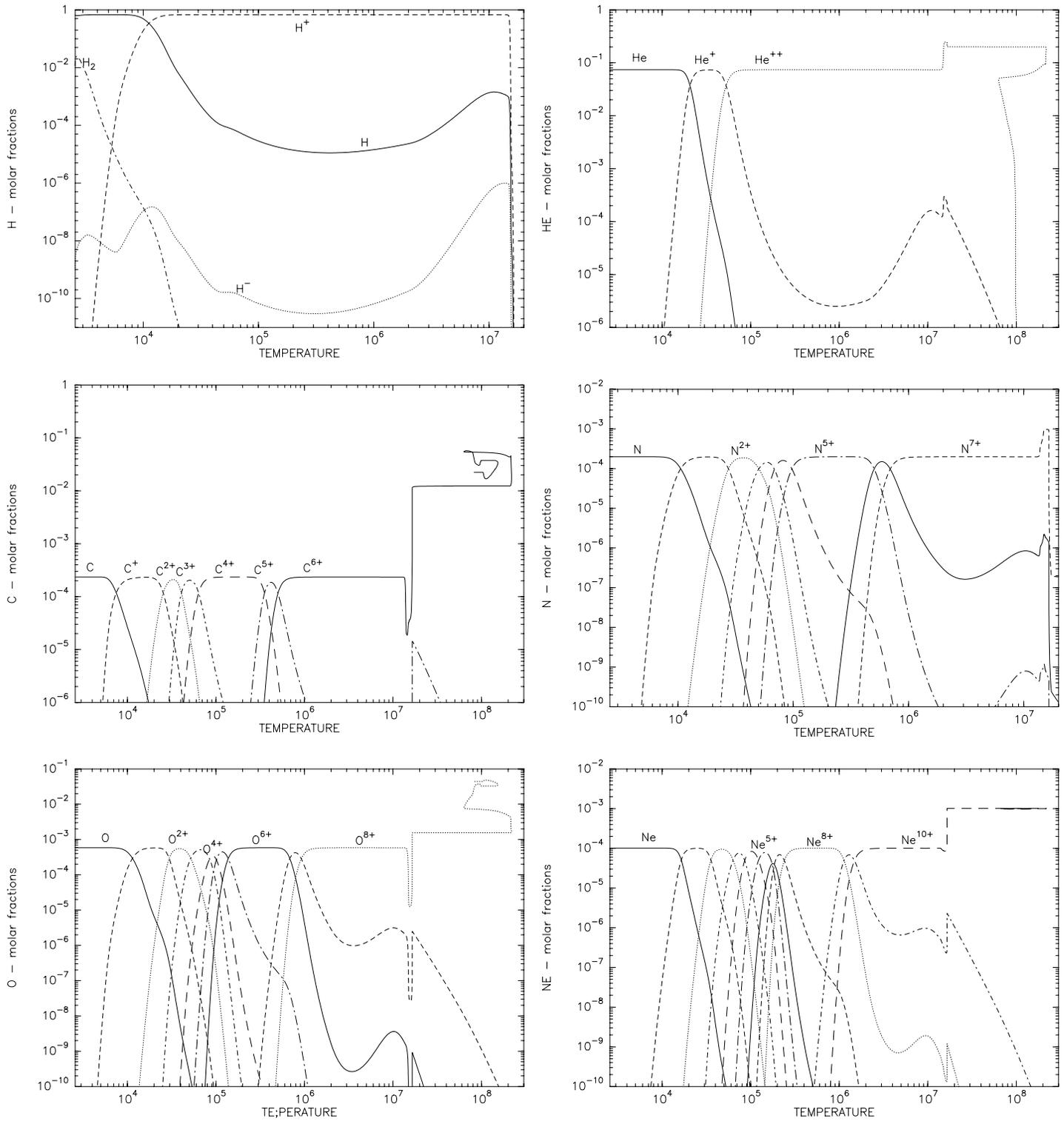


FIG. 2.10 – Ionisation en fonction de la température dans une étoile de l'AGB de 3 masses solaires.

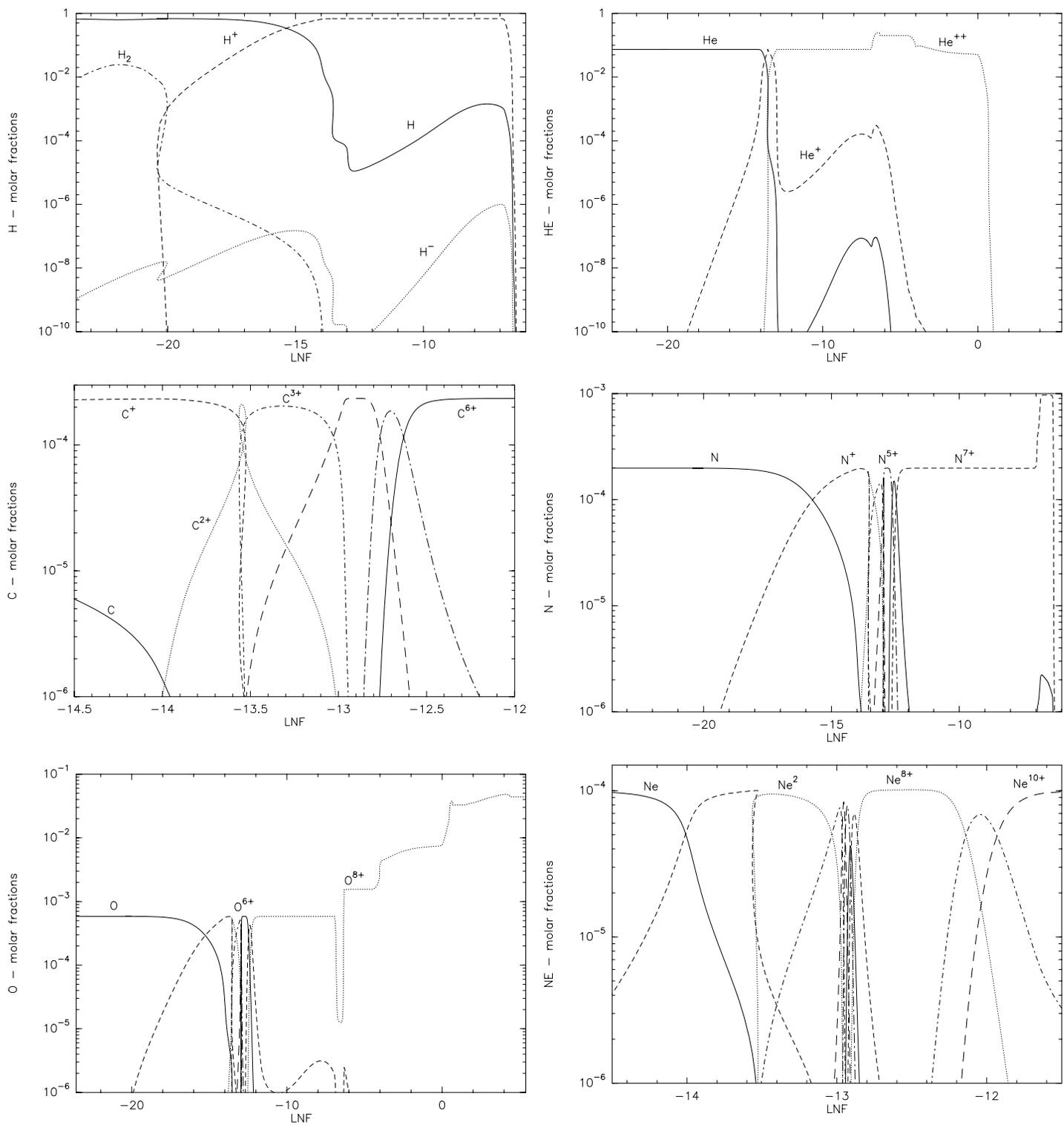


FIG. 2.11 – Ionisation en fonction de $\ln \tau$ dans une étoile de l'AGB de 3 masses solaires.

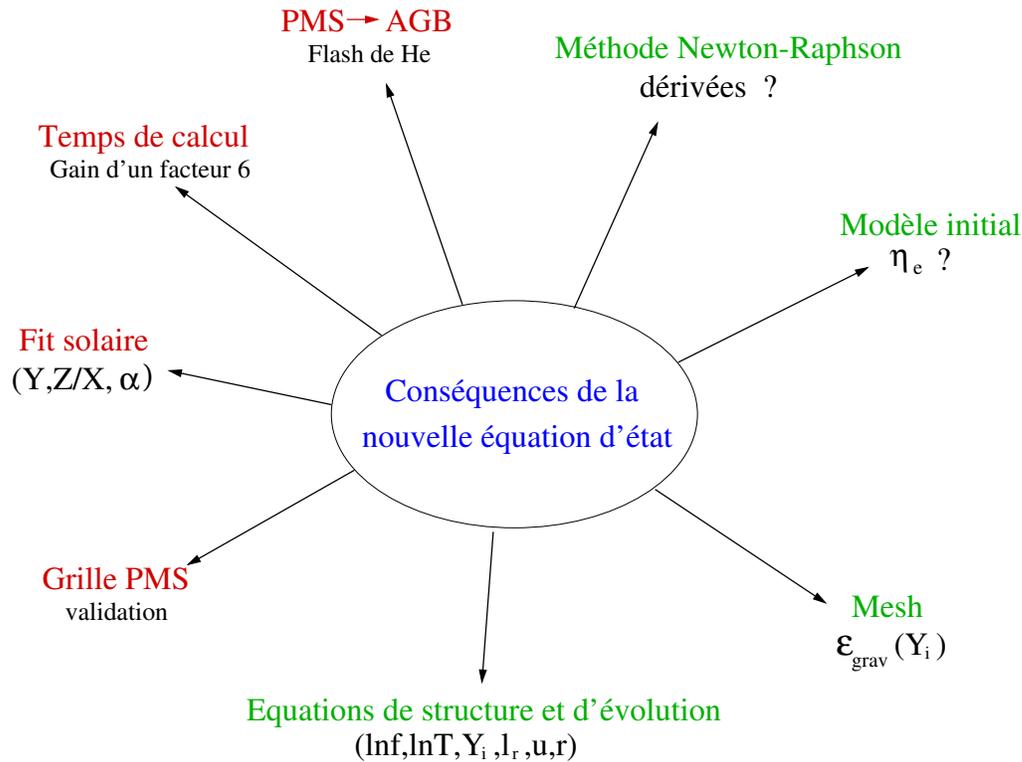


FIG. 2.12 – *Conséquences et tests de la nouvelle équation d'état.*

- l'échantillonnage spatial ("mesh") a été complètement revu pour tenir compte de la nouvelle sensibilité aux abondances introduite par la nouvelle équation d'état .
- enfin, les équations de la structure et de l'évolution stellaire ont été réécrites dans le nouveau jeu de variables.

Pour annoncer les tests à venir, cette même figure mentionne en rouge les différents tests que l'équation d'état a subie avec succès et qui seront reportés plus loin dans cette thèse:

- un gain de temps de calcul qui s'avère d'un facteur 6.
- des tracés PMS \perp → AGB recalculés pour plusieurs étoiles entre $1 M_{\odot}$ et $6 M_{\odot}$ avec en particulier le passage du flash de l'Hélium
- un nouveau fit des quantités $(Y, Z/X, \alpha)$ sur les caractéristiques actuelles du Soleil dont les valeurs sont tout à fait compatibles avec les meilleurs codes spécialisés en physique solaire
- enfin, un test de la physique ajoutée dans l'équation d'état en calculant une grille PMS s'étendant en masse jusqu'à $0.1 M_{\odot}$ et tout à fait comparable avec les meilleurs codes dans ce domaine.

Chapitre 3

Processus de mélange

Sommaire

3.1 Outils de diagnostic pour les instabilités	129
3.2 Le cas "standard": l'instabilité thermique	131
3.3 Instabilités et rotation	135
3.4 Turbulence et limitations	142
3.5 Diffusion et traitement du mélange	145

L'étude précise souhaitée dans la première partie passe obligatoirement par l'utilisation du mélange pour modéliser les étoiles de l'AGB. Comme le rappelle le chapitre II-1, plusieurs modes de transport de la chaleur existent et doivent être pris en compte dans le bilan d'énergie de l'étoile. Le mode macroscopique de transport de la chaleur (convection) consiste aussi en un brassage (mélange) de matière. Mélange et chaleur sont donc fortement couplés par la convection, comme peuvent le montrer les équations II-1.15. Ce mode de transport est tout à fait pertinent pour la phase AGB car les épisodes de nucléosynthèse que subit l'étoile produisent beaucoup de chaleur et de forts gradients de composition, qui sont susceptibles de provoquer du mélange. Il nous faudra donc analyser dans cette partie les conditions d'apparition de la convection pour prendre en compte le mélange associé. Ensuite, nous décrirons les différents autres mécanismes susceptibles de provoquer du mélange. Nous poserons les difficultés associées à la modélisation de ces phénomènes turbulents et nous finirons par présenter le traitement numérique (diffusif) qui a permis de les implémenter dans le code. Notons qu'à l'occasion de l'incorporation de ses routines dans le code avec C. Charbonnel (Toulouse), la diffusion microscopique a été introduite. Nous n'en parlerons pas ici car elle ne joue pas aux phases avancées.

3.1 Outils de diagnostic pour les instabilités

Tester la stabilité du plasma vis-à-vis de la convection revient à se demander comment il peut réagir lorsque les caractéristiques d'un modèle subissent de petites perturbations d'une de ces quantités thermodynamiques: $A \in \{P, \rho, T\}$ telle que $\delta A/A \ll 1$. Dans un cas (stable), ces perturbations n'ont pas d'effet à long terme et finissent par se résorber naturellement. Dans l'autre cas (instable), elles grossissent jusqu'à devenir macroscopiques et produisent donc du mélange de matière et du transport de chaleur.

Pour établir les outils permettant de déterminer si on a stabilité ou pas, on utilisera une cellule de plasma dans laquelle ont lieu des fluctuations. Sa stabilité par rapport à de petites fluctuations thermodynamiques est caractérisée en écrivant les excès de pression, de température et de masse volumique de cette cellule avec l'extérieur. L'excès d'une quantité A entre la cellule et le reste du milieu est par définition:

$$\Delta A \stackrel{def}{=} A_{int} \perp A_{ext} \quad (3.1)$$

On quantifie cet excès comme suit sur une distance Δr :

$$\Delta A = \left[\left(\frac{dA}{dr} \right)_{int} \perp \left(\frac{dA}{dr} \right)_{ext} \right] \Delta r \quad (3.2)$$

Dans tout ce chapitre, l'indice "int" désignera l'intérieur de la cellule alors que l'indice "ext" désignera son milieu extérieur.

Le temps caractéristique de variation de la quantité A est défini par:

$$\tau_A \stackrel{def}{=} \left(\frac{1}{\Delta A} \frac{d\Delta A}{dt} \right)^{-1} \quad (3.3)$$

Aux fluctuations de T , ρ et P , on associe respectivement les temps caractéristiques de variation suivants (voir par exemple Kippenhahn & Weigert (1990)):

$$\tau_{th} \stackrel{def}{=} \frac{\text{Energie échangée}}{\text{conduction de cette énergie}} \quad (3.4)$$

$$= \frac{\rho_{int} V_{int} c_P \Delta T}{\lambda_{rad}} \sim \frac{l^2}{K} \quad (3.5)$$

$$\tau_{dyn} = \sqrt{\frac{H_P}{g}} \sim \frac{l}{v_{dyn}} \quad (3.6)$$

$$\tau_s = \frac{l}{v_s} \quad (3.7)$$

où l est la longueur d'une cellule (longueur de mélange, voir annexe B), v_s la vitesse du son (voir annexe D) et λ_{rad} et K , respectivement la conductivité et la diffusivité thermique (voir B.2). τ_{th} est le temps caractéristique d'atteinte de l'équilibre thermique (ou de disparition de la fluctuation de température), τ_{dyn} , le temps caractéristique dynamique (ou de chute libre) et τ_s , le temps caractéristique de propagation du son (ou d'une fluctuation de pression). On utilisera pour toute la section l'équation suivante *posée comme hypothèse*:

$$\Delta P = 0 \quad (3.8)$$

On peut interpréter cette hypothèse comme suit: le temps caractéristique de retour à l'équilibre des pressions est beaucoup plus petit que les temps caractéristiques des autres fluctuations. L'équilibre des pressions a donc toujours le temps de s'installer. Cela revient à dire que les fluctuations ne peuvent pas se propager à grande échelle dans l'étoile, que nous n'étudierons pas ici des instabilités globales de l'étoile comme les pulsations par exemple mais que nous chercherons des instabilités locales.

Par ailleurs, trois relations importantes seront sans cesse utilisées ici: la définition de la hauteur caractéristique de pression, II-1.20, l'équation d'état donnant P dans le jeu de

variable (ρ, T, μ) donnée dans l'annexe D sous la forme D.60 et la définition des gradients logarithmiques de température, II-1.14, et du gradient de poids moléculaire moyen :

$$\nabla_{\mu} \stackrel{def}{=} \frac{d \ln \mu}{d \ln P} \quad (3.9)$$

Remarquons pour la suite que comme $\Delta P = 0$, les variations de T , ρ et μ sont reliées par D.60 et gouvernées par l'équation d'état.

3.2 Le cas "standard": l'instabilité thermique

3.2.1 Instabilité thermique et composition

La force subie par la cellule par unité de volume à un endroit précis est donnée par la résultante de la gravité et de la force d'Archimède: $\rho_{int}g \perp \rho_{ext}g$. On écrit donc:

$$f = g\Delta\rho \quad (3.10)$$

Dans cette section, nous supposons que la cellule étudiée est au départ à l'équilibre mécanique, ce qui implique $f = 0$ et donc $\rho_{int} = \rho_{ext}$. On a alors d'après D.60:

$$\Delta \ln T = \perp \frac{\chi_{\mu}}{\chi_T} \Delta \ln \mu \quad (3.11)$$

où l'on définit l'excès de composition grâce à II-3.2:

$$\Delta\mu = \frac{\mu}{H_P} \nabla_{\mu} \Delta r \quad (3.12)$$

La notation ∇_{μ} s'adresse sans ambiguïté au milieu extérieur à la cellule étudiée car on suppose (voir annexe B) que celle-ci est homogène. D'après II-3.11, l'introduction dans un milieu de matière de composition différente de celle de ce milieu (caractérisée par $\Delta\mu$) donne naissance à une fluctuation thermique. Comme l'équilibre des pressions est quasi-instantané par hypothèse, cela se traduit par une variation de masse volumique de la cellule qui provoque donc une force résultante. La cellule entre en mouvement jusqu'à ce que l'équilibre mécanique soit retrouvé. Si le milieu extérieur n'est toujours pas homogène à ce moment-là, $\nabla_{\mu} \neq 0$, alors la fluctuation de température recommence et le mouvement reprend et ainsi de suite. Un mouvement macroscopique peut se mettre en place.

3.2.2 Instabilité thermique et instabilité dynamique

Une instabilité dynamique est une fluctuation de masse volumique qui, petit à petit, amplifie le mouvement de la cellule. Nous allons voir que cette situation est reliée à une instabilité thermique.

Equation du mouvement

Dans ce but, on écrit l'équation du mouvement d'une cellule sur la distance Δr :

$$\rho \frac{\partial^2 \Delta r}{dt^2} = g \frac{\Delta\rho}{\Delta r} \Delta r \quad (3.13)$$

La solution de cette équation est :

$$\Delta r = \Delta r_0 \exp(i\nu_{int} t) \quad (3.14)$$

$$\text{avec } \nu_{int} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\perp g \frac{\Delta \ln \rho}{\Delta r}} = \nu_{int}^r + i \nu_{int}^i \quad (3.15)$$

où ν_{int} est par définition la fréquence de Brunt-Väisälä pour le gradient de température interne.

Pour obtenir une expression pratique de cette grandeur, on utilise II-3.1 écrite pour $A = \nabla$ et on écrit les excès de masse volumique et de température sur un trajet Δr grâce aux relations listées dans la section II-3.1:

$$\Delta T = \perp \frac{T}{H_P} \Delta \nabla \Delta r \quad (3.16)$$

$$\Delta \rho = \frac{\rho \chi_T}{H_P \chi_\rho} \left[\Delta \nabla \perp \frac{\chi_\mu}{\chi_T} \nabla_\mu \right] \Delta r \quad (3.17)$$

$$\Delta \mu = \frac{\mu}{H_P} \nabla_\mu \Delta r \quad (3.18)$$

et l'on obtient alors pour la fréquence de Brunt-Väisälä :

$$\nu_{int}^2 = B \left(\Delta \nabla \perp \frac{\chi_\mu}{\chi_T} \nabla_\mu \right) \quad (3.19)$$

$$\text{avec } B \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\perp g \chi_T}{H_P \chi_\rho} > 0 \quad (3.20)$$

Remarquons que si l'on suppose nulle la fluctuation de température II-3.16, cela signifie qu'il n'y a pas d'échange de chaleur avec l'extérieur: le mouvement de la cellule est donc adiabatique. On pose généralement $\nabla_{int} = \nabla_{ad}$ si les cellules subissent pas suffisamment peu d'échanges thermiques car, n'échangeant pas trop avec l'extérieur, le profil de température de ces cellules se structurent approximativement avec ∇_{ad} . Cette hypothèse n'est strictement valable que si $\Delta \nabla = 0$, car d'après II-3.16, on a alors $T_{int} = T_{ext}$.

Etude de stabilité

Etudions maintenant la stabilité des fluctuations II-3.14. Il y a instabilité si l'exponentielle de II-3.14 n'est pas oscillante autour de la position d'équilibre $\Delta r = 0$, c'est-à-dire :

$$\text{instabilité si } \nu_{int}^2 < 0 \quad (3.21)$$

Si ν_{int}^r et ν_{int}^i sont mathématiquement les parties réelles et imaginaires de ν_{int} , elles correspondent donc physiquement respectivement aux parties "oscillante" et "instable". En effet, la présence d'une partie imaginaire non nulle fait apparaître une exponentielle réelle dans II-3.14, ce qui correspond soit à une amplification, soit à un amortissement exponentiel de Δr .

Pour étudier la stabilité mécanique de la cellule, c'est-à-dire par rapport aux fluctuations de ρ , on peut distinguer deux sources d'instabilités. L'une purement dynamique, c'est-à-dire une instabilité par rapport aux fluctuations de μ et l'autre purement thermique, c'est-à-dire une instabilité par rapport aux fluctuations de T . Les équations II-3.16 à II-3.18 montrent que les deux quantités déterminantes sont ∇_μ et $\Delta \nabla$. C'est ce que l'on retrouve dans l'expression de la fréquence de Brunt-Väisälä, II-3.19, sur laquelle repose l'analyse de la stabilité (voir II-3.21). Les différentes possibilités ont donc été représentées dans un graphe montrant $\Delta \nabla$ en abscisse et $\frac{\chi_\mu}{\chi_T} \Delta \mu$ en ordonnée (figure II-3.1), lors d'un déplacement vers l'extérieur.

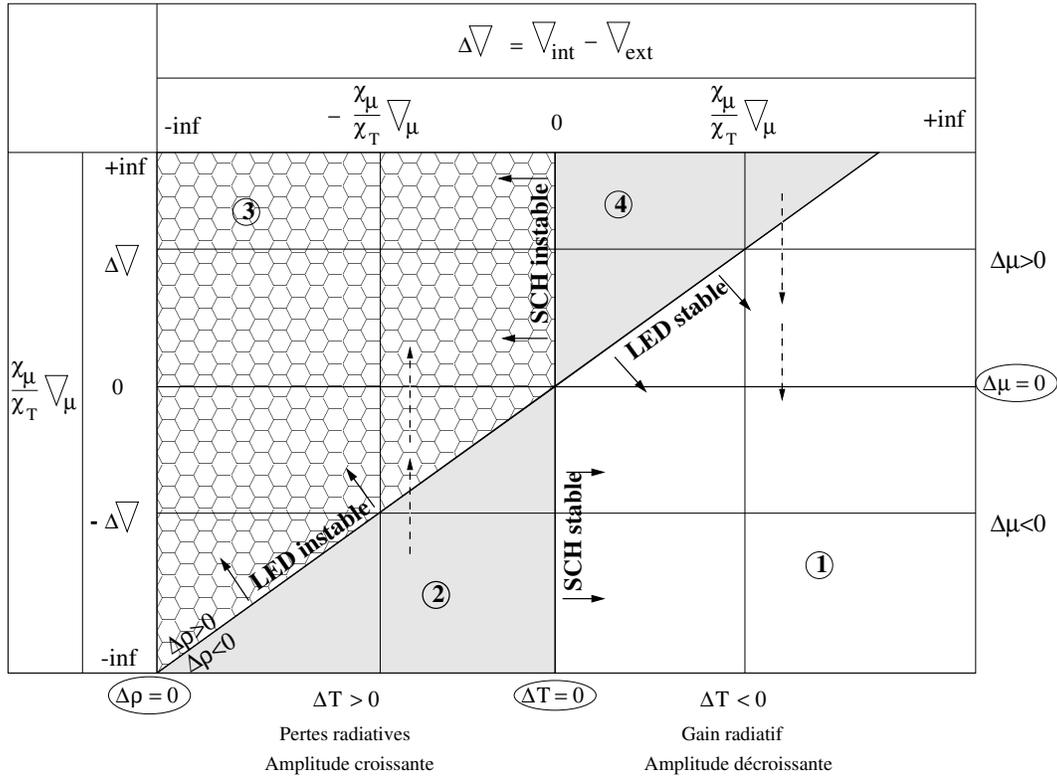


FIG. 3.1 – Fluctuations de température et de masse volumique en fonction des gradients de T et μ .

Les lignes du graphe

Etudions d’abord les différentes lignes de ce graphe.

La ligne verticale épaisse est, d’après II-3.16, la ligne d’adiabaticité pour la cellule. Une instabilité qui s’y développerait ($\nu_{int}^2 < 0$) ne pourrait être que purement dynamique c’est-à-dire due au ∇_μ , conformément à l’équation II-???. Sur cette ligne, en raison de II-3.8, $\Delta\rho$ et ΔT se compensent forcément pour pouvoir vérifier D.60. Cette ligne est encore appelée ligne de métastabilité thermique ou vibrationnelle car elle sépare deux zones aux comportements différents. L’une, à gauche, qui a tendance à être thermiquement instable, et l’autre, à droite, qui a tendance à être thermiquement stable. Montrons le dans un cas simple, lorsque $\nabla\mu = 0$, car alors le développement des instabilités est purement thermique.

Dans ce cas, à la gauche de la ligne d’adiabaticité, on a $\Delta\nabla < 0$ et la quantité $\perp \frac{T\Delta r}{H_P}$ de II-3.16 est négative pour un déplacement vers l’extérieur. On obtient donc d’après II-3.16 que $\Delta T > 0$, alors que l’on est dans une zone où $\nabla_{int} < \nabla_{ext}$. Comme la température de la cellule est supérieure à celle du milieu extérieur, son énergie baisse car elle subit des pertes radiatives. La température de la cellule descend donc, mais moins rapidement que celle du milieu extérieur, compte tenu de l’inégalité entre les gradients. Finalement, l’excès ΔT augmente et la cellule s’éloigne donc encore de la ligne d’adiabaticité. Le milieu est donc instable dans ce cas.

C’est exactement la situation inverse à droite de la ligne verticale. On obtient $\Delta T < 0$ alors que $\nabla_{int} > \nabla_{ext}$. La cellule perçoit donc des gains radiatifs du milieu extérieur. Sa température monte en conséquence et rejoint celle du milieu extérieur car son gradient de

température est plus grand que celui du milieu extérieur. De ce côté de la ligne, le milieu est stable.

La ligne qui sépare la zone stable de la zone instable est dite " métastable ". Elle correspond au critère d'apparition de la convection de Schwarchild, d'où les inscriptions " SCH stable " et " SCH instable " de part et d'autre de la ligne. Dans ce cas, on se rend bien compte que l'instabilité de la cellule résulte d'une instabilité thermique, c'est-à-dire d'une accumulation de chaleur ($\Delta T > 0$) dans la cellule, qui peut être due, par exemple, à une accélération des réactions nucléaires ou à une augmentation de l'opacité.

La ligne horizontale, marquée $\Delta\mu = 0$, est la ligne où le milieu est homogène ($\nabla\mu = 0$). Sur cette ligne, l'apparition de l'instabilité est donc gouvernée par le signe de la quantité $\nabla_{int} \perp \nabla_{ext}$. Elle sépare le graphe en deux zones. L'une qui a tendance à être dynamiquement instable (en haut) et l'autre qui a tendance à être dynamiquement stable (en bas). Ces tendances se révèlent mieux si l'on se place à $\Delta\nabla = 0$ car l'instabilité est alors purement dynamique. Dans ces conditions, on voit à partir de II-3.17 et II-3.15 qu'au-dessus de la ligne de milieu homogène, $\nu_{int}^2 < 0$. Le milieu est alors instable à cause du gradient de composition. En dessous, là où $\nabla\mu < 0$, il est stable compte tenu des mêmes relations.

Enfin, la ligne oblique (notée $\Delta\rho = 0$) est la ligne où l'on a équilibre mécanique, ou encore $\rho_{int} = \rho_{ext}$ car $\nu_{int}^2 = 0$. C'est la " ligne de métastabilité mécanique " qui sépare le graphe en deux zones. L'une instable où $\nu_{int}^2 < 0$, c'est-à-dire $\frac{\chi\mu}{\chi T} \nabla\mu > \Delta\nabla_{int}$ (en haut à gauche), et l'autre stable où $\nu_{int}^2 > 0$, en bas à droite. Cela correspond au critère de Ledoux pour la stabilité des cellules, d'où les inscriptions " LED stable " et " LED instable " de part et d'autre de la ligne. On voit bien ici que ce critère combine les effets purement thermique et purement dynamique décrits dans les deux paragraphes précédents.

Les différentes zones du graphe

Les différentes zones du graphe combinent les effets individuels décrits ci-dessus. On s'aperçoit par exemple que la zone 2, même si elle se trouve du côté stable de la frontière de Ledoux, est naturellement sujette aux instabilités thermiques puisqu'elle est du côté gauche de la ligne d'adiabaticité. Par ailleurs, si l'on est du côté instable dynamiquement ($\Delta\mu > 0$), on peut s'attendre à un mouvement divergent de la cellule. Mais si l'on se place simultanément du côté droit de la ligne d'adiabaticité, on a aussi $\Delta T < 0$, ce qui entraîne que l'amplitude du mouvement de la cellule diminue. Dans ce cas, quelque soit la zone du graphe occupée à droite de la ligne d'adiabaticité, l'amplitude du mouvement diminue et l'on tend vers la stabilité (flèche en tirets vers le bas). Inversement, si $\Delta\mu < 0$, si en plus $\Delta T > 0$, l'amplitude des mouvements de la cellule augmente. Dans ce cas, quelque soit la zone du graphe occupée à gauche de la ligne d'adiabaticité, zone à priori stable, l'amplitude du mouvement augmente et l'on tend vers l'instabilité (flèche en tirets vers le haut). Ces flèches sont seulement en tiret car l'évolution qu'elles indiquent n'est pas obligatoire. En effet, les mouvements s'amplifiant, le mélange qu'ils provoquent devient de plus en plus important entre l'intérieur et l'extérieur de la cellule. Les gradients de composition doivent donc être recalculés pour prendre en compte ce mélange et pouvoir faire une prévision fiable sur la stabilité du mouvement. Notons enfin que *sur* la ligne de stabilité mécanique, des instabilités peuvent avoir lieu, suivant la valeur de $\Delta\mu$ car à cet endroit T et μ se compensent pour vérifier D.60 (voir paragraphe II-3.2.1).

Résumons les comportements dans les différentes zones du graphe II-3.1:

- dans la zone cerclée 1: le plasma est dynamiquement et thermiquement (vibrationnellement) stable. Aucun mouvement macroscopique de matière n’a lieu, on a une stabilité mécanique.
- dans la zone cerclée 3: le plasma est dynamiquement et thermiquement (vibrationnellement) instable. La convection est opérante. On utilise le nombre de Peclet pour caractériser la rapidité relative des ajustements thermique et dynamique:

$$Pe \stackrel{def}{=} \frac{\tau_{th}}{\tau_{dyn}} \sim \frac{lv}{K} \quad (3.22)$$

L’évaluation de ce nombre est donnée à partir de II-3.4 et II-3.6. On peut dire que sur la frontière verticale de ce domaine 3, la convection est adiabatique et on a donc $Pe \ll 1$. Sur la frontière inférieure oblique, l’équilibre mécanique est vérifié et alors $Pe \gg 1$.

- dans la zone cerclée 4: le plasma est instable dynamiquement mais stable thermiquement (vibrationnellement). Petit à petit les mouvements convectifs se réduisent pour rejoindre le domaine de stabilité. Tout dépend ici de $\Delta\mu$ qui n’est pas porté sur le graphe mais peut stopper cette évolution en provoquant un mouvement continu (voir II-3.2.1).
- dans la zone cerclée 2: le plasma, instable thermiquement (vibrationnellement) dans cette zone, est a priori stabilisé dynamiquement par le gradient de μ . Cependant, même si la cellule est déclarée stable par le critère de Ledoux, sa stabilité mécanique est non déterminée à ce stade. En effet, un petit mouvement risque de l’entraîner vers $\nabla_{\mu} = 0$, car l’amplitude des oscillations augmentant de plus en plus, on tend à mélanger de plus en plus la zone en question et les gradients initiaux de composition ne sont plus représentatifs du milieu: c’est la semi-convection. La stabilité finale de cette zone est à déterminer en recalculant les gradients compte tenu du mélange qui s’y déroule, caractérisé par l’évolution de $\Delta\mu$. Cette zone est appelée “zone semi-convective” ou instabilité doublement diffusive (Grossman & Taam 1996).

3.3 Instabilités et rotation

Abordons les phénomènes de mélanges liés à la rotation des étoiles en expliquant d’abord comment prendre en compte la rotation dans les modèles et en explicitant ensuite, sur un exemple, les mécanismes engendrés par la rotation qui peuvent générer du mélange.

3.3.1 Prise en compte de la rotation

La plupart des codes d’évolution stellaire ne considèrent pas la rotation car les forces d’inertie qui apparaissent dans ce cas dépendent de la latitude dans l’étoile, ce qui brise la symétrie sphérique et oblige en théorie à travailler au moins en deux dimensions. Il existe cependant des méthodes approximatives permettant d’estimer l’influence de la rotation sur l’équilibre mécanique (voir ci-dessous).

Généralités

En pratique, voyons comment prendre en compte la rotation dans un code d'évolution stellaire:

- Il faut tout d'abord rajouter une quantité pour caractériser chaque cellule du plasma: le moment cinétique et incorporer son équation de conservation associée. Cette quantité doit permettre de suivre l'évolution du profil de la vitesse de rotation, $\vec{\Omega}$, dans toute l'étoile et en fonction du temps, car le moment cinétique spécifique, $\vec{\sigma}$, vaut:

$$\vec{\sigma} \stackrel{def}{=} \vec{r} \wedge \vec{u} = [I] \cdot \vec{\Omega} \quad (3.23)$$

où $[I]$ est le moment d'inertie. Rappelons que l'évolution temporelle de $\vec{\sigma}$ est commandée par le moment de la résultante des forces:

$$\frac{d\vec{\sigma}}{dt} = \vec{\mathcal{M}}(\vec{f}_{tot}) \stackrel{def}{=} \vec{r} \wedge \vec{f}_{tot} \quad (3.24)$$

- Il faut ensuite tenir compte du fait que l'étoile tourne en rajoutant les forces d'inerties volumiques propres aux référentiels non-inertiels dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement II-1.7:

$$\vec{f}_{ie} = \perp \vec{\Omega} \wedge (\vec{\Omega} \wedge \vec{r}), \quad \text{force d'inertie massique centrifuge} \quad (3.25)$$

$$\vec{f}_{ic} = \perp 2(\vec{\Omega} \wedge \vec{u}), \quad \text{force d'inertie massique de Coriolis} \quad (3.26)$$

Si l'on décompose les quantités vectorielles en une composante parallèle et une composante perpendiculaire à $\vec{\Omega}$, on a en particulier $\vec{r} = \vec{r}_{\parallel} + \vec{r}_{\perp}$. La quantité r_{\perp} représente donc la distance à l'axe de rotation. D'après II-3.25, on peut alors mettre \vec{f}_{ie} sous la forme:

$$\vec{f}_{ie} = \Omega^2 \vec{r}_{\perp} \quad (3.27)$$

L'équation du mouvement comprenant l'ajout des forces d'inertie peut donner naturellement l'évolution de la vitesse angulaire. Il suffit pour cela de prendre le rotationnel de l'équation du mouvement sous forme eulérienne (voir chapitre II-1), en se souvenant que $r \vec{ot}(\vec{u}) \stackrel{def}{=} \vec{\omega} = 2\vec{\Omega}$ est la vorticit  (Guyon *et al.* 1994) et en utilisant les formules d'analyse vectorielle rappelées de F.4 à F.8. On obtient alors les différents termes qui font évoluer la vitesse angulaire, en toute généralité:

$$\frac{D\vec{\Omega}}{Dt} = (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \perp \vec{\Omega} \text{div}(\vec{v}) + \frac{1}{2} r \vec{ot}(\vec{f}_{ie} + \vec{f}_{ic}) + \frac{1}{2\rho^2} \vec{\nabla} \rho \wedge \vec{\nabla} P \quad (3.28)$$

On a explicitement utilisé un "D" pour la dérivation de Ω pour insister sur le fait qu'il s'agit d'une dérivée lagrangienne. En comparant II-3.28 à II-3.23, on note que cette équation peut se substituer à l'équation d'évolution du moment angulaire si l'on suppose $[I]$ indépendant du temps.

Approximations

La prise en compte de la force d'inertie de Coriolis oblige un passage du code à plusieurs dimensions car elle entraîne par définition une cellule de plasma dans une direction

perpendiculaire à $\vec{\Omega}$ et \vec{u} . Mais, si on la néglige dans un premier temps par rapport à la force d'entraînement, la multidimensionnalité n'est pas obligatoire à priori. En effet, plusieurs variantes existent pour formuler le problème avec rotation de façon unidimensionnelle!

Cette possibilité dépend essentiellement de la loi de rotation. En effet, le critère essentiel est: "les forces d'inertie associées à la rotation sont-elles conservatives" ? Si tel est le cas, d'après F.8, le terme $r\vec{\omega}t(\vec{f}_{ie} + \vec{f}_{ic})$ devient nul dans II-3.28 car alors \vec{f}_{ie} dérive dans ce cas d'un potentiel c'est-à-dire qu'il existe Ψ_{ie} tel que $\vec{f}_{ie} = \vec{\nabla}\Psi_{ie}$. Par exemple, la loi de rotation cylindrique, $\vec{\Omega} = g(\vec{r}_\perp)$, vérifie cette condition. Ce cas est très intéressant car la loi de rotation cylindrique est *la seule* qui est conservative et qui permet *simultanément* d'annuler le terme $(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla})\vec{v}$ de l'équation II-3.28. En ajoutant l'hypothèse de l'équilibre mécanique, $\frac{D\vec{\Omega}}{Dt} = \vec{0}$. De plus, si l'on suppose l'incompressibilité du fluide, $(\frac{D\rho}{Dt} = 0)$, on a aussi $div(\vec{v}) = 0$ (voir). En utilisant II-3.28, on montre alors que

$$\nabla\rho \wedge \nabla P = 0 \quad (3.29)$$

Par ailleurs, on réécrit l'équation du mouvement (II-1.7) en utilisant le potentiel gravitationnel effectif défini par $\Psi = \Psi_g + \Psi_{ie}$, où Ψ_g est le potentiel gravitationnel tel que $\vec{\nabla}\Psi_g = \vec{g}$ et $div(\vec{g}) = 4\pi\mathcal{G}\rho$. On obtient alors à l'équilibre mécanique :

$$\nabla P \propto \rho \nabla \Psi \quad (3.30)$$

La comparaison de II-3.29 et II-3.30 montre que P et ρ sont tous deux constants sur les équipotentiels du champ de gravité effectif. Par conséquent (voir D.60) $T^{\chi T} \mu^{\chi\mu}$ est aussi constant sur les équipotentiels du champ de gravité effectif. On écrit alors les équations de la structure stellaire non plus sur des surfaces sphériques mais sur les *équipotentiels* du champ de gravité effectif (qui sont des sortes d'ellipsoïdes de révolution à cause des forces d'inertie) où les grandeurs caractéristiques sont constantes (Kippenhahn & Thomas 1970). En résumé, un fluide incompressible à l'équilibre mécanique dont la loi de rotation est cylindrique est dit "barotrope": la pression peut s'écrire en fonction de ρ seulement.

Dans le cas où la force n'est pas conservative, comme par exemple lorsque l'on prend une loi de rotation, $\Omega(P) = \text{constante}$ (Zahn (1992) et Meynet & Maeder (1997)), on peut formuler les équations de la structure stellaire *sur les surfaces isobares*, à condition de savoir les identifier et en suivant la méthode exposée par Meynet & Maeder (1997), qui consiste à moyenner les quantités non constantes sur ces surfaces.

3.3.2 Rotation et mélange: un exemple

Plaçons-nous dans le cas simple d'un fluide en rotation cylindrique. Selon Zahn (1975), Zahn (1992) et Chaboyer & Zahn (1992), le mélange turbulent agit plus le long des isobares que perpendiculairement à celle-ci. Il aura donc tendance à homogénéiser la composition sur les isobares tant et si bien que μ ne dépend que de Ψ . Dans ce cas, en conservant l'hypothèse de l'équilibre mécanique faite au paragraphe précédent, T ne dépend de même que de Ψ . On

peut donc réécrire le gradient radiatif de la façon suivante:

$$\vec{\nabla}_T = \frac{dT}{d\Phi}(\Phi) \frac{H_{\perp}(\Phi)}{T(\Phi)} g_{eff} \quad \text{avec} \quad \vec{g}_{eff} = \vec{\nabla}\Phi \quad (3.31)$$

Le gradient radiatif a été écrit ici $\vec{\nabla}_T$ pour ne pas le confondre avec l'opérateur "nabla", $\vec{\nabla}$. Le gradient radiatif, portant les effets de la rotation au travers de \vec{g}_{eff} va donc modifier le courant de chaleur \vec{J}_{rad} (voir B.1). L'équation de conservation de l'énergie peut alors être réécrite en prenant la divergence du courant de chaleur radiative pour obtenir le flux d'énergie (voir II-1.2 avec $x = q_{rad}$).

Si on cherche l'équilibre thermique local de l'étoile en posant $\frac{dq_{rad}}{dt} = 0$, on obtient l'équation:

$$div(\vec{J}_{rad}) = \rho(\Psi)\sigma_{rad}(\Psi) \quad (3.32)$$

où les quantités qui dépendent seulement de Ψ sont dans le membre de droite. C'est le cas pour σ_{rad} car la production radiative d'énergie s'identifie en fait à $\epsilon_{nuc} \perp \epsilon_{\nu}$ (voir section II-1.2.1) qui dépendent seulement de $\rho(\Psi)$ et $T(\Psi)$. Ce n'est par contre pas le cas pour J_{rad} car, d'après sa définition (voir B.1), cette quantité fait intervenir $\vec{\nabla}_T$ et donc \vec{g}_{eff} . Or la gravité effective n'est pas constante sur une équipotentielle mais dépend par définition (II-3.31) de leur resserrement. Le problème de l'équation II-3.32, c'est qu'elle ne peut pas être satisfaite sur une équipotentielle car elle égalise des quantités constantes avec des quantités qui ne le sont pas: c'est le théorème de Von Zeipel (Von Zeipel 1924). L'équilibre mécanique, faisant partie des conditions d'obtention d'un fluide barotrope (voir la section II-3.3.1) et l'équilibre thermique ne peuvent pas exister simultanément dans une étoile en rotation.

En conclusion de cet exemple, la situation ne peut pas être stationnaire. Il doit donc exister un courant de matière ($\frac{d\vec{u}}{dt} \neq 0$) qui transporte l'énergie cinétique de rotation pour rétablir l'équilibre thermique perdu. Il s'agit bien d'un terme d'advection, c'est-à-dire que la chaleur est transportée par un courant de matière, appelé *circulation méridienne*, schématisé sur la figure II-3.2. Elle a été dérivée par Eddington (1925) et Sweet (1950). Dans ce cas, comme on

n'a plus l'hypothèse de l'équilibre mécanique, P ne dépend plus seulement de l'équipotentielle considérée et le fluide n'est plus barotrope mais devient barocline par définition, c'est-à-dire que la pression ne peut plus être fonction de Ψ seulement, mais elle dépend de deux variables géométriques. Parmi les conséquences (Schatzman & Praderie 1990):

- le processus est non linéaire: le mélange va changer la loi de rotation qui ne sera plus cylindrique comme au départ. Au contraire, le transport de matière plus profonde, plus dense vers la surface va modifier le gradient de μ et donc l'apparition ou pas d'instabilités comme la circulation. Les effets essaient de compenser la cause.
- le produit vectoriel vitesse linéaire par vitesse angulaire étant non nul, le force de Coriolis va produire de la rotation différentielle.

3.3.3 Conséquences "turbulentes" de la rotation

Le paragraphe précédent était destiné à montrer que les conséquences de la prise en compte de la rotation dans l'évolution de l'étoile ne sont pas que structurelles. Nous avons

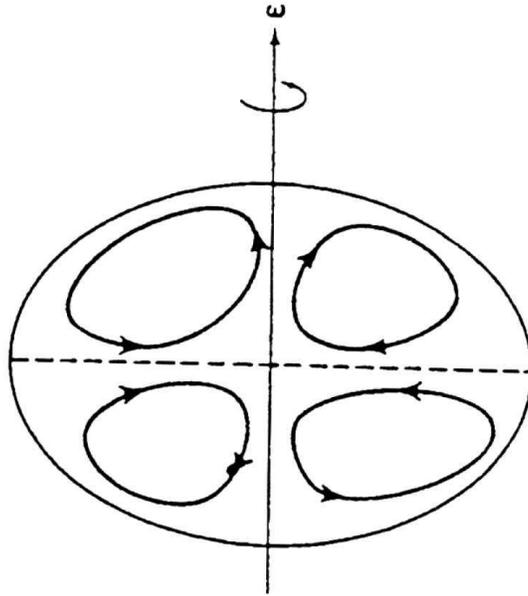


FIG. 3.2 – *Circulation méridienne dans une étoile en rotation, extrait de Rose (1998).*

terminé le paragraphe précédent en constatant que, dans certains cas particuliers, une étoile en rotation *devait* développer des mouvements macroscopiques, ce qui induit du mélange. Voilà qui rejoint le centre d'intérêt de ce travail de thèse. Nous devons donc nous demander maintenant quels peuvent être les différents mélanges induits par la rotation, puis sélectionner ceux qui pourraient être efficaces à la phase AGB. Ces mélanges sont particulièrement importants puisqu'ils se produisent en dehors des zones convectives.

D'après Heger *et al.* (2000), Schatzman & Praderie (1990) et Kippenhahn & Weigert (1990) citons les principales sources de turbulence et leurs critères d'apparition:

Circulation méridienne

Résumons l'apparition de la circulation en faisant se concurrencer deux tendances: le profil de $\vec{\Omega}$ qui la favorise, et les courants de μ qui la freine. Kippenhahn (1974) et Pinsonneault *et al.* (1989) expriment les vitesses correspondantes comme suit:

$$v_{\Omega} = \frac{\nabla_{ad}}{\nabla_{ext} \perp \nabla_{int}} \frac{\chi T \Omega^2 r^5 l_r}{\chi \rho \mathcal{G}^2 m_r^2} \left[\frac{2}{l_r} \epsilon_{nuc} \perp \frac{2}{m} \perp \frac{3}{4\pi r^3 \rho} \right] \quad (3.33)$$

$$v_{\mu} = \frac{HPr(l_r \perp m_r \epsilon_{\nu})}{\mathcal{G} m_r^2} \frac{\frac{\chi \mu}{\chi T} \nabla \mu}{\nabla_{ext} \perp \nabla_{int}} \quad (3.34)$$

Endal & Sofia (1978) basent alors le critère *d'instabilité* sur la vitesse résultante où vitesse d'Eddington-Sweet. Ils demandent:

$$v_{ES} \stackrel{def}{=} |v_{\Omega}| \perp |v_{\mu}| > 0 \quad (3.35)$$

Cela revient à dire qu'il n'y a de la circulation que si les gradients de poids moléculaire (initiaux ou déplacés suite à de la circulation) ne l'inhibe pas.

Cisaillement

Dans un milieu visqueux, où la rotation ne peut donc pas être homogène sur plus de τ_{tur}^{vis} (voir section II-3.4), la friction entre les couches ayant des vitesses différentes entraîne un

transfert de matière perpendiculaire aux surfaces ayant des vitesses constantes. En effet, les gradients de quantité de mouvement provoquent une diffusion de celle-ci, qui entraînent la matière. Toutefois, ce mélange apparaît à condition que l'énergie nécessaire au déplacement (travail contre les forces) soit au moins fourni au cours du déplacement. Le travail nécessaire au déplacement par unité de longueur vaut $\frac{\Delta W}{\Delta r} = f = g \frac{\Delta \rho}{\Delta r} = \rho \nu_{int}^2$ (voir la section II-3.2.2) et l'énergie échangée par unité de longueur de ce déplacement vaut $\rho \left(\frac{du}{dr}\right)^2$ (Maeder 1995). Dans cette expression, le gradient de vitesse $\frac{du}{dr}$ caractérise le cisaillement. On obtient le critère de stabilité de Richardson :

$$Ri \stackrel{def}{=} \frac{\nu_{int}^2}{(du/dr)^2} > Ri_c = \frac{1}{4} \quad (3.36)$$

La valeur limite, Ri_c , étant donnée par Miles (1961).

Perturbations axisymétriques

Ce paragraphe traite de la stabilité de perturbations perpendiculaires à l'axe de rotation, c'est-à-dire δr_{\perp} uniquement (perturbations axisymétriques). Si ces perturbations grossissent jusqu'à une échelle macroscopique, on a alors apparition de turbulence.

Une approximation consiste à considérer que la conductivité thermique du milieu propage les fluctuations de température "instantanément" et que, par conséquent, même si le milieu est stable par rapport à ces perturbations de température, il ne pourra pas stabiliser l'éventuelle instabilité axisymétrique. Cela revient à "découpler" les critères d'instabilité: "le thermique" n'influe pas sur "le mécanique" ou encore $\tau_{th} \ll \tau_{axy}$ où τ_{axy} est le temps caractéristique de propagation de δr_{\perp} . Une instabilité thermique est impossible avec cette hypothèse si une instabilité axisymétrique se développe déjà. Le critère de stabilité est le suivant pour cette instabilité dite de Goldreich-Schubert-Fricke (GSF) (Goldreich & Schubert (1967) et Fricke (1968), puis Kippenhahn (1969), Kippenhahn (1974) et Tassoul (1978)):

$$\frac{d\sigma}{dr_{\perp}} > 0 \quad \text{et} \quad \frac{d\Omega}{dr_{\parallel}} = 0 \quad (3.37)$$

Cela veut dire que le moment cinétique doit croître vers l'extérieur et que le champ de vitesse angulaire doit être cylindrique. La première condition permet d'expliquer que lors du déplacement d'une cellule vers l'extérieur, son moment cinétique est inférieur au moment cinétique ambiant. La force centrifuge étant par conséquent, elle aussi, inférieure au milieu ambiant, le mouvement vers l'extérieur va être décéléré: le milieu est stable. La deuxième condition revient à dire que la force centrifuge doit être conservative (Heger *et al.* 2000). Elle est conséquence de la prise en compte de la force d'inertie de Coriolis dans l'équation du mouvement (théorème de Taylor-Proudman, voir Schatzman & Praderie (1990)). Elle revient à imposer une forme à la distribution de vitesse angulaire telle que la force de Coriolis qui en résulte ne puisse pas rendre le milieu instable alors qu'il est stable d'après la première condition.

Echange de matière

On teste ici la stabilité d'un échange de matière dans différentes directions: c'est l'instabilité de Solberg-Hoiland. Cet échange de matière provoque un échange d'énergie avec le milieu

car il faut travailler contre la force totale résultant de la gravité, de la force d'Archimède et des forces d'inertie. Si l'on se déplace dans la direction de la somme des forces, le moment cinétique est conservé car, en vertu de II-3.23, on a alors $d\vec{\sigma} = d\vec{r} \wedge \vec{f}_{tot} = \vec{0}$. Si l'échange de matière a lieu sur l'axe de rotation par exemple, le moment cinétique étant nul, l'instabilité revient à tester si l'échange de matière libère assez d'énergie pour créer une instabilité thermique: on doit retrouver le critère de Ledoux. Le triple critère de stabilité associé est, pour une fluctuation dans la direction x (voir Kippenhahn & Weigert (1990) Zahn (1974) et Tassoul (1978)):

$$R_{SH} \stackrel{def}{=} \nu_{int}^2 + \frac{1}{r_{\perp}^3} \frac{d\sigma^2}{dr_{\perp}} > 0 \quad (3.38)$$

$$\frac{d\sigma^2}{dr_{\perp}} \perp \frac{d\sigma^2}{dx} \leq 0 \quad (3.39)$$

$$\vec{g}_{eff} \cdot \vec{e}_x \frac{ds}{dx} > 0 \quad (3.40)$$

où ν_{int} est la fréquence de Brunt-Väisälä calculée avec g_{eff} , \vec{e}_x , un vecteur unitaire dans la direction x , et s , l'entropie spécifique. La première inégalité montre que, quand le milieu est stable par rapport à la convection, il ne peut y avoir d'instabilité que si σ décroît vers l'extérieur. Si le milieu est déjà instable par rapport à la convection ($\nu_{int}^2 < 0$), un moment angulaire croissant avec r_{\perp} peut quand même provoquer l'instabilité de Solberg-Hoiland. L'instabilité demande aussi que l'entropie et la gravité effective varient en sens inverse le long de la direction choisie (troisième équation) et que le gradient de moment angulaire soit plus faible dans cette direction que le long de r_{\perp} (deuxième équation). Si justement, on choisit une direction perpendiculaire à l'axe de rotation, on retrouve bien le critère de Goldreich-Schubert-Fricke, à condition de ne pas considérer l'influence de ν_{int} , comme supposé dans le critère d'apparition de l'instabilité GSF du paragraphe précédent. De plus, si on est sur l'axe de rotation, $x = r_{\parallel}$ et $\vec{\sigma} = \vec{0}$ et on retrouve bien le critère de Ledoux.

3.3.4 Résumé dans le plan ($\nabla_{int} - \nabla_{ext}, \frac{\chi_{\mu}}{\chi_T} \nabla_{\mu}$)

En reprenant la représentation de la figure II-3.1, on peut porter les frontières d'instabilités de rotation. Ceci est fait dans la figure II-3.3. Pour cela, on réécrit les critères de stabilité de la façon suivante:

Pour la circulation:

$$\left| \frac{\chi_{\mu}}{\chi_T} \nabla_{\mu} \right| > |\nabla_{\mu}^{ES}| \quad (3.41)$$

$$avec \quad \nabla_{\mu}^{ES} = \nabla_{ad} \frac{\chi_T \Omega^2 r^4 l_r}{\chi_{\rho} H_P \mathcal{G}(l_r \perp m_r \epsilon_{\nu})} \left(\frac{2\epsilon_{nuc}}{l_r} \perp \frac{2}{m_r} \perp \frac{3}{4\pi r^3 \rho} \right) \quad (3.42)$$

Pour le cisaillement:

$$\Delta \nabla_{int} \perp \frac{\chi_{\mu}}{\chi_T} \nabla_{\mu} > \frac{1}{4B} \left(\frac{du}{dr} \right)^2 \quad (3.43)$$

la constante B étant donnée en II-3.19.

Pour l'échange de matière:

$$\Delta \nabla_{int} \perp \frac{\chi_{\mu}}{\chi_T} \nabla_{\mu} > \perp \frac{1}{Br_{\perp}^3} \frac{d\sigma^2}{dr_{\perp}} \quad (3.44)$$

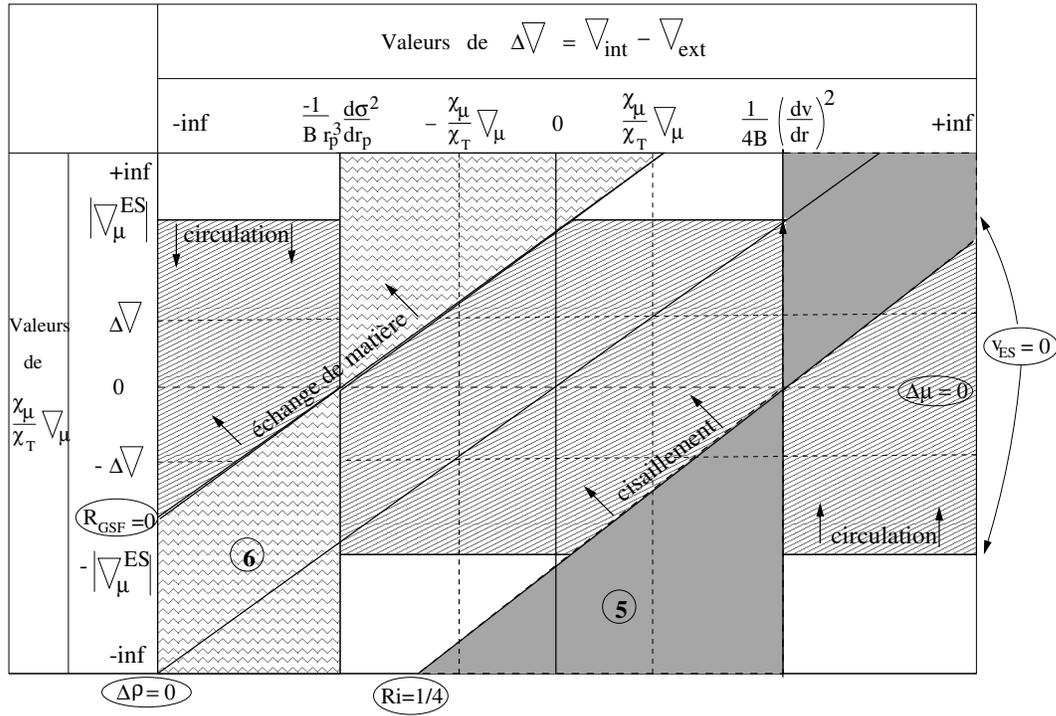


FIG. 3.3 – Domaines des différentes instabilités de rotation.

Les droites $v_{\text{ES}} = 0$, $Ri = 1/4$, $R_{\text{SH}} = 0$ ont été tracées. Les zones hachurées correspondent aux zones où la circulation apparaît, lorsque le gradient de poids moléculaire n'est pas assez fort pour l'inhiber. La partie à gauche de la ligne $Ri = 1/4$ est la zone où le cisaillement génère de la turbulence. L'analyse de stabilité peut se faire de la même façon que pour les instabilités thermiques. Par exemple, si le milieu est homogène, on doit être à droite de la ligne verticale $\Delta\nabla = \frac{1}{4B} \left(\frac{dv}{dr}\right)^2$ pour avoir stabilité. Or, lorsque le gradient de composition est pris en compte, cette droite devient la ligne $Ri = 1/4$, ce qui signifie que la zone encadrée 5 n'est plus instable mais a été stabilisée par le gradient de composition (zone grisée). Par analogie avec le cas thermique, Maeder (1997) appelle cette zone une "zone de cisaillement semi-convectif". Elle tend vers la zone de mélange semi-convectif thermique quand $\frac{dv}{dr} \rightarrow 0$. Le même raisonnement peut s'appliquer pour l'instabilité GSF qui provoque de la turbulence à gauche de la ligne $R_{\text{GSF}} = 0$. La zone encadrée 6 devient alors une zone d'instabilité par échange de matière stabilisée par le gradient de composition.

3.4 Turbulence et limitations

La notion de convection abordée à la section II-3.2 se range dans la catégorie des phénomènes turbulents. On peut définir un phénomène turbulent comme un mouvement aléatoire macroscopique descriptible statistiquement par des quantités moyennes et dont les mécanismes générateurs, les *instabilités*, et l'évolution doivent être trouvés (Schatzman & Praderie 1990). Dans les milieux stellaires où le champ magnétique est négligé, la turbulence est générée à la suite de deux sortes d'instabilités. Tout d'abord les instabilités thermiques (ou de Rayleigh-Bénard) présentées à la section II-3.2 qui donnent naissance par définition à la convection. Les autres mécanismes générateurs sont les instabilités associées au mouvement

de rotation de l'étoile. C'est ce que nous avons vu à la section II-3.3. Nous allons discuter ici les difficultés engendrées par l'apparition de phénomènes turbulents.

3.4.1 Viscosité turbulente

Le but de ce paragraphe est de montrer que les mouvements turbulents sont non linéaires et, de façon équivalente, source de viscosité. Dans l'équation du mouvement générale, II-1.7, un terme a été négligé, c'est le terme de viscosité qui s'écrit: $\eta\Delta\vec{u}$. En l'incorporant et en redérivant l'équation d'évolution de la vitesse angulaire $\vec{\Omega}$, II-3.28, comme indiqué dans la section II-3.3, on trouve qu'un terme $\eta\Delta\vec{\Omega}$ doit être rajouté. Dans un cas simple (fluide barotrope, voir II-3.3), on obtient:

$$\frac{d\vec{\Omega}}{dt} = \eta\Delta\vec{\Omega} \quad (3.45)$$

La viscosité tient compte macroscopiquement des pertes d'énergies microscopiques dues aux collisions non élastiques dans le plasma. Elle sont modélisées dans le cadre de la théorie cinétique des gaz par un traitement statistique de marches aléatoires. La viscosité peut être calculée pour chaque composante indépendante du plasma. Son expression est $\eta_x = \rho \langle l \rangle_x v_x^{\text{th}}$ (Guyon *et al.* 1994) où $\langle l \rangle_x$ est le libre parcours moyen des particules donné par la théorie classique de la cinétique des gaz: $\langle l \rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}n_x \sigma_x^{\text{eff}}}$ (n_x est la densité numérique et σ_x^{eff} la section efficace) et v_x^{th} est la vitesse thermique définie par $\frac{1}{2}m (v_x^{\text{th}})^2 = \frac{3}{2}kT$.

Son effet principal est de provoquer une non linéarité directe. En effet, la viscosité couple le profil de $\vec{\Omega}$ à son évolution temporelle, créant ainsi une sorte de rétroaction caractérisée par une équation de diffusion, II-3.45. Au bout d'un temps suffisamment long, une solution stationnaire est atteinte ($\Delta O\vec{m}ega = 0$). Dans le cas simple de l'équation II-3.45, on voit que l'état stationnaire est atteint au bout d'un temps τ_x^{vis} estimé en ordre de grandeur en utilisant II-3.3 et en remplaçant les dérivées par des grandeurs caractéristiques: $\tau_x^{\text{vis}} \sim \frac{\rho\partial^2}{\eta}$. Pour les ions et les photons, on obtient $\tau_{\text{ions}}^{\text{vis}} \sim 10^{22}\text{s}$ et $\tau_{\gamma}^{\text{vis}} \sim 10^{18}\text{s}$, ce qui est très grand devant le temps caractéristique d'évolution stellaire.

Par contre, si l'on considère comme "particules" élémentaires les mouvements macroscopiques de matière (turbulence) enclenchés par des instabilités, on peut aussi calculer la viscosité associée. Elle n'est pas du tout négligeable et l'on obtient alors: $\tau_{\text{tur}}^{\text{vis}} \sim 10^9\text{s}$ avec un libre parcours moyen de l'ordre de H_P (voir annexe D), une vitesse égale au centième de la vitesse du son et des valeurs de ρ et T typique d'une enveloppe convective, 10^{-4}g cm^{-3} et 30000K .

Donc, à un mouvement turbulent, on peut associer une viscosité qui, suivant la nature des instabilités génératrices, n'est pas négligeable et peut provoquer ainsi une non linéarité. Plus généralement, Guyon *et al.* (1994) montrent que *seul un fluide parfait conserve un profil de $\vec{\Omega}$ constant*, quel qu'il soit au départ.

3.4.2 Anisotropie et incompressibilité

Parmi les conséquences du paragraphe précédent, où les effets de viscosité turbulente (ou macroscopique) sont quantifiés de façon similaire aux effets microscopiques, on note qu'un

profil de vitesse angulaire initialement inhomogène devrait tendre vers un profil homogène puisque II-3.45 est une équation de diffusion. C'est effectivement le cas pour une viscosité isotrope, comme supposé dans la théorie classique de la cinétique des gaz. Or, dans une étoile, les mouvements turbulents (comme la convection) sont entretenus par un flux de photons radial, une gravité radiale et une force d'Archimède radiale elle aussi. On peut donc s'attendre à une forte anisotropie de la viscosité entre les directions verticale et horizontale mais aussi entre un mouvement dirigé vers l'extérieur ou vers le centre : tout dépend de l'intensité relative des différentes forces mises en jeu. Lorsqu'on en tient compte dans le calcul de l'évolution du profil de rotation, Biermann (1951) a montré que la viscosité favorise alors la rotation différentielle.

De plus, dans la plupart des cas, le fluide est considéré comme incompressible. La levée de cette hypothèse est de nature à provoquer aussi une anisotropie, car l'évolution de ρ est alors sensible aux gradient de pression et forces volumiques à travers la divergence de la vitesse.

Plusieurs essais ont été fait pour prendre en compte certains des effets d'anisotropie. Donnons deux exemples :

- dans la théorie classique de la longueur de mélange, Forestini (1994) considère un fluide compressible et prend en compte l'anisotropie résultante en séparant le flux convectif en un flux vers le haut et un flux vers le bas.
- Zahn (1992) remarque que la circulation méridienne entraîne un cisaillement horizontal qui lui-même peut provoquer un transport de matière horizontal pendant le déplacement des globules convectifs (Talon & Zahn 1997), dominant par rapport au transport vertical.

3.4.3 Spectre

Un phénomène turbulent est caractérisé par trois sortes d'échelles (Schatzman & Praderie 1990) :

- les gros tourbillons, alimentés en énergie par les instabilités, ont la longueur caractéristiques la plus importante.
- les échelles dissipatives, les plus petites, où la dynamique dépend de la dissipation due à la viscosité. L'énergie y est dissipée sous forme de chaleur.
- les échelles intermédiaires, où les effets non linéaires dominant, transférant l'énergie aux petites échelles.

En fait, l'énergie n'est pas seulement incluse dans des globules de taille l comme la MLT le suppose, mais il existe un spectre complet d'énergie défini comme suit pour une turbulence isotropique en régime stationnaire :

$$E(k) \stackrel{def}{=} 4\pi k^2 \mathcal{F}(C_{ii}(d)) = 1.4\epsilon^{2/3} k^{15/3} \quad (3.46)$$

$$\int_0^\infty E(k) dk = \frac{1}{2} \langle v^2 \rangle \quad et \quad \langle v \rangle = 0 \quad (3.47)$$

$$C_{ij}(d) = \langle v_i(\vec{r}, t) v_j(\vec{r} + \vec{d}, t) \rangle \quad (3.48)$$

Le spectre d'énergie est donc défini comme la transformée de Fourier de la matrice de corrélation des vitesses microscopiques. La dépendance trouvée en le nombre d'onde, k , et en le taux de dissipation massique de l'énergie, ϵ , est la loi de Kolmogorov (Schatzman & Praderie (1990)). Les théories qui veulent décrire l'apparition de la turbulence dans les étoiles devraient donc prendre en compte aussi le spectre complet de la turbulence qui peut varier fortement suivant si l'on est au coeur de l'étoile pour le brûlage de l'Helium ou dans une zone d'ionisation partielle de l'Hydrogène. Canuto & Mazzitelli (1991) puis Canuto (1998) ont formulé une version de la MLT où ils tiennent compte du spectre complet de la turbulence. La première a été rediscutée par Lydon *et al.* (1992).

3.4.4 Critère d'apparition

La turbulence n'est pas un phénomène continu mais se développe à partir du moment où une instabilité a lieu. Cela donne donc lieu à un critère et plusieurs difficultés y sont rattachées:

- dans le cas de l'instabilité thermique, la frontière convective est définie comme le lieu où la fluctuation de masse volumique est nulle, $\Delta\rho = 0$, ce qui implique $f_{tot} = g\Delta\rho = 0$ ou encore une accélération nulle pour la matière s'y trouve. La *vitesse* v_{conv} à la frontière étant, elle, non nulle, la matière va tout de même franchir cette frontière et passer du coté stable où la convection, selon le critère, ne doit pas apparaître. Comme on se trouve justement du coté stable de la frontière, cette fluctuation est vite amortie, avec le temps caractéristique $(\nu_{int})^{\perp 1}$ (voir II-3.14). Cependant, sur une certaine distance $d_{ov} \sim v_{conv} \nu_{int}^{\perp 1}$, du mélange a eu lieu et doit être pris en compte pour calculer la structure de l'étoile. La distance de pénétration dépend fortement de la structure thermique et en composition des couches ($\Delta\nabla_{int}$ et ∇_{μ}). Ce phénomène de dépassement de la frontière de stabilité est appelé "overshooting".
- de plus, ces critères d'apparition de la turbulence sont locaux. Or les couches adjacentes sont en théorie couplées par différents processus: transfert de masse, de composition, de moment angulaire, de quantité de mouvement . . . Dans le traitement de l'overshooting par exemple, la distance exacte de pénétration dans le milieu stable demanderait de calculer le point d'annulation de la vitesse. Ce point dépend de la valeur de l'accélération ou du freinage dans toutes les couches traversées par la cellule. Sa valeur ne peut pas être calculée localement. De même le critère d'instabilité thermique demande le calcul de ΔT ou $\Delta\rho$. Or, ces quantités sont moyennées sur une distance Δr (voir II-3.2) qui, certes introduit une non localité mais, surtout, est tout-à-fait arbitraire.

Pour ces raisons, l'ajout de l'overshooting dans les calculs d'évolution stellaire est pour le moment effectué de façon paramétrique ou sur base de simulations hydrodynamiques (Herwig *et al.* 1997).

3.5 Diffusion et traitement du mélange

Comment traiter le mélange une fois qu'un critère établit qu'il doit exister? Voila la problématique de cette section.

La diffusion microscopique est un phénomène bien connu: les particules ont chacune un mouvement qui semble erratique et en moyenne nul mais statistiquement, les particules se dispersent d'autant plus que le temps s'écoule. Etudier la diffusion microscopique des particules revient à étudier les déviations par rapport au comportement moyen. Cela se traduit par un formalisme mathématique particulier: l'équation de diffusion microscopique. Si un traitement statistique de la turbulence (macroscopique) est adapté au problème, on peut se ramener aussi, par analogie, à une description mathématique diffusives de la turbulence. C'est le traitement qui a été introduit pendant ma thèse dans le code STAREVOL. Aussi, un rappel des équations de diffusion sera fait ici, puis une description des coefficients de diffusions intéressants à tester à la phase AGB.

3.5.1 Equations de la diffusion

Notations

On s'intéresse à un plasma multicomposante comme pour l'équation d'état. On utilisera dans cette section la concentration et la densité de l'espèce x , définies par:

$$c_x \stackrel{def}{=} \frac{n_x}{\sum_i n_i} \quad (3.49)$$

$$\rho_x \stackrel{def}{=} \rho c_x \quad (3.50)$$

On s'intéressera à la diffusion d'une espèce x , *c'est-à-dire au mouvement d'un type de particules, x , par rapport au mouvement global moyen du milieu*. On décomposera pour cela la concentration et la vitesse d'une particule en une partie moyenne et un écart à la moyenne:

$$c_x = \langle c \rangle + c_x^{diff} \quad (3.51)$$

$$v_x = \langle v \rangle + v_x^{diff} \quad (3.52)$$

où on a:

$$\langle c \rangle \stackrel{def}{=} \sum_i c_i = 1 \quad (3.53)$$

$$\langle \vec{v} \rangle \stackrel{def}{=} \sum_i c_i \vec{v}_i = \text{vitesse macroscopique} \quad (3.54)$$

L'équation de diffusion

On écrit une équation du type II-1.2 pour la conservation de la masse de l'espèce x dans laquelle on incorpore un terme de création/destruction pouvant symboliser les réactions nucléaires par exemple:

$$\frac{d\rho_x}{dt} + div(\rho_x \vec{v}_x) = \sigma_x \rho_x \quad (3.55)$$

Une sommation sur les espèces x redonne l'équation de conservation de la masse totale:

$$\frac{d\rho}{dt} + div(\rho \langle \vec{v} \rangle) = \langle \sigma \rangle \rho \quad (3.56)$$

avec

$$\rho \stackrel{def}{=} \sum_i \rho_i \quad (3.57)$$

$$\langle \sigma \rangle \stackrel{def}{=} \sum_i c_i \sigma_i \quad (3.58)$$

On soustrait II–3.56 de II–3.55 pour faire apparaître les grandeurs concernant la diffusion, c'est-à-dire les écarts à la moyenne. En utilisant II–3.58, II–3.53 et II–3.54, on obtient:

$$\frac{d\rho c_x^{diff}}{dt} + div(\rho \vec{v}_x^{diff}) = \rho \sigma_x^{diff} \quad (3.59)$$

Par comparaison avec II–1.2, on identifie le courant de diffusion:

$$\vec{J}_x^{diff} = \rho \vec{v}_x^{diff} \quad (3.60)$$

Par ailleurs, d'après les relations II–1.15, on voit bien que le courant de matière dépend de trois facteurs: le gradient de température, les forces extérieures appliquées (ou gradient de pression d'après II–1.7 à l'équilibre mécanique) et des gradients de concentration. Dans l'approximation où le gradient de composition domine (c'est la loi de Fick), le courant de diffusion de la masse peut s'écrire:

$$\vec{J}_x^{diff} = \perp D \vec{\nabla}(\rho_x) \quad (3.61)$$

où D est le coefficient de diffusion. En comparant II–3.60 et II–3.61, on obtient une expression pour la vitesse de diffusion:

$$\vec{v}_x^{diff} = \perp \frac{D}{\rho} \vec{\nabla} \rho_x \quad (3.62)$$

On remarquera que, même si l'on a un plasma à une composante où $\rho_x = \rho$, la vitesse de diffusion est non nulle car l'espèce va migrer, à masse volumique moyenne constante, pour réduire les gradients de masse volumique. En introduisant l'expression II–3.62 dans II–3.59, on obtient la forme générale de l'équation de diffusion de la masse causée par les gradients de concentrations:

$$\frac{d\rho c_x^{diff}}{dt} = div(D \vec{\nabla} \rho_x) + \rho \sigma_x^{diff} \quad (3.63)$$

Le coefficient de diffusion

L'expression du coefficient de diffusion peut s'obtenir en faisant simplement le bilan de passage de la masse dû à la diffusion (donc à la vitesse \vec{v}_x^{diff}) sur un axe particulier choisi. On quantifie alors ce bilan en estimant les courants de matière \vec{J}_+ et \vec{J}_\perp dans les deux sens en un point d'abscisse y_0 , à partir de deux positions $y_0 + l_x$ et $y_0 - l_x$. On obtient (Guyon *et al.* 1994),

$$D = \frac{1}{3} \langle v \rangle l_x \quad (3.64)$$

le coefficient $1/3$ venant du fait qu'en moyenne, seulement un tiers des particules se dirigent le long de l'axe étudié dans un espace à trois dimensions. Cette hypothèse sous-tend une condition d'isotropie. Si l'on veut traiter le mélange convectif de façon diffusive, on prendra alors: $D_{conv} = \frac{1}{3} \langle v \rangle l$, la vitesse moyenne des cellules convectives étant donnée par II–B.6 et $l = \alpha H_P$ étant la longueur de mélange.

3.5.2 Choix des coefficients de diffusion pour STAREVOL

Parmi toutes les instabilités rotationnelles possibles, nous avons choisi de tester deux coefficients de diffusion susceptibles d'aider à l'apparition du troisième dredge-up à la phase AGB.

Overshooting

L'overshooting est le plus naturel puisqu'il s'agit d'une "prolongation" de la zone de mélange jusque dans la zone radiative stable située en-dessous de l'enveloppe convective. Des simulations hydrodynamiques ont été menées par Freytag *et al.* (1996) sur des modèles de naines blanches qui subissent un très fort overshoot à tel point que la zone mélangée est environ 300 fois plus importante en masse que la zone d'instabilité. La dispersion verticale des particules autour du mouvement moyen à différents endroits dans l'étoile a été calculée en fonction du temps. La figure II-3.4 montre le logarithme de cette dispersion (1σ) en kilomètres pour plusieurs altitudes dans l'étoile en fonction du temps.

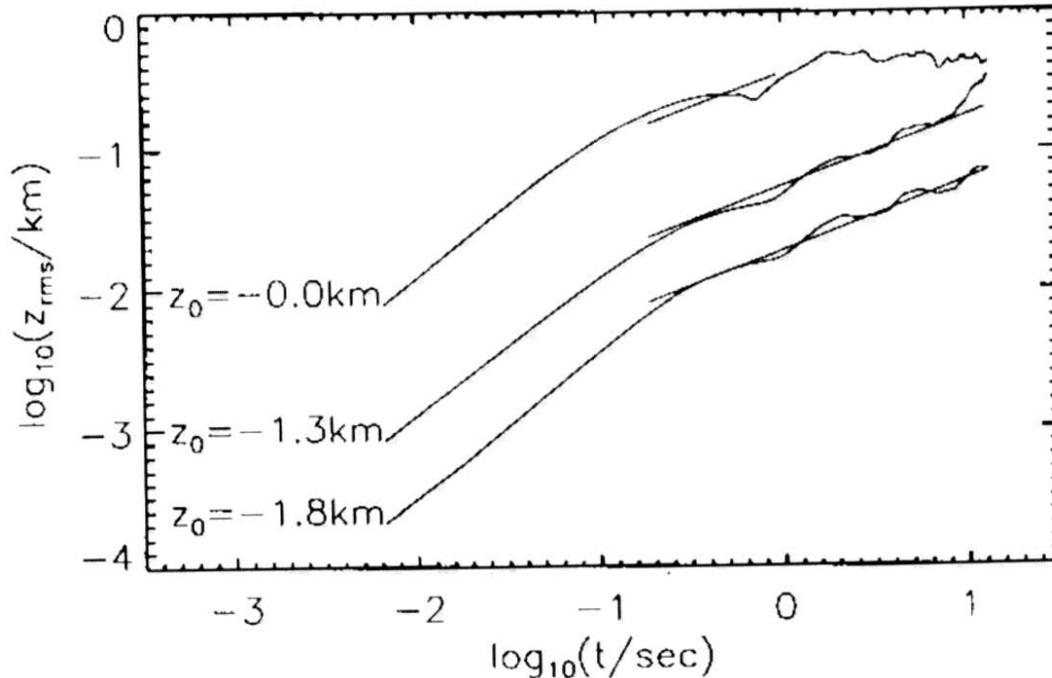


FIG. 3.4 – Dispersion du mouvement vertical des particules à différents endroits dans l'étoile, d'après Freytag *et al.* (1996).

$z_0 = 0$ km correspond à la frontière convective et $z_0 < 0$ à la zone d'overshooting. En moins de 0.5 s, la dispersion atteint un régime de croissance en $t^{1/2}$. De plus, la variation radiale de cette dispersion donne la variation du coefficient de diffusion en fonction de la dispersion des vitesses. Freytag *et al.* (1996) obtient comme ajustements satisfaisants:

$$\sigma_z^2(z, t) = 2D_{ov}(z)t \quad (3.65)$$

$$\text{avec } D_{ov}(z) = \tau_{tur} \sigma_v^2 \quad (3.66)$$

Il donne aussi une formule générale pour le coefficient de diffusion permettant de le calculer

sans avoir les résultats des simulations:

$$D_{ov}(z) = v_{conv}^2(z_{conv})\tau_{tur}e^{2\frac{(z-z_{conv})}{H_v}} \quad (3.67)$$

où les quantités indicées "conv" se rapportent à la frontière convective, τ_{tur} est le temps caractéristique de mélange dans la zone (indépendant du rayon d'après les simulations) et H_v est la distance caractéristique de variation de la vitesse. Cela revient à choisir pour la dispersion des vitesses la loi: $\sigma_v = v(z)e^{\frac{(z-z_{conv})}{H_v}}$ mais les arguments expérimentaux ou statistiques permettant de supposer cette forme analytique ne sont pas explicités.

Herwig *et al.* (1997) reprend ces simulations pour introduire un coefficient de diffusion d'overshooting sous l'enveloppe convective à la fin d'un pulse thermique. Il pose:

$$D_{ov}(z) = D_{conv}e^{2\frac{(z-z_{conv})}{H_v}} \quad (3.68)$$

$$H_v = fH_P \quad (3.69)$$

$$D_{conv} = v_{conv}l_{tur} \quad (3.70)$$

Deux problèmes se posent alors:

- l'expression choisie pour D_{conv} , même si qualitativement II-3.70 et II-3.66 sont équivalentes car $v \sim \frac{l_{tur}}{\tau_{tur}}$, est-elle valable alors que Freytag *et al.* (1996) mentionne explicitement que cette forme analytique pour D_{ov} ne permet pas de trouver un bon ajustement des courbes de la figure II-3.4Γ
- quelle valeur de f prendre pour adapter le coefficient de diffusion à la phase AGB alors que Herwig *et al.* (1997) rappellent bien que cette valeur dépend des paramètres de l'étoile. Le choix qu'ils ont fait a été d'ajuster la séquence principale des modèles de Schaller *et al.* (1992) calculés avec un overshooting instantané, fixé à $d_{ov} = 0.2H_P$. Le résultat, f=0.02, peut être modifié d'un facteur 2 sans changer qualitativement les résultats.

Ce coefficient de diffusion a été implémenté tel quel, pour pouvoir comparer les résultats obtenus par Herwig *et al.* (1997) avec les notres.

Cisaillement

Un autre processus de mélange tout-à-fait adapté pour faciliter le troisième dredge-up est le cisaillement. En effet, le troisième dredge-up étant la descente d'un milieu convectif de composition majoritaire en Hydrogène dans un milieu ayant subi le brûlage de l'Hydrogène puis la nucléosynthèse du pulse thermique, les différences de masse volumique et de composition favorisent la rotation différentielle et donc le mélange radial. Récemment, Maeder (1997) a revu le traitement du cisaillement en tenant compte du fait que ce phénomène physique peut se développer dans une zone déjà instable, thermiquement par exemple. Comme rappelé à la fin de la section II-3.3, l'étude des zones de cisaillement semi-convectif se réduit à celle des zones semi-convectives "standards" quand le cisaillement est nul. L'étude de ces zones particulières permet donc de coupler semi-convection (et donc convection) avec cisaillement.

Tout d'abord, mettons en évidence qu'un profil de vitesse "cisailé" contient une certaine énergie. En effet, moyennant quelques approximations (voir section II-3.3), le cisaillement

va provoquer un mélange radial qui va se répercuter sur le profil de vitesse jusqu'à ce que le cisaillement soit nul et le mélange stoppé. Bilan de l'opération: le cisaillement contenait forcément l'énergie nécessaire au mélange qu'il a provoqué.

Maeder (1997) a résumé l'apparition d'instabilité de cisaillement, en milieu turbulent ou non, comme suit:

- dans un milieu non turbulent, c'est le cisaillement qui doit fournir l'énergie nécessaire à créer la turbulence et à l'entretenir. Comme turbulence signifie mélange, le cisaillement doit donc posséder comme énergie minimum celle nécessaire à effectuer le mélange. C'est le critère de Richardson, $Ri > \frac{1}{4}$, qui permet de quantifier cette condition, même si une barrière de composition existe.
- dans un milieu turbulent (convectif ou semi-convectif), l'énergie contenue dans le cisaillement peut donner naissance sans condition à du mélange car la turbulence est déjà maintenue par un autre processus. La fraction de matière mélangée, f_μ sera une fonction croissante de la fraction d'énergie du cisaillement, f_{sh} , disponible pour le mélange. Ainsi, on a mélange partiel de la zone à cause du cisaillement même si $Ri < \frac{1}{4}$. En appelant $\delta\Delta\mu$ la variation d'excès de composition $\Delta\mu$ au cours d'un déplacement, Maeder (1997) dérive:

$$f_\mu \stackrel{def}{=} \frac{\delta\Delta\mu}{\Delta\mu} = \frac{\chi_T}{\chi_\mu} \frac{\nabla_{int} \perp \nabla_{ext}}{\nabla_\mu} \frac{f_{sh}}{4} \frac{H_P \chi_\rho}{\chi_\mu \nabla_\mu} \left(\frac{dv}{dr} \right)^2 \quad (3.71)$$

Pour avoir le coefficient de diffusion associé à ce mélange, on va utiliser la relation II-3.64 et on a donc besoin de $\langle v \rangle$, la vitesse d'un globule convectif ou semi-convectif de cisaillement.

Pour obtenir cette quantité, on utilise l'équation générale de l'excès de température donnée par Kippenhahn & Weigert (1990) sur une distance donnée:

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta \ln T}{dt} &= \text{'' excès de température cumulé } \perp \text{ pertes radiatives cumulées''} \\ &= \frac{v_\mu}{H_P} (\nabla_{ext} \perp \nabla_{ad}) \perp \frac{\Delta \ln T}{\tau_{th}} \end{aligned} \quad (3.72)$$

et l'on va exprimer la dérivée temporelle de $\Delta \ln T$ par ailleurs.

En combinant l'équation du mouvement des globules, II-3.13, la relation thermodynamique D.60 avec l'approximation $d \ln P = 0$, l'hypothèse $Pe \ll 1$ (c'est-à-dire que les dérivées temporelles de la vitesse sont négligeables devant celles de la température) et en n'oubliant pas la définition de la vitesse, $v_\mu = \frac{d\Delta r}{dt}$, on obtient

$$\frac{d\Delta \ln T}{dt} = \frac{\chi_\mu}{\chi_T} \frac{\nabla_\mu}{H_P} v_\mu \quad (3.73)$$

ce qui donne, en associant à l'équation II-3.72 et en posant que les vitesses de propagation de $\delta\Delta\mu$ et $\Delta\mu$ sont les mêmes:

$$v_\mu = \frac{H_P}{\Delta \nabla + \frac{\chi_\mu}{\chi_T} \nabla_\mu} \frac{\chi_\mu}{\chi_T} \frac{\delta\Delta\mu}{\mu \tau_{th}} \quad (3.74)$$

où τ_{th} est donné par II-3.4, $\frac{\delta\Delta\mu}{\mu} = f_\mu \frac{\Delta\mu}{\mu}$, $\Delta\mu$ est défini par II-3.18 et f_μ par II-3.71. En supposant que $\Delta r \sim d$, ce qui est raisonnable car cela équivaut à une longueur de mélange

dans la théorie de la MLT (voir annexe B), et en utilisant B.9, on obtient l'expression du coefficient de diffusion:

$$D = \frac{4K}{\nu_{ad}^2} \left[f_{sh} \rho \left(\frac{dv}{dr} \right)^2 \perp \frac{\Gamma}{\Gamma + 1} B \Delta \nabla_{ad} \right] \quad (3.75)$$

Cette équation contient trois inconnues: Γ , ∇_{conv} (dans ν_{ad}^2) et D . On doit lui adjoindre deux autres équations contenant ces variables pour les obtenir toutes les trois.

La deuxième résulte du calcul de Γ à partir de sa définition B.9,(Maeder 1995), et de la définition de D , II-3.64:

$$D = 2K\Gamma \quad (3.76)$$

Et enfin, la dernière équation découle de la prise en compte dans le transport de l'énergie emmenée par le cisaillement (Maeder 1995), qui est un transfert radial d'énergie. On fait donc apparaître le gradient de chaleur dans cette direction. On a respectivement pour la luminosité de cisaillement, la luminosité transmise par transfert radiatif et la luminosité totale:

$$L_{sh} \stackrel{def}{=} 4\pi r^2 \rho v l \frac{\Delta Q}{\Delta r} \quad (3.77)$$

$$L_{rad} \stackrel{def}{=} 4\pi r^2 J_{rad} = 4\pi r^2 \lambda \frac{T}{HP} \nabla_{ext} \quad (3.78)$$

$$L_{tot} \stackrel{def}{=} 4\pi r^2 J_{tot} = 4\pi r^2 \lambda \frac{T}{HP} \nabla_{rad} = L_{rad} \left(1 + \frac{L_{sh}}{L_{rad}} \right) \quad (3.79)$$

On calcule L_{sh} en utilisant Γ (voir B.9) et $\Delta Q = c_P \Delta T$. Puis on calcule son quotient avec L_{rad} pour pouvoir l'introduire dans L_{tot} ; ce qui donne la troisième équation:

$$\nabla_{ext} = \frac{\nabla_{rad} + \left(\frac{6\Gamma^2}{1+\Gamma} \right) \nabla_{ad}}{\left(1 + \frac{6\Gamma^2}{1+\Gamma} \right)} \quad (3.80)$$

La résolution couplée de II-3.75,II-3.76 et II-3.80 aboutit à une équation du troisième degré en Γ :

$$12p_\mu \Gamma^3 + (2 + 2p_\mu \perp 6p_u) \Gamma^2 + (6 + 2p_\mu \perp p_u) \Gamma \perp p_u = 0 \quad (3.81)$$

où l'on a défini:

$$p_u = \frac{\nabla_u}{\nabla_{ad} \perp \nabla_{rad}} \quad (3.82)$$

$$p_\mu = \frac{\nabla_m}{\nabla_{ad} \perp \nabla_{rad}} \quad (3.83)$$

$$\nabla_u = f_{sh} \frac{\rho}{B} \left(\frac{dv}{dr} \right)^2 \quad (3.84)$$

$$\nabla_m = \frac{\chi_\mu}{\chi_T} \nabla_\mu \quad (3.85)$$

Maeder (1997) donne un critère pour choisir la solution physique dans le domaine où les solutions peuvent être multiples. Nous l'avons utilisé sous la forme suivante en dérivant l'équation II-3.81:

$$\left. \frac{\partial \Gamma}{\partial p_u} \right|_{p_\mu} = \frac{6\Gamma^2 + \Gamma + 1}{36p_\mu \Gamma^2 + 2(2 + 2p_\mu \perp 6p_u) \Gamma + (6 + 2p_\mu \perp p_u)} > 0 \quad (3.86)$$

3.5.3 Traitement Numérique

Juste un petit paragraphe pour préciser quelques points concernant la méthode numérique qui permet de résoudre l'équation II-3.63 avec les coefficients de diffusion appropriés:

- l'équation est résolue par la méthode des éléments finis (Le Pourhiet 1988). Cette méthode robuste permet de tester des coefficients de diffusion variant très rapidement sur plusieurs ordres de grandeurs.
- le calcul du coefficient de diffusion ayant une rétroaction sur le gradient de température dans le cas du cisaillement (couplage Γ, D, ∇), ce coefficient est calculé à chaque itération de la structure.
- la procédure de diffusion est découplée du calcul de la structure pour être effectuée séparément en découpant le pas de temps de structure en n "sous pas de temps de diffusion". Nous avons choisi $n = 50$ pour les calculs réalisés à la phase AGB.
- dans le cas de l'overshooting, la frontière convective pouvant varier d'un modèle à l'autre de plusieurs dizaines de couches alors que le coefficient de diffusion n'a un effet significatif que sur quelques couches, les profils d'abondances résultant présentaient des pics non physiques confirmant que la diffusion n'opérait pas de manière continue. On impose donc dans la région située en-dessous de l'enveloppe convective et jusqu'au maximum de la couche en fusion d'Helium, un critère de masse maximum des couches très faible dans la gestion de la discrétisation spatiale, pour assurer un grand nombre de couche (> 100) dans la région d'overshooting.
- dans le cas du cisaillement, le coefficient de diffusion a été calculé avec $f_{sh} = 1$ pour avoir un effet maximum. De plus, lorsque le cisaillement tend vers 0, p_u aussi et on obtient une solution évidente, $\Gamma = 0$. Ce sont les deux autres solutions qui déterminent alors s'il y a du mélange ou pas. En effet, si elles sont complexes, la seule solution restante est $\Gamma = D = 0$. Une difficulté numérique qu'il faut surmonter est le profil, très piqué, de ∇_μ qui demande à être lissé. D'autre part, le cisaillement a été estimé d'après un modèle d'une étoile de 3 masses solaires calculée dans le code de Genève avec suivi du moment angulaire, après la combustion centrale de l'Hélium. Tout ceci est en phase de calcul à Grenoble. A terme, il est prévu de suivre le moment angulaire dans STAREVOL pour pouvoir calculer la diffusion de façon cohérente avec l'évolution de la structure de l'étoile.

Chapitre 4

Observations radiomillimétriques de raies moléculaires

Sommaire

4.1	Spécificités du domaine radio	153
4.2	Le “téléscope”	160
4.3	Méthode de réception	165

Que se passe-t-il entre le moment où le rayonnement traverse l’atmosphère terrestre et celui où la raie tant attendue apparaît enfin sur l’écran de la salle de contrôle ? Quelles informations recueillir à partir de ces raies et avec quelle précision ? Les deux questions sont étroitement corrélées : seule une bonne connaissance des techniques d’observation permettra d’optimiser l’information que l’on peut retirer des raies obtenues. Voilà le centre de discussion de ce chapitre.

4.1 Spécificités du domaine radio

Rappelons que le rayonnement radio est caractérisé par les longueurs d’ondes supérieures à environ $\lambda = 100\mu m$. L’habitude est de parler en fréquence dans ce domaine du spectre électromagnétique. Nous dirons donc que le rayonnement radio est celui des fréquences inférieures à $\nu = c/\lambda \sim 3000GHz$. Nous allons présenter dans cette section les différentes températures caractéristiques utiles pour la suite et la physique de l’émission de ce rayonnement.

4.1.1 Températures caractéristiques

Une grande habitude dans ce domaine de fréquence est de parler des intensités en unité de température. Pourquoi est-ce possible ? Que représente la température obtenue ? Nous aurons besoin d’utiliser l’intensité spécifique (qui sera introduite en détail au chapitre II-5) et la notion d’équilibre statistique pour répondre à ces questions. Nous pourrons alors établir tout un jeu de températures importantes en radio.

Equilibre statistique

Lorsqu’on considère un système à plusieurs composantes (e^\perp, γ, \dots), le Hamiltonien contient toute la physique microscopique de ce système et la fonction de partition \mathcal{Z} (voir le chapitre

II-2) tous les états accessibles (électroniques, rotation, vibration...). On dit que *l'équilibre statistique est atteint lorsque les particules du système sont réparties sur les différents niveaux pour former la configuration*

la plus probable. Cet état ...

- est le plus probable au sens statistique: il minimise l'entropie statistique, $S = -k \ln(P)$, où P est la probabilité de la configuration.
- est stationnaire dans le sens où il minimise l'énergie (le grand potentiel exactement, voir Couture & Zitoun (1992)). En effet, le minimum d'entropie cherché et calculé à énergie totale et nombre de particules donné, ce qui implique en fait de minimiser le grand potentiel. Le système ne peut donc évoluer qu'en échangeant avec l'extérieur: cet échange modifiera les états accessibles et changera l'état le plus probable vers lequel tendra alors le système.
- est caractérisé par \mathcal{Z} mais aussi par deux paramètres, T et μ_i (i variant sur toutes les composantes du plasma) qui ont une signification statistique. C'est *le jeu de paramètres unique décrivant le système dans l'état le plus probable*. Ce sont des paramètres qui permettent de minimiser S à énergie totale et nombre de particules constants. Tous les autres paramètres thermodynamiques découlent de ces trois grandeurs (voir chapitre II-2).

La remarque primordiale pour définir les températures utilisées en radio est que cet état d'équilibre peut concerner *tout ou partie* du système.

- en effet, prenons un premier exemple dans lequel les différentes composantes du système sont dans des états d'équilibre statistique séparés. Dans une enceinte remplie de photons et de gaz, ces deux types de particules n'ont pas forcément d'équilibre statistique commun. Cela signifie que les interactions entre les deux composantes ne sont pas assez fortes. Le hamiltonien du système peut se décomposer en deux hamiltoniens et la fonction de partition du système est un produit de deux facteurs décrivant chacun un sous système. On peut donc calculer séparément les jeux de paramètres (T, μ_i) caractérisant les équilibres statistiques des photons, du gaz et du système complet. Dans ce cas tous ces paramètres sont différents.
- dans un deuxième exemple, les différents degrés de liberté du système peuvent ne pas être à l'équilibre statistique simultanément. On peut considérer l'équilibre des degrés de liberté de translation sans tenir compte de ceux de rotation/vibration. La configuration la plus probable de répartition sur les états de translation est caractérisée par une température qui n'est pas forcément celle donnant la répartition la plus probable sur les états de rotation. Le hamiltonien est alors une somme de hamiltoniens décrivant chacun un degré de liberté et la fonction de partition s'écrit comme produit de fonctions de partition. Cela signifie que les degrés de liberté ne sont pas couplés statistiquement. La connaissance de l'état de translation ne contraint pas l'état rotationnel dans lequel se trouve la particule. On peut donc trouver des équilibres pour chacun des degrés de liberté.
- enfin, un seul endroit du système peut vérifier cet équilibre. Cela signifie que la température caractérisant l'état le plus probable de tout le système (tous les degrés de libertés

et toutes les composantes) n'est valable que localement. Les gradients de température et de potentiels chimiques vont tendre à uniformiser la situation en déclenchant des courants de diffusion (voir l'équation II-1.15). On parle alors d'ETL (Equilibre Thermodynamique Local).

Retenons de cette discussion que la température, par définition la température statistique ou thermodynamique, est caractéristique de l'atteinte de l'équilibre thermodynamique.

Rayonnement et température effective

L'intensité spécifique est une mesure de l'énergie par unité de temps, de surface, d'angle solide et de fréquence (voir section II-5.1). Cette quantité I_ν change au fur et à mesure des interactions avec la matière. Un cas particulier intéressant est le corps idéalisé dit "corps noir": il a la propriété d'absorber tout le rayonnement électromagnétique qui lui parvient et de le ré émettre en intégralité. Cette définition, "entrées"="sorties", est caractéristique de l'équilibre thermodynamique. Cette propriété macroscopique demande que les collisions entre particules microscopiques soient très nombreuses pour que l'énergie soit rapidement transmise uniformément à travers tout le corps noir. Au bout de ce temps d'atteinte de l'équilibre, τ_{th} , le corps noir sera dans un état stationnaire où il ne sera caractérisé que par une seule température. On montre alors (Balian 1982) que l'intensité émergente de ce corps noir ne dépend que de sa température au travers de la fameuse loi de Planck:

$$B_T(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{(e^{\frac{h\nu}{kT}} \pm 1)} \quad (4.1)$$

et que le flux émergent vaut $F_\nu = \sigma T^4$ où la constante σ est définie dans l'annexe F. Le corps noir est en équilibre thermodynamique global.

Ce résultat permet donc raisonnablement, à tout flux reçu, d'associer une température dite "température effective", telle que:

$$T_{eff}^4 = \frac{F_\nu}{\sigma} \quad (4.2)$$

Cette température n'a de signification statistique ou thermodynamique que si le système observé est à l'équilibre complet (éventuellement local).

Translation et température cinétique

Lorsqu'un grand nombre de particules subissent des collisions aléatoirement dans le temps et l'espace, on peut caractériser le milieu par la distribution statistique des énergies cinétiques: une moyenne, $\langle E_c \rangle$, et un écart type, σ_{ec} . Dans un cas extrême, chaque particule a une vitesse différente des autres et les valeurs sont réparties uniformément entre $-\infty$ et $+\infty$. Après un temps caractéristique de variation de la température, τ_{th} , les particules ont subi des collisions et transféré leur énergie les unes aux autres, si bien que certaines auront perdu de l'énergie, d'autres en auront gagné. Globalement, les énergies cinétiques vont se resserrer autour d'une valeur moyenne. L'autre cas extrême est celui où les particules ont toutes la même énergie cinétique, c'est-à-dire l'équilibre thermique parfait, où l'on a $\langle E_c \rangle = E_c(i)$ pour toute particule i . Dans le cas de particules indiscernables et quasi-classiques, la

distribution d'équilibre sur les états de translation est donnée par la distribution de Maxwell-Boltzman :

$$dP(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{v}{v_m}\right)^2} \left(\frac{v}{v_m}\right)^2 d\left(\frac{v}{v_m}\right) \quad (4.3)$$

Elle est très piquée en $v_m = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$ et d'écart type $\sigma_v = \langle v^2 \rangle = \frac{3kT}{m}$ donnant $\langle E_c \rangle = \frac{3}{2}kT$. La quantité kT ayant la dimension d'une énergie, on peut toujours *définir* une température cinétique par:

$$T_{kin} \stackrel{def}{=} \frac{2 \langle E_c \rangle}{3k} \quad (4.4)$$

Mais la température cinétique n'est donc la température usuelle (thermodynamique) que si l'on est "suffisamment proche" de l'équilibre statistique des degrés de liberté de translation et que les états de translation domine l'équilibre du système total: $\frac{T_{\perp} T_{kin}}{T} \ll 1$.

Température de brillance

Lorsque l'on est à l'équilibre thermodynamique local, le milieu émet localement l'intensité I définie par II-4.1 où la température T est toujours par définition la température statistiquement significative de l'équilibre, mais localement. Si cette température et la longueur d'une onde considérée dans ce milieu sont tels que $h\nu \ll kT$, alors on peut faire un développement limité de l'exponentielle en $\frac{h\nu}{kT}$, ce qui donne la loi de Rayleigh-Jeans:

$$B_T(\nu) = \frac{2kT\nu^2}{c^2} \quad si \quad \frac{h\nu}{kT} \ll 1 \quad (4.5)$$

Remarquons que pour les ondes radio, il faut que la température du milieu, supposé en équilibre thermodynamique (du moins localement), vérifie: $T \gg \frac{h\nu}{k}$ et $\nu_{max} \sim 3000GHz$, donc $T \gg T_{max} \sim 150K$, ce qui est le cas si on ne va pas "trop loin" dans l'enveloppe circumstellaire. Cette approximation, valide dans le domaine radio, donne l'idée de définir une température caractéristique du système observé, à partir de l'intensité spécifique mesurée. Comme l'équation II-4.5 est dimensionnellement toujours vraie, on peut toujours *définir* une température de brillance associée à l'intensité I par:

$$T_B(\nu, I) \stackrel{def}{=} \frac{Ic^2}{2k\nu^2} \quad (4.6)$$

Cette température ne sera thermodynamiquement significative que si les conditions suivantes sont réalisées:

$$\frac{\sigma_v}{\langle E_c \rangle} \ll 1 \quad et \quad \frac{h\nu}{kT} \ll 1 \quad (4.7)$$

On utilise aussi pour les procédures de calibration des radio-télescopes la température radiative effective:

$$J_\nu(T) \stackrel{def}{=} T_B(\nu, B_\nu) = \frac{h\nu}{k} \frac{1}{(e^{\frac{h\nu}{kT}} \pm 1)} \quad (4.8)$$

Température d'excitation

Si l'on considère un système de particules indiscernables et quasi-classiques (forte densité d'état dans l'espace des phases), l'équilibre statistique sur les niveaux d'énergie du système est donné par la statistique de Boltzmann:

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{g_j}{g_i} e^{-\frac{h(\nu_j - \nu_i)}{kT}} \quad (4.9)$$

où les énergies des niveaux sont écrites $E_x = h\nu_x$, ν_x étant une fréquence caractéristique du niveau x considérés, les g_j sont les poids statistiques des états quantiques et T est le paramètre décrivant l'équilibre statistique atteint. L'équation II-4.9, toujours dimensionnellement valable, encourage à définir la température d'excitation par:

$$T_{ex}(i) \stackrel{def}{=} \frac{h\nu_i}{k} \ln \left(\frac{g_i n_i}{g_{i+1} n_{i+1}} \right) \quad (4.10)$$

Elle est une mesure de l'écart à l'équilibre statistique. En effet, plus T_{ex} est grande et plus le rapport $\frac{g_i n_i}{g_j n_j}$ est grand. Pour l'équipartition, $g_i n_i = g_j n_j$, on a $T_{ex} = 0$. Une inversion de population est donc signalée par $T_{ex} < 0$. En général, la température n'a une signification pour tout le système que si l'on a

$$\frac{T \pm T_{ex}}{T} \ll 1 \quad \text{et} \quad \frac{dn_i}{dt} = 0 \quad (4.11)$$

Si les collisions dominant par rapport aux processus radiatifs pour peupler les niveaux, on aura à l'équilibre statistique, $T_{kin} = T_{ex}$.

Température résistive équivalente

Les électrons d'un conducteur à une température T subissent l'agitation thermique, c'est-à-dire des petits mouvements produisant des courants dont la moyenne, $\langle i \rangle$, est nulle mais dont l'écart type, $\langle i^2 \rangle$ est non nul et dépend de la température. Or la puissance moyenne macroscopique dans une résistance est $P = \langle Ui \rangle = R \langle i^2 \rangle$. Le conducteur en question fournit donc de l'énergie et d'autant plus que la température est grande, tout comme l'agitation augmente avec la température. Une analyse de cet écart type par une méthode statistique de type "marche aléatoire", donne pour la puissance: $P \sim kT$ (Rohlf's & Wilson 1996). On définit donc la température de bruit par la température à laquelle serait une résistance dont la puissance fournie due à l'agitation thermique serait la puissance du signal observé sur le domaine spectral $\Delta\nu$:

$$T_n \stackrel{def}{=} \frac{1}{k} \int_{\Delta\nu} P(\nu) d\nu \quad (4.12)$$

C'est le bruit thermique résistif équivalent de la source. Cette température n'est la "vraie" température de la source que si les observations sont bien des mesures du bruit thermique d'une résistance. On en reparlera dans le processus de calibration des radiotélescopes.

4.1.2 Emission

Le rayonnement radio peut être produit par différents moyens. Il peut s'agir d'un rayonnement continu thermique ou non ou d'un rayonnement discontinu (raies). Le rayonnement

continu le plus évident est le rayonnement thermique d'un corps à une certaine température. D'après l'équation II-4.1, la longueur d'onde du maximum d'émission d'un corps noir, λ_{max} , vérifie (loi de Wien): $\lambda_{max}T = 2898\mu mK$. Pour le rayonnement radio, on aura donc $T \lesssim 29K$. Ces températures correspondent au milieu interstellaire et à l'extrême périphérie des enveloppes circumstellaires, à condition qu'il y ait équilibre thermodynamique, et au rayonnement cosmologique (2.3K). Les sources continues non thermiques sont de type synchrotron et nécessitent la présence de forts champs magnétiques ou de particules très énergétiques.

Mais le rayonnement radio le plus fécond pour l'observation des enveloppes circumstellaires est discontinu. L'énergie associée aux fréquences des ondes radio est petite: $E < E_{max} = h\nu_{max} \sim 12.4meV$. Les phénomènes reliés aux électrons d'un atome ou d'une molécule ayant des énergies caractéristiques de l'ordre de l'électron-volt (voir figure II-2.9), une énergie aussi petite sera reliée à des phénomènes de plus basse énergie: rotation ou vibration des molécules.

Niveaux d'énergie d'une molécule

Les possibilités d'interactions d'une molécule avec les photons environnants reposent toutes sur le calcul de ces niveaux d'énergie. En rappelant brièvement la méthode et la physique sous jacente pour cette tâche, nous essaierons de dégager les approximations et donc les facteurs qui influencent la position des niveaux d'énergie.

La molécule est décrite dans le centre de masse de ces composants (noyaux et électrons) qui se réduit à celui de ces noyaux compte tenu de la masse négligeable des électrons. On utilise alors la masse réduite $\mu = \frac{\prod_i m_i}{\sum_i m_i}$ pour caractériser le système. Le Hamiltonien de ce système s'écrit généralement comme suit:

$$\hat{H} = \sum_n \hat{T}_n + \sum_e \hat{T}_e + \hat{U} \quad (4.13)$$

Les indices "e" et "n" désignent les électrons et les noyaux, les opérateurs cinétiques s'écrivent: $\hat{T}_i = \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla^2$. Le terme d'interaction (coulombien) peut se décomposer comme suit:

$$\hat{U}(r_n, r_e) = \sum_{n_1, n_2 < n_1} \hat{U}(n_1 \leftrightarrow n_2) + \sum_{e_1, e_2 < e_1} \hat{U}(e_1 \leftrightarrow e_2) + \sum_{e, n} \hat{U}(e \leftrightarrow n) \quad (4.14)$$

où $\hat{U}(i \leftrightarrow j)$ est l'interaction entre les particules i et j . La méthode de résolution (Bransden & Joachain 1994) est la suivante:

- résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour les électrons, les positions r_n des noyaux étant *fixées*:

$$[\hat{H}(\vec{r}_n, \vec{r}_e) \perp E_e(\vec{r}_n)] |\phi_e(\vec{r}_n, \vec{r}_e) \rangle = 0 \quad (4.15)$$

Les états d'énergie et les fonctions d'ondes électroniques, E_e et $|\phi_e \rangle$, trouvés dépendent donc paramétriquement des r_n .

- sur la base orthogonale formée par les solutions électroniques $|\phi_e \rangle$, on décompose la fonction d'onde totale de la molécule dont les composantes sont alors Ψ_e :

$$|\Psi(\vec{r}_n, \vec{r}_e) \rangle = \sum_e \Psi_e(\vec{r}_n) |\phi_e(\vec{r}_n, \vec{r}_e) \rangle \quad (4.16)$$

Les composantes $\Psi_\epsilon(\vec{r}_n)$ sont considérées comme des fonctions d'ondes décrivant l'évolution du système en fonction des positions des noyaux avec une configuration fixée des électrons.

- on projette ensuite sur $\{\phi_\epsilon\}$ l'équation de Schrödinger indépendante du temps construite avec le Hamiltonien II-4.13 pour le système complet, dans laquelle on décompose la fonction d'onde totale selon II-4.16:

$$\langle \phi_{\epsilon_1} | (\hat{\mathcal{H}} \perp E) | \Psi \rangle = \sum_{\epsilon_2} \langle \phi_{\epsilon_1}(\vec{r}_n, \vec{r}_e) | (\hat{\mathcal{H}} \perp E) \Psi_{\epsilon_2}(\vec{r}_n) | \phi_{\epsilon_2}(\vec{r}_n, \vec{r}_e) \rangle = 0 \quad (4.17)$$

- on fait l'approximation de Born-Oppenheimer qui consiste à négliger les variations de ϕ_ϵ avec les $\{r_n\}$ devant celle de Ψ_ϵ : $|\nabla_{r_n} \phi_\epsilon| \ll |\nabla_{r_n} \Psi_\epsilon|$: la fonction d'onde globale de la molécule dépend plus des positions relatives des noyaux que de celles des électrons. Cela permet d'évaluer l'action de $\hat{\mathcal{T}}_n$ dans II-4.17.
- dans le cas d'une molécule diatomique ($\{r_n\} = \{R\}$), on décompose Ψ_ϵ en une partie radiale, ψ_ϵ , et une partie angulaire (harmoniques sphériques). La partie angulaire de l'opérateur cinétique peut s'écrire en fonction de l'opérateur moment cinétique et fait donc apparaître les valeurs propres, $\hbar^2 J(J+1)$, des harmoniques sphériques:

$$\Psi_{\epsilon, J, M_J} = \frac{\psi_\epsilon(R)}{R} \mathcal{Y}_{J, M_J}(\theta, \phi) \quad (4.18)$$

$$\nabla_n^2 = \nabla_n^2(R) \perp \frac{\mathcal{L}^2}{\hbar^2 R^2} \quad (4.19)$$

Dans le cas d'une molécule diatomique cela conduit à:

$$\left[\perp \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{dR^2} \perp \frac{J(J+1)}{R^2} \right) + E_\epsilon(R) \perp E_{\epsilon, v, J} \right] \Psi_{\epsilon, v, J} = 0 \quad (4.20)$$

où l'on attend pour les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes au moins un nombre quantique pour les électrons, un pour la rotation et un autre pour la vibration (respectivement ϵ, J, v). Il reste ensuite à poser une forme pour l'énergie des électrons lorsque R varie. On utilise souvent l'approximation parabolique autour de l'état d'équilibre de la molécule, R_0 :

$$E_\epsilon(R) \sim E_\epsilon(R_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 E_\epsilon}{dR^2} \right|_{R_0} (R \perp R_0)^2 \quad (4.21)$$

où une variation de R correspondant à une vibration de la molécule. Lorsqu'on calcule l'énergie de l'état stationnaire de l'équation II-4.20 en R_0 par rapport à E_ϵ :

$$E(R_0) \stackrel{def}{=} E_{\epsilon, v, J} \perp E_\epsilon(R_0) = E_J = \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} J(J+1) \quad (4.22)$$

l'éventuelle énergie résiduelle trouvée ne peut être due qu'au degré de liberté de rotation. On identifie donc $E(R_0)$ à E_J , à l'énergie de rotation. D'après II-4.22, on écrit alors de façon plus générale lorsque l'on est pas à la position d'équilibre:

$$E_{\epsilon, v, J} = E_\epsilon(R_0) + E_v + E_J \quad (4.23)$$

$$\text{où } E_J = \hbar B J(J+1), \quad B = \frac{1}{8\pi^2 I_0} \quad (4.24)$$

$$\text{et } E_v = \hbar \nu_0 \left(v + \frac{1}{2} \right), \quad \omega_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\left. \frac{1}{\mu} \frac{\partial^2 E_\epsilon}{dR^2} \right|_{R_0}} \quad (4.25)$$

E_v est trouvée en résolvant II-4.20 dans laquelle on a utilisé II-4.21 et II-4.23. On reconnaît alors une équation avec potentiel harmonique dont II-4.25 est une solution bien connue. B est appelée constante rotationnelle de la molécule est dépend de son moment d'inertie à la position d'équilibre, $I_0 = \frac{\mu R_0^2}{h}$. Elle vaut typiquement entre 3 et $3000 GHz$, ce qui est tout à fait le domaine radio défini plus haut avec par exemple $B_{CO} = 57.86 GHz$. ν_0 est la constante vibrationnelle. Elle vaut typiquement entre 9000 et $150000 GHz$, ce qui est correspond au domaine infrarouge et non radio.

Approximations

Dans le rappel du paragraphe précédent, plusieurs approximations ont été faites qui restreignent la portée des résultats trouvés

- La molécule a été considérée comme diatomique. La levée de cette hypothèse est importante car le moment d'inertie change en fonction de la répartition de la masse, et la constante rotationnelle définissant les niveaux d'énergie en dépend. De façon générale, Townes & Schawlow (1975) exprime le hamiltonien rotationnel non perturbé par

$$\hat{\mathcal{H}}_{rot} = \frac{1}{2} \left(\sum_{ap} \frac{J_{ap}^2}{I_{ap}} \right) \quad (4.26)$$

L'indice "ap" désignant les axes principaux de l'opérateur moment d'inertie. Ainsi, suivant la géométrie de la molécule vont apparaître des constantes rotationnelles sur chaque axes de la molécule: A, B, C , avec les nombres quantiques qui correspondent.

- On a supposé que l'énergie de rotation pouvait être déterminée à la position d'équilibre de la molécule, c'est-à-dire quand l'énergie de vibration est nulle: c'est l'hypothèse du "rotateur rigide". Cela signifie que degré de liberté de rotation et de vibration sont découplés. On pourrait imaginer par exemple que les états d'énergie de rotation dépendent du nombre quantique v de vibration. C'est ce que l'on appelle les effets de distorsion centrifuge. Ils doivent être pris en compte dans le Hamiltonien comme un terme perturbatif et modifient les énergies avec des nombres quantiques supplémentaires.
- On a pas tenu compte des moments angulaires orbitaux ou de spin éventuellement non nuls des électrons qui peuvent démultiplier des niveaux: c'est la structure fine (Gordy & Cook 1970). On pourrait aussi prendre en compte les moments angulaires des noyaux (structure hyperfine)...

Nous retiendrons de cette section que ce sont les raies de transitions rotationnelles dipolaires électriques des niveaux fondamentaux électroniques et vibrationnels qui produisent les raies observables en radio et que la modélisation qui permettra de simuler les raies observées devra choisir la physique à incorporer parmi un ensemble qui peut vite mener à une résolution purement analytique très complexe.

4.2 Le "télescope"

Si des guillemets ont été mis au mot télescope, c'est que la physionomie de cet outil astronomique est bien loin de la classique image du télescope optique. Il ressemble le plus souvent à une gigantesque antenne. L'objectif de cette section est de définir les grandeurs

fondamentales définissant un radio télescope pour les utiliser à bon escient dans la phase de dépouillement des données.

4.2.1 Mécanismes de l'émission-réception

Théorème de réciprocité

Ce théorème qui découle des équations de Maxwell (Rohlf & Wilson 1996), s'apparente donc au principe de retour inverse de la lumière. Il s'applique entre un récepteur, R, et un émetteur, E, d'onde électromagnétique.

Si le milieu propage identiquement la même onde de R à E ou de E à R, alors la puissance mesurée dans R avant d'échanger R et E sera la même après cet échange: $U_{R \rightarrow E} I_R = U_{E \rightarrow R} I_E$ Où $U_{i \rightarrow j}$ est la tension provoquée par i sur j et I_j , l'intensité circulant dans j . Ce théorème est fondamental car il explique que l'on s'intéresse indifféremment à la réception ou à l'émission pour établir les caractéristiques d'une antenne donnée. Sa justification tient dans le fait que le processus de création ou de réception de courant est symétrique dans un conducteur.

Rayonnement

En quelques lignes, on peut expliquer le processus d'émission-réception:

Dans un conducteur, les électrons peuvent se déplacer. Lorsqu'on soumet le conducteur à un champ électrique périodique variable *interne*, les électrons sont soumis à une force (de manière équivalente, à une accélération) périodique variable et entrent dans un régime d'oscillations entretenues. Les électrons sont chargés et accélérés: ils rayonnent donc!

Réciproquement:

Dans un conducteur, les électrons peuvent se déplacer. Lorsqu'on soumet le conducteur à un champ électrique périodique variable *externe*, les électrons sont soumis à une force périodique variable et entrent dans un régime d'oscillations entretenues. Les électrons sont en mouvement: ils créent donc un courant dans le conducteur!

Les deux situations sont parfaitement symétriques et peuvent être quantifiées en lisant par exemple Jackson (1975).

4.2.2 Lobes de l'antenne

L'énergie emportée par une onde électromagnétique vérifie une équation de conservation du type II-1.2 obtenue à partir des équations de Maxwell (voir annexe G). Sous forme macroscopique pour un volume V , on a:

$$\frac{dE_V}{dt} + \int_S \vec{\Sigma} \cdot d\vec{S} = \int_V \vec{E} \cdot \vec{J} dV \quad (4.27)$$

La variation temporelle d'énergie (puissance) dans un volume V (l'antenne par exemple) est donc le bilan entre un terme échangé avec l'extérieur, issu du courant d'énergie électromagnétique (vecteur $\vec{\Sigma}$) ou vecteur de Poynting, défini par G.13 et un terme de destruction (conversion en chaleur par effet joule). Cette écriture n'est pas tout à fait macroscopique car les quantités décrites dans cette équation oscillent à une fréquence typique de 50Hz qui n'a rien de mesurable. Ce sont les quantités moyennes qui nous intéressent. Retenons ici que la

puissance rayonnée dans une direction \vec{k} caractérisée par (θ, ϕ) est par définition:

$$P(\theta, \phi) \stackrel{def}{=} \left\langle \int_S \vec{\Sigma} \cdot d\vec{S} \right\rangle \quad (4.28)$$

La puissance rayonnée dépend évidemment fortement de la surface d'intégration, c'est-à-dire de la surface de l'antenne. Cette valeur doit ensuite être calculée en suivant les étapes suivantes :

- Pour toutes les grandeurs oscillantes, on utilise un vecteur complexe oscillant de la forme $X(\vec{r}, t) = X(\vec{r})e^{\pm i\omega t}$.
- Calcul du potentiel vecteur retardé à partir des sources de champs: σ et \vec{J} en tous points de l'antenne (voir G.18). Les conditions les plus simples à l'extérieur, $|\vec{J}_{ext}| = \vec{0}$ et $\sigma = 0$. On utilisera aussi l'approximation de Fraunhofer qui suppose que l'on s'intéresse au champ loin de l'antenne: $|\vec{r}' \perp \vec{x}| \sim |\vec{r}'| \perp \frac{\vec{r}'}{|\vec{r}'|} \cdot \vec{x}$
- On calcule les champs loin de l'antenne en utilisant la définition de \vec{B} en fonction du potentiel vecteur, G.8, et l'équation G.6 pour \vec{E} (voir annexe G).
- Calcul de $\vec{\Sigma}$ par G.13 et de sa moyenne temporelle (Rohlf's & Wilson 1996).

Remarquons que cette démarche est un calcul classique de diffraction. Pour l'antenne la plus simple (surface finie plane), on obtient la fonction caractéristique (Jackson 1975) $P \propto \left(\frac{\sin(\theta)}{\theta}\right)^2$. Les figures II-4.1 et II-4.2 montrent cette fonction en coordonnées cartésiennes et polaires. On voit apparaître les “lobes” de l'antenne. On remarque le *lobe principal* (*MB pour*

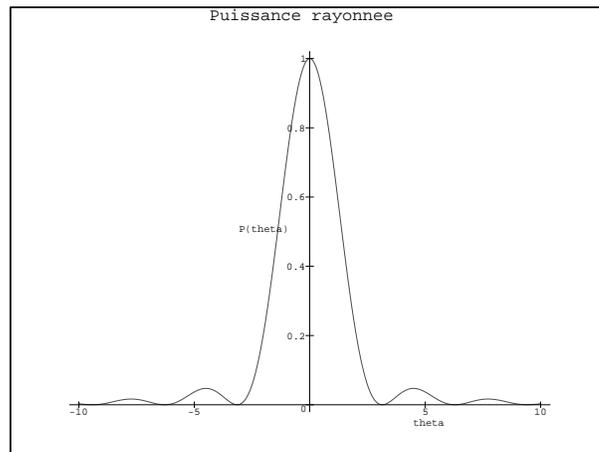


FIG. 4.1 – Répartition angulaire de puissance dans une antenne en coordonnées cartésiennes

Main Beam), celui où l'intensité maximum est émise, dans la direction $\theta = 0$. Il est souvent défini par sa largeur à mi-hauteur (HPBW pour Half Power Beam Width). On remarque aussi des lobes secondaires, c'est à dire des maximums locaux pointant vers des directions autres que $\theta = 0$. Cela signifie que si l'antenne doit émettre (recevoir) une puissance totale, $P_{tot} = \int_{4\pi} P(\theta, \phi) d\Omega$, elle la répartira différemment dans les différentes directions de l'espace, suivant la taille de ces lobes.

Cela se quantifie par la quantité normalisée:

$$P_n(\theta, \phi) = \frac{P(\theta, \phi)}{P_{max}} \quad (4.29)$$

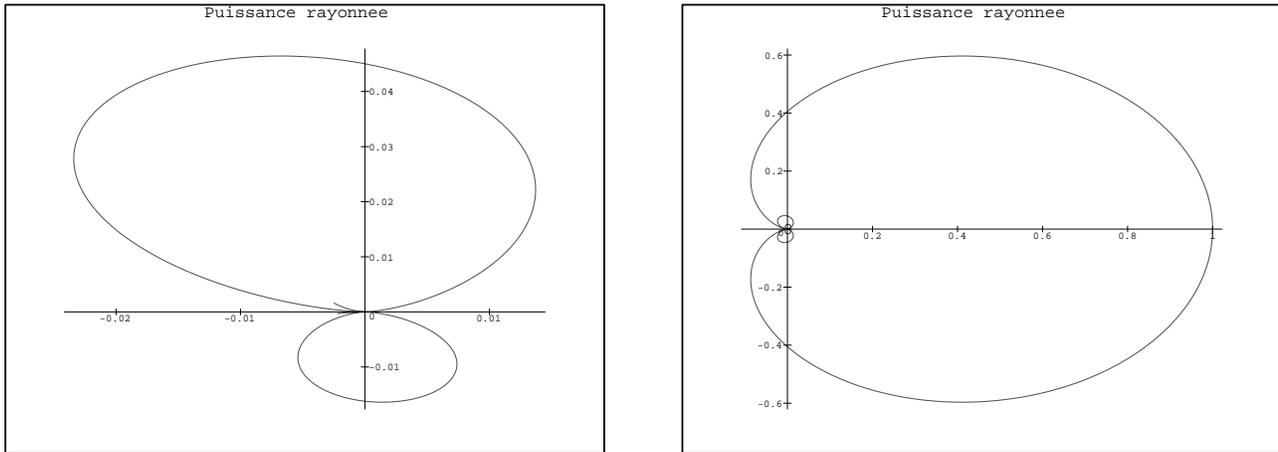


FIG. 4.2 – Schéma polaire général de la répartition de puissance d'une antenne (à droite) et détail des lobes secondaires (à gauche).

4.2.3 Caractéristiques du rayonnement reçu

Caractéristique des lobes

Pour l'observation astronomique, il est évident que l'on veut sélectionner au maximum la puissance provenant de la direction de pointage du télescope et éviter de superposer au signal une source proche même si son intensité est plus faible. Il est donc primordial d'avoir un lobe principal le plus développé possible. De plus, il faut séparer le signal venant de l'avant, qui provient du ciel, de celui provenant des 2π stéradian arrières, c'est-à-dire du sol ! Cela se mesure par les paramètres suivant :

$$\Omega_A = \int_{4\pi} P_n d\Omega \quad (4.30)$$

$$\Omega_F = \int_{2\pi_{\text{avant}}} P_n d\Omega \quad (4.31)$$

$$\Omega_{MB} = \int_{MB} P_n d\Omega \quad (4.32)$$

$$b_{eff} \stackrel{def}{=} \frac{\Omega_{MB}}{\Omega_A} \quad (4.33)$$

$$f_{eff} \stackrel{def}{=} \frac{\Omega_F}{\Omega_A} \quad (4.34)$$

La quantité Ω_x représente l'angle solide moyen couvert par la partie x du lobe, pondérée par la fraction de puissance qu'elle capte. Ω_A vaut 4π si la puissance est répartie uniformément dans toutes les directions. Ainsi, f_{eff} représente la fraction d'angle solide couverte par le lobe principal ou le rendement du lobe principal et b_{eff} représente la même chose pour la partie "avant" du lobe.

Températures mesurées

La température reçue par le télescope est exprimée en température résistive équivalente, dite température d'antenne. Elle s'obtient facilement en exprimant le signal provenant de la

source d'étendue Ω_s sous la forme suivante:

$$T'_n(\theta, \phi) = \frac{T'(\theta, \phi)}{T'_{max}} \quad (4.35)$$

où les ' signalent que la quantité a été modifiée par l'atmosphère. On a alors la température d'antenne par une convolution du signal reçu et de la fraction de puissance prélevée dans chaque direction (Kutner & Ulich 1981):

$$T_a(\theta, \phi) \stackrel{def}{=} \eta_A T'_{max} \frac{\int_{\Omega_s} P_n(\omega \perp \Omega) T'_n(\omega) d\omega}{\Omega_A} \quad (4.36)$$

Le coefficient η_A représente les pertes d'énergie à travers l'antenne. Plusieurs températures sont utilisées pour caractériser la puissance reçue. La température corrigée des effets d'atmosphère est la suivante:

$$T_a^c \stackrel{def}{=} \eta_A T \frac{(P_n * T_n)_{\Omega_s}}{\Omega_A} = \mathcal{A}^{+1}(T_a) \quad (4.37)$$

où $(P_n * T_n)_{\Omega_s}$ est le produit de convolution sur l'étendue de la source et \mathcal{A} , l'opérateur contenant l'influence de l'atmosphère.

La température qu'aurait mesurée le télescope si la même puissance avait été répartie dans le lobe avant uniquement est définie par:

$$T_a^c \stackrel{def}{=} T_a^* F_{eff} \quad (4.38)$$

$$F_{eff} \stackrel{def}{=} \eta_A f_{eff} \quad (4.39)$$

Enfin, la température qu'aurait mesurée le télescope si la même puissance avait été répartie dans le lobe principal uniquement est définie par:

$$T_a^c \stackrel{def}{=} T_{mb} B_{eff} \quad (4.40)$$

$$B_{eff} \stackrel{def}{=} \eta_A b_{eff} \quad (4.41)$$

Les quantités F_{eff} et B_{eff} sont les efficacités du lobe principal et du lobe avant. Elles tiennent compte des pertes dans l'antenne et leur rapport vaut :

$$\eta_{MB} \stackrel{def}{=} \frac{B_{eff}}{F_{eff}} \quad (4.42)$$

Résolution

La forme du lobe principal est souvent approximée par une gaussienne (Downes 1989) et dans ce cas, on a:

$$\Omega_{MB} \sim 1.133 \theta_{mb}^2 \quad (4.43)$$

$$avec \quad \theta_{mb} = 1.22 \frac{\lambda}{D} \quad (4.44)$$

où θ_{mb} est la largeur à mi-hauteur de la gaussienne et D la taille physique de l'antenne. Si la répartition de l'intensité de la source peut être approximée par une gaussienne de HPBW θ_s , alors l'intensité observée aura elle aussi une répartition gaussienne de HPBW:

$$\theta_a^2 = \theta_{mb}^2 + \theta_s^2 \quad (4.45)$$

C'est le résultat des propriétés de convolution des gaussiennes. Si une source a une taille angulaire inférieure à celle du lobe, alors la totalité de son intensité sera moyennée (convoluée) dans le lobe principal. La source est dite “non résolue”. Par contre si la taille angulaire de la source est supérieure à celle du lobe principal, la température d'antenne mesurée va dépendre de la ligne de visée rencontrant la source. La source est dite “résolue”. Dans le cas d'approximation par des gaussiennes, le facteur $\beta = \frac{\theta_s}{\theta_a}$ (facteur de dilution) est donc un indicateur de résolution. Ce rapport tend en effet vers 1 si la taille du lobe est très petite devant celle de la source et vers 0 si c'est l'inverse. Dans un cas général, facteur de dilution ou facteur de remplissage du lobe principal est défini par :

$$\beta \stackrel{def}{=} \frac{(P_n * T_n)\Omega_s}{\Omega_{MB}} \quad (4.46)$$

Notons que si les températures d'antennes sont des températures résistives équivalentes, la température “main beam”, T_{mb} , est la température du corps noir équivalent (Rohlfs & Wilson 1996). Elle est reliée directement à la température de brillance par II-4.40, II-4.37 et II-4.46 :

$$T_{mb} = \beta T \quad (4.47)$$

4.3 Méthode de réception

Ici, nous allons suivre rapidement le signal après sa pénétration dans l'antenne. Il va passer successivement dans deux types d'appareillages électroniques. Les “front end”, récepteurs (filtres) adaptés à la fréquence observée et les “back end”, analyseurs capables d'extraire l'information désirée (un spectrographe pour des raies, dans notre cas). Nous allons détailler dans la suite les processus de filtrage nécessaires et les incertitudes liés aux méthodes de réception.

4.3.1 Le filtrage

La très forte amplification nécessaire à la réception du signal (80 à 100dB) entraîne une très grande sensibilité à la fréquence du signal. Plus la fréquence est haute et plus une légère fuite de puissance peut entraîner des oscillations de fortes amplitudes (Rohlfs & Wilson 1996). C'est pourquoi, après son arrivée au foyer, le signal est envoyé dans un mélangeur, élément électronique à réponse non linéaire, qui va combiner le signal d'entrée à la pulsation ω_{in} avec un signal stable local de pulsation ω_0 . Ainsi, le signal de sortie aura une intensité proportionnelle à la somme des amplitudes au carré. Soit :

$$I_{out} \sim [E_{in} \sin(\omega_{in}t + \delta_{in}) + E_0 \sin(\omega_0t + \delta_0)]^2 \quad (4.48)$$

Le calcul de cette intensité en utilisant quelques formules classiques de trigonométrie fait apparaître 5 composantes:

$$\begin{aligned}
 I_{out} &\sim \frac{E_{in}^2 + E_0^2}{2} \\
 &\pm \frac{E_{in}^2}{2} \sin(2\omega_{in}t + 2\delta_{in} + \pi/2) \\
 &\pm \frac{E_0^2}{2} \sin(2\omega_0t + 2\delta_0 + \pi/2) \\
 &+ E_{in}E_0 \sin((\omega_{in} \pm \omega_0)t + \delta_{in} \pm \delta_0 + \pi/2) \\
 &\pm E_{in}E_0 \sin((\omega_{in} + \omega_0)t + \delta_{in} + \delta_0 + \pi/2)
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

Si l'on applique ce traitement à la fréquence ω_* , la pulsation de sortie $\omega_* \pm \omega_0$ est dite pulsation intermédiaire, ω_{IF} , c'est-à-dire le signal d'entrée voulu mais abaissé en fréquence par l'oscillateur local. Les fréquences ω_* et ω_0 étant connues, la fréquence intermédiaire, ω_{IF} , est connue par avance aussi. Le calcul II-4.49 montre qu'un signal d'entrée et un oscillateur local donnés se décomposent en plusieurs composantes en fréquence. Le figure II-4.3 schématise ce petit calcul. On a porté en haut les fréquences d'entrée et leurs bandes passantes associées (pointillés) et en bas les fréquences de sorties.

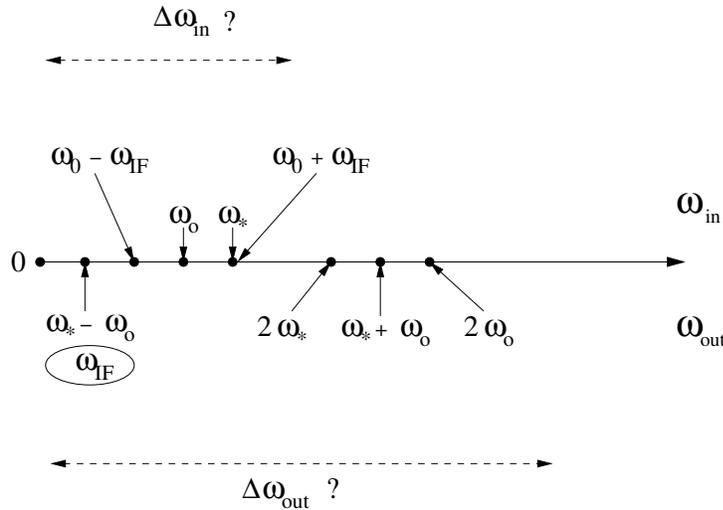


FIG. 4.3 – Entrées-sorties du mélangeur

Ce qu'il faut bien comprendre, c'est que la fréquence locale est fixée alors que la fréquence d'entrée est incluse dans une bande passante $\Delta\omega_{in}$. En général, seule une petite zone de la bande passante nous intéresse, $\delta\omega$, autour de la raie que l'on souhaite observer en $\omega_{in} = \omega_*$. Cette portion du spectre se retrouve en sortie autour de ω_{IF} . Cependant, le petit calcul précédent montre que d'autres fréquences d'entrées peuvent se retrouver en ω_{IF} à la sortie et se superposer au signal souhaité (voir aussi Warin (1990) pour une autre approche). C'est le cas pour les fréquences suivantes:

$$\omega_{in} = \omega_s \stackrel{def}{=} \omega_0 + \omega_{IF} \tag{4.50}$$

$$\omega_{in} = \omega_i \stackrel{def}{=} \omega_0 \pm \omega_{IF} \tag{4.51}$$

dites fréquences ou bandes “signal” et “image”. La bande “signal” porte son nom car on a $\omega_s = \omega_*$, et c’est donc normal qu’elle se trouve en ω_{IF} à la sortie. La bande “image” va créer un terme $\sin(\perp\omega_{IF} + \dots)$ dans la formule II-4.49 qui peut se transformer en une contribution négative $\perp\sin(\omega_{IF} + \dots)$ en ω_{IF} , moyennant un déphasage différent.

Le but de cette étape est donc de choisir la fonction de transfert du filtre et la fréquence ω_0 telles que

- la bande de fréquence en sortie ne contiennent pas les 3 autres fréquences issues du mélange de ω_* et ω_0 .
- ω_0 soit proche de ω_* pour éviter la multiplication d’harmoniques se superposant en ω_{IF} .
- la fréquence image soit filtrée, à moins que la superposition des deux fréquences en sortie puisse permettre l’observation de deux raies simultanément par exemple...
- baisser suffisamment la fréquence du signal pour pouvoir l’amplifier.

On dit travailler en SSB (Single Side Band) si l’on filtre la bande image et en DSB (Double Side Band) dans le cas contraire. La prédominance de chacune de ces bandes dans le signal de sortie est quantifiée par deux gains G_i et G_s dont la somme est normalisée à 1. Le mode SSB correspond donc en pratique à $G_i/G_s \ll 1$.

4.3.2 Incertitudes

Parmi les incertitudes liées au principe de détection, on en distingue ici deux principales.

Le pointage peut être une source d’erreur. Même si l’antenne est pointée avec une précision finie (comment faire autrement!), celle-ci est juste suffisante : ~ 3 d’après Wild (1995) pour le 30m de l’IRAM. La précision de pointage dépend des contraintes mécaniques sur la structure de télescope, de la force du vent, de la position de pointage,... La seule solution est donc de vérifier le pointage régulièrement en s’assurant que la ligne de visée utilisée est bien celle qui donne l’intensité maximum (si la source est non résolue) pour en tenir compte dans les intensités mesurées et leurs incertitudes.

Une autre source d’incertitude est le bruit parasite généré tout autour du signal observé. On peut faire baisser ces sources d’incertitude en utilisant des méthodes qui permettent de séparer les contributions respectives de la source et du bruit. C’est cette dernière source d’incertitude que nous allons détailler maintenant.

Sources de bruit

On en distingue principalement trois. Le fond du ciel, caractérisé par T_{atm} , et la cabine du télescope, caractérisée par T_{cab} , sont deux causes “naturelles”. Les récepteurs produisent la troisième source de bruit: le bruit électronique (bruit de lecture, bruit thermique, courant d’obscurité...) caractérisé par T_{rec} , mais incluent aussi le signal! La température “système”, T_{sys} est la somme de tous ces signaux.

Diminuer le bruit

On diminue le bruit tout d’abord en stabilisant les récepteurs:

A la *sortie* d’un récepteur, les coups enregistrés sont convertis en température résistive équivalente avec une relation de passage de la forme $T_x = G_{out}N_x$. D’après II-4.12, la puissance

détectée alors fournie en sortie du récepteur pointant sur une source est:

$$W_{sou} = k(T_{sou} + T_{sys})G_{out}\Delta\nu \quad (4.52)$$

Si G_{out} n'est pas stable, la puissance de sortie va être modifiée et on va l'interpréter comme une variation de T_{sou} telle que:

$$\frac{\Delta T}{T_{sys}} = \frac{\Delta G_{out}}{G_{out}} \quad (4.53)$$

La procédure de correction de cette effet consiste à pointer alternativement la source et une source de chaleur résistive de valeur T_s . Ainsi on a:

$$W_{sou} \perp W_s = k(T_{sou} \perp T_s)G_{out}\Delta\nu \quad (4.54)$$

$$et \quad \frac{\Delta T}{T_{sys}} = \frac{\Delta G_{out}}{G_{out}} \frac{T_{sou} \perp T_s}{T_{sys}} \quad (4.55)$$

Dans le meilleur des cas, si $T_{sou} \perp T_s = 0$, la variation de gain n'influe plus sur la mesure de T ! On dit alors que le récepteur est "équilibré".

Il y a d'autres façons, plus évidentes, de faire diminuer le bruit. Parmi elles:

- Augmenter le temps d'intégration τ (voir Rohlf's & Wilson (1996)) dans la bande passante $\Delta\nu$ car:

$$\frac{\Delta T}{T_{sys}} = \frac{1}{\sqrt{\tau}\Delta\nu} \quad (4.56)$$

- Refroidir les détecteurs pour minimiser leur émission propre.

Les bruits constitués de l'atmosphère et de la cabine ont pour effet d'augmenter l'émission de fond. Cela revient à vouloir détecter $\sim 0.1K$ de signal (dans un cas favorable) sur un signal de $273K$ environ. Ces sources doivent donc être soustraites avec la plus grande prudence pour ne rien pas modifier du signal de la source. C'est l'objet du paragraphe suivant.

4.3.3 Extraction du signal

La problématique de ce paragraphe est de s'affranchir de l'émission du fond de ciel. Deux types de méthodes sont principalement utilisées, l'une reposant sur une position de référence et l'autre sur un traitement du signal observé.

Position switching et Wobbler switching

Ces méthodes consistent à choisir une position de référence dans le ciel et à intégrer le signal en provenant pendant le même temps que celui provenant de la source. La différence des deux spectres obtenus élimine le bruit de fond de ciel. Le "position switching" dépointe le télescope sur la position de référence et le repointe sur la source. Le "Wobbler switching" utilise un miroir secondaire oscillant sans cesse entre deux positions. Dans un premier temps, il oscille entre la source et une position de référence décalée de $+x$ secondes d'arc, et dans un deuxième temps entre la source et une position de référence décalée de $\perp x$ secondes d'arc. Cette méthode permet de bien moyennner le bruit et donne donc des lignes de bases bien plates. Pour cette raison, et le fait qu'on évite un mouvement de dépointage, le "Wobbler switching"

est préféré au “Position switching” quand la source est moins étendue que l’amplitude de l’oscillation maximum du miroir secondaire (240’’ maximum au 30m de l’IRAM). Par contre, ces deux méthodes imposent de passer la moitié du temps d’intégration sur la position de référence, ce qui implique d’intégrer deux fois plus longtemps pour obtenir le même rapport signal sur bruit.

Frequency switching

Cette méthode consiste à observer deux fois la source pendant δt , dans deux bandes de sortie en fréquence $\Delta\omega_{out}$ et $\Delta\omega'_{out}$ correspondant à deux fréquences différentes de l’oscillateur local: ν_{OL} et ν'_{OL} . La procédure utilisée est alors de soustraire le signal des deux bandes en affectant le poids ± 1 à l’une et la poids $+1$ à l’autre pour annuler l’émission de fond de ciel. Le spectre obtenu contient donc deux fois la raie souhaitée, une fois en émission à la fréquence ν_{IF} et une autre fois en absorption à la fréquence ν'_{IF} . Si le décalage en fréquence de l’oscillateur local est choisi de telle manière que le spectre de référence en absorption soit dans la bande passante du récepteur, on peut renverser et sommer la raie en absorption avec celle en émission et éviter de perdre la moitié du temps d’intégration. C’est un des avantages de la méthode. De plus, elle ne nécessite pas de position de référence dans le ciel car le décalage en fréquence peut se dérouler suffisamment rapidement pour pouvoir éliminer les fluctuations atmosphériques. Un inconvénient par contre est que les lignes de bases sont dégradées (ce ne sont plus des droites) à cause par exemple de la réponse des récepteurs, différentes suivant la fréquence d’observation, ou des variations de bruits de fond de ciel à deux fréquences différentes...

4.3.4 Calibration

La calibration du signal, c’est-à-dire l’opération qui consiste à *faire correspondre une température à un nombre de coups détectés*, est effectuée en deux parties. Pour cela, il faudra premièrement estimer l’influence des récepteurs à l’aide de températures de référence et deuxièmement déterminer l’influence de la traversée de l’atmosphère à l’aide d’un modèle de celle-ci.

Sources de températures

On utilise deux sources de température, une froide et une chaude caractérisées par leurs températures de brillance T_+ et T_- . Cette méthode est dite méthode “Chopper wheel”. La détection se quantifie comme suit à partir des températures de brillance des sources si le récepteur est linéaire:

$$N_x = N_{off} + G_{rec}^{in}(T_x + T_{rec}) \quad (4.57)$$

où N_{off} est le courant d’obscurité, le nombre de coups détecté en l’absence de signal, et G_{rec}^{in} le gain à l’entrée du récepteur. Pour pouvoir quantifier le nombre de coups reçus *dûs à la source*, il faut estimer la température de bruit du récepteur, T_{rec} . En écrivant II-4.57 pour les deux sources de températures, on obtient:

$$T_{rec} = \frac{T_+(N_- \pm N_{off}) \pm T_-(N_+ \pm N_{off})}{N_- \pm N_+} \quad (4.58)$$

Alors que la température des sources est connue, le nombre de coups correspondant est altéré par une partie provenant du reste de la salle des récepteurs. Cette quantité parasite, qui crée un δT_{rec} , dépend du récepteur et de la fréquence observée; elle doit donc être évaluée. Pour cela, on utilise (Kramer 1995) deux sources de températures externes supplémentaires, une froide (pièce absorbante dans de l'Azote liquide) et une chaude (pièce absorbante à température ambiante) dont les températures sont celles de l'azote et de la pièce et qui permettent d'évaluer δT_{rec} .

Température de calibration

On souhaite déterminer une température de calibration telle que:

$$T_a^* = T_{cal} \frac{N_{sou} \perp N_{atm}}{N_+ \perp N_{atm}} \quad (4.59)$$

Ainsi, les températures sont mesurées à partir du niveau "zéro" constitué par l'émission de l'atmosphère (voir les méthodes d'extraction du signal détaillées ci-dessus) et calibrées par rapport à la source chaude. Le principe est de mesurer la température de calibration de "temps en temps" en utilisant II-4.59 en sens inverse, puis de s'en servir pour obtenir T_a^* le reste du temps. En omettant le courant d'obscurité, en utilisant le signal des deux bandes et les températures radiatives effectives (voir II-4.8) , II-4.57 donne:

$$N_+ = G_{in}[G_s J_{T_+}(\nu_s), + G_i J_{T_+}(\nu_i) + T_{rec}] \quad (4.60)$$

$$N_{atm} = G_{in}\{G_s[F_{eff} J_{T_{atm}}(\nu_s) + (1 \perp F_{eff}) J_{T_{cab}}(\nu_s)] + \quad (4.61)$$

$$G_i[F_{eff} J_{T_{atm}}(\nu_i) + (1 \perp F_{eff}) J_{T_{cab}}(\nu_i)] + T_{rec}\} \quad (4.62)$$

$$N_{sou} = G_{in}[G_s J_{T_{sou}}(\nu_s) + G_i J_{T_{sou}}(\nu_i) + T_{rec}] \quad (4.63)$$

où le signal de l'atmosphère a été décomposé en une partie réellement atmosphérique provenant de l'avant et une partie venant de la cabine, en provenance de l'arrière. Des mesures atmosphériques sont faites pour permettre de déterminer l'opérateur d'influence de l'atmosphère:

$$T_{atm} = F_{eff} T_{atm} + (1 \perp F_{eff}) T_{cab} \quad (4.64)$$

$$T_{atm} = G_i T_{atm}(\nu_i) + G_s T_{atm}(\nu_s) \quad (4.65)$$

Les températures de brillance de l'atmosphère dans les deux bandes sont ajustées avec un modèle d'atmosphère utilisant les gains des bandes image et signal, la température de brillance du ciel, la pression et la température locales mesurées sur place et dont le paramètre libre est le pourcentage de vapeur d'eau. Une fois cette quantité ajustée, les opacités au zénith dans chacune des bandes, $\tau_{i/s}$, peuvent être calculées et l'opérateur de modification atmosphérique prend la forme:

$$\mathcal{A}_{i/s} = e^{\perp \tau_{i/s} A} \quad (4.66)$$

où A est la masse d'air traversée suivant la hauteur h de la source:

$$A(h) = \frac{1}{\sin(h)} \quad (4.67)$$

A partir des équations II-4.60, de la définition II-4.38, on suppose que $J_T(\nu_i) = J_T(\nu_s)$ pour tout T , que le récepteur est en mode SSB et que l'on a $J_{T_{atm}} = J_{T_{atm}}(1 \perp \mathcal{A}) + J_{T_{bg}} \mathcal{A}$ (voir le chapitre II-5) pour obtenir la température de calibration (voir Kramer (1995) et Ulich & Haas (1976)):

$$T_{cal} = \frac{N_+ \perp N_{atm}}{G_{in} G_s F_{eff} \mathcal{A}_s} \quad (4.68)$$

Chapitre 5

Transfert radiatif dans les enveloppes circumstellaires

Sommaire

5.1	Caractéristiques du transfert radiatif d'énergie	173
5.2	Le couplage matière-rayonnement	177
5.3	Quels choix faire?	180
5.4	Les choix effectués	182
5.5	Implémentation du code de transfert radiatif.	190

L'objectif de ce chapitre est de faire le lien entre les régions de l'étoiles modélisées par le code d'évolution stellaire, qui se situe à une profondeur optique paramétrée à $\tau = 0.005$, et les régions où est émis le rayonnement qui va être détecté par les radiotélescopes, après la traversée de l'enveloppe circumstellaire. Il s'agit donc de transfert radiatif dans un milieu se situant à des températures inférieures à $3000K$ environ et composé par conséquent d'atomes, de molécules et de poussières. Les observations menées lors de ce travail de thèse en radio ont demandé, pour pouvoir être interprétées, l'utilisation et le développement d'un code de transfert radiatif initialement écrit par Robert Lucas (IRAM). Nous allons donc rappeler l'équation de transfert radiatif, puis la façon dont elle a été implémentée dans ce code. En particulier, nous serons amenés à préciser la nature des interactions matière-rayonnement prises en compte et la géométrie de l'intégration.

5.1 Caractéristiques du transfert radiatif d'énergie

Un retour sur la méthode générale d'établissement de l'équation de transfert est nécessaire à plusieurs titres. Il permet notamment, par comparaison avec le cas idéal, de savoir quelles approximations faire dans le cas qui nous intéresse, en toute connaissance de cause. On connaît ainsi mieux les forces et faiblesses du modèle utilisé. On en profitera aussi pour faire des rapprochements avec la physique utilisée dans les chapitre II-1 et II-4.

5.1.1 Paramètres de la propagation

Description du faisceau

On s'intéresse à la propagation de l'énergie radiative contenue dans un faisceau schématisé sur la figure II-5.1. Le faisceau est émis à partir de la surface $d\vec{S}_E$ du milieu émetteur E, localisée en \vec{r}_E . Il est reçu au point \vec{r}_R du milieu récepteur R sur une surface $d\vec{S}_R$. Le milieu de propagation est quelconque, mais on ne considèrera pas dans ce chapitre les états de polarisation de la lumière.

Etablissons les caractéristiques minimum nécessaires à décrire ce faisceau. L'énergie dE

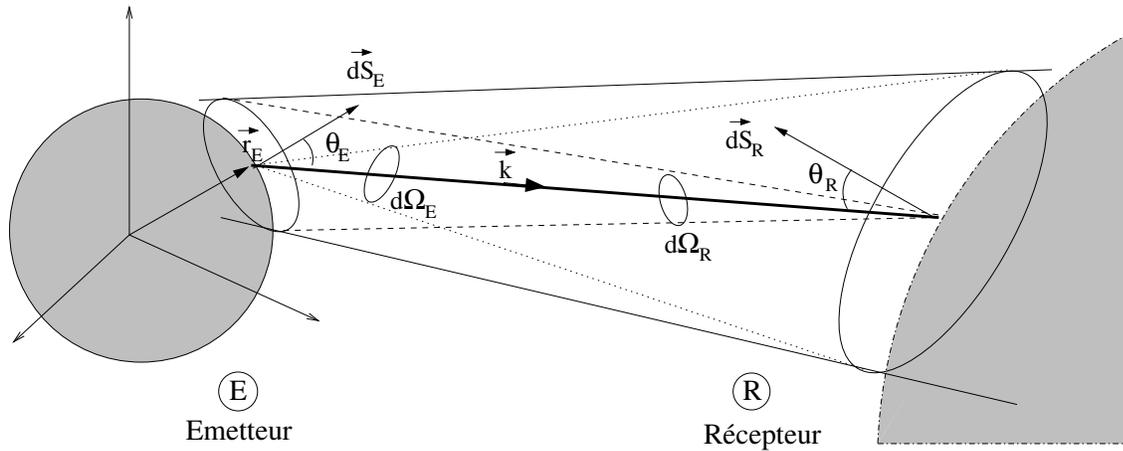


FIG. 5.1 – Propagation de l'énergie d'un faisceau lumineux émis en E jusqu'en R.

est émise pendant un temps dt , avec un vecteur d'onde moyen \vec{k} , dirigé vers le récepteur, tel que :

$$\vec{k} \stackrel{def}{=} \frac{\omega}{c} \vec{u}_k \quad (5.1)$$

$$\text{avec } \vec{u}_k \stackrel{def}{=} \frac{\Delta \vec{r}}{\|\Delta \vec{r}\|} \quad (5.2)$$

$$\text{et } \Delta \vec{r} \stackrel{def}{=} \vec{r}_R \perp \vec{r}_E \quad (5.3)$$

D'après la définition du vecteur d'onde, sa variation $d\vec{k}$ correspond à un angle solide $d\Omega$ et à une bande de fréquence $d\nu$ autour de la fréquence $\nu = \frac{c|\vec{k}|}{2\pi}$.

Caractéristique géométrique.

Pour concrétiser la situation, l'émetteur et le récepteur ont été matérialisés par des objets physiques grisés sur la figure II-5.1. On peut très bien aussi s'intéresser à la propagation d'un faisceau dans le vide ou un milieu matériel sans frontières. On doit alors discuter du rôle joué par les surfaces infinitésimales $d\vec{S}_E$ et $d\vec{S}_R$. En effet, elles n'ont de définition possible que si elles sont sou tendues par une frontière physique, et dans ce cas, la donnée de \vec{r} est équivalente à la donnée de $d\vec{S}$ moyennant la connaissance de la forme de l'objet. Par exemple, pour un plan horizontal, $d\vec{S}(\vec{r}) = dS \vec{u}_z$ et pour une sphère, $d\vec{S}(\vec{r}) = dS \vec{u}_r$. Si, d'une part, la définition de ces surfaces élémentaires est impossible à l'intérieur des milieux émetteur et récepteur et que, d'autre part, à la frontière extérieure de ces milieux, la connaissance du

vecteur position et de la forme de l'objet émetteur ou récepteur permet de déterminer ces surfaces élémentaires, alors quel est le rôle, l'intérêt de ces surfaces pour le transfert radiatif

En fait, les surfaces sont importantes pour délimiter la proportion de flux sortant de E qui va rentrer en R. C'est en quelque sorte une mesure du "nombre de rayons" qui vont relier E et R. On comprend que plus le nombre de rayons est important, plus l'énergie transportée est grande. Mais ce n'est pas tout à fait la surface qui est importante dans ce but, ce sont deux quantités dérivées que nous allons définir maintenant:

(1) La surface "effective", c'est-à-dire tenant compte de l'orientation de la surface par rapport à R. Si la surface est orthogonale à \vec{k} , le flux aura du mal à être non nul! On définit la surface effective par:

$$dS_E^{eff} \stackrel{def}{=} d\vec{S}_E \cdot \vec{u}_k \quad (5.4)$$

(2) La surface "apparente" traduit le fait qu'une surface donnée soit loin ou pas. Plus elle est loin et plus il sera difficile "de viser" pour que les rayons passent entre les deux points E et R. Ce renseignement est contenu dans l'angle solide:

$$d\Omega_E \stackrel{def}{=} \frac{dS_R^{eff}}{\Delta r^2} = \frac{d\vec{S}_R \cdot \vec{u}_k}{\Delta r} \quad (5.5)$$

Retenons que ce ne sont pas les surfaces qui sont les quantités indispensables pour définir la géométrie du faisceau. L'information qu'elles peuvent transporter est contenue de façon équivalente par l'angle solide et la surface effective.

Les remarques quant à l'information transportée par les quantités "surface apparente" et "angle solide" amène à définir l'*étendue géométrique* du faisceau:

$$dG_{ER} \stackrel{def}{=} d\Omega_E dS_E^{eff} \quad (5.6)$$

Cette grandeur, exprimée en $sr \cdot m^2$ dans le système international (S.I.), permet de quantifier le "nombre de rayons" dans un faisceau: elle *contient donc toute l'information géométrique de la propagation*. Une autre propriété importante de l'étendue géométrique est que la quantité:

$$n_\nu^2 dG = const \quad (5.7)$$

est constante au cours de la propagation (voir par exemple Terrien & Desvignes (1972) pour une démonstration), où n_ν est l'indice de réfraction du milieu. En conséquence, dans un milieu homogène, l'étendue géométrique est constante lors de la propagation. De plus, le principe de retour inverse de la lumière est alors vérifié, c'est-à-dire que la propagation est supposée indépendante du sens de propagation, et elle vérifie donc $dG_{ER} = dG_{RE}$.

En définissant l'abscisse $d\vec{s} \stackrel{def}{=} ds\vec{u}_k$ pour repérer l'avancement d'un point dans un faisceau, on peut donc écrire que *les trois quantités* $\{dt, d\vec{k}, d\vec{s}\}$ *définissent le faisceau* car elles sont indépendantes et si l'une d'entre elles change, l'énergie du faisceau changera en conséquence.

5.1.2 Energétique du faisceau

Intensité spécifique

Compte tenu de la définition du paragraphe précédent, on peut réécrire la dépendance générale de l'énergie du faisceau car la donnée de \vec{k} et \vec{s} est équivalente à celle de ν et G :

$$dE \propto dt d\nu dG \quad (5.8)$$

Ce qui conduit à définir une quantité appelée "intensité Spécifique", de dimension $[E] \cdot L^{+2}$ et exprimée en $W \cdot Hz^{+1} \cdot sr^{+1} \cdot m^{+2}$ dans le système international (S.I.):

$$I_\nu(t, \vec{k}, \vec{s}) \stackrel{def}{=} \frac{dE}{dt d\nu dG} \quad (5.9)$$

On suppose simplement que le faisceau infinitésimal choisi est tel que de nombreux rayons s'y trouvent car on souhaite définir I_ν comme une grandeur macroscopique. On a donc besoin de $dt \gg \nu^{-1}$ et de $dS \gg \lambda^2$. L'intensité spécifique pour unité le $W \cdot m^{+2} \cdot Hz^{+1} \cdot sr^{+1}$.

L'intensité spécifique permet de retrouver toutes les grandeurs photométriques utiles, et en particulier:

$$\text{Le flux, } \vec{F}_\nu(t, \nu, \vec{u}_k, \vec{r}_E) \stackrel{def}{=} \frac{dE}{dS_E dt d\nu} \vec{u}_k \text{ en } W m^{+2} Hz^{+1} \quad (5.10)$$

$$d'où \vec{F}_\nu = \vec{u}_k \int I_\nu \vec{u}_E \cdot \vec{u}_k d\Omega_E \quad (5.11)$$

$$\text{La densité d'énergie, } u_\nu(t, \nu, \vec{r}_E) \stackrel{def}{=} \frac{dE}{dV_E d\nu} \text{ en } \quad (5.12)$$

$$d'où u_\nu = \frac{1}{c_\nu} \int I_\nu d\Omega_E \quad (5.13)$$

$$\text{L'intensité moyenne, } J_\nu(t, \nu, \vec{r}_E) \stackrel{def}{=} \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_\nu d\Omega_E \quad (5.14)$$

où l'on a écrit le volume balayé par le faisceau en dt :

$$dV_E = dS_{ef} c_\nu dt \quad (5.15)$$

et où c_ν est la vitesse des photons dans le milieu considéré, liée à l'indice de réfraction du milieu par la relation:

$$c_\nu n_\nu = c \quad (5.16)$$

Conservation de l'énergie

L'intensité spécifique est liée à l'énergie. On peut donc s'attendre à ce qu'elle vérifie une équation de conservation du type II-1.2. En partant de la définition de u , II-5.12, en introduisant successivement II-5.15 et II-5.4, on obtient une expression qu'il est facile de relier à II-5.10 pour obtenir une relation générale:

$$\vec{F}_\nu = \mu u_\nu \vec{c}_\nu \text{ avec } \mu \stackrel{def}{=} \vec{u}_E \cdot \vec{u}_k \text{ et } \vec{c}_\nu \stackrel{def}{=} c_\nu \vec{u}_k \quad (5.17)$$

Dans cette équation, \vec{u}_E est le vecteur normal à la surface émettrice. En comparant avec II-1.2, on se rend compte que la quantité générale $\rho[x]$ définie dans l'équation II-1.2 s'identifie

à u , l'énergie volumique, et que \vec{F} est alors le courant de densité d'énergie associé à u , ce qui est confirmé par son écriture du type “quantité” x “vitesse” (voir II-5.17). De plus, pour des photons, il paraît normal que ce ne soit pas la quantité massique x qui soit définie, mais la quantité volumique ρx , puisqu'ils ont une masse nulle! Ces observations permettent de poser:

$$\frac{du_\nu}{dt} + \text{div}(\vec{F}_\nu) = \sigma_\nu \quad (5.18)$$

où σ_ν est le terme source d'énergie. En dérivant cette équation par rapport à Ω , en utilisant les relations II-5.10, II-5.12 et en développant certains termes, on obtient:

$$\frac{dI_\nu}{dt} + \text{div}(\mu \vec{c}_\nu I_\nu) = c_\nu S_\nu + \frac{I_\nu}{c_\nu} \frac{dc_\nu}{dt} + \frac{\vec{c}_\nu}{c_\nu} I_\nu \mu \vec{\nabla} c_\nu \quad (5.19)$$

S_ν est le terme source d'énergie; son contenu physique sera décrit dans le paragraphe suivant. Il est de dimension $[I_\nu] \cdot L^{\pm 1}$ et s'exprime en $J \cdot m^{\pm 3} \cdot sr^{\pm 1}$ en S.I. Dans cette équation, on a regroupé dans le membre de droite toutes les dérivées de c_ν car elles s'annulent si le milieu est homogène, comme c'est le cas la plupart du temps. Ainsi, ces termes sont assimilés à des termes sources supplémentaires de l'équation de conservation de I_ν . L'équation II-5.19 peut s'obtenir rigoureusement dans l'espace des phases des photons en utilisant une équation de Boltzmann (Collins 1989). La cohérence entre les différentes dérivations de l'équation de conservation de l'énergie électromagnétique est totale lorsqu'on s'aperçoit (Rutly 1992) que les quantités u_ν et \vec{F}_ν sont les moyennes macroscopiques des quantités microscopiques ϵ et $\vec{\Sigma}$ définies en G.12 et G.13, ces dernières vérifiant elles aussi une équation de conservation, II-G.11, découlant des équations de Maxwell. C'est encore l'équation II-5.18 qui, sous une forme simplifiée, décrit le transport de l'énergie radiative dans le chapitre II-1.

5.2 Le couplage matière-rayonnement

Dans tous milieux, l'énergie peut être émise ou absorbée, réfléchi, réfractée, diffractée ou dispersée, dissipée ou encore diffusée. Cela se traduit par des variations dans l'énergie disponible au cours du temps, dans son spectre, ou dans la géométrie de la propagation. Toute cette information se retrouve dans le terme source de l'équation II-5.19. Examinons certaines contributions possibles (Rutly (1992) et Cox & Giuli (1984)):

5.2.1 Emission pure

On distingue deux contributions en émission dans le terme source:

- l'émission de photons par des sources dites primaires, c'est-à-dire qui ne dépendent pas du champ radiatif ambiant I_ν . On écrit cette contribution,

$$S_{\text{epp}}(t, \vec{r}, \vec{k}) = \rho \epsilon_\nu \quad (5.20)$$

L'indice “epp” rappelant qu'il s'agit du terme source d'“émissivité pure primaire”. ϵ_ν , l'émissivité primaire massique, a la dimension $[I_\nu] M^{\pm 1} L^2$ et s'exprime en $J \cdot kg^{\pm 1} \cdot sr^{\pm 1}$ en S.I.

- l'émission de photons par des sources dites secondaires, c'est-à-dire qui dépendent du champ radiatif ambiant, I_ν . Elles tirent leur énergie de l'absorption d'énergie du champ électromagnétique. On exprime cette contribution :

$$S_{eps}(t, \vec{r}, \vec{k}) = \rho j_\nu \quad (5.21)$$

où j_ν , l'émissivité secondaire massique, a la dimension $[I_\nu]M^{\perp 1}L^2$ et s'exprime en $J \cdot kg^{\perp 1} \cdot sr^{\perp 1}$ en S.I. L'indice "eps" rappelle qu'il s'agit du terme source d'"émissivité pure secondaire".

La physique sous-jacente à l'émission des photons comprend :

- L'*émission thermique*, fonction de la température uniquement et qui suppose donc l'équilibre matière-rayonnement atteint (voir section II-4.1, équation II-4.1).
- La *désexcitation* entre deux niveaux quantiques liés de la matière ("bound-bound"). Elle est fonction des populations des niveaux et des probabilités de transition entre eux . Si elle est spontanée, c'est un processus primaire, si elle est induite, c'est un processus secondaire.
- L'*association radiative* (recombinaison électronique, formation moléculaire...) qui dépend des abondances des particules qui se regroupent et des taux de collisions. Ce sont des transitions entre états quantiques libres et états quantiques liés ("free-bound") .
- Le *rayonnement Brehmstrahlung*, ou rayonnement de freinage, fonction de l'énergie et des abondances des particules chargées ("free-free").

5.2.2 Absorption pure

L'absorption de photons par la matière est fonction du nombre de photons disponibles. On l'écrit par conséquent :

$$S_{ap}(t, \vec{r}, \vec{k}) = \perp \rho \kappa_\nu I_\nu \quad (5.22)$$

L'indice "ap" rappelle qu'il s'agit du terme source d'"absorption pure". κ_ν est l'opacité ($M^{\perp 1}L^2$). On utilise parfois le coefficient d'absorption $\alpha_\nu = \rho \kappa_\nu$ ($L^{\perp 1}$). Les processus physiques s'y rattachant sont les symétriques des précédents :

- L'*excitation radiative*
- La *séparation radiative* (ionisation, dissociation...)
- Le *Brehmstrahlung inverse* (accélération).

5.2.3 La diffusion

On définit le processus de diffusion radiative comme un phénomène de collision mettant en jeu un photon, dans lequel, soit il cède une fraction non nulle de son énergie en direction des autres particules (sans être absorbé), soit il gagne toute ou partie de l'énergie des autres particules. Le gain ou la perte se fait en modifiant ν ou en modifiant \vec{u}_k . Les valeurs initiales de fréquence et de direction des photons sont donc "redistribuées" vers d'autres valeurs. A chaque "transition de diffusion" $(\nu, \Omega) \rightarrow (\nu', \Omega')$, on associe une *probabilité* notée $R_{t,\vec{r}}(\nu, \Omega; \nu', \Omega')$ appelée fonction de redistribution. Elle vérifie évidemment la relation :

$$\int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \int_0^\infty R_{t,\vec{r}}(\nu, \Omega; \nu', \Omega') d\Omega' d\nu' d\Omega d\nu = 1 \quad (5.23)$$

car on est sûr, en intégrant sur les domaines de définition des variables, que les deux couples de valeurs s’y trouveront. Elle s’exprime en $H z^{\perp 2} \cdot sr^{\perp 2}$ dans le système d’unité S.I. Notons que la fonction de redistribution peut être très complexe car elle contient toute la physique des collisions, parfois simples (2 corps), parfois multiples, impliquant des objets aussi différents que des électrons (diffusion Thomson) ou des molécules (diffusion Rayleigh) etc.

En utilisant la fonction de redistribution, l’énergie perdue par diffusion pour les photons caractérisés par le couple (ν, Ω) est donc le terme:

$$S_{ad}(t, \vec{r}, \nu, \Omega) = \rho \sigma_{\nu} I_{\nu}(t, \vec{r}, \nu, \Omega) \phi_{\perp} \quad (5.24)$$

$$\text{avec } \phi_{\perp} = \int_{4\pi} \int_0^{\infty} R_{t, \vec{r}}(\nu, \Omega; \nu', \Omega') d\Omega' d\nu' \quad (5.25)$$

où l’on intègre sur tous les “canaux de sortie” possibles. La probabilité ϕ_{\perp} s’exprime en $H z^{\perp 1} \cdot sr^{\perp 1}$ dans le système S.I. et le coefficient de diffusion σ_{ν} a la dimension $L \cdot T^{\perp 1} M^{\perp 1}$ et s’exprime en $m^2 \cdot H z \cdot sr \cdot kg^{\perp 1}$. L’indice “ad” rappelle qu’il s’agit du terme source d’“absorption par diffusion”.

De même, l’énergie gagnée par diffusion pour les photons caractérisés par le couple (ν, Ω) s’écrit:

$$S_{ed}(t, \vec{r}, \nu, \Omega) = \rho \sigma_{\nu} \phi_{+} \quad (5.26)$$

$$\text{avec } \phi_{+} = \int_{4\pi} \int_0^{\infty} R_{t, \vec{r}}(\nu', \Omega'; \nu, \Omega) I_{\nu}(t, \vec{r}, \nu', \Omega') d\Omega' d\nu' \quad (5.27)$$

où ϕ_{+} est de dimension $[I_{\nu}] \cdot T$ et s’exprime en $W \cdot H z^{\perp 2} \cdot sr^{\perp 2} \cdot m^{\perp 2}$ dans le système S.I. L’indice “ed” rappelle qu’il s’agit du terme source d’“émission par diffusion”.

5.2.4 Réfraction

Pour aborder le cas des milieux non homogènes, considérons un faisceau qui, le long de son parcours, passe d’une couche d’épaisseur Δr et d’indice n_{ν} à une couche *de même taille* Δr et d’indice n'_{ν} . Lors du passage d’un milieu à un autre, les différentes fréquences vont être déviées de façon différente. On isole ici le phénomène de réfraction des autres interactions présentées ci-dessus, et en particulier, supposons que l’énergie contenue dans le faisceau est conservée: il peut y avoir dispersion mais pas dissipation: $dE' = dE$.

La définition II-5.9 permet d’écrire:

$$I'_{\nu} \Delta t' \Delta \nu' \Delta G' = I_{\nu} \Delta t \Delta \nu \Delta G \quad (5.28)$$

A partir de $c_{\nu} \propto \frac{\Delta r}{\Delta t}$, de la relation $\lambda \nu = c_{\nu}$, de la propriété de l’étendue géométrique II-5.7 et de l’équation II-5.16, on peut écrire:

$$n_{\nu}^2 \Delta G = \text{const} \quad (5.29)$$

$$\frac{n_{\nu}}{\Delta t} = \text{const} \quad (5.30)$$

$$c_{\nu} \Delta t = \text{const} \quad (5.31)$$

$$n_{\nu} \Delta \nu = \text{const} \quad (5.32)$$

En utilisant ces relations sur II-5.28, on obtient:

$$\frac{I_{\nu}}{n_{\nu}^2} = \text{const} \quad (5.33)$$

La prise en compte de la réfraction peut donc être faite de deux façons différentes.

(1) Soit on incorpore des termes de source S_{er} et S_{ar} qui utiliseront une fonction de redistribution tout comme la diffusion.

(2) Soit on garde les mêmes termes sources et on remplace I_ν par $\frac{I_\nu}{n_\nu^2}$. Dans ce cas là, l'indice de réfraction doit évidemment être calculé de façon cohérente avec la physique du terme source : c'est-à-dire que si la diffusion par les poussières est prise en compte dans le terme source, on doit, a priori, calculer l'indice avec l'influence de ces poussières etc.

5.3 Quels choix faire?

5.3.1 Un problème complexe !

Rappelons finalement le résultat général pour le terme source mais en se plaçant tout de suite en milieu homogène:

$$\frac{dI_\nu}{dt} + \text{div}(\mu \vec{c} I_\nu) = c(S_{epp} + S_{eps} + S_{ed} + S_{er} \perp S_{ap} \perp S_{ad} \perp S_{ar}) \quad (5.34)$$

Remarquons que, d'après la physique sous jacente au terme source (voir paragraphe II-5.2), cette décomposition nécessite le calcul des populations des états d'énergie \vec{k} , calcul directement couplé à la matière présente (interactions matière-rayonnement). Cependant, ce calcul dépend aussi des interactions matière-matière (collisions). En effets les interactions matière-rayonnement qui font évoluer le champ électromagnétique sont fonctions de la population des niveaux quantiques de la matière, qui sont eux-mêmes peuplés ou dépeuplés aussi par interaction avec la matière. Ce couplage oblige théoriquement à calculer les populations de tous les niveaux quantiques de toute la matière présente dans le milieu, en tenant compte des processus radiatifs (matière-rayonnement) et des processus collisionnels (matière-matière). Comme le lieu et l'instant de l'interaction sont importants dans l'équation II-5.34, cela nécessiterait aussi par exemple la résolution des équations de transport des abondances et de la quantité de mouvement, de la dynamique des particules, la connaissance de l'équation d'état de la matière (Rutily 1992)... Notons enfin que la gravité pourrait aussi être considérée comme une interaction à prendre en compte dans le terme source, dans le cadre de la relativité générale. Tout un programme! On comprend donc qu'il soit nécessaire de faire des hypothèses simplificatrices! Les hypothèses recensées pour simplifier cette équation se rangent en deux classes.

5.3.2 Simplifications physiques

On peut tout d'abord négliger ou découpler certaines classes de processus physiques. Par exemple:

- On identifie le terme d'émission pure primaire, ϵ_ν , à l'émission thermique, ce qui n'est vrai qu'à l'ETL. L'émission induite, j_ν , vérifie alors (Rohlf & Wilson 1996) :

$$j_\nu = \kappa_\nu B_\nu(T) \quad (5.35)$$

Cette équation rend compte du bilan détaillé, c'est-à-dire de l'égalité entre les gains et les pertes d'énergie. ϵ_ν et j_ν sont alors indépendants de \vec{u}_k .

- On fait des simplifications sur la fonction de redistribution en ne considérant que certains types de collisions. Par exemple (Collins 1989):

(1) Diffusion *cohérente*: le photon est dévié sans changer d'énergie.

$$R_{t,\vec{r}}(\nu, \Omega; \nu', \Omega') = R_{t,\vec{r},\nu}(\Omega; \Omega') \delta(\nu \perp \nu') \quad (5.36)$$

(2) Diffusion *isotrope*: le photon est redistribué de façon inconnue en fréquence mais équiprobablement en direction. La fonction de redistribution ne doit donc pas dépendre de l'angle solide. Quelque soit la direction de provenance ou la direction d'émergence du photon, il sera redistribué en fréquence de la même façon. On moyenne donc R sur les directions:

$$\begin{aligned} R_{t,\vec{r}}(\nu, \Omega; \nu', \Omega') &= R_{t,\vec{r}}(\nu; \nu') \\ &= \int_{4\pi} \int_{4\pi} R_{t,\vec{r}}(\nu, \Omega; \nu', \Omega') d\Omega d\Omega' \end{aligned} \quad (5.37)$$

(3) Diffusion *incohérente*. On devrait plutôt écrire diffusion “non corrélée en fréquence”: les photons ont perdu la mémoire de la fréquence à laquelle ils étaient avant de diffuser. Toutes les valeurs de ν sont donc équiprobables et alors la condition de normalisation II-5.23 ne peut pas être satisfaite sur tout le domaine de définition de \vec{k} . La probabilité d'obtenir une fréquence donnée serait nulle! On se restreint donc à un domaine fini en ν que l'on suppose suffisamment grand pour ne pas en sortir pendant les collisions (sinon, à nouveau, R n'est plus normalisée) et l'on moyenne R sur ce domaine. On a alors:

$$\begin{aligned} R_{t,\vec{r}}(\nu, \Omega; \nu', \Omega') &= R_{t,\vec{r}}(\Omega; \Omega') \\ &= \int_{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu'} R_{t,\vec{r}}(\nu, \Omega; \nu', \Omega') d\nu d\nu' \end{aligned} \quad (5.38)$$

(4) Diffusion *multiple*. Elle est traitée en supposant que le photon initial de caractéristiques (ν_0, Ω_0) peut passer n fois par un état intermédiaire (ν_i, Ω_i) avant d'arriver dans l'état final $(\nu_{n+1}, \Omega_{n+1})$. On réalise donc des produits de fonctions de redistribution et on intègre sur tous ces états intermédiaires possibles. Pour $n > 1$, on a:

$$R_{t,\vec{r}}^n(\nu_0, \Omega_0; \nu_{n+1}, \Omega_{n+1}) = \int \cdots \int \prod_{i=0}^n R_{t,\vec{r}}(\nu_i, \Omega_i; \nu_{i+1}, \Omega_{i+1}) d\Omega_2 \cdots d\Omega_n d\nu_2 \cdots d\nu_n \quad (5.39)$$

5.3.3 Simplifications “mathématiques”

On peut aussi restreindre le domaine de validité de l'équation en jouant sur les conditions temporelles ou spatiales de l'intégration. Exemples:

- on cherche un état stationnaire pour I_ν . Toutes les quantités utilisées sont alors indépendantes du temps et en particulier $\frac{dI_\nu}{dt} = 0$. Les résultats obtenus ne seront alors valables que lorsque le temps caractéristique d'atteinte de cet état sera écoulé.
- on souhaite pouvoir simplifier le terme de divergence dans l'équation II-5.34. Celui-ci s'écrit:

$$\text{div}(\mu I_\nu \vec{c}) = \mu I_\nu \text{div}(\vec{c}) + \mu \vec{c} \cdot \vec{\nabla} I_\nu + I_\nu \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \mu \quad (5.40)$$

C'est possible de plusieurs façons. Voici deux exemples:

- (1) En intégrant l'équation de transfert (donc à \vec{k} fixé) dans un repère où \vec{u}_k soit vecteur de base. Ainsi les dérivées spatiales de ce vecteur s'annulent.
- (2) En alignant le vecteur \vec{k} sur un des axes de symétrie des sources car, s'il en existe, les quantités dépendant des sources (I_ν) possèdent les mêmes symétries (Sivardière 1994). Ainsi, on peut restreindre la dimension de l'espace dans lequel on travaille et les opérateurs de dérivation se simplifient.

5.4 Les choix effectués

Le problème pratique qu'il faut résoudre est celui du transfert de rayonnement aux longueurs d'onde radio-millimétriques d'une raie de rotation émise par une distribution quelconque de molécules autour d'une étoile. Cette section va donc consister à choisir petit à petit les simplifications judicieuses dans ce cas. Ces dernières concerneront la complexité du terme source utilisé, l'écriture de l'équation de transfert et le découplage des différents domaines de la physique dans l'enveloppe... tout ceci pour arriver à dresser l'organigramme du code de transfert qui est utilisé.

5.4.1 Hypothèses physiques pour le terme source

Composantes

Dans un premier temps, la poussière qui est présente dans l'enveloppe est négligée. Différents arguments permettent de justifier ce choix:

- Les coefficients d'absorption et de diffusion d'un mélange de grains de silicates et de carbone ont été évalués par Wolfire & Cassinelli (1986). Il apparaît que le coefficient d'absorption chute de deux ordres de grandeur entre $100\mu m$ et $1000\mu m$ alors qu'il est déjà trois ordres de grandeur en dessous de sa valeur à $0.1\mu m$. Le coefficient de diffusion a une chute encore plus vertigineuse puisqu'il est trois ordres de grandeur en dessous de κ_ν à seulement $10\mu m$ et que la différence s'accroît avec λ .
- Des rapports "masse gazeuse sur masse de poussière" ont été évalués par Olofsson *et al.* (1993b) et Groenewegen *et al.* (1998). Ils se situent entre 200 et 700. Ce deuxième argument n'est valable que pour négliger l'influence des poussières sur la *dynamique* de l'enveloppe. Cette remarque est nécessaire car nous verrons (voir section II-5.4.4) que la dynamique doit, a priori, être couplée à l'équation de transfert.

Nous supposons ensuite que les seules espèces moléculaires présentes dans l'enveloppe sont l'espèce observée, notée X , et H_2 , qui nous servira de référence pour les abondances:

$$f_X = \frac{n_X}{n_{H_2}} \quad (5.41)$$

Ceci est justifié par le fait que H_2 est supposé majoritaire dans l'enveloppe. Les espèces atomiques ne sont pas prises en compte. En effet, elles n'ont pas d'influence importante compte tenu des températures au sein des enveloppes circumstellaires. De plus, elles n'émettent pas dans les longueurs d'ondes qui nous intéressent.

Interactions matière-rayonnement

Les différentes hypothèses faites sont les suivantes :

- (1) On ne prend pas en compte la diffusion. Il faudrait pour cela avoir des particules dont la taille serait du même ordre de grandeur que les longueurs d’ondes utilisées ($\sim qq \text{ mm}$), ce qui n’est pas le cas.
- (2) On modélise le rayonnement cosmologique de “fond de ciel” par un spectre de corps noir à $2.7K$.
- (3) Nous utilisons des valeurs de flux infrarouge mesurées sous forme de table pour interpoler la contribution de rayonnement de l’étoile de l’AGB supposée au centre de l’enveloppe. Les mesures couvrent le domaine $[1\mu m, 100\mu m]$.
- (4) Les molécules observées absorbent le rayonnement mais pas H_2 . En effet, son moment dipolaire est nul à cause de la symétrie de la molécule.
- (5) On traitera uniquement les degrés de liberté de vibration et de rotation des molécules car les transitions électroniques et celles entre états translationnels sont bien sûr en dehors du domaine radio. De plus, d’après les hamiltoniens de rotation/vibration des molécules données par Gordy & Cook (1970), les transitions millimétriques correspondent aux transitions rotationnelles entre niveaux vibrationnels peu excités, les niveaux d’énergie étant supposés non perturbés (voir chapitre II-4). On prévoit donc de pouvoir calculer les niveaux d’énergie de N_{rot} niveaux rotationnels sur N_{vib} niveaux vibrationnels.
- (6) L’énergie produite localement est exprimée en terme de température d’excitation. Cela ne comporte pas a priori d’approximations et figure dans ce paragraphe pour bien insister sur ce point. On ne suppose pas l’équilibre thermodynamique, même local, entre les degrés de liberté de rotation et les degrés de liberté de translations. On ne fera que supposer plus tard (voir paragraphe II-5.5.2) l’atteinte de l’équilibre de chacune de ces composantes a priori *indépendamment*.

5.4.2 Ecriture retenue pour l’équation de transfert

Dans cette section, on se limitera le plus possible à des approximations mathématiques pour éviter maintenant de restreindre la portée physique de l’équation de transfert. On recherchera donc un *état stationnaire* et, pour écrire une équation simplifiée utilisable dans une *géométrie quelconque*, on choisit d’aligner le repère utilisé sur le vecteur \vec{k} .

Formulation intermédiaire

La divergence devient ainsi une dérivée “le long de la direction de propagation du photon” et la distance parcourue devient l’abscisse s . On obtient, dans un milieu où l’on prend $d\vec{S} \perp \vec{k}$ et en utilisant les définitions II-5.20, II-5.21, II-5.22, II-5.24, II-5.26:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = \rho\epsilon_\nu + \rho\sigma_\nu\phi_+ \perp \rho\kappa_\nu I_\nu \perp \rho\sigma_\nu I_\nu\phi_\perp \quad (5.42)$$

L’émission induite, j_ν , a été groupée, comme c’est l’usage, avec l’opacité du milieu. En définissant la profondeur optique (sans dimension) suivant l’axe de propagation:

$$d\tau_\nu \stackrel{def}{=} \perp \rho k_\nu ds \quad avec \quad k_\nu \stackrel{def}{=} \kappa_\nu + \sigma_\nu\phi_\perp \quad (5.43)$$

l'équation II-5.42 devient:

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = S_\nu \perp I_\nu \quad \text{avec} \quad S_\nu = \frac{\epsilon_\nu + \sigma_\nu \phi_+}{k_\nu} \quad (5.44)$$

Solution de l'équation

En utilisant une méthode de variation de la constante, on peut obtenir la solution de l'équation II-5.44 (Mihalas 1970). On a:

$$I_\nu(\vec{r}_R \perp \vec{r}_E) = \int_{\tau_\nu(E)}^{\tau_\nu(R)} S_\nu(\tau_\nu) e^{\perp[\tau_\nu(R) \perp \tau_\nu]} d\tau_\nu + I_\nu(\vec{r}_E) e^{\perp[\tau_\nu(R) \perp \tau_\nu(E)]} \quad (5.45)$$

La figure II-5.2 permet de visualiser la signification des différents termes de cette solution. L'intensité en R est la somme de l'intensité arrivant en E, atténuée par la traversée complète du milieu, et des émissions de tous les points du milieu, atténuées lors de leur parcours pour en sortir.

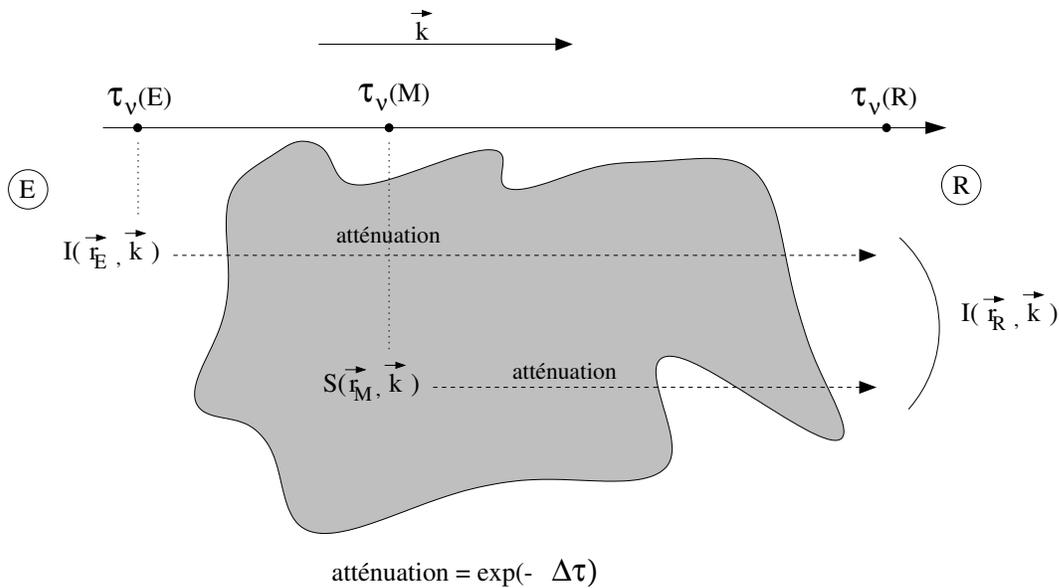


FIG. 5.2 – Signification physique de la solution à l'équation de transfert

Un cas particulièrement utilisé est celui où l'on intègre dans un corps noir, c'est-à-dire avec $S_\nu = B_\nu$, en prenant l'origine des profondeurs optique à l'entrée du corps ($\tau_\nu(E) = 0$):

$$I_\nu(\vec{r}_R \perp \vec{r}_E) = B_\nu(T) + (I_\nu(\vec{r}_E) \perp B_\nu(T)) e^{\perp\tau_\nu(E)} \quad (5.46)$$

A partir de cette équation, on peut définir $\tau_\nu^{lim} = \ln\left(\frac{I_\nu(\vec{r}_E)}{B_\nu(T)} \perp 1\right)$. Dès que $\tau_\nu \gg \tau_\nu^{lim}$, le rayonnement émergent est un spectre de corps noir; il est alors indépendant de τ_ν .

5.4.3 Formulation spécifique en radio

Pour plus de commodité, on va maintenant réécrire la solution de l'équation de transfert en utilisant la définition de la température de brillance II-4.6.

$$T_{mb}(\nu) = \int_{\tau_\nu(E)}^{\tau_\nu(R)} T_\nu(\tau_\nu) e^{\perp[\tau_\nu(R) \perp \tau_\nu]} d\tau(\vec{r}) + T_\nu(\tau_\nu(E)) e^{\perp[\tau_\nu(R) \perp \tau_\nu(E)]} \quad (5.47)$$

On identifie la température de brillance $T_\nu(\tau_\nu)$ associée au terme source à la température d'excitation locale dans l'enveloppe. D'autre part, pour isoler le rayonnement de la source de celui du fond de ciel (voir chapitre II-4), le télescope fait deux observations successives. Une sur la source, T_ν^+ et l'autre sur le fond de ciel, T_ν^\perp . Sans prendre en compte l'influence du télescope, qui ne changera pas entre les deux positions, et celle de l'atmosphère, qui est soustraite au moment des observations, on a :

$$T_{mb}(\nu) = T_\nu^+ \perp T_\nu^\perp = \int_{\tau_\nu(E)}^{\tau_\nu(R)} T_{ex}(\tau_\nu) e^{\perp[\tau_\nu(R) \perp \tau_\nu]} d\tau(\vec{r}) + T_\nu(\tau_\nu(E)) (e^{\perp[\tau_\nu(R) \perp \tau_\nu(E)]} \perp 1) \quad (5.48)$$

Sur la ligne de visée choisie, si l'on intègre en direction de l'observateur, alors la température au point origine, E , est la température de brillance du corps noir cosmologique, T_{bg} . De plus, on suppose que l'enveloppe est optiquement épaisse à ce rayonnement, c'est-à-dire que pour tout ν , on a $\perp(\tau_\nu(\vec{r}_R) \perp \tau_\nu(\vec{r}_E)) \ll 1$. On peut alors faire un développement limité de l'exponentielle et faire entrer la température en facteur de cette exponentielle dans l'intégrale. On obtient finalement :

$$T_\nu(*) = T_{mb}(\nu) = \int_{\tau_\nu(E)}^{\tau_\nu(R)} (T_{ex} \perp T_{bg})(\vec{r}) e^{\perp[\tau_\nu(R) \perp \tau_\nu(\vec{r})]} d\tau(\vec{r}) \quad (5.49)$$

5.4.4 Découplage

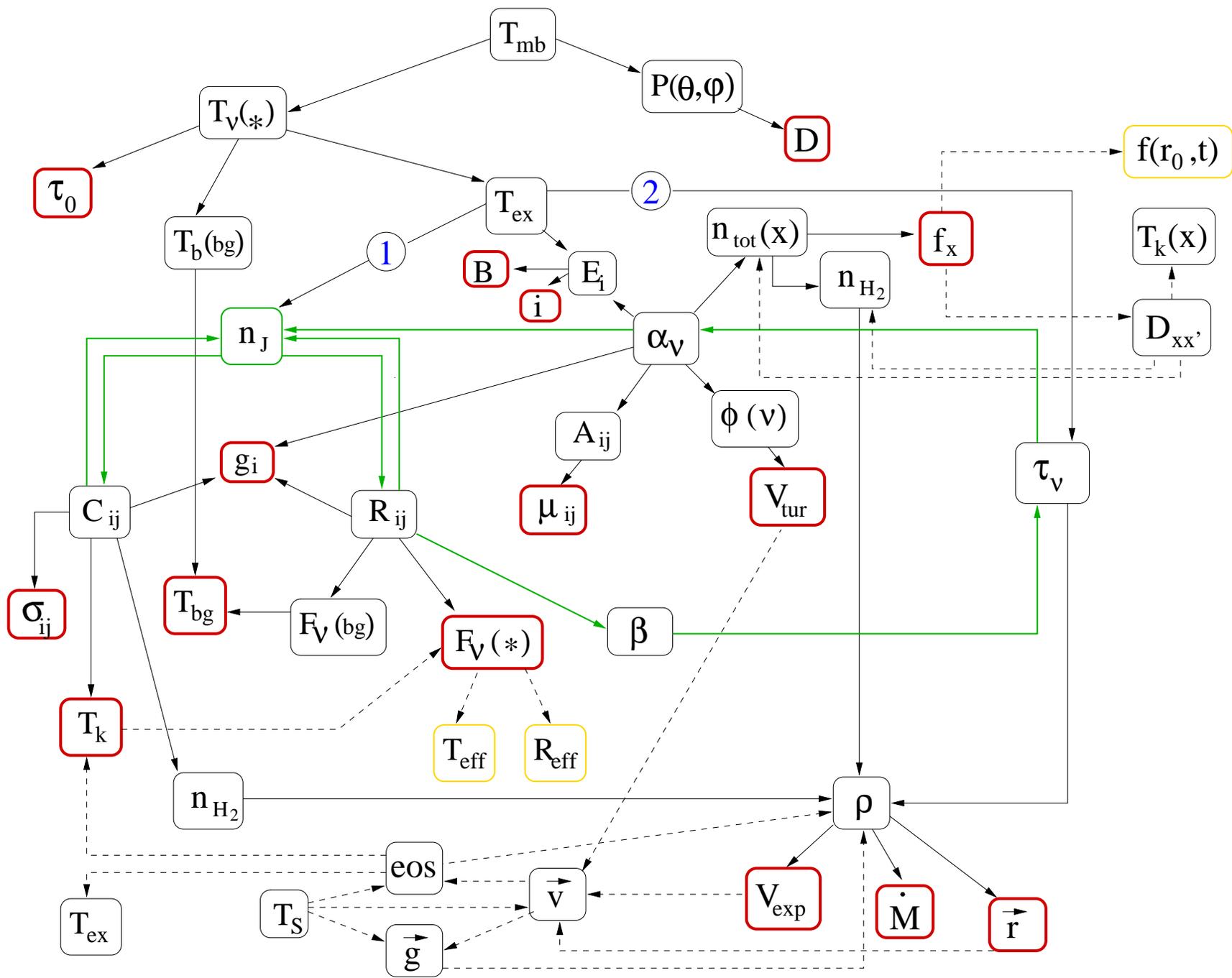
En vue d'obtenir un organigramme pour calculer les quantités entrant dans l'équation II-5.49, nous sommes amenés à analyser les relations entre les différentes quantités physiques requises. Nous devons savoir quelles sont celles qu'il faut calculer en premier, puis celles qui en découlent et ainsi de suite... Cette analyse mène petit à petit à la figure II-5.3 ! Cette section est donc destinée à explorer petit à petit cette figure et les relations y figurant, et à discuter les approximations physiques faites lorsque l'on résout l'équation de transfert seule, isolée du reste de la physique se déroulant dans l'enveloppe.

Généralité

Les hypothèses du au couplage matière-rayonnement étant faites, la figure montre les relations entre les différentes grandeurs restant à calculer. L'impression de complexité qui s'en dégage reflète bien la *réalité*. Et rappelons que tous les processus liés à la poussière ne figurent pas sur ce schéma car nous avons choisi de le négliger ! Tout d'abord, une flèche de A vers B doit s'interpréter comme : “ A a besoin de B pour être calculé”. Ainsi, en partant du haut, l'obtention de la température “main beam” de la source demande de connaître le profil de puissance de l'antenne (voir chapitre II-4) et la température de brillance de la source. Mis à part les choix d'origine, le calcul de $T_\nu(*)$ par la formule II-5.49 demande de connaître la température de brillance du fond de ciel, $T_b(bg)$, la profondeur optique au début de l'intégration, $\tau_0 = \tau_\nu(\vec{r}_E)$ et la température de brillance de l'étoile. Le tableau II-5.1 donne un glossaire dans l'ordre alphabétique des notations utilisées dans la figure II-5.3.

Une flèche en pointillés indique que la relation de dépendance a été négligée dans le programme. Un cadre rouge pour une grandeur signifie qu'elle est une grandeur d'entrée.

FIG. 5.3 – L'imbrication des paramètres physiques dans l'enveloppe



A_{ij}	Coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée
B	Constante rotationnelle de la molécule X , voir II-4.24
C_{ij}	Taux de transition collisionnel $i \rightarrow j$
D	Diamètre de l'antenne réceptrice
$D_{xx'}$	Taux des réactions chimiques mettant les molécules x et x' en jeu
E_i	Energies
"eos"	Donne pression et énergie interne en fonction de ρ, T et la composition
$F_\nu(bg)$	Flux du rayonnement cosmologique
$F_\nu(*)$	Flux de l'étoile centrale
f_x	Abondance de la molécule x par rapport à H_2
$f_{r_0,t}$	Abondance de la molécule x à la frontière r_0 et au temps t
g_i	Poids statistiques
\vec{g}	Champ de gravité
i	Nombres quantiques des niveaux rotationnels considérés
\dot{M}	Perte de masse
n_{H_2}	Abondances volumique de l'Hydrogène moléculaire
n_J	Abondances volumiques des différents niveaux de rotation
n_{tot}	Abondances volumiques de la molécule observée X
$P(\theta, \phi)$	Profil de puissance de l'antenne réceptrice
\vec{r}	coordonnée d'un point de l'enveloppe
R_{eff}	Rayon effectif de l'étoile centrale
R_{ij}	Taux de transition radiative
$T_b(bg)$	Température de brillance du rayonnement cosmologique
T_{bg}	Température du fond de ciel cosmologique (égal à $T_b(bg)$ car les conditions II-4.7 sont vérifiées)
T_{eff}	Température effective de l'étoile centrale
$T_{ex}(\nu_{ij})$	Température d'excitation de la molécule X pour la transition $i \rightarrow j$
$T_k(x)$	Température cinétique de la molécule X
T_{mb}	Température de brillance mesurée par l'antenne réceptrice
T_S	Température de brillance du terme "source" (posée égale à T_{ex})
$T_\nu(*)$	Température de brillance provenant de la source
X	La molécule étudiée
v_{exp}	Vitesse d'expansion de l'enveloppe
\vec{v}	Vitesse macroscopique totale d'un point de l'enveloppe
v_{tur}	Vitesse turbulente
α_ν	Coefficient d'absorption volumique, $\alpha_\nu = \rho\kappa_\nu$
β	Probabilité d'échappement
μ_{ij}	Moment dipolaire électrique pour la transition $i \rightarrow j$
ρ	Masse volumique
σ_{ij}	Taux de collisions pour la transition $i \rightarrow j$
τ_0	Profondeur optique à l'origine de l'intégration, sur la ligne de visée.
τ_ν	Profondeur optique.
ϕ_ν	Profil de raie

TAB. 5.1 – Glossaire de la figure II-5.3

Enfin, les flèches vertes signalent un processus itératif. Les numéros autour de T_{ex} l'ordre dans lequel calculer les grandeurs dont elle dépend. Une boîte jaune indique que ces valeurs sont des conditions aux limites à l'intérieur de l'enveloppe. On n'a pas détaillé ici les conditions à l'extérieur.

Toutes ces relations de dépendance vont par la suite être explicitée dans la section II-5.5. Nous voulons juste nous attarder ici sur le découplage des différentes parties de la physique de l'enveloppe.

Chimie

En haut à droite de la figure, on peut observer des lignes pointillées partant de f , la fraction numérique de molécule observée X , relativement à H_2 . En effet, au cours du temps et en fonction du rayon, la fraction f peut changer à cause notamment des processus chimiques se déroulant entre X et le reste des molécules de l'enveloppe (même si on les a négligés par ailleurs) ou entre X et les photons (dissociations par exemple). Pour mettre en SSuvre ces calculs, il faudrait idéalement introduire les abondances au centre de l'enveloppe de façon cohérente avec la nucléosynthèse de l'étoile au cours du temps et la faire évoluer en suivant la température du milieu avec des taux de réactions chimiques, d'ionisation... par des formules du type de II-1.18. Ce serait donc éventuellement la levée de l'hypothèse de l'équilibre entre chaque espèce, puisque chaque composante peut être décrite par une distribution de vitesse différente. On voit apparaître un processus non linéaire entre les abondances, qui dépendent des taux (donc de ρ et T), et les taux, qui dépendent de ρ et T_k .

Masse

A propos de ρ , la figure II-5.3 nous indique par quel chemin elle est calculée. Elle dépend de \vec{v}_{exp} , \vec{r} et \dot{M} , de manière à respecter l'équation de conservation de la masse (version macroscopique, voir chapitre II-1, équation II-1.3):

$$\frac{dM}{dt} + \oint_S \rho \vec{v}_{exp} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (5.50)$$

Les travaux visant à produire de la perte de masse dans les enveloppes étant très récents (voir par exemple Andersen *et al.* (1999) ou Hoëfner (1999)), il est d'usage de la paramétrer, ce qui est cohérent avec le traitement utilisé dans le code d'évolution stellaire. Mais pour vérifier l'équation II-5.50, on a encore besoin de connaître la vitesse d'expansion et la géométrie de l'enveloppe (\vec{r}). Comment les obtenir? C'est l'objet du paragraphe suivant.

Thermodynamique

En bas de la figure, les flèches pointillées représentent le couplage des grandeurs mécaniques au travers d'une équation du mouvement. C'est cette équation qui permet d'obtenir la position et la vitesse des différents éléments de fluide dans l'enveloppe. La résolution de l'équation du mouvement demanderait de calculer la gravité du milieu pour avoir les forces volumiques à prendre en compte et l'équation d'état pour obtenir la pression. Notons qu'à priori, s'il n'y a pas ETL, chaque composante du milieu a une équation d'état distincte représentée par un couple (ρ, T) différents: les photons en interaction avec les niveaux rotationnels

Grandeur	Désignation	Traitement
Niveaux d'énergie		
N_{rot}, N_{vib}	Nombre de niveaux rotationnels et vibrationnels	Paramétrés
E_i	Energies des niveaux	Calculées
g_i	Poids statistiques des niveaux	Calculés
σ_{ij}	Taux de collisions	Données interpolées
μ	Moment dipolaire	Donné
Structure de l'enveloppe		
v_{tur}	Vitesse turbulente	Paramétrée
v_{exp}	Vitesse d'expansion	Paramétrée
\vec{r}	Géométrie de l'enveloppe	Fixée, sphérique
r_{min}	Rayon interne de l'enveloppe	Paramétré
r_{max}	Rayon externe de l'enveloppe	Paramétré
\dot{M}	Perte de masse	Paramétrée
Chimie		
f_x	Abondances relative à H_2	Paramétré
T_k	Température cinétique	Paramétrée
Termes fixes		
$F_\nu(*)$	Flux de l'étoile centrale	Donnée interpolée
R_{eff}	Rayon de l'étoile centrale	Paramétré
d_*	Distance de l'étoile	Paramétrée (donnée)
T_{bg}	Température du fond de ciel cosmologique	Donnée
Convolution par l'antenne		
$P(\theta, \phi)$	Profil du lobe de l'antenne	Calculé
D	Diamètre de l'antenne	Paramétré

TAB. 5.2 – Paramètres de calcul pour le code de transfert radiatif

des molécules d'une part et les molécules en interaction avec elles mêmes au travers des collisions. De cette manière, il ne manquerait plus qu'une équation de conservation de l'énergie pour calculer l'énergie volumique locale avec une équation du type $E = E_k + E_{pot} + U(X)$, où ces termes représentent respectivement l'énergie volumique totale, cinétique, potentielle et interne. La "boucle est bouclée" car cette énergie locale constitue une contrainte pour le terme source de l'équation de transfert, noté T_S (que nous avons supposé égal à T_{ex}). Cette partie "dynamique" a été approximée en supposant que la gravité était négligeable et qu'un état stationnaire était atteint dans lequel pression gazeuse (représentée par T_k) et pression de radiation (représentée par T_{ex} et T_{eff}) s'équilibrent.

5.4.5 Organigramme - paramétrage

Résumons en disant que les équations du mouvement, de conservation de l'énergie et d'évolution des abondances n'ont pas été résolues de manière cohérente avec l'équation de conservation de la masse et du transfert radiatif. Les paramètres du programme sont regroupés dans le tableau II-5.2.

Dans le programme de transfert radiatif, tout paramètre peut être décrit par une loi affine ou une loi de puissance dont le ou les points fixés sont quelconques. L'organigramme résultant de la figure II-5.3 simplifiée est donné dans la figure II-5.4.

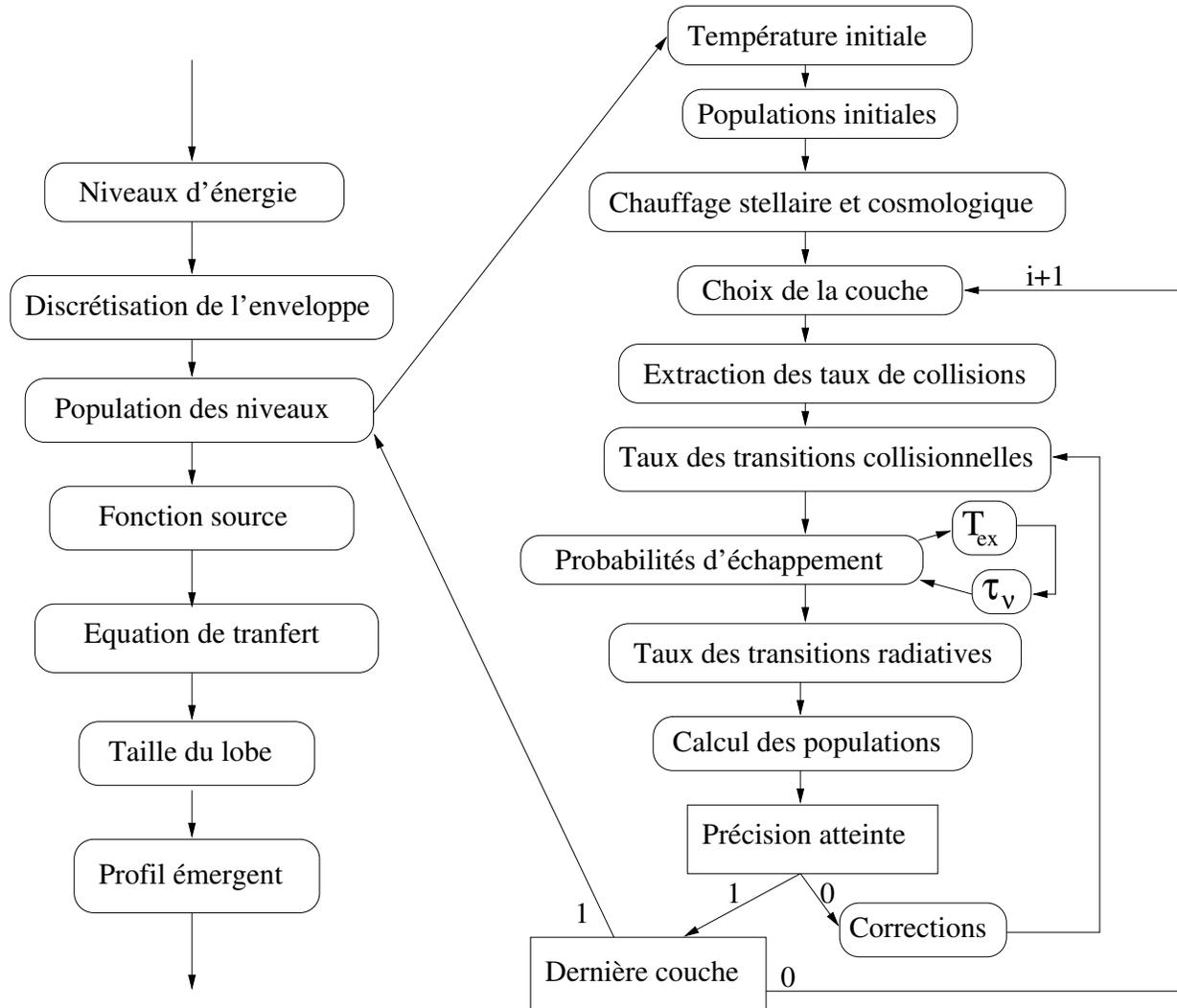


FIG. 5.4 – Organigramme du programme de transfert radiatif

5.5 Implémentation du code de transfert radiatif

A partir de l'équation qui a été obtenue sous sa forme définitive, nous allons décrire l'organisation et les différentes "rubriques" du programme de transfert. Celles qui ont été développées durant ma thèse sont incluses. Elles comprennent une révision du calcul des taux de collisions, un calcul de la profondeur optique moyenne dans la raie et une amélioration du calcul numérique des abondances quand le milieu est dense.

5.5.1 Structure de l'enveloppe

La figure II-5.5 schématise l'enveloppe circumstellaire. On peut faire plusieurs remarques:

- Cadran inférieur gauche (caractéristiques mécaniques): l'enveloppe choisie est maintenant considérée sphérique. Cela facilite grandement la recherche des lignes d'égal

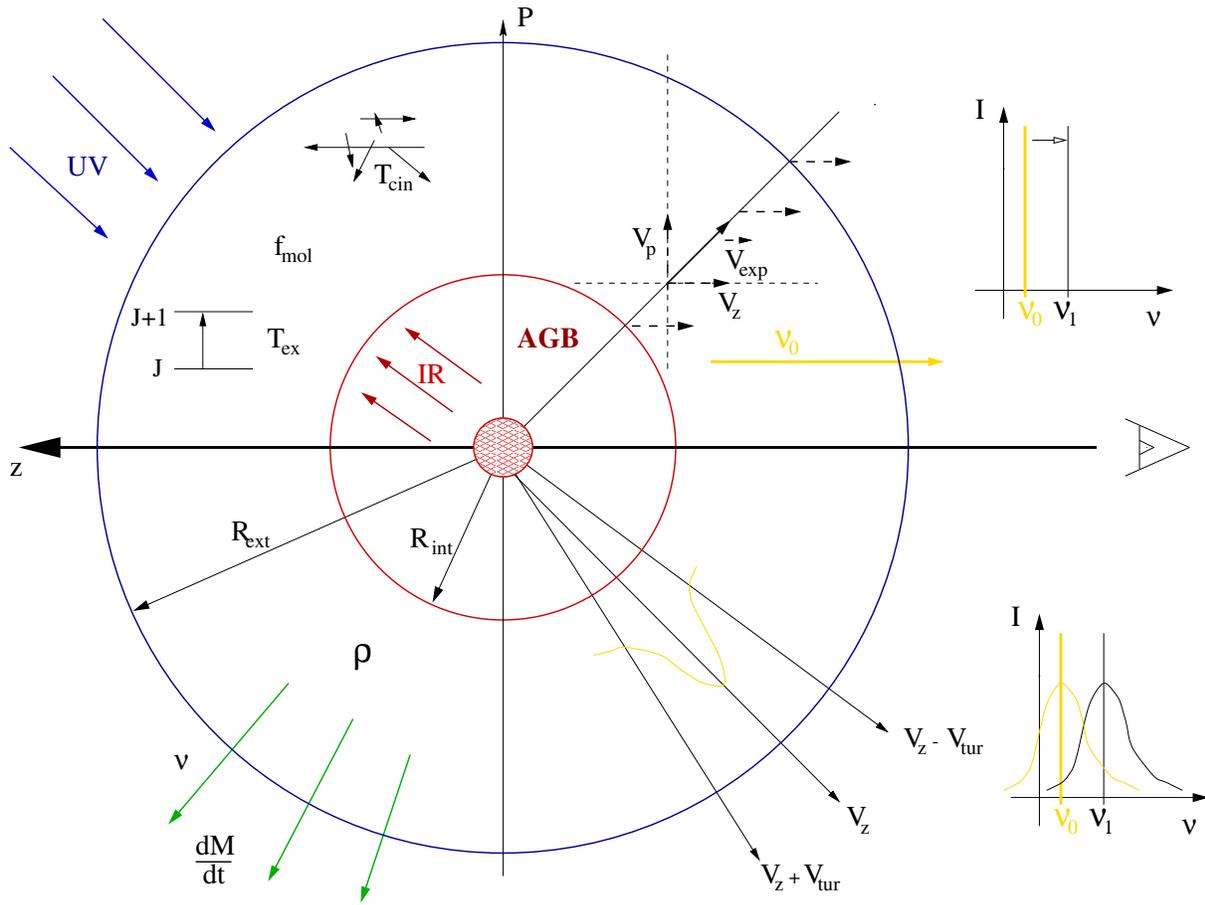


FIG. 5.5 – Caractéristiques de l’enveloppe modélisée.

vitesse projetées, v_p . La symétrie de l’enveloppe permet d’exprimer le problème à une seule dimension (r). Les caractéristiques de cette enveloppe sont le profil de ρ , de \dot{M} , un rayon extérieur, R_{ext} , et un rayon intérieur, R_{int} .

- Cadrant supérieur gauche (caractéristiques chimiques): le rayon externe de cette enveloppe est en fait le rayon à partir duquel la molécule observée soit n’émet plus, soit a disparu parce qu’elle a été dissociée par les UV provenant du milieu interstellaire. Ce rayon dépend donc de la molécule considéré et doit être en cohérence avec les modèles réalisés de chimie des enveloppes (voir Mamon *et al.* (1988) pour CO par exemple). Chaque molécule est donnée par un profil d’abondance relativement à H_2 : f_{mol} . Les populations des niveaux rotationnels sont quantifiées par la donnée du profil de la température d’excitation, T_{ex} . Un profil de température cinétique caractérise par ailleurs l’agitation thermique dans l’enveloppe.
- Cadrant supérieur droit (mouvements dans l’enveloppe): le repère utilisé pour décrire l’enveloppe est muni d’un axe (coordonnée z) le long de la ligne de visée, orienté de l’observateur vers l’étoile et d’un axe perpendiculaire (coordonnée p). Les coordonnées vérifient donc: $r^2 = p^2 + z^2$. On utilisera aussi le paramètre $\mu = \sqrt{1 - (\frac{p}{r})^2} = \pm \frac{z}{r} = \cos(\theta)$. On rappelle dans le quadrant supérieur droit que, compte tenu de l’expansion de l’enveloppe, une raie subit un décalage Doppler-Fizeau:

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{\vec{v} \cdot \vec{c}}{c^2} \quad (5.51)$$

C'est ce qui est schématisé en dehors du cadran, dans le graphe $I(\nu)$.

- L'enveloppe a un mouvement d'expansion. Le gaz est donc animé d'une vitesse $v_{exp}(\vec{r})$. Dans le cadre de ce mouvement macroscopique de matière, il est raisonnable de supposer que la dispersion des vitesses à un endroit donné de l'étoile est négligeable: $\sigma_v(\vec{r}) \sim 0$. Les profils de raies dans le référentiel du photon, ϕ_p et dans celui de l'observateur, ϕ_o sont donc:

$$\phi_p(\nu) = \delta(\nu \perp \nu_0) \quad (5.52)$$

$$\phi_o(\nu) = \delta[\nu \perp (\nu_0 + \Delta\nu)] \quad (5.53)$$

Où $\Delta\nu$ est donné par II-5.51. Comme on suppose que la vitesse d'expansion ne dépend que de r (géométrie sphérique), on a alors:

$$\Delta\nu(v_z) = \frac{v_z \nu_0}{c} = \perp \frac{v_r \mu \nu_0}{c} \quad (5.54)$$

On peut réécrire II-5.52 pour un profil de raie général:

$$\phi_o(\nu_c \perp \nu) = \phi_p(\nu_0 \perp \nu) \quad \text{avec} \quad \nu_c = \nu_0 + \Delta\nu \quad (5.55)$$

Si l'on choisit une vitesse d'expansion constante, les lignes d'égales vitesses projetée, v_p , sont les rayons de l'enveloppe. Chaque rayon de l'étoile contribue donc à la raie mais à des fréquences observées différentes. Les photons émis par les bords de la surface apparente de l'enveloppe proviennent d'un milieu ayant une vitesse projetée nulle et contribuent par conséquent au centre de la raie à la même fréquence d'émission que dans le référentiel des photons. Vers le centre de la surface apparente de l'enveloppe, la vitesse projetée est maximum. Les photons contribuent donc en bord de raie. Dans ce cas, pour obtenir le profil de raie dans le référentiel de l'observateur, il faut sommer tous les profils ϕ_o de II-5.55 pour toutes les vitesses projetées possibles dans l'enveloppe, c'est-à-dire de $v_z = 0$ sur les bords, à v_z maximum ($v_z = v_{exp}$) au centre et renormaliser:

$$\phi_{tot} = \frac{\int_0^{v_{exp}} \phi_o(v_z) dv_z}{\int_0^{v_{exp}} dv} \quad (5.56)$$

- Cadrant inférieur droit (vitesse locale turbulente v_{tur}). On peut raisonnablement introduire une vitesse locale turbulente dans l'enveloppe car son principal effet, l'asymétrie dans les raies, est incontestablement observé. Les molécules X ont toujours un mouvement d'ensemble du à l'enveloppe mais que c'est un mouvement moyen. De petites fluctuations existent autour à cause de l'agitation thermique ou d'un processus de turbulence. Le profil de raie dans le référentiel du photon ϕ_p est inchangé mais dans celui de l'enveloppe en expansion, les raies ont une certaine largeur décrite par ϕ_e . Si les molécules sont à l'équilibre cinétique, la distribution des vitesses dans le référentiel des photons est maxwellienne, centrée en $v = 0$ en vitesse ou $\nu = \nu_0$ en fréquence et d'écart type σ_{tur} relié à la largeur à mi-hauteur de la maxwellienne, $\langle v^2 \rangle$. Le profil de raie associé à cette distribution de vitesses dans le référentiel de l'enveloppe est gaussien

(Léna 1996):

$$\phi_\varepsilon(\nu) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\Delta\nu_{tur}^2}{2\sigma_{tur}^2}} \quad (5.57)$$

$$\sigma_{tur} = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{\langle v_{tur}^2 \rangle}{2}} \quad (5.58)$$

$$\Delta\nu_{tur} \stackrel{def}{=} \nu \perp \nu_0 = \frac{v_{tur}\nu_0}{c} \quad (5.59)$$

- Dans le référentiel de l'observateur, les lignes d'égalité vitesses radiales sont *en moyenne* les mêmes que sans vitesse turbulente. En fait, elles sont élargies pour constituer des zones dans lesquelles la probabilité d'avoir $v(\vec{r}) = v_z$ diminue exponentiellement (comme la valeur de v_{tur}). La distribution maxwellienne des vitesses est centrée en $v = v_z$ en vitesse ou $\nu = \nu_z = \nu_0 + \frac{v_z\nu_0}{c}$ en fréquence, mais toujours avec le même écart type: σ_{tur} . Le profil observé pour une *zone* de vitesse radiale constante n'est plus seulement piqué et décalé, il est élargi et décalé:

$$\phi_o(\nu) = \frac{1}{\sigma_{tur}\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\Delta\nu \perp v_z \frac{\nu_0}{c}}{2\sigma_{tur}^2}} \quad (5.60)$$

où l'on a $\Delta\nu = \nu \perp \nu_0 = \frac{\nu_0}{c}(v_z + v_{tur})$.

Pour avoir le profil de raie final, on choisit la forme de la distribution de v_{tur} en prenant:

$$\langle v_{tur}^2 \rangle = v_{tur}^2 \quad \text{car } \langle v_{tur} \rangle = 0 \quad (5.61)$$

En combinant II-5.61, II-5.60 et II-5.58, on obtient finalement le profil de raie utilisé dans ce programme:

$$\phi(\nu) = \frac{c}{\nu v_{tur}} e^{-\frac{(v \perp v_z)^2}{v_{tur}^2}} \quad (5.62)$$

Le profil de raie a pour effet d'étaler l'intensité spécifique émise en fréquence. On définit l'intensité sur la raie par:

$$\langle I \rangle = \int_0^\infty I_\nu \phi(\nu) d\nu \quad \text{où} \quad \int_0^\infty \phi(\nu) d\nu = 1 \quad (5.63)$$

Un autre effet du champ de vitesse va être de changer les probabilités d'absorption d'une fréquence donnée à un endroit donné. Cet effet s'apparente ainsi à celui d'un processus de diffusion et Mihalas (1970) le prend en compte dans la fonction source de l'équation du transfert radiatif. Ce même auteur montre alors que les profils d'absorption et d'émission sont les mêmes. Nous avons choisi d'introduire l'effet du champ de vitesse dans le calcul de la profondeur optique en utilisant le profil de raie.

5.5.2 Calcul des populations

Dans toute la suite de ce chapitre on utilisera comme indice les lettres "ul" pour les transitions d'un niveau haut (Upper level) de nombre quantique de rotation $J + 1$ à un niveau bas (Lower level) de nombre quantique J .

Bilan d'un niveau

L'évolution des abondances des niveaux rotationnels est régie par le comptage des peuplements et dépeuplements causés par les photons (cas radiatif) ou le gaz (H_2 , cas collisionnel).

Cas radiatif

Pour les transitions radiatives, on va utiliser les coefficients d'Einstein pour l'absorption, B_{lu} , l'émission induite, A_{ul} et l'émission spontanée, B_{ul} . A_{ul} ne dépend que des caractéristiques intrinsèques de la molécule. Son expression est (Lang 1999):

$$A_{ul} = \frac{64\pi^4}{3hc^3} \nu_{ul}^3 |\mu_{ul}^2| \quad (5.64)$$

$$\text{avec } |\mu_{ul}^2| = \mu^2 \frac{J+1}{2J+3} \quad (5.65)$$

$$\text{et } |\mu_{lu}^2| = \mu^2 \frac{J+1}{2J+1} \quad (5.66)$$

où l'indice "ul" indique une transition $u \rightarrow l$, u représentant le niveau le plus haut ("up") et l , le niveau le plus bas ("low"). Il n'est pas étonnant que ce coefficient dépende du moment dipolaire électrique μ de la molécule puisque c'est cette dernière quantité qui, si elle n'est pas nulle, domine les interactions avec le champ électromagnétique (comme dans le cas classique) et "met en mouvement" la molécule (la fait changer d'état quantique de rotation). De façon similaire, dans le cas de l'émission spontanée, la molécule interagit avec les fluctuations d'énergie du vide qui créent des photons. Les expressions des coefficients des transitions induites sont aussi reliées au moment dipolaire mais le champ électromagnétique avec lequel l'interaction a lieu ne peut pas être précisé par avance. Pour pouvoir faire le bilan des transitions radiatives entre états, on utilise l'énergie intégrée dans la raie U_{int} , définie comme I_{int} dans II-5.63. L'effet du champ sur le niveau J est le suivant:

$$R_J^\perp = \perp N_J \langle U \rangle \sum_k B_{Jk} \perp N_J A_{Jk} \quad (5.67)$$

$$R_J^+ = \sum_k N_k B_{kJ} \langle U \rangle \quad (5.68)$$

où R_J^\perp et R_J^+ sont respectivement les taux de transitions peuplant et dépeuplant le niveau de nombre quantique J .

Cas collisionnel

Pour les transitions collisionnelles, on a :

$$C_J^\perp = \perp N_J \sum_k C_{Jk} \quad (5.69)$$

$$C_J^+ = \sum_k N_k C_{kJ} \quad (5.70)$$

$$C_{ul} = n_{H_2} \langle \sigma v \rangle \quad (5.71)$$

où C_J^\perp est le nombre de transitions collisionnelles dépeuplant l'état de nombre quantique J , C_J^+ est le nombre de transitions collisionnelles peuplant l'état de nombre quantique J et C_{ul} est le taux de collisions $u \rightarrow l$. L'expression des taux de collisions est bien sur la même que

pour l'évolution des abondances nucléaires dans le code d'évolution stellaire (voir chapitre II-1, équation II-1.18).

Bilan global

Le bilan final, prenant en compte collision et radiation pour le niveau J donne donc:

$$\frac{dN_J}{dt} = R_J^+ + C_J^+ - R_J^- - C_J^- \quad (5.72)$$

Cas limites

Examinons les cas limites de l'équation II-5.72.

Si l'effet d'évolution des transitions radiatives est plus important que celui des transitions collisionnelles, alors la recherche d'un état stationnaire du système donne:

$$R_J^+ = R_J^- \quad (5.73)$$

En utilisant alors II-5.12 et II-5.14, on constate finalement que

$$U_{int} = \frac{4\pi}{c} I_\nu \quad (5.74)$$

Or, dans le cas particulier où l'on est à l'équilibre thermodynamique, le champ de rayonnement est celui d'un corps noir (voir équation II-5.46) qui est isotrope. En introduisant II-5.74 et II-4.1 dans II-5.73 pour deux niveaux seulement on peut exprimer N_2/N_1 en fonction de B_ν et des coefficients d'Einstein. En comparant à leur répartition d'équilibre donnée par II-4.9, on trouve:

$$A_{ul} = \frac{8\pi h\nu_{ul}^3}{c^3} B_{ul} \quad (5.75)$$

$$g_L B_{lu} = g_U B_{ul} \quad (5.76)$$

$$T_{ex} = T_b \quad (5.77)$$

où T_b est la température de brillance du corps noir. Les deux premières relations, mettant en jeu uniquement la nature des molécules, sur laquelle on n'a pas fait d'approximations, est donc générale.

Dans l'autre cas limite, ce sont les collisions qui dominent l'équation d'évolution II-5.72. Lorsqu'on cherche la solution stationnaire, on arrive à:

$$\begin{aligned} \frac{C_J^-}{C_J^+} &= 1 \\ \frac{N_{J'} C_{J'J}}{N_J C_{JJ'}} &= 1 \\ \frac{N_{J'}}{N_J} &= \frac{C_{J'J}}{C_{JJ'}} \end{aligned} \quad (5.78)$$

Supposons maintenant que l'on fasse la statistique des états de translation uniquement. On partirait de la même équation d'évolution des niveaux, II-5.72, mais pour les niveaux translationnels (notés p et p') et en ne prenant en compte que les taux de collisions. La condition

d'équilibre cinétique (sans que globalement il y ait ETL, ce qui comprendrait l'équilibre avec les états rotationnels), donnerait l'équivalent de II-5.78:

$$\frac{N_{p'}}{N_p} = \frac{C_{p'p}}{C_{pp'}} \quad (5.79)$$

On sait alors que les vitesses auraient une statistique Maxwellienne et les niveaux de translation une répartition de Boltzman paramétrée par T_k par définition de l'équilibre statistique (voir II-4.3). Cela donnerait donc pour deux niveaux (principe udu bilan détaillé) :

$$\frac{C_{p'p}}{C_{pp'}} = \frac{g_{p'}}{g_p} e^{-\frac{h\nu_{p'p}}{kT_k}} \quad (5.80)$$

Revenons au cas qui nous occupe. Si l'on suppose que (1) les collisions dominent les processus radiatifs et que (2) l'équilibre cinétique est atteint, alors les équations II-5.80 et II-5.78 sont vérifiées. Les taux de collisions sont les mêmes dans ces deux équations car ils sont indépendants de la nature des niveaux qu'ils peuplent, s'exprimant d'ailleurs en cm^3s^{-1} . De même, si les taux de collisions peuplent les états de rotation, ce sont les nombres quantiques de rotation qui doivent apparaître dans II-5.80. En utilisant II-5.80, II-5.78 et la définition de T_{ex} , II-4.10, on obtient une distribution de Boltzman pour les populations d'équilibre des niveaux rotationnels dans laquelle:

$$T_{ex} = T_k \quad (5.81)$$

Equation maître et résolution

On généralise l'écriture de II-5.72 à un nombre quelconque de niveaux. Cela se traduit par une "équation maître" vectorielle qui prend la forme:

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = [T] \cdot \vec{N} \quad (5.82)$$

$$[T] = [C] + [R] \quad (5.83)$$

$$[C]_{ij} = C_{ij} \quad si \quad j \neq i \quad (5.84)$$

$$[C]_{ii} = \perp \sum_{k \neq i} C_{ik} \quad (5.85)$$

$$[R]_{ij} = B_{ji} \langle U \rangle \quad si \quad j < i \quad (5.86)$$

$$[R]_{ij} = B_{ji} \langle U \rangle + A_{ji} \quad si \quad j > i \quad (5.87)$$

$$[R]_{ii} = \perp \sum_{k < i} (A_{ik} + B_{ik} \langle U \rangle) \perp \sum_{k > i} (B_{ik} \langle U \rangle) \quad (5.88)$$

où $\vec{N} = (N_1, \dots, N_{J_{\max}})$ est le vecteur population. On note que la matrice des transitions radiatives dépend de $\langle U \rangle$ qui n'est pas encore connue puisqu'on cherche à déterminer les populations précisément pour calculer la température d'excitation du système et ensuite sa température de brillance (intensité spécifique). C'est ce constat d'un phénomène non linéaire qui oblige une résolution itérative de l'équation des populations. On cherche l'état stationnaire des populations, soit:

$$[T]_{\vec{N}} \cdot \vec{N} = 0 \quad (5.89)$$

où l'on a pris la notation $[T]_{\vec{N}}$ pour montrer que $[T]$ dépend de \vec{N} . On utilise pour résoudre cette équation la même méthode que celle employée pour les équations de la structure stellaire, une méthode Newton-Raphson (voir le chapitre II-1). L'équation résolue itérativement est:

$$[E] \cdot \delta \vec{N}^{i+1} = \vec{F} \quad (5.90)$$

$$\vec{F} = \perp [T]_{\vec{N}^i} \cdot \vec{N}^i \quad (5.91)$$

$$[E] = \frac{d[T]_{\vec{N}} \cdot \vec{N}}{d\vec{N}}(\vec{N}^i) = [T] + \vec{N} \cdot \frac{d[R]}{d\vec{N}} \quad (5.92)$$

Des difficultés sévères de convergence sont survenues, notamment dans les enveloppes optiquement épaisses (fort taux de perte de masse ou enveloppe dense). Une méthode d'accélération de la convergence a été mise en oeuvre pour la résolution (voir chapitre II-1). Il s'agit ici très simplement de l'ajout d'un coefficient α , qui jusque là n'existait pas, pour éviter une évolution trop forte lors des corrections sur les abondances. Cela a suffi pour pouvoir faire converger les populations dans les enveloppes "récalcitrantes".

Révision des taux de collisions

Alors que le calcul des taux de transitions radiatives sera groupé avec celui de la profondeur optique dans la prochaine section pour des raisons qui s'éclairciront à ce moment là, nous allons aborder ici le calcul des taux de collision, qui a été mis au point pendant cette thèse. A priori "calcul" est un bien grand mot. Les taux nécessitent le calcul de deux quantités (voir II-5.71): l'abondance de particules incidentes (n_{H_2}) et les quantités $\langle \sigma v \rangle$. Mais nous allons voir que le calcul de la seconde quantité n'est pas si évident que cela.

La première est calculée de façon à respecter l'équation de conservation de la masse, compte tenu des lois paramétrées prises pour \dot{M} et v_{exp} (taux constants), et de la géométrie choisie (sphère). En utilisant ces éléments dans II-5.50, on obtient:

$$4\pi r^2 \rho v_{exp} = \dot{M} \quad (5.93)$$

La quantité inconnue, la masse volumique, peut s'écrire de façon générale (voir le chapitre II-2):

$$\rho = \frac{n_{H_2}}{N_{H_2}} \quad (5.94)$$

Le numérateur contient la quantité cherchée, la densité numérique, reste à évaluer le dénominateur, l'abondance massique (dans le même volume que celui utilisé pour le numérateur). Comme on ne suit pas la chimie de l'enveloppe, les fractions relatives d'éléments au cours du temps restent constantes. Nous avons supposé que la molécule d'Hydrogène était majoritaire et donc si l'on prend une certaine masse de gaz $M \stackrel{def}{=} M_X + M_{H_2} \sim M_{H_2}$. On utilise donc:

$$N_{H_2} \stackrel{def}{=} \frac{Nb_{H_2}}{M} = \frac{Nb_{H_2}^{mol}}{M^{mol}} = \frac{\mathcal{N}}{M^{mol}} \sim \frac{\mathcal{N}}{M_{H_2}^{mol}} \quad (5.95)$$

où \mathcal{N} est la constante d'Avogadro et $M_{H_2}^{mol}$ la masse molaire de H_2 . En combinant II-5.93, II-5.94 et II-5.95, on obtient:

$$n_{H_2} = \frac{\mathcal{N} \dot{M}}{4\pi v_{exp} r^2 M_{H_2}^{mol}} \sim 1.5 \cdot 10^{13} (cgs) \frac{\dot{M}}{v_{exp} r^2} \quad (5.96)$$

La deuxième quantité entrant dans les taux de collisions n'est pas vraiment à calculer. Les valeurs de $\langle \sigma v \rangle$, les vitesses de réactions, sont tabulées (Green & Chapman 1978) ou ajustées (Albrecht 1983) dans des articles spécialisés. Cependant, les difficultés de calcul inhérentes à ces quantités sont encore nombreuses (choix du potentiel d'interaction en particulier) et l'on ne trouve pas forcément ce que l'on souhaite. Les trois paramètres de ces vitesses de réactions sont:

- *Les vitesses de collisions sont définies pour des particules incidentes et cibles données.* Celles qui ont été incorporées concernent les collisions entre $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ et H_2 d'une part et $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ et H_2 d'autre part. Malheureusement, les molécules $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ et $^{13}\text{C}^{32}\text{S}$ ne sont pas disponibles dans la littérature et les taux de $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ ne le sont pas non plus pour toutes les conditions de température. Les facteurs $\langle \sigma v \rangle$ dépendent de la géométrie des molécules (\sim section efficace) et de la vitesse des particules dans le repère du centre de masse de celles-ci. On peut donc supposer que lorsque l'on remplace un des atomes des molécules diatomiques citées ci-dessus par un de ses isotopes, la géométrie de la molécule ne change pas beaucoup et que l'on doit corriger le taux de collision d'un facteur égal à la racine carrée du rapport des masses de l'atome substitué et de son isotope (Green & Thaddeus 1976). En effet, on peut évaluer cette dépendance en considérant l'équilibre des niveaux translationnels dans le repère du centre de masse de deux molécules isotopes l'une de l'autre, x et x' , avec une troisième, y . La relation II-4.3 donne pour la vitesse la plus probable la valeur $v_m = \sqrt{\frac{2kT}{\mu_{x,y}}}$ où $\mu_{x,y}$ est la masse réduite du système (x, y) . Le taux de collisions étant linéaire en la vitesse puisque $C \propto \langle \sigma v \rangle$, on écrira:

$$C_{ij}(x, y) = C_{ij}(x', y) \sqrt{\frac{\mu_{x',y}}{\mu_{x,y}}} \quad (5.97)$$

On obtient donc les taux de collisions pour toutes les molécules isotopiques nécessaires. On a utilisé la même méthode pour calculer les taux de collisions $\text{CS} \perp \text{H}_2$ en fonction de ceux de $\text{CO} \perp \text{H}_2$ quand ceux-ci n'ont pas été trouvés. C'est justifiable par un argument principalement: la différence majeure entre $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ et $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ réside dans leurs masses. En effet, leur structure électronique est la même et l'on peut donc supposer que les forces induites par les moments de ces deux molécules seront équivalentes.

- *le domaine des transitions calculées dans les taux de la littérature sont à prendre en compte:* quels ΔJ sont calculés, pour quels états de vibrations Γ Bien souvent, les taux (Schinke *et al.* 1985) sont donnés pour une transition $0 \rightarrow J$ ou, plus généralement pour des transitions ne nous intéressant pas (cela dépend du nombre de niveaux rotationnels et vibrationnels choisis). Deux relations permettent d'obtenir le taux C_{ul} à partir du taux C_{0J} . On a d'une part la relation II-5.80 et d'autre part une relation tirée de Varshalovich & Khersonskii (1977):

$$C_{J'J} = \frac{g_J}{g_{J'}} C_{JJ'} e^{-(E_J \pm E_{J'})/kT} \quad J > J' \quad (5.98)$$

$$C_{JJ'} = g_{J'} \sum_{J \perp J'}^{J+J'} \left[\begin{pmatrix} J' & S & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 C_{OS} \right] \quad J' > J \quad (5.99)$$

où la matrice présente dans la formule est un coefficient "3 J". Les relations qui per-

mettent de le calculer sont les suivantes (Brink & Satchler 1994):

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} = \frac{\langle ab\alpha\beta | c \perp \gamma \rangle}{(\pm 1)^{a \pm b \pm \gamma} \sqrt{2c+1}} \quad (5.100)$$

où $\langle ab\alpha\beta | c \perp \gamma \rangle$ est un coefficient de Clebsh-Gordan dont l'expression générale est donnée par (Brink & Satchler 1994):

$$\begin{aligned} & \langle ab\alpha\beta | c \perp \gamma \rangle = \\ & \delta(\alpha + \beta \perp \gamma) \Delta(abc) \\ & \sqrt{(2c+1)(a+\alpha)!(a \perp \alpha)!(b+\beta)!(b \perp \beta)!(c+\gamma)!(c \perp \gamma)!} \\ & \sum_{\nu} (\pm 1)^{\nu} [(a \perp \alpha \perp \nu)!(c \perp b + \alpha + \nu)!(b + \beta \perp \nu)(c \perp a \perp \beta + \nu)! \nu!(a+b+c+1)!] \\ & \text{où } \Delta(abc) = \sqrt{\frac{(a+b+c)!(a+c \perp b)!(b+c \perp a)!}{(a+b+c+1)!}} \end{aligned} \quad (5.101)$$

Dans la somme ci-dessus, ν prend toutes les valeurs possibles ne donnant pas une factorielle négative. En combinant les équations II-5.98 et II-5.99, on obtient:

$$C_{ul} = g_L e^{\frac{E_U \perp E_L}{kT}} \sum_{L \perp U}^{U+L} \left[\begin{pmatrix} U & S & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 C_{OS} \right] \quad (5.102)$$

Cette méthode de calcul est recommandée par Green & Chapman (1978).

- Une autre caractéristique des vitesses de collision est le domaine de température dans lequel elles sont valables. Si les interpolations sont toujours nécessaires, des extrapolations sont parfois à faire aussi. Elle peuvent être basées par exemple sur des formules d'ajustement comme celle données par Varshalovich & Khersonskii (1977) reprise par Albrecht (1983) pour les transitions C_{OS} présentes dans II-5.99:

$$C_{OS}(T_k, E_0 \perp E_S) = A_S \sqrt{\frac{T_S}{T_k}} e^{\pm \sqrt{\frac{T_S}{T_k}}} \quad (5.103)$$

où T_k est la température cinétique de H_2 . La dépendance en $E_0 \perp E_S \sim S(S+1)$ est incluse dans T_S :

$$\ln(T_S) = 1.7 + 0.13x + 0.39x^2 \quad (5.104)$$

$$x = \ln(S(S+1)) \quad (5.105)$$

La dépendance en les nombre quantiques des transitions calculées sont dans le coefficient A_S :

$$A_S^{odd} = [(0.28S \pm 1.87)^4 + 0.73] 10^{\pm 10} \text{cm}^3 \text{s}^{\pm 1} \quad (5.106)$$

$$A_S^{even} = [(0.3S \pm 1.62)^2 + 0.28] 10^{\pm 10} \text{cm}^3 \text{s}^{\pm 1} \quad (5.107)$$

De Jong *et al.* (1975), à partir des données de Green & Thaddeus (1976) utilisent une forme un peu différente:

$$C_{ij} = a(i \perp j) \frac{g_j}{g_i} \left(1 + \frac{E_j \perp E_{j'}}{kT} \right) e^{\pm b(i \perp j) \sqrt{\frac{E_j \perp E_{j'}}{kT}}} \quad (5.108)$$

où a et b sont ajustés sur les données de Green & Thaddeus (1976).

Résumons les différents taux utilisables et les méthodes avec lesquelles sont calculés dans le programme de transfert radiatif dans le tableau II-5.5.2. Par exemple, la première ligne de code " FLO " concerne les interactions entre $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ et H_2 (première colonne). La source des taux de collisions est Flower & Launay (1985) (deuxième colonne). Les températures auxquelles sont données les taux sont dans la troisième colonne pour toutes les transitions entre niveaux de J indiqué dans la dernière colonne. La deuxième ligne indique ensuite que les taux aux autres températures et aux autres niveaux sont calculés en interpolant et en extrapolant jusqu'à 3000K et jusqu'à $J=30$.

Code	Molécules	Référence	Température (K)	Niveaux
	Méthode de calcul			
FLO	$^{12}\text{C}^{16}\text{O} - \text{H}_2$	Flower & Launay (1985)	10, 20, 40, 60, 100, 250	$J = 1 \dots 11$
	Interpolations et extrapolations $\rightarrow T = 3000\text{K}$ et $\rightarrow J = 30$			
	$^{13}\text{C}^{16}\text{O} - \text{H}_2$	Flower & Launay (1985)	10, 20, 40, 60, 100, 250	$J = 1 \dots 11$
	Interpolations, extrapolations et correction II-5.97 par rapport à $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$			
SCH	$^{12}\text{C}^{16}\text{O} - \text{H}_2$	Schinke <i>et al.</i> (1985)	10, 20, 40, 80	$J = 0 \dots 5$
	Interpolations et extrapolations $\rightarrow T = 100\text{K}$			
			100, 300, 600, 1000, 1500, 2000	$J = 0 \rightarrow 1 \dots 20$
	Transformation par II-5.102 et interpolations			
	$^{13}\text{C}^{16}\text{O} - \text{H}_2$	Schinke <i>et al.</i> (1985)	10, 20, 40, 80	$J = 0 \dots 5$
	Interpolations, extrapolations et correction II-5.97 par rapport à $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$			
			100, 300, 600, 1000, 1500, 2000	$J = 0 \rightarrow 1 \dots 20$
	Transformation par II-5.102, interpolations et correction II-5.97 par rapport à $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$			
ALB	$^{12}\text{C}^{32}\text{S} - \text{H}_2$	Albrecht (1983)		$0 \rightarrow J$
	Ajustements puis transformation par II-5.102			
	$^{13}\text{C}^{32}\text{S} - \text{H}_2$	Albrecht (1983)		$0 \rightarrow J$
	Ajustements, transformation II-5.102, correction II-5.97 par rapport à $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$			
GRE	$^{12}\text{C}^{32}\text{S} - \text{H}_2$	Green & Chapman (1978)	10, 20, 40, 60, 80, 100	$J = 0 \dots 12$
	Interpolations			
		Schinke <i>et al.</i> (1985)	100, 300, 600, 1000, 1500, 2000	$J = 0 \rightarrow 1 \dots 20$
	Interpolations, transformation II-5.102 et correction par rapport à $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$			
	$^{13}\text{C}^{32}\text{S} - \text{H}_2$	Green & Chapman (1978)	10, 20, 40, 60, 80, 100	$J = 0 \dots 12$
	Interpolations et correction II-5.97 par rapport à $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$			
		Schinke <i>et al.</i> (1985)	100, 300, 600, 1000, 1500, 2000	$J = 0 \rightarrow 1 \dots 20$
	Interpolations, transformation II-5.102 et correction par rapport à $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$			

TAB. 5.3 – Les différents taux de collisions utilisables dans le code de transfert radiatif.

5.5.3 Méthode de calcul de la profondeur optique

Pour pouvoir calculer la profondeur optique nécessaire à intégrer la température de brillance (voir II-5.49), l'idée est de calculer les coefficients d'absorption et d'émission la définissant (voir II-5.43) en fonction des coefficients d'Einstein déjà définis (voir II-5.64). On écrit donc la variation de l'énergie due aux interactions avec la matière en tenant compte du

profil de raie (sans diffusion):

$$dE(\nu_{ul}) = h\nu_{ul}(n_u A_{ul} \perp n_l B_{lu} \langle U \rangle + n_u B_{ul} \langle U \rangle) \phi(\nu) dV d\nu dt \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (5.109)$$

où les n minuscules indiquent une abondance volumique. En utilisant la formule II-5.109 avec II-5.15 et les définitions II-5.9 et II-5.74, on obtient:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = \frac{h\nu_{lu}}{c}(n_u B_{ul} \perp n_l B_{lu}) I_\nu \phi(\nu) \perp \frac{h\nu_0}{4\pi} n_u A_{ul} \phi(\nu) \quad (5.110)$$

En comparant à II-5.34, on obtient:

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu_{lu}}{\rho c} (B_{ul} n_u \perp B_{lu} n_l) \phi(\nu) \quad (5.111)$$

$$J_\nu = \perp \frac{h\nu_{lu}}{4\pi} n_u A_{ul} \phi_\nu \quad (5.112)$$

Si on utilise les relations générales II-5.75 et II-5.76 dans II-5.111 en se rappelant de la définition de τ , II-5.43, on trouve finalement:

$$d\tau_\nu = \frac{c^2}{8\pi\nu_{lu}^2} A_{ul} g_u n_X \left(\frac{N'_u}{g_u} \perp \frac{N'_l}{g_l} \right) \Phi(\nu) ds \quad (5.113)$$

où les $N'_i \stackrel{def}{=} \frac{N_i}{N}$ sont les fractions d'abondances dans l'état de rotation J et n_X la densité numérique de la molécule X . Cette relation est générale et ne suppose donc pas l'ETL. Il nous reste à l'intégrer pour obtenir τ . La figure II-5.6 montre comment va se passer l'intégration.

Pour calculer l'opacité dans la raie à une vitesse V_{lin} , on localise dans l'enveloppe une zone où $V_{lin} \perp 5V_{tur} < V_z < V_{lin} + 5V_{tur}$ ce qui assure de couvrir la majeure partie de la gaussienne II-5.62. Puis pour chaque rayon à $p = const$, on intègre II-5.113 par une formule de trapèze. On obtient donc $\tau_\nu(V_{int}, p)$. La température de brillance intégrée sera ensuite calculée sur ces mêmes lignes.

Probabilités d'échappement

Résumons les résultats des derniers paragraphes. Pour calculer la température d'excitation, on a besoin à la fois des populations et de τ . Or, on vient de montrer que τ dépend des populations. On est tenté alors de déterminer d'abord les abondances. Oui, mais voilà, les abondances dépendent du champ électromagnétique local au travers de $\langle U \rangle$ dans II-5.82. Et c'est précisément T_{ex} , dépendant des abondances qui va nous permettre de trouver ce champ en intégrant l'équation du transfert! La méthode Newton-Raphson mise en place devrait donc a priori comprendre le calcul de $\langle U \rangle$, c'est-à-dire la résolution de l'équation de transfert à chaque itération nécessaire au calcul des abondances. La figure II-5.3 montre que ce n'est pas le cas dans le programme. Deux solutions sont envisageables:

- Supposer que l'on est à l'équilibre thermodynamique local et alors les fractions de population dans les différents états de rotation s'expriment en fonction de la température cinétique (voir le paragraphe de II-5.80) qui est une entrée. On a plus besoin alors d'itérations, ni même d'ailleurs de calculer les abondances pour avoir τ , qui dépend directement de T_k . L'hypothèse de l'ETL revient finalement intégrer une loi de température cinétique que l'on entre nous même!

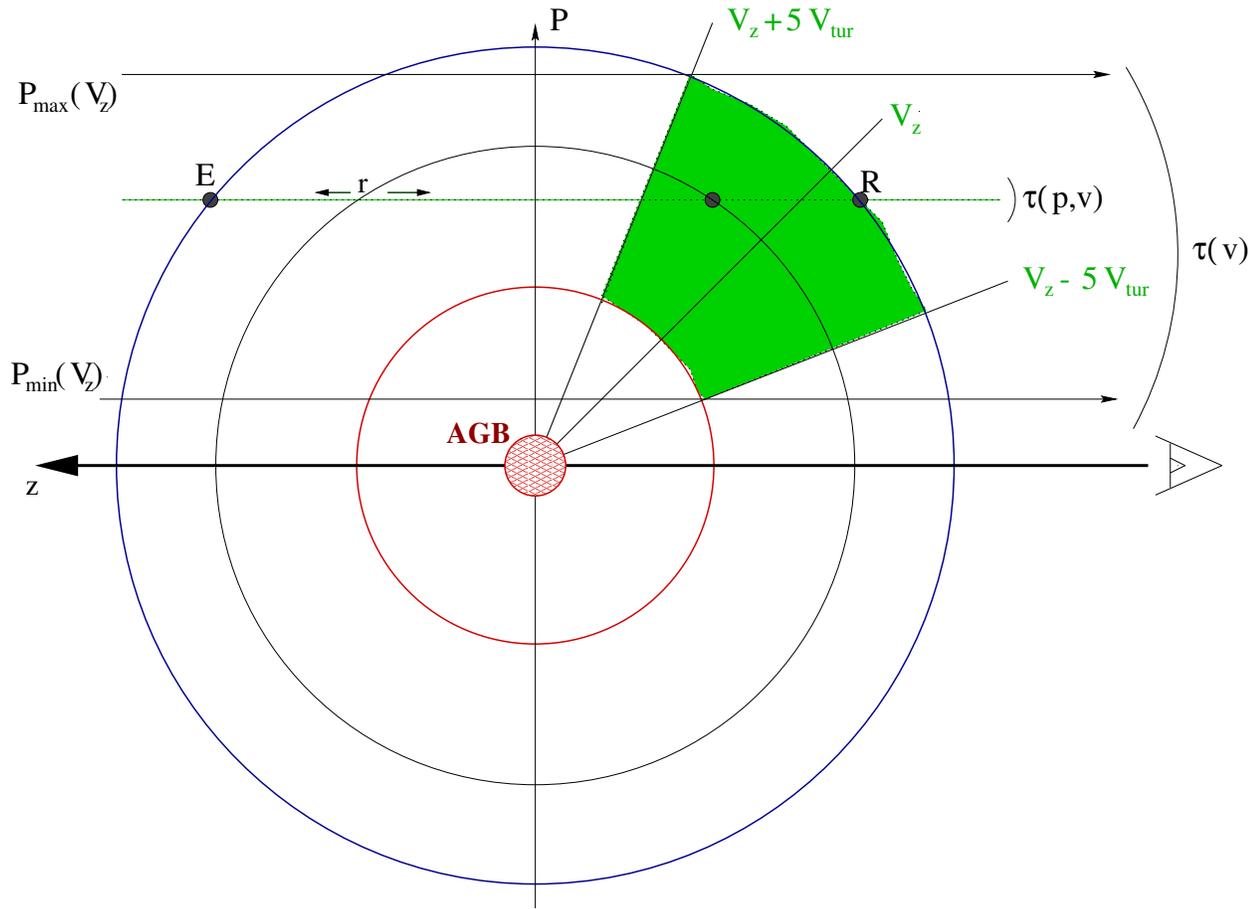


FIG. 5.6 – Méthode de calcul pour la profondeur optique.

- La méthode intermédiaire, évitant le couplage de l'équation de transfert aux itérations cherchant les populations, est la méthode dite des "probabilités d'échappement" ou "LVG" pour Large Velocity Gradient". Elle a été créée par Sobolev (1947) et développée ou réutilisée par Castor (1970), De Jong *et al.* (1975), Rybicki & Hummer (1978), Sobolev (1985) ... C'est celle qui a été employée dans le programme de transfert radiatif et que nous allons décrire sommairement maintenant.

Cette méthode consiste à exprimer simplement, moyennant quelques hypothèses, les taux de transitions radiatives entre niveaux rotationnels sans utiliser explicitement les grandeurs décrivant le champ électromagnétique.

Le terme "probabilité" présent dans cette méthode est du au raisonnement suivant: un photon créé en un point M de l'enveloppe par une particule a d'autant plus de chance de s'échapper de cette enveloppe que la matière est transparente à sa longueur d'onde. Cela se traduit par une probabilité *locale*, $\beta_\nu(\vec{r})$, pour que le photon de fréquence ν s'échappe ou pénètre dans une zone. Lamers & Cassinelli (1999) donne:

$$\beta_\nu(r) \stackrel{def}{=} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{1 \pm e^{\pm \tau_{\nu_0}}}{\tau_{\nu_0}} d\mu \quad (5.114)$$

$$\beta_\nu^c(r) \stackrel{def}{=} \frac{1}{2} \int_{\mu^*}^1 \frac{1 \pm e^{\pm \tau_{\nu_0}}}{\tau_{\nu_0}} d\mu \quad (5.115)$$

$$(5.116)$$

où β_ν est la probabilité d'échappement hors de l'enveloppe à partir du point r et β_ν^* la probabilité de pénétration au point r du rayonnement extérieur (celui de l'étoile centrale, du rayonnement de fond de ciel ...). ν_0 est la fréquence émise dans le référentiel de l'émetteur et $\mu_* = \cos(\theta_*) = \sqrt{1 - \left(\frac{R_*}{r}\right)^2}$ l'angle entre la direction radiale et le bord de la surface de l'étoile centrale.

Le terme "Velocity", lui, vient du fait que l'enveloppe a un champ de vitesse et que les capacités d'émission et d'absorption des particules sont considérablement changées par celui-ci. Ainsi, au lieu d'échanger des photons à la fréquence ν_0 , les molécules de l'enveloppe circumstellaire peuvent échanger sur tout leur profil $\phi(\nu)$ à des fréquences données par II-5.51 dépendantes de leur vitesse. A priori, cela diminue fortement les chances du photons de s'échapper de l'enveloppe.

Les hypothèses fondamentales de cette méthode sont les suivantes:

- *Il existe un fort gradient de vitesse dans le milieu.* Ainsi, lorsqu'on parcourt une distance Δr , la vitesse a variée de $\frac{dv}{dr}\Delta r$. II-5.51 donne alors $\Delta r = \frac{\Delta\nu c}{\nu_0 \frac{dv}{dr}}$. Cela signifie que, si le gradient de vitesse est fort, la distance au bout de laquelle $\Delta\nu$ devient égal à la largeur de la raie, r_0 est très petite. En dehors de cette zone, la raie qui se forme localement ne peut plus interagir avec le photon qui la traverse. Or, sur le chemin d'intégration de la profondeur optique et de la température de brillance, on a $r = \sqrt{p^2 + z^2}$ où p est fixé. Cette première hypothèse nous permet donc de dire que la zone de variation de la fonction r est très piquée autour de z_0 . Cela conduit à faire des développements en puissance de la fonction source, de la profondeur optique ...
- Les coefficients d'émission et d'absorption sont constants dans le profil de raie, nuls ailleurs. Cela permet de simplifier l'intégrale de la fonction source notamment, dans laquelle on n'intègre plus que le profil de raie.

Les hypothèses ci-dessus permettent d'estimer par avance en chaque point de la ligne d'intégration ce que sera la profondeur optique intégrée. Comme elle simplifient aussi l'intégrale II-5.45 et que les profondeurs optiques sont estimées, le calcul de l'intensité moyenne est possible et celui des taux de transitions radiatives en découle. Castor (1970) donne pour des enveloppes circumstellaires:

$$\tau_\nu(p) = \frac{\tau_\nu(r, z)}{1 + \mu^2 \sigma'} \quad (5.117)$$

$$\beta = \int_0^1 \left[\frac{1 \pm \exp\left(\frac{\pm \tau_\nu(r, z)}{1 + \mu^2 \sigma}\right)}{\frac{\tau_\nu(r, z)}{\mu^2 \sigma}} \right] d\mu \quad (5.118)$$

$$\beta_c = \frac{1}{2} \int_{1 \pm 2W}^1 \left[\frac{1 \pm \exp\left(\frac{\pm \tau_\nu(r, z)}{1 + \mu^2 \sigma}\right)}{\frac{\tau_\nu(r, z)}{\mu^2 \sigma}} \right] d\mu \quad (5.119)$$

$$\sigma = \frac{d \ln v}{d \ln r} \pm 1 \quad \sigma' = \frac{d \ln v}{d \ln r} + 1 \quad (5.120)$$

$$W = \frac{1}{2} \left[1 \pm \sqrt{1 \pm \frac{r_c^2}{r^2}} \right] \quad (5.121)$$

où $\tau_\nu(r, z)$ est donné par II-5.113, β et β_c sont les probabilités d'échappement, σ , l'indice des vitesses et W , le facteur géométrique de dilution de l'étoile centrale (fraction d'angle solide

couvert par celle-ci). Les taux de transitions sont alors donnés par:

$$R_{ul} = A_{ul} g_u [N'_u(\beta + R) \pm N'_l R] \quad (5.122)$$

$$R = \beta F_\nu(bg) + \beta_c F_\nu(*) \quad (5.123)$$

Notons que les dérivées des probabilités d'échappement doivent être calculées car elles sont nécessaires à la convergence de la méthode Newton-Raphson calculant les abondances (voir équation II-5.82).

Troisième partie

Les résultats obtenus

Une fois les moyens mis en place, plusieurs campagnes de calculs et d'observations ont été lancées. Pour la partie observationnelle, deux campagnes d'observations ont été menées sur les thèmes respectifs des rapports isotopiques d'éléments lourds (Chlore, Soufre et Silicium) et des rapports isotopiques des éléments C,N,O dans les étoiles oxygénées. La première campagne sera présentée au chapitre III-1, la deuxième ne le sera pas car elle n'a pas encore été dépouillée. Par ailleurs, une campagne d'observation sur les étoiles de type J (riches en Carbone 13) a été dépouillée et analysée grâce au programme de transfert radiatif présenté au chapitre II-5. Elle fera l'objet du chapitre III-2.

Par ailleurs, en utilisant le code d'évolution stellaire de Grenoble revu comme cela a été décrit aux chapitres II-1 et II-2, nous avons aussi réalisé des calculs complets d'étoiles de 1 à 6 masses solaires qui ont été menés de la phase PMS (pré séquence principale ou Pre Main Sequence) jusqu'à la phase AGB. A cette occasion une grille (M, Z) jusqu'à la fin de la séquence principale a été réalisée avec $M \in [0.1, 7] M_{\odot}$ et $Z \in [0.01, 0.04]$. Pour la première fois, des comparaisons sont possibles entre le code de Grenoble et les tracés existant dans la littérature pour les faibles masses. Notons que c'est aussi la première fois que des étoiles de faible masse traversent le flash central de l'Hélium avec le code de Grenoble. Ces nouvelles possibilités du code de Grenoble seront présentées au chapitre III-3. Enfin, sur un pulse de référence choisi produisant un troisième dredge-up, différents tests ont été menés concernant l'apparition du dredge-up. Ils seront exposés au chapitre III-4.

Chapitre 1

Mesure du rapport isotopique du Chlore

Sommaire

1.1	Intérêt de cette observation	209
1.2	“New isotopic ratio determinations in the envelope of IRC+10216 and s process”	211

Dans ce chapitre, un article *publié dans Astronomy & Astrophysics*, Kahane *et al.* (2000), est présenté. Il analyse le rapport isotopique $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ du Chlore obtenu à partir des mesures des intensités des raies de transition rotationnelles des molécules Al^{37}Cl , Al^{35}Cl , Na^{37}Cl et Al^{36}Na dans l’enveloppe circumstellaire de CW Leo. Cette source, encore appelée IRC+10216, est l’étoile de l’AGB carbonée la plus observée à cause de sa luminosité élevée. Nous discuterons tout d’abord de l’utilité de cette mesure, clairement reliée au processus “s”, et de la démarche employée, avant de présenter l’article lui-même, .

1.1 Intérêt de cette observation

Pour montrer l’intérêt de cette observation, nous exposerons d’abord les facteurs qui influencent la nucléosynthèse des espèces dont les rapports isotopiques sont mesurés. Ensuite, nous en déduisons une démarche de comparaison des prédictions avec les observations. Enfin, nous montrerons en quoi le rapport isotopique du Chlore est une contrainte importante par rapport à tous les autres rapports isotopiques mesurables.

1.1.1 Les facteurs d’influence

Pour savoir ce que cette observation peut nous apporter, nous devons réfléchir à l’information transportée par le rapport $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$, c’est-à-dire aux facteurs qui influencent sa valeur. D’après le chapitre I-3, le Chlore fait partie des éléments synthétisés par processus de capture de neutrons dit “processus s”.

Trivialement, le taux de réaction du processus “s” produisant ces isotopes du Chlore dépend de l’abondance des neutrons, de l’abondance des noyaux cibles et de la quantité $\langle \sigma v \rangle$. En remontant aux dépendances de ces trois quantités, on peut dire que les abondances de ^{35}Cl et ^{37}Cl dépendent:

- de la nature et de l’abondance de la source de neutrons qui est activée. En effet, suivant

- la source invoquée, la température d'activation de la production des neutrons sera différente. De plus, sans tenir compte de l'abondance des protons, plus l'abondance de la source de neutrons sera grande, plus les neutrons seront produits en grande quantité.
- de l'abondance des protons injectés dans l'intercouche par le troisième Dredge-up. En effet, celle-ci va augmenter le nombre de neutrons produits par la source de neutrons (voir chapitre I-3).
 - des conditions physiques de la capture de neutrons (température, masse volumique). En effet, ces quantités influent directement sur les probabilités de rencontres des espèces.
 - de l'abondance des noyaux cibles, issus de tous les épisodes de nucléosynthèse précédents.

Toute incertitude empêchant de prévoir précisément ces quantités engendre donc une incertitude sur le rapport $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$. Or, ces quantités sont toutes influencées par l'évolution de la structure de l'étoile, notamment en température. Comme dans toutes les étoiles, celle-ci est définie en premier lieu par la masse. A la phase AGB, trois paramètres spécifiques contrôlent les quantités décrites ci-dessus et par conséquent le processus "s":

- la masse initiale de l'étoile
- ensuite, le traitement adopté pour le dredge-up. En effet, sa profondeur commande directement la localisation de la poche de ^{13}C servant ensuite de source aux neutrons. Or, celle-ci est liée à de nombreux choix numériques ou physiques discutés par exemple dans Straniero *et al.* (1995), Frost & Lattanzio (1996) ou Mowlavi (1999). Le chapitre III-4 permettra d'évaluer l'influence de ces choix de manière cohérente, c'est-à-dire au sein d'un même code d'évolution stellaire.
- enfin, la prescription utilisée pour le taux de perte de masse (voir chapitre I-3). En effet, la perte de masse influe directement sur la température des zones de brûlage ainsi que sur l'extension et l'intensité des pulses thermiques.

1.1.2 Démarche employée

Le schéma d'analyse adopté dans l'article qui va suivre est donc de réaliser des modèles à (\dot{M}, DUP) choisis (fixés) pour comparer leurs prédictions de rapports isotopiques aux observations. Les prédictions dans ce cas ne dépendent plus que de la masse de l'étoile et de son âge, cette dernière quantité étant remplacée par exemple par la masse de coeur puisqu'elle croît de façon monotone avec le temps. On vérifie ensuite les incertitudes liées aux couples (\dot{M}, DUP) choisis.

1.1.3 Spécificité du rapport isotopique du Chlore

Tous les rapports isotopiques ne sont pas équivalents pour contraindre les modèles. En effet, la valeur d'un rapport isotopique donné en surface, est sensible a priori:

- au nombre et à la nature des réactions qui le modifie. En particulier, pour les étoiles de l'AGB, les réactions à examiner sont nombreuses. En effet, les étapes de mélanges subies par les couches où se déroule la nucléosynthèse permettent d'obtenir au même endroit protons, neutrons et α , ce qui augmente la taille du réseau des réactions possibles.

- à l’endroit où cette activation a lieu car la température et la masse volumique influent sur le taux de réaction. A la phase AGB, les lieux possibles sont nombreux: couche en fusion d’Hélium, couche en fusion d’Hydrogène, intercouche (production de neutrons), pulse thermique et enveloppe convective (en cas de HBB).
- à la quantité de matière mélangée par le DUP3 pour enrichir l’enveloppe convective.

Ainsi, les éléments jusqu’au Néon, fortement abondants, présents dans tous les sites de nucléosynthèse, réagissants aux températures les plus basses, sont-ils les plus sensibles à *tous* ces processus.

Les éléments lourds, du Fer au Plomb, ne pouvant se former que par les processus de capture de neutrons, sont davantage associés au bas de l’intercouche et au pulse thermique. Par contre leurs faibles abondances et leur tendance à se condenser sur les grains de poussières, les rend difficiles à observer.

Les éléments intermédiaires, du Néon au Fer réalisent un bon compromis entre les abondances élevées des éléments légers et les sections efficaces élevées des éléments lourds. Il sont sensibles à des températures plus élevées que les éléments légers et seront donc produits en plus grande proportion par les neutrons libérés par le Néon 22 et au sein des pulses thermiques. Ces derniers sont donc plus “sélectifs” que les éléments C,N,O par exemple.

Parmi les rapports de ces éléments “intermédiaires”, le rapport isotopique du Cllore étant celui qui dépend le plus fortement de la masse de l’étoile, c’est naturellement celui dont l’observation contraint le plus les modèles d’évolution stellaire.

1.2 “New isotopic ratio determinations in the envelope of IRC+10216 and s process”

1.2.1 Résumé

Dans l’article qui suit, les comparaisons entre observations et prévisions ont été faites avec les modèles calculés par le code FRANEC (voir Straniero *et al.* (1997), Gallino *et al.* (1998) ou Vaglio *et al.* (1999)). L’avantage est qu’il suit précisément l’abondance de neutrons en incorporant le calcul du processus “s” dans sa partie nucléaire. L’inconvénient est qu’il ne comprend pas de physique capable d’effectuer de manière consistante l’injection, à travers la frontière convective, des protons nécessaires au processus “s” lors du troisième dredge-up. La quantité de protons injectés dans l’intercouche est donc paramétrée. Cela rajoute une source d’incertitude supplémentaire dont il faut vérifier l’influence.

Après avoir présenté les observations et les précautions prises pour dériver le rapports $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$, les effets des différentes incertitudes (paramétrage de la quantité de protons injectés dans l’intercouche, taux de perte de masse adopté, ...) sont discutés. Il est ensuite montré que la précision de la mesure de ce rapport permet de donner une contrainte sur la masse de CW Leo:

$$M_* \leq 4M_{\odot} \quad (1.1)$$

Dans la dernière partie de l’article, cette contrainte sur la masse de CW Leo établie grâce à la nouvelle mesure de $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ est discutée à la lumière des valeurs des rapports isotopiques des éléments CNO données dans la littérature.

1.2.2 Article

Improved isotopic ratio determinations in IRC+10216, the progenitor mass and the *s* process

C. Kahane¹, E. Dufour¹, M. Busso², R. Gallino³, M. Lugaro⁴, M. Forestini¹, and O. Straniero⁵

¹ Laboratoire d'Astrophysique de l'Observatoire de Grenoble B.P. 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France

² Osservatorio Astronomico di Torino, 10025 Torino, Italy

³ Dipartimento di Fisica Generale, Università di Torino, Via P. Giuria 1, 10125 Torino, Italy

⁴ Department of Mathematics, Monash University, Clayton 3168, Victoria, Australia

⁵ Osservatorio Astronomico di Collurania, 64100 Teramo, Italy

Received 17 December 1999 / Accepted 2 March 2000

Abstract. We present an improved determination of the chlorine isotopic ratio in the circumstellar envelope IRC+10216. This determination is the first clear evidence that in this circumstellar envelope elements heavier than the CNO do show deviations from the solar isotopic ratios, thus allowing a detailed comparison with quantitative model predictions. We have compared these data, together with other measurements for Mg and CNO isotopes, with predictions of AGB stellar models of solar metallicity and initial masses 1.5, 3 and 5 M_{\odot} computed with the FRANEC evolutionary code. The comparison shows excellent agreement for the results of a low mass AGB model and remarkable disagreement for those of the 5 M_{\odot} star. We briefly discuss the impact that model uncertainties can have on our conclusions.

Key words: nuclear reactions, nucleosynthesis, abundances – stars: AGB and post-AGB – stars: individual: IRC+10216 – stars: circumstellar matter – radio lines: stars

1. Introduction

In advanced asymptotic giant branch (AGB) evolutionary stages, H and He burning occur in two shells. The He-rich zone between them (hereafter defined as the He intershell) is periodically swept by convective instabilities induced by He-burning runaways (thermal pulses, TP), where ^{12}C is synthesized by partial He burning. In these layers heavy elements are built up by slow neutron captures (*s* process) on seed nuclei, driven by the $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ and the $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$ reactions, as will be discussed in Sect. 4. After a few TPs, at the quenching of a thermal instability the H shell is inactive and the convective envelope penetrates in the upper region of the He intershell, bringing to the surface newly synthesized ^{12}C and *s*-processed elements. This recurrent phenomenon is known as *third dredge up* (TDU) (e.g., Busso et al. 1999).

In AGB stars of mass lower than $M \simeq 3 M_{\odot}$, the maximum temperature at the bottom of the convective instability barely reaches $T = 3 \times 10^8$ K in advanced TPs. At this temperature the ^{22}Ne neutron source is marginally activated. On average, about 1% of ^{22}Ne nuclei are burned, and rather small neutron fluxes are generated. The bulk of the neutron flux for the production of the heavy elements comes instead from the ^{13}C neutron source, which is activated at $T \leq 1 \times 10^8$ K and consumes all ^{13}C nuclei in radiative conditions during the interpulse period (Straniero et al. 1997). In contrast, in intermediate mass AGB stars ($M = 5$ to $8 M_{\odot}$), the bottom temperature in the convective TPs reaches a peak value of 3.5×10^8 K and the $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$ reaction is efficiently activated (Iben 1975). Here, on average 30% of ^{22}Ne nuclei are consumed in the He intershell. On the other hand, in intermediate mass AGBs the mass of the He intershell is an order of magnitude lower than in AGB stars of lower mass, and the duration of the post-flash dip is shorter. Thus the ^{13}C pocket is expected to be comparatively less efficient (Vaglio et al. 1998; Straniero et al. 2000).

The *s*-process isotopes synthesized by the two neutron bursts described above belong to heavy elements from Sr to Pb (e.g., Truran & Iben 1977; Iben & Truran 1978; Gallino et al. 1998). Observationally, evidence of this dates back to the measurement of Tc in S stars (Merrill 1952). At the *s*-process efficiencies typical of S and C (type N) stars in the galactic disc the *s*-elements at the Zr or Ba abundance peaks are enhanced by up to one or two orders of magnitude (Busso et al. 1995). Unfortunately, this cannot be verified here, as no spectroscopic analysis is possible for the photosphere of CW Leo, the central object of the very dusty source IRC+10216.

In contrast, all nuclei lighter than Fe, though capable of capturing up to 50% of the available neutrons and hence to act as filters, or *poisons* for the neutron captures, reach only small enhancements, below 10 – 50 in the He intershell and below 2 – 3 in the envelope (Lugaro et al. 1999). This is so because of their high initial abundance and small neutron capture cross sections (the heavy isotopes beyond $A = 90$ have cross sections that are larger by up to three orders of magnitude). Despite this fact, intermediate mass nuclei from Ne to Fe can be used as indicators

Table 1. Telescope and spectra characteristics for the observed lines.

Line	Frequency (MHz)	η	HPBW (arcsec)	δv (km s ⁻¹)	T_{mb}^c (K)	$\int T_{mb} dv$ (K km s ⁻¹)	v_{exp} (km s ⁻¹)
Na ³⁵ Cl (7-6)	91169.796 (0.065)	0.80	26	1.03	0.048 (0.013)	0.399 (0.024)	13.763 (0.220)
Na ³⁷ Cl (7-6)	89219.640 (0.122)	0.81	27	1.05	0.018 (0.007)	0.164 (0.022)	13.208 (0.428)
Al ³⁵ Cl(15-14)	218560.583 (0.068)	0.48	11	0.43	0.226 (0.029)	4.670 (0.193)	13.709 (0.094)
Al ³⁷ Cl(15-14)	213428.448 (0.064)	0.49	11	0.44	0.104 (0.027)	2.010 (0.068)	14.046 (0.089)

of the *s*-process conditions. Indeed, their final concentration is sensitive to the activation of the ²²Ne neutron source, hence to the maximum temperature achieved in the convective TPs. The Cl isotopic ratio shares this property. In particular, the neutron magic ³⁷Cl is relatively enhanced by the *s* process while the lighter ³⁵Cl, whose neutron capture cross section is a factor of 5 larger than that of ³⁷Cl, is depleted. Also the Mg isotope ratios are of interest. Both ²⁵Mg and ²⁶Mg are enhanced in the He intershell as a combination of α -captures on ²²Ne and of neutron captures, while ²⁴Mg remains almost untouched.

Thanks to the properties outlined above, the measurement of relative isotopic abundances of intermediate mass elements in the circumstellar envelopes of enshrouded AGB stars appears a powerful tool for studying the details of the *s* processing during thermal pulses, in particularly constraining the progenitor stellar mass.

Except for the lightest elements, isotopic shifts of the atomic lines are smaller than the thermal linewidths so that isotopic abundances are mainly derived from molecular lines, for which isotope shifts are easily resolved. The molecular rotational transitions of circumstellar molecules, observed in the radio millimeter range, have proved to be extremely useful for such determinations. In particular, towards the high mass-loss stars belonging to the end of the AGB phase, the optically thick dusty envelopes prevent any optical observation of the photospheric molecules, but the circumstellar molecules provide intense radio emission. Up to now, systematic measurements of the silicon, sulfur and chlorine isotopic ratios have been performed in a single circumstellar envelope, the carbon-rich IRC+10216. The central star, CW Leo, is a long period Mira-type variable, near the end of its AGB stage (Skinner et al. 1998) with a high mass loss rate of $\sim 1.5 \times 10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$. The luminosity is rather low, between 1.1 and $1.9 \times 10^4 L_{\odot}$ (Groenewegen et al. 1998; Weigelt et al. 1998), depending on the precise value adopted for the distance, which is estimated to be in the range 130 to 170 pc (Le Bertre 1997; Winters et al. 1994). From models of the circumstellar emission, a C/O ratio ~ 1.4 and a total mass below $2 M_{\odot}$ were estimated (Winters et al. 1994). However, if we accept for the distance a value close to the maximum allowed limit (170 pc), the derived luminosity might imply a more massive star, up to $4 - 4.5 M_{\odot}$ (Weigelt et al. 1998). This higher mass estimate was found by Guélin et al. 1995 to be compatible with some of the observed isotopic ratios. On the basis of new measurements for Cl isotopes and of a reanalysis of published data for other species, we plan to readdress here the problem of the progenitor mass of IRC+10216.

The chlorine isotopic ratio derived from the previous 2mm survey showed a quite large uncertainty. Additional observations have been performed and are presented in Sect. 2. The chlorine isotopic ratio, based on a careful compilation of all existing measurements, is derived with better accuracy and analyzed in Sect. 3, together with those of other intermediate atomic mass elements. Sects. 4 and 5 present an analysis of the envelope isotopic composition of intermediate mass elements, as expected from AGB nucleosynthesis models, to be compared with the observed ratios. Finally, Sect. 6 summarizes the main results of this research.

2. Observations and data reduction

The NaCl and AlCl data presented here were obtained with the 30m IRAM telescope in Pico Veleta, Spain between Nov. 29, 1997 and Dec. 1, 1997. The telescope was equipped with three SIS receivers (two in the 3mm range and one in the 1mm range) operating simultaneously, tuned in single side band (SSB) mode. The image sideband rejection was measured to be high (from 20 dB to 30 dB). The antenna temperature scale was calibrated every 10 minutes by the cold load technique. The main beam temperatures, T_{mb} , reported here are related to the antenna temperature scale, T_A^* , by $T_{mb} = T_A^*/\eta$ where η is the ratio of the main beam to the forward efficiency, as listed in Table 1. The absolute calibration accuracy was estimated to be of the order of 10%, from comparison with standard calibration spectra and from day to day line intensity variations. The antenna pointing was checked approximately every hour using the 115 GHz continuum receiver on a nearby bright quasar taken from the standard IRAM catalog. The typical pointing drift during one hour was 3'', significantly smaller than the telescope beam sizes (HPBW) given in Table 1. The signal from each receiver was sent to a filter bank with 256 channels of 1 MHz and to an autocorrelator with a resolution of about 80 kHz for the 3mm range lines and about 300 kHz for the 1mm range lines. The weather conditions were good, with typical SSB system noise temperatures between 250 and 300 K in the 3mm range and between 550 and 700 K in the 1mm range.

The observed NaCl and AlCl spectra are shown in Fig. 1 and Fig. 2. The NaCl spectra have been smoothed to a velocity resolution (δv) of about 1 km s⁻¹ to increase the signal to noise ratio, whereas the AlCl spectra show their original resolution of about 0.44 km s⁻¹. Only linear or parabolic baselines have been subtracted from the spectra.

In order to derive the line characteristics, the observed profiles have been fitted to model profiles, which are, as usual for

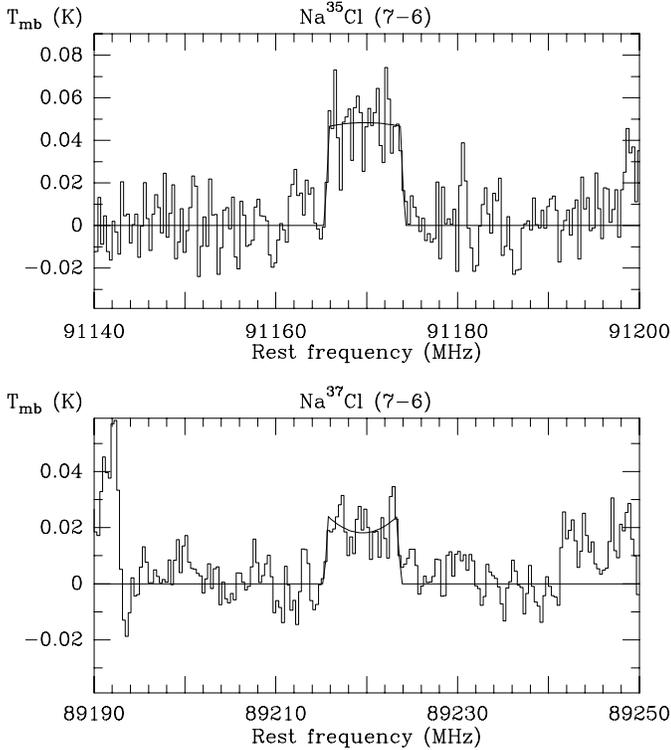


Fig. 1. NaCl (7-6) isotopomers lines observed towards IRC+10216 with the IRAM 30m telescope. The source position is $\alpha(1950) = 09^{\text{h}}45^{\text{m}}14.8^{\text{s}}$ and $\delta(1950) = 13^{\circ}30'40''$. The spectral resolutions are 1.03 and 1.05 km s^{-1} , respectively. Only linear or parabolic baselines have been subtracted and the solid lines represent the model profiles fitted to the lines.

spherical uniformly expanding envelopes, truncated parabolas, with positive or negative curvatures. The results and 1σ errorbars of the fits (frequencies, intensities at the line center, T_{mb}^c , integrated intensities, $\int T_{mb} dv$, envelope expansion velocity, v_{exp}) are reported in Table 1, and the fitted profiles are plotted in Fig. 1 and Fig. 2.

The line profiles are quite rectangular, as expected for unresolved, optically thin, expanding envelope. As already mentioned by Cernicharo et al. (1987), the expansion velocities derived from the linewidths are smaller than the terminal velocity of 14.5 km s^{-1} derived for most molecular lines in IRC+10216, indicating that the lines arise from inner layers of the envelope, where the terminal velocity is not yet reached.

3. Results for the isotopic ratios

Assuming (i) that the lines are optically thin and (ii) that both isotopomers have the same excitation conditions (this is most likely, because their abundances are very similar), the derivation of the molecular abundance ratios from the integrated intensity ratios is straightforward: only a frequency correction (in ν^{-1}) has to be applied to take into account the frequency dependence of the line strengths (Kahane et al. 1988; 1992). The rms 1σ errorbars on these ratios include two statistically independent uncertainties: a 10% calibration uncertainty and a "fit uncertainty". The results are reported in Table 2. We have also

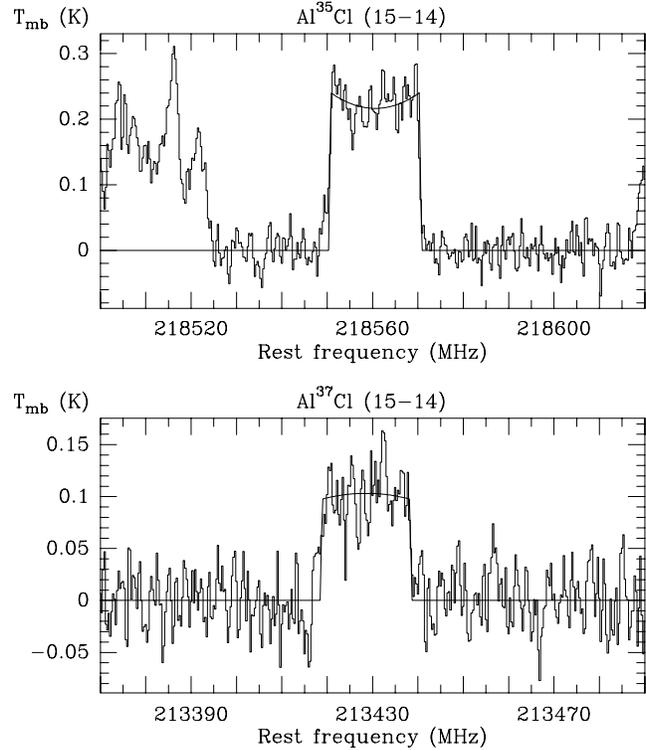


Fig. 2. The same as Fig. 1 for the AlCl (15-14) lines. The spectral resolutions are respectively 0.43 and 0.44 km s^{-1} .

included in this table the molecular isotopic ratios obtained by Cernicharo et al. (1987) and two of the four ratios derived by Cernicharo et al. (2000) in the 2mm survey (two ratios based on tentatively detected lines have been ruled out). The five measurements appear to be compatible and no systematic difference between NaCl and AlCl (which would indicate an unlikely isotopic fractionation effect) can be seen. We conclude that these molecular abundance ratios reflect the elemental $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ ratio. Using weightings inversely proportional to the individual errorbars, we derive an average $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ ratio of 2.30 ± 0.24 , significantly smaller than the solar value of 3.13. With the significantly reduced errorbars provided by the new data (the average of the previous data was 2.4 ± 0.4), we have been able to bring the first observational evidence that the AGB circumstellar envelope IRC+10216 presents deviations from the solar system isotopic composition that are not limited to the well known CNO isotopes. Furthermore, the accuracy of our $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ isotopic ratio measurement allows now a meaningful comparison with theoretical predictions.

In Table 2 we have also reported the silicon and sulfur ratios derived from the 2mm survey (Cernicharo et al. 2000), which represent a significant improvement compared to previous estimates (Kahane et al. 1988) and, to our knowledge, the most accurate existing measurements of silicon and sulfur isotopic ratios in an evolved AGB star. We have further included the isotopic composition of C (Cernicharo et al. 2000), N (Kahane et al. 1988), O (Kahane et al. 1992), and Mg (Guélin et al. 1995).

Table 2. Observed isotopic ratios towards IRC+10216.

Ratio	Value	1σ	Ref. ^a	Solar ^b
Na ³⁵ Cl/Na ³⁷ Cl (7-6)	2.33	0.50	(1)	
Al ³⁵ Cl/Al ³⁷ Cl (15-14)	2.15	0.33	(1)	
Na ³⁵ Cl/Na ³⁷ Cl (8-7)	1.78	0.59	(2)	
Al ³⁵ Cl/Al ³⁷ Cl (10-9)	3.17	0.79	(3)	
Al ³⁵ Cl/Al ³⁷ Cl (11-10)	2.40	0.76	(3)	
³⁵ Cl/ ³⁷ Cl ^c	2.30	0.24	(1)	3.13
¹² C/ ¹³ C	45	3	(3)	89
¹⁴ N/ ¹⁵ N	> 4400		(4)	270
¹⁶ O/ ¹⁷ O	840	200	(5)	2610
¹⁶ O/ ¹⁸ O	1260	280	(5)	499
²⁴ Mg/ ²⁵ Mg	7.60	1.1	(6)	7.94
²⁴ Mg/ ²⁶ Mg	6.50	0.7	(6)	7.19
²⁹ Si/ ³⁰ Si	1.45	0.13	(3)	1.52
²⁸ Si/ ²⁹ Si ^d	> 15.4		(3)	19.8
³⁴ S/ ³³ S	5.55	0.31	(3)	5.62
³² S/ ³⁴ S	21.8	2.6	(3)	22.5

^a the references are the following: (1) this paper; (2) Cernicharo et al. 1987; (3) Cernicharo et al. 2000; (4) Kahane et al. 1988; (5) Kahane et al. 1992; (6) Guélin et al. 1995

^b from Anders & Grevesse 1989

^c average value derived from the above ratios (see text)

^d due to the non negligible opacity of the ²⁸Si bearing lines, only a lower limit could be derived.

4. Comparison with AGB model predictions

We used TP-AGB models obtained with the FRANEC evolutionary code for solar metallicity and initial masses 1.5, 3 and 5 M_{\odot} , adopting the Reimers' parameterization (Reimers 1975) for mass loss ($\eta = 0.7, 1.5$ and 10, respectively). In the 1.5 and 5 M_{\odot} models, mass loss was actually accounted for in a post-process calculation, after computing the series of thermal pulses from a model with constant mass (Gallino et al. 1999). TDU was found to start at the 11th (1.5 M_{\odot}), 8th (3 M_{\odot}) and 4th (5 M_{\odot}) thermal pulse, and the parameter λ was on average 0.24, 0.26 and 0.38 in the three cases. The model details are described elsewhere (Straniero et al. 1997; Gallino et al. 1998; Vaglio et al. 1998; Straniero et al. 2000).

In the most massive stellar model discussed here (the 5 M_{\odot} star), the temperature at the base of the convective envelope during the interpulse never exceeds 50×10^6 K so that a negligible Hot Bottom Burning (HBB, i.e. burning at the inner edge of the convective envelope) occurs, without affecting the CNO nuclei. With FRANEC, efficient HBB is currently found in models of 6 and 7 M_{\odot} and solar metallicity. The minimum mass for its activation decreases with decreasing metallicity (Lattanzio & Forestini 1999; Straniero et al. 2000).

As recalled in the introduction, in TP-AGB stars two neutron bursts are released in different conditions, by the ¹³C and by the ²²Ne neutron source. The effectiveness of the ¹³C neutron source requires the penetration of a limited amount of protons from the envelope into the He intershell zone at every TDU. This allows the formation of a tiny ¹³C pocket in the top layers of the He intershell at H-shell burning reignition. Subse-

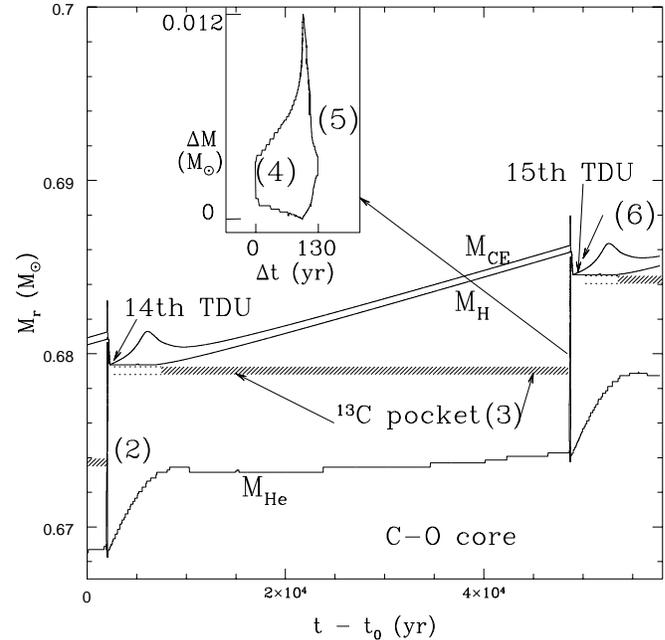


Fig. 3. Structure vs time of a AGB star model of 1.5 M_{\odot} evolving through the interpulse - pulse cycle illustrated in Table 3. The zero of the temporal scale in abscissa corresponds to $t_0 = 1.28 \times 10^8$ yr after the start of core He burning. M_r is the mass coordinate in M_{\odot} . The upper line (labelled M_{CE}) represent the bottom of the convective envelope, the middle line (labelled M_H) indicates the H/He discontinuity, and the bottom line (labelled M_{He}) indicates the He/C-O core discontinuity. The zone comprised between the two last lines is the He intershell. The insert is an enlarged view of the 25th convective pulse, which precedes the 15th TDU episode. The shaded region corresponds to the layers of the ¹³C pocket. For sake of clarity, this region was shifted somewhat downwards from the H/He discontinuity left by the TDU episode. There, a certain amount of protons are assumed to penetrate in the radiative He intershell (the proton pocket, corresponding to the area below TDU, not shaded). Immediately before H reignition protons are captured by the abundant ¹²C, giving rise to the formation of a ¹³C pocket. Before the next TP, all ¹³C nuclei are consumed so that the ¹³C pocket changes into an *s* pocket, before being ingested by the next growing convective instability. This structural scheme can be considered as representative of all AGB models with TDU, apart from numerical details. The bracketed numbers illustrate where and when the abundances reported in the corresponding column numbers of Table 3 were calculated.

quently, the ¹³C nuclei are fully consumed by α -captures in radiative conditions already in the interpulse phase (Straniero et al. 1997). Though some successful models of the ¹³C-pocket formation have been presented, the details are still a matter of debate (see for instance Herwig et al. 1997; Langer et al. 1999) and the amount of ¹³C burnt per nucleosynthesis episode must be assumed as a free parameter of the model. However, this remarkable source of uncertainty does not affect much the resulting abundances of the nuclei discussed here, which mostly depend on the activation of the ²²Ne source, hence on the maximum temperature at the base of the TP convective zone, which in turn depends on the stellar mass. In order to illustrate this, in Fig. 3 we show the temporal evolution of the stellar struc-

Table 3. Enhancement factors with respect to initial abundances at the 25th pulse of the 1.5 M_{\odot} model, $Z = 0.02$.

N_i End 24th TP	He intershell	^{13}C pocket	He intershell Start 25th TP	He intershell End 25th TP	Envelope C/O = 1.3
^{24}Mg	1.048	1.662	1.072	1.048	1.002 (1.002) ^(*)
^{25}Mg	56.60	29.12	22.61	62.04	1.110 (0.972)
^{26}Mg	2.974	6.008	2.103	3.196	1.050 (1.037)
^{28}Si	0.966	0.952	0.984	0.963	0.999 (0.999)
^{29}Si	1.514	0.974	1.176	1.556	1.013 (0.994)
^{30}Si	1.679	0.774	1.216	1.754	1.016 (0.994)
^{32}S	0.907	0.674	0.940	0.901	0.997 (0.999)
^{33}S	2.660	1.124	1.585	2.686	1.049 (1.006)
^{34}S	1.267	1.599	1.142	1.292	1.007 (1.002)
^{36}S	8.999	51.32	7.982	9.347	1.236 (1.205)
^{35}Cl	0.779	0.154	0.853	0.769	0.994 (0.996)
^{37}Cl	12.94	51.56	9.367	13.40	1.350 (1.216)
^{150}Sm	166.14	1270.08	164.41	172.11	5.866 (5.733)

* In brackets: test case with the ^{22}Ne source switched off.

ture during an interpulse - pulse cycle from our 1.5 M_{\odot} model, while in Table 3 we present the enhancement factors with respect to solar of relevant isotopes across the same cycle. This corresponds to the interval between the 14th and the 15th TDU episode.

The phases shown include the end of the previous thermal pulse (24th, whose relevant abundances are listed in Column 2 of Table 3), the s processing through radiative burning inside the tiny ^{13}C pocket during the interpulse (Column 3) followed by dilution of the highly s -enriched pocket by a factor 20 in mass when the 25th convective TP spreads over the whole He intershell. Here the pocket is mixed with material composed at 50% of H-burning ashes and 50% of s -processed material (in the lower part of the He intershell) from the previous TPs. The composition after this dilution is shown in Column 4. Further s -processing occurs through partial ^{22}Ne burning in the TP. This occurs when the convective instability reaches its maximum extension, and lasts for about 6 yr. The final composition in the He intershell after the 25th TP is listed in Column 5.

From a comparison between the various columns one can understand which phases are dominant in the production of the various isotopes. Species lighter than Fe are controlled by ^{22}Ne burning, hence by the pulse temperature. In particular, for ^{26}Mg and ^{37}Cl the ^{22}Ne burning episode increases the previous abundance in the He intershell by a factor ~ 1.5 , and ^{25}Mg by a factor 2.7 (see Columns 4 and 5). The last column of the table gives the enhancement factor in the envelope after the 15th TDU episode, when C/O equals 1.3. Owing to dilution by TDU episodes with the original envelope, the surface enrichment with respect to solar at this stage is rather low, amounting to 11% and to 5%, respectively, in the case of ^{26}Mg and ^{26}Mg , and to 35% in the case of ^{37}Cl . Conversely, the most abundant isotopes ^{24}Mg and ^{35}Cl in the envelope are left about unchanged.

In the last column we also show (in brackets) the envelope enhancement factors resulting by the computation of a test case in which the $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$ reaction was switched off. By com-

paring the two numbers in Column 6 for each isotope one can see how much of the production factor in the envelope has to be ascribed to the ^{22}Ne source.

In the last row of Table 3 we have also included the heavy s -only isotope ^{150}Sm , in order to better state the difference between the heavy neutron-rich species and the lighter nuclei studied here. This last row shows that the abundance of ^{150}Sm is almost the same for the two cases of Column 6, since its production is dominated by the ^{13}C neutron source.

The observational results for Mg and Cl isotope ratios in the circumstellar envelope are compared in Fig. 4 with envelope predictions from the mentioned AGB models of two different initial mass and for different choices of the ^{13}C amount in the pocket (for silicon and sulfur, the measured and predicted ratios are compatible but will not be discussed here since the present observational errorbars are too large to provide any constrain on the models). Cases labelled ST correspond to the models defined as *standard* in Gallino et al. (1998) for stars up to 3 M_{\odot} , and in Vaglio et al. (1998) for intermediate mass AGB models. The other two are obtained by scaling the ^{13}C amount downward by a factor of three (d3), or upward by a factor of two (u2) (see Busso et al. 1999; Lugaro et al. 1999). In Fig. 4 each dot corresponds to a TDU episode; open symbols refer to the late TP-AGB phases where $C/O \geq 1$.

The mass of the envelope is progressively eroded by stellar winds and in a minor way by the growing of the H-burning shell. The TDU mechanism ceases to operate when the envelope mass approaches 0.5 M_{\odot} . This corresponds to the last representative point shown in Fig. 4. There the photospheric ratios C/O and $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ reach 1.4 and 63, respectively, for the 1.5 M_{\odot} model, 1.1 and 103 for the 3 M_{\odot} model, 1.3 and 122 for the 5 M_{\odot} model. From then on the envelope composition does not change anymore, while the star will eventually encounter a phase of superwind (e.g., Iben & Renzini 1983) blowing off the remaining envelope. The cause of this phenomenon may be identified in a dynamical instability driven by radiation pressure

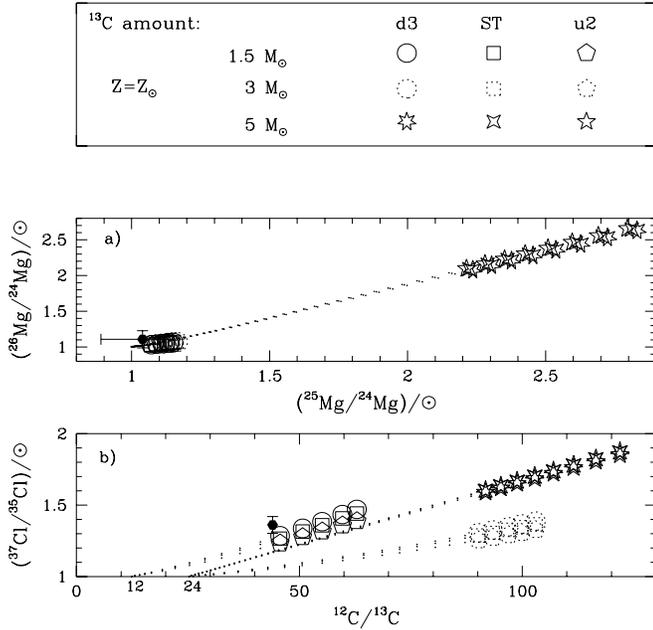


Fig. 4. **a** Computed isotopic ratios of $^{26}\text{Mg}/^{24}\text{Mg}$ vs $^{25}\text{Mg}/^{24}\text{Mg}$ during the TDU phases in the envelope of AGB stars of solar metallicity, initial masses 1.5, 3, and 5 M_{\odot} and for different choices of the ^{13}C amount (d3, ST, u2, see Busso et al. 1999) as compared with measured isotopic ratios (full symbol). Large open symbols are for C-rich envelope, dots are for O-rich conditions. **b** The same as panel **a** for the ratio $^{37}\text{Cl}/^{35}\text{Cl}$ plotted versus $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$.

right at the bottom of the envelope when the luminosity exceeds a critical value (Sweigart 1998; Straniero et al. 2000).

The results shown in Fig. 4 make clear that model predictions are almost independent of the amount of ^{13}C consumed in the pocket (see Lugaro et al. 1999 for a detailed discussion of the behaviour of Si isotopes). From Fig. 4 it appears that the 1.5 and 3 M_{\odot} models are both compatible with the observed Cl and Mg isotopic ratios, whereas the 5 M_{\odot} model predicts too high values for the $^{37}\text{Cl}/^{35}\text{Cl}$ and $^{25,26}\text{Mg}/^{24}\text{Mg}$ ratios with respect to the observations.

Let us discuss the above result in the more general context of AGB modelling. The final Cl and Mg abundances in the envelope might in principle depend of the choices for TDU and mass loss as well as on the efficiency of the ^{22}Ne neutron source during the TPs. As it is well known the lack of a reliable theory for stellar convection and the difficulty of evaluating a suitable mass loss rate may substantially affect our comprehension of AGB evolution. The models here adopted have been computed by using the Schwarzschild criterion for convection, without allowing for any extramixing. This likely provides a minimal efficiency for TDU. We have also used the Reimers' formula to account for the mass loss rate. Other stellar evolutionary models make use of various diffusive or overshoot prescriptions for TDU (e.g., Frost & Lattanzio 1996; Herwig et al. 1997), and of different mass loss criteria.

We can have hints on the effects that a more efficient TDU in the first TPs may have on the predicted isotopic ratios by considering how these last vary from pulse to pulse. For the 1.5 M_{\odot}

model the abundance by mass of ^{37}Cl in the He intershell varies from the 15.th TP (5.th with TDU) to the 25.th TP by a factor 1.5. This increase is related to the slight progressive increase of the peak temperature at the bottom of the TPs, from 2.78×10^8 K at the 15.th TP to 2.99×10^8 K at the 25.th TP. Other factors are involved, such as the decrease with pulse number of the mass of the He intershell and of the overlap factor among adjacent pulses (e.g., Gallino et al. 1998). All these structural characteristics are quite general in low mass AGB stars, being governed by the relatively low value of M_{H} at the first TP with TDU (e.g., Gallino et al. 1998). In models with a more efficient TDU since the first TPs, and a lower number of pulses on the AGB so that about the same final carbon enrichment in the envelope would result, the ^{37}Cl abundance in the envelope might achieve a slightly lower surface enrichment than we do. However, because of dilution with the envelope the effect is not large and our general conclusions would not change. In the case of the 5 M_{\odot} model, the value of M_{H} at the first TDU is already 0.88 M_{\odot} , and the various structural and physical characteristics in the He intershell, among which the temperature history in the TPs, remain almost the same from pulse to pulse (Straniero et al. 2000). Thus the abundances of Cl isotopes in the He intershell reach asymptotic values very quickly, so that any choice for TDU and mass loss would lead to a too high $^{37}\text{Cl}/^{35}\text{Cl}$ ratio at the stellar surface to be compatible with observations. Similar considerations hold for the Mg isotopes.

We therefore argue that, as for the constraints derived from Cl and Mg isotopes, a higher mass estimate for CW Leo is possible only from models where the temperature in the pulses, the temporal evolution of the mass of the He intershell and overlap between adjacent TPs, or the rate of the $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$ reaction (i. e. the fundamental structural parameters in the TP-AGB phase), are substantially different than in our model. Whether these differences are possible is something that deserves scrutiny in another context. In any case, the precision of the new Cl measurement allows us to reduce the ambiguity on the initial stellar mass, showing that this last has to be low enough to keep at low efficiency the ^{22}Ne neutron source. With the models presently adopted this actually requires a mass below 3 M_{\odot} .

A further comment concerns the luminosity. Our 1.5 M_{\odot} model reaches a maximum luminosity at the tip of the TP-AGB phase of $1.15 \times 10^4 L_{\odot}$, which fits in the range deduced by observations. On the contrary, our 5 M_{\odot} is too luminous ($4.15 \times 10^4 L_{\odot}$). This is another argument in favour of a low initial mass.

5. Constraints from CNO isotopes

5.1. The $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio

In Fig. 4 we plotted the envelope Cl isotopic ratio versus the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio, with two different initial ratios at the beginning of the TP-AGB phase: $(^{12}\text{C}/^{13}\text{C})_{\text{ini}} = 12$, or 24, as representative of low-mass AGB stars ($M \leq 2 M_{\odot}$) or of higher mass stars, respectively. This important point needs to be elucidated.

IRC+10216 has a $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio of 45 ± 3 (see Table 2). This value, which is typical of C (N-type) stars with measured

$C/O \approx 1$ (e.g., de Laverny & Gustafsson 1998; Lambert et al. 1986; Jorissen et al. 1992) may appear a bit small in the case of IRC+10216, if we accept for it the value $C/O = 1.4$ inferred from circumstellar modelling (Winters et al. 1994). The estimated C/O ratio is reasonable in the lights of the advanced spectral type of CW Leo (C9.5, see Olofsson et al. 1982) but cannot be trusted at the same level of confidence as the other (observed) ratios discussed here. Therefore, independently of the precise C/O value, we shall simply try to explain how a C-rich atmosphere with the observed $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio can be formed.

It is known that in the red giant phase the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio is modified by the first dredge up, where a photospheric value $\sim 20 - 25$ is predicted by canonical models. This implies that later, on the TP-AGB, mixing of pure ^{12}C by TDU would increase this isotopic ratio to values around 100. However, in red giant stars of low mass $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ values lower than the canonical one have been measured spectroscopically (Gilroy 1989). For stars on the red giant branch and initial masses below $\sim 2 M_{\odot}$, an appropriate value for the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio appears to be between 10 and 15. This indicates that some kind of extramixing, or “cool bottom processing” (CBP) phenomena are at work (Charbonnel 1994, 1995; Wasserburg et al. 1995; Charbonnel et al. 1998), possibly driven by rotational shear (Sweigart & Mengel 1979).

From Fig. 4b it results that CBP, simulated by adopting a $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ value of 12 on the red giant branch, chosen as appropriate for a low mass model, is indeed required to explain the observed carbon isotope ratio in the circumstellar envelope of CW Leo. We notice that in the case of the $1.5 M_{\odot}$ model we predict for this ratio the value of 45 when C/O equals unity (i.e. slightly less than the C/O ratio estimated for CW Leo), at a somewhat earlier phase than the AGB tip. However, in view of the above discussion on C/O this cannot be considered as critical. It would be sufficient in our models to change the η parameter of mass loss, increasing it slightly, to obtain $C/O = 1$ and $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 45$ at the very end of the sequence. Another possibility is to choose a slightly higher progenitor mass, resulting in a somewhat larger dilution of He-intershell material with the envelope. In the absence of a precise measurement for the C/O ratio in CW Leo, all we can say is that our $1.5 M_{\odot}$ AGB model can provide a C-rich envelope with the observed $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio. Conversely, in AGB stars of $M > 2 M_{\odot}$, this is not possible, as the observational evidence excludes the operation of CBP. In stars with $M > 2 M_{\odot}$ the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio reaches about 100 already at $C/O = 1$.

Thanks to CBP, the same low mass star holds to explain the high value of the $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ ratio (Boothroyd et al. 1995), for which only a lower limit exists. In principle, the predicted $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio in the AGB phase might be kept low also for higher stellar masses, but only if a moderate HBB occurs, consuming some of the ^{12}C in the envelope (Guélin et al. 1995; Weigelt et al. 1998).

5.2. The $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ and $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ ratios

Another crucial constraint comes from the oxygen isotopes, and this is a further decisive argument in favour of a low initial mass. Indeed, as shown by Boothroyd et al. (1995) and Lattanzio &

Boothroyd (1997), the low value of $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$, and the high value of $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ measured in IRC+10216 (see Table 2) cannot be explained by HBB, even of moderate entity. When represented in a 3-isotope plot displaying the $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ ratio versus the $^{17}\text{O}/^{16}\text{O}$ one, the data (see Fig. 2 of Wasserburg et al. 1995) falls in a region that cannot be reached by model curves from HBB calculations. The same authors show instead as those isotopic ratios, which are not accounted for by the canonical first dredge up, are a natural result of CBP. This fact again necessarily implies a low initial mass.

As a final comment, it can be noticed that our conclusion about a low initial mass for CW Leo places it in the already known family of dust-enshrouded low-mass carbon stars. This was indirectly recognized through high precision isotopic measurements in presolar SiC grains recovered from meteorites (Zinner 1997; Hoppe & Ott 1997), while comparisons with nucleosynthesis models similar to the one performed here demonstrated that indeed these grains condensed in the circumstellar envelopes of low-mass carbon stars (Gallino et al. 1997).

6. Conclusions

New observations of four transitions, belonging to two chlorine bearing molecules, have allowed to derive an accurate and reliable measurement of the $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ ratio towards IRC+10216, the circumstellar envelope of the carbon-rich AGB star CW Leo. It represents the first observational evidence for a significant deviation from solar of an isotopic ratio of elements heavier than the CNO in this circumstellar envelope. The high accuracy of the new data presented here for Cl, combined with the carbon and magnesium isotopic ratios previously measured in IRC+10216, allow nucleosynthesis models to constrain the initial stellar mass better than previously possible (Guélin et al. 1995; Forestini & Charbonnel 1997). The inferred mass is low, $M \leq 2 M_{\odot}$, as often assumed in IRC+10216 envelope modelling. Our results are obtained with the Reimers (1975) choice for the mass loss rate and with the TDU efficiency provided by the Schwarzschild criterion inside the FRANEC evolutionary code. We have argued, from the dependence of Cl isotope abundances on the pulse number, and from independent constraints provided by carbon, magnesium and oxygen isotopes, that our results for the stellar mass remain valid independently of several details (mass loss prescriptions, TDU) of the specific stellar code adopted. A dedicated check from *s*-process calculations in different evolutionary codes would be clearly useful.

Acknowledgements. We are indebted to an anonymous referee for useful suggestions. It is a pleasure to thank Dr. Uli Ott for his careful and useful check of the manuscript. This work was partly supported by the MURST Italian grant Cofin98. ML gratefully acknowledges the support of a OPRS grant.

References

- Anders E., Grevesse N., 1989, *Geochim. Cosmochim. Acta* 53, 197
- Boothroyd A.I., Sackmann I.-J., Wasserburg G.J., 1995, *ApJ* 442, L21
- Busso M., Lambert D.L., Beglio L., et al., 1995, *ApJ* 446, 775

Chapitre 2

Rapports isotopiques du Carbone dans les étoiles de type “J”

Sommaire

2.1	Intérêt de la mesure	221
2.2	“Constraints on stellar evolution by modelling the observed $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios in three J-type stars”	223

Afin de souligner le contexte scientifique de l'article en cours de soumission à *Astronomy & Astrophysics* qui sera présenté à la section III-2.2.3, nous allons exposer l'intérêt des observations effectuées en rappelant les derniers travaux sur ces objets, les avantages et les difficultés liés à l'interprétation des mesures du rapport isotopique du Carbone. Ensuite, nous insisterons sur la méthode utilisée pour ajuster les modèles présentés dans l'article aux observations; cette étape est critique car les valeurs en découlant ont une grande influence sur l'analyse réalisée ensuite en terme d'évolution stellaire.

2.1 Intérêt de la mesure

2.1.1 Petit historique

Les étoiles de type J sont carbonées rapport ($C/O > 1$) et présentent un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ faible (entre 3 et 9) par rapport aux autres étoiles carbonées pour lesquelles le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ est plutôt compris entre 30 et 80 d'après les observations photosphériques (Olofsson *et al.* 1993a). Parmi les étoiles de type “J”, trois d'entre elles, RY Dra , T Lyr et Y CVn , ont fait l'objet de plusieurs mesures indépendantes. En particulier, depuis 1996, deux équipes utilisant des observations analogues s'opposent sur la valeur des rapports $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ qu'elles en déduisent. Récemment, une série d'articles est en partie consacrée à la valeur du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ mesuré dans ces étoiles: Ohnaka & Tsuji (1996), de Laverny & Gustafsson (1998), Ohnaka & Tsuji (1998), de Laverny & Gustafsson (1999) et Ohnaka & Tsuji (1999). Alors pourquoi refaire cette détermination?

Tout d'abord, le Carbone est le deuxième élément le plus abondant après l'Hydrogène dans les enveloppes circumstellaires. Il paraît donc normal que le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ soit dans les premiers rapports à déterminer. De plus, le Carbone étant sensible à tous les épisodes de nucléosynthèse et de mélange se déroulant au sein de l'étoile, la connaissance de ce rapport

isotopique permet de contraindre les épisodes de DUP3 et de HBB subis par l'étoile (voir les chapitres I-3 et III-3), ce qui est un des objectifs de cette thèse.

Enfin, les travaux mentionnés ci-dessus utilisent des moyens optiques ou infrarouges et les valeurs obtenus dans les travaux cités ci-dessus s'excluent les unes les autres. L'idée est d'utiliser sur ces sources les différents avantages des observations radiométriques listés au chapitre I-2. Cela aura comme conséquence en particulier de simplifier l'analyse de ce rapport. Une détermination du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ à partir d'observations moléculaires radio a déjà été effectué par Jura *et al.* (1988). Cependant les détecteurs ont fait depuis des progrès considérables et ils permettent maintenant d'améliorer le rapport signal sur bruit. De plus, l'originalité des mesures proposées réside dans l'analyse simultanée de plusieurs transitions de plusieurs molécules.

2.1.2 Difficultés d'interprétation pour les étoiles de type "J"

Globalement, les paramètres obtenus à partir des observations moléculaires permettant de caractériser les étoiles de type "J" discutées ici sont les valeurs de $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, \dot{M} et C/O. Leur interprétation mène à trois hypothèses:

(1) L'analyse de nos observations conduit à un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ comparable à la valeur d'équilibre du cycle CNO, qui vaut ~ 3.5 d'après Clayton (1983). Si les barres d'erreurs rendent possible la valeur d'équilibre, on peut supposer que ces étoiles subissent le HBB et qu'elles ont par conséquent des masses supérieures ou égales à $5 M_{\odot}$.

(2) Ces étoiles sont aussi carbonées. Elles montrent des rapports C/O (voir Forestini & Charbonnel (1997)) compris entre 1.1 et 1.3 (Lambert *et al.* 1986). Ce fait est, a priori, incompatible avec la présence de HBB car ce dernier, transformant le Carbone en Azote, empêche l'étoile d'être carbonée *tant qu'il opère*. Or, le HBB cesse à deux occasions:

- au moment de l'extinction temporaire de la couche en fusion d'Hydrogène après un pulse thermique, pendant le troisième dredge-up. A ce moment là, la quantité de Carbone apportée par le DUP3 fait croître le rapport C/O, mais pas assez pour expliquer les valeurs de Lambert *et al.* (1986).
- une fois que la perte de masse cumulée a été assez importante afin de faire baisser suffisamment la température à la base de l'enveloppe convective (Boothroyd & Sackmann 1992). Dans ce cas, le rapport C/O remonte petit à petit jusqu'à des valeurs compatibles (Forestini & Charbonnel 1997) avec celles de Lambert *et al.* (1986).

(3) Les taux de perte de masse observés pour ces étoiles ont des valeurs très faibles: entre $4 \cdot 10^{-8} M_{\odot} \cdot \text{yr}^{-1}$ et $7 \cdot 10^{-8} M_{\odot} \cdot \text{yr}^{-1}$ (Olofsson *et al.* 1993b). Ces valeurs sont incompatibles avec un rapport C/O > 1 dans une étoile de $M_{\star} \geq 5 M_{\odot}$ d'après Frost (1997) car la luminosité atteinte par ces étoiles engendre un taux de perte de masse de plusieurs ordres de grandeurs supérieur aux valeurs données dans Olofsson *et al.* (1993b) (voir le chapitre I-3).

On le voit, ces trois hypothèses ne sont pas compatibles les unes avec les autres: c'est un facteur de plus en faveur d'une détermination précise et cohérente du couple $(^{12}\text{C}/^{13}\text{C}, \dot{M})$, comme le permettent les observations radio (voir le chapitre II-5).

2.2 “Constraints on stellar evolution by modelling the observed $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$ ratios in three J-type stars”

2.2.1 Des rapports d’intensité aux rapports atomiques

Les deux questions générales qui se posent pour l’interprétation des rapports isotopiques vont être examinées successivement.

Tout d’abord, les rapports d’intensité des raies sont-ils représentatifs des rapports d’abondances des molécules observées ?

Les différents facteurs permettant de répondre à cette question sont les suivants :

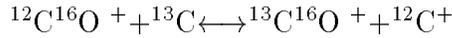
- *La température du rayonnement du fond du ciel.* En effet, comme elle s’additionne à l’intensité émise dans les deux raies, elle modifie le rapport d’intensité de ces deux raies. Pour que les rapports des intensités des raies observées soient comparables aux abondances des molécules, il faut donc, soit que l’intensité du rayonnement ambiant soit négligeable par rapport aux deux intensités des raies, soit en tenir compte pour ” déconvoluer ” le rapport.
- *Les conditions d’excitation des deux raies observées.* Une raie peut très bien être plus intense que l’autre uniquement parce que la fréquence du rayonnement ambiant est plus proche de la température d’excitation de cette transition que de l’autre. Pour que les rapports des intensités des raies observées soient comparables aux abondances des molécules, il faut donc, que les conditions d’excitation des molécules (températures et rayonnement excitant) soient comparables.
- *La profondeur optique des deux raies observées.* La valeur de la profondeur optique est primordiale car une raie peut être peu intense soit parce que la molécule est très peu abondante (optiquement fine) soit parce qu’elle est très abondante et donc très absorbée (optiquement épaisse). De la même façon, l’intensité dépendra aussi de l’opacité de la molécule qui rentre dans la valeur de la profondeur optique. Une modélisation soignée de la profondeur optique est donc nécessaire pour interpréter les rapports d’intensité en terme de rapports d’abondances moléculaires ; les deux rapports n’étant équivalents sans ” déconvolution ” de l’effet de profondeur optique que si les deux transitions sont optiquement fines.
- *La répartition géométrique des molécules observées.* Supposons en effet que la molécule observée dans la raie au dénominateur du rapport soit répartie dans une coquille beaucoup plus étendue que celle observée au numérateur. Toutes autres choses égales par ailleurs (abondances, profondeur optiques...), l’intensité observée pour le dénominateur sera donc plus importante mais non pas à cause d’une abondance plus élevée mais à cause d’une extension géométrique plus importante ; faussant ainsi l’interprétation du rapport d’intensités en terme de rapport d’abondances. Il est donc nécessaire que la répartition spatiale des deux molécules observées soient les mêmes.

La deuxième question qui pose pour remonter aux rapports d’intensité atomiques est la suivante:

Les rapports d’abondances des molécules sont-ils représentatifs des rapports d’abondances des espèces atomiques ?

Les différents facteurs permettant de répondre à cette question sont les suivants :

- *Le fractionnement chimique.* Cette réaction chimique influe sur les rapports d’abondances moléculaires et atomiques car, sur l’exemple du monoxyde de carbone, elle fait intervenir à la fois les isotopes des molécules et ceux des atomes:



Cependant cette classe de réaction n’est privilégiée dans un sens ou dans un autre qu’à des températures très basses qui correspondent en général à l’extérieur des enveloppes circumstellaires, là où les molécules sont dissociées.

- *La photodissociation sélective.* Cet effet consiste à la prise en compte des interactions des molécules avec les rayons ultraviolets environnant qui vont les dissocier et changer ainsi leur répartition spatiale. Ces interactions dépendent de l’importance du rayonnement UV et aussi de l’abondance des molécules ; une effet d’écran permettant aux molécules les plus abondantes de se protéger des UV.

Pour pouvoir identifier le rapport d’abondance moléculaire au rapport d’abondance atomique, il faut donc que le fractionnement chimique et que la dissociation sélective soient inopérants dans l’enveloppe.

2.2.2 Méthode d’ajustement des modèles

Les observations effectuées consistent en la mesure de l’intensité de trois transitions rotationnelles différentes pour quatre molécules différentes. $\Delta J = 1 \pm 0$, $\Delta J = 2 \pm 1$ et $\Delta J = 3 \pm 2$ pour les molécules $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ et $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, et $\Delta J = 2 \pm 1$, $\Delta J = 3 \pm 2$ et $\Delta J = 5 \pm 4$ pour les molécules $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ et $^{13}\text{C}^{32}\text{S}$. Pour RY Dra et Y CVn, 12 raies sont donc modélisables contre seulement 6 pour T Lyr, trop peu lumineuse pour permettre la mesure des transitions de la molécule CS. Grâce au programme de transfert de rayonnement détaillé au chapitre II-5, nous sommes en mesure d’ajuster avec un même modèle physique le taux de perte de masse et le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ avec une bonne précision, compte tenu du nombre important d’observations et de leur diversité.

Si l’on fait le compte des paramètres libres du programme de transfert de rayonnement qui sont donnés dans le tableau II-5.2 et si on ajoute quelques hypothèses supplémentaires, on obtient une série de seulement 11 paramètres:

$$\dot{M}, R_{CO}, R_{CS}, f_{^{12}\text{CO}}, f_{^{13}\text{CO}}, f_{^{12}\text{CS}}, f_{^{13}\text{CS}}, T_{min} = T_k(R_{min}), V_{exp}, V_{tur}, V_{lsr}$$

Les différentes hypothèses permettant de réduire l’ensemble des paramètres du tableau II-5.2 à ces 11 paramètres sont les suivantes:

- on fixe $R_{eff} = 10^{13}\text{cm}$ (le rayon de la source infrarouge modélisant l’étoile) et $R_{min} = 0.5 \cdot 10^{15}\text{cm}$ (le rayon interne de l’enveloppe) après avoir vérifié que cela n’a pas beaucoup d’influence sur les résultats et on suppose que la chimie dans l’enveloppe est telle que $R_{^{13}\text{CO}} \sim R_{^{12}\text{CO}}$ et $R_{^{13}\text{CS}} \sim R_{^{12}\text{CS}}$, ce qui est réaliste d’après Mamon *et al.* (1988).
- on fixe $N_{rot} = 30$ et $N_{vib} = 2$.
- on prend une loi de puissance pour la température d’exposant $\alpha_T = \pm 0.7$. compatible avec les résultats de Larsen & Olofson (1999) et Schöier & Olofsson (2000) qui prennent en compte la résolution de l’équilibre thermique de l’enveloppe et non pas une loi had-hoc.

La figure III-2.1 présente la démarche suivie pour ajuster les 12 raies.

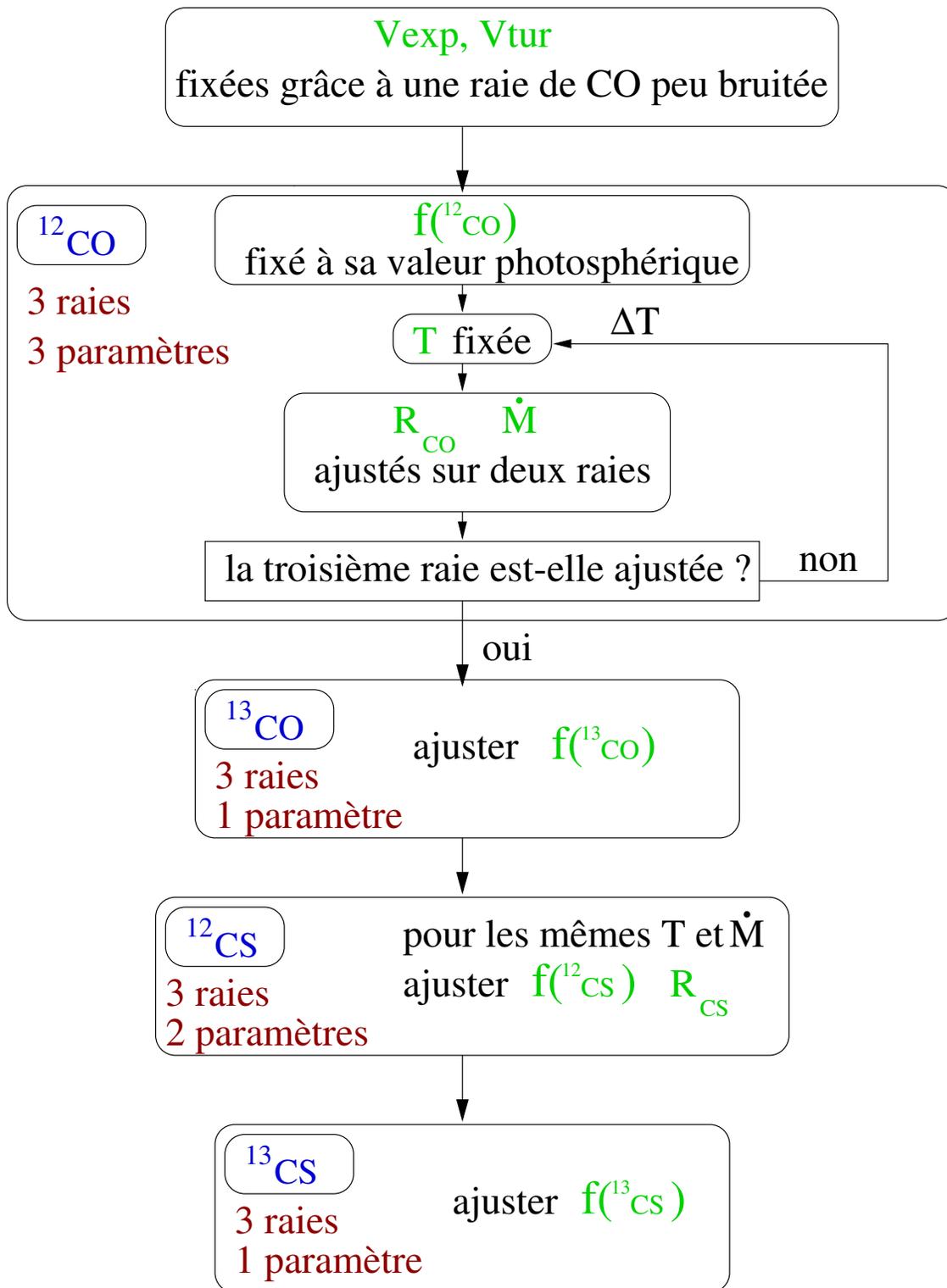


FIG. 2.1 – Méthode suivie pour l'ajustement des 12 raies observées par source.

Elle se résume comme suit:

- les vitesses sont fixées pour toute la suite de la procédure en utilisant la raie de $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ possédant le plus fort rapport signal sur bruit.
- l’abondance relative de $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ est fixée à sa valeur photosphérique, donnée par Lambert *et al.* (1986)
- commence ensuite un processus itératif qui consiste à choisir une température, puis à ajuster le couple $(R_{12\text{CO}}, \dot{M})$ sur deux raies fixées. La température est modifiée jusqu’à ce que les trois raies de $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ soient correctement ajustées par le triplet $(T_{min}, R_{12\text{CO}}, \dot{M})$
- en conservant le jeu de paramètres trouvé, on ajuste alors $f_{13\text{CO}}$ sur les 3 transitions de $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$.
- puis, en relachant la contrainte sur le rayon, le couple $(R_{12\text{CS}}, f_{12\text{CS}})$ est ajusté sur les raies de $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$. En effet, l’abondance plus faible de CS l’empêche de se protéger aussi efficacement que CO des UV interstellaires par effet “bouclier” décrits dans Mamon *et al.* (1988). Cela a pour conséquence de diminuer le rayon auquel la molécule va se dissocier.
- enfin, on ajuste $f_{13\text{CS}}$ sur les 3 transitions de $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$.

Pour réaliser chaque ajustement, le calcul du χ^2 , quantifiant la différence entre le modèle et la raie observée, a été incorporé au programme de transfert radiatif. L’ajustement est accepté quand le χ^2 est minimum.

2.2.3 article

A&A manuscript no.

(will be inserted by hand later)

Your thesaurus codes are:

08(08.03.1;08.03.4;08.01.1;08.13.2;13.18.7;02.14.1)

ASTRONOMY
AND
ASTROPHYSICS

Precise determination of carbon isotopic ratios in J-type stars: radio molecular line analysis.

E. Dufour¹, C. Kahane¹, J.S. Greaves², and M. Forestini¹¹ Observatoire de Grenoble - B.P. 53 - F-38041 Grenoble Cedex 9 - France² Joint Astronomy Center, 660 N. A'ōhōkū Place, University Park, Hilo, Hawaii 96720, U.S.A.

Received, accepted

Abstract. Key words: stars: carbon – stars: circumstellar matter – stars: abundances – stars: mass loss – radio lines: molecular: circumstellar – nuclear reactions, nucleosynthesis, abundances

We have performed a multitransitions analysis of the molecular emission of four ¹³C -rich sources, using the several rotational transitions of ¹²CO, ¹³CO, ¹²CS, ¹³CS observed with the JCMT and the 30m IRAM telescopes. We have derived for each envelope the mass loss rate, the source size and the molecular abundance ratios ¹²CO / ¹³CO and ¹²CS / ¹³CS both from a straightforward line intensity analysis and from a radiative transfer analysis. We conclude in particular that in such low mass loss rate envelopes ($1 \cdot 10^{-7} M_{\odot} \text{yr}^{-1} < \dot{M} < 3 \cdot 10^{-7} M_{\odot} \text{yr}^{-1}$), isotopic abundances ratios simply derived from the CO and CS line intensities provide reliable estimates of the elemental ¹²C / ¹³C isotopic ratio. We derive ¹²C / ¹³C isotopic ratios ranging from 2.1 to 2.6, i.e. significantly smaller than the CNO equilibrium ratio and very difficult to conciliate with predictions of single star evolution scenarii for such low mass loss rate objects.

1. Introduction

When studying the mechanisms that influence the composition of the matter expelled by AGB stars, the ¹²C / ¹³C ratio plays a crucial role because it is sensitive to every process occurring in the burning regions of the star. Hot bottom burning, mixing, dredge-up: all these phenomena have to be considered to explain the value of this ratio and the spectral type of a star in the sequence M-MS-S-SC-C. In particular, J-type carbon stars do not match very well this scheme because they show very little ¹²C / ¹³C ratios which could be too low to be explained by the equilibrium value of the CNO cycle. The uncertainties on the measurements and the sensitivity of the model used to derive these ratios are thus very important in this context.

A comprehensive study of the carbon, oxygen and nitrogen abundances towards 30 bright carbon stars has been performed more than ten years ago by Lambert et al. (1986), from high resolution infrared spectroscopy of CO and CN vibration-rotation bands. Among this sample, Lambert et al. found 4 stars presenting remarkably low ¹²C / ¹³C ratios, ~ 4 , i.e. an order of magnitude lower than the average ratio of the sample ($30 < ^{12}\text{C} / ^{13}\text{C} < 70$). From radio observations of the (J = 1–0) rotational lines of CO isotopes, performed with the IRAM 30m telescope, Jura et al. (1988) derived also very low ¹²C / ¹³C ratios towards three of these extreme ¹³C -rich stars (Y CVn, RY Dra and T Lyr). They even suggested that the ¹²C / ¹³C ratios could be a factor 2 smaller than previously believed. However, as this result was based on an *elementary* analysis (assuming negligible line opacities) of a *single* transition of isotopomers of a *single* chemical species, bias due to radiative transfer, chemical fractionation and selective photodissociation effects, although probably small, could not be definitely ruled out. On the other hand, derivation of ¹²C / ¹³C from optical measurements of the photospheric lines relies on non straightforward analysis and modeling techniques and discrepancies larger than a factor two may appear [see the long lasting controversy between Ohnaka & Tsuji (1996, 1998, 1999) and de Laverny & Gustafsson (1998, 1999)]. These uncertainties represent an additional argument to revisit the ¹²C / ¹³C determination from a significantly larger set of molecular radio lines.

To be able to improve, test and discuss the reliability of the ¹²C / ¹³C ratios derived from molecular transitions, we have performed with the IRAM 30m telescope and with the James Clerk Maxwell Telescope (JCMT) multi-transition observations of the isotopomers of CO and CS towards the three brightest envelopes of ¹³C -rich stars (Y CVn, RY Dra and T Lyr). In addition, we have also obtained CO(2-1) observations towards the fourth ¹³C -rich star, WZ Cas, which had not been observed previously in molecular radio emission. These observations are presented in Section 2. To take into account radiative transfer effects, we have modelled the observed transitions. The model and its results are described in section 3. Comparison of the ¹²C / ¹³C ratios obtained from CO and CS observation provides informations on chemical fractionation and se-

lective photodissociation effects, as discussed in Section 4. Our results are then compared to previous radio and optical measurements and discussed in terms of stellar evolution in Section 5.

2. Observations and data reduction

CO and CS observations have been performed with the IRAM 30m telescope and with the JCMT. The telescopes main characteristics (antenna half power beam width HPBW, efficiency ratio η , receiver temperatures) and the observing conditions (date, typical zenith opacity τ) are summarized in Table 1 and detailed below.

2.1. IRAM 30m observations

The selected stars are the four most extreme J-type stars observed by Lambert et al. (1986): according to optical and previous radio measurements they show $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios of the order of 4 or less. Observations of CO (J=1-0 and J=2-1) and of CS (J=2-1, J=3-2, J=5-4) were carried out with the IRAM 30m telescope, at Pico Veleta (Spain). Most observations were performed in September 1996 and completed by a few spectra obtained in March 1988, after a careful check of the relative calibrations of both sets of data. The CS (J=5-4) observations, which show a poorer signal to noise ratio than the spectra obtained with the JCMT (see below), will not be analyzed in the following, except in comparison with the JCMT observations, both as a check of the lines relative calibration and to derive an estimate of the molecular sources sizes.

The telescope was equipped with 3mm and 1mm SIS receivers, operating simultaneously in single sideband (SSB) mode. The antenna temperature scale was calibrated every 10 minutes by successively observing a cold load, a room temperature load, and the sky. The temperatures reported in the text and the figures are main beam temperatures, T_{mb} ; they are related to equivalent antenna temperatures above the atmosphere, T_A^* , by $T_{mb} = T_A^*/\eta$, where η is the ratio of the main beam to the forward efficiencies. The observations were made in wobbler switching mode, i.e. the secondary mirror was wobbled every 3 sec, with an amplitude of $240''$. This technique provides very flat baselines. The focus and the receivers alignment were checked at each frequency change by observing planets. The pointing was checked every hour on planets or a nearby continuum sources and was found to remain accurate within 3 to 5" (rms) in one hour intervals.

In 1988, spectra were obtained only with a low resolution backend (a filterbank of 512 channels 1MHz wide). In 1996, we used simultaneously an autocorrelator, providing a spectral resolution of 80 kHz.

The telescope main characteristics (antenna half power beam width HPBW, efficiency ratio η , receiver temperatures) and the observing conditions (date, typical zenith opacity τ) are reported in Table 1.

For most transitions, in addition to the central position, we have observed a few offset positions (generally 6" from the

central position). These small maps allowed us both to measure the brightness distribution maximum, even in case of slight mispointing of the envelope center and, when the molecular source happened to be resolved by the telescope beam, to estimate its size. The full width at half maximum (FWHM) of the molecular brightness distributions, assumed to be gaussian and deconvolved from the gaussian telescope beam, is reported in Table 2, whenever it could be measured.

2.2. JCMT Observations

To check the relative calibrations of the JCMT and the IRAM 30m telescope, we have compared the intensities of standard ^{12}CO (J=2-1) spectra observed towards the carbon-rich envelope IRC+10216. The CO source in this envelope is extended enough not to suffer from beam dilution effects with these two antennas and we expect to observe the same main beam brightness temperature with both telescopes. The spectra observed with both telescopes show exactly the same shape, which is a good indication that during each observation the antennas were accurately pointed towards the envelope center. In T_{mb} units, the JCMT reference spectrum is 1.30 times stronger than the IRAM spectrum; as this difference appears larger than expected from calibration uncertainties (less than 15% on such a well studied envelope), we have decided to apply a systematic correction factor of 1.3 to the JCMT spectra before modeling them together with the IRAM 30m spectra. We can check this correction factor with the ^{12}CS (J=5-4) lines observed towards IRC+10216 with the same telescope. In this case, the molecular source is not large enough to neglect beam dilution effects. Assuming gaussian distributions, if the full width at half maximum of the CS source is denoted a , the JCMT HPBW b and the IRAM 30m HPBW c , the intensity ratio of the CS lines observed with both telescopes is

$$T_{mb}(30m)/T_{mb}(JCMT) = (a^2 + b^2)/(a^2 + c^2) \quad (1)$$

Without relative calibration correction, the IRAM 30m spectrum appears 1.3 times stronger than the JCMT spectrum. If this difference is attributed to a beam dilution effect, it corresponds, with the HPBW values reported in Table 1, to a CS source diameter of 42", significantly larger than observed (see Lucas et al. 1995, who derived a CS source radius of the order of 12" from interferometric observations). In contrast, if a correction factor of 1.3 is applied, the "corrected" intensity ratio is 1.7, which corresponds to a more reasonable source diameter of 26".

2.3. Line fit

Except in the few cases where only 1 MHz spectra were available, we have smoothed all the spectra to the same velocity resolution of 1.1 km s⁻¹, to increase the signal to noise ratios. Linear baselines have been subtracted to the spectra. To derive the

Table 1: Observations summary and telescopes characteristics

Transition	Frequency (MHz)	Star	Telescope	Date	HPBW (arcsec)	η	T_{rec} (K)	τ
¹² CO (1-0)	115271.204	Y CVn , RY Dra , T Lyr	IRAM	sep 96	20.8	0.79	90	.4
	230537.990	T Lyr , WZ Cas	IRAM	mar 88	12.0	0.50	230	.1
		Y CVn , RY Dra	IRAM	sep 96	10.4	0.48	160	.4
	345796.000	Y CVn	JCMT	jun 94	17.1	0.62	???	.5
		T Lyr	JCMT	feb 94	17.1	0.62	???	.06
RY Dra	JCMT	jan 95	17.1	0.62	???	.4		
¹³ CO (1-0)	110201.370	Y CVn , RY Dra , T Lyr	IRAM	sep 96	21.8	0.81	100	.1
	220398.682	T Lyr , WZ Cas	IRAM	mar 88	12.5	0.50	230	.08
		Y CVn , RY Dra	IRAM	sep 96	10.9	0.48	160	.2
	330588.100	Y CVn , RY Dra	JCMT	dec 94	17.9	0.62	???	.2
		T Lyr	JCMT	feb 94	17.9	0.62	???	.03
¹² CS (2-1)	97980.968	Y CVn , RY Dra	IRAM	sep 96	24.5	0.81	180	.1
	146969.049	Y CVn , RY Dra	IRAM	sep 96	16.3	0.58	150	.2
	244935.606	Y CVn , RY Dra	IRAM	sep 96	9.8	0.42	270	.6
		Y CVn , RY Dra	JCMT	jan 96	24.1	0.62	???	.3
¹³ CS (2-1)	92494.299	Y CVn , RY Dra	IRAM	sep 96	25.0	0.75	110	.1
	146969.049	Y CVn , RY Dra	IRAM	sep 96	17.2	0.58	110	.06
	231220.000	Y CVn , RY Dra	IRAM	sep 96	12.4	0.48	180	.5
		Y CVn , RY Dra	JCMT	jan 96	25.5	0.62	???	.3

line characteristics, we have fitted the observed profiles with truncated convex or concave parabola, as usual for spherical uniformly expanding shells. The observed spectra and the fitted profiles are plotted in Figures 1 to 4. The fit parameters are reported in Table 2 : v_{lsr} is given by the model profile central velocity, v_{exp} is half the model linewidth (deconvolved from the spectral resolution), T_{mb} and $\int T_{mb} dv$ are respectively the central and the integrated model line intensities. The errorbars reported in Table 2 are only fit uncertainties. To take into account the instrumental uncertainties, they have to be quadratically added to the calibration uncertainties (20 %) or to the spectral resolution (1.1 km s⁻¹ in most cases, respectively 1.3 and 1.4 km s⁻¹ for the ¹²CO and ¹³CO (J=2-1) line towards WZ Cas and T Lyr, for which only 1MHz filterbank was available).

The dispersion between the expansion velocities derived from different transitions of the same molecule or transitions belonging to different molecules is within the errorbars. Thus there is no kinematic indication that the lines could arise from very distinct envelope layers. For two lines showing poor signal to noise ratio (¹³CS (J=2-1) in Y CVn and in RY Dra), the fits have been done with fixed expansion velocities. It can also be noticed that the expansion velocities are, except for T Lyr, significantly weaker than the average values measured in carbon rich envelopes (typically 15 km s⁻¹ see for instance Loup et al., 1993, hereafter L93). Most of the lines present flat top shapes, as expected for optically thin unresolved emission from spherically expanding envelopes.

The fitted profiles are plotted in Figures 1 to 4, as dashed lines superimposed to the observed spectra.

2.4. Sources size

For most of the transitions observed with the IRAM 30m telescope, we have obtained small maps, usually five points crosses, including the central position and four positions offsets by 6'' in Right Ascension or in Declination. Fitting a 2D-gaussian distribution to the observed integrated intensities gives an estimate of the molecular source size, convolved with the telescope beam. The deconvolved Full Widths at Half Maximum (denoted h) are given in Table ???. It appears that the molecular sources are hardly resolved by the 30m telescope beam, which is coherent with the line shapes. Sizes derived from ¹²CO and ¹³CO do not show significant differences and we conclude that both species are likely to be similarly distributed in the envelope. In contrast, sizes derived from (1-0) transitions appears larger than sizes derived from (2-1) transitions. This easily explains as an excitation effect : (2-1) transitions require higher excitation conditions and arise from more internal layers than (1-0) transitions. This effect is systematically observed for instance in the atlas of CO(1-0) and (2-1) maps published by Neri et al. (1998). The size of the CS brightness distribution towards Y CVn is the same as that of the telescope beam and we conclude that this molecular source is completely unresolved.

Table 2: Parameters of the model line fits

Star	Line	h	v_{lsr}	v_{exp}	σ	T_{mb}	σ	$\int T_{mb} dv$	σ	
		"	(km s^{-1})			(mK)		(K km s^{-1})		
WZ Cas	^{12}CO	2-1	10	-25.8	2.9	0.2	770	20	3.25	0.20
	^{13}CO	2-1	11	-25.7	3.1	0.2	330	40	1.71	0.13
T Lyr	^{12}CO	1-0		7.6	12.7	0.2	63	5	1.76	0.11
		2-1	9	6.3	13.4	0.3	325	30	7.12	0.27
		3-2		7.8	11.6	0.1	205	18	4.32	0.13
	^{13}CO	1-0		7.8	12.8	0.4	27	1	0.69	0.07
		2-1	6	6.1	14.1	0.3	118	11	2.81	0.12
		3-2		9.1	13.2	0.1	58	10	1.35	0.14
RY Dra	^{12}CO	1-0	9	-5.3	9.3	0.1	515	43	9.65	0.23
		2-1	6	-5.0	8.3	0.1	1217	116	19.93	0.36
		3-2		-4.6	9.5	0.2	999	87	14.99	0.44
	^{13}CO	1-0		-4.9	9.9	0.1	188	15	3.75	0.08
		2-1		-5.1	10.4	0.1	464	39	9.34	0.30
		3-2		-5.9	9.5	0.3	226	28	3.66	0.25
	^{12}CS	2-1		-4.1	11.0	0.1	157	18	2.36	0.15
		3-2		-4.6	7.3	0.1	479	47	6.43	0.14
		5-4		-5.0	8.5	0.6	160	18	1.96	0.10
	^{13}CS	2-1		-5.8	9.5	0.0	31	4	0.53	0.06
		3-2		-3.9	8.1	0.1	89	13	1.17	0.09
		5-4		-6.0	7.3	0.3	38	5	0.51	0.03
Y CVn	^{12}CO	1-0	15	21.1	7.8	0.1	817	69	11.44	0.16
		2-1	9	20.8	7.7	0.1	2059	178	25.49	0.38
		3-2		20.7	7.0	0.2	1040	116	12.80	0.42
	^{13}CO	1-0	13	20.1	7.9	0.1	359	32	5.74	0.11
		2-1	6	21.3	7.7	0.1	797	74	11.15	0.24
		3-2		20.5	7.5	0.2	412	45	5.08	0.18
	^{12}CS	2-1	U	21.6	6.3	0.5	230	36	2.40	0.16
		3-2		22.0	7.9	0.2	627	55	7.06	0.12
		5-4		20.6	6.8	0.3	261	30	2.68	0.09
	^{13}CS	2-1		23.4	7.7	0.0	35	4	0.43	0.06
		3-2		22.1	7.0	0.3	156	20	1.77	0.09
		5-4		22.2	7.8	0.2	74	10	0.71	0.04

2.5. Mass loss rate and photodissociation radii

Based on the works of Mamon et al. (1988), hereafter M88, (fitted by Planesas et al., 1990) and Knap and Morris (1985), L93 have used a system of two self-consistent equations in order to provide the couple (\dot{M}, r_{CO}) , which can be written for the a telescope of diameter $D(m)$:

$$\dot{M} = 2.45 \cdot 10^{-8} \frac{v_{exp}^2 d^2 T_{mb}}{D^2 x^{0.85}} F^{-1}(r_{CO}) M_{\odot} yr^{-1} \quad (2)$$

$$r_{CO} = 73 \cdot 10^{15} \left(\frac{\dot{M}}{10^{-6}} \right)^{0.58} \left(\frac{10}{v_{exp}} \right)^{0.4} \left(\frac{x}{4 \cdot 10^{-4}} \right)^{0.5} \text{ cm} \quad (3)$$

where \dot{M} , v_{exp} , d , T_{mb} , r_{CO} and x are respectively the mass loss rate ($M_{\odot} yr^{-1}$), the expansion velocity (km s^{-1}), the distance of the star (kpc), the main beam temperature at the center of the CO(1-0) line (K), the photodissociation radius of CO (in cm) and the abundance of CO relative to H_2 . The non linear term $F(r_{CO})$ (figure 2 of L93) expresses the change of T_{mb} with r_{CO} .

We have estimated the mass loss rates and the photodissociation radii from an numerical resolution of equations 3 and 2. For T Lyr, Y CVn and RY Dra, the observed CO(1-0) intensities have been used. For WZ Cas, we have assumed that the CO(1-0) intensity was 2.5 times smaller than the CO(2-1) intensity, as observed for Y CVn and RY Dra. All the abundances relative to H_2 have been fixed to the photospheric values given by Olofsson et al. 1993 (hereafter O93). The parameters and the results of this calculation are reported in Table 3.

The mass loss rates of the four J-type stars range between $7 \cdot 10^{-8}$ and $7 \cdot 10^{-7} M_{\odot} yr^{-1}$, i.e. significantly smaller than the rates observed in most AGB stars ($5 \cdot 10^{-7}$ to $10^{-4} M_{\odot} yr^{-1}$ according to L93)s. The CO photodissociation radii show a small dispersion ranging from $5 \cdot 10^{16}$ to $8 \cdot 10^{16}$ cm. These values for \dot{M} and r_{CO} are consistent with the results of Neri et al. (1998) for Y CVn, which have used an overestimated distance of 340pc for this source. It can be noticed that, for Y CVn and RY Dra, the corresponding angular sizes are very close to the CO(1-0) distribution radii at half maximum derived from the observed "mini-maps" (see Table 2).

2.6. Molecular abundance ratios

The most straightforward analysis of the molecular lines in terms of molecular isotopic abundances ratios concludes that the molecular abundance ratio simply equals the isotopic lines intensity ratio, corrected by a frequency dependant factor which ranges from ν^{-1} to ν^{-3} when the source size compared to the telescope beam varies from fully resolved to fully unresolved. This result relies on a number of conditions:

- (1) the background radiation at both line frequencies should be negligible compared to the molecular gas emission.
- (2) both lines should be optically thin.
- (3) both isotopes should present identical excitation conditions.
- (4) both isotopes should show the same spatial distribution.

Assumption (1) is not a strong constrain but assumptions (2) to (4) are much better satisfied when the molecular lines are weak, i.e. are emitted by low abundance molecules and when both isotopes show similar abundances. They have thus been extensively used to derive the rare isotopes of oxygen, sulfur, silicon, chloride (see Kahane et al 1985, 1992). Application of this method to ^{12}CO and ^{13}CO is much more questionable in particular in particular of the usually non negligible opacity of the isotopic lines.

However, Jura et al. (1988) have argued that it should provide reliable CO abundance ratios in the low mass loss rate J type stars. One of the purpose of this paper is to check this conclusion from a comparison of a simple line intensity ratio calculation with the abundance ratios required by a multitransition radiative transfer calculation (see section 3).

From the line central intensities and integrated intensities reported in Table 2, we derive the intensity ratios reported in Table 5: the CO ratios are corrected by a ν^{-1} factor since the molecular sources are resolved as discussed above, and the CS

Table 3: Parameters and results of the numerical mass loss rate and photodissociation radii calculation.

Source	$T_{mb}(1-0)$ (K)	V_{exp} (km s ⁻¹)	x(CO) (10 ⁻⁴)	d (pc)	r_{CO} (10 ¹⁵ cm)	\dot{M} (10 ⁻⁷ M _⊙ yr ⁻¹)
T Lyr	0.06	12.7	5.2	633	55	5.8
RY Dra	0.52	9.3	6.9	488	79	6.8
Y CVn	0.82	7.8	6.6	218	52	3.0
WZ Cas	0.32	2.9	20.	787	58	0.7

ratios are corrected by a ν^{-3} factor which applies for unresolved sources. It appears that:

- the integrated intensity ratios are marginally weaker than the central intensity ratios, which suggests weak opacity effects (the optical depth is minimum at the center of a line emitted by a spherical and uniform envelope).
- the intensity ratios derived from each of the three observed transitions are fully consistent both for CO and CS.
- the intensity ratios derived for CS are marginally larger than those derived for CO.

The first two conclusions suggest that line opacity only weakly affects the derivation of the abundances ratios, and that none of the observed line shows anomalous excitation effects. The third one might suggest that excitation and/or chemical bias could affect somewhat differently CO and CS species. These points will be discussed in Section 4 on the basis of a comparison with the abundances ratios derived from the lines radiative transfer modeling.

3. Molecular line modeling

Except for WZ Cas, for which a single transition was observed for ¹²CO and ¹³CO we use a simple radiative transfer code to simultaneously model the three transitions observed for each molecular species. This modeling is not self consistent because the mechanical quantities are parameterized, and no coupling with chemistry or grain formation is taken into account. Nevertheless, it is likely to improve the derivation of the ¹²C/¹³C ratio, compared to the very elementary analysis previously used, and to help to identify the bias that may affect such an elementary analysis. After a short summary of the characteristics of this code (initially written by R. Lucas), we describe the strategy we used to explore the parameters space and comment the results.

3.1. The radiative transfer code

Details about the radiative transfer code used for the modelling can be found in Dufour (2000). Only the main characteristics are stated hereafter.

3.1.1. Envelope physical parameters

The envelope, assumed to be spherical, extends between an inner radius r_{in} and an outer radius r_{out} , which may depend on

each molecular species. The star mass loss rate \dot{M} is assumed to be constant. The gas density (that of the dominant species H₂), and expansion velocity are assumed to present spherical distributions ; their radial dependances are parameterized and related by the matter conservation equation :

$$\dot{M} = 4\pi r^2 \rho V_{exp} \quad (4)$$

The kinetic temperature distribution, also assumed to be spherical, is parameterized by a power law :

$$T^k = T_{in}^k \left(\frac{r}{r_{in}} \right)^\alpha \quad (5)$$

For each molecular species the abundance relative to H₂ is assumed to be constant between the inner and the outer radius.

The envelope is expanding with a constant and uniform velocity V_{exp} . Thus, the region which contribute at the same frequencies in the line are the radii of the envelope, where radial velocity is constant: $V_{exp}(\theta) = \text{const}$, if θ is the angle of a radius with the line of sight. In addition we have introduced a turbulent velocity, which extends the region of emission contributing at the same frequency in the line around a given radius (i.e. θ) with a gaussian probability law whose ecart type depends on the local value of the turbulent velocity.

3.1.2. Integration of the envelope emission

The envelope is divided into 100 shells, defined by a logarithmical mesh. To compute the emergent intensity with the radiative transfer equation, we need to compute the excitation temperature which is defined in term of populations by

$$T_{ex} = \frac{h\nu}{k} \ln \left(\frac{n_{J+1}}{n_j} \right) \quad (6)$$

In each shell, the equilibrium populations are computed using an iterative method which improves an initial population iteration by iteration. The initial excitation temperatures are assumed nul for each transition and the equilibrium is supposed to be reached when the relative change of populations between two iterations is less than 10⁻⁸. The populations evolves because of collisional and radiatives transitions which will be detailed below.

The emergent intensities are integrated along the line of sight and the resulting line profiles are computed with a velocity resolution of 1.1 km s⁻¹ to be easily compared to the observed ones. The regions which contribute at each (radial) velocity $V_{||}$ in the line verify $V_{||} - 5V_{tur} < V_{exp} < V_{||} + 5V_{tur}$.

3.1.3. Radiative rates

The radiative transition rates are computed with the Low Velocity Gradient hypothesis (LVG) which avoids the ETL assumption and the escape probabilities (Castor, 1970) which require optical depths knowledge. Their values take into account a central source and a background emission. The central star emission is modeled by an infrared source of radius r_* whose flux is interpolated in a set of observed values (Harten et al., 1988). However, we check that for our purpose the addition of this infrared source doesn't change the modeled lines. In addition, to simulate the cosmic radio emission, a background flux of a 2.7 K blackbody has been added. Finally, the influence of the dust is not taken into account into this computation.

3.1.4. Collision rates

For each molecular species, we take into account only the two lowest vibrational levels with 31 rotational levels each. Only collisions with H_2 are considered.

The CO lines are computed with collision rates given by Flower et al. (1985), depending in J and T^k , extrapolated with the formulae given by De Jong et al (1975). In order to estimate the effects of the choice of collision rates, we have tested the rates of Schinke et al (1985) using one well fitted model with the Flower's one. The intensity changes induced are around 10%. After performing the fit with these new collision rates, the set of parameters of the model is only modified within 4%, without improving notably the quality of the models.

For ^{13}CO and isotopes of CS, we use the same rates as for ^{12}CO , but corrected by a scaling factor depending on the reduced mass of the system:

$$[R]_{x/\text{H}_2}^{\text{coll}} = [R]_{\text{CO}/\text{H}_2}^{\text{coll}} \sqrt{\frac{\mu_x}{\mu_{\text{CO}}}} \quad (7)$$

where μ_x is the reduced mass of the system $x\text{-H}_2$. This method is justified for CS because this molecule has the same external electronic configuration as CO and is consequently likely to have the same interaction with H_2 .

3.2. Modeling strategy

3.2.1. Fixed parameters

- We have checked that the values of r_* and r_{in} have very little effects on the molecular lines, as long as $r_* \ll r_{in} \ll r_{out}$. We have adopted $r_* = 10^{13}\text{cm}$ and $r_{in} = 0.5 \cdot 10^{15}\text{cm}$.
- The index of the kinetic temperature power law is fixed to $\alpha = -0.7$. This value is fully consistent with more elaborated radiative transfer codes which also compute the thermal equilibrium (see for example the model of U Hya given in Schöier et al. 2000).
- As mention above, we assume that \dot{M} and v_{exp} are constants, which results in a density power law in r^{-2} according to equation 4.

- $x(^{12}\text{CO})$ is assigned to his photospheric value, as given by Olofson et al (1993): respectively $6.6 \cdot 10^{-4}$, $6.9 \cdot 10^{-4}$ and $5.2 \cdot 10^{-4}$ for Y CVn, RY Dra and T Lyr. This value is of crucial importance for the derivation of the star mass loss rate but of relatively weak influence on the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio. When multiplying or dividing the ^{12}CO abundance by 100, the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio obtained after fitting the lines changes only by 30%.
- We consider that the photodissociation effect responsible for the value of r_{out} for each molecule leads to negligible differences for two isotopes of the same molecule. This assumption is suggested by our molecular source size estimates, which do not show any systematic difference between ^{12}C and ^{13}C bearing molecules. In contrast, as the molecular envelope is likely to be limited by photodissociation and not by gas expansion, we expect very different outer radius for CO and CS (hereafter r_{CO} and r_{CS}).
- The distances used for the three sources are based on Hipparcos parallax measurements (Perryman et al., 1997).

3.2.2. Fitting algorithm

For Y CVn and RY Dra, the 10 remaining parameters to be fitted on the 12 observed lines are thus: the star systemic velocity v_{lsr} , the envelope constant expansion velocity v_{exp} and constant turbulent velocity v_{tur} , the molecular outer radii r_{CO} and r_{CS} , the kinetic temperature at the envelope inner radius T_{in} , the constant mass loss rate \dot{M} , the abundances relatively to H_2 , $x(^{13}\text{CO})$, $x(^{12}\text{CS})$ and $x(^{13}\text{CS})$. For T Lyr there are no CS data; there are thus 6 observed lines and 7 parameters to fit.

The following procedure has been used to fit the observed lines:

- First, the values of the three velocities v_{exp} , v_{lsr} and v_{tur} are iteratively adjusted on the highest signal to noise spectra, from initial values given by the line fits, i.e. the values reported in Table 2 and the constraint $v_{exp} + v_{tur} = 0.5 \overline{\Delta v}$, where $\overline{\Delta v}$ is the average of widths at zero level of the observed lines. It expresses that the turbulent velocity results in an increase of the linewidths (it also results in a slight asymetry of the line profiles as discussed below).
- Then, we fix an arbitrary inner kinetic temperature (typically between 1000 to 4000 K) and adjust the values for \dot{M} and r_{CO} to reproduce at least two of the three ^{12}CO lines. If the third line is not well fitted, we change the temperature and iterate.
- When \dot{M} , T_{in}^k and r_{CO} are determined from the best fit to the three ^{12}CO lines, we adjust $x(^{13}\text{CO})$ to fit the three ^{13}CO lines.
- The same kinetic temperature and mass loss rate are assumed to compute CS emission. $x(^{12}\text{CS})$ and r_{CS} are derived from the three ^{12}CS lines.
- Finally, the ^{13}CS lines provide the $x(^{13}\text{CS})$ relative abundance.

We use the reduced χ^2 factor, which is computed for each line, as a criterion for the quality of a line fit, but we do not affect

the same weighting to all the fits, depending on the quality of the observed line, as discussed below.

3.3. Results

The computed emission lines are shown in figures 1, 2 and 3 (dotted lines) and the corresponding characteristics of the envelopes are presented in table 4.

3.3.1. Global behaviour

Globally, the observed lines are well modelled.

For Y CVn, the CO computed lines show a double peak profile slightly asymmetric which is also detected in the observed spectra (see for example CO(2-1) lines). For CO, only one line doesn't match its observational counterpart: the ^{13}CO (1-0) one. For CS, taking into account the noise of the ^{13}CS (2-1), the discrepancy (factor 2) between the modelled line and the observed one for this transition is not so important. Consistently with the fact that the CS(5-4) lines give a higher ratio than the other transitions in table 5, the modelled ^{13}CS (5-4) line is too low compared to the observed one.

In the case of RY Dra, a symmetric double peak profile is also clearly reproduced by the modeling for CO. Differences between modeling and observations are always within the error bars except for ^{12}CO (3-2). Indeed, the ratio of the central intensities of the modelled CO(3-2) lines results in a lower $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$ value than for the other transitions. On the contrary, the value reported in table 5 from the observed lines is higher for the 3-2 transition than for the others. The same behaviour is noticeable for CS(5-4). It could be argued then that this effect could be related to calibration uncertainty between IRAM 30m and JCMT telescopes.

For T Lyr, two lines are badly reproduced by the modeling: ^{12}CO (3-2) and ^{13}CO (1-0). The latter is not very significant because the line is very noisy. For ^{12}CO (3-2), we note in table 5 that the abundance ratio deduced from the observed CO(3-2) lines is higher than the same quantity derived with the observed CO(2-1) lines. Like for RY Dra, the modeling gives exactly the opposite result: according to the modelled lines, the ratio derived from the CO(3-2) lines should be smaller than the ratio derived from the CO(2-1) ones.

3.3.2. Velocities

The values derived from the modeling for the expansion velocities are in general good agreement with the ones resulting from the fits.

However, we can note that the σ mentioned in table 2 for the velocities under-estimate the uncertainties, as already mentioned in section 2.3. Indeed, for one of the best defined lines, ^{12}CO (2-1) in Y CVn, the difference between the fitted and the modeled v_{exp} is about 5σ ! We can observe in the spectra that, because of the finite resolution (1.1 km s^{-1}) and noise, it

is always difficult to determine more precisely the location of a line edge than in an interval of 2 channels, i.e. 2.2 km s^{-1} . Thus, with a more realistic uncertainty of $\Delta v_{exp} \sim 4 \text{ km s}^{-1}$, the modelled and fitted velocities match very well.

3.3.3. Mass loss rates and source sizes

The uncertainties on the mass loss rate and the abundance ratio have been estimated by changing the intensities of ^{12}CO by $\Delta(I) = \pm 20\%$, which corresponds to the typical observational uncertainty on these values. To obtain a good fit, we have to change the parameters by the following percentages:

$$\Delta(\dot{M}) = (+33\%, -27\%) \text{ and } \Delta \left[\frac{x(^{12}\text{CO})}{x(^{13}\text{CO})} \right] = (+29\%, -20\%)$$

We can note that:

(1) $\Delta \left[\frac{x(^{12}\text{CO})}{x(^{13}\text{CO})} \right]$ are of the same order as those deduced from the integrated intensity ratios (see Table 5).

(2) $\Delta(\dot{M})$ is slightly larger than $\pm 20\%$, as would naively be expected from equations 2 and 3.

This last remark can be understood as follows: first, the relation between T_{mb} and x is not linear as can be seen in equation 2: $T_{mb} \propto x^{1.18}$. Moreover, equation 2 takes into account the factor $F(r_{CO})$, which depends on x and \dot{M} through equation 3, and consequently is an other source of non linearity.

Compared with the mass loss rates of table 3, derived from the observed lines with equation 2, the modelled mass loss are lower by a systematic factor between 2 to a factor 3. This discrepancy can easily be explained by the fact that equation 2, originally established by Knapp & Morris (1985) for a 7m antenna has been scaled by a factor $(30/7)^2$ to apply to the CO(1-0) spectra observed with the IRAM 30m telescope. This scaling factor which implicitly assumes that the molecular source is unresolved in the telescope beam, results in an overestimate of the mass loss rate given by equation 2 if the source is partially resolved as here. Moreover, L93 reported that equation 2 is reliable for $10^{-6} < \dot{M} < 10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$. Outside this domain, the computed values have to be considered as upper limits.

The agreement between the CO source sizes derived from the line modeling and the CO photodissociation radii is striking. This good agreement strengthens also our assumption concerning the identity of the ^{12}CO and ^{13}CO molecular source sizes. Indeed, we have determined the photodissociation radii of ^{12}CO and ^{13}CO with figure 7a of M88, considering that the photodissociation radius is achieved when the molecular abundance has dropped to 5% of its value in the inner part of the envelope. We have found a relative difference between the two values lower than 10%. That is negligible compared to the other sources of uncertainties described above.

Our modeling also concludes that the CS sources are unresolved with the 30m telescope beam, which is fully consistent with our observations.

Table 4: Parameters of the radiative transfer modeling from column 4 to 10. Column 11: r_{CO} based on equation 3(M88); the range of values arises from the uncertainties on \dot{M} and x reported in section 3.3.3.

Star	d (pc)	P (days)	v_{exp}	v_{lsr}	v_{tur}	T_{in}^k (K)	\dot{M} ($10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$)	Molecule	r_{out} (10^{15} cm)	$x(^{12}\text{C})$	$x(^{13}\text{C})$	θ_x ($''$)
T Lyr	633		12.9	7.0	0.5	3000	2.9	CO	52	$5.2 \cdot 10^{-4}$	$2.0 \cdot 10^{-4}$	5.5
RY Dra	488	200	9.3	-5.4	1.0	3000	2.9	CO	67.5	$6.9 \cdot 10^{-4}$	$2.7 \cdot 10^{-4}$	9.2
								CS	10	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$4.1 \cdot 10^{-6}$	1.4
Y CVn	218	157	7.2	20.5	1.5	1300	1.0	CO	48	$6.6 \cdot 10^{-4}$	$2.8 \cdot 10^{-4}$	14.7
								CS	5	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$4.0 \cdot 10^{-6}$	1.5

4. Derivation of $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$

Derivation of the elemental isotopic ratio $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ in the material expelled by the star from the radio molecular lines emitted by the circumstellar gas requires to main stages :

- to analyze the lines intensities in terms of molecular abundances
- to examine how faithfully the molecular gas $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios reflect the elemental $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$.

To derive the molecular abundances we have used two methods : (i) a very straightforward calculation which simply relies on the lines intensity ratios but assumes several strong conditions and (ii) a radiative transfer modeling of the observed lines. Comparison of the molecular isotopic ratios provided by both methods will allow to conclude on the reliability of the simple method.

Several effects may prevent the molecular isotopic ratios to be identical to the elemental isotopic ratios : chemical fractionation, selective photodissociation, selective condensation onto grains. They will be discussed with the help of the comparison of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios for CO and CS molecules.

4.1. Radiative transfer effects

For each modelled line, excitation temperature and optical depth have been computed by the radiative transfer code. An example is given in figure 6. The averaged optical depths have been computed over the lines, including beam effect, and are reported in table 6.

4.1.1. Temperatures and population inversion

All the modelled lines show an inversion population [such as observed at $r \sim 1.4 \cdot 10^{15} \text{ cm}$ for ^{12}CS (3-2) in Y CVn , see 6]. It can be understood has a consequence of the competition between the collisionnal and radiative processes. For the first, all the rates are equal within a factor ~ 3 whereas, for the second, the rates depend on ν^3 . Thus, an inversion population occurs when a level is slowly depopulated by collisions and rapidly populated by radiative spontaneous emission from higher levels. When compared with the excitation temperature, we can say that the inversion population region corresponds

effectively to the region where the collision rates dominate because $T^k \sim T_{ex}$ (see Rohlfs & Wilson, 1996).

The comparison of our T_{in}^k with the two models detailed in Schöier et al (2000) shows that we find values 3 to 6 times larger than their authors. Is it a characteristic feature of J-type stars ? Otherwise, the three main physical improvements of the Schöier models which could be imply are the computation of the thermal equilibrium, the description of the molecular relative abundances with an exponential law and the approximation of the diffusion by the dust. Finally, let us also mention that if the lines show a double pic, the temperature is critical parameter to reproduce it. On the contrary, if their is no double pic to be reproduced, this parameter doesn't constraint very much the fit. For example, for T Lyr , using $T_{in}^k = 900\text{K}$ instead of $T_{in}^k = 3500\text{K}$ only changes the quantities r_{CO} , \dot{M} and $x(^{13}\text{CO})$ of 20%, 15% and 5% respectively.

4.1.2. Optical depths and isotopic ratios

As mentioned previously, the good agreement between the central line intensity ratios and the integrated intensity ratios suggests that these lines are not strongly affected by opacity effects.

This conclusion is consistent with the CO line opacities derived from the radiative transfer calculation, which appear weak for each transition of ^{12}CO and ^{13}CO in the low mass loss rate envelopes of these J type stars.

The agreement between the CO isotopic abundances ratios derived from the transfer modeling and simply deduced from the lines intensity ratios is remarkable. In contrast to the higher mass loss rate envelopes where strong opacity effects on CO lines require careful modeling or observations of less abundant molecules to derive $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, it appears that this ratio may be derived very easily from the CO line intensity ratios in low mass loss rate envelopes such as J type stars envelopes studied here.

For CS, the optical depths derived from the line transfer modeling appear somewhat higher, in particular for RY Dra . Such a conclusion is also suggested by the slight discrepancy observed between the central and the integrated intensity ratios (see Table 5). However, these line opacities effects remain weak and a comparison of the abundance ratios derived from line modeling and line intensity ratios allows to conclude that in these low mass loss rate envelopes the $^{12}\text{CS}/^{13}\text{CS}$ abun-

Table 5: Molecular isotopic ratios

Star	Molecule	Line	Molecular isotopic ratios $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$		
			Line fitting		Line modeling abundance ratios
			intensity ratios		
			intensity ratios	area ratios	
WZ Cas	CO	2 – 1	2.2 (+0.5, -0.4)	1.8 (+0.4, -0.4)	
T Lyr	CO	1 – 0	2.2 (+0.5, -0.4)	2.4 (+0.6, -0.5)	
		2 – 1	2.6 (+0.7, -0.5)	2.4 (+0.5, -0.4)	
		3 – 2	3.4 (+0.9, -0.7)	3.1 (+0.7, -0.6)	
		average	2.5 (+0.4, -0.3)	2.6 (+0.3, -0.3)	2.6
RY Dra	CO	1 – 0	2.6 (+0.6, -0.5)	2.5 (+0.6, -0.4)	
		2 – 1	2.5 (+0.6, -0.5)	2.0 (+0.5, -0.4)	
		3 – 2	4.2 (+1.1, -0.9)	3.9 (+0.9, -0.7)	
		average	2.8 (+0.4, -0.3)	2.5 (+0.4, -0.3)	2.5
	CS	2 – 1	4.3 (+1.1, -0.9)	3.7 (+0.9, -0.7)	
		3 – 2	4.6 (+1.2, -1.0)	4.6 (+1.1, -0.9)	
		5 – 4	3.6 (+1.0, -0.7)	3.2 (+0.7, -0.6)	
average	4.1 (+0.6, -0.5)	3.6 (+0.5, -0.4)	3.2		
Y CVn	CO	1 – 0	2.2 (+0.5, -0.4)	1.9 (+0.4, -0.3)	
		2 – 1	2.5 (+0.6, -0.5)	2.2 (+0.5, -0.4)	
		3 – 2	2.4 (+0.6, -0.5)	2.4 (+0.5, -0.4)	
		average	2.3 (+0.3, -0.3)	2.1 (+0.3, -0.2)	2.4
	CS	2 – 1	5.5 (+1.5, -1.2)	4.7 (+1.2, -0.9)	
		3 – 2	3.4 (+0.9, -0.7)	3.4 (+0.8, -0.6)	
		5 – 4	2.9 (+0.8, -0.6)	3.2 (+0.7, -0.6)	
		average	3.4 (+0.6, -0.4)	3.5 (+0.5, -0.4)	3.3

Table 6: Optical depth of the modelled lines.

	Y CVn			RY Dra			T Lyr		
ΔJ	1-0	2-1	3-2	1-0	2-1	3-2	1-0	2-1	3-2
^{12}CO	0.05	0.17	0.15	0.04	0.20	0.17	0.03	0.15	0.24
^{13}CO	0.01	0.07	0.06	0.01	0.08	0.06	0.02	0.05	0.09
ΔJ	2-1	3-2	5-4	2-1	3-2	5-4			
^{12}CS	0.21	0.66	1.30	0.48	1.25	2.21			
^{13}CS	0.08	0.33	0.41	0.11	0.37	0.36			

dance ratio can reliably be derived from the central line intensity ratio and that the use of line transfer modeling is not necessary.

4.2. Molecular effects

It can be seen in Table 5 that abundance ratios derived from CO or CS are compatible but just within the error bars for RY Dra and Y CVn . If confirmed by further measurements, this small difference should be explained, which requires a careful analysis of selective photodissociation effects and chemical fractionation in CS.

M88 have computed the abundances of ^{12}CO and ^{13}CO in a circumstellar envelope, taking into account selective photodissociation and chemical fractionation. It appears that the first effect roughly cancels the second one, so that $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$ is almost constant in the envelope and faithfully reflects the

$^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio. Their work also shows that this cancellation depends on the mass loss rates. In envelopes with the lowest mass loss rate, some little deviations (about 10%) of the ratio can occur in the inner parts of the envelope. However, such low deviations are lower than the uncertainties given for the modelled ratios.

The same studies for CS doesn't exist. It would be interesting to know

- if chemical fractionation is significant for CS. Indeed, this reaction involves the ion $^{12}\text{C}^+$ in the following equation:



As CO is the most abundant molecule, all the required $^{12}\text{C}^+$ for CS fractionation could be used in CO fractionation so that CS fractionation could be negligible.

- if chemical fractionation occurs, does it cancel the selective photodissociation effect as for CO ?

Anyhow as the molecular isotopic ratios derived from CO and CS only slightly differ, both species are likely to provide reliable estimates of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ elemental ratio.

5. Discussion

5.1. Comparison with previous measurements

The table 7 presents different values of $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios and M derived from radio or optical observations by various au-

thors. Our ¹²C /¹³C ratios appear compatible with and significantly more accurate than the ratios derived by Jura et al. (1988), hereafter J88, from the observation of a single CO transition in each envelope. The generally lower values derived by J88, using the same wavelengths, is partly explained because their sources was unresolved. Consequently, they have applied a correction factor in ν^{-4} whereas we have used ν^{-1} . Their ratio scaled with ν^{-1} are reported in parenthesis. Basically, these corrected values and ours are compatible, taking into account the error bar which were probably larger in 1988.

In addition, for each star, our values lie between those of Lambert et al., hereafter L86, and Ohnaka et al., hereafter O99. Taking into account the error bars, the values derived by these two authors excluded each other but our ratios are close to the results of O99 and less compatible with the values derived by L86. This is a critical result because the values derived by L86 allow for an interpretation in term of equilibrium ratio of the CNO cycle, whereas the values derived by O99 and us are too low for this explanation.

Mass loss rates derived from very different data (rotational transitions of CO and CS, vibrational transitions of CO, CN and C₂) and analysis (radiative transfer, fit of chemical models, simple analytical models, atmosphere models) are reported in Table 7 and have been corrected by a factor in d^2 in order to be compared. We find mass loss rate showing a quite low dispersion (factor 2.9) but from 3 to 6 times larger than those of O93.

Finally, it may be mentioned that our CS modeling is incompatible with the low photospheric abundances given in L86: we require abundances from more than 3 times to almost 30 times larger. O93 reaches an even drastic conclusion, assuming CS abundances 100 times larger than L86. It has been confirmed recently by Larsen et al. (1999, private communication).

5.2. Constraints on stellar evolution models

Until now, three interpretations have been used in order to explain the low ¹²C /¹³C observed in the J type stars:

(1) These stars are intermediate mass stars and should develop Hot Bottom Burning (HBB). In this case, low values for ¹²C /¹³C are explained by CNO cycle equilibrium.

The problem is that HBB prevents the stars from becoming carbon rich, by transforming Carbon into Nitrogen. This case is consequently inconsistent with a photospheric ratio C/O > 1 like these of J type stars, except if we assume that an oxygen-rich star envelope could exist together with a carbon-rich star photosphere (O99 have made such an assumption for the silicate J-type stars they analysed) and in this case, a theoretical explanation as to be found (chemical modeling, dust aggregation . . .).

To get a C/O ratio upper than 1, we can supposed that HBB has stopped because the end of the AGB has been reached. However, according to computations by Forestini et al. (1997), such stars would only reach ¹²C /¹³C ~ 10 and \dot{M} tends to a

few $10^{-4} M_{\odot} \text{yr}^{-1}$, i.e. significantly higher than the values derived here. HBB could also be temporarily “switched off” during a third dredge-up phase but, in this case, even if we temporarily get a higher C/O, the ratio ¹²C /¹³C increases because of the ¹²C dredged in the envelope.

(2) If the mass of the stars is less than $5 M_{\odot}$, HBB can not occur and extra mixing scenarii like cool bottom processing (CBP) suggested by Boothroyd et al. (1995), might account for the equilibrium value of ¹²C /¹³C. Wasserburg et al. have shown that it is possible with double streamed deep circulation currents to obtain low carbon isotopic ratio, ~ 4, at the AGB phase together with C/O > 1. These processes require a deeper third dredge-up than those generally modelled in stellar evolution. Thus, theoretically, the (numerical and physical) way to obtain deeper third dredge-up must be improved and, observationally, it would be useful to obtain nitrogen abundances for these stars because CBP transform large amount of ¹³C located in the envelope in ¹⁴N.

(3) J type stars could be binary stars composed of a dwarf and a RGB star (Wood, private communication). The C/O enrichment and the low ¹²C /¹³C would be due to the abundance pollution by the previous AGB phase of the dwarf, and the low mass loss rate would be consistent with the RGB status of the companion.

As it can be see, it’s quite difficult to concile the values of ¹²C /¹³C, \dot{M} and C/O for J type stars. Table 8 sum up the basic facts for low mass and intermediate mass AGB, compared to RGB stars. The use of this table will help us to clarify an other interpretation for these objects. In J type stars, C/O and the mass loss rate are compatible with low masses whereas ¹²C /¹³C < 10 is compatible with intermediate masses. Various evidences now exists of turbulent mixing at the RGB Bump (see ref). So, instead of testing the influence of slow mixing processes at AGB phase, from “standard” RGB models, an other way to proceed should be to compute consistently RGB and AGB models with the same appropriate physics. Consequently, J type stars could be quantitatively explained as low mass stars if the initial models of AGB stars would exhibit low ¹²C /¹³C (instead of 20/25 in the standard models) due to slow mixing processes acting on the star along the RGB. Such computations have to be performed to be able to make a choice between what we can call “non standard coupled RGB-AGB evolution” and one of the three scenarii presented above in the context of “non standard AGB evolution” (non standard is defined by the use of mixing processes).

6. conclusion

The analysis of CO rotational lines in low mass loss rate envelopes show that:

- the lines are optically thin and consequently, the abundance ratios can be reliably derived from line intensity ratios.

Table 7: Comparisons of our results with previous measurements. References: D00 refers to this work, O99 is Ohnaka et al. (1999), L86, Lambert et al. (1986), J88, Jura et al. (1988), O93, Olofsson et al. (1993) and C87, Claussen et al. (1987). The mass loss rates reported in the table are corrected with a factor $(d_{D00}/d_{author})^2$.(*) For WZ Cas, the value given in the column D00 is the intensity ratio $^{12}\text{CO} (2-1)/^{13}\text{CO} (2-1)$.

Stars	$^{12}\text{C} / ^{13}\text{C}$ ratios				\dot{M} ($10^{-7} M_{\odot} \text{yr}^{-1}$)		
	D0	O99	L86	J88	D00	O93	C87
	Radio CO,CS	Optical CN	Optical CN,CO,C ₂	Radio CO	Radio CO,CS	Radio CO	60 μm
T Lyr	2.6 \pm 0.3		3.2 \pm 0.5	1.4(1.6)	2.9	1.1	1.7
RY Dra	2.5 \pm 0.4	2.0 \pm 0.5	3.6 \pm 0.5	1.9(2.2)	2.9	0.5	1.4
Y CVn	2.1 \pm 0.3	1.9 \pm 0.2	3.5 \pm 0.4	1.4(1.6)	1.0	0.3	1.9
WZ Cas	2.2 \pm 0.5(*)	4.0	4.5 \pm 0.5			0.6	

Table 8: Main characteristics of RGB and AGB stars

	Low mass	Intermediate mass
RGB	Occurrence of first DUP	
	turbulent mixing very efficient (observationnal clues at the BUMP)	no turbulent mixing ($\tau_{evol} \ll \tau_{mix}$)
AGB	Third DUP (more efficient with low masses)	
	low luminosity and mass loss	high luminosity and mass loss
	no HBB	HBB
	slow mixing processes (more efficient with low masses): semiconvection, overshootig or turbulent transport rotationally induced	

- the photodissociation radius derived from equations 2 and 3 corresponds to the CO source size
- the mass loss rate derived from equation 2 is slightly overestimated if the source is resolved.

Thus radiative transfer calculations in low mass loss rate envelopes are not necessary, even for CS, where central line intensity ratios provide reliable abundance ratios.

Concerning $^{12}\text{C} / ^{13}\text{C}$ in J-type stars:

- low values are confirmed, between these of O99 and L86.
- the values derived are around the equilibrium values for the CNO cycle.
- such a low abundance ratio is very difficult to concil with the low mass loss rates in stellar evolution models for single stars. These two low values could be qualitatively explained by the evolution scenario of a binary star.
- in order to clarify the status of J-type stars, we propose a new way of considering the AGB modelling as to be use in which the AGB evolution is computed consistently with the RGB one, using the same physics of mixing.

Acknowledgements. The authors wish to thank R.Lucas for its help during the modification of the radiative transfer code.

References

Bessel, M.S., Wood, P.R., Evans, T.L., 1983, MNRAS 202, 59
 Boothroyd, A.I., Sackmann, I.J., Wasserburg, G. J., 1995, ApJ 442, 21
 Dufour, E., february 2000, “Nucleosynthesis in AGB stars: from degenerate core to circumstellar envelope”, PhD thesis, University Joseph FOURIER, Grenoble, FRANCE
 Jura, M. Kahane, C. & Omont, A. 1988, A&A 201, 80
 Lambert, D.L., Gustafsson, B., Eriksson, K. & Hinkle K.H. 1986, ApJS 62, 373

Ohnaka, K. & Tsuji, T. 1996, A&A 310, 933
 Castor, J.I., 1970, MNRAS 149, 111
 Claussen, M.J., Kleinmann, S.G., Joyce, R.R., Jura, M., 1987, ApJS 65, 385
 De Jong, T., Shih-I Chu, Dalgarno, A., 1975, ApJ 199, 69
 Flower, D. R., Launay, J. M., 1985, MNRAS 214, 271
 Forestini, M., Charbonnel, C., 1997, A&AS 123, 241
 Green, S., Chapman, S, 1978, ApJS 37, 169
 Harten, R. H.,Grosbol, P.,Greisen, E. W.,Wells, D. C., 1988, A&AS 73, 365
 Larsen, F., Olofsson, H., 1998, “Circumstellar envelopes of carbon stars”, poster at the IAU symposium 191.
 Knapp, G.R., Morris, M., 1985, ApJ 292, 640
 Loup, C., Forveille, T., Omont, A., & Paul, J.F. 1993, A&AS 99, 291
 Mamon, G. A., Glassgold, A. E. & Huggins, P. J. 1988, ApJ 328, 797
 Morris, M. 1980, ApJ 236, 823
 Morris, M., Guilloteau, S., Lucas, R. & Omont, A. 1987, ApJ 321, 888
 Nerri, R., Kahane, C., Lucas, R., Bujarrabal, V., Loup, C., 1998, A&AS 130, 1–64
 Olofsson, H., Eriksson, K., Gustafsson, B., Carlström, U., 1993, ApJS 87, 267
 Planesas, P., Bachiller, R., Martin-Pintado, J., Bujarrabal, V., 1990, ApJ 351, 263
 Rohlfs, K., Wilson, T.L., 1996, Tools of radioastronomy, Springer verlag
 Schinke, R., Engel, V., Buck, U., Meyer, H., Diercksen, G.H.F, 1985, ApJ 299, 939
 Schöier, F.L., Olofsson, H., Kahane, C., 2000, A&A preprint
 Sloan, J.C., Marenin, I.R.L., Price, S.D, 1988, AJ, 115 809
 Wannier, P. G. & Sahai, R. 1986, ApJ 311, 335
 Wasserburg, G. J., Boothroyd, A.I., Sackmann, I.J., 1995, ApJ 447, 37
 Wood, P. R. 1990, in From Miras to Planetary nebulae: Which Path for Stellar Evolution?, ed. M. O. Mennessier & A. Omont (Gif sur Yvette: Editions Frontières), 67

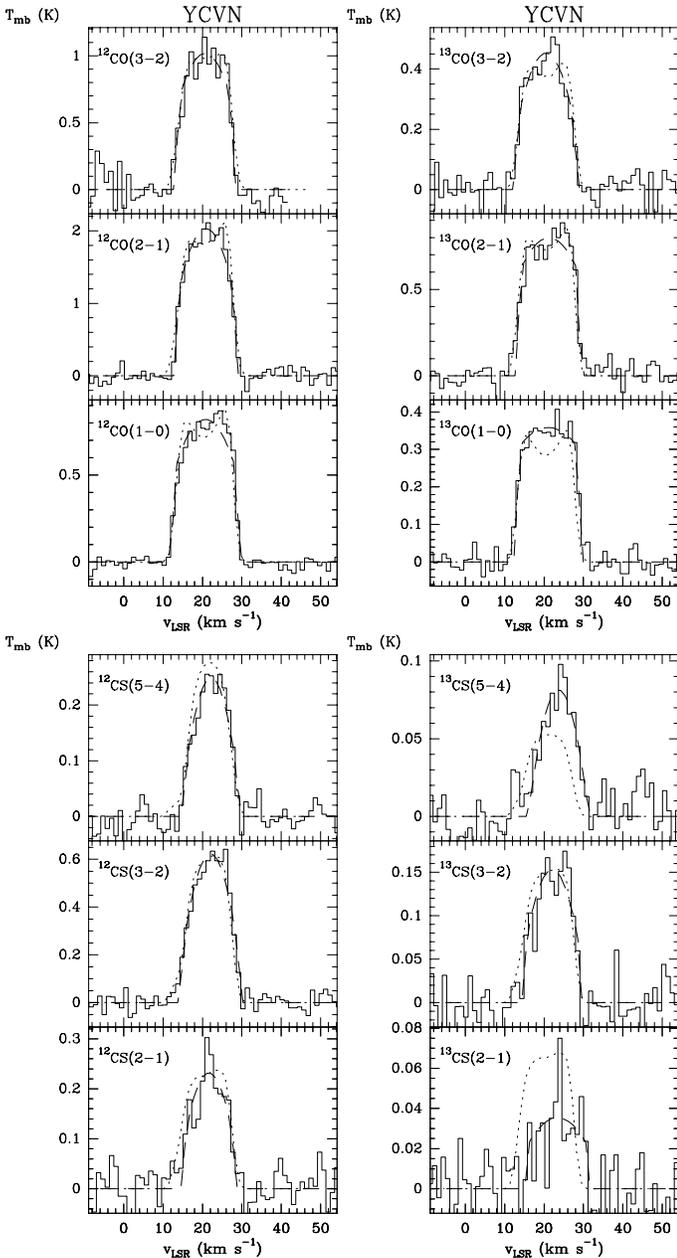


Fig. 1: Molecular spectra observed towards Y CVn. The source coordinates are $\alpha(1950) = 12^h 42^m 47.0^s$, $\delta(1950) = 45^\circ 42' 48''$. The histograms represent observed spectra, the dashed lines model profiles and the dotted lines radiative transfer calculation results. On the observed spectra the velocity resolution has been smoothed to 1.1 km s^{-1} .

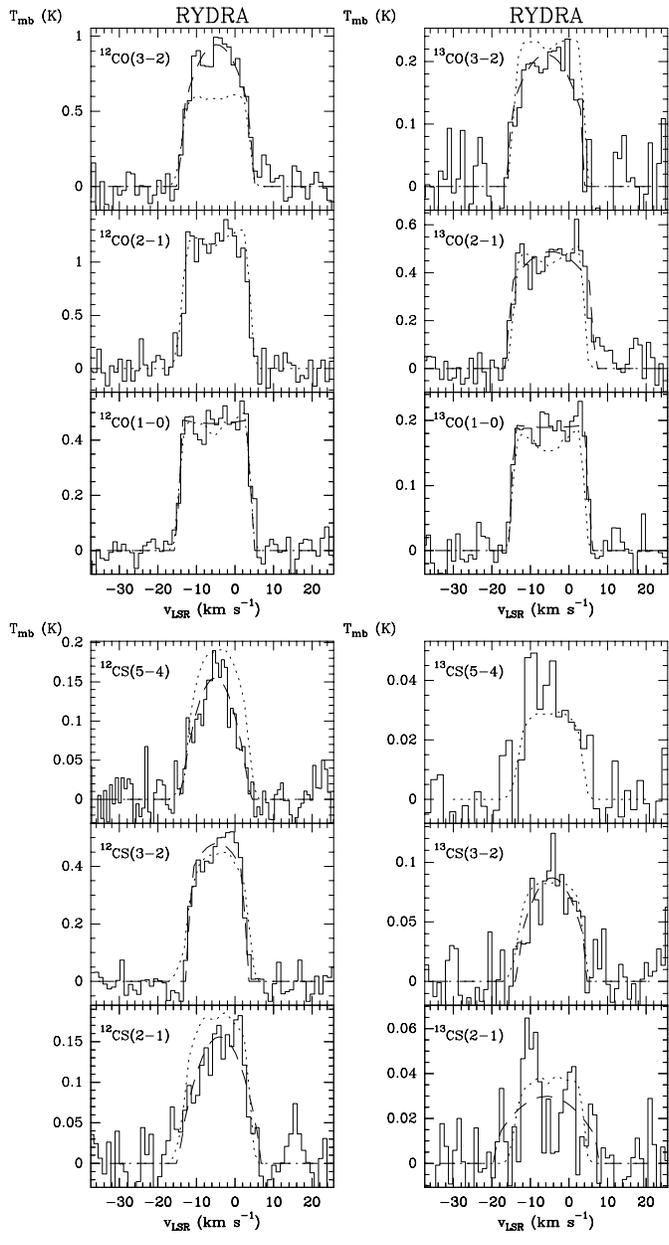


Fig. 2: Molecular spectra observed towards RY Dra. The source coordinates are $\alpha(1950) = 12^h 54^m 28.1^s$, $\delta(1950) = 66^\circ 15' 52''$. The histograms represent observed spectra, the dashed lines model profiles and the dotted lines radiative transfer calculation results. On the observed spectra the velocity resolution has been smoothed to 1.1 km s^{-1} .

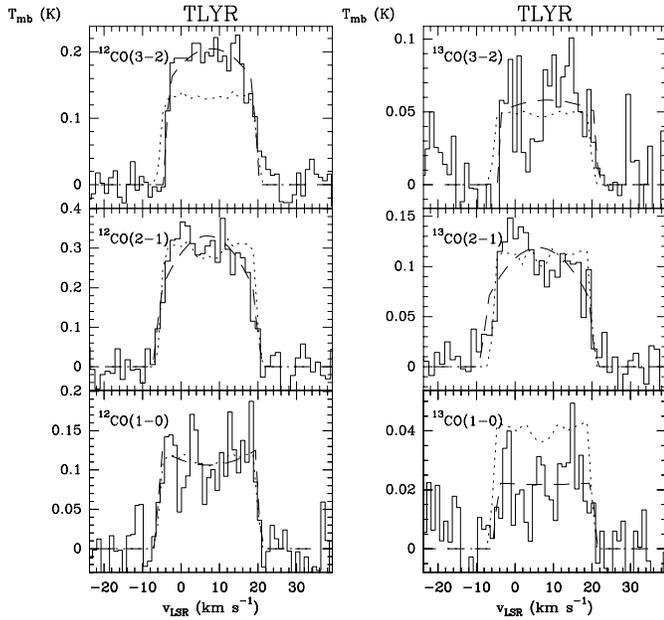


Fig. 3: Molecular spectra observed towards T Lyr. The source coordinates are $\alpha(1950) = 18^h 30^m 36.2^s$, $\delta(1950) = 36^\circ 57' 39.0''$. The histograms represent observed spectra, the dashed lines model profiles and the dotted lines radiative transfer calculation results. On the observed spectra the velocity resolution has been smoothed to 1.1 km s^{-1} except for the ^{12}CO and ^{13}CO lines, observed with 1 MHz filterbank, where the resolution is 1.3 and 1.4 km s^{-1} respectively.

Fig. 4: Molecular spectra observed towards WZ Cas. The source coordinates are $\alpha(1950) = 23^h 58^m 41.9^s$, $\delta(1950) = 60^\circ 04' 37.4''$. The histograms represent observed spectra, the dashed lines model profiles and the dotted lines radiative transfer calculation results. The velocity resolution is 1.3 km s^{-1} for the ^{12}CO line and 1.4 km s^{-1} for the ^{13}CO line, both observed with 1 MHz filterbank.

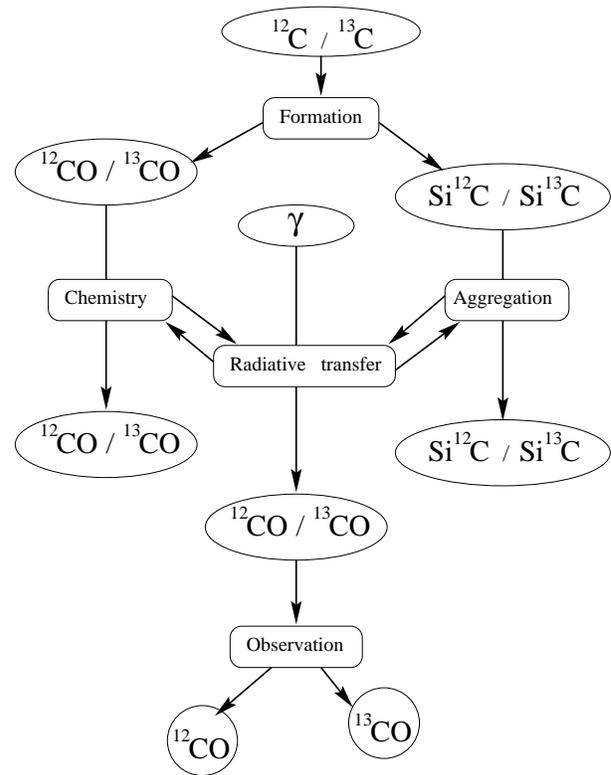


Fig. 5: From elemental isotopic abundances to molecular line intensities.

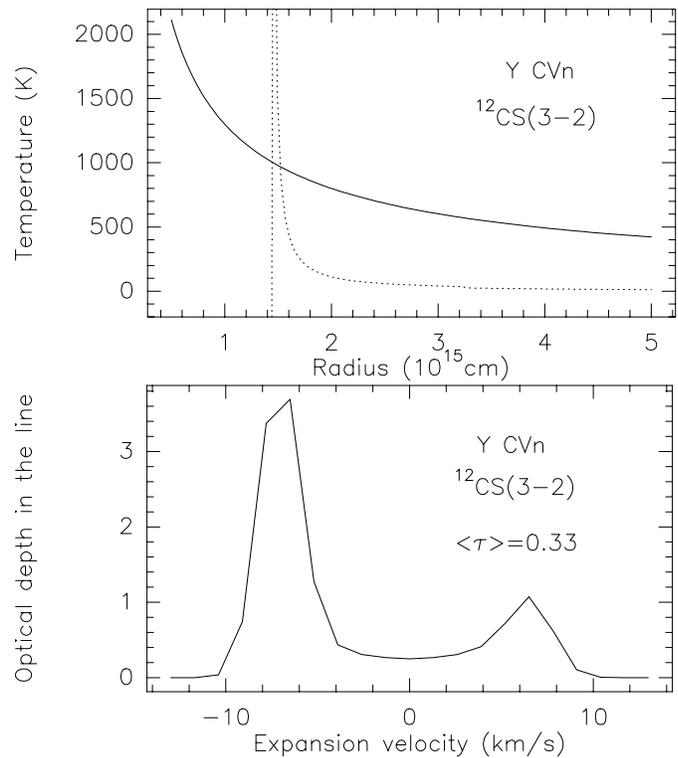


Fig. 6: Excitation temperature (top, dashed line), excitation temperature (top, solid line) and optical depth (bottom) computed for ^{12}CS (3-2) in Y CVn.

Chapitre 3

Une longue attente !

Sommaire

3.1	Un petit détour par les étoiles pré-séquence principale	241
3.2	Tracés complets	257
3.3	Flash de l’Hélium	262

Le chemin des étoiles de l’AGB est long et semé d’’embûches’’ ou de ‘’trésors’’ selon les points de vue! Nous aurions pu réaliser les test voulus sur le troisième dredge-up (voir la section I–1.3.2) en reprenant d’anciens modèles et les poursuivre avec le nouveau code. Cependant, nous avons repris les calculs à partir de la phase PMS car nous y avons vu plusieurs avantages:

- tout d’abord, tester la validité des changements réalisés dans le code d’évolution stellaire. En effet, lorsqu’une étoile évolue de la phase PMS à celle de l’AGB, ses différentes couches traversent une telle diversité de conditions physiques, représentées par les triplets $(\rho, T, \{Y_i\})$, que l’on peut considérer que la physique du code est ainsi assez complètement testée. De plus, nous disposons aussi d’anciens tracés pour quantifier les effets des changements opérés.
- élargir le domaine de modélisation en masse du code et évaluer a posteriori la pertinence des choix physiques effectués. En effet, grâce aux changements d’équation d’état en particulier, le code peut calculer les tracés PMS d’étoiles de très faible masse, $M_* < 0.2 M_\odot$, alors que c’était impossible avant. De plus, si l’on prend en compte l’optimisation réalisée en temps de calcul, cela rend réaliste le calcul du flash de l’Hélium pour les étoiles qui le subissent ($M_* < 2.5 M_\odot$). Des comparaisons avec les modèles d’autres équipes sont essentielles pour estimer la qualité de la physique utilisée.
- obtenir des modèles fiables pour faire les tests de profondeur du troisième dredge-up, sur base de modèles d’étoile de l’AGB issus de calculs évolutifs dont la physique est cohérente depuis le début le début de la phase PMS.

Ce chapitre est donc destiné à exploiter les calculs des phases antérieures à la phase AGB réalisés avec la nouvelle version du code d’évolution stellaire.

3.1 Un petit détour par les étoiles pré-séquence principale

Nous avons donc tout d’abord réalisé plusieurs grilles d’étoiles pré-séquence principale . En effet, pour la première fois le code de Grenoble peut calculer des modèles d’étoiles fiables

jusqu'à $0.1 M_{\odot}$. Ces grilles ont donné lieu à une publication *accepté pour publication dans Astronomy & Astrophysics* qui fait l'objet de la section III–3.1.3. Nous y montrons que les nouveaux tracés obtenus sont compétitifs avec ceux donnés par les meilleures équations d'état utilisées en ce moment et avec les codes les plus modernes ou spécialisés dans ces domaines de masse. A la section III–3.1.1, nous montrerons pourquoi les modèles PMS permettent si efficacement de tester une équation d'état. Un petit résumé des points clés de l'article sera donné ensuite à la section III–3.1.2.

3.1.1 Les étoiles pré-séquence principale, tests pour l'équation d'état

En effet, les étoiles pré-séquence principale sont un très bon test à passer après les modifications opérées sur le code. En particulier, l'équation d'état y est importante pour plusieurs raisons...

Prédominance de l'équation d'état

Tout d'abord, c'est l'équation d'état qui domine la structure et l'évolution de ce type d'étoiles. En effet, ces objets sont complètement convectifs. C'est donc le gradient adiabatique, quantité purement thermodynamique, qui contrôle en première approximation le transport de la chaleur (voir l'équation II–1.13 et l'annexe B) et donc la structure en température de l'étoile.

De plus, ces étoiles sont en contraction et sans brûlage nucléaire permanent. C'est donc le terme source de l'équation d'état, ϵ_{grav} (voir équation II–1.10 à II–1.12), qui permet à la luminosité de l'étoile d'évoluer.

L'impact de l'équation d'état sur ces deux quantités va donc pouvoir se quantifier directement dans le diagramme Hertzsprung-Russell, par comparaison avec les anciens tracés et ceux de la littérature. Ce point sera discuté dans l'article présenté à la section III–3.1.3 (voir aussi le résumé à la section III–3.1.2).

Correction non-idéales

Un exemple des conditions thermodynamiques à l'intérieur des étoiles de faibles masses est donné la figure III–3.1 pour une étoile de $0.2 M_{\odot}$ à métallicité $Z = 0.02$.

Le graphe a été tracé en fonction des couches pour permettre sur une seule figure d'apprécier toutes les valeurs prises par ρ et T . La profondeur optique a été rajoutée pour pouvoir situer la surface de l'étoile. Notons que la profondeur optique est limitée à 10^2 , valeur à partir de laquelle on ne s'intéresse plus à cette quantité physique car le milieu est optiquement épais. Le trait vertical épais délimite sur sa droite une zone dans laquelle $T < 10^4 K$ et $\rho < 10^3$. De telles conditions impliquent des effets coulombiens très importants (voir la figure II–2.2). En règle générale, les effets non-idéaux de l'équation d'état sont surtout testés par les étoiles de faible masse, comme le montre la figure III–3.2. Le profil de la quantité $\beta_c \stackrel{def}{=} \frac{P_{\perp} P_{cor}}{P}$, analogue de β pour la pression de radiation, a été tracée pour plusieurs masses. $\beta_c \rightarrow 1$ indique $P_{cor} \rightarrow 0$, les corrections non-idéales sont négligeables. Un écart à cette valeur quantifie la fraction de pression supportée par les corrections.

Pour pouvoir comparer l'importance des corrections non-idéales dans différentes masses, nous avons choisi comme référence le moment juste après le brûlage du ${}^9\text{Be}$ où la fraction

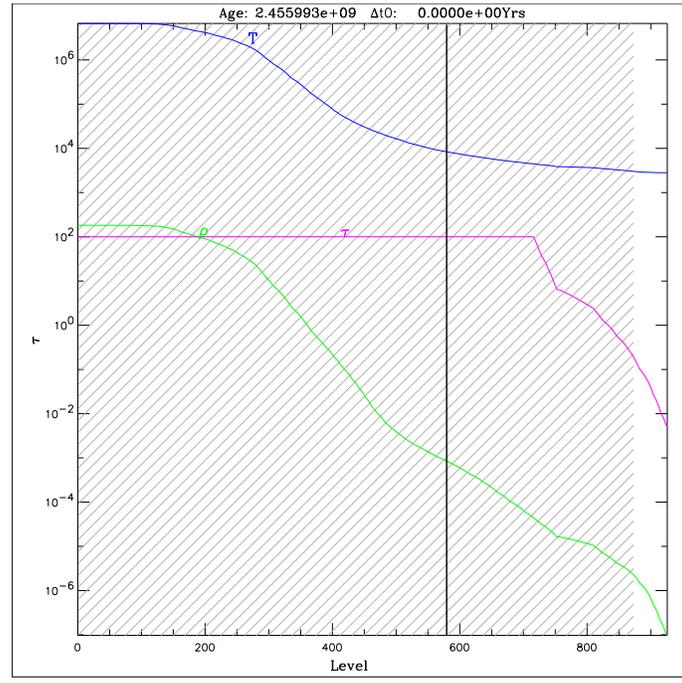


FIG. 3.1 – Conditions thermodynamiques dans une étoile pré-séquence principale de 0.2 masses solaires pour $t = 2.46 \cdot 10^9 \text{ yr}$, $R_{eff} = 0.21 R_{\odot}$, $L = 5.97 \cdot 10^{-3} L_{\odot}$.

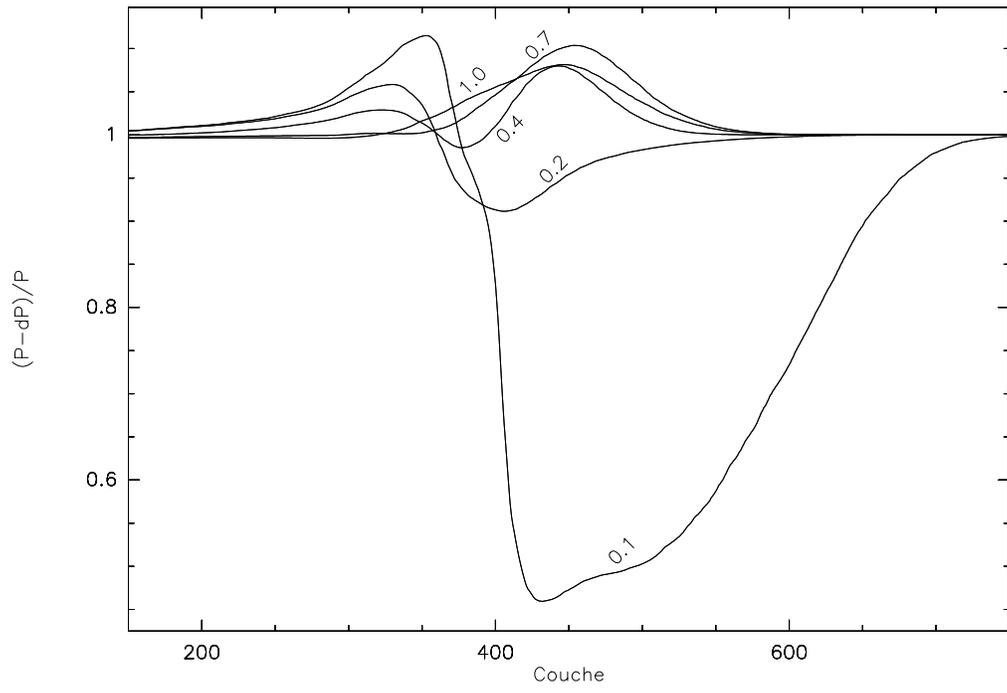


FIG. 3.2 – Corrections non-idéales pour des étoiles PMS de 0.1, 0.4, 0.7 et 1.0 M_{\odot} , juste après le brûlage du Béryllium 9 (les âges correspondants sont donnés dans le texte).

de masse de cet élément atteint la valeur 10^{-36} . Cela correspond respectivement pour les différentes masses tracées (0.1, 0.2, 0.4, 0.7 et 1.0 M_{\odot}) aux âges suivants: $1.65 \cdot 10^9 \text{ yr}$, $8.73 \cdot 10^7 \text{ yr}$, $7.81 \cdot 10^7 \text{ yr}$, $5.49 \cdot 10^7 \text{ yr}$ et $2.10 \cdot 10^7 \text{ yr}$.

Ionisation

Enfin, compte-tenu des faibles températures de surface pour les étoiles pré-séquence principale de faible masse, la molécule de di-Hydrogène devient majoritaire et son influence se fait sentir sur la structure par un changement de poids moléculaire moyen (en vertu de II-2.2 et II-2.295). La formation de cette molécule, et plus généralement l'ionisation des espèces puisque toutes sont reliées (voir la section II-2.6.1), constituera donc un test supplémentaire.

La figure III-3.3 montre la variation d'abondances de H , H^+ , H^- et H_2 (respectivement en rouge, bleu, jaune et violet) dans des étoiles de $0.1, 0.2, 0.4, 0.7$ et $1.0 M_{\odot}$. On retrouve bien, comme on s'y attend une montée des abondances de H_2 et H^- quand la masse décroît, due à la température décroissante et à la plus forte dégénérescence.

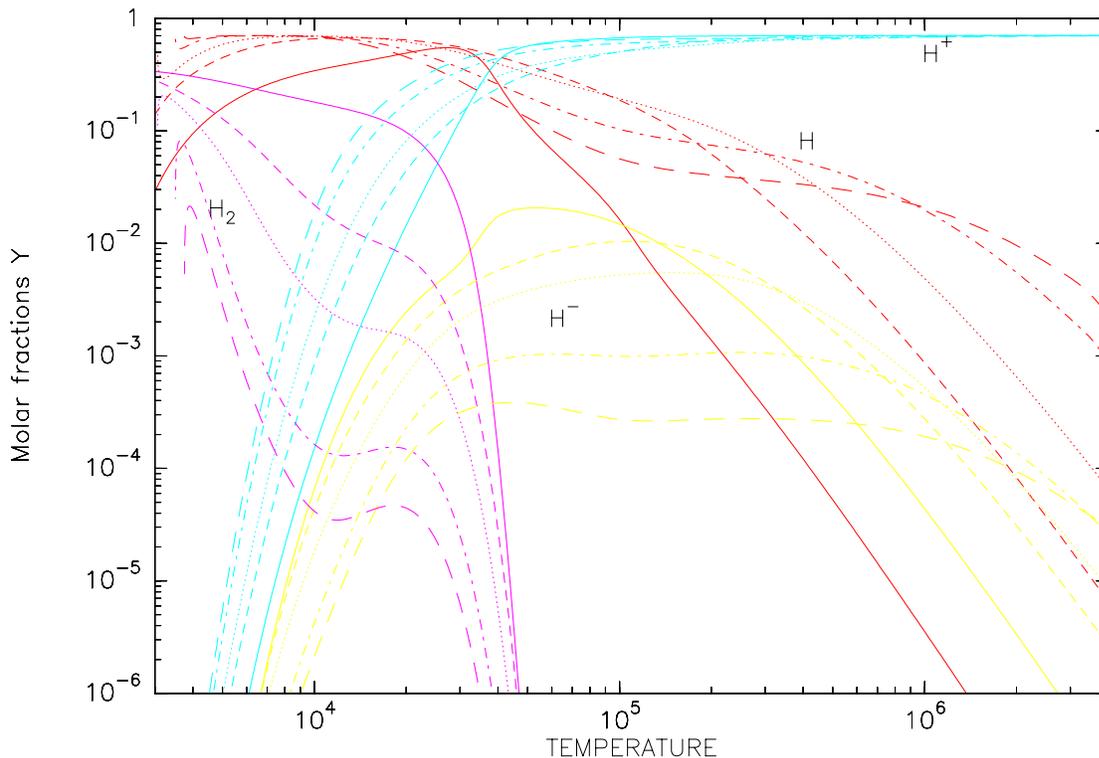


FIG. 3.3 – Variation des profils d'ionisation de l'Hydrogène pour des étoiles PMS de $0.1, 0.2, 0.4, 0.7$ et $1.0 M_{\odot}$ (respectivement en trait plein, tiret, pointillé, tiret-point et longs tirets) juste après le brûlage du Béryllium 9 (les âges correspondants sont donnés dans le texte).

La figure III-3.4 montre, dans une étoile de $7 M_{\odot}$, les profils du gradient adiabatique, du gradient radiatif et de l'opacité à deux moments séparés par $\Delta t \sim 5 \cdot 10^5$ ans.

On constate trois pics d'opacité se répercutant sur le gradient radiatif (voir l'équation II-1.19) et se situant à proximité de zones où le gradient adiabatique a un minimum local, si bien que de petites zones convectives peuvent se former. Ces pics d'opacités s'expliquent par les variations de ρ , T et des abondances des ions.

Les figures III-3.5, III-3.6 et III-3.7 montrent respectivement les profils d'abondance de ρ et T , H, He, et de Ne au moment correspondant à la figure de gauche de III-3.4. Les variations de ρ et T n'ont clairement pas de corrélations avec celles de l'opacité. Par contre, on constate

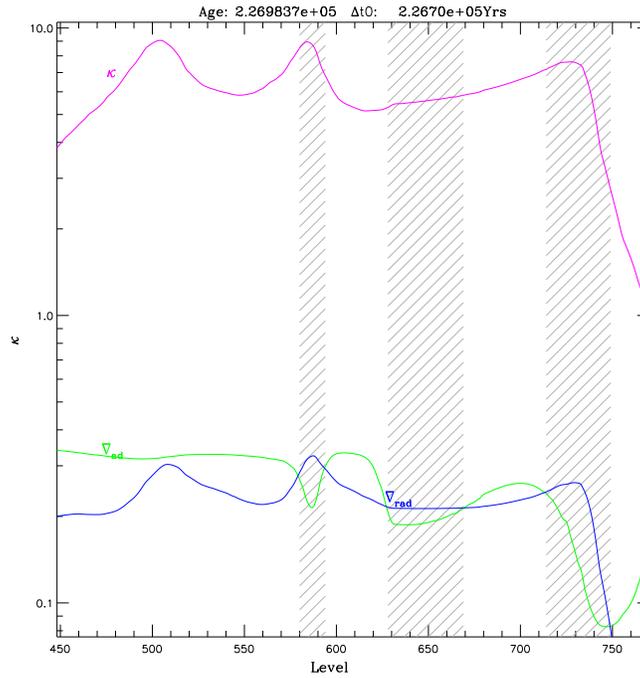


FIG. 3.4 – Zones d'ionisation partielle dans une étoile étoile pré-séquence principale de $7 M_{\odot}$ à $t \sim 2.27 \cdot 10^5 \text{ yr}$, $L = 1357 L_{\odot}$, $R_{\text{eff}} = 11.35 R_{\odot}$

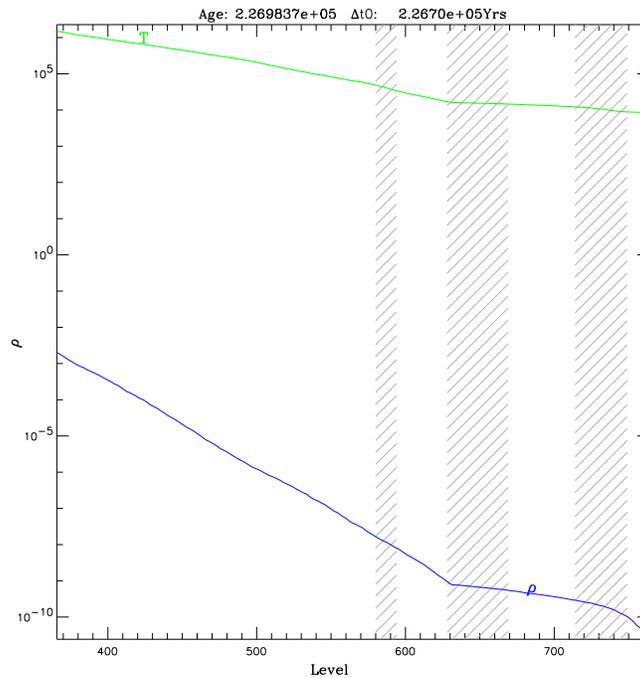


FIG. 3.5 – Profils de ρ et T dans une étoile étoile pré-séquence principale de $7 M_{\odot}$ à $t \sim 2.27 \cdot 10^5 \text{ yr}$, $L = 1357 L_{\odot}$, $R_{\text{eff}} = 11.35 R_{\odot}$.

que chacun des pics d'opacités et donc chacune des trois zones convectives formées correspond exactement à l'emplacement de transitions d'ionisation de l'Hydrogène: H/H^+ à la couche 750 environ, He/He^+ à la couche 635 environ et $\text{He}^+/\text{He}^{++}$ à la couche 590 environ. Par contre le pic présent à la couche 500 ne peut visiblement pas être expliqué par une transition d'ionisation de H ou He. Après inspection de toutes les transitions d'ionisation de

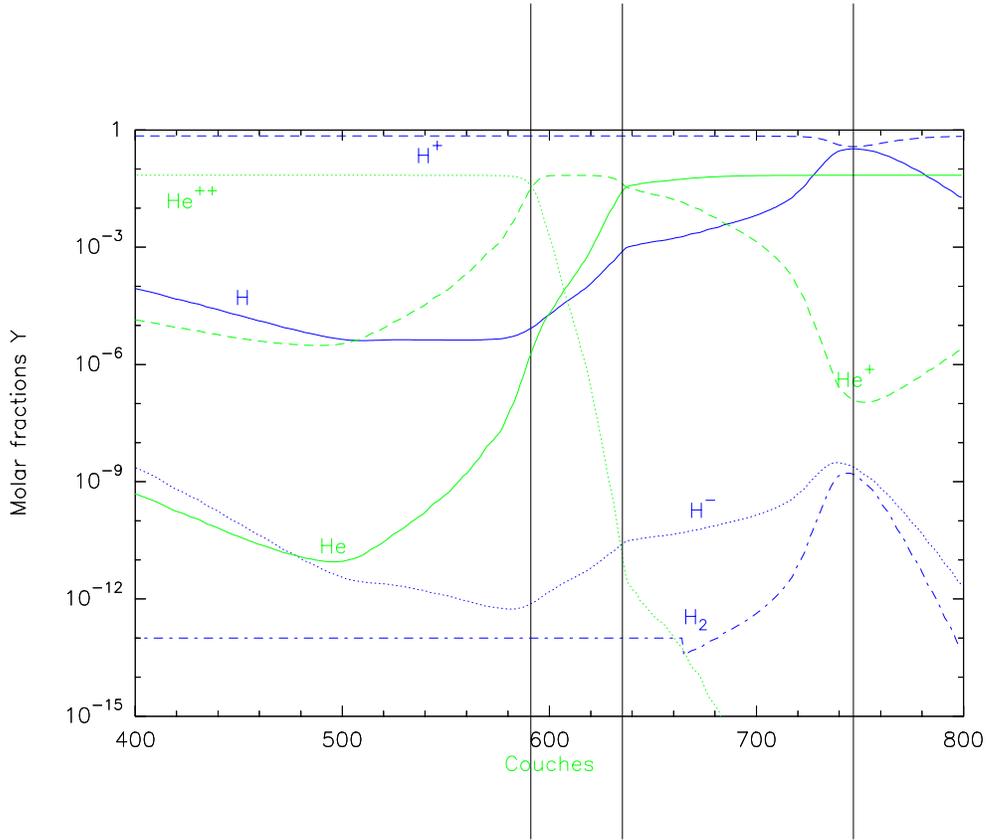


FIG. 3.6 – Abondance des ions de l’Hydrogène (en bleu), de l’Hélium (en vert) dans une étoile étoile pré-séquence principale de $7 M_{\odot}$ à $t \sim 2.27 \cdot 10^5 \text{ yr}$, $L = 1357 L_{\odot}$, $R_{\text{eff}} = 11.35 R_{\odot}$.

C,N,O et Ne, la seule qui soit localisée à la couche 500 pour expliquer le pic d’opacité et de ∇_{rad} est la transition Ne^{7+}/Ne^{8+} .

3.1.2 Résumé des principaux résultats

Ajustement solaire

Avec la physique du nouveau code, un nouvel ajustement solaire a été effectué, de telle manière à reproduire le rayon, la luminosité et la température effective solaire actuelle le plus précisément possible. Les paramètres ajustables pour cela sont α , le paramètre qui exprime la longueur de mélange de la MLT, Λ , en unité de hauteur caractéristique de pression, et Y , l’abondances d’Hélium. Nous avons obtenu pour le couple (L, R) une précision meilleure que 0.1% pour le jeu de paramètre ($\alpha = 1.605, Y = 0.279$) avec une abondance d’éléments lourds fixée à $Z=0.0249$, compatible avec les observations. Les valeurs obtenues pour cet ajustement sont tout-à-fait comparables à celles obtenues par les autres codes d’évolution stellaire modernes (voir Brun *et al.* (1998) par exemple). “Notre” Soleil, calculé de façon standard, c’est-à-dire sans aucun processus de diffusion, a les caractéristiques internes suivantes:

- au centre: $T_c = 1.552 \cdot 10^7 K$, $\rho_c = 145.7 gcm^{-3}$, $Y_c = 0.6187$, $\eta_c = \pm 1.527$.
- à la base de l’enveloppe convective: $M_{\text{base}} = 0.981999 M_{\odot}$, $R_{\text{base}} = 0.73322 R_{\odot}$, $T_{\text{base}} = 1.999 \cdot 10^6 K$, $\rho_{\text{base}} = 1.3961 \cdot 10^{12} gcm^{-3}$.

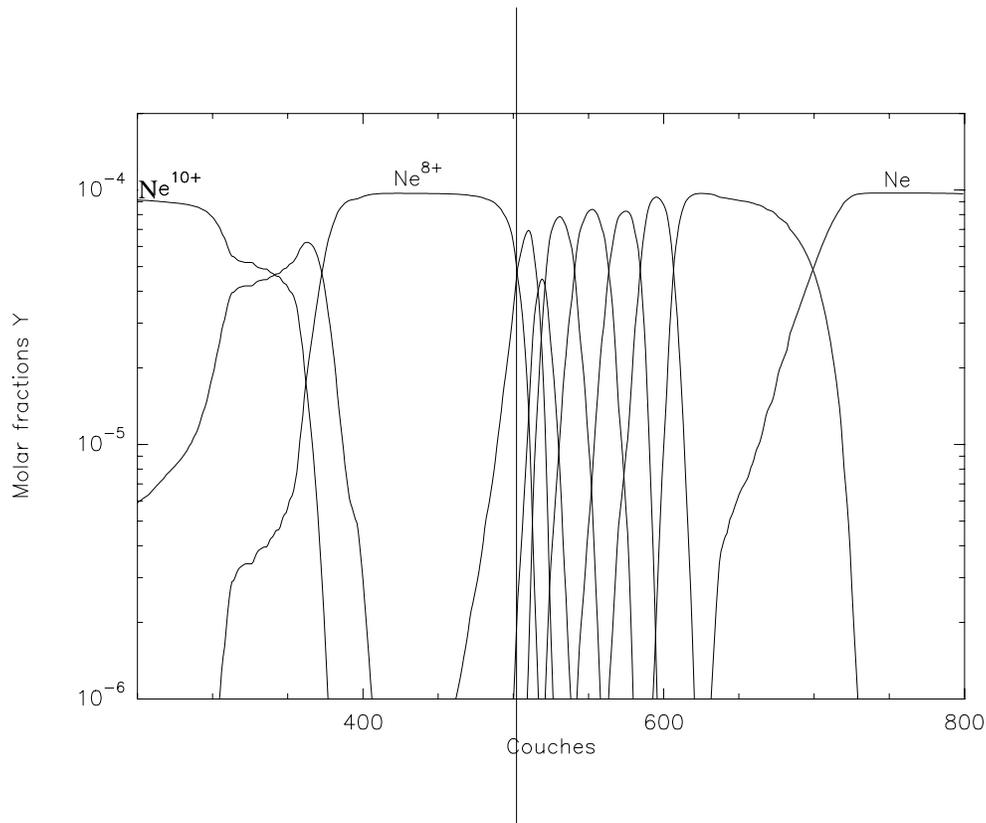


FIG. 3.7 – Abondance du Néon dans une étoile étoile pré-séquence principale de $7 M_{\odot}$ à $t \sim 2.27 \cdot 10^5 \text{ yr}$, $L = 1357 L_{\odot}$, $R_{eff} = 11.35 R_{\odot}$.

Ces nombres sont très proches de tous les modèles standards publiés récemment (Brun *et al.* (1998), Morel *et al.* (1999), Bahcall & Pinsonneault (1996)) et donne la position *observée* de la zone convective avec moins de 3% d'erreur. Ces caractéristiques auraient pu être encore plus proche des valeurs observées en incluant les processus de diffusion microscopique et/ou turbulente, implémentés durant ma thèse et maintenant disponible dans notre code.

Energie gravothermale

La phase étoile pré-séquence principale est un test particulièrement efficace pour l'écriture de l'énergie gravothermale, ϵ_{grav} . En effet, lorsque l'étoile possède une source d'énergie centrale, ce terme est négligeable devant ϵ_{nuc} . Or, à la phase PMS, l'étoile n'a pas encore de source nucléaire stable et se trouve dans une phase de contraction où le profil de luminosité est donc dominé par la quantité ϵ_{grav} . Dans ce contexte, nous avons testé avec succès les trois écritures possibles de cette quantité, rappelées dans les équations II-1.10 à II-1.12. Cela implique, en particulier, que notre profil d'entropie, à partir duquel nous dérivons toutes les quantités thermodynamiques, y compris l'énergie gravothermale quand nous utilisons II-1.12, est bien modélisé et correctement implémenté.

Origines des différences entre tracés

Nos tracés sont comparés avec ceux de cinq autres publications: Baraffe *et al.* (1998), Charbonnel *et al.* (1999), D'Antona & Mazzitelli (1997), Swenson *et al.* (1994), Siess *et al.*

(1997). Les tracés diffèrent d'un groupe à l'autre à cause de différences dans la *physique constitutive* (principalement l'équation d'état et la convection) mais aussi dans le traitement des *conditions de frontière en surface*. Par ailleurs, on note deux types de différences d'un tracé à l'autre: celles qui concernent la *forme* du tracé et celles qui concernent la *position* de celui-ci. Les premières sont principalement liées aux changements de physique constitutive alors que celles rangées dans la deuxième catégorie se rapportent plus facilement aux paramètres libres (α, Y, Z) et/ou aux conditions de surface.

A ce propos, la physique constitutive ayant été présentée dans les chapitres II-2 (équation d'état), II-3 (convection) et II-1 (pour le reste), donnons quelques indications nécessaires sur le traitement de l'atmosphère dans le code. Les équations de la structure stellaire sont intégrées du centre vers l'extérieur jusqu'à une très faible épaisseur optique ($\tau = 0.005$) dans l'atmosphère. Dans les régions où $\tau < 10$, nous prenons comme profils de température ceux qui sont calculés dans des modèles réalistes d'atmosphère après intégration d'une équation de transfert radiatif (voir chapitre II-5). Pour cela, nous avons réalisé des ajustements de $T(\tau)$ en fonction de trois paramètres (T_{eff}, g_{eff}, Z), la température et le champ de gravité effectif et la métallicité de l'étoile. Ils ont été calculés d'après les modèles de Plez (1992) pour $T_{eff} < 3900K$, Eriksson jusqu'à $T_{eff} = 5500K$ (1994, communication privée, même physique que Bell *et al.* (1976)) et Kurucz (1991) pour $T_{eff} > 5500K$. Ces ajustements assurent une convergence rapide à cause de la régularité des profils $T(\tau)$ et de leurs dérivées. Notons aussi que la définition de l'atmosphère joue un rôle essentiel dans les comparaisons et peut expliquer des différences de température jusqu'à 100K. On peut en effet choisir l'une ou l'autre des définitions suivantes:

$$T_{eff} = \left(\frac{L(\tau = 2/3)}{4\pi\sigma R^2(\tau = 2/3)} \right)^{1/4} \quad \text{ou} \quad T_{eff} = T(\tau = 2/3) \quad (3.1)$$

La deuxième expression, lorsqu'elle est utilisée dans nos calculs, donne une température effective plus faible.

Analyse des différences

L'article montre que, quel que soit la masse de l'étoile considérée:

- la forme des tracés est très similaire à ceux de Charbonnel *et al.* (1999) et Baraffe *et al.* (1998). En particulier, pour $M_* < 0.2 M_\odot$, les tracés de Baraffe *et al.* (1998) et les nôtres sont quasiment superposables.
- la position en température effective de nos tracés est toujours intermédiaire entre celle de Baraffe *et al.* (1998) et Charbonnel *et al.* (1999).

Ces deux remarques prouvent respectivement:

- que nous décrivons proprement la thermodynamique de ces étoiles, y compris dans le domaine des très faibles masses.
- que nos ajustements des modèles d'atmosphère sont globalement valides. En particulier, on ne s'attend pas à des discontinuités dans les dérivées du profil $T(\tau)$ ajusté car un seul fit analytique est calculé pour couvrir les domaines de définitions des trois modèles différents utilisés (Kurucz (1991), Plez (1992) et Eriksson).

Par ailleurs, de fortes différences de forme existent pour les étoiles de très faibles masses avec D'Antona & Mazzitelli (1997) et Swenson *et al.* (1994). L'équation d'état de Magni &

Mazzitelli (1979) utilisée par D’Antona & Mazzitelli (1997) donnant des résultats similaires aux autres (Saumon *et al.* 1995), ces écarts sont plutôt attribués à leur théorie de la convection, très différente de celle utilisée par les autres codes (théorie de la MLT, voir annexe D) et à leur hypothèse d’atmosphère grise, trop approximative pour modéliser les étoiles si froides en surface que sont les étoiles de très faibles masses.

Enfin, plus la masse des étoiles modélisées augmente et plus les tracés deviennent similaire en forme. Il reste des différences en température effective (jusqu’à 200K) que l’on peut attribuer aux différences de composition chimique ou à α . De même, les tracés de Charbonnel *et al.* (1999) ont systématiquement des T_{eff} plus élevées que les nôtres à cause de l’utilisation d’une atmosphère grise et ceux de Baraffe *et al.* (1998) ont des T_{eff} plus faibles que tous les autres modèles parce qu’ils n’incluent pas les éléments plus lourds que l’Hélium.

3.1.3 Article: “An internet server for update pre main sequence tracks of low- and intermediate-mass stars”

An internet server for pre-main sequence tracks of low- and intermediate-mass stars

L. Siess, E. Dufour, and M. Forestini

Observatoire de Grenoble, Laboratoire d'Astrophysique, Université Joseph Fourier, B.P. 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France

Received 8 December 1999 / Accepted 31 March 2000

Abstract. We present new grids of pre-main sequence (PMS) tracks for stars in the mass range 0.1 to $7.0 M_{\odot}$. The computations were performed for four different metallicities ($Z=0.01, 0.02, 0.03$ and 0.04). A fifth table has been computed for the solar composition ($Z=0.02$), including a moderate overshooting. We describe the update in the physics of the Grenoble stellar evolution code which concerns mostly changes in the equation of state (EOS) adopting the formalism proposed by Pols et al. (1995) and in the treatment of the boundary condition. Comparisons of our models with other grids demonstrate the validity of this EOS in the domain of very low-mass stars. Finally, we present a new server dedicated to PMS stellar evolution which allows the determination of stellar parameters from observational data, the calculation of isochrones, the retrieval of evolutionary files and the possibility to generate graphic outputs.

Key words: equation of state – stars: evolution – stars: Hertzsprung–Russel (HR) and C–M diagrams – stars: pre-main sequence – astronomical data bases: miscellaneous

1. Introduction

Interest in modeling of very low-mass stars (VLMS) has grown steadily over the past decade, due to a large amount of work, both theoretical and observational. Brown dwarfs and very low-mass stars are now frequently discovered and the abundant literature in this domain attests to the vitality of this field. From these observations, we now realize that very low-mass stars represent a large fraction of the stellar population. However, the precise determination of the initial mass function, and more generally of stellar parameters and evolutionary states is still limited by the accuracy of stellar models. It is therefore desirable that different tracks be available in order to understand the theoretical discrepancies and also to estimate the uncertainties associated with the derivation of stellar parameters.

On the theoretical side, the computation of the structure of very low-mass stars is very challenging since it involves the micro-physics associated with dense, cold and partially degenerate matter. In the interior of VLMS, collective effects due to

large densities become important and an accurate treatment of pressure ionization and Coulomb interactions is required. Also, in the cool atmosphere of VLMS, several molecules form and produce strong absorption bands that considerably modify the emergent spectrum. As a consequence, the stellar surface cannot be considered as a black body and stellar atmosphere models must also be used.

Since our last grids (Siess et al. 1997, hereafter SFD97), substantial improvements have been made in the Grenoble stellar evolution code that led us to the production of new grids of PMS tracks. The main modification to the code concerns the equation of state (EOS) which treats more accurately the behavior of cold and degenerate matter. In particular, we now take into account the effects associated with the pressure ionization and treat more carefully degeneracy conditions in stellar interior. We also updated the opacity tables using the latest release of the OPAL group and modified our surface boundary conditions using analytic fits to stellar atmosphere models. The updates to the code are described in Sect. 2 followed by a brief description of the grids. Then in Sect. 4 we compare our models to grids recently published by other groups. Finally, we describe a new server dedicated to PMS evolution.

2. The stellar evolution code

A general description of the stellar evolution code has already been presented in several papers (i.e. Forestini 1994, SFD97) and only subsequent modifications are discussed. They include updates in the opacity tables, in the treatments of the atmosphere and the incorporation of a new formalism for the equation of state.

2.1. Opacity tables

At high temperature (i.e. above 8000 K), we use the OPAL radiative opacities by Iglesias and Rogers (1996) which now include additional metal elements. The tables are interpolated in temperature, density and H, He, C, O and metal mass fraction using the subroutine provided by the OPAL group. However, for the computation of very low-mass stars ($M \lesssim 0.2 M_{\odot}$), we had to extrapolate the opacity tables to $\log R = \log(\rho/T_6^3) = 4.0$ but this is of little effect since the internal region concerned

with this extrapolation ($T \gtrsim 10^5$ K) has an almost adiabatic behavior. Consequently, the temperature gradient is governed by the thermodynamics coming from the equation of state and is nearly independent of the opacity coefficient. Conductive opacities are computed from a modified version of the Iben (1975) fits to the Hubbard and Lampe (1969) tables for non-relativistic electrons, from Itoh et al. (1983) and Mitake et al. (1984) for relativistic electrons and from formulae of Itoh et al. (1984) as well as Raikh and Yakovlov (1982) for solid plasmas. Below 8000 K, we use the atomic and molecular opacities provided by Alexander and Ferguson (1994) as in SFD97.

2.2. Treatment of the atmosphere

The stellar structure is integrated from the center to a very low optical depth ($\tau = 0.005$) in the atmosphere. In the regions where $\tau < 10$, we constrain the atmospheric temperature profile (as well as the radiative pressure and gradient) to correspond to those coming from realistic atmosphere models determined by the integration of the radiative transfer equation. More specifically, we have performed one analytic fit of $T(\tau)$, as a function of effective temperature T_{eff} , surface gravity g_{eff} and metallicity Z which agrees with the atmosphere models to within 20% or less. The parameters of this fit are constrained by various atmosphere models, namely (1) Plez (1992) for $2500 < T_{\text{eff}} < 4000$ K, (2) Eriksson (1994, private communication, using a physics similar to Bell et al. 1976) up to 5500 K and (3) Kurucz's models (1991) computed with the ATLAS 12 code above 5500 K. Unfortunately, the lack of atmosphere models in some regions of the $Z - g_{\text{eff}}$ plane did not allow us to precisely determine the behavior of this fit at high gravity and/or non solar metallicities. This can potentially affect the modeling of very low-mass stars but considering the weak dependence of our fit on Z and g_{eff} compared to the one on T_{eff} , we decided to use this unique fit in all our computations instead of using a grey atmosphere approximation. This fit also provides a faster convergence in the surface layers due to the smooth profile of $T(\tau)$ and of its derivatives. Finally, let us mention that we define the effective temperature as $T_{\text{eff}} = (L/4\pi\sigma R^2)^{1/4}$ where L and R are estimated at $\tau = 2/3$.

2.3. Equation of state

In order to improve the description of the micro-physics relevant to VLMS, we have revisited the computation of the equation of state (EOS), adopting the scheme developed by Pols et al. (1995, hereafter PTEH). This new formalism is characterized by three main points:

- we adopt the chemical point of view (i.e. Saumon et al. 1995) where bound configurations (ions, molecules) are populated according to matter-photons and matter-matter interactions,
- we use the assumption of local thermodynamic equilibrium which allows the use of the Saha equations to determine the ion abundances as a function of the local values of temperature, T and number of electrons per unit mass, N_e ,

- the plasma is described by three components, photons, ions and electrons, coupled only through the photo-ionization and photo-dissociation processes. Each component of the plasma is represented by an independent term in the Helmholtz free energy (Fontaine et al. 1977). Non-ideal corrections due to Coulomb shielding and pressure ionization are treated separately in an additional term whose expression has been fitted to the MHD EOS (Mihalas et al. 1988). This fit allows us to treat the regime of strong coupling while keeping the formalism of a separate additive term in the free energy to describe non-ideal effects (as explained in Saumon et al. 2000).

This new equation of state allows us to better take into account the effects of pressure ionization, partially degenerate matter and Coulomb interactions and provides very smooth profiles of the thermodynamic quantities since analytical expressions of all their derivatives can be obtained. Note that, as we will see in the next section, the computation of this EOS naturally introduces a new independent variable related to degeneracy.

2.3.1. A new variable

The general philosophy of this new EOS is to replace the density ρ (or pressure P) by a new independent variable which describes the electron degeneracy. To do so, we use the electron degeneracy parameter $\eta_e = \beta\xi_e$ where $\beta = 1/kT$ and ξ_e is the electron chemical potential. In this context, the density is given by

$$\rho = \frac{n_e(\eta_e, T)}{N_e(\eta_e, T, y_X)}, \quad (1)$$

where n_e , N_e and y_X are the number of electrons per unit volume, per unit mass and the molar fraction of a chemical element X , respectively.

N_e depends on η_e and T through the generalized Saha equations, and through the mass and charge conservation equations

$$N_e = \sum_{X,i} iN_{X^{i+}} \quad (2)$$

$$N_{X^{(i+1)+}} = N_{X^{i+}} \frac{\mathcal{Z}_{X^{(i+1)+}}}{\mathcal{Z}_{X^{i+}}} e^{-\eta_e - \Delta\eta_e - \beta\chi^{i+}} \quad (3)$$

$$N_{\text{H}_2} = \mathcal{Z}_{\text{H}_2} \left(\frac{N_{\text{H}}}{\mathcal{Z}_{\text{H}}} \right)^2 \quad \text{for H}_2 \quad (4)$$

$$y_X \mathcal{N}_a = \sum_i N_{X^{i+}} \quad \text{for } X \neq \text{H} \quad (5)$$

$$y_{\text{H}} \mathcal{N}_a = N_{\text{H}} + N_{\text{H}^+} + 2N_{\text{H}_2} + N_{\text{H}^-} \quad \text{for H} \quad (6)$$

where $N_{X^{i+}}$ represents the number per unit mass of the i times ionized atom X^{i+} (i can be negative for H^- for example), χ^{i+} its ionization potential, $\mathcal{Z}_{X^{i+}}$ its partition function and A_X its atomic molar mass. $\Delta\eta_e$ contains the contributions owing to the non-ideal effects of Coulomb interactions and pressure ionization which will be described in the following section. The use of η_e instead of ρ as the input variable for the Saha equations,

allows us to analytically derive the ionization states for all the desired elements anywhere in the star.

The number of electrons per unit volume n_e is then obtained in terms of η_e and T through the Fermi-Dirac integral

$$n_e = \frac{8\pi}{\lambda_c^3} \int_0^\infty \frac{y^2 dy}{e^{\frac{x}{T^*} - \eta_e} + 1} \quad (7)$$

where $y = \frac{p}{m_e c} = x^2 + 2x$, λ_c is the electron Compton wavelength and $T^* = kT/m_e c^2$. This is a general definition which allows for relativistic electrons. In order to speed up the computation of n_e , we use polynomial fits to this integral. These fits have a simple form when expressed in terms of two variables, called f and g by Eggleton et al. (1973), arising from the asymptotic expansion of Eq. 7. Following these authors,

$$\eta_e = \ln(f) + 2 \times (\sqrt{1+f} - \ln(1 + \sqrt{1+f})). \quad (8)$$

As a consequence, the variable $\ln(f)$ (hereafter $\ln f$), very well suited to describe the degeneracy of the plasma, is our new independent variable replacing ρ in the stellar structure equations. The change of variable $\rho(\ln f, T, y_i)$ is defined by Eqs. 1, 2, 7 and 8. In weakly degenerate conditions, $\ln f$ can be identified with a good approximation to the degeneracy parameter η_e while at high degeneracy f scales as η_e .

2.3.2. Physical ingredients of the EOS

The plasma is always considered as *partially* ionized for H, He, C, N, O and Ne. The other species are considered to be either neutral or totally ionized. Our tests indicate that for $M < 3 M_\odot$, the structure and evolution of the stars are almost indistinguishable in both prescriptions (as far as PMS is concerned). In the more massive stars ($M \gtrsim 3 M_\odot$) we report that models assuming total ionization for the heavy elements have initially a slightly shallower convective region but when the star reaches the ZAMS, these differences vanish.

Non-ideal effects include Coulomb shielding for all species and pressure ionization for H, He, C, N and O, except for H^- . Both effects have been incorporated following PTEH by means of analytic fits to the non-ideal terms in the Helmholtz free energy. The fit to the pressure ionization has been derived from the MHD EOS for a mixture $X=0.70$ and $Z=0.02$. Nevertheless, they have been used in all our computations, regardless of the chemical composition. According to Pols (private communication), this is a reasonable approximation since these fits give the expected behavior of pressure ionization as a function of T and of the degeneracy parameters (η_e or $\ln f$).

The computation of H_2 and H^- abundance is taken into account. For H_2 , the partition function of Irwin (1987) is used in Eq. 3 below 16000 K and had to be extrapolated at higher temperatures to ensure the convergence of the model. This is certainly of little importance since in this region H_2 is insignificant. It must be noted that for very low-mass stars ($M \lesssim 0.4 M_\odot$), H_2 becomes very abundant in the surface layers and must be included in the computations to ensure consistency between the atmosphere models (which include this molecule) and the EOS.

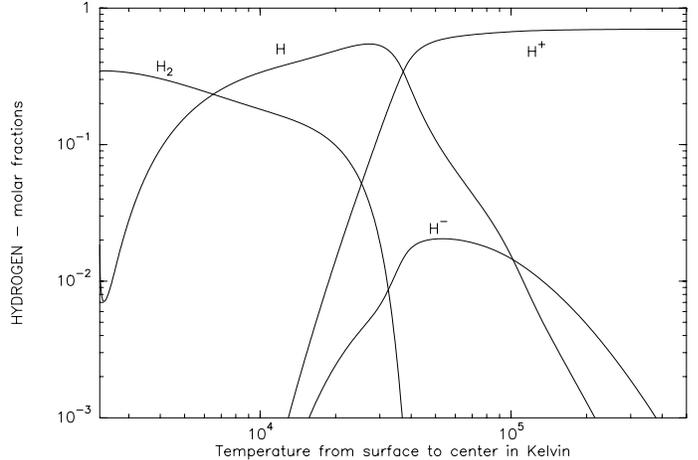


Fig. 1. Profiles of H, H^+ , H^- and H_2 inside a $0.1 M_\odot$ on the ZAMS. The star has an age of 8.36×10^9 yr, a solar composition and is located in the HRD at $T_{\text{eff}} = 2776$ K and $L = 8.2 \times 10^{-4} L_\odot$

For example, in a $0.1 M_\odot$ 50% of the hydrogen is trapped into H_2 at a temperature of 11800 K (Fig. 1). Further inside the star, this molecule cannot survive.

Due to its negative charge, the abundance of H^- derived from Eq. 3 is proportional to $\exp(\eta_e)$ instead of $\exp(-\eta_e)$. This different dependence of H^- abundance on the degeneracy parameter is not reproduced by the fit to the pressure ionization, thus preventing for the moment the treatment of this effect on this ion. This different behavior also explains why the peak of H^- is located at the maximum of the degeneracy parameter, around $T = 5 \times 10^4$ K where $\eta_e = 3.02$. We also verified that because of its small abundance in the encountered conditions, H^- has a negligible effect on the evolution tracks, even if its influence on the opacity coefficient can be large. Finally, in the central region of the star, H only subsists in its ionization state H^+ .

Compared to Pols et al. (1995), our EOS presents slight modifications which mostly concern the treatment of ionization. More specifically, now that we compute the ionization states of C, N, O and Ne everywhere in the star, the elements for which ionization is not followed can be considered either completely ionized or neutral. The most recent partition function of Irwin (1987) is used for H_2 instead of Vardya's (1960) and the presence of H^- has been accounted for in the Saha equations. Apart from these modifications, the basic scheme and physical inputs (mainly the treatments of the non-ideal corrections and degeneracy) are the same. We checked that by adopting the same ionization treatment as PTEH (i.e. without the computation of H^- and assuming complete ionization for all the elements heavier than He), all the physical quantities derived from our EOS are comparable to that computed by PTEH to within less than 1%. Consequently, we refer the reader to these authors for a detailed comparison of this EOS with others. In particular, they found that due to the use of a simplified treatment of pressure ionization, this EOS can differ by up to 10% with the MHD and OPAL EOS, and even a bit more in the region of the $\rho - T$ plane delimited by the $3.0 < \log T < 4.5$ and $0 < \log \rho < 2$.

3. Pre-Main sequence computations

3.1. Initial models

Our initial models are polytropic stars that have already converged once with the code. The central temperature of all our initial models is below 10^6 K so deuterium burning has not yet taken place. The stars are completely convective except for $M \geq 6 M_{\odot}$ where a radiative core is already present. For solar metallicity ($Z = 0.02$), we use the Grevesse and Noels (1993) metal distribution. For different Z , we scale the abundances of the heavy elements in such a way that their relative abundances are the same as in the solar mixture.

3.2. The grids

Our extended grids of models includes 29 mass tracks spanning the mass range 0.1 to $7.0 M_{\odot}$. Five grids were computed for four different metallicities encompassing most of the observed galactic clusters ($Z = 0.01, 0.02, 0.03$ and 0.04) and, for the solar composition ($Z = 0.02$), we also computed a grid with overshooting, characterized by $d = 0.2 H_p$, where d represents the distance (in units of the pressure scale height H_p measured at the boundary of the convective region) over which the convective region is artificially extended. An illustration of these grids is presented in Fig. 2. Our computations are standard in the sense that they include neither rotation nor accretion. The Schwarzschild criterion for convection is used to delimit the convective boundaries and we assume instantaneous mixing inside each convective zone at each iteration during the convergence process.

During the PMS phase, the completely convective star contracts along its Hayashi track until it develops a radiative core and finally, at central temperatures of the order of 10^7 K, H burning ignites in its center. The destruction of light elements such as ^2H , ^7Li and ^9Be also occurs during this evolutionary phase. Deuterium is the first element to be destroyed at temperatures of the order of 10^6 K. The nuclear energy release through the reaction $^2\text{H}(p,\gamma)^3\text{He}$ temporarily slows down the contraction of the star. Then, ^7Li is burnt at $\sim 3 \times 10^6$ K shortly followed by ^9Be . For a solar mixture, our models indicate that stars with mass $\leq 0.4 M_{\odot}$ remain completely convective throughout their evolution. We also report that in the absence of mixing mechanisms, stars with $M > 1.1 M_{\odot}$ never burn more than 30% of their initial ^7Li .

The account of a moderate overshooting characterized by $d = 0.20 H_p$, significantly increases the duration of the main sequence (MS) for stars possessing a convective core and provides additional Li depletion during the PMS phase. More quantitatively, the MS lifetime of a $1.2 M_{\odot}$ star is increased by 25%, this percentage then decreases to level off at around a 15% increase for $M \gtrsim 3 M_{\odot}$. Surface depletion of Li occurs only in stars with $0.4 < M \lesssim 1.3$ for which the temperature at the base of the convective envelope can reach 3×10^6 K. Our models including overshooting indicates that Li is much more efficiently depleted around $0.8 M_{\odot}$, where its abundance is $\sim 3 \times 10^5$ smaller than in a standard evolution.

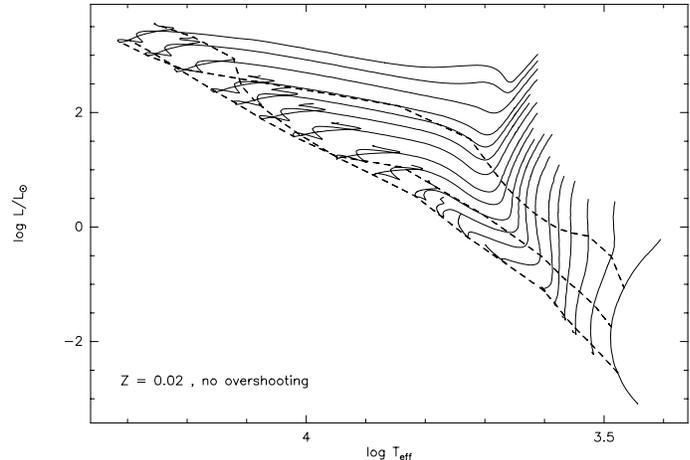


Fig. 2. Evolutionary tracks from 7.0 to $0.1 M_{\odot}$ for a solar metallicity ($Z=0.02$ and $Y=0.28$). Isochrones corresponding to 10^6 , 10^7 and 10^8 (dashed lines) are also represented. This figure has been generated using our internet server

3.3. Our fitted solar model

With the above physics, we have fitted the solar radius, luminosity and effective temperature to better than 0.1% with the MLT parameter $\alpha = 1.605$ and an initial composition $Y = 0.279$ and $Z/X = 0.0249$ that is compatible with observations. The values used for this fit are quite similar to those obtained by other modern stellar evolution codes (see e.g. Brun et al. 1998). Our sun, computed in the standard way, i.e. without the inclusion of any diffusion processes, has the following internal features

- at the center: $T_c = 1.552 \times 10^7$ K, $\rho_c = 145.7 \text{ g cm}^{-3}$, $Y_c = 0.6187$ and the degeneracy parameter $\eta_c = -1.527$;
- at the base of the convective envelope: $M_{\text{base}} = 0.981999 M_{\odot}$, $R_{\text{base}} = 0.73322 R_{\odot}$, $T_{\text{base}} = 1.999 \times 10^6$ K and $\rho_{\text{base}} = 1.39610^{-2} \text{ g cm}^{-3}$.

These numbers are in very close agreement with other recently published standard models (see e.g. Brun et al. 1998, Morel et al. 1999, Bahcall & Pinsonneault 1996).

In our grid computed with overshooting, we found that the $1 M_{\odot}$ model maintains a small convective core of $\sim 0.05 M_{\odot}$ during the central H burning phase. This would consequently be the case for the fitted sun but present day helioseismic observations cannot exclude this possibility (e.g. Provost et al. 2000).

4. Comparison with other studies

In this section we compare our PMS tracks with the computations made available by the groups listed in Table 1. These comparisons show the accuracy of the EOS and the pertinence of our models in the domain of VLMS.

Pre-main sequence tracks differ from one group to another due to differences in the constitutive physics (EOS, convection), but also in the treatment of the surface boundary conditions. In the last decade, a tremendous amount of work has been done to

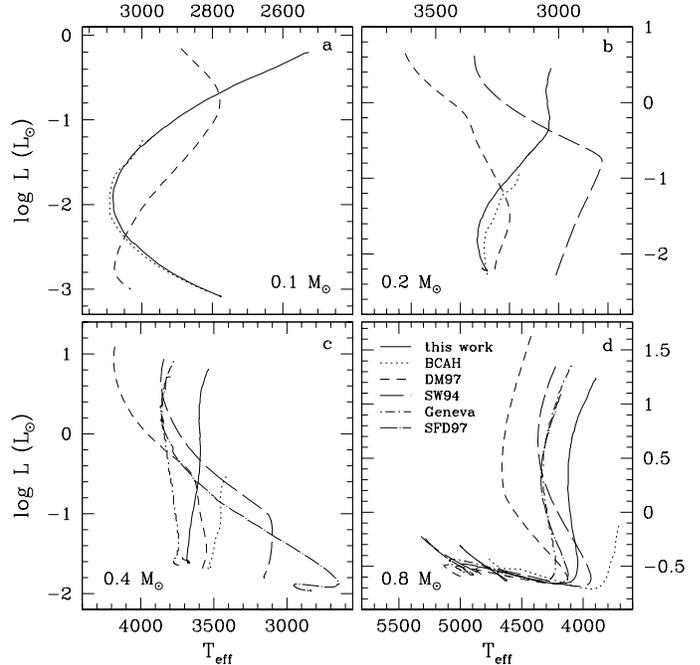
Table 1. PMS stellar models used in the comparisons

X	Z	Group	Code
0.725	0.019	Baraffe et al. (1998)	BCAH
0.680	0.020	Charbonnel et al. (1999)	Geneva
0.691	0.019	D’Antona & Mazzitelli (1997)	DM97
0.699	0.019	Swenson et al. (1994)	SW94
0.703	0.020	Siess et al. (1997)	SFD97
0.703	0.020	This study	

better understand the physical processes taking place in the extreme regime of high density and low temperature encountered in the interior of VLMS. Three main EOS have emerged: the MHD EOS used by the Geneva group and by DM97, the SCVH EOS (Saumon et al. 1995, hereafter SCVH95) used by Baraffe et al. (1998, hereafter BCAH) and the OPAL EOS (Rogers et al. 1996) used by DM97 in the regime of high temperature. Comparisons between these different EOS (SCVH95, Rogers et al. 1996, Chabrier & Baraffe 1997, Charbonnel et al. 1999) showed a good agreement within their domain of validity. For example, the MHD and SCVH EOS gives very similar results in the mass range $0.4 \lesssim M \lesssim 0.8 M_{\odot}$.

Fig. 3 shows that, the morphology of our tracks is very similar to the BCAH and Geneva models, for all the considered masses. This is strong evidence that we correctly follow the thermodynamics involved in these objects. This is not surprising since, as mentioned in Sect. 2.3.2, we treat the non-ideal effects through analytical fits to the MHD EOS. In comparison, our previous tracks (long dashed-dotted lines) were systematically too red and their paths were very different from the new ones. This is due in part to the fact that H_2 was not accounted for in the computations and also because the treatment of the non-ideal effects was less accurate. As a consequence, the internal structure of our old models was less centrally condensed and the stellar radius slightly larger compared to our new models.

At the lower mass end ($M=0.10$ and $0.20 M_{\odot}$), the similarity with BCAH models is striking, as effective temperature differences are $\lesssim 50$ K (much less than observational uncertainties along the Hayashi tracks!). In particular, this shows that our boundary conditions (Sect. 2.2) are in reasonably good agreement with the much more sophisticated atmosphere models used by BCAH. We see, however, that in the domain of very low mass stars ($M \lesssim 0.4 M_{\odot}$) strong morphological differences are present. More specifically, we observe (Fig. 3) that the DM97 and SW94 tracks present a strong inflexion in their Hayashi path which is not reproduced by the other groups. Several reasons can be put forward to explain these differences. First DM97 uses a convection model which differs substantially from the commonly used standard MLT prescription. As shown by D’Antona and Mazzitelli (1998), this can result in T_{eff} differences as large as ~ 200 K along the Hayashi line (see also below). Secondly, in this mass range the morphology of the evolutionary tracks is particularly sensitive to the EOS and to the different treatments of the thermodynamics. Finally, their use of a grey atmosphere approximation is certainly not satisfactory for modeling cool

**Fig. 3.** HR diagrams comparing the different PMS tracks for the models listed in Table 1

stars whose emergent spectrum diverges significantly from a black body. In order to estimate the impact of using a grey atmosphere treatment in our stellar evolution code, we have also computed some additional tracks for different masses. We report that the non-grey atmosphere models are systematically cooler than the grey ones, as a result of molecular blanketing in the outermost layers (e.g. Chabrier et al. 1996). This probably also explains why the Geneva models, which use the same treatment of convection with a similar value for MLT parameter ($\alpha = 1.6 \pm 0.1$), are systematically hotter than ours.

For higher mass stars ($M \gtrsim 0.6 M_{\odot}$), the morphology of the tracks becomes quite similar, as the non-ideal physical effects and the molecular absorption in the atmosphere vanish. The shifts in T_{eff} between the different tracks mainly result from the different chemical compositions and/or values of α in the MLT and can be as large as 200 K. In particular, the Hayashi tracks of the BCAH models become increasingly cooler as the stellar mass increases compared to all the other tracks. This most probably results from their smaller value of the MLT parameter ($\alpha = 1$), the effect of which is only significant above $\sim 0.6 M_{\odot}$ (Chabrier and Baraffe 1997) and is to shift the tracks towards lower T_{eff} . The fact that species heavier than H and He are not accounted for in the BCAH EOS could be part of the explanation as well. Finally, for the most massive stars ($M > 1.0 M_{\odot}$), the morphology of the tracks is very similar. We notice however that our models are slightly cooler than the DM97 tracks by ~ 100 K.

A comparison of the isochrones shows that our tracks are generally slightly more luminous than those of others. Consequently, for a given luminosity, the stellar age estimated from our models will be smaller, the relative effects being more pro-

nounced for younger stars. The discrepancy between the different isochrones is particularly strong below 10^6 yr, where an age determination remains, in any case, very misleading. This is, in part, due to the fact that early in the evolution, the results still depend on the initial state of the star (Tout et al. 2000).

Aside from the above-mentioned explanations for the discrepancies between the tracks, other physical ingredients, usually not reported in the literature, may also affect the evolutionary path of a PMS stars. Consequently, the origin of some of the observed discrepancies cannot be clearly identified. To illustrate this, we will now demonstrate that, even within the MLT, different prescriptions to solve the third polynomial equation for the convective gradient give rise to different degrees of superadiabaticity and thus a different location of the star in the HRD. Indeed, the T_{eff} location of a fully convective PMS stars is very sensitive to the degree of superadiabaticity in the sub-photospheric layers which in turn depends on the prescription used to compute the convective temperature gradient (see e.g. D’Antona & Mazzitelli 1998). We performed a series of tests using two different formalisms for the computation of the convective gradient, namely the Cox (1984, Chap. 14) and the Kippenhahn and Weigert (1991, Chap. 7) formalisms. The latter, used in our grids, leads in the superadiabatic region to a temperature gradient $\sim 20\%$ higher than that derived from the Cox formalism. This translates into effective temperature shifts of the Hayashi tracks of 100 to 300 K, depending on the stellar mass. The Cox solutions have systematically smaller radii and the Hayashi lines are consequently bluer. Finally, with the receding of the convective envelope, the degree of superadiabaticity decreases and the temperature shift reduces to ~ 100 K. These differences mainly result from the assumed “form factor” used in the MLT formalism. Indeed, the shape of the convective cells directly affects the radiative loss efficiency and a change in the form factor can be compensated by a modification to the α parameter. We refer the reader to Henyey et al. (1965) for a detailed discussion of the arbitrariness of some constants used in the MLT. Among other numerical tests, the evolution of the structure of PMS stars does not depend at all on the prescription used to write the gravothermal energy production rate $\varepsilon_{\text{grav}}$ (i.e. using the internal energy, the entropy or the pressure; see Kippenhahn & Weigert 1991, Chap. 4). This is due to our completely consistent treatment of the thermodynamics with our EOS formalism.

Given the relatively good agreement between the different EOS involved in this comparison, the physical and numerical treatment of convection is certainly the most influent parameter for the modeling of fully convective PMS. It can account for T_{eff} differences as large as 300 K. Faced with our poor knowledge of convection, large discrepancies between the different sets of tracks are unfortunately inevitable.

5. Internet interface to stellar model requests

The internet site located at <http://www-laog.obs.ujf-grenoble.fr/activites/starevol/evol.html> offers several services to take advantage of our stellar model database. Among these fa-

cilities, it is possible to compute an isochrone, to determine the stellar parameters of a star knowing its position in the HR diagram, to draw a specific HR diagram and of course, and to retrieve all the evolutionary files.

For the computation of isochrones, the user specifies the metallicity, and ages and selects the mass tracks entering the computation of the isochrone. The results are displayed on the screen and can be saved in a file. We also give the luminosity, effective temperature, and radius as well as the colors and magnitudes corresponding to the location of a given star at any specified age. We use the conversion table provided by Kenyon and Hartmann (1995) and display the different colors in the Cousin system. It is also possible to ask for further information and get, for example, the surface Li abundance, the central temperature or the extent of the convective envelope for the set of stars selected to compute the isochrones.

The other facility is the determination of stellar parameters. The user specifies the coordinates of a star in the HR diagram using either the luminosity or magnitude and T_{eff} or colors and then, the program computes the theoretical track that passes through this observational point. This procedure allows the determination of the stellar age, mass and radius assuming the star is on its pre-main sequence track. If requested, additional information such as surface chemical composition, central properties or moments of inertia can also be provided.

The third facility deals with graphic outputs. In this page, the user can plot HR diagrams in any combination of color and magnitude. It is also possible to zoom in by stating limits, to superpose isochrones and/or the ZAMS.

6. Conclusion

We presented new pre-main sequence evolutionary tracks for low- and intermediate-mass stars. Comparisons of our models with other PMS tracks indicate rather strong discrepancies in the regime of very low-mass stars ($M \lesssim 0.5 M_{\odot}$). Our tracks are very similar, in morphology and effective temperature, to those computed by Baraffe et al. (1998) and the Geneva group (Charbonnel et al., 1999). This similarity is a strong indicator that our treatment of the EOS and boundary conditions is correct. Conversely, we report strong deviations of these tracks with those of D’Antona and Mazzitelli (1997), especially below $0.3 M_{\odot}$. For higher mass stars, the morphology of the tracks is similar and effective temperature differences $\lesssim 200$ K are noted, partly due to different mixing length parameter values and chemical compositions. Comparisons of the isochrones, indicates age determination remains, in any case, very uncertain below 10^6 yr. Finally, we present our internet server which provides several facilities to use and take advantage of our large database of PMS stellar models.

Acknowledgements. The authors wish to thank C. Tout and O. Pols for their numerous and very helpful interactions during the implementation of the EOS in the code. LS also wants to thank F. Roch for her help in building the server. The computations presented in this paper were performed at the “Centre de Calcul de l’Observatoire de Grenoble” and

at “IMAG” on a IBM SP1 computer financed by the MESR, CNRS and Région Rhône-Alpes.

References

- Alexander D.R., Ferguson J.W., 1994, *ApJ* 437, 879
 Bahcall J.N., Pinsonneault M.H., 1996, *AAS* 189, 5601B
 Baraffe I., Chabrier G., Allard F., Hauschildt P.H., 1998, *A&A* 337, 403, BCAAH
 Bell R.A., Eriksson K., Gustafsson B., Nordlund A., 1976, *A&A* 23, 37
 Brun A.S., Turck-Chieze S., Morel P., 1998, *ApJ* 506, 913
 Chabrier G., Baraffe I., 1997, *A&A* 327, 1039
 Chabrier G., Baraffe I., Plez B., 1996, *ApJ* 459, L91
 Charbonnel C., Däppen W., Schaerer D., Bernasconi P.A., Maeder A., et al., 1999, *A&AS* 135, 405
 Cox J., 1984, “Principle of Stellar Structure”, Gordon and Bridge, Science Publishers
 D’Antona F., Mazzitelli I., 1994, *ApJS* 90, 467
 D’Antona F., Mazzitelli I., 1997, in: *Cool Stars in Clusters and Associations*, eds R. Pallavicini and G. Micela, *Mem. S. A. It.*, 68, 807, DM97
 D’Antona F., Mazzitelli I., 1998, in: *Brown Dwarfs and Extrasolar Planets*, ASP Conference Series, eds. R. Rebolo, E. Martin, M.R. Zapatero Osorio, p. 442
 Eggleton P.P., Faulkner J., Flannery B.P., 1973, *A&A* 23, 325
 Eriksson K. 1994, private communication, see Sect. 2.2
 Fontaine G., Graboske H.C., Van Horn H.M., 1977, *ApJS* 35, 293
 Forestini M., 1994, *A&A* 285, 473
 Grevesse N., Noels A., 1993, in: *Origin and Evolution of the Elements*, eds Prantzos N., Vangioni-Flam E., Cassé M., Henyey L., Vardya M.S., Bodenheimer P., 1965, *ApJ* 142, 841
 Hubbard W.B., Lampe M., 1969, *ApJS* 18, 297
 Hummer D.G., Mihalas D., 1988, *ApJ* 331, 794
 Iben I., 1975, *ApJ* 196, 525
 Iglesias C.A., Rogers F.J., 1996, *ApJ* 464, 943
 Irwin A.W., 1987, *A&A* 182, 348
 Itoh N., Mitake S., Iyetomi H. Ichimaru S., 1983, *ApJ* 273, 774
 Itoh N., Kohyama Y., Matsumoto N., Seki M., 1984, *ApJ* 285, 758
 Kenyon S.J., Hartmann L. 1995, *ApJS* 101, 117
 Kippenhahn R., Weigert A., 1991, *Stellar Structure and Evolution*, Springer-Verlag
 Kurucz R.L., 1991, *Stellar Atmospheres: Beyond Classical Models*. eds. Crivellari L., Hibeny I., Hammer D.G., NATO ASI Series, Kluwer, Dordrecht
 Mihalas D., Hummer D.G., Däppen W., 1988, *ApJ* 331, 815
 Mitake S., Ichimaru S., Itoh N., 1984, *ApJ* 277, 375
 Morel P., Pichon B., Provost J., Berthomieu G., 1999, *A&A* 350, 275
 Plez B., 1992, *A&AS* 94, 527
 Pols O.R., Tout C.T., Eggleton P.P., Han Z., 1995, *MNRAS* 274, 964, PTEH
 Provost J., Berthomieu G., Morel P., 2000, *A&A* 353, 775
 Raikh M.E., Yakovlev D.G., 1982, *ApSS* 87, 193
 Rogers F.J., Swenson F.J., Iglesias C.A., 1996, *ApJ* 456, 902
 Saumon D., Chabrier G., Van Horn H.M., 1995, *ApJS* 99, 713, SCVH95
 Saumon D., Chabrier G., Wagner D.J., Xie X., 2000, in: *High Pressure Research*, Gordon and Breach publishers
 Siess L., Forestini M., Dougados C., 1997, *A&A* 324, 556, SFD97
 Swenson F.J., Faulkner J., Rogers F.J., Iglesias C.A., 1994, *ApJ* 425, 286, SW94
 Tout C.A., Livio M., Bonnell I.A., 2000, *MNRAS* 310, 360
 Vardya M.S., 1960, *ApJS* 4, 281

3.2 Tracés complets

Trois étoiles de masse intermédiaire ($3 M_{\odot}$, $4.5 M_{\odot}$ et $6 M_{\odot}$) et de métallicité solaire ($Z = 0.02$) ont été calculées jusqu'à la phase AGB. Les figures qui suivent présentent l'évolution de la structure des deux étoiles de masses extrêmes au cours du temps (diagrammes de Kippenhahn) et l'évolution des rapports C/O et $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ en surface et au centre. Ces deux rapports ont été choisis car leur grande sensibilité aux conditions de la nucléosynthèse et aux processus de mélange (voir partie I) permet, en les visualisant, de se faire une idée de toute l'évolution de l'étoile.

3.2.1 La $3 M_{\odot}$

Les figures III–3.8 montrent la structure interne d'une étoile de $3 M_{\odot}$ avant son arrivée à la phase AGB.

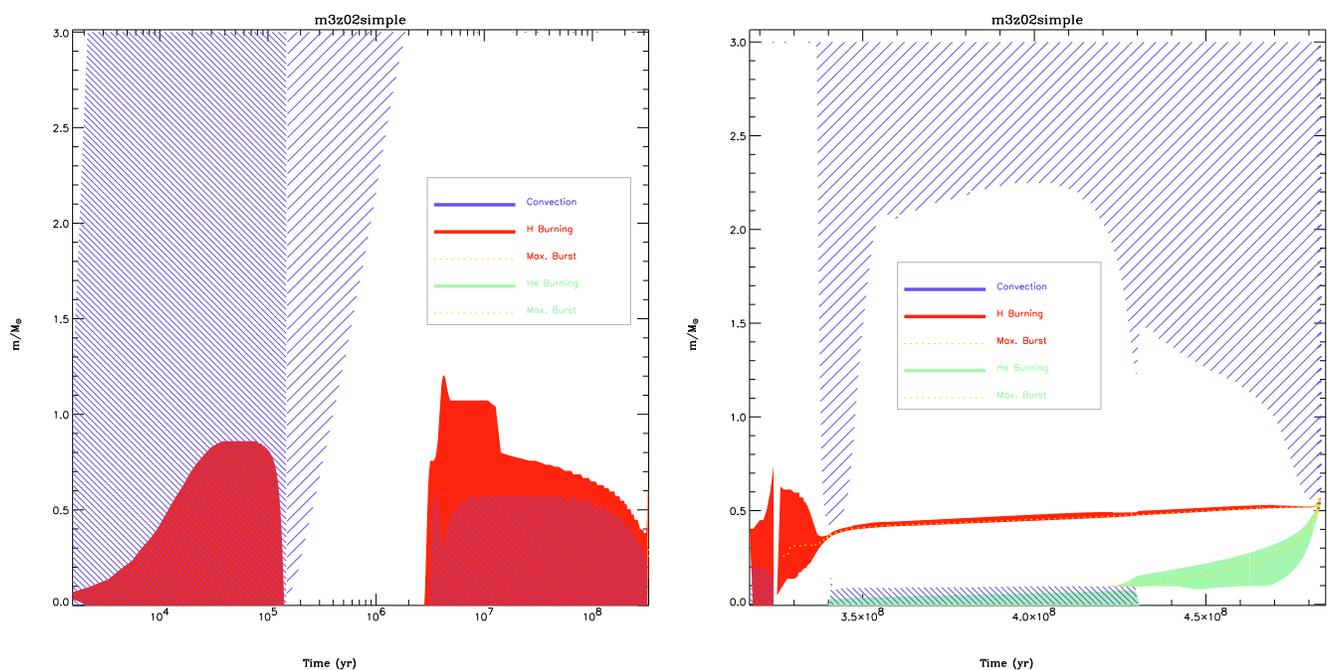


FIG. 3.8 – Diagramme de Kippenhahn d'une étoile de $3 M_{\odot}$ avant (à gauche) et après (à droite) le premier dredge-up

On remarquera sur les figures III–3.8:

- la phase PMS où l'étoile est complètement convective et brûle les éléments comme le Lithium ou le Beryllium.
- une phase séquence principale possédant une enveloppe convective extrêmement fine et montrant, comme attendu (voir annexe A), un brûlage convectif de l'Hydrogène.
- à la fin de cette phase, lorsque le brûlage de l'Hydrogène devient non central, la profonde pénétration de l'enveloppe (premier dredge-up).
- le brûlage central de l'Hélium, qui est lui aussi convectif et surmonté d'une couche en fusion d'Hydrogène.
- à la fin du brûlage central de l'Hélium qu'un “deuxième dredge-up” s'amorce mais n'est

pas efficace puisqu'il ne descend pas dans les couches altérées par la combustion de l'Hydrogène.

Le rapport C/O étant une observable classique des étoiles de l'AGB qui sert à les classer (voir le chapitre I-2), la prédiction de sa valeur est primordiale. Les figures III-3.9 montrent le rapport C/O au cours de l'évolution de l'étoile. En comparant les deux figures III-3.9, on

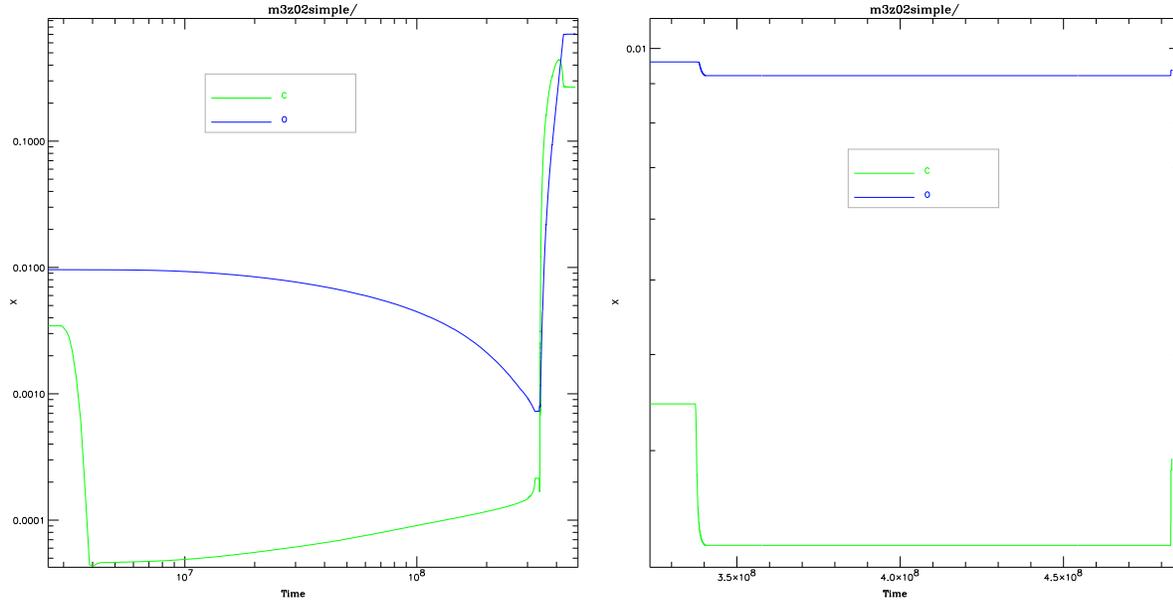


FIG. 3.9 – *Rapports C/O d'une étoile de $3 M_{\odot}$ au centre (à gauche) et en surface (à droite) au cours du temps. L'Oxygène est en bleu et le Carbone en vert.*

constate déjà très "naïvement" que les abondances au centre et en surface n'évoluent pas de la même façon! On voit au centre l'effet du brûlage de l'Hydrogène par le cycle CNO qui débute entre $3 \cdot 10^6$ ans et $4 \cdot 10^6$ ans (voir figure III-3.8). L'abondance de Carbone diminue fortement lorsque le brûlage de l'Hydrogène commence alors que celle de l'Oxygène est encore constante. Petit à petit, l'abondance de l'oxygène va diminuer pendant que celle du carbone va rester constante. La légère remontée de l'abondance de Carbone visible sur le graphe n'est due qu'à la croissance de température des zones de brûlage qui influe sur les taux de réactions et donc sur l'abondance d'équilibre. Le "grand saut" vers $3.5 \cdot 10^8$ ans correspond au premier dredge-up. On voit bien son effet en surface où (1) les abondances diminuent et (2) le rapport C/O diminue. Le brûlage de l'Hélium a lieu en milieu convectif alors que les abondances de surfaces sont constantes mais que C et O augmentent au centre, produits par le brûlage de l'Hélium. Lors de la phase AGB, les abondances centrales ne sont pas modifiées car le brûlage devient non central. Cependant, il n'en est rien en surface à partir du premier pulse avec dredge-up (après $4.8 \cdot 10^8$ ans). Son effet est de faire remonter du carbone en surface car, malgré la transformation partielle du Carbone et de l'Oxygène en Azote opérée dans la couche d'Hydrogène, le dredge-up ramène aussi la matière du pulse provenant du bas de l'intercouche et donc riche en Carbone. Les abondances de surface montent en privilégiant le carbone: C/O augmente petit à petit.

Le Carbone étant parmi les éléments les plus abondants et formant facilement une molécule dissymétrique, CO, il est facile de l'observer. Les rapports isotopiques du Carbone sont

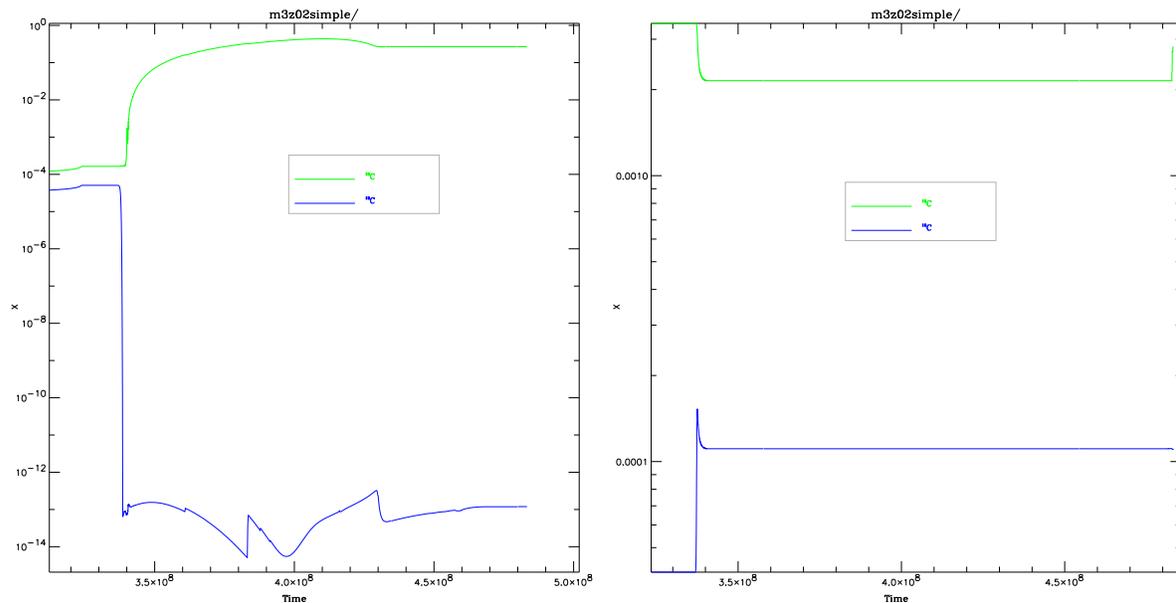


FIG. 3.10 – *Rapports isotopiques du Carbone dans une étoile de $3 M_{\odot}$ au centre (à gauche) et en surface (à droite) au cours du temps. Le ^{12}C est en vert et le ^{13}C en bleu.*

donc des grandeurs facilement observables et comparables à celles prédites par les modèles. Les figures III–3.10 montrent ce rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$.

Les figures ont été tracées à partir du premier dredge-up. Comme pour les abondances de C et O, on se rend compte en regardant les figures III–3.10 que ce rapport varie lentement en général et qu’il subit de fortes et rapides évolutions à des moments précis correspondant à des mélanges puissants comme le premier dredge-up. Globalement au centre, à partir de l’allumage de l’Hélium, le rapport reste en moyenne constant. Par contre, en surface, le dredge-up amène à la surface de l’étoile les produits de combustion de l’Hydrogène en milieu relativement froid (le dredge-up descend dans les couches au-dessus de la combustion de H). Il fait donc descendre l’abondance de ^{12}C au profit de ^{13}C et le rapport diminue. On remarquera, vers $4.8 \cdot 10^8$ yr, une brusque remontée du rapport du à la montée de ^{12}C : c’est l’effet du troisième dredge-up qui remonte en surface le Carbone amené dans l’intercouche par le pulse thermique.

3.2.2 La $4.5 M_{\odot}$

La figure III–3.11 montre une vue de la phase AGB où l’on voit la base de l’enveloppe convective jusqu’à la couche de brûlage d’Hélium. On voit la couche d’Hydrogène en fusion (très fine, en rouge) juste sous l’enveloppe et les perturbations qui s’y produisent régulièrement sont dues aux pulses thermiques. Avec l’échelle temporelle choisie, ces derniers sont très minces et partent du milieu de la couche en fusion d’Hélium (en vert) en remontant jusqu’à celle de l’Hydrogène. La deuxième figure en montre un agrandissement. Il s’agit de la petite zone convective hachurée en bleu qui s’élève à partir du maximum de ϵ_{nuc} dans la couche en fusion d’Hélium pour aller affleurer sous la couche en fusion d’Hydrogène. On remarque l’extinction de la couche en fusion d’Hydrogène après la disparition du pulse.

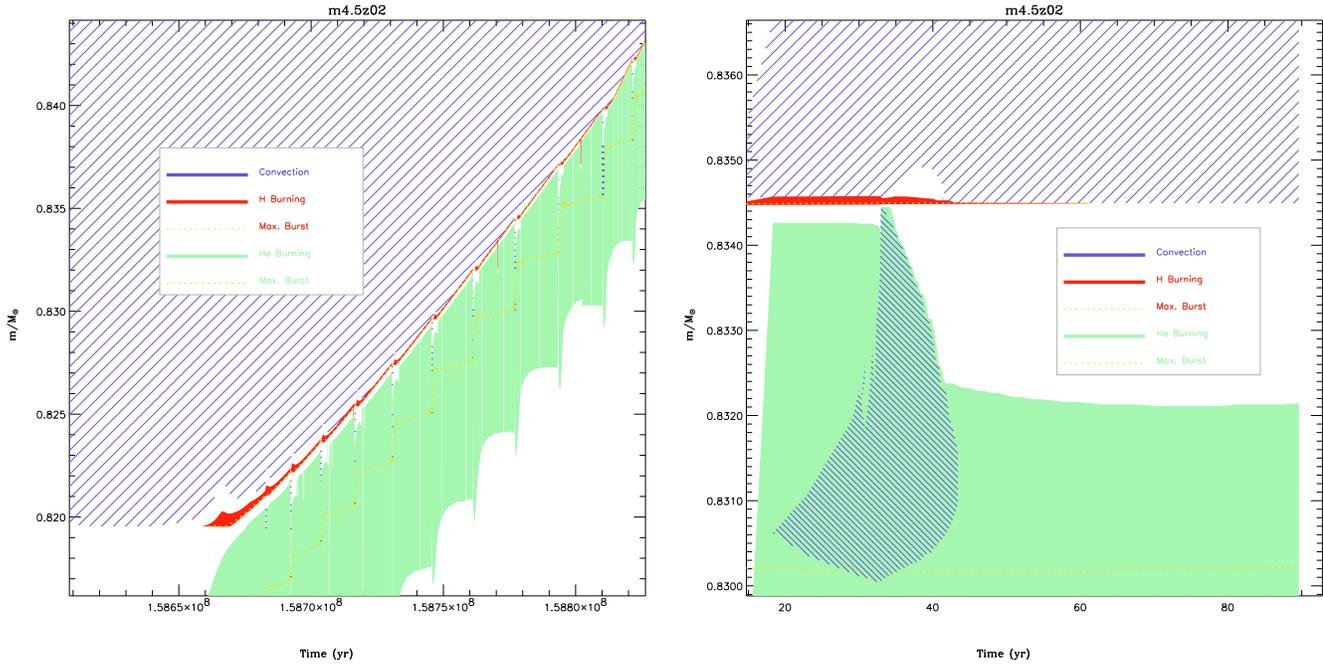


FIG. 3.11 – Diagramme de Kippenhahn de la phase TP-AGB d'une étoile de $4.5 M_{\odot}$ (à gauche) et agrandissement d'un pulse thermique (à droite, l'origine des temps a été prise à $t_0 = 1.58777 \cdot 10^8 \text{ yr}$).

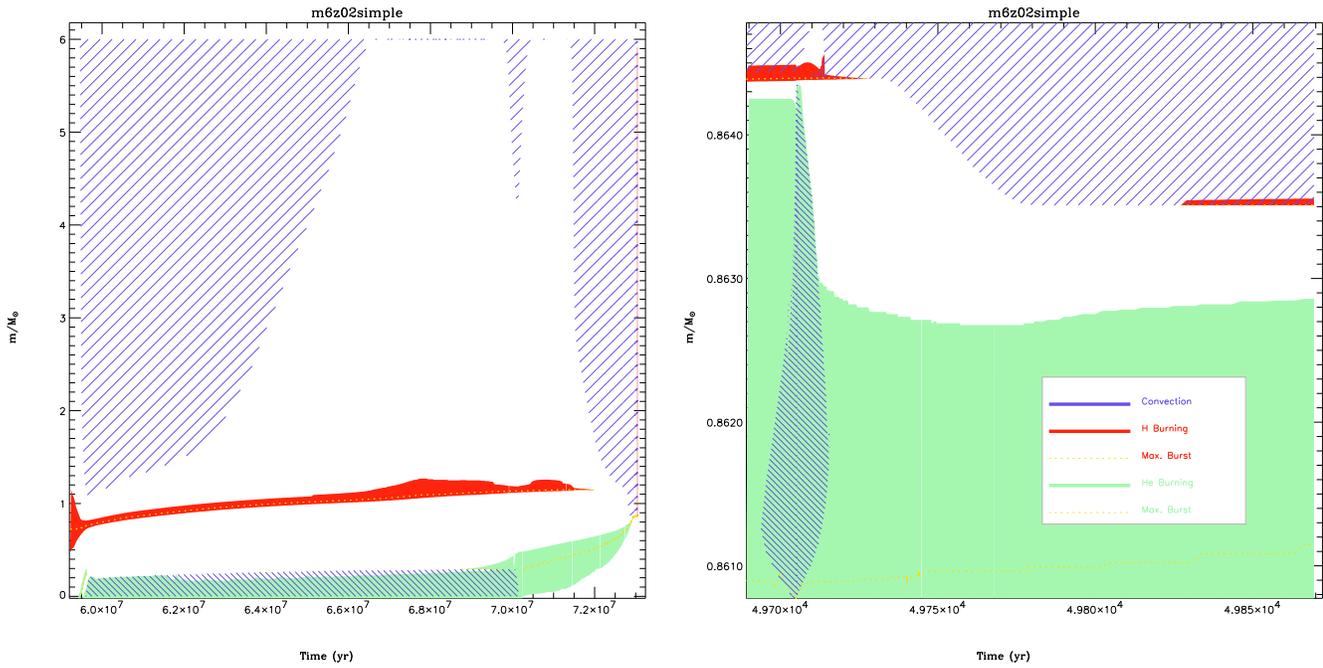


FIG. 3.12 – Diagramme de Kippenhahn d'une étoile de $6 M_{\odot}$, après le premier dredge-up (à gauche), HBB et pulse avec DUP3 (à droite).

3.2.3 La $6 M_{\odot}$

Sur les figures III-3.12, on montre la structure de l'étoile à partir du premier dredge-up. On note un deuxième dredge-up beaucoup plus efficace que dans la $3 M_{\odot}$. De plus, on remarque sur la figure montrant le pulse thermique, la présence de HBB: le brûlage de

l'Hydrogène a lieu partiellement dans l'enveloppe convective. Cette figure détaille aussi un pulse thermique, suivi d'un troisième dredge-up (à partir du moment où ils suivent un pulse thermique, tous les dredge-up s'appellent troisième dredge-up). On retrouve bien l'évolution en quatre phases décrites par Frost (1997):

- l'amorçage du pulse jusqu'à son sommet pendant lequel l'énergie est libérée
- la phase descendante où les couches se dilatent et l'enveloppe convective monte puis, après avoir atteint son rayon maximum, commence à redescendre et lorsque la couche d'Hydrogène s'éteint, la franchit
- la phase éventuelle de troisième dredge-up lors de laquelle l'enveloppe franchit la discontinuité $H \perp He$ laissée par le pulse
- l'interpulse, période radiative pendant laquelle les couches reprennent leurs avancées en masse dans l'étoile.

La figure III–3.13 montre le rapport C/O dans la $6 M_{\odot}$.

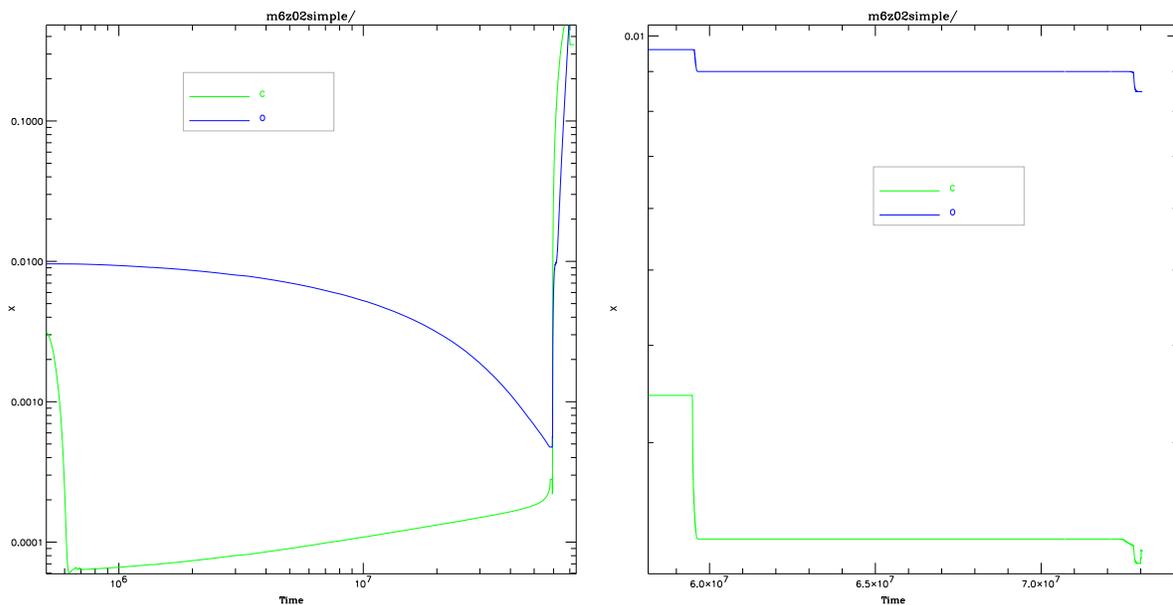


FIG. 3.13 – Rapports C/O d'une étoile de $6 M_{\odot}$ au centre et en surface

La principale différence pour le rapport C/O dans cette étoile de $6 M_{\odot}$ par rapport à celle de $3 M_{\odot}$ est l'influence qu'il subit de la part du HBB à la phase AGB. Alors que le rapport C/O monte tout au long de la phase AGB en l'absence de HBB, il oscille dans le cas où il y en a. En effet, le dredge-up provoque une augmentation du rapport C/O alors que le HBB, qui reprend par la suite pendant l'interpulse, se traduit directement dans l'enveloppe par la transformation du Carbone en Azote. C'est ce dernier effet qui domine l'évolution globale comme le montrent les abondances de surfaces: les abondances de O et C diminuent et le rapport aussi.

Les figures III–3.14 permettent de comparer l'évolution du rapport $^{12}C/^{13}C$ par rapport à la $3 M_{\odot}$.

Là encore, la différence avec la $3 M_{\odot}$ n'est évidente qu'à la phase TP-AGB. Le dredge-up aurait plutôt tendance à faire monter le rapport $^{12}C/^{13}C$ car, en plus du ^{12}C , dans la

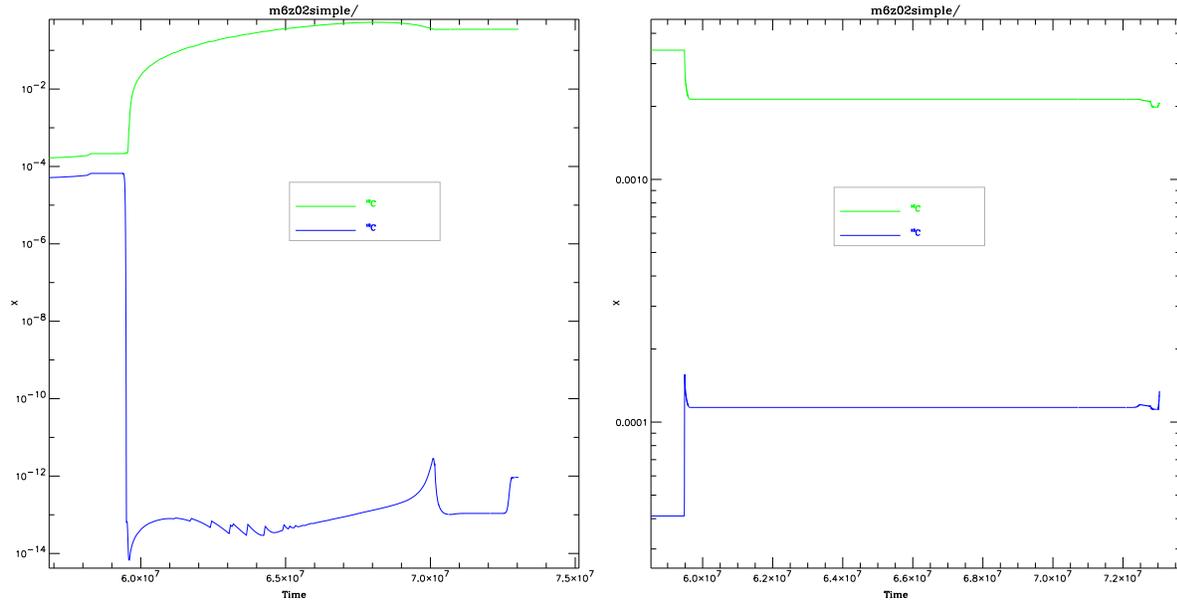


FIG. 3.14 – *Rapports isotopique du Carbone dans une de $6 M_{\odot}$ au centre et en surface*

région du pulse, le Carbone 13 y est détruit. Mais le HBB fait sentir son influence aussi sur le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, en le faisant tendre vers le rapport d'équilibre du cycle CNO (~ 3) pendant l'interpulse. Le rapport oscille donc aussi entre deux tendances, un pic montant lors des dredge-up et une longue redescente pendant l'interpulse, mais globalement, l'effet du HBB est donc d'entraver la formation d'une étoile riche en Carbone à partir d'une étoile riche en Oxygène. Cet effet ne s'annule qu'à l'arrêt du HBB, lorsque la masse de l'enveloppe restante ne suffit plus à faire monter la température assez haut en bas de la zone convective. Mais nous ne sommes pas encore arrivé à ce stade évolutif avec ces étoiles-ci; cette conclusion vient d'un travail antérieur de Frost *et al.* (1998).

On voit bien ici à quel point les rapports C/O et $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ sont sensibles à tous les processus de nucléosynthèse et de mélange successifs se déroulant dans l'étoile.

D'après Frost *et al.* (1998), les phases de dredge-up se poursuivent après l'arrêt du HBB, permettant à l'étoile de devenir riche en Carbone. Cependant, la perte de masse élevée, qui a dépouillé l'étoile de la majorité de son enveloppe, a aussi créé une enveloppe circumstellaire si dense que l'étoile n'est plus observable optiquement. Les commentaires des figures III-3.13 et III-3.14 faits au paragraphe précédent expliquent pourquoi Cohen *et al.* (1981) ne trouvent pas d'étoiles de l'AGB carbonées de magnitude inférieure à -6, c'est-à-dire environ $L > 23000 L_{\odot}$ (présence de HBB). De plus, le fait que 50% des étoiles de l'AGB observées en infrarouge soient carbonnées (Van Loon *et al.* 1998) est cohérent avec une montée du rapport C/O après l'arrêt du HBB, lorsque \dot{M} est très grand (phase AGB terminale).

3.3 Flash de l'Hélium

Deux étoiles de faible masse ($1 M_{\odot}$ et $1.5 M_{\odot}$) à métallicité solaire ont été elles aussi calculées. Elles n'ont pas encore été exploitées car la phase AGB a été atteinte depuis peu, le passage du flash de l'Hélium ayant demandé toute notre attention. Les figures III-3.15

présentent notamment la structure de l'étoile de $1.5 M_{\odot}$ à ce moment-là. L'axe temporel du diagramme de Kippenhahn a été numéroté à partir de $3.2 \cdot 10^9$ ans, peu avant le flash de l'Hélium.

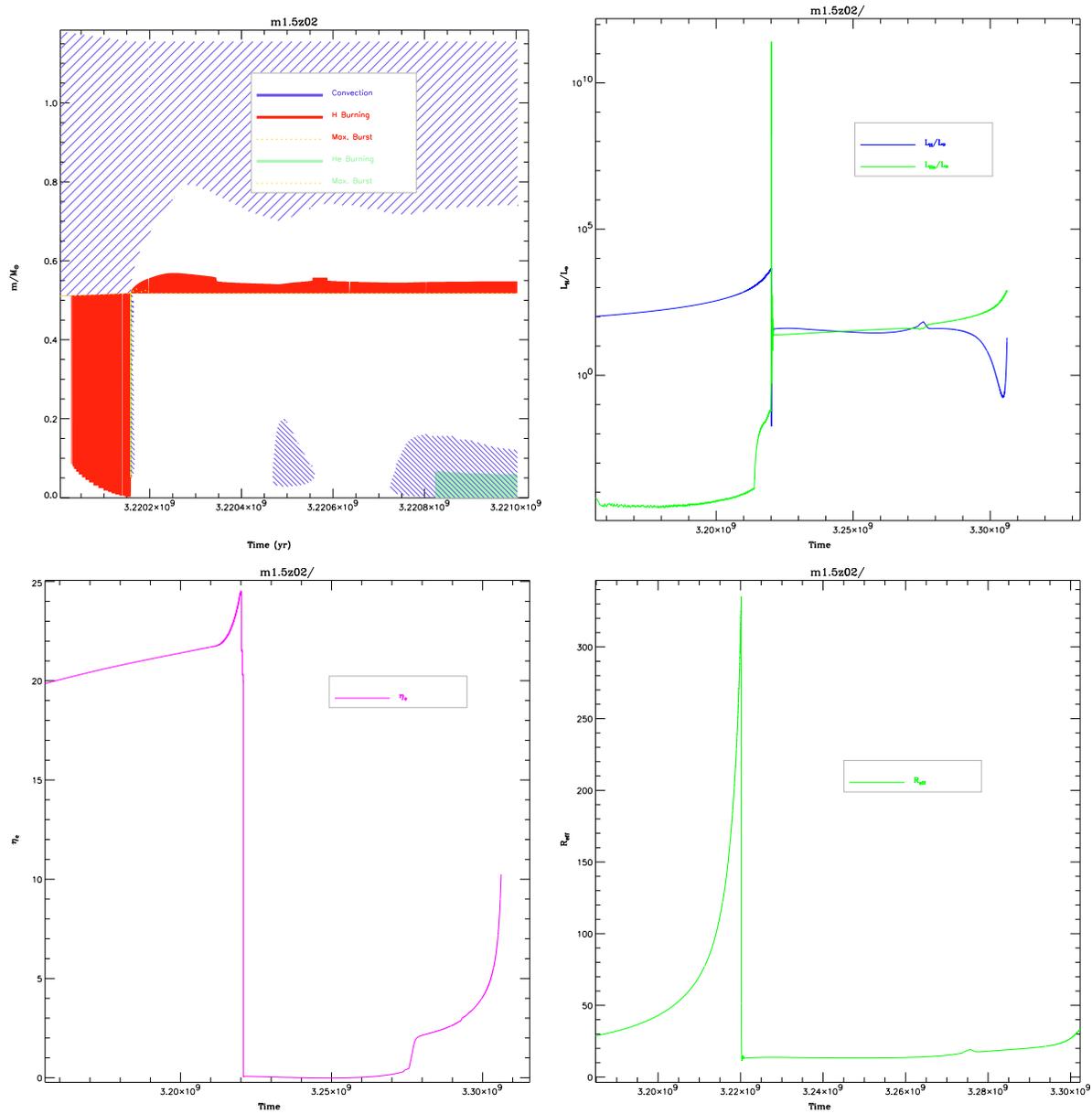


FIG. 3.15 – Conséquences structurelles du flash de l'Hélium

On peut mesurer l'importance de cet évènement dans l'étoile en constatant que la zone convective qui se développe a une masse d'environ $0.45 M_{\odot}$ (sur $1.5 M_{\odot}$!) On remarque aussi que l'enveloppe convective avant le flash est descendue vraiment contre la couche en fusion de H, le premier dredge-up étant donc très efficace. La puissante dilatation qui suit le flash avec un facteur 10 sur le rayon effectif et surtout le développement d'une zone convective atteignant finalement le coeur provoquent une levée de dégénérescence centrale (de $\eta_e = 25$ à $\eta_e = 0!$) qui permettra à l'Hélium de brûler plus "paisiblement". A partir de ce moment, c'est la combustion de l'Hélium qui devient la source de luminosité principale de l'étoile.

Chapitre 4

Tests autour du troisième dredge-up

Sommaire

4.1	Présentation des différents tests prévus	265
4.2	Le pulse de référence	268
4.3	Tableau comparatif	273
4.4	Détails des résultats	274

Suite aux difficultés de modélisation du troisième dredge-up, exposées au chapitre I-3, et aux incertitudes qu’elles provoquent sur la nucléosynthèse, un des objectifs fixé pour ce travail (chapitre I-1) est de déterminer les mécanismes facilitant le dredge-up. Nous allons développer ici les moyens cités au chapitre I-4 c’est-à-dire déterminer une batterie de tests à effectuer (section III-4.1) sur une seul et même DUP3 de référence (section III-4.2), tous avec le même code et toutes choses égales par ailleurs, pour constater l’influence de ces tests sur la profondeur du dredge-up (sections III-4.3 et III-4.4).

4.1 Présentation des différents tests prévus

Les différents tests prévus peuvent se rassembler en différents groupes cohérents: la discrétisation, l’équation d’état, les frontières convectives et les processus de mélanges “non-standards”. Ces différents groupes vont maintenant être présentés.

4.1.1 Discrétisation

L’article Straniero *et al.* (1997) rapporte une grande sensibilité de la profondeur du troisième dredge-up à la discrétisation spatiale et temporelle de l’étoile. Cette sensibilité va même jusqu’à une quasi-annulation du dredge-up si ces résolutions sont trop basses. Deux tests seront donc effectués: le premier en augmentant le nombre de couches d’un facteur deux, puis d’un facteur trois, par rapport au modèle de référence, et le deuxième en diminuant le pas de temps de calcul d’un facteur 10 au moins.

4.1.2 Equation d'état

Pour les tests qui vont être présentés, on souhaite atteindre deux objectifs. Le premier est de vérifier l'influence de la nouvelle équation d'état et le deuxième est de se rendre compte si de petites approximations peuvent avoir de grandes conséquences, notamment sur le dredge-up. En effet, les calculs "standards" depuis la phase PMS pour produire les modèles à utiliser à la phase AGB ont été faits en ionisant que l'Hydrogène et l'Hélium, les autres éléments chimiques étant considérés comme totalement ionisés. Le premier de ces tests consistera donc à ioniser aussi les éléments CNO et le Néon. L'effet de ce changement sera de prélever une quantité d'électrons croissante vers la surface de l'étoile. Cela se traduit par une augmentation de μ_e dans ces régions et donc par une baisse de la pression et une augmentation de la luminosité.

Le deuxième test est relié à la dégénérescence. La masse volumique, donnée par la relation II-2.66, dépend de n_e . Or cette quantité est *approximée* par des polynômes d'ordre 4 (voir partie II-2.7.2). L'objectif est donc de savoir si les petites erreurs commises lors de cette approximation peuvent entraîner de gros écarts sur un phénomène aussi non-linéaire qu'un pulse thermique. Le test consiste à calculer numériquement les intégrales de Fermi-Dirac sans approximations au lieu d'utiliser des polynômes ajustés.

Pour des systèmes ouverts comme le sont les couches d'une étoile, lorsque les abondances varient, les quantités thermodynamiques (u, s, ρ) varient aussi. En particulier, l'énergie gravothermale doit changer, même à température et volume constant, si les abondances changent car de l'énergie peut être prélevée à l'étoile par exemple pour travailler contre la gravité si des éléments lourds sont amenés à des rayons plus grands (cas du DUP3). Les équations d'état "standards" doivent tenir compte de cet effet et rajouter un terme spécifique à ϵ_{grav} (Wood 1981).

Dans notre cas, on s'attend à ce que les différentes expressions utilisables pour ϵ_{grav} (II-1.10, II-1.11, II-1.12):

- prennent toujours en compte le mélange éventuel
- soient toujours équivalentes les unes avec les autres

et, ce, sans que l'on ait besoin de retoucher quoi que ce soit dans les quantités calculées. En effet, les quantités thermodynamiques servant à écrire ces différentes expressions (u, s, ρ, P, \dots) dérivent toutes de l'énergie libre qui est décrite avec des dépendances explicites en les abondances. Le test consistera donc à changer l'écriture de ϵ_{grav} de l'expression II-1.11, utilisée pour le model standard, à l'expression II-1.10.

Définition des frontières convectives

En se plaçant toujours dans le cadre de la MLT, cette partie des tests consiste à évaluer l'impact du critère de définition des couches convectives et son utilisation.

Le premier test consiste à changer le critère de Schwarzschild, utilisé par le modèle standard, par celui de Ledoux, ce dernier prenant en compte le gradient de composition qui, s'il est assez fort (voir chapitre II-3) peut être un facteur d'inhibition de la convection.

Le deuxième test consiste à homogénéiser les zones convectives à chaque itération Newton-Raphson plutôt qu'après la convergence, comme dans le modèle standard. Les gradients définissant les zones convectives sont donc modifiés au cours de la convergence pour tenir compte du changement de composition dû à la progression de l'enveloppe convective.

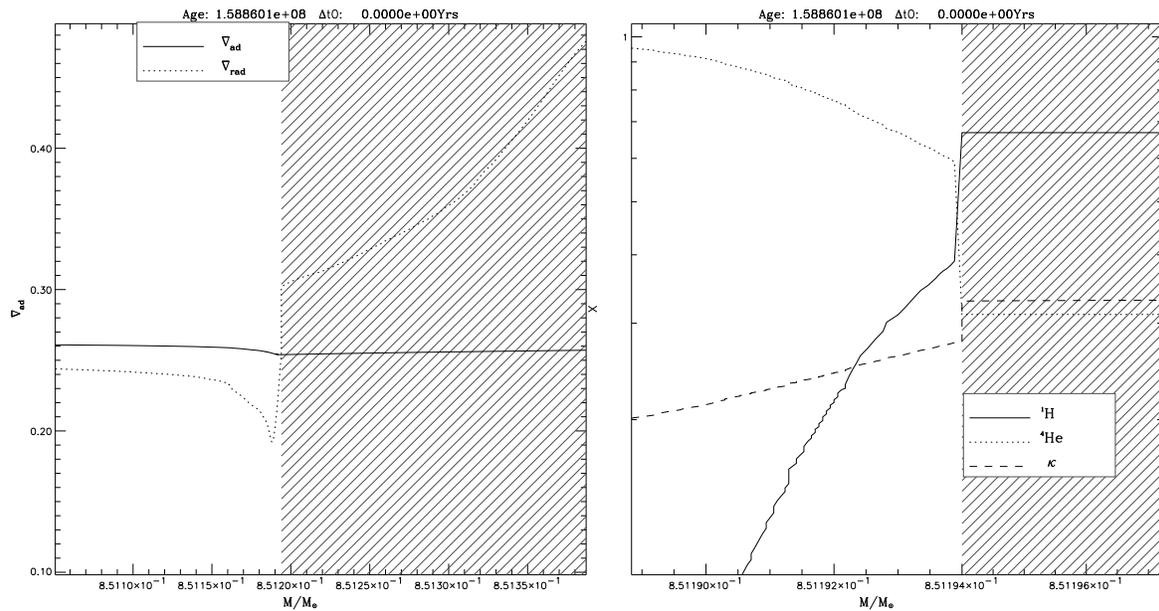


FIG. 4.1 – Profil des gradients à la discontinuité H-He laissée par la couche en fusion de l'Hydrogène.

Le dernier test de cette série consiste à utiliser un algorithme de recherche d'une frontière convective *stable*. On entend par stabilité le fait que si la frontière progresse un peu dans la zone radiative adjacente, elle revient ensuite à sa position initiale. C'est-à-dire que lorsqu'on mélange une couche radiative de plus au-delà de la frontière convective déterminée, les nouveaux gradients radiatifs et adiabatiques, recalculés pour tenir compte du mélange effectué, indiquent que cette couche adjacente mélangée doit être radiative. Ce test est particulièrement adapté au cas du dredge-up car on souhaite savoir si l'enveloppe convective va descendre à travers la discontinuité de composition laissée à l'ancien emplacement de la couche en fusion d'Hydrogène. En effet, la discontinuité du profil de l'abondance d'Hydrogène à cet endroit agit sur le gradient radiatif, à travers κ , et ce gradient présente lui aussi une discontinuité qui rend très imprécise la définition de la frontière convective (Mowlavi 1999). Les figures III-4.1 montrent la discontinuité en composition, sa répercussion sur l'opacité et le gradient radiatif. L'algorithme utilisé consiste à prolonger le gradient radiatif au-delà de sa discontinuité en conservant sa pente. Si, à l'endroit où il coupe le gradient adiabatique, on a changé de couche numérique, on rajoute une couche radiative à l'enveloppe convective. On exécute cet algorithme, dû à Frost (1997), à chaque itération.

Processus de mélange

Cette nouvelle série de tests a pour but d'incorporer de la physique supplémentaire modélisant un phénomène de mélange devant se produire en bordure de zone convective, pour quantifier son impact sur la profondeur du troisième dredge-up.

Les trois tests effectués concerneront la prise en compte de la semi-convection, de l'over-shooting (paramétré) et du mélange induit par le cisaillement. Ces trois phénomènes sont décrits au chapitre II-3.

Code	Explication
Numérique	
SHL	Nombre de couches multiplié par 2
SHL2	Nombre de couches multiplié par 3
TIM	Nombre de pas de temps multiplié par 10
Equation d'état	
ION	Addition de l'ionisation de C,N,O et Ne.
EGS	Réécriture de ϵ_{grav} avec II-1.12
FDT	Calcul exact des intégrales de Fermi-Dirac
Frontières convectives	
LED	Utilisation du critère de Ledoux
STA	Recherche d'une frontière convective stable
MIX	Mélange convectif à chaque itération
Processus de mélange	
DOV	Addition de l'Overshooting
SCO	Addition de la semi-convection
SHR	Addition du mélange induit par cisaillement

TAB. 4.1 – Les différents test menés concernant la profondeur du dredge-up

4.1.3 Tableau récapitulatif

Une description résumée des différents tests est présentée dans le tableau III-4.1

4.2 Le pulse de référence

4.2.1 Caractéristiques

Le pulse de référence a été choisi dans l'étoile de $3 M_{\odot}$ à $Z=0.02$. Il s'agit du cinquième pulse depuis le début de la phase TP-AGB. La masse de coeur est $M_c(ref) = .580227 M_{\odot}$ et celle à la base de l'enveloppe convective $M_{env}^{\perp}(ref) = .581132$ avec une température à sa base de $T_{env}^{\perp} = 3.47 \cdot 10^6 K$. Les couches de combustion de l'Hydrogène et de l'Hélium ont respectivement des températures maximum de $T_H^{max} = 59.8 \cdot 10^6 K$ et $T_{He}^{max} = 143.1 \cdot 10^6 K$.

Code	L_{He}^{max} L_{\odot}	M_{pth}^+ M_{\odot}	M_{pth}^{\perp} M_{\odot}	ΔM_{pth} $\cdot 10^{\pm 3} M_{\odot}$	$\log(T_{max})$	M_{dup}^{\perp} M_{\odot}	ΔM_{dup} $\cdot 10^{\pm 3} M_{\odot}$
STD	$4.75 \cdot 10^7$.580238	.555037	25.2	8.4324	.579251	0.99

TAB. 4.2 – Tableau des caractéristiques du pulse de référence.

La masse drainée dans l'enveloppe convective est calculée comme suit:

$$\Delta M_{dup} \stackrel{def}{=} M_{pth}^+ \perp M_{dup}^{\perp} \quad (4.1)$$

4.2.2 Nucléosynthèse

Nous allons profiter de la présentation du pulse de référence pour montrer la nucléosynthèse dans les différents sites d'une étoile de l'AGB .

Brûlage en couche

Nous allons commenter maintenant la figure III-4.2 qui présente les réactions dominantes dans les différentes couches de brûlage de l'étoile.

La couche en fusion d'Hélium (en haut à gauche) a une masse de $42.5 \cdot 10^{-3} M_{\odot}$, ce qui représente entre 1% et 2% de la masse totale de l'étoile, son maximum de production d'énergie est à $T=1.2 \cdot 10^8 \text{K}$ et c'est la réaction 3α qui domine l'énergétique. Cependant, sur les bords de la couche (le sommet est à $T=10^8 \text{K}$), c'est la deuxième capture de particules α présente sur la carte supérieure gauche de la figure III-4.2 qui domine l'énergétique: $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$. On remarque, au centre de la couche, la présence d'une série de réactions très attendue par ailleurs: $^{12}\text{C}(p, \gamma)^{13}\text{N}(\beta^+)^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ qui est une des sources de neutrons. La présence de protons dans la couche d'Hélium, pour le moins incongrue, est expliquée par la présence de réactions (n, p) ou (α, p) , voir par exemple la réaction $^{19}\text{F}(\alpha, p)^{22}\text{Ne}$, présente sur la carte en haut à gauche de la figure III-4.2. Le peu de protons présents réagit alors très vite, compte tenu de la température élevée.

La couche d'Hydrogène est caractérisée par une masse de $4 \cdot 10^{-3} M_{\odot}$ (0.1% de la masse totale) et un maximum de production d'énergie nucléaire à la température de $5.9 \cdot 10^7 \text{K}$. La partie inférieure de la couche est quasiment isotherme car la température à sa base est de $6 \cdot 10^7 \text{K}$. A cet endroit, les chaînes Na-Ne et Mg-Al sont présentes (mais contribuent très peu à l'énergétique). Au sommet de la couche ($2.5 \cdot 10^7 \text{K}$) se sont les chaînes pp qui dominent l'énergétique alors qu'au milieu de la couche, les quatre cycles CNO (voir annexe C) sont visibles mais avec des flux très différents, CNO-I étant largement dominant.

Dans l'enveloppe convective dont la base est à $3.4 \cdot 10^6 \text{K}$, on n'a bien sûr aucun brûlage nucléaire mais on peut remarquer la désintégration de l'Aluminium: $^{26}\text{Al}(\beta^+)^{26}\text{Mg}$.

Pulse et intercouche

Les figures III-4.3 contiennent des informations relatives à la nucléosynthèse dans la pulse et dans l'intercouche après le pulse.

On remarque la structure en température du pulse: deux plateaux ($2.5 \cdot 10^8 \text{K}$ et $3 \cdot 10^7 \text{K}$) séparés par une zone de transition très abrupte au centre du pulse. A la base du pulse, on peut observer (figure III-4.3) évidemment la grande activité de la réaction 3α mais surtout toutes les réactions supplémentaires (par rapport à la figure III-4.2) qui se sont activées: de nombreuses captures de α dont une des plus importantes énergétiquement est la production de ^{22}Ne par la série de réactions $^{14}\text{N}(\alpha, \gamma)^{18}\text{F}(\beta^+)^{18}\text{O}(\alpha, \gamma)^{22}\text{Ne}$. Cette série de réaction permettra plus tard, dans un pulse beaucoup plus chaud, d'activer la source de neutrons $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$. On remarque qu'une flèche la représentant est présente ici mais que, compte tenu de la température du pulse, son flux est plusieurs ordres de grandeurs en dessous des réactions dominantes. On note aussi que ^{13}C est présent dans le pulse car il était présent dans l'intercouche et a donc été incorporé lorsque le pulse a atteint cette zone. Cependant,

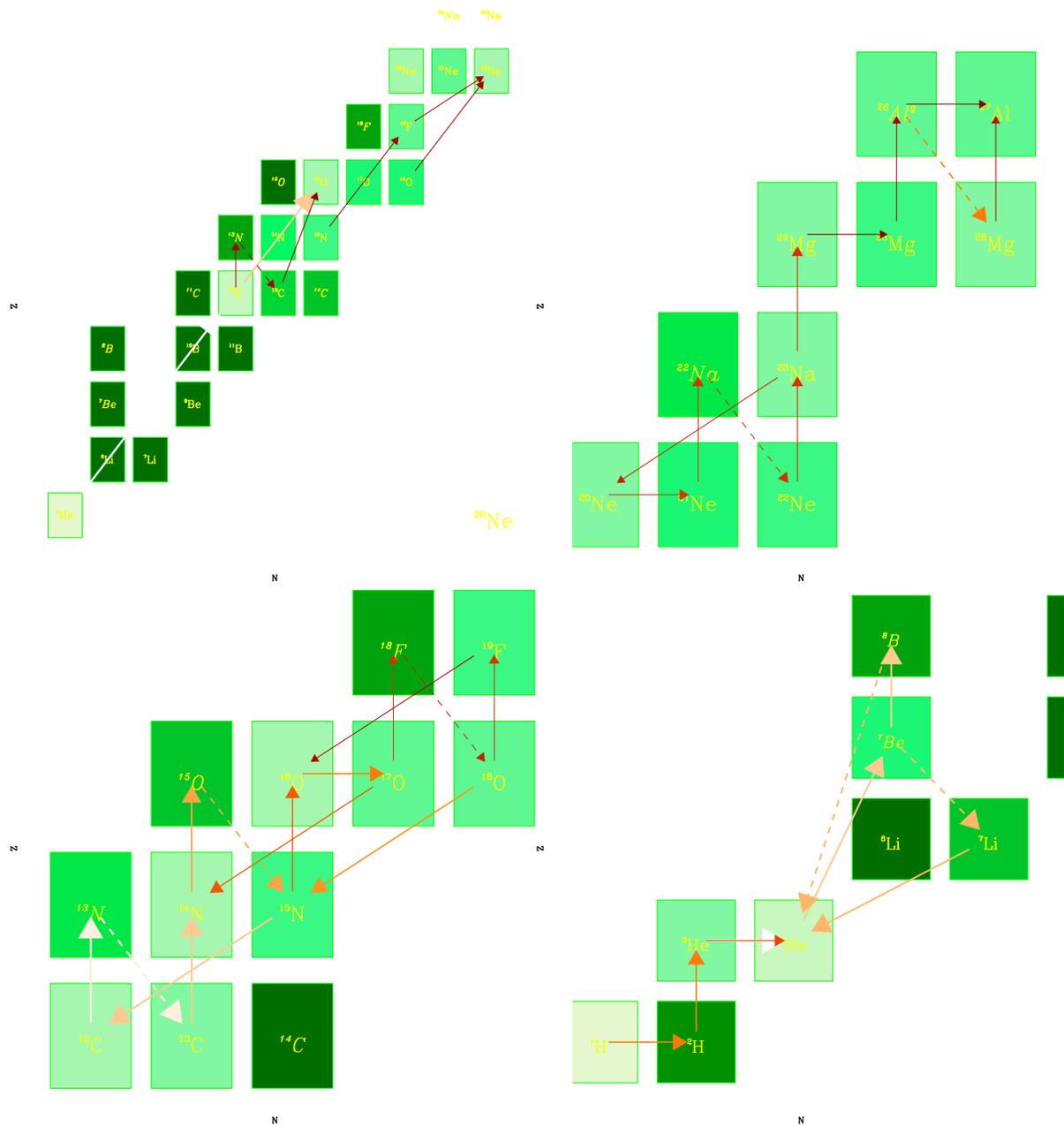


FIG. 4.2 – Réactions dominantes dans les couches en fusion d'une étoile de l'AGB de $3 M_{\odot}$. En haut à gauche, la couche en fusion d'Hélium. En haut à droite, la base de la couche en fusion d'Hydrogène. En bas à gauche et à droite respectivement le milieu et le sommet de la couche d'Hydrogène. La nature du vert présent dans la case des éléments indique son abondance. La répartition des niveaux de verts est effectuée sur 30 ordres de grandeur en fraction de masse, de 1 (vert sombre) à 10^{130} (vert clair). Les flèches indiquent les flux de réaction. Leurs couleurs s'échelonnent de 1 (clair) à 10^{120} (sombre) et leur taille est d'autant plus grande que la réaction participe à l'énergétique de l'étoile.

il est présent en quantité très limitée car la majorité du ^{13}C présent dans l'intercouche brûle radiativement pendant l'interpulse (Forestini & Charbonnel 1997)

A la base de l'intercouche, la situation est très différente. Les neutrons sont au centre de la nucléosynthèse par des (n, γ) sur le Silicium, le Magnésium et le Soufre mais aussi et principalement des (n, p) , sur le ^{14}N (et ^{18}F) produit dans le pulse et sur $^{26}\text{Al}^9$.

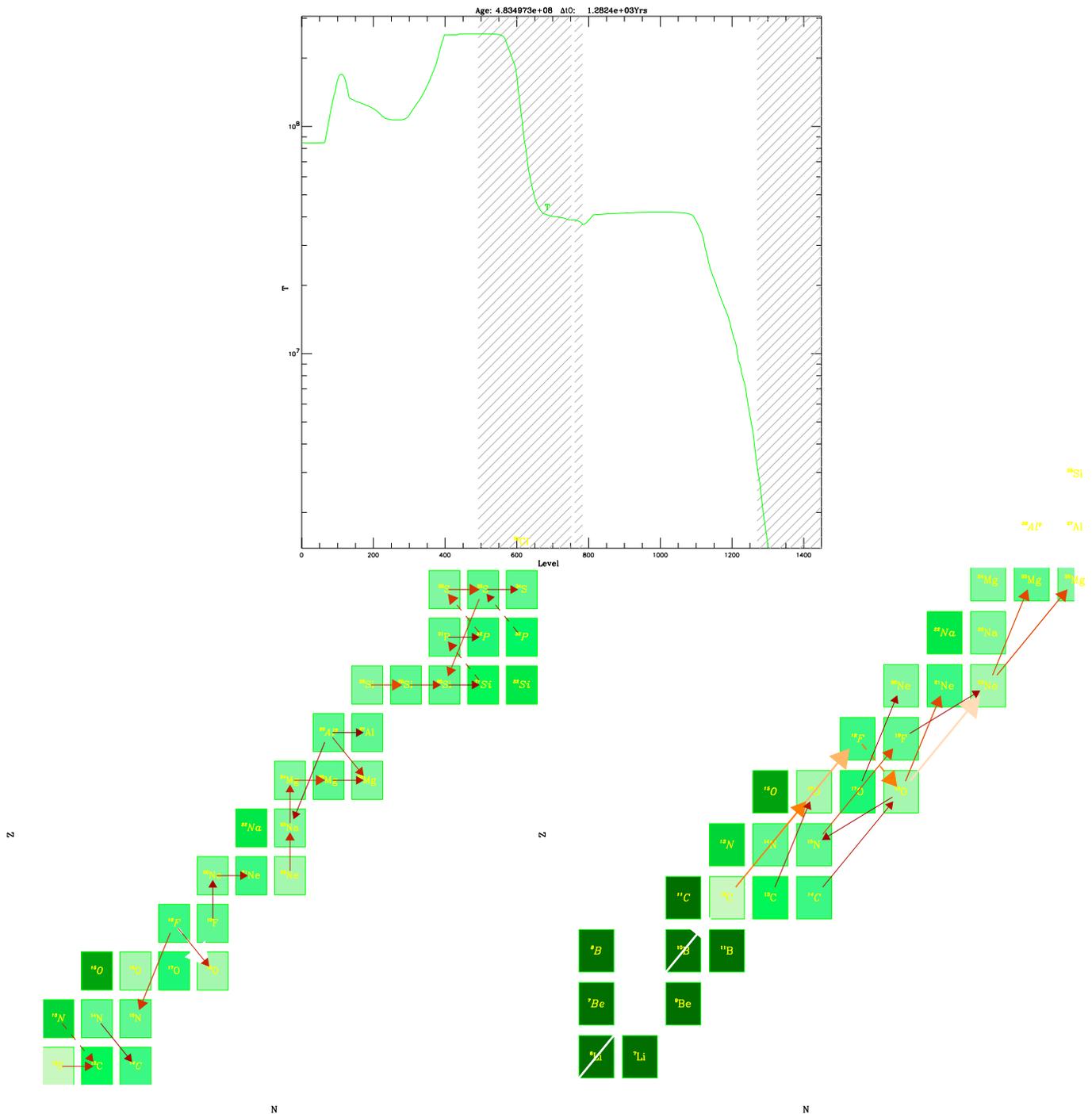


FIG. 4.3 – Réactions dominantes dans le pulse (en bas à gauche) et dans l’intercouche après le pulse (en bas à droite) dans une étoile de l’AGB de $3 M_{\odot}$. En haut, un graphe montre la structure en température du pulse.

4.2.3 Discontinuités et zones convectives

On remarque juste avant le dredge-up, la présence d’une petite zone convective, juste en dessous de la base de l’enveloppe. L’origine de cette petite zone est claire au vue des figures III-4.4. On constate deux discontinuités des abondances dans la zone dans laquelle descend l’enveloppe convective.

Dans la première zone (figure du haut), on remarque que l’Hydrogène diminue très fort de même que le Carbone, le Néon et l’Oxygène alors que l’Hélium et l’Azote augmentent. Il s’agit

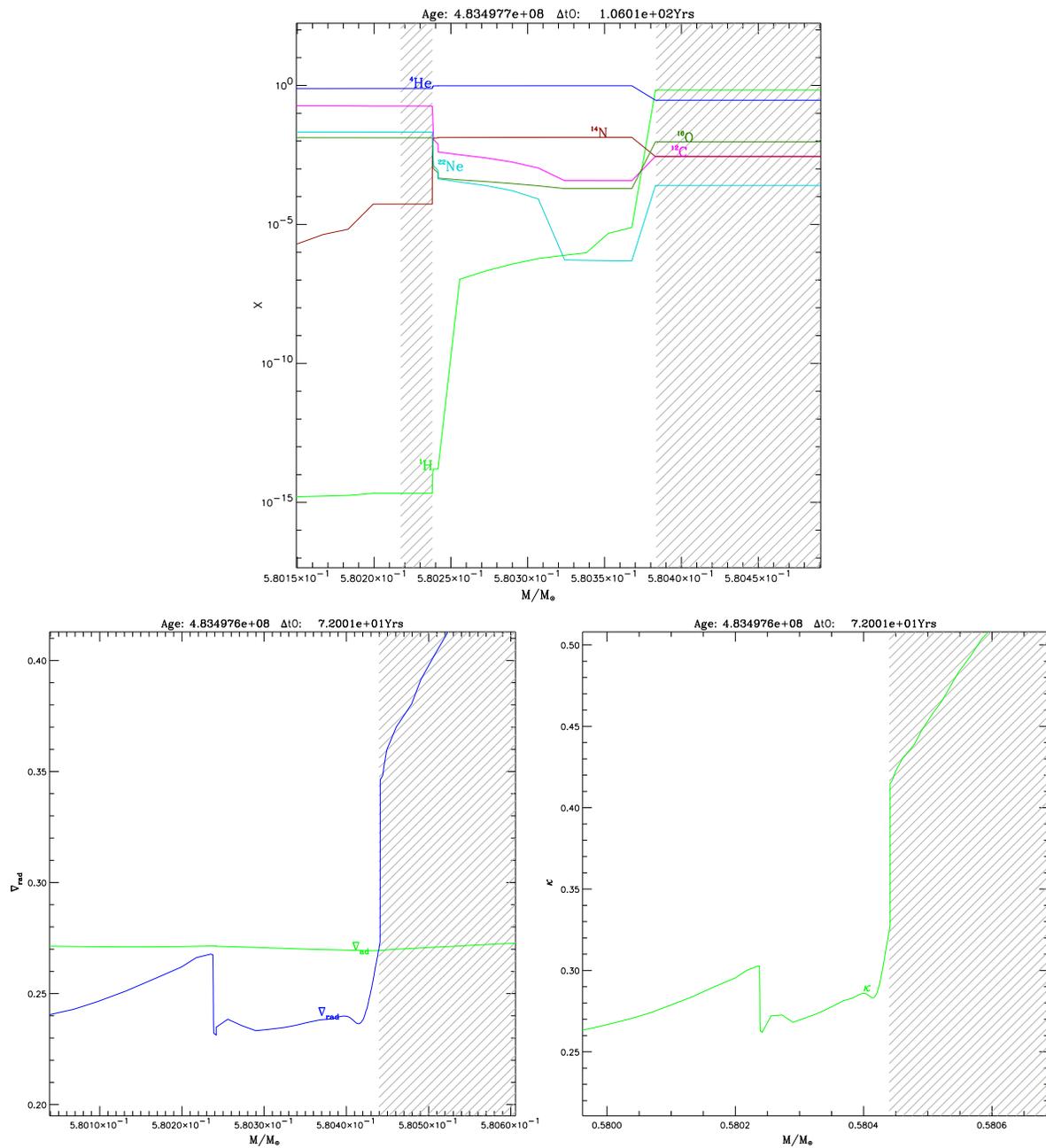


FIG. 4.4 – Profils des abondances, des gradients et de l'opacité juste à l'apparition d'une petite zone convective avant le dredge-up sous l'enveloppe.

clairement des signatures d'une ancienne zone de brûlage CNO: c'était l'ancien emplacement de la couche en fusion d'Hydrogène avant qu'elle ne s'éteigne. Après être montée avec la dilation provoquée par le pulse, l'enveloppe convective redescend vers cette région.

La deuxième discontinuité, autour de $0.58023 M_\star / M_\odot$, est signée par une remontée du Carbone et du Néon et une diminution de l'Hélium et des abondances constantes. Il s'agit en fait de l'ancienne position du sommet du pulse où avait lieu le brûlage de l'Hélium. Il est clair que la petite zone remarquée apparaît juste à la position de la deuxième discontinuité.

En fait, le profil discontinu des abondances se répercute à l'évidence sur celui de l'opacité et par conséquent du gradient radiatif (voir figures du bas). Or, depuis le déplacement de l'enveloppe convective vers l'extérieur, l'étoile subit dans cette région une chute de tempéra-

ture et de masse volumique corrélée à une montée de la luminosité. Cette chute se traduit sur le gradient radiatif par une quasi-translation progressive de son profil vers le haut (d’après l’équation II–1.19), si bien qu’à un certain moment le pic correspondant à la deuxième discontinuité coupe le gradient adiabatique et produit une petite zone convective.

En comparant un pulse suivi de dredge-up avec un autre où le dredge-up n’est pas présent, nous avons pu constater que:

- pour un pulse sans DUP, dès que la petite zone est apparue, T et ρ amorcent une forte augmentation qui fait redescendre le gradient radiatif et supprime la zone.
- pour un pulse suivi de DUP, T et ρ ne cessent de diminuer. La petite zone est alors rejointe par l’enveloppe qui descend. Les profils de T et ρ continuent à descendre, le gradient radiatif monte encore, l’enveloppe convective descend de plus en plus et produit le troisième dredge-up.

On doit retenir de ce paragraphe l’imbrication entre pulse thermique et dredge-up. En effet, plus un pulse est violent et plus la luminosité va monter rapidement. Alors le profil du gradient radiatif monte très rapidement et la petite zone convective non seulement apparaît mais aussi est rapidement accolée à l’enveloppe convective, qui descend elle aussi à cause de la montée de ∇_{rad} . Dans ce cas, le troisième dredge-up a donc lieu. Par contre si la luminosité du pulse n’est pas assez importante, alors même si la petite zone convective apparaît, la redescente de la luminosité accompagnée de la remontée de ρ et T fera redescendre ∇_{rad} et disparaître cette zone. L’enveloppe remonte, incapable de franchir le ”puit” du gradient radiatif visible sur les figures au bas de III–4.4.

4.3 Tableau comparatif

Chaque test effectué a consisté à recalculer le modèle de référence dans l’un ou l’autre des cas suivants:

- soit à partir de $\Delta t = 1044ans$ (45 pas de temps) avant l’apparition du pulse thermique
- soit à partir du modèle suivant la disparition du pulse, ce qui correspond à $\Delta t = 3000ans$ (272 pas de temps) avant le dredge-up.

Nous avons en effet choisi de recalculer aussi le pulse pour certains tests qui nous semblaient pouvoir modifier ses caractéristiques, notamment pour ceux concernant l’équation d’état et les frontières convectives, puisqu’un pulse est par définition convectif.

Pulses

Globalement, on peut faire une remarque: parmi les pulses recalculés, tous ont des caractéristiques très similaires. De 0.4% à 4% de différences en luminosité et de 0.1% à 0.3% en masse. Seul ION se détache un peu avec respectivement 9% et 0.4% de différence en L_{max} et ΔM . Cela paraît normal car on s’attendait justement à une augmentation de la luminosité à cause de la perte d’électrons dans l’enveloppe de l’étoile.

Code	L_{He}^{max} L_{\odot}	M_{pth}^+ M_{\odot}	M_{pth}^{\perp} M_{\odot}	ΔM_{pth} $10^{-13} M_{\odot}$	$\log(T_{max})$	M_{dup}^{\perp} M_{\odot}	ΔM_{dup} $10^{-13} M_{\odot}$
STD	$4.75 \cdot 10^7$.580238	.555037	25.2	8.4324	.579251	0.99
Numérique							
SHL	$4.77 \cdot 10^7$.580241	.554983	25.26	8.4325	.579175	1.07
SHL2	$4.81 \cdot 10^7$.580241	.555027	25.21	8.4325	.579190	1.05
TIM						.578648	1.59
Equation d'état							
ION	$5.20 \cdot 10^7$	580222	.554922	25.3	8.4343	.578943	1.30
EGS						.579193	1.04
FDT	$4.86 \cdot 10^7$	580251	.554988	25.26	8.4329	.579167	1.08
Frontières convectives							
LED						.580490	-0.25 (!)
STA	$4.94 \cdot 10^7$.580241	.554971	25.27	8.4336	.576632	3.61
MIX	$4.85 \cdot 10^7$.580240	.555014	25.23	8.4330	.577854	2.38
Processus de mélange							
DOV						.578268	1.97
SCO							
SHR							

TAB. 4.3 – Tableau comparatif des pulses et dredge-up obtenus pour les différents test réalisés. Lorsque le calcul du pulse et donc de M_{pth}^+ n'a pas été fait, on a supposé $M_{pth}^+ = M_{pth}^+(ref)$ pour calculer ΔM_{dup} .

Troisième dredge-up

Les test se rangent en trois catégories.

- ceux qui ne changent pas la profondeur du DUP3: SHL,SHL2, EGS et FDT.
- ceux qui réduisent la profondeur du DUP3 (l'annule même!): LED.
- ceux qui augmentent la pénétration de l'enveloppe convective: ION, TIM, DOV, MIX, STA (par ordre croissant de ΔM_{dup}).

4.4 Détails des résultats

4.4.1 Constance de la profondeur du dredge-up

Le deux types de tests n'ayant pas montré de différence pour la profondeur du dredge-up sont la variation du nombre de couches, le changement du calcul des intégrales de Fermi-Dirac et le changement d'écriture de ϵ_{grav} . Nous pouvons donc retenir que

- nous ne retrouvons pas la dépendance en la résolution spatiale montrée par Straniero *et al.* (1997)
- les deux écritures (avec s ou ρ et u) de ϵ_{grav} sont bien équivalentes et dans une situation ou les abondances changent, ce qui démontre la cohérence de notre équation d'état et l'exactitude du traitement du terme de mélange. La figure III-4.5 montre le profil de ϵ_{grav} juste après le franchissement par l'enveloppe convective d'une discontinuité

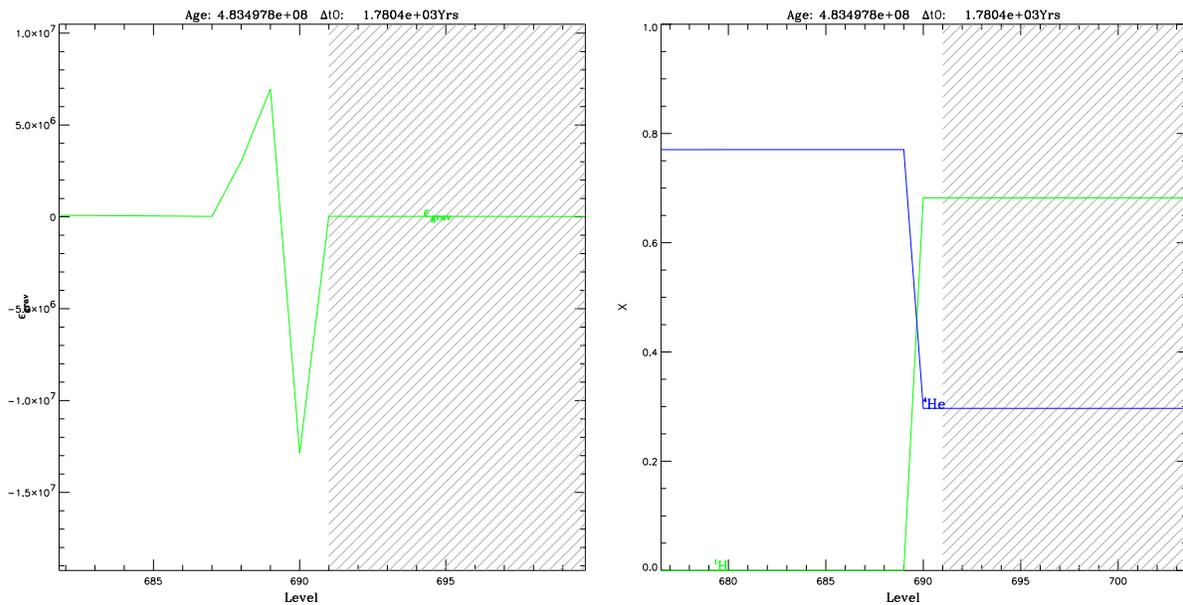


FIG. 4.5 – Profils des abondances et de ϵ_{grav} lorsque l’enveloppe convective pénètre une région de composition différente de la sienne.

de composition. Deux pics opposés en signe apparaissent dans l’énergie gravothermale, correspondant aux modifications de composition chimique de chaque côté de la frontière convective. Du côté convectif, il y a augmentation de l’abondance des lourds, contraction et donc un $\epsilon_{grav} < 0$ et inversement du côté radiatif de la frontière.

- les petites erreurs éventuellement introduites par l’utilisation d’intégrales de Fermi-Dirac ajustées ne se répercutent pas sur les calculs, ni sur celui du pulse à la base de laquelle la dégénérescence est pourtant importante ($\eta \sim 0.6$), ni sur celui du dredge-up.

4.4.2 Réduction de la profondeur du dredge-up

Le seul modèle qui présente cette caractéristique est celui utilisant le critère de Ledoux pour délimiter les frontières convectives. Les figures III–4.6 montrent très bien que la discontinuité H-He est tellement abrupte que ∇_{μ} est piquée sur une seule couche numérique avec une très forte valeur. Utiliser le critère de Ledoux pour délimiter la frontière convective revient donc à empêcher la base de l’enveloppe convective de pénétrer sous cette barrière de μ . En réalité, il convient, dans une telle situation, de traiter ce problème en introduisant la possibilité d’un mélange partiel dépendant du temps. Il s’agit d’un traitement diffusif de la semi-convexion. Un tel traitement constitue le test SCO. Il est actuellement en cours de réalisation.

4.4.3 Augmentation de la profondeur du dredge-up

ION

L’influence de l’ionisation se fait sentir sur les conditions thermodynamiques régnant à la base de l’enveloppe convective. On remarque sur la figure III–4.7 où ρ et T à la base de l’enveloppe convective ont été tracés, que T et ρ sont légèrement supérieurs à leurs valeurs dans le modèle de référence. On note sur l’évolution de ρ et T , le moment de remontée maximum

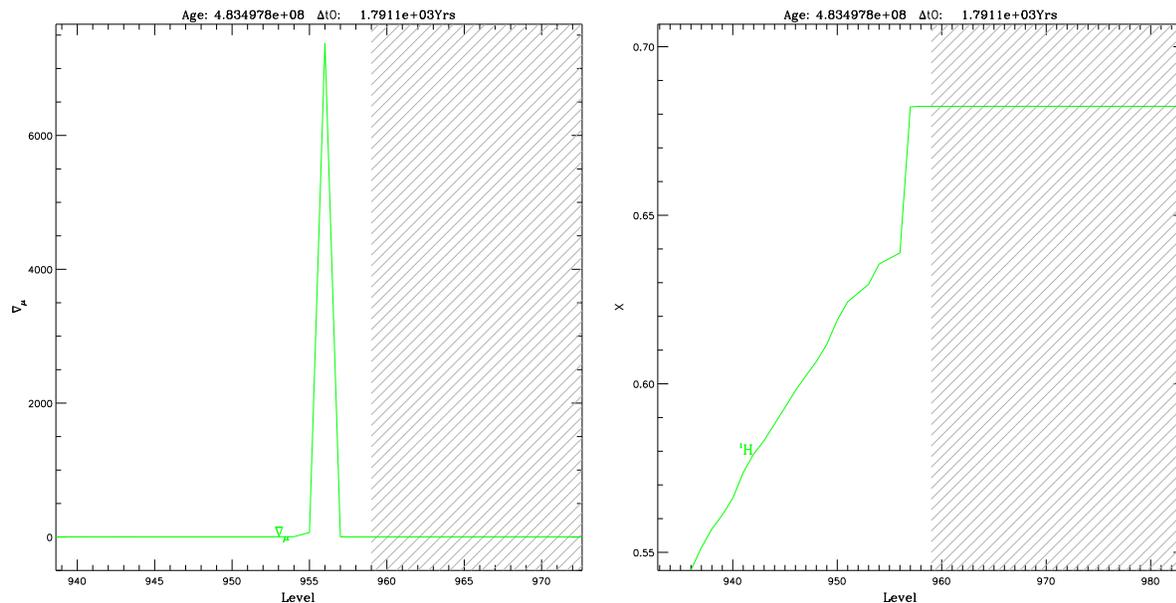


FIG. 4.6 – *Test LED: profils de l’abondance d’Hydrogène et du gradient de poids moléculaire moyen, ∇_{μ} , au moment de pénétration maximum de l’enveloppe (l’enveloppe est restée au-dessus de la couche d’Hydrogène).*

de la base de l’enveloppe convective, juste après le pulse, pendant lequel ρ et T chutent. Les remontées successives au-dessus des valeurs de départ sont dues au franchissement successifs des deux discontinuités correspondants à l’ancienne zone de brûlage de l’Hydrogène et à l’extension maximum du pulse (voir la section III-4.2.3). Cela correspond pour la frontière convective à une descente en ”deux fois” avec des pentes différentes dans les diagrammes de Kippenhahn.

TIM

La figure III-4.8 montre la structure du pulse pour le pulse de référence et celui calculé avec un pas de temps 10 fois plus petit. Le temps choisi comme origine de l’axe des temps est $t_0 = 4.83496800 \cdot 10^8 yr$. La première pénétration de l’enveloppe vers le bas est similaire mais la deuxième est plus importante pour TIM que pour le test standard puisqu’elle atteint $M \sim .5785$ au lieu de $M \sim .5790$.

DOV

Les figures présentées en III-4.9 montrent clairement l’effet de l’overshooting. Lorsque la frontière convective de l’enveloppe descend dans l’ancienne couche en fusion d’Hydrogène, l’overshooting, modélisé par le coefficient de diffusion, D_{tur} , va permettre à de l’Hydrogène de migrer vers l’intérieur de l’étoile riche en Hélium, à travers la discontinuité H-He. Le début de ce phénomène est illustré par la figure III-4.9 (en haut à gauche) au temps $t = 4.834975 \cdot 10^8 yr$. La discontinuité visible sur la gauche du graphe dans l’abondance de ^{13}C est l’ancien sommet du pulse thermique précédent qui s’est retiré.

On remarquera de plus sur le graphe suivant de la même série (en haut à droite) que les protons ont commencé à diffuser avec des abondances qui présentent quelques oscillations.

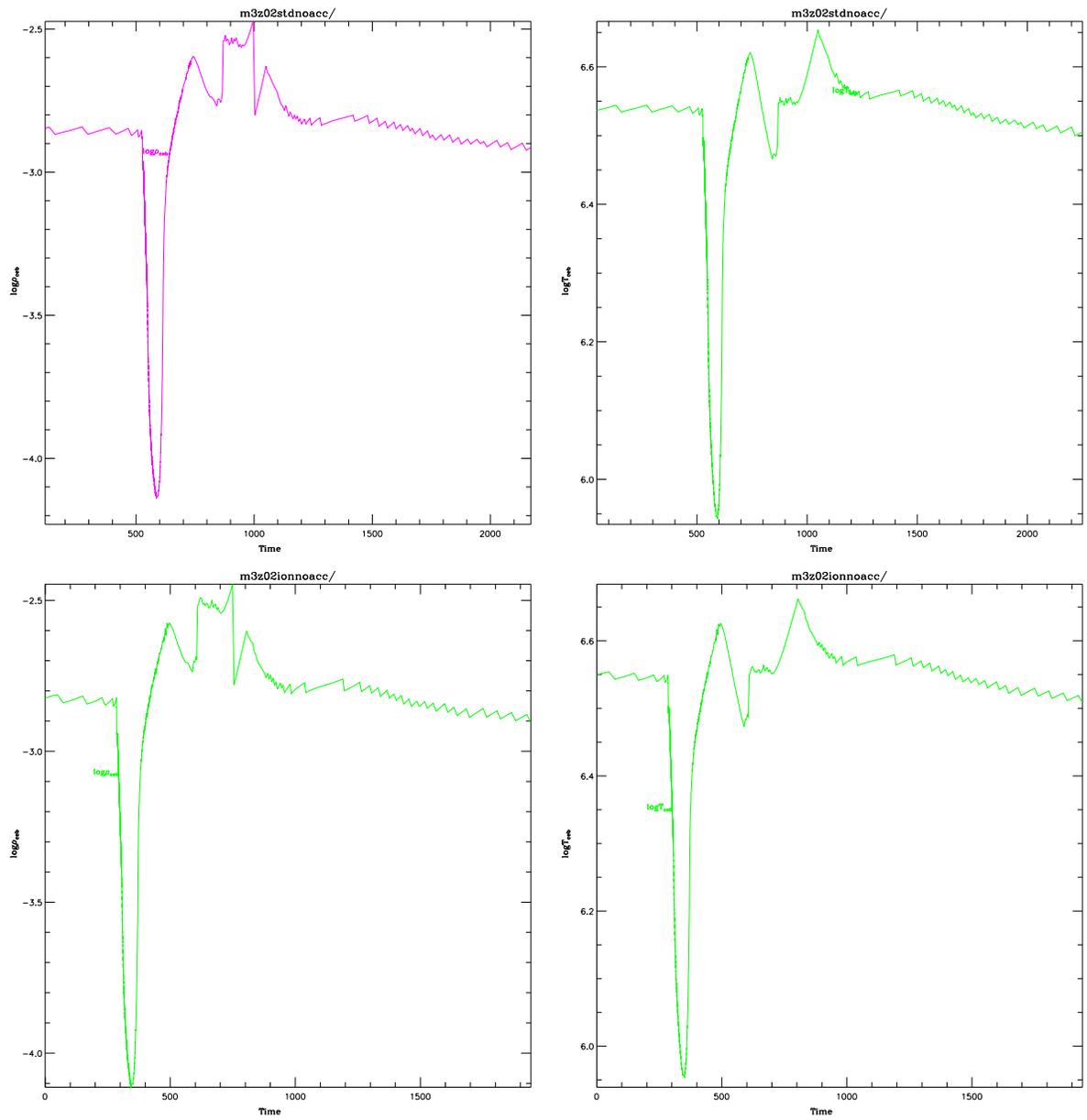


FIG. 4.7 – *Test ION: évolution temporelle des conditions thermodynamiques (T, ρ) à la base de l’enveloppe convective pour le modèle de référence (en haut) et le test TIM (en bas).*

Elles se résorberont en quelques itérations. Leur origine est due au profil en ”marche d’escalier” de l’abondance initiale d’Hydrogène. Comme la frontière convective approche de la deuxième discontinuité, non seulement les protons diffusent mais aussi directement le ^{13}C !

Enfin, le graphe porté au milieu à gauche de III–4.9 correspond à un moment où l’enveloppe convective s’est retirée de la zone où l’overshooting a eu de l’influence. Elle laisse clairement derrière elle une poche de protons et une de ^{13}C formées en seulement 300 ans environ car $t=4.834978 \cdot 10^8 \text{yr}$.

La couche d’hydrogène se rallume ensuite 5500 ans après (à $t=4.835033 \cdot 10^8 \text{yr}$ et $\epsilon_{\text{nuc}} \sim 6000 \text{erg/g/s}$). Avec la montée de température résultant du rallumage, on voit nettement sur la figure en bas à gauche que la poche de protons est brûlée pour agrandir encore la poche de ^{13}C dans l’intercouche par $^{12}\text{C}(p, \gamma)^{13}\text{C}$.

Finalement, la dernière figure montre la poche de ^{13}C ”prête à l’emploi” pour produire

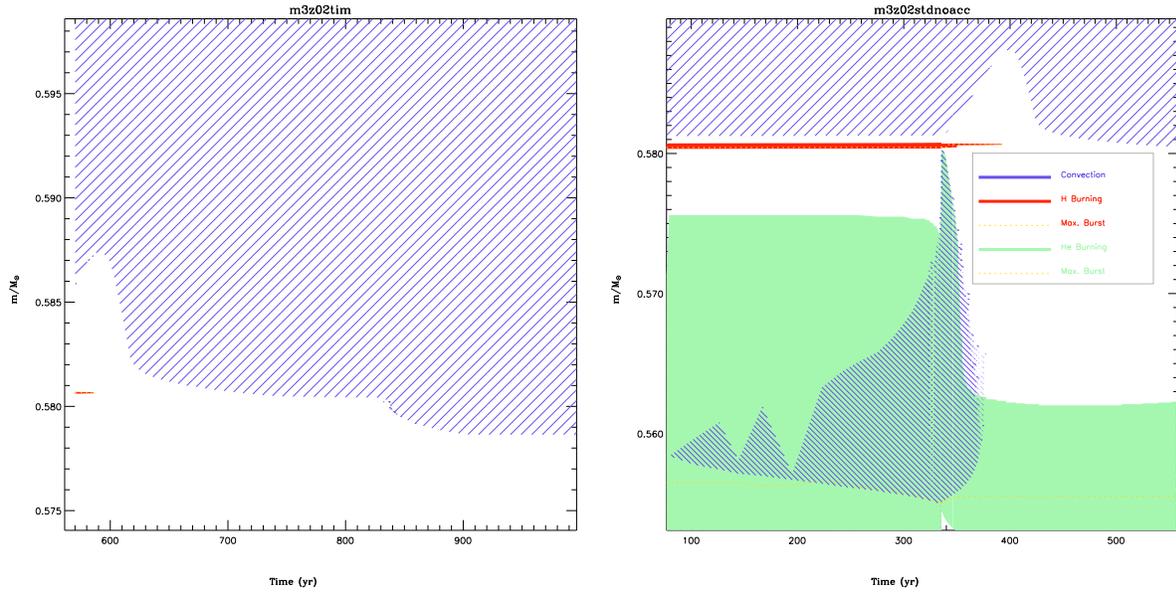


FIG. 4.8 – *Test TIM: diagramme de Kippenhann du DUP3 de référence (droite) et de celui du test TIM (gauche).*

des neutrons, qui atteint la fraction de masse 10^{12} .

Soulignons ici que *non seulement l'addition d'overshooting a pour conséquence de créer une poche de ^{13}C permettant au processus "s" d'avoir lieu, mais que ce traitement de l'overshooting permet aussi d'obtenir un dredge-up plus profond.* Cela démontre qu'un processus physique et la façon de le traiter pourraient être la solution unique à deux problèmes observationnels: l'enrichissement en élément "s" et la formation des étoiles carbonées. Parmi les autres processus physiques pouvant expliquer le transfert de protons sous la frontière convective, le calcul du test SHR, utilisant le transport induit par la rotation, est en cours de calcul.

MIX

L'algorithme utilisé a été le suivant:

- pour chaque modèle, on impose de mélanger toutes les zones convectives à chaque itérations pendant au maximum 20 itérations.
- Ensuite, les zones convectives ne sont plus mélangées jusqu'à convergence.

La conséquence de cet algorithme est que la convergence est très difficile pendant les 20 premières itérations puisqu'à chaque itération où l'on devrait vérifier un peu mieux les équations de la structure stellaire, on déplace les frontières convectives et on y change la compositions. Comme on est dans cas de figure où la base de l'enveloppe convective descend dans une zone radiative de composition très différente, le modèle est perturbé en cours de convergence. En règle générale, le modèle converge normalement *après* l'arrêt du mélange à chaque itérations.

Ce procédé n'est cependant pas vain car si on compare un modèle convergé avec ce procédé et un modèle qui converge sans, on va s'apercevoir qu'ils ne sont pas identiques: la structure du modèle où l'algorithme a été appliqué a pris en compte le mélange pour évoluer. Ainsi les frontières convectives en particulier peuvent être très différentes car sans algorithme, cette

frontière est fixée avec des abondances locales qui sont celles de l'ancien modèle, c'est-à-dire celles d'une zone radiative. Par contre, si l'on mélange à chaque itération, on force le modèle à prendre en compte le mélange résultant de l'avancée de la base de l'enveloppe et on réduit ainsi le gradient de composition à la frontière. De modèle en modèle, cela permet donc à l'enveloppe de descendre plus bas. Un futur test pourrait donc être le couplage de LED et MIX. Cette dépendance dans le traitement du mélange convectif avait déjà été discutée en partie par Lattanzio & Boothroyd (1997).

STA

On remarque dans le cas "STA" une descente très rapide (figure III-4.11) de l'enveloppe convective qui fait passer directement le "fond du puit" du gradient radiatif au dessus du gradient adiabatique sans faire apparaître la petite zone convective discutée en III-4.2.3.

A propos du test STA, comme pour le test MIX d'ailleurs, quelles sont les conséquences de l'augmentation de la profondeur de pénétration du DUP3F En fait, simplement la quantité de matière ramenée dans l'enveloppe va être plus importante et les rapports isotopiques de surface vont être modifiés de façon plus importante. Par contre, il n'y pas de répercussion sur le processus "s" tant que le mélange est instantané, car dans ce cas, les protons ne peuvent pas traverser la frontière convective pour se déposer dans l'intercouche. Ce qu'il faudra, c'est coupler la recherche d'une frontière stable grâce à l'algorithme de STA pour avoir une profondeur de pénétration plus importante, avec un algorithme de mélange non standard tel que DOV. Ainsi, on se placera dans des conditions optimum de dépôt de protons profondément dans l'intercouche.

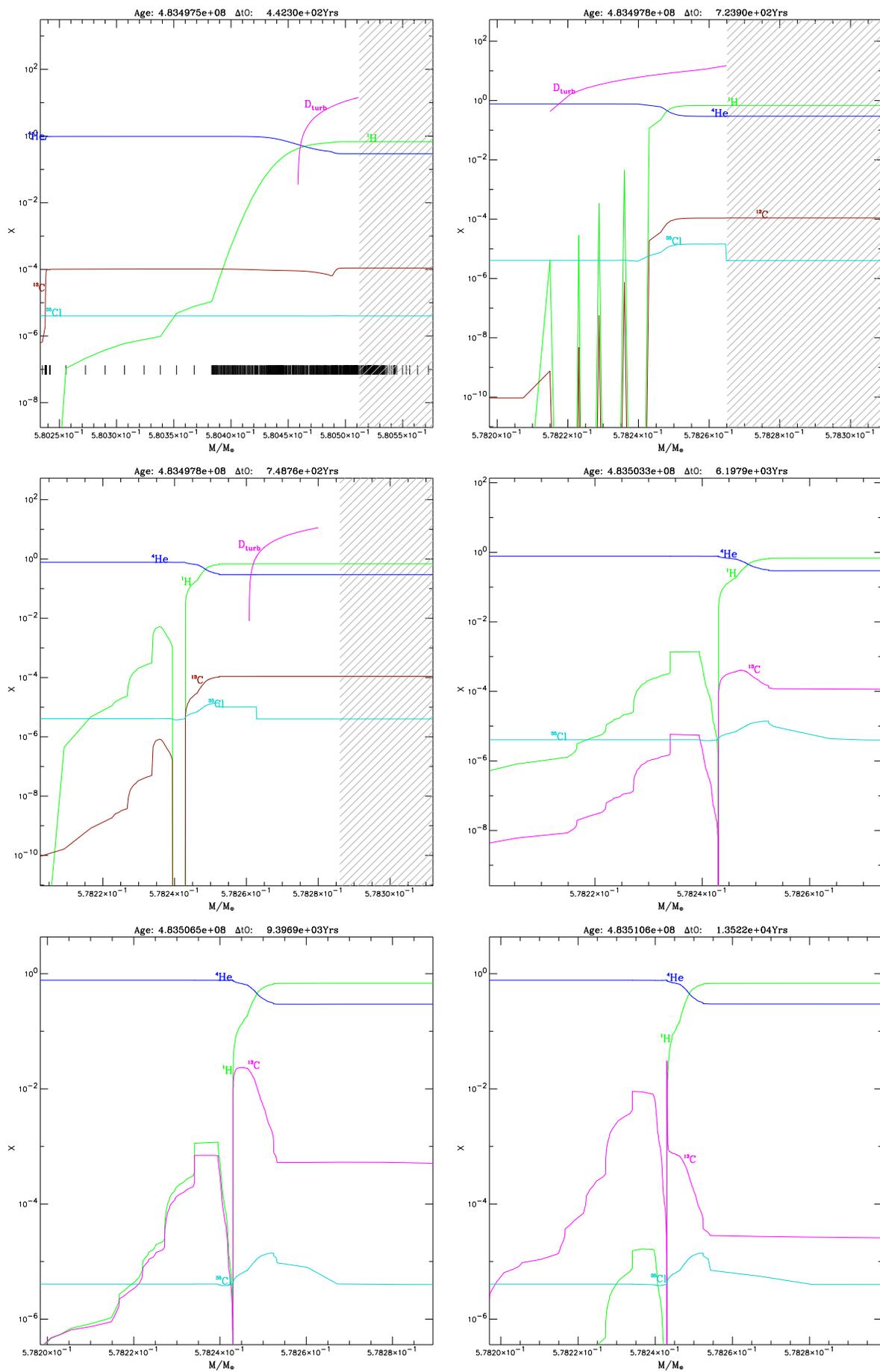


FIG. 4.9 – Test DOV: évolution du profil des abondances de ^1H , ^4He , ^{13}C et ^{35}Cl chronologiquement de gauche à droite et de haut en bas.

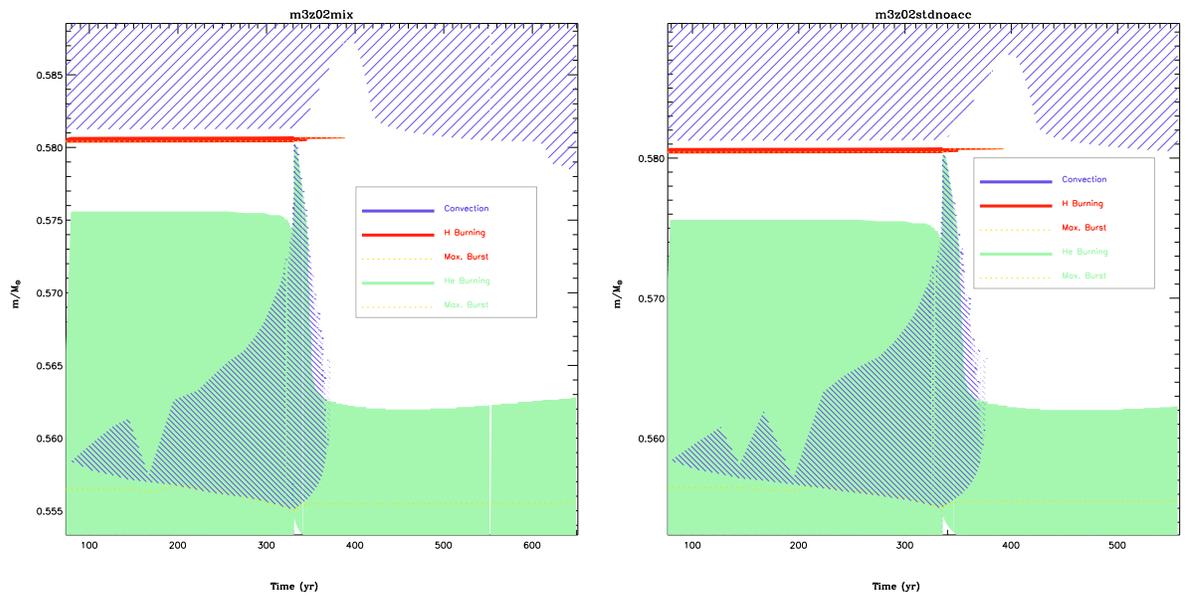


FIG. 4.10 – *Test MIX: structure du DUP3 de référence et de celui de MIX (respectivement à droite et à gauche). Le temps est compté en années à partir de $t = 4.83497 \cdot 10^8$ yr.*

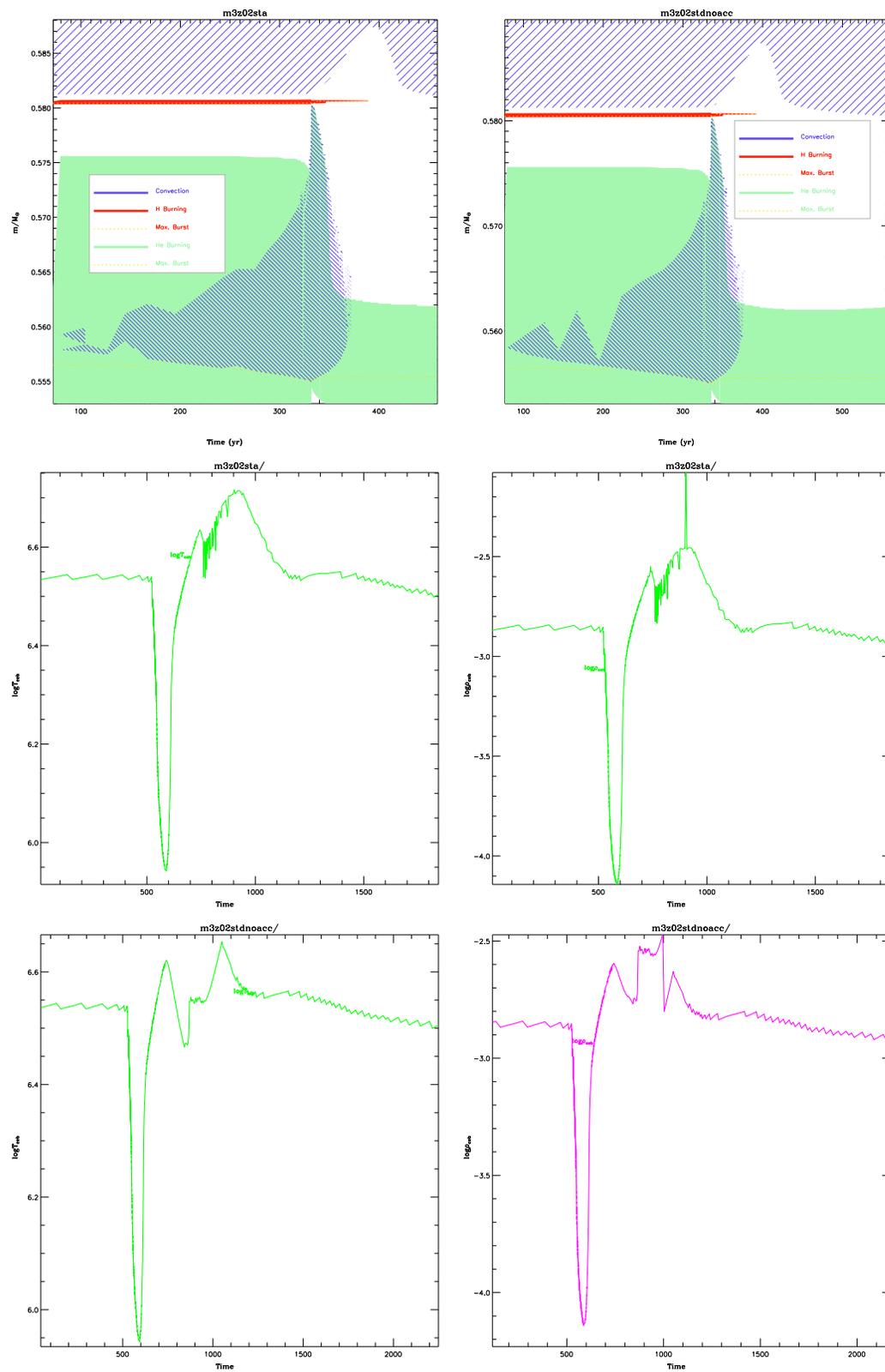


FIG. 4.11 – Test STA: structure du DUP3 de référence et de celui de STA (en haut, respectivement à droite et à gauche) et évolution temporelle des conditions thermodynamiques, ρ et T , à la base de l'enveloppe convective pour le modèle de référence (en bas) et le test STA (au milieu).

Conclusion

4.5 Résumé

Résumons ici les résultats obtenus lors de ce travail de thèse.

4.5.1 Résultats observationnels (étoiles J)

- Les valeurs de la perte de masse sont faibles comparées aux valeurs courantes rencontrées lors de la phase AGB: $1 \cdot 10^{-7} < \dot{M} < 3 \cdot 10^{-7} M_{\odot} \cdot \text{yr}^{-1}$
- Les r_{CO} trouvés sont compatibles avec les rayons de photodissociation issus des modèles chimiques pour CO de Mamon *et al.* (1988).
- Les profondeurs optiques des raies observées vérifient l'inégalité suivante: $\tau(^{12}\text{C}^{32}\text{S}) > \tau(^{13}\text{C}^{32}\text{S}) > \tau(^{12}\text{C}^{16}\text{O}) > \tau(^{13}\text{C}^{16}\text{O})$ et de plus, les valeurs trouvées montrent que les transitions sont suffisamment optiquement fines pour que les rapports d'intensités soient comparables aux rapports d'abondances moléculaires.
- La comparaison entre les molécules CO et CS montre que les effets chimiques sont négligeables et que les rapports d'abondances moléculaires et atomiques doivent donc être semblables.

Les valeurs de $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, \dot{M} et $C/O > 1$ sont difficilement conciliables. Comme résumé dans l'article présenté au chapitre III-2, les faibles valeurs de \dot{M} et $C/O > 1$ sont compatibles avec des étoiles de faibles masses alors que les valeurs trouvées pour le rapport isotopiques du Carbone sont cohérentes avec des étoiles de masses intermédiaires.

Certes, on peut toujours supposer un phénomène de transfert de masse dans une étoile binaire pour réconcilier ces valeurs sur un même objet, mais une explication plus "physique" permettrait sans doute d'atteindre le même objectif. En effet, la prise en compte de processus de transport dès la phase RGB pourrait modifier les abondances du rapport isotopique du Carbone pour les abaisser significativement en début de phase AGB vers les valeurs trouvées dans les étoiles de type J.

4.5.2 Résultats théoriques

- Le code d'évolution stellaire de Grenoble est maintenant performant pour la modélisation des étoiles de l'AGB, tant d'un point de vue numérique que d'un point de vue physique.
- L'influence de différents facteurs numériques ou physique ont été testés sur la modélisation du dredge-up et les résultats ont été comparés avec les différents tests déjà effectués dans la littérature. Il apparaît que tous les choix de traitement du mélange influencent la profondeur du dredge-up, que ce soit l'algorithme, la méthode ou la nature physique du mélange utilisé.
- Parmi les effets de mélange testés, ce travail montre pour la première fois que le mélange diffusif influence *à la fois* la profondeur du dredge-up *et* l'apparition d'une poche de ^{13}C .

4.6 Perspectives

Le travail engagé demande tout naturellement à être complété, notamment par :

- La possibilité de faire directement du processus « s » sur les modèles calculés.
- L'amélioration de l'ionisation par pression dont le traitement est très approximatif.
- La fin des tests sur le dredge-up avec notamment l'essai de mélange diffusif résultant du couplage des instabilités thermiques et rotationnelles (semiconvection et cisaillement dans le formalisme de Maeder (1997)) et l'addition de conditions numériques et physiques favorisant un dredge-up plus profond.
- le dépouillement de la campagne d'observations des rapports isotopiques des éléments CNO dans les étoiles oxygénées.

Cependant, l'association des résultats théoriques et des résultats observationnels conduit à penser que l'avenir ne consiste pas seulement à réaliser les compléments techniques décrits ci-dessus. Ils doivent être associés à un changement total dans l'esprit de travail. En effet, pourquoi invoquer des *cas particuliers* (transfert de masse, étoile d'une masse donnée nécessitant l'incorporation de physique particulière mais seulement à un moment donné,...) pour rendre compte d'incompatibilités entre observations et théories, qui deviennent d'ailleurs de plus en plus nombreuses dans la littérature ? Les étoiles J n'en sont qu'un exemple.

De même, pourquoi faire évoluer une étoile RGB sans mélange, obtenir des rapports isotopiques initiaux en conséquence, et subitement faire évoluer ces rapports avec du mélange car on arrive sur la phase AGB ? Il a été montré lors de ce travail de thèse que le mélange influence à la fois le processus « s » (apparition de la poche de ^{13}C) et les abondances relatives des isotopes en fonction de la luminosité de l'étoile (à travers la profondeur du dredge-up). Certaines difficultés d'interprétation pourraient, peut être, être levées en prenant en compte le mélange décrit dans cette thèse, de façon appropriée, dès que l'étoile devient « évoluée ». Cela demande en tout cas de s'y intéresser. C'est un changement d'état d'esprit car il nécessite :

- La volonté de ne plus faire appel à des cas particuliers pour expliquer des incompatibilités entre observations et théories.
- La possibilité de calculer de façon cohérente une étoile évoluée tout au long de son histoire, avec le même code, et la même physique.

Remerciements

Cette partie “remerciements” est bien plus qu’un simple additif conventionnel ou obligatoire dans une thèse. Il fait partie intégrante des relations humaines qui sont au centre de tout projet. Mon souhait est que chacun puisse prendre part à la fin de ce projet comme il a eu l’occasion d’y participer directement ou indirectement pendant son déroulement.

Ma famille, *Murielle, Béatrice et Romain* pour le temps, souvent cruellement partagé, entre eux et ma thèse.

Manuel, pour son soutien enthousiaste tant scientifique, technique, matériel que moral, à tous les instants de ce travail de thèse. Il a toujours su recadrer ce projet ambitieux et “mettre la main à la pâte” lorsque des difficultés se présentaient. C’est en particulier grâce au savant dosage entre l’autonomie, nécessaire et appréciable, qu’il m’a laissée et la présence, rassurante et active, qu’il a assurée que j’ai pu vivre agréablement un travail de recherche en équipe. Merci aussi pour nos “rencontres” sur des terrains tout aussi différents et divertissants que l’enseignement, la vulgarisation ou le chocolat!

Claudine, pour sa patience dans mon apprentissage total des observations et de leur dépouillement, en particulier en radio, et pour le “folklore” de nos 60h d’observations non-stop au 30m de l’IRAM, alternant plats de charcuterie, remise à zéro de l’autocorrélateur, tricot et interrogations métaphysique sur la présence ou non d’une raie dans le bruit de nos spectres.

Corinne, pour sa collaboration efficace et agréable grâce à laquelle un outil puissant dont j’ai bénéficié a été incorporé dans le code.

Lionel, pour sa participation active et concrète aux phases décisives de modification du code d’évolution stellaire.

Les membres du jury, pour avoir accepté d’évaluer ce travail et en particulier les rapporteurs, pour avoir rendu leurs conclusions en un temps très peu “conventionnel”.

Michel, pour la réalisation professionnelle des procédures IDL permettant de présenter agréablement les centaines de giga-octets de données générées pour chaque étoile.

Ginette, pour avoir répondu à de nombreuses sollicitations informatiques, presque tout le temps en dernière minute, et aussi pour l’ambiance de “vie” dans le travail qu’elle contribue à entretenir au laboratoire.

Nicolas, pour nos discussions passionnées et toujours très sérieuses de physique, pour son système avantgardiste et révolutionnaire de “classement en tas continus miscibles” et pour notre ambiance de travail, tantôt FrereJacquiste, ou JoDassinienne, tantôt classiquiste.

Alexandre, pour avoir marché sur le Web tout en gardant son sang-froid dans un pareil moment historique.

Sébastien et Jean-Charles, pour m’avoir prêté un toit lors de ma période de rédaction.

Evy, la standardiste appréciée et dévouée du bureau 113, pour sa bonne humeur et son goût pour la vraie musique au DEA “Grenouille et gros boeuf”.

Yves, pour son accueil amical lorsque j’étais en “manque de bureau”.

Enfin, un grand merci collectif au laboratoire d’astrophysique de Grenoble où il règne une ambiance de travail tout à la fois exceptionnellement conviviale, sérieuse et détendue.

Références Bibliographiques

Bibliographie

- Albrecht, M. A. 1983, Approximated collisional rates for CS-H2 ($J = 0$), *Astron. & Astrophys.* **127**, 409+.
- Alexander, D. R. et Ferguson, J. W. 1994, Low-temperature Rosseland opacities, *Astrophysical Journal* **437**, 879.
- Andersen, A. C., Loidl, R. et Hoëfner, S. 1999, Optical properties of carbon grains: Influence on dynamical models of AGB stars, *Astron. & Astrophys.* **349**, 243.
- Angulo, C., Arnould, M. et Rayet, M. 1999, *Nucl. Phys.* **656**, 3.
- Arnould, M., Mowlavi, N. et Champagne, A. 1996, Non-Explosive Hydrogen Burning: Where Do We Stand?, dans "Stellar Evolution: What Should be Done", 32nd Liege Int. Astroph. Coll., eds. A. Noels, D. Fraipont-Caro, M. Gabriel, N. Grevesse, P. Demarque, Universite de Liege, Belgium, 1996, pp 17-29, pp. 17-29.
- Audouze, J. et Vauclair, S. 1981, *L'astrophysique nucléaire*, Presses universitaires de France.
- Bahcall, J. N. et Pinsonneault, M. H. 1996, Helioseismology, Solar Models, and Solar Neutrinos, dans *American Astronomical Society Meeting*, vol. 189, pp. 5601+.
- Balian, R. 1982, *Du microscopique au macroscopique*, Ellipse.
- Baraffe, I., Chabrier, G., Allard, F. et Hauschildt, P. H. 1998, Evolutionary models for solar metallicity low-mass stars: mass-magnitude relationships and color-magnitude diagrams, *Astron. & Astrophys.* **337**, 403.
- Bell, R. A., Eriksson, K., Gustafsson, B. et Nordlund, A. 1976, A grid of model atmospheres for metal-deficient giant stars. II, *Astronomy and Astrophysics, Supplement* **23**, 37.
- Biermann, L. 1951, Kometenschweife und solare Korpuskularstrahlung, *Zeitschrift Astrophysics* **29**, 274+.
- Bloecker, T. 1995, Stellar evolution of low and intermediate-mass stars. I. Mass loss on the AGB and its consequences for stellar evolution., *Astron. & Astrophys.* **297**, 727+.
- Boothroyd, A. I. et Sackmann, I. J. 1988a, Low-Mass Stars. III. Low-mass stars with steady mass loss: up to the asymptotic giant branch and through the final thermal pulses., *Astrophysical Journal* **328**, 653.
- Boothroyd, A. I. et Sackmann, I. J. 1988b, Low-Mass Stars. IV. Carbon stars, *Astrophysical Journal* **328**, 671.
- Boothroyd, A. I. et Sackmann, I. J. 1992, Breakdown of the core mass-luminosity relation at high luminosities on the asymptotic giant branch, *Astrophysical Journal, Letters* **393**, L21.
- Bransden, B. et Joachain, C. 1994, *Physics of atoms and molecules*, Longman scientific & technical.

- Brink, D. et Satchler, G. 1994, *Angular momentum*, Oxford science publications.
- Brun, A. S., Turck-Chièze, S. et Morel, P. 1998, Standard Solar Models in the Light of New Helioseismic Constraints. I. The Solar Core, *Astrophysical Journal* **506**, 913.
- Bujarrabal, V., Fuente, A. et Omont, A. 1994, "The discrimination between O- and C-rich circumstellar envelopes from molecular observations", *Astrophysical Journal, Letters* **421**, L47.
- Canuto, V. M. 1990, The mixing length parameter alpha, *Astron. & Astrophys.* **227**, 282.
- Canuto, V. M. 1998, Turbulence in Stars. II. Shear, Stable Stratification, and Radiative Losses, *Astrophysical Journal* **508**, 767.
- Canuto, V. M. et Mazzitelli, I. 1991, Stellar turbulent convection - A new model and applications, *Astrophysical Journal* **370**, 295.
- Castor, J. 1970, Spectral formation in Wolf-Rayet envelopes, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.* **149**, 111.
- Chaboyer, B. et Zahn, J. P. 1992, Effect of horizontal turbulent diffusion on transport by meridional circulation, *Astron. & Astrophys.* **253**, 173.
- Charbonnel, C., Daëppen, W., Schaerer, D., Bernasconi, P. A. *et al.* 1999, Grids of stellar models. VIII. From 0.4 to 1.0 $\{M_{\text{sun}}\}$ at $Z=0.020$ and $Z=0.001$, with the MHD equation of state, *Astronomy and Astrophysics, Supplement* **135**, 405.
- Clayton, D. 1983, *Principles of stellar evolution and nucleosynthesis*, Chicago Press.
- Cohen, J. G., Persson, S. E., Elias, J. H. et Frogel, J. A. 1981, Bolometric luminosities and infrared properties of carbon stars in the Magellanic Clouds and the Galaxy, *Astrophysical Journal* **249**, 481.
- Collins, G. 1989, *Stellar astrophysics*, Freeman.
- Couture, L. et Zitoun, R. 1992, *Physique statistique*, Ellipses.
- Cox, J. et Giuli, R. 1984, *Principles of stellar structure*, Gordon and Breach science publisher.
- D'Antona, F. et Mazzitelli, I. 1996, Hot Bottom Burning in Asymptotic Giant Branch Stars and the Turbulent Convection Model, *Astrophysical Journal* **470**, 1093+.
- D'Antona, F. et Mazzitelli, I. 1997, dans in "Cool stars in clusters and Associations", eds. R. Pallavicini, G. Micela, *Memorie della Societa Astronomia Italiana*, vol. 69, p. 575.
- de Groot, S. et Mazur, P. 1984, *Non equilibrium thermodynamics*, Dover.
- De Jong, T., Dalgarno, A. et Chu, S. I. 1975, Carbon monoxide in collapsing interstellar clouds, *Astrophysical Journal* **199**, 69.
- de Laverny, P. et Gustafsson, B. 1998, On the determination of carbon isotopic ratios in cool carbon stars, *Astron. & Astrophys.* **332**, 661.
- de Laverny, P. et Gustafsson, B. 1999, On the determination of carbon isotopic ratios in cool carbon stars. II. Accuracy of the iso-intensity method for crowded spectra, *Astron. & Astrophys.* **346**, 520.
- Delfosse, X., Kahane, C. et Forveille, T. 1997, Superwind in evolved OH/IR stars., *Astron. & Astrophys.* **320**, 249.
- Dewitt, H. E., Graboske, H. C. et Cooper, M. S. 1973, Screening factors for nuclear reactions. 1. General theory, *Astrophysical Journal* **181**, 439.

- Downes, D. 1989, Radio astronomy techniques, dans *Evolution of Galaxies: Astronomical Observations*, pp. 351+.
- Eddington, A. S. 1925, Circulating currents in rotating stars, *The Observatory* **48**, 73.
- Eggleton, P. P., Faulkner, J. et Flannery, B. P. 1973, An Approximate Equation of State for Stellar Material, *Astron. & Astrophys.* **23**, 325+.
- Endal, A. S. et Sofia, S. 1978, The evolution of rotating stars. II - Calculations with time-dependent redistribution of angular momentum for 7- and 10-solar-mass stars, *Astrophysical Journal* **220**, 279.
- Fleischer, A., Winters, J. et Sedlmayr, E. 1999, Dynamical modeling of circumstellar outflows, dans *Asymptotic giant branch stars - IAU symposium 191 - T. Le Bertre, A. Lèbre, C. Waelkens eds.*, pp. 187–194.
- Flower, D. R. et Launay, J. M. 1985, Rate coefficients for the rotational excitation of CO by ortho- and para-H₂, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.* **214**, 271.
- Fontaine, G., Graboske, H. C. et Van Horn, H. M. 1977, Equations of state for stellar partial ionization zones, *Astrophysical Journal, Supplement* **35**, 293+.
- Forestini, M. 1994, Thèse de doctorat, Université libre de Bruxelles.
- Forestini, M. 1999, *Principes fondamentaux de structure stellaire*, Gordon and Breach.
- Forestini, M., Arnould, M. et Paulus, G. 1991, On the production of Al-26 in AGB stars, *Astron. & Astrophys.* **252**, 597.
- Forestini, M. et Charbonnel, C. 1997, Nucleosynthesis of light elements inside thermally pulsing AGB stars: I. The case of intermediate-mass stars, *Astronomy and Astrophysics, Supplement* **123**, 241.
- Forestini, M., Goriely, S., Jorissen, A. et Arnould, M. 1992, Fluorine production in thermal pulses on the asymptotic giant branch, *Astron. & Astrophys.* **261**, 157.
- Freytag, B., Ludwig, H. G. et Steffen, M. 1996, Hydrodynamical models of stellar convection. The role of overshoot in DA white dwarfs, A-type stars, and the Sun., *Astron. & Astrophys.* **313**, 497.
- Fricke, K. 1968, Instabilität stationärer Rotation in Sternen, *Zeitschrift Astrophysics* **68**, 317+.
- Frost, C. 1997, *Effects of the third dredge-up on the structure of asymptotic giant branch stars*, Thèse de doctorat, Monash university - Australia.
- Frost, C. A., Cannon, R. C., Lattanzio, J. C., Wood, P. R. *et al.* 1998, The brightest carbon stars, *Astron. & Astrophys.* **332**, L17.
- Frost, C. A. et Lattanzio, J. C. 1996, On the Numerical Treatment and Dependence of the Third Dredge-up Phenomenon, *Astrophysical Journal* **473**, 383+.
- Gallino, R., Arlandini, C., Busso, M., Lugaro, M. *et al.* 1998, Evolution and Nucleosynthesis in Low-Mass Asymptotic Giant Branch Stars. II. Neutron Capture and the s-Process, *Astrophysical Journal* **497**, 388+.
- Glassgold, A. 1999, Circumstellar chemistry of AGB winds, dans *"Asymptotic giant branch stars"*, *IAU symposium 191*, eds T. Le Bertre, A. Lèbre, C. Waelkens, pp. 337–346.
- Goldreich, P. et Schubert, G. 1967, Differential Rotation in Stars, *Astrophysical Journal* **150**, 571+.

- Gordy, W. et Cook, R. 1970, *Microwave molecular spectra*, ed. W. West, Interscience publishers, New York.
- Graboske, H., Harwood, D. et Rogers, F. J. 1969, Thermodynamic properties of nonideal gases. I. Free-energy minimization method, *Physical review* **186**, 210.
- Graboske, H. C., Dewitt, H. E., Grossman, A. S. et Cooper, M. S. 1973, Screening factors for nuclear reactions. 11. Intermediate screening and astrophysical applications, *Astrophysical Journal* **181**, 457.
- Green, S. et Chapman, S. 1978, Collisional excitation of interstellar molecules - Linear molecules CO, CS, OCS, and HC₃N, *Astrophysical Journal, Supplement* **37**, 169.
- Green, S. et Thaddeus, P. 1976, Rotational excitation of CO by collisions with He, H, and H₂ under conditions in interstellar clouds, *Astrophysical Journal* **205**, 766.
- Grevesse, N. et Sauval, A. J. 1998, Standard Solar Composition, *Space Science Reviews, v. 85, Issue 1/2, p. 161-174 (1998)*. **85**, 161.
- Groenewegen, M. A. T., van Der Veen, W. E. C. J. et Matthews, H. E. 1998, IRC +10 216 revisited. II. The circumstellar CO shell, *Astron. & Astrophys.* **338**, 491.
- Grossman, S. A. et Taam, R. E. 1996, Double-Diffusive Mixing-Length Theory, Semiconvection and Massive Star Evolution, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.* **283**, 1165.
- Guyon, E., Hulin, J. et Petit, L. 1994, *Hydrodynamique physique*, InterEditions/Editions du CNRS.
- Hansen, C. et Kawaler, S. 1993, *Stellar interiors*, Springer Verlag.
- Hashimoto 1998, *Astron. & Astrophys.* **329**, 213.
- Heger, A., Langer, N. et Woosley, S. E. 2000, Presupernova Evolution of Rotating Massive Stars. I. Numerical Method and Evolution of the Internal Stellar Structure, *Astrophysical Journal* **528**, 368.
- Herwig, F., Bloeker, T., Schoenberner, D. et El Eid, M. 1997, Stellar evolution of low and intermediate-mass stars. IV. Hydrodynamically-based overshoot and nucleosynthesis in AGB stars., *Astron. & Astrophys.* **324**, L81.
- Hoëfner, S. 1999, A new generation of dynamic model atmospheres for AGB stars: first results, *Astron. & Astrophys.* **346**, L9.
- Hummer, D. G. et Mihalas, D. 1988, The equation of state for stellar envelopes. I - An occupation probability formalism for the truncation of internal partition functions, *Astrophysical Journal* **331**, 794.
- Irwin, A. W. 1981, Polynomial partition function approximations of 344 atomic and molecular species, *Astrophysical Journal, Supplement* **45**, 621.
- Irwin, A. W. 1987, Refined diatomic partition functions. I - Computational methods and H₂ and CO results, *Astron. & Astrophys.* **182**, 348.
- Itoh, N., Mitake, S., Iyetomi, H. et Ichimaru, S. 1983, Electrical and thermal conductivities of dense matter in the liquid metal phase. I - High-temperature results, *Astrophysical Journal* **273**, 774.
- Izumiura, H., Hashimoto, O., Kawara, K., Yamamura, I. et al. 1996, A detached dust shell surrounding the J-type carbon star Y Canum Venaticorum., *Astron. & Astrophys.* **315**, L221.

- Jackson, J. 1975, *Classical electrodynamics*, Wiley.
- Jaschek, C. et Jaschek, M. 1990, *The classification of stars*, Cambridge university press.
- Jeong, K., Winters, J. et Sedlmayr, E. 1999, Dust formation in oxygen-rich circumstellar shells around long-period variables., dans "*Asymptotic giant branch stars*", *IAU symposium 191*, eds T. Le Bertre, A. Lèbre, C. Waelkens, pp. 233–238.
- Jura, M., Kahane, C. et Omont, A. 1988, Detection of C-13O radio emission from C-13-rich carbon stars, *Astron. & Astrophys.* **201**, 80.
- Kahane, C. 1989, *Observations millimétriques de molécules circumstellaires: de la recherche de nouvelles espèces à la mesure d'abondances isotopiques.*, Thèse de doctorat, université Joseph FOURIER - Grenoble I.
- Kahane, C., Cernicharo, J., Gomez-Gonzalez, J. et Guelin, M. 1992, Isotopic abundances in carbon-rich circumstellar envelopes - A further iteration on the oxygen isotope puzzle, *Astron. & Astrophys.* **256**, 235.
- Kahane, C., Dufour, E., Busso, M., Gallino, R. et al. 2000, "Improved isotopic ratio determinations in IRC+10216, the progenitor mass and the s process", *Astron. & Astrophys.* **357**, 669.
- Kippenhahn, R. 1969, Secularly Unstable Differential Rotation in Stars, *Astron. & Astrophys.* **2**, 309+.
- Kippenhahn, R. 1974, Circulation and mixing, dans *IAU Symposia*, vol. 66, pp. 20+.
- Kippenhahn, R. et Thomas, H. C. 1970, A simple method for the solution of the stellar structure equations including rotation and tidal forces, dans *IAU Colloq. 4: Stellar Rotation*, pp. 20+.
- Kippenhahn, R. et Weigert, A. 1990, *Stellar structure and evolution*, Springer-Verlag.
- Knapp, G. R. et Morris, M. 1985, Mass loss from evolved stars. III - Mass loss rates for fifty stars from CO J = 1-0 observations, *Astrophysical Journal* **292**, 640.
- Knapp, G. R., Phillips, T. G., Leighton, R. B., Lo, K. Y. et al. 1982, Mass loss from evolved stars. I - Observations of 17 stars in the CO/2-1/ line, *Astrophysical Journal* **252**, 616.
- Kramer, C. 1995, Calibration of spectral line data at the 30m IRAM radiotelescope, Rapport technique, IRAM.
- Kurucz, R. L. 1991, New Opacity Calculations, dans *Stellar Atmospheres - Beyond Classical Models*, pp. 441+.
- Kutner, M. L. et Ulich, B. L. 1981, Recommendations for calibration of millimeter-wavelength spectral line data, *Astrophysical Journal* **250**, 341.
- Kwan, J. et Webster, Z. 1993, Circumstellar CO Emission of Evolved Stars and Mass Loss, *Astrophysical Journal* **419**, 674+.
- Lambert, D. L., Gustafsson, B., Eriksson, K. et Hinkle, K. H. 1986, The chemical composition of carbon stars. I - Carbon, nitrogen, and oxygen in 30 cool carbon stars in the Galactic disk, *Astrophysical Journal, Supplement* **62**, 373.
- Lamers, H. et Cassinelli, J. 1999, *Introduction to stellar winds*, Cambridge university press.
- Lang, K. 1999, *Astrophysical formulae, volume 1*, Springer-Verlag.

- Larsen, F. et Olofson, H. 1999, Circumstellar envelopes of carbon stars, dans *poster at "Asymptotic giant branch stars"*, *IAU symposium 191*, eds T. Le Bertre, A. Lèbre, C. Waelkens.
- Lattanzio, J. C. 1998, Nucleosynthesis in Intermediate-Mass Asymptotic Giant Branch stars, *Astro-ph/9810094*.
- Lattanzio, J. C. et Boothroyd, A. I. 1997, Nucleosynthesis of elements in low to intermediate mass stars through the AGB phase, dans *Astrophysical Implications of the Laboratory Study of Presolar Materials*, pp. 85+.
- Le Pourhiet, A. 1988, *Résolution numérique des équations aux dérivées partielles*, CEPADUES éditions.
- Leroy, F. 1999, *Etude de la nucléosynthèse stellaire à la lumière des nouveaux taux de réaction de la compilation NACRE*, Thèse de maîtrise, Université Joseph FOURIER.
- Léna, P. 1996, *Méthodes physiques de l'observation*, Interéditions - CNRS.
- Lodders, K. et Fegley, B. 1999, Condensation chemistry of circumstellar grains, dans *"Asymptotic giant branch stars"*, *IAU symposium 191*, eds T. Le Bertre, A. Lèbre, C. Waelkens, pp. 279–289.
- Loup, C., Forveille, T., Omont, A. et Paul, J. F. 1993, CO and HCN observations of circumstellar envelopes. A catalogue - Mass loss rates and distributions, *Astronomy and Astrophysics, Supplement* **99**, 291.
- Lucas, R. et Guélin, M. 1999, Millimeter wave interferometry of circumstellar envelope, dans *Asymptotic giant branch stars - IAU symposium 191 - T. Le Bertre, A. Lèbre, C. Waelkens eds.*, pp. 305–314.
- Luo, G. 1994, The equation of state in the chemical picture: A grand canonical approach, *Astron. & Astrophys.* **281**, 460.
- Lydon, T. J., Fox, P. A. et Sofia, S. 1992, A formulation of convection for stellar structure and evolution calculations without the mixing-length theory approximations. I - Application to the sun, *Astrophysical Journal* **397**, 701.
- Maeder, A. 1995, On the Richardson criterion for shear instabilities in rotating stars., *Astron. & Astrophys.* **299**, 84+.
- Maeder, A. 1997, Stellar evolution with rotation. II. A new approach for shear mixing., *Astron. & Astrophys.* **321**, 134.
- Magni, G. et Mazzitelli, I. 1979, Thermodynamic properties and equations of state for hydrogen and helium in stellar conditions, *Astron. & Astrophys.* **72**, 134.
- Magro, W., Ceperley, D., Pierleoni, C. et Bernu, B. 1996, *Physical review Lett.* **76**, 1240.
- Mamon, G. A., Glassgold, A. E. et Huggins, P. J. 1988, The photodissociation of CO in circumstellar envelopes, *Astrophysical Journal* **328**, 797.
- Merrill, S. P. W. 1952, Spectroscopic Observations of Stars of Class, *Astrophysical Journal* **116**, 21+.
- Meynet, G. et Maeder, A. 1997, Stellar evolution with rotation. I. The computational method and the inhibiting effect of the μ -gradient., *Astron. & Astrophys.* **321**, 465.
- Mihalas, D. 1970, *Stellar atmospheres*, W. H. Freeman and compagny.
- Mihalas, D., Dappen, W. et Hummer, D. G. 1988, The equation of state for stellar envelopes. II - Algorithm and selected results, *Astrophysical Journal* **331**, 815.

- Miles 1961, *Journal of fluid mechanics* **10**, 496.
- Mitake, S., Ichimaru, S. et Itoh, N. 1984, Electrical and thermal conductivities of dense matter in the liquid metal phase. II - Low-temperature quantum corrections, *Astrophysical Journal* **277**, 375.
- Morel, P., Pichon, B., Provost, J. et Berthomieu, G. 1999, Solar models and NACRE thermonuclear reaction rates, *Astron. & Astrophys.* **350**, 275.
- Mowlavi, N. 1999, On the third dredge-up phenomenon in asymptotic giant branch stars, *Astron. & Astrophys.* **344**, 617.
- Netzer, N. et Elitzur, M. 1993, The dynamics of stellar outflows dominated by interaction of dust and radiation, *Astrophysical Journal* **410**, 701.
- Ohnaka, K. et Tsuji, T. 1996, Quantitative analysis of carbon isotopic ratios in carbon stars. I. 62 N-type and 15 SC-type carbon stars., *Astron. & Astrophys.* **310**, 933.
- Ohnaka, K. et Tsuji, T. 1998, Quantitative analysis of carbon isotopic ratios in carbon stars. II. The effect of model atmosphere on the iso-intensity method, *Astron. & Astrophys.* **335**, 1018.
- Ohnaka, K. et Tsuji, T. 1999, Quantitative analysis of carbon isotopic ratios in carbon stars. III. 26 J-type carbon stars including 5 silicate carbon stars, *Astron. & Astrophys.* **345**, 233.
- Olofsson, H. 1999, The AGB-star phenomenon: setting the stage, dans *Asymptotic giant branch stars - IAU symposium 191 - T. Le Bertre, A. Lèbre, C. Waelkens eds.*, pp. 3–18.
- Olofsson, H., Bergman, P., Eriksson, K. et Gustafsson, B. 1996, Carbon stars with episodic mass loss: observations and models of molecular emission from detached circumstellar shells., *Astron. & Astrophys.* **311**, 587.
- Olofsson, H., Carlstrom, U., Eriksson, K., Gustafsson, B. *et al.* 1990, Bright carbon stars with detached circumstellar envelopes - A natural consequence of helium shell flashes Γ , *Astron. & Astrophys.* **230**, L13.
- Olofsson, H., Eriksson, K., Gustafsson, B. et Carlstroem, U. 1993a, A Study of Circumstellar Envelopes around Bright Carbon Stars. II. Molecular Abundances, *Astrophysical Journal, Supplement* **87**, 305+.
- Olofsson, H., Eriksson, K., Gustafsson, B. et Carlstrom, U. 1993b, A study of circumstellar envelopes around bright carbon stars. I - Structure, kinematics, and mass-loss rate., *Astrophysical Journal, Supplement* **87**, 267.
- Pinsonneault, M. H., Kawaler, S. D., Sofia, S. et Demarque, P. 1989, Evolutionary models of the rotating sun, *Astrophysical Journal* **338**, 424.
- Plez, B. 1992, Spherical opacity sampling model atmospheres for M-giants and supergiants. II - A grid, *Astronomy and Astrophysics, Supplement* **94**, 527.
- Pols, O. R., Tout, C. A., Eggleton, P. P. et Han, Z. 1995, Approximate input physics for stellar modelling, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.* **274**, 964.
- Reimers, D. 1975, *Circumstellar envelopes and mass loss of red giant stars*, pp. 229–256, Problems in Stellar Atmospheres and Envelopes.
- Rogers, F. 1981, *Physical review A* **24**, 1531.
- Rogers, F. 1984, *Physical review A* **29**, 868.
- Rogers, F. et Young, D. 1997, *Physical review E* **56**, 5876.

- Rogers, F. J. 1986, Occupation numbers for reacting plasmas - The role of the Planck-Larkin partition function, *Astrophysical Journal* **310**, 723.
- Rogers, F. J. et Iglesias, C. A. 1992, Rosseland mean opacities for variable compositions, *Astrophysical Journal* **401**, 361.
- Rogers, F.J. et DeWitt, H. 1973, *Physical review A* **8**, 1061.
- Rohlfs, K. et Wilson, T. 1996, *Tools of radioastronomy*, Springer Verlag.
- Rose, W. 1998, *Advanced stellar astrophysics*, Cambridge university press.
- Rutly, B. 1992, *Solutions exactes de l'équation de transfert and applications astrophysiques*, Thèse de doctorat, University Claude BERNARD - Lyon I.
- Rybicki, G. et Hummer, D. 1978, A generalization of the Sobolev method for flows with nonlocal radiative coupling, *Astrophysical Journal* **219**, 654.
- Saumon, D., Chabrier, G. et M., V. H. 1995, An Equation of State for Low-Mass Stars and Giant Planets, *Astrophysical Journal, Supplement* **99**, 713+.
- Saumon, D., Chabrier, G., Wagner, D. J. et Xie, X. 1999, Modelling pressure-ionization of Hydrogen in the context of astrophysics, *astro-ph/9909168* .
- Schaller, G., Schaerer, D., Meynet, G. et Maeder, A. 1992, New grids of stellar models from 0.8 to 120 solar masses at $Z = 0.020$ and $Z = 0.001$, *Astronomy and Astrophysics, Supplement* **96**, 269.
- Schatzman, E. et Praderie, F. 1990, *Les étoiles*, InterEditions/Editions du CNRS.
- Schinke, R., Engel, V., Buck, U., Meyer, H. *et al.* 1985, Rate constants for rotational transitions of CO scattered by para-hydrogen, *Astrophysical Journal* **299**, 939.
- Schöier, F. L. et Olofsson, H. 2000, The $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ -ratio in cool carbon stars, *Astron. & Astrophys.* **359**, 586.
- Siess, L., Forestini, M. et Dougados, C. 1997, Synthetic Hertzsprung-Russell diagrams of open clusters., *Astron. & Astrophys.* **324**, 556.
- Siess, L. et Livio, M. 1997, On the Rotational Evolution of Young Low-Mass Stars, *Astrophysical Journal* **490**, 785+.
- Sivardière, J. 1994, *La symétrie en mathématique, physique and chimie*, PUG - presses universitaires de Grenoble.
- Slattery, W., Doolen, G. et DeWitt, H. 1980, *Physical review A* **21**, 2087.
- Smith, V. V. et Lambert, D. L. 1990, The chemical composition of red giants. III - Further CNO isotopic and s-process abundances in thermally pulsing asymptotic giant branch stars, *Astrophysical Journal, Supplement* **72**, 387.
- Sobolev, V. 1947, *Moving envelopes of stars*, Thèse de doctorat, Leningrad state university.
- Sobolev, V. 1985, *Cours d'astrophysique théorique*, Editions MIR - Moscou.
- Spergel, D. N., Giuliani, J. L., J. et Knapp, G. R. 1983, Mass loss from evolved stars. II - Radio continuum emission and evolution to planetary nebulae, *Astrophysical Journal* **275**, 330.
- Stanek, K. Z., Knapp, G. R., Young, K. et Phillips, T. G. 1995, Maps of the Molecular Emission around 18 Evolved Stars, *Astrophysical Journal, Supplement* **100**, 169+.

- Straniero, O., Chieffi, A., Limongi, M., Busso, M. *et al.* 1997, Evolution and Nucleosynthesis in Low-Mass Asymptotic Giant Branch Stars. I. Formation of Population I Carbon Stars, *Astrophysical Journal* **478**, 332+.
- Straniero, O., Gallino, R., Busso, M., Chieffi, A. *et al.* 1995, Radiative C-13 burning in asymptotic giant branch stars and s-processing, *Astrophysical Journal, Letters* **440**, L85.
- Sweet, P. A. 1950, The importance of rotation in stellar evolution, *Mon. Not. of the Royal Astron. Soc.* **110**, 69,548+.
- Swenson, F. J., Faulkner, J., Rogers, F. J. et Iglesias, C. A. 1994, The Hyades lithium problem revisited, *Astrophysical Journal* **425**, 286.
- Talon, S. et Zahn, J. P. 1997, Anisotropic diffusion and shear instabilities., *Astron. & Astrophys.* **317**, 749.
- Tassoul, J. L. 1978, *Theory of rotating stars*, Princeton Series in Astrophysics, Princeton: University Press, 1978.
- Terrien, J. et Desvignes, F. 1972, *La photométrie*, Presses universitaires de France.
- Townes, C. et Schawlow, A. 1975, *Microwave spectroscopy*, Dover publications INC., New York.
- Ulich, B. L. et Haas, R. W. 1976, Absolute calibration of millimeter-wavelength spectral lines., *Astrophysical Journal, Supplement* **30**, 247.
- Vaglio, P., Gallino, R., Busso, M., Travaglio, C. *et al.* 1999, Circumstellar envelopes of carbon stars, dans in "Nuclei in the Cosmos V", eds. N. Prantzos, S. Harissopulos, Editions Frontières, Paris.
- Van Loon, J. T., Zijlstra, A. A., Whitelock, P. A., Te Lintel Hekkert, P. *et al.* 1998, Obscured Asymptotic Giant Branch stars in the Magellanic Clouds. IV. Carbon stars and OH/IR stars, *Astron. & Astrophys.* **329**, 169.
- Vardya, M. S. 1960, Hydrogen-Helium adiabats for the late-type stars, *Astrophysical Journal, Supplement* **4**, 281+.
- Varshalovich, D. A. et Khersonskii, V. K. 1977, Collisional excitation of interstellar molecules, *Astrophys. Lett.* **18**, 167.
- Vassiliadis, E. et Wood, P. R. 1993, Evolution of low- and intermediate-mass stars to the end of the asymptotic giant branch with mass loss, *Astrophysical Journal* **413**, 641.
- Von Zeipel, H. 1924, Festschrift f. H.V. Seeliger.
- Wallerstein, G., Iben, I., Parker, P., Merchant Boesgaard, A. *et al.* 1997, Synthesis of elements in stars: forty years of progress, *Review of modern physics* **69**, 995.
- Warin, S. 1990, *Observations mill'emitriques du nuage mol'eculaire b5*, Thèse de maîtrise, USTL - Université de Flandre Artois.
- Waters, L. B. F. M., Loup, C., Kester, D. J. M., Bontekoe, T. R. *et al.* 1994, Resolution of a fossil dust shell around U Hydrae using maximum entropy image reconstruction, *Astron. & Astrophys.* **281**, L1.
- Webbink 1975, Thèse de doctorat, university of cambridge.
- Wild, W. 1995, The 30m Manual, Rapport technique, IRAM.
- Wolfire, M. G. et Cassinelli, J. P. 1986, The temperature structure in accretion flows onto massive protostars, *Astrophysical Journal* **310**, 207.

- Wood, P. R. 1981, On the entropy of mixing, with particular reference to its effect on dredge-up during helium shell flashes, *Astrophysical Journal* **248**, 311.
- Wood, P. R. 1990, Mira variables - Pulsation, mass loss and evolution, dans *ASP Conf. Ser. 11: Confrontation Between Stellar Pulsation and Evolution*, pp. 355–363.
- Zahn, J. P. 1974, Rotational instabilities and stellar evolution, dans *IAU Symposia*, vol. 59, pp. 185–194.
- Zahn, J. P. 1975, The dynamical tide in close binaries, *Astron. & Astrophys.* **41**, 329.
- Zahn, J. P. 1992, Circulation and turbulence in rotating stars, *Astron. & Astrophys.* **265**, 115.
- Zuckerman, B. 1980, Envelopes around late-type giant stars, *Annual Review of Astron and Astrophys* **18**, 263.
- Zuckerman, B. et Dyck, H. M. 1986, "Dust grains and gas in the circumstellar envelopes around luminous red giant stars", *Astrophysical Journal* **311**, 345.

Annexes

Annexe A

Résumé de quelques caractéristiques des étoiles selon leurs masses

La structure et l'évolution des étoiles sont caractérisées par la donnée de quelques grandeurs (luminosité, température, masse volumique...). Les relations entre ces grandeurs fondamentales sont paramétrées par deux valeurs omniprésentes: la masse et la composition chimique initiales de l'étoile. Une manière de le vérifier est d'écrire les relations qui gouvernent l'évolution d'une étoile (voir chapitre 1) dans des cas simples et en ordre de grandeur, uniquement pour estimer les dépendances. On s'aperçoit alors par exemple, à partir de l'équation de conservation de la masse et de l'équation d'état d'un gaz parfait, que l'on a:

$$\bar{T} = \bar{\mu} \bar{R}^{11} \bar{M} \quad (\text{A.1})$$

Avec la définition suivante:

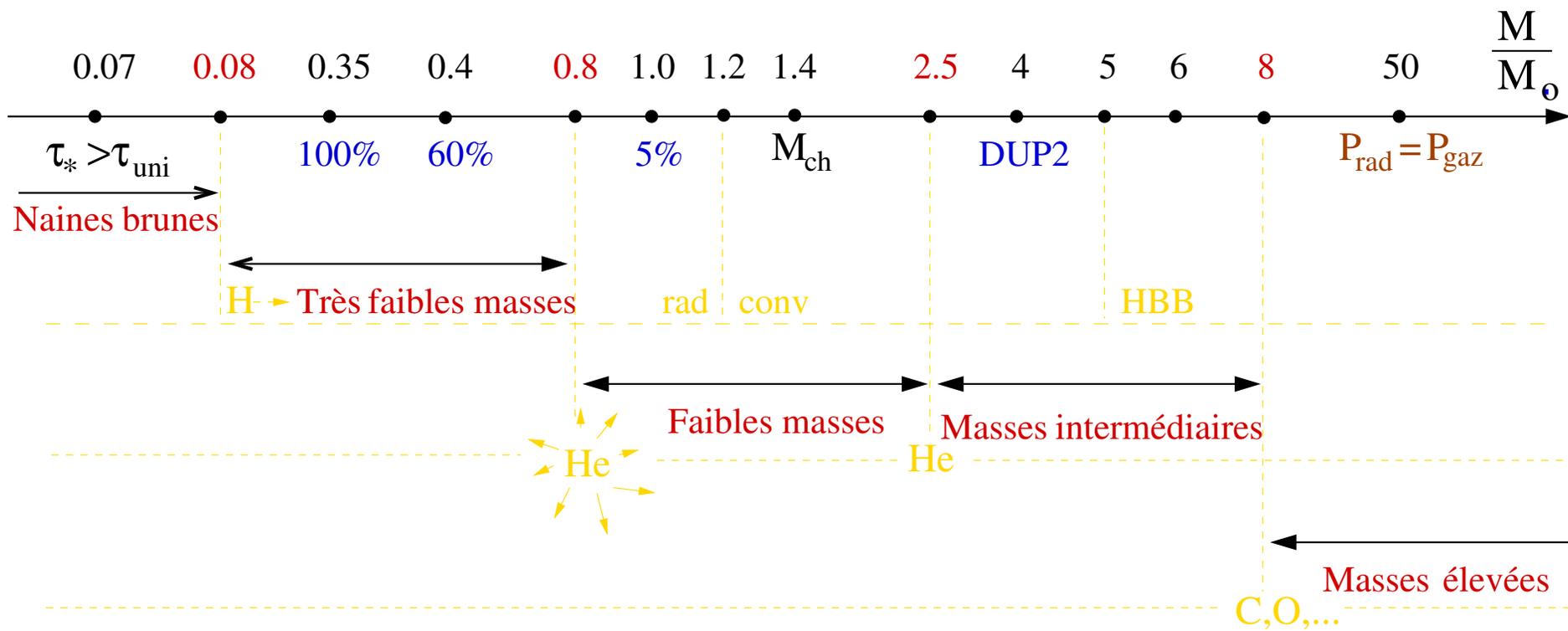
$$\bar{X} = \frac{X}{X_{\odot}} \quad (\text{A.2})$$

la quantité indicée “ \odot ” se référant à la valeur solaire de X . C'est ainsi que la plupart des caractéristiques d'une étoile tout au long de son évolution seront déterminées par sa masse. Par conséquent, il est important d'avoir quelques repères dans ce domaine-là.

La figure A.1 donne quelques caractéristiques des étoiles suivant leur masse initiales, qui sont utilisées tout au long de cette thèse. On trouve, en rouge, des valeurs *indicatives* délimitant des catégories d'étoiles en masse possédant par conséquent certaines similarités. En particulier, les étoiles d'une même catégorie vont subir les mêmes étapes de brûlage nucléaire:

- les *naines brunes*, notées pour mémoire, ne produisent pas d'énergie par fusion nucléaire à cause de leur masse trop faible.
- les étoiles de *très faible masse* sont celles qui sont suffisamment massives pour que la température atteinte en leur sein permette le brûlage de l'Hydrogène, mais pas celui de l'Hélium. Ceci est représenté sur la première ligne pointillée jaune. On a portée aussi sur cette ligne la masse à partir de laquelle le brûlage central de l'Hydrogène est convectif. Ces étoiles termineront leur existence comme naine blanche à Hélium.

FIG. A.1 – Repères stellaires en masses (voir les commentaires dans le texte).



- les étoiles de *faible masse* brûlent l’Hydrogène mais aussi l’Hélium au centre avec une particularité due à leur “faible masse”. Le début de la combustion de l’Hélium s’effectue dans un milieu dégénéré qui réagit très fortement à la libération d’énergie nucléaire produite. La combustion est “explosive”: elle donne lieu, entre autres, à une très forte montée de la luminosité de l’étoile (jusqu’à $10^{11} L_{\odot}$ dans certains cas) avec des temps caractéristiques d’évolution très courts (quelques dizaines de secondes!). Ces étoiles finiront leur existence comme naine blanche de Carbone et d’Oxygène.
- les étoiles de *masse intermédiaire* subissent les mêmes phases de brûlage mais le milieu d’allumage de l’Hélium n’est plus dégénéré. Ces étoiles, tout comme celles de la catégorie précédente, n’effectuent pas le brûlage central des éléments plus lourds que l’Hélium.
- les étoiles de *masse élevée*, par contre, se définissent comme celles qui vont allumer les réactions de brûlage du Carbone, de l’Oxygène...

Par ailleurs, en bleu, le pourcentage indiqué quantifie la fraction de masse représentée par l’enveloppe convective pendant le brûlage central de l’Hydrogène. Enfin, on signale la masse approximative pour laquelle la pression des photons devient égale à la pression du gaz parfait d’ions (en marron) et deux “masses limites”: M_{ch} , qui est la masse maximum pour une naine blanche (étoile dont les électrons sont complètement dégénérés) et $0.07 M_{\odot}$, masse d’un astre dont le temps caractéristique d’évolution est supérieur à celui de l’Univers. Les limites en masse marquées “DUP2” et “HBB” indiquent les masses minimales à partir desquelles les étoiles subissent respectivement un deuxième dredge-up et le Hot Bottom Burning (voir la partie I).

Annexe B

La théorie de la longueur de mélange

Le but de cette annexe est de donner une vue générale de la théorie de la longueur de mélange (MLT): ses hypothèses simplificatrices et les équations à résoudre.

B.1 Hypothèses simplificatrices de la "MLT"

Dans tout ce qui suit, un indice "int" désignera une quantité *interne* aux globules convectifs alors qu'un indice "ext" se réfèrera au milieu *extérieur* au globule. Par définition, l'indice "ext" sera remplacé par "conv" pour le gradient de température.

- Il existe des fluctuations de température ou de masse volumique de faibles amplitudes: $\frac{T_{ext} \pm T_{int}}{T_{ext}} \ll 1$ et $\frac{\rho_{ext} \pm \rho_{int}}{\rho_{ext}} \ll 1$
- Le mouvement du globule est sous-sonique, $v < v_s$, si bien que l'équilibre mécanique a le temps d'être atteint tout au long du déplacement du globule: $P_{ext} = P_{int}$.
- Les globules sont supposés être constitués de gaz parfait de façon à pouvoir appliquer $P = \frac{\rho RT}{\mu}$. On en déduit notamment le rapport entre les fluctuations de température et de masse volumique: $d \ln \rho = Q d \ln T$.
- La distribution en vitesse des globules est un pic de Dirac.
- La bulle convective se forme, évolue et se désagrège sur une distance Λ , la longueur de mélange.
- La distance caractéristique de variation du champ de gravité est très supérieure à Λ si bien que $g = \text{constante}$ pendant le mouvement du globule.
- Aucune réactions nucléaires ne se produisent dans les globules.
- Les globules sont supposés avoir tous la même forme. La plus simple supposition est la sphère, de diamètre Λ .
- La distribution des globules est telle que la distance moyenne parcourue par un globule est $\Lambda/2$ partout dans la zone convective.
- La moitié du travail de la force d'Archimède est convertie en énergie cinétique.
- Les globules peuvent ensuite
 - (1) soit avoir un temps caractéristique de déplacement supérieur au temps d'ajustement thermique, au quel cas, le mouvement est adiabatique jusqu'à ce que le globule relâche

son énergie à la désagrégation.

(2) Soit le globule rayonne un peu d'énergie (les "pertes" radiatives) et dans ce cas, il est considéré comme optiquement épais pour pouvoir faire l'approximation de diffusion.

B.2 Equations et inconnues

Les inconnues de la MLT sont respectivement: $F_{rad}, F_{conv}, v_{conv}, \nabla_{conv}$ et ∇_{int} , c'est-à-dire le flux évacué par radiation, le flux évacué par convection, la vitesse moyenne des globules convectifs, le gradient de température correspondant à la fraction de flux transportée radiativement et le gradient de température au sein des globules.

Cinq équations sont donc nécessaires pour contraindre les variables décrivant le transport de la chaleur couplé par radiation et convection. On utilise la définition de la hauteur caractéristique de pression, $H_P \stackrel{def}{=} \perp \frac{dr}{d \ln P}$ pour réécrire la loi de Fourier, issue de 1.15, $J_{rad} = \lambda_{rad} \frac{dT}{dr}$ sous la forme

$$J_{rad} = \lambda_{rad} \frac{T}{H_P} \nabla \quad (\text{B.1})$$

Le coefficient de conductivité thermique vaut:

$$\lambda = \frac{16\sigma T^3}{3\kappa\rho} \quad (\text{B.2})$$

Les cinq équations sont alors:

– la définition du flux total:

$$F_{tot} = F_{rad} + F_{conv} \quad (\text{B.3})$$

$$\text{avec } \nabla_{rad} \stackrel{def}{=} \frac{F_{tot} H_P}{\lambda_{rad} T} \quad (\text{B.4})$$

– la définition de ∇_{conv} :

$$\nabla_{conv} \stackrel{def}{=} \frac{F_{rad} H_P}{\lambda_{rad} T} \quad (\text{B.5})$$

– l'expression de la vitesse convective, issue de l'égalité de l'énergie cinétique et du travail de la force résultante (somme de la gravité et des forces de surface), $\perp g(\rho_{ext} \perp \rho_{int})$, s'exerçant sur chaque globule.

$$v_{conv}^2 = \frac{gQl^2}{8H_P} (\nabla_{conv} \perp \nabla_{int}) \quad (\text{B.6})$$

– l'expression physique du flux convectif comme le produit de la quantité de matière transporté et de la chaleur qu'elle emporte.

$$F_{conv} = \rho v_{conv} c_P \Delta T \quad (\text{B.7})$$

$$\text{avec } \Delta T = \frac{l}{2} (\nabla_{conv} \perp \nabla_{int}) \frac{T}{H_P} \quad (\text{B.8})$$

– l'expression des pertes d'énergie radiatives par les globules:

$$\Gamma \stackrel{def}{=} \frac{\text{énergie transportée}}{\text{énergie perdue}} = \frac{\nabla_{conv} \perp \nabla_{int}}{\nabla_{int} \perp \nabla_{ad}} \quad (\text{B.9})$$

$$\text{et } \Gamma = \frac{\rho c_P \Delta T V}{J_{rad} S \tau} = \frac{vl}{6K} \quad (\text{B.10})$$

où V , S et τ sont respectivement les volume, surface et temps de vie du globule convectif. K est la diffusivité thermique, définie par $K \stackrel{def}{=} \frac{\lambda}{\rho c_P}$ où λ est donnée par B.2. Γ est appelé efficacité du transport d'énergie par la convection.

B.3 Solution

En adimensionnant le système d'équation grâce à U et S , et en les combinant, on obtient l'équation du troisième degré à résoudre en ζ :

$$(\zeta \pm U)^3 + \frac{8U}{9}(\zeta^2 \pm U^2 \pm S) = 0 \quad (\text{B.11})$$

$$U = \frac{12\sigma T^3}{c_p \kappa \rho^2 \Lambda^2} \sqrt{\frac{8H_P}{Qg}} \quad (\text{B.12})$$

$$S = \nabla_{rad} \pm \nabla_{ad} \quad (\text{B.13})$$

$$avec \quad \nabla_{conv} = \nabla_{ad} \pm U^2 + \zeta^2 \quad (\text{B.14})$$

La solution globale est alors:

$$\zeta^2 = 1 + x + x^2 \quad x = a \frac{U}{W} \quad (\text{B.15})$$

$$avec \quad W = \left(A + \sqrt{D}\right)^{\frac{1}{2}} \quad et \quad a = \frac{19}{27} \quad (\text{B.16})$$

$$et \quad A = U \left[\frac{4}{9}S + \left(a^2 \pm \frac{1}{9}\right)U^2 \right] \quad (\text{B.17})$$

$$D = A^2 + (aU)^4 \quad (\text{B.18})$$

Trois méthodes de résolution de l'équation B.11 sont utilisées dans le code pour obtenir ζ et ses dérivées. Celle de Kippenhahn (Kippenhahn & Weigert 1990), une résolution analytique reposant sur les formules de Cardan et une résolution numérique itérative du type Newton-Raphson .

Annexe C

Espèces et réactions nucléaires dans le code

C.1 Espèces nucléaires suivies dans STAREVOL

Eléments suivis dans STAREVOL				
Numéro <i>i</i>	Nom <i>X</i>	Masse atomique A_x	Numéro atomique Z_x	Abondance Solaire fraction massique
1	neutr	1.00000	0.	1.00000D-50
2	proto	1.00000	1.	7.10847D-01
3	deutr	2.00000	1.	4.83392D-05
4	He 3	3.00000	2.	2.88999D-05
5	He 4	4.00000	2.	2.71513D-01
6	Li 6	6.00000	3.	6.52992D-10
7	Li 7	7.00000	3.	9.39820D-09
8	Be 7	7.00000	4.	1.00000D-50
9	B 8	8.00000	5.	1.00000D-50
10	Be 9	9.00000	4.	1.68282D-10
11	B 10	10.00000	5.	1.07241D-09
12	B 11	11.00000	5.	4.75218D-09
13	C 11	11.00000	6.	1.00000D-50
14	C 12	12.00000	6.	2.99350D-03
15	C 13	13.00000	6.	3.60329D-05
16	N 13	13.00000	7.	1.00000D-50
17	C 14	14.00000	6.	1.00000D-50
18	N 14	14.00000	7.	9.25395D-04
19	N 15	15.00000	7.	3.65459D-06
20	O 15	15.00000	8.	1.00000D-50
21	O 16	16.00000	8.	8.41163D-03
22	O 17	17.00000	8.	3.40879D-06
23	O 18	18.00000	8.	1.90065D-05
24	F 18	18.00000	9.	1.00000D-50

A suivre ...

Numéro <i>i</i>	Nom <i>X</i>	Masse atomique A_x	Numéro atomique Z_x	Abondance Solaire fraction massique
25	F 19	19.00000	9.	4.07897D-07
26	Ne 20	20.00000	10.	1.58926D-03
27	Ne 21	21.00000	10.	4.05194D-06
28	Ne 22	22.00000	10.	1.27837D-04
29	Na 22	22.00000	11.	1.00000D-50
30	Na 23	23.00000	11.	3.33829D-05
31	Mg 24	24.00000	12.	5.12630D-04
32	Mg 25	25.00000	12.	6.73785D-05
33	Mg 26	26.00000	12.	7.72774D-05
34	Al26m	26.00000	13.	1.00000D-50
35	Al26g	26.00000	13.	1.00000D-50
36	Al 27	27.00000	13.	5.79643D-05
37	Si 28	28.00000	14.	6.51352D-04
38	Si 29	29.00000	14.	3.41697D-05
39	Si 30	30.00000	14.	2.34644D-05
40	Si 31	31.00000	14.	1.00000D-50
41	P 31	31.00000	15.	8.18763D-06
42	Si 32	32.00000	14.	1.00000D-50
43	P 32	32.00000	15.	1.00000D-50
44	S 32	32.00000	16.	4.02469D-04
45	P 33	33.00000	15.	1.00000D-50
46	S 33	33.00000	16.	3.27625D-06
47	S 34	34.00000	16.	1.89763D-05
48	S 35	35.00000	16.	1.00000D-50
49	Cl 35	35.00000	17.	3.51191D-06
50	S 36	36.00000	16.	9.53556D-08
51	Cl 36	36.00000	17.	1.00000D-50
52	Cl 37	37.00000	17.	1.18517D-06
53	heavy	38.00000	17.	1.55348D-03
54	captn	39.00000	17.	1.00000D-50
55	gamma	999.99999	99.	1.00000D-50

Fin.

Pour la signification de l'élément "heavy", se reporter au chapitre 1.

C.2 Le réseau de réactions nucléaires utilisé dans STAREVOL

Réactions du réseau nucléaire dans STAREVOL			
Numéro	Réaction $X(a, b)Y$	Energie libérée (MeV) $Q_{X(a,b)Y}$	Référence
1	$2 \text{ p } (0 \gamma, 0 \nu) 1 \text{ } ^2\text{H}$	1.442	nacre
2	$1 \text{ } ^2\text{H } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^3\text{He}$	5.494	nacre
3	$2 \text{ } ^2\text{H } (0 \gamma, 0 \gamma) 1 \text{ } ^4\text{He}$	23.847	nacre
4	$2 \text{ } ^2\text{H } (0 \gamma, 1 \text{ n}) 1 \text{ } ^3\text{He}$	3.269	nacre
5	$1 \text{ } ^3\text{He } (1 \text{ } ^2\text{H}, 1 \text{ p}) 1 \text{ } ^4\text{He}$	18.353	cf88
6	$2 \text{ } ^3\text{He } (0 \gamma, 2 \text{ p}) 1 \text{ } ^4\text{He}$	12.860	nacre
7	$1 \text{ } ^4\text{He } (1 \text{ } ^2\text{H}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^6\text{Li}$	1.475	nacre
8	$1 \text{ } ^4\text{He } (1 \text{ } ^3\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^7\text{Be}$	1.588	nacre
9	$3 \text{ } ^4\text{He } (0 \gamma, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{12}\text{C}$	7.275	nacre
10	$1 \text{ } ^6\text{Li } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^7\text{Be}$	5.606	nacre
11	$1 \text{ } ^6\text{Li } (1 \text{ p}, 1 \text{ } ^3\text{He}) 1 \text{ } ^4\text{He}$	4.018	nacre
12	$1 \text{ } ^7\text{Li } (1 \text{ p}, 1 \text{ } ^4\text{He}) 1 \text{ } ^4\text{He}$	17.346	nacre
13	$1 \text{ } ^7\text{Li } (1 \text{ } ^2\text{H}, 1 \text{ n}) 2 \text{ } ^4\text{He}$	15.122	cf88
14	$1 \text{ } ^7\text{Be } (0 \beta^+, 0 \nu) 1 \text{ } ^7\text{Li}$	0.862	cf88
15	$1 \text{ } ^7\text{Be } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^8\text{B}$	0.138	nacre
16	$1 \text{ } ^7\text{Be } (1 \text{ } ^2\text{H}, 1 \text{ p}) 2 \text{ } ^4\text{He}$	16.766	cf88
17	$1 \text{ } ^8\text{B } (0 \beta^+, 0 \nu) 2 \text{ } ^4\text{He}$	18.071	table
18	$1 \text{ } ^9\text{Be } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{10}\text{B}$	6.586	nacre
19	$1 \text{ } ^9\text{Be } (1 \text{ p}, 1 \text{ } ^2\text{H}) 2 \text{ } ^4\text{He}$	0.651	nacre
20	$1 \text{ } ^9\text{Be } (1 \text{ p}, 1 \text{ } ^4\text{He}) 1 \text{ } ^6\text{Li}$	2.126	nacre
21	$1 \text{ } ^{10}\text{B } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{11}\text{C}$	8.690	nacre
22	$1 \text{ } ^{10}\text{B } (1 \text{ p}, 1 \text{ } ^4\text{He}) 1 \text{ } ^7\text{Be}$	1.146	nacre
23	$1 \text{ } ^{11}\text{B } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{12}\text{C}$	15.957	nacre
24	$1 \text{ } ^{11}\text{B } (1 \text{ p}, 1 \text{ } ^4\text{He}) 2 \text{ } ^4\text{He}$	8.682	nacre
25	$1 \text{ } ^{11}\text{B } (1 \text{ } ^4\text{He}, 1 \text{ p}) 1 \text{ C } 14$	0.784	cf88
26	$1 \text{ } ^{11}\text{C } (0 \beta^+, 0 \nu) 1 \text{ } ^{11}\text{B}$	1.982	table
27	$1 \text{ } ^{11}\text{C } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{12}\text{C}$	17.939	db90
28	$1 \text{ } ^{12}\text{C } (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{13}\text{C}$	4.946	oni94
29	$1 \text{ } ^{12}\text{C } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{13}\text{N}$	1.944	nacre
30	$1 \text{ } ^{12}\text{C } (1 \text{ } ^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{16}\text{O}$	7.162	nacre
31	$2 \text{ } ^{12}\text{C } (0 \gamma, 1 \text{ } ^4\text{He}) 1 \text{ } ^{20}\text{Ne}$	4.623	cf88
32	$2 \text{ } ^{12}\text{C } (0 \gamma, 1 \text{ p}) 1 \text{ } ^{23}\text{Na}$	2.243	cf88
33	$1 \text{ } ^{13}\text{C } (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{14}\text{C}$	8.177	rid90
34	$1 \text{ } ^{13}\text{C } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{14}\text{N}$	7.551	nacre
35	$1 \text{ } ^{13}\text{C } (1 \text{ } ^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ } ^{16}\text{O}$	2.216	nacre
36	$1 \text{ } ^{13}\text{N } (0 \beta^+, 0 \nu) 1 \text{ } ^{13}\text{C}$	2.220	table
37	$1 \text{ } ^{13}\text{N } (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ } ^{13}\text{C}$	3.003	nacre
38	$1 \text{ } ^{13}\text{N } (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{14}\text{N}$	9.771	nacre
39	$1 \text{ } ^{14}\text{C } (0 \beta^-, 0 \nu) 1 \text{ } ^{14}\text{N}$	0.157	table

A suivre ...

Numéro	Réaction $X(a, b)Y$	Energie libérée (MeV) $Q_{X(a,b)Y}$	Référence
40	$1 \text{ }^{14}\text{C} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{15}\text{N}$	10.990	bwk91
41	$1 \text{ }^{14}\text{C} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{15}\text{N}$	10.207	wgt90
42	$1 \text{ }^{14}\text{C} (1 \text{ p}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{14}\text{N}$	-0.626	cf88
43	$1 \text{ }^{14}\text{C} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{11}\text{B}$	-0.784	cf88
44	$1 \text{ }^{14}\text{C} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{17}\text{O}$	-1.817	fcz67
45	$1 \text{ }^{14}\text{C} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{18}\text{O}$	6.227	fl89
46	$1 \text{ }^{14}\text{N} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{15}\text{N}$	10.833	fcz67
47	$1 \text{ }^{14}\text{N} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{14}\text{C}$	0.626	bbr88
48	$1 \text{ }^{14}\text{N} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{15}\text{O}$	7.297	nacre
49	$1 \text{ }^{14}\text{N} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{18}\text{F}$	4.415	nacre
50	$1 \text{ }^{15}\text{N} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{16}\text{O}$	12.910	fcz67
51	$1 \text{ }^{15}\text{N} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{12}\text{C}$	4.966	nacre
52	$1 \text{ }^{15}\text{N} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{16}\text{O}$	12.128	nacre
53	$1 \text{ }^{15}\text{N} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{19}\text{F}$	4.014	nacre
54	$1 \text{ }^{15}\text{O} (0 \beta^+, 0 \nu) 1 \text{ }^{15}\text{N}$	2.754	table
55	$1 \text{ }^{15}\text{O} (1 \text{ n}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{12}\text{C}$	8.502	cf88
56	$1 \text{ }^{15}\text{O} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{15}\text{N}$	3.536	nacre
57	$1 \text{ }^{16}\text{O} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{17}\text{O}$	4.143	amg71
58	$1 \text{ }^{16}\text{O} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{17}\text{O}$	3.361	nacre
59	$1 \text{ }^{16}\text{O} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{20}\text{Ne}$	4.736	nacre
60	$1 \text{ }^{17}\text{O} (1 \text{ n}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{14}\text{C}$	1.817	skk93
61	$1 \text{ }^{17}\text{O} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{18}\text{O}$	8.044	w69
62	$1 \text{ }^{17}\text{O} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{18}\text{F}$	5.607	nacre
63	$1 \text{ }^{17}\text{O} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{14}\text{N}$	1.192	nacre
64	$1 \text{ }^{17}\text{O} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{20}\text{Ne}$	0.592	nacre
65	$1 \text{ }^{17}\text{O} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{21}\text{Ne}$	7.353	cf88
66	$1 \text{ }^{18}\text{O} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{19}\text{F}$	8.777	rac94
67	$1 \text{ }^{18}\text{O} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{19}\text{F}$	7.994	nacre
68	$1 \text{ }^{18}\text{O} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{15}\text{N}$	3.980	nacre
69	$1 \text{ }^{18}\text{O} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{22}\text{Ne}$	9.670	nacre
70	$1 \text{ }^{18}\text{O} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{21}\text{Ne}$	-0.691	nacre
71	$1 \text{ }^{18}\text{F} (0 \beta^+, 0 \nu) 1 \text{ }^{18}\text{O}$	1.656	table
72	$1 \text{ }^{18}\text{F} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{18}\text{O}$	2.438	hfesh
73	$1 \text{ }^{18}\text{F} (1 \text{ n}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{15}\text{N}$	6.418	hfesh
74	$1 \text{ }^{19}\text{F} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{20}\text{Ne}$	13.632	bk87
75	$1 \text{ }^{19}\text{F} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{20}\text{Ne}$	12.849	nacre
76	$1 \text{ }^{19}\text{F} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{16}\text{O}$	8.114	nacre
77	$1 \text{ }^{19}\text{F} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{22}\text{Ne}$	1.676	cf88
78	$1 \text{ }^{20}\text{Ne} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{21}\text{Ne}$	6.761	bvw91
79	$1 \text{ }^{20}\text{Ne} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{21}\text{Ne}$	5.979	nacre

A suivre ...

Numéro	Réaction $X(a, b)Y$	Energie libérée (MeV) $Q_{X(a,b)Y}$	Référence
80	$1 \text{ }^{20}\text{Ne} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{24}\text{Mg}$	9.311	nacre
81	$1 \text{ }^{20}\text{Ne} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{23}\text{Na}$	-2.380	nacre
82	$1 \text{ }^{21}\text{Ne} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{22}\text{Ne}$	10.361	bk87
83	$1 \text{ }^{21}\text{Ne} (1 \text{ n}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{18}\text{O}$	0.691	cf88
84	$1 \text{ }^{21}\text{Ne} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{22}\text{Na}$	6.737	nacre
85	$1 \text{ }^{21}\text{Ne} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{25}\text{Mg}$	9.880	cf88
86	$1 \text{ }^{21}\text{Ne} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{24}\text{Mg}$	2.550	nacre
87	$1 \text{ }^{22}\text{Ne} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{23}\text{Na}$	9.577	bvw91
88	$1 \text{ }^{22}\text{Ne} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{23}\text{Na}$	8.794	nacre
89	$1 \text{ }^{22}\text{Ne} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{25}\text{Mg}$	-0.481	nacre
90	$1 \text{ }^{22}\text{Ne} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{26}\text{Mg}$	10.612	nacre
91	$1 \text{ }^{22}\text{Na} (0 \beta^+, 0 \nu) 1 \text{ }^{22}\text{Ne}$	2.842	table
92	$1 \text{ }^{22}\text{Na} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{23}\text{Na}$	12.418	wfh78
93	$1 \text{ }^{22}\text{Na} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{22}\text{Ne}$	3.624	cf88
94	$1 \text{ }^{22}\text{Na} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{23}\text{Na}$	11.636	nacre
95	$1 \text{ }^{23}\text{Na} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{24}\text{Mg}$	12.473	bvw91
96	$1 \text{ }^{23}\text{Na} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{20}\text{Ne}$	2.380	nacre
97	$1 \text{ }^{23}\text{Na} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{24}\text{Mg}$	11.690	nacre
98	$1 \text{ }^{23}\text{Na} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{26}\text{Mg}$	1.818	wfh78
99	$1 \text{ }^{24}\text{Mg} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{25}\text{Mg}$	7.331	bvw91
100	$1 \text{ }^{24}\text{Mg} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{25}\text{Mg}$	6.548	nacre
101	$1 \text{ }^{24}\text{Mg} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{27}\text{Al}$	-1.600	nacre
102	$1 \text{ }^{24}\text{Mg} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{28}\text{Si}$	9.984	cf88
103	$1 \text{ }^{25}\text{Mg} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{26}\text{Mg}$	11.093	bvw91
104	$1 \text{ }^{25}\text{Mg} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{26\text{m}}\text{Al}$	6.078	nacre
105	$1 \text{ }^{25}\text{Mg} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{26\text{g}}\text{Al}$	6.307	nacre
106	$1 \text{ }^{25}\text{Mg} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{28}\text{Si}$	3.429	hfesh
107	$1 \text{ }^{25}\text{Mg} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{28}\text{Si}$	2.654	nacre
108	$1 \text{ }^{25}\text{Mg} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{29}\text{Si}$	11.127	hfesh
109	$1 \text{ }^{26}\text{Mg} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{27}\text{Al}$	9.054	bvw91
110	$1 \text{ }^{26}\text{Mg} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{27}\text{Al}$	8.272	nacre
111	$1 \text{ }^{26}\text{Mg} (1 \text{ }^4\text{He}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{30}\text{Si}$	10.644	hfesh
112	$1 \text{ }^{26}\text{Mg} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{29}\text{Si}$	0.817	hfesh
113	$1 \text{ }^{26}\text{Mg} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{29}\text{Si}$	0.035	nacre
114	$1 \text{ }^{26\text{m}}\text{Al} (0 \beta^+, 0 \nu) 1 \text{ }^{26}\text{Mg}$	4.232	table
115	$1 \text{ }^{26\text{m}}\text{Al} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{26}\text{Mg}$	5.014	cf88
116	$1 \text{ }^{26\text{m}}\text{Al} (1 \text{ n}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{23}\text{Na}$	3.197	nacre
117	$1 \text{ }^{26\text{m}}\text{Al} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{27}\text{Al}$	13.286	wfh78
118	$1 \text{ }^{26\text{m}}\text{Al} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{27}\text{Al}$	12.504	nacre
119	$1 \text{ }^{26\text{g}}\text{Al} (0 \beta^+, 0 \nu) 1 \text{ }^{26}\text{Mg}$	4.004	table

A suivre ...

Numéro	Réaction $X(a, b)Y$	Energie libérée (MeV) $Q_{X(a,b)Y}$	Référence
120	$1 \text{ }^{26g}\text{Al} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{27}\text{Al}$	13.058	wfh78
121	$1 \text{ }^{26g}\text{Al} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{26}\text{Mg}$	4.786	cf88
122	$1 \text{ }^{26g}\text{Al} (1 \text{ n}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{23}\text{Na}$	2.968	nacre
123	$1 \text{ }^{26g}\text{Al} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{27}\text{Al}$	12.276	nacre
124	$1 \text{ }^{26g}\text{Al} (0 \gamma, 0 \gamma) 1 \text{ }^{26m}\text{Al}$	-0.228	vol89
125	$1 \text{ }^{27}\text{Al} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{28}\text{Si}$	11.585	nacre
126	$1 \text{ }^{27}\text{Al} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{24}\text{Mg}$	1.600	nacre
127	$1 \text{ }^{27}\text{Al} (1 \text{ }^4\text{He}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{30}\text{Si}$	-2.636	nacre
128	$1 \text{ }^{28}\text{Si} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{29}\text{Si}$	8.473	hfesh
129	$1 \text{ }^{28}\text{Si} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{29}\text{Si}$	7.692	nacre
130	$1 \text{ }^{29}\text{Si} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{30}\text{Si}$	10.609	hfesh
131	$1 \text{ }^{29}\text{Si} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{30}\text{Si}$	9.827	nacre
132	$1 \text{ }^{30}\text{Si} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{31}\text{Si}$	6.587	hfesh
133	$1 \text{ }^{30}\text{Si} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{31}\text{P}$	7.297	nacre
134	$1 \text{ }^{31}\text{Si} (0 \beta^-, 0 \nu) 1 \text{ }^{31}\text{P}$	1.480	table
135	$1 \text{ }^{31}\text{Si} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{32}\text{Si}$	9.203	hfesh
136	$1 \text{ }^{31}\text{Si} (1 \text{ p}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{31}\text{P}$	0.710	hfesh
137	$1 \text{ }^{31}\text{Si} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{32}\text{P}$	8.645	hfesh
138	$1 \text{ }^{31}\text{P} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{31}\text{Si}$	-0.710	hfesh
139	$1 \text{ }^{31}\text{P} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{32}\text{P}$	7.935	hfesh
140	$1 \text{ }^{31}\text{P} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{28}\text{Si}$	1.916	hfesh
141	$1 \text{ }^{31}\text{P} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{32}\text{S}$	8.864	hfesh
142	$1 \text{ }^{32}\text{Si} (0 \beta^-, 0 \nu) 1 \text{ }^{32}\text{P}$	0.210	table
143	$1 \text{ }^{32}\text{Si} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{33}\text{P}$	10.327	hfesh
144	$1 \text{ }^{32}\text{Si} (1 \text{ p}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{32}\text{P}$	-0.558	hfesh
145	$1 \text{ }^{32}\text{Si} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{33}\text{P}$	9.546	hfesh
146	$1 \text{ }^{32}\text{P} (0 \beta^-, 0 \nu) 1 \text{ }^{32}\text{S}$	1.710	table
147	$1 \text{ }^{32}\text{P} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{33}\text{P}$	10.104	hfesh
148	$1 \text{ }^{32}\text{P} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{32}\text{Si}$	0.558	hfesh
149	$1 \text{ }^{32}\text{P} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{33}\text{S}$	9.570	hfesh
150	$1 \text{ }^{32}\text{P} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{29}\text{Si}$	2.454	hfesh
151	$1 \text{ }^{32}\text{P} (1 \text{ p}, 1 \text{ n}) 1 \text{ }^{32}\text{S}$	0.929	hfesh
152	$1 \text{ }^{32}\text{S} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ }^{32}\text{P}$	-0.929	hfesh
153	$1 \text{ }^{32}\text{S} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{33}\text{S}$	8.641	hfesh
154	$1 \text{ }^{32}\text{S} (1 \text{ n}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{29}\text{Si}$	1.525	hfesh
155	$1 \text{ }^{32}\text{S} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{33}\text{S}$	7.860	hfesh
156	$1 \text{ }^{33}\text{P} (0 \beta^-, 0 \nu) 1 \text{ }^{33}\text{S}$	0.248	table
157	$1 \text{ }^{33}\text{P} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{34}\text{S}$	11.665	hfesh
158	$1 \text{ }^{33}\text{P} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ }^{34}\text{S}$	10.883	hfesh
159	$1 \text{ }^{33}\text{P} (1 \text{ p}, 1 \text{ }^4\text{He}) 1 \text{ }^{30}\text{Si}$	2.959	hfesh

A suivre ...

Numéro	Réaction $X(a, b)Y$	Energie libérée (MeV) $Q_{X(a,b)Y}$	Référence
160	$1 \text{ } ^{33}\text{P} (1 \text{ p}, 1 \text{ n}) 1 \text{ } ^{33}\text{S}$	-0.534	hfesh
161	$1 \text{ } ^{33}\text{S} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{34}\text{S}$	11.417	hfesh
162	$1 \text{ } ^{33}\text{S} (1 \text{ n}, 1 \text{ } ^4\text{He}) 1 \text{ } ^{30}\text{Si}$	3.493	hfesh
163	$1 \text{ } ^{33}\text{S} (1 \text{ n}, 1 \text{ p}) 1 \text{ } ^{33}\text{P}$	0.534	hfesh
164	$1 \text{ } ^{33}\text{S} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{34}\text{S}$	10.636	hfesh
165	$1 \text{ } ^{34}\text{S} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{35}\text{S}$	6.985	hfesh
166	$1 \text{ } ^{34}\text{S} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{35}\text{Cl}$	6.371	hfesh
167	$1 \text{ } ^{35}\text{S} (0 \beta^-, 0 \nu) 1 \text{ } ^{35}\text{Cl}$	0.167	table
168	$1 \text{ } ^{35}\text{S} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{36}\text{S}$	9.889	hfesh
169	$1 \text{ } ^{35}\text{S} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{36}\text{Cl}$	7.965	hfesh
170	$1 \text{ } ^{35}\text{Cl} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{36}\text{Cl}$	8.579	hfesh
171	$1 \text{ } ^{35}\text{Cl} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ heavy}$	8.505	hfesh
172	$1 \text{ } ^{36}\text{S} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{37}\text{Cl}$	9.168	hfesh
173	$1 \text{ } ^{36}\text{S} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{37}\text{Cl}$	8.387	hfesh
174	$1 \text{ } ^{36}\text{Cl} (0 \beta^-, 0 \nu) 1 \text{ heavy}$	0.712	table
175	$1 \text{ } ^{36}\text{Cl} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{37}\text{Cl}$	10.311	hfesh
176	$1 \text{ } ^{36}\text{Cl} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ } ^{37}\text{Cl}$	9.529	hfesh
177	$1 \text{ } ^{37}\text{Cl} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ heavy}$	11.024	hfesh
178	$1 \text{ } ^{37}\text{Cl} (1 \text{ p}, 0 \gamma) 1 \text{ heavy}$	10.242	hfesh
179	$1 \text{ heavy} (1 \text{ n}, 0 \gamma) 1 \text{ captn}$	8.221	ja89
Références			
amg71	Allen, B.J., Machlin, R.L., Gibbons, J.H.: 1971, Adv. Nucl. Phys. 4, 205		
bbr88	Brehm, K., Becker, H.W., Rolfs, C., Kappeler, F., Ratynski, W.: 1988 Phys. A. Atomic Nuclei 330, 167		
bk87	Bao, Z.Y., Kappeler, F.: 1987, Atomic Data Nucl. Data Tables 36, 411		
bvw91	Beer, H., Voss, F., Winters, R.R.: 1991, preprint		
bwk91	Beer, H., Wiescher, M., Kappeler, F., Gorres, J., Koehler, P.E.: 1991, preprint		
cf88	Caughlan, G.R., Fowler, W.A.: 1988, Atomic Data Nucl. Data Tables 40, 283		
db90	Descouvemont, P., Baraffe, I.: 1990, Nucl. Phys. A514, 66		
fcz67	Fowler, W.A., Caughlan, G.R., Zimmerman, B.A.: 1967, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 5, 525		
fl89	Funck, C., Langanke, K.: 1989, Ap.J. 344, 46		
hfesh	Hauser-Feshbach theoretical fit (Rayet, M.: 1997, Belgium)		
ja89	Jorissen, A., Arnould, M.: 1989, A.A. 221, 161		
nacre			
oni94	Ohsaki, T., Nagai, Y., Igashira, M., Shima, T., Takeda, K., Seino, S., Irie, T.: 1994, ApJ 422, 912		
rac94	Rauscher, T., Applegate, J.U., Cowan, J.J., Thielemann, F.D., Wiescher, M.: 1994, ApJ 429, 499		

A suivre ...

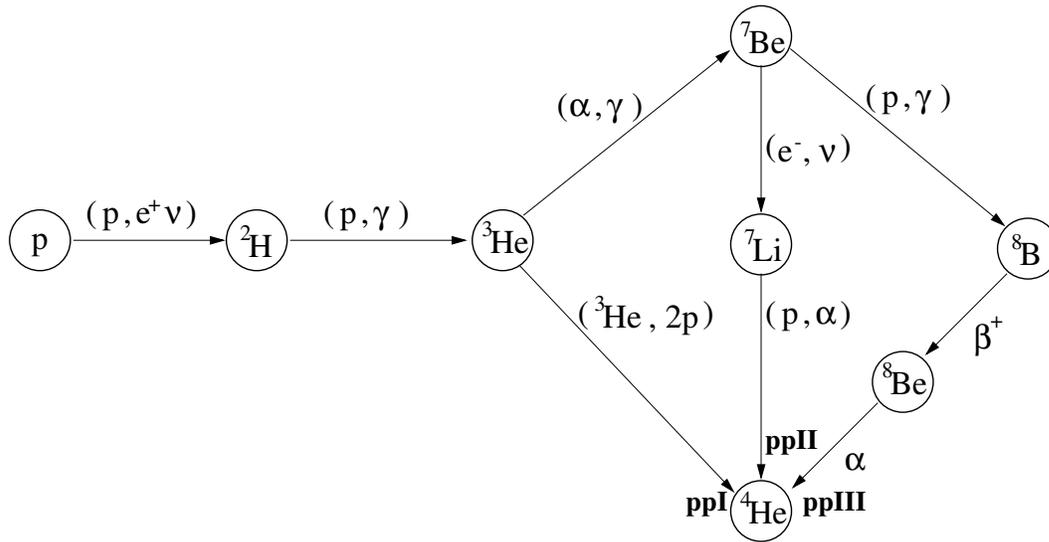


FIG. C.1 – Les chaînes protons-protons.

Numéro	Réaction $X(a, b)Y$	Energie libérée (MeV) $Q_{X(a, b)Y}$	Référence
rid90	Raman, S., Igashira, M., Dozono, Y., Kitazawa, H., Mizimoto, M., Lynn, J.E.:		1990, Phys. Rev. C41, 458
skk93	Schatz, H., Kappeler, F., Koehler, P.E., Wiescher, M., Trautvetter, H.P.:		1993, ApJ 413, 750
vol89	Vogelaar, R.B.:		1989, Ph.D. Thesis (California Institute of Technology)
w69	Wagoner, R.V.:		1969, Ap.J.Suppl. 162, 247
wfh78	Woosley, S.E., Fowler, W.A., Holmes, J.A., Zimmerman, B.A.:		1978, Atomic Data Nucl. Data Tables 22, 371
wgt90	Wiesher, M., Gorres, J., Thielemann, F.-D.:		1990, Ap.J. 363, 340

Fin.

C.3 Les réactions de brûlage

Les scénarios non explosifs de brûlage de l'Hydrogène sont rappelés ici (figures extraites de Arnould *et al.* (1996) pour les cycles CNO et chaînes Mg-Al et Ne-Na):

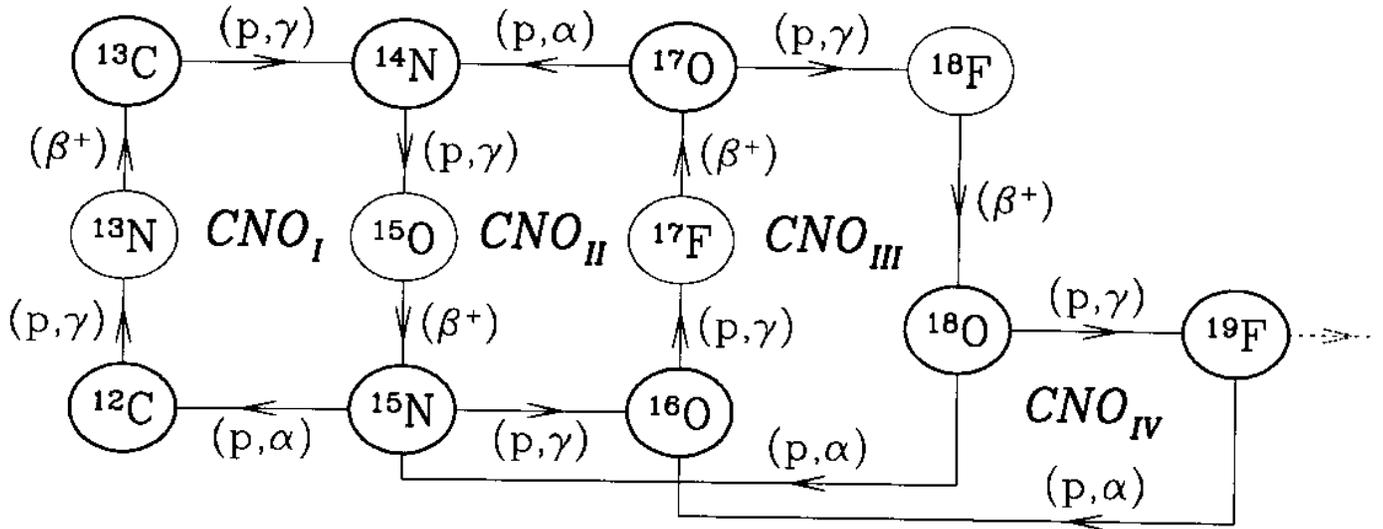


FIG. C.2 - Les cycles CNO, extraits de Arnould et al. (1996)

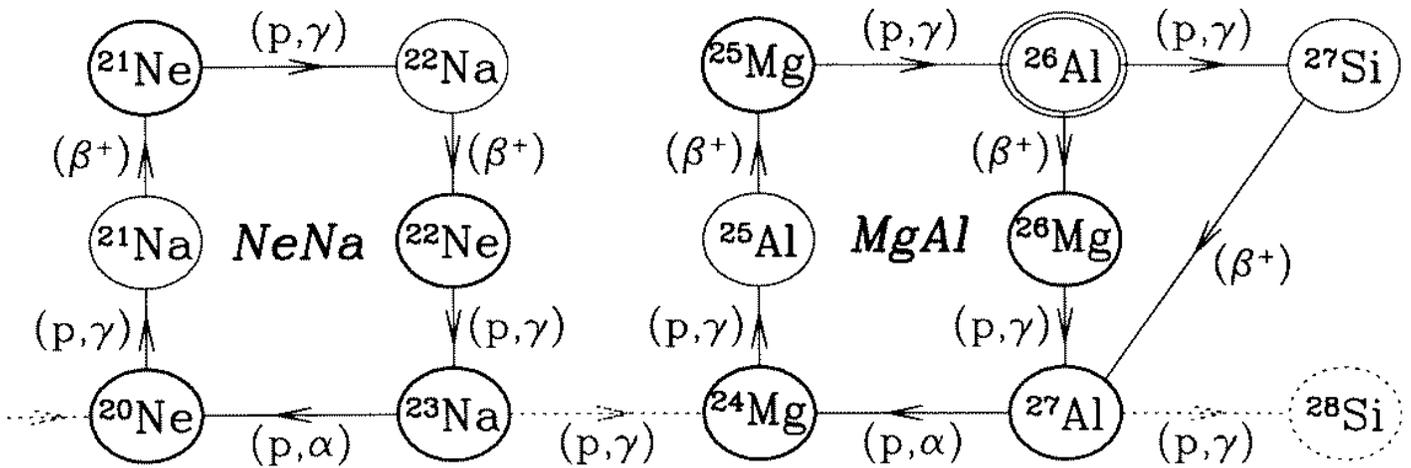


FIG. C.3 - Les chaînes Néon-Sodium et Magnésium-Aluminium, extrait de Arnould et al. (1996)

Annexe D

Expression des quantités thermodynamiques du deuxième ordre

L'objectif de cette annexe est d'établir l'expression des quantités thermodynamiques du deuxième ordre telles que ∇_{ad} , c_P , c_V , ... en fonction des dérivées par rapport aux variables indépendantes de deux grandeurs thermodynamiques de base: l'entropie et la pression. Les variables d'abondances utilisées, les Y_i , sont rappelées pour mémoire car les quantités thermodynamiques en dépendent mais elles sont toujours constantes en vertu du découplage structure/composition relaté au chapitre 1.

D.1 En version (T, ρ, Y_i)

D.1.1 Deux jeux de variables indépendantes

Pour atteindre notre objectif, nous allons utiliser deux systèmes de variables thermodynamiques pour exprimer la quantité de chaleur q . Les variables du système A sont (T, P) et les variables du système B sont (T, ρ) . Le changement de variable reliant P à ρ sera obtenu en écrivant:

$$d \ln P = \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \right|_T d \ln \rho + \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_\rho d \ln T \quad (\text{D.1})$$

En définissant

$$z_\rho = \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \right|_T \quad (\text{D.2})$$

$$z_T = \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_\rho \quad (\text{D.3})$$

on peut finalement écrire:

$$d \ln \rho = \frac{d \ln P}{z_\rho} \perp Q d \ln T \quad \text{avec} \quad Q = \frac{z_T}{z_\rho} \quad (\text{D.4})$$

D.1.2 Relations dans le premier jeu de variables

En se plaçant pour commencer dans le système de variables A, on exprime le premier principe, $dq = du + Pdv$, de la façon suivante:

$$dq = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_P dT + \left. \frac{\partial u}{\partial P} \right|_T dP \pm \frac{P}{\rho} d \ln \rho \quad (\text{D.5})$$

En utilisant l'équation D.4, cela donne:

$$dq = \left[\left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_P + \frac{QP}{\rho T} \right] dT + \left[\left. \frac{\partial u}{\partial P} \right|_T \pm \frac{1}{\rho z_\rho} \right] dP \quad (\text{D.6})$$

d'où

$$c_P \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial q}{\partial T} \right|_P = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_P + \frac{QP}{\rho T} \quad (\text{D.7})$$

Comme on a aussi $dq = Tds$, on peut écrire

$$ds = \left[\left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_P + \frac{QP}{\rho T} \right] d \ln T + \frac{P}{T} \left[\left. \frac{\partial u}{\partial P} \right|_T \pm \frac{1}{\rho z_\rho} \right] d \ln P \quad (\text{D.8})$$

et donc,

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_P = c_P \quad (\text{D.9})$$

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln P} \right|_T = \frac{P}{T} \left[\left. \frac{\partial u}{\partial P} \right|_T \pm \frac{1}{\rho z_\rho} \right] \quad (\text{D.10})$$

D.1.3 Relations dans le deuxième jeu de variables

En se plaçant maintenant dans le système de variables B, on écrit le premier principe de même:

$$dq = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_\rho dT + \left. \frac{\partial u}{\partial \rho} \right|_T d\rho \pm \frac{P}{\rho} d \ln \rho \quad (\text{D.11})$$

et alors en utilisant D.4:

$$dq = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_\rho dT + \left[\left. \frac{\partial u}{\partial \rho} \right|_T \pm \frac{P}{\rho^2} \right] d\rho \quad (\text{D.12})$$

On obtient donc de la même façon

$$c_V \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial q}{\partial T} \right|_v = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_\rho \quad (\text{D.13})$$

et

$$ds = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_\rho d \ln T + \frac{\rho}{T} \left[\left. \frac{\partial u}{\partial \rho} \right|_T \pm \frac{P}{\rho^2} \right] d \ln \rho \quad (\text{D.14})$$

Et finalement, les dérivées de l'entropie sont:

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_\rho = c_V \quad (\text{D.15})$$

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \right|_T = \frac{\rho}{T} \left[\left. \frac{\partial u}{\partial \rho} \right|_T \pm \frac{P}{\rho^2} \right] \quad (\text{D.16})$$

Dans ce même jeu de variables, écrivons maintenant l'égalité des dérivées secondes croisées de s :

$$\frac{d}{d \ln \rho} \left(\frac{ds}{d \ln T} \right) = \frac{d}{d \ln T} \left(\frac{ds}{d \ln \rho} \right) \quad (\text{D.17})$$

Compte tenu des expressions D.15 trouvées ci-dessus, cette relation devient:

$$\frac{d}{d \ln \rho} (c_V) = \frac{d}{d \ln T} \left[\frac{\rho}{T} \frac{\partial u}{\partial \rho} \Big|_T \perp \frac{P}{\rho^2} \right] \quad (\text{D.18})$$

Après avoir mené à bien ce calcul en éliminant les dérivées secondes croisées de u qui s'annulent, on obtient:

$$\frac{\partial u}{\partial \rho} \Big|_T = \frac{P}{\rho^2} (1 \perp z_T) \quad (\text{D.19})$$

D.1.4 Changement de variable

Pour finir, écrivons le changement de variables des dérivées de u en passant du système B au système A:

$$\frac{\partial u}{\partial P} \Big|_T = \frac{\partial u}{\partial \rho} \Big|_T \frac{\partial \rho}{\partial P} \Big|_T \quad (\text{D.20})$$

$$\frac{\partial u}{\partial T} \Big|_P = \frac{\partial u}{\partial T} \Big|_\rho + \frac{\partial u}{\partial \rho} \Big|_T \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_P \quad (\text{D.21})$$

En utilisant l'expression des dérivées de u trouvées en D.19, D.7 et D.13 et le changement de variable D.4, on trouve:

$$\frac{\partial u}{\partial P} \Big|_T = \frac{1}{\rho z_\rho} \perp \frac{Q}{\rho} \quad (\text{D.22})$$

$$c_P = c_V + \frac{PQ^2}{\rho} \quad (\text{D.23})$$

La deuxième expression n'est autre que la relation de Clapeyron entre c_P et c_V . La première relation permet d'expliciter toutes les dérivées de l'entropie comme suit:

$$\frac{\partial s}{\partial \ln T} \Big|_P = c_P \quad \frac{\partial s}{\partial \ln T} \Big|_\rho = c_V \quad (\text{D.24})$$

$$\frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \Big|_T = \perp \frac{PQ}{\rho T} z_T \quad \frac{\partial s}{\partial \ln P} \Big|_T = \perp \frac{PQ}{\rho T} \quad (\text{D.25})$$

D.1.5 Conclusion

Si l'on construit la quantité suivante:

$$k = z_T \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \Big|_T \perp z_\rho \frac{\partial s}{\partial \ln T} \Big|_\rho \quad (\text{D.26})$$

on peut montrer, en utilisant les dérivées de l'entropie rassemblées ci-dessus et la relation de Clapeyron démontrée plus haut, que l'on a

$$k = \perp z_\rho c_P \quad (\text{D.27})$$

. Par ailleurs la relation $dq = Tds$ permet d'écrire

$$dq = c_P dT + T \left. \frac{\partial s}{\partial \ln P} \right|_T d \ln P \quad (\text{D.28})$$

en utilisant l'équation D.24. On en déduit l'expression du gradient adiabatique:

$$\nabla_{ad} \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial \ln T}{\partial \ln P} \right|_q = \frac{PQ}{\rho T c_P} \quad (\text{D.29})$$

En introduisant le relation D.27 et la définition de $\left. \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \right|_T$ dans l'expression du gradient, on obtient finalement les trois relations cherchées:

$$c_P = \perp \frac{k}{z_\rho} \quad (\text{D.30})$$

$$c_V = \perp \left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_\rho \quad (\text{D.31})$$

$$\nabla_{ad} = \frac{1}{k} \left. \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \right|_T \quad (\text{D.32})$$

D.2 En version $(T, \ln f, Y_i)$

On introduit ici un nouveau jeu de variables, le système C: $(\ln f, T)$.

D.2.1 Le changement de variable $\rho(f)$

Le changement de variable entre ρ et $\ln f$ s'écrit comme suit:

$$d \ln \rho = \rho_f d \ln f + \rho_T d \ln T \quad (\text{D.33})$$

En exprimant la différentielle $d \ln \rho$ dans la relation D.4, on obtient pour la pression:

$$d \ln P = P_T d \ln T + P_f d \ln f \quad (\text{D.34})$$

$$\text{avec } P_T \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_f = z_T + z_\rho \rho_T \quad (\text{D.35})$$

$$\text{et } P_f \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln f} \right|_{T, L_{Yr}} = z_\rho \rho_f \quad (\text{D.36})$$

D.2.2 Passage A \rightarrow C et c_P

En suivant la même méthode que pour la section précédente de cette annexe, nous allons calculer les dérivées de l'entropie. Pour cela, on écrit le changement de variable entre le système de variables A défini plus haut et le nouveau système C, $(T, \ln f)$:

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T = \left. \frac{\partial s}{\partial \ln P} \right|_T \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln f} \right|_T \quad (\text{D.37})$$

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_f = \left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_P + \left. \frac{\partial s}{\partial \ln P} \right|_T \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_f \quad (\text{D.38})$$

ce qui se réécrit:

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T = \perp \frac{PQ}{\rho T} P_f \quad (\text{D.39})$$

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_f = c_P \perp \frac{PQ}{\rho T} P_T \quad (\text{D.40})$$

en utilisant D.24. En éliminant la quantité $\left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T$ des équations D.37 et D.38 et en introduisant D.24, on peut montrer que

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_f = c_P + \frac{\left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T}{\left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln f} \right|_T} \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln T} \right|_f \quad (\text{D.41})$$

En posant

$$K = P_T \left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T \perp P_f \left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_f \quad (\text{D.42})$$

on obtient la relation $K = \perp P_f c_P$ et l'on retient donc:

$$c_P = \perp \frac{K}{P_f} \quad (\text{D.43})$$

D.2.3 Passage $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{C}$ et c_V

On écrit le système de passage entre les systèmes de variables B et C pour l'entropie (voir aussi annexe F):

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T = \left. \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \right|_T \left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \right|_T \quad (\text{D.44})$$

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_f = \left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_\rho + \left. \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \right|_T \left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right|_f \quad (\text{D.45})$$

En éliminant $\left. \frac{\partial s}{\partial \ln \rho} \right|_T$ de ces équations et en introduisant les relations D.24, on obtient

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_f = c_V + \frac{\left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T}{\left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \right|_T} \left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right|_f \quad (\text{D.46})$$

En posant

$$K' = \rho_f \left. \frac{\partial s}{\partial \ln T} \right|_f \perp \rho_T \left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T \quad (\text{D.47})$$

on obtient la relation $K' = \perp \rho_f c_V$ et l'on retient donc:

$$c_V = \perp \frac{K'}{\rho_f} \quad (\text{D.48})$$

D.2.4 Vers le gradient adiabatique

De l'expression D.39 pour la dérivée de l'entropie, on tire:

$$Q = \perp \frac{\rho T}{P P_f} \left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T \quad (\text{D.49})$$

On remplace cette expression de Q et celle trouvée pour c_P , D.43, dans l'équation D.29 pour obtenir la nouvelle forme du ∇_{ad} . Après simplifications, on a:

$$\nabla_{ad} = \frac{1}{K} \left. \frac{\partial s}{\partial \ln f} \right|_T \quad (\text{D.50})$$

D.2.5 La vitesse du son

Dans cette partie, on calculera aussi

$$\Gamma_1 \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \right|_q \quad (\text{D.51})$$

pour pouvoir obtenir la vitesse du son

$$v_s \stackrel{def}{=} \sqrt{\frac{P}{\rho} \Gamma_1} \quad (\text{D.52})$$

La vitesse du son demande le calcul du premier exposant adiabatique Γ_1 et donc le calcul d'une expression de P en fonction de q et ρ pour calculer celui-ci. On utilise l'expression de dq en fonction de P et T (relation D.28) et le changement de variable D.4 en les réécrivant comme suit:

$$\rho c_P T d \ln T = \rho dq + Q P d \ln P \quad (\text{D.53})$$

$$z_\rho Q d \ln T = d \ln P \perp z_\rho d \ln \rho \quad (\text{D.54})$$

En éliminant la température de ces deux équations, on a:

$$d \ln P \left(\frac{1}{z_\rho Q} \perp \nabla_{ad} \right) = \frac{dq}{c_P T} + \frac{d \ln \rho}{Q} \quad (\text{D.55})$$

Par ailleurs, on réécrit la relation de Clapeyron D.22 en divisant par c_P et en introduisant les définitions du gradient adiabatique D.29 et du coefficient $\gamma = \frac{c_P}{c_V}$. On obtient: $1 = \gamma + \nabla_{ad} Q z_\rho$. Ce qui donne pour la relation D.55 préalablement multipliée par $Q z_\rho$:

$$d \ln P = \frac{z_\rho Q}{\gamma c_P T} dq + \frac{z_\rho}{\gamma} d \ln \rho \quad (\text{D.56})$$

D'où l'expression $\Gamma_1 = \frac{z_\rho}{\gamma}$. En remplaçant maintenant c_P et c_V par les expressions trouvées au paragraphe précédent, puis en introduisant les relations D.36 on obtient l'expression cherchée:

$$\gamma = \perp \frac{P_f K'}{\rho_f K} \quad (\text{D.57})$$

$$\Gamma_1 = \perp \frac{K}{K'} \quad (\text{D.58})$$

D.3 Calcul de χ_μ

Cette quantité, définie par:

$$\chi_\mu \stackrel{def}{=} \left. \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \mu} \right|_{T, \rho} \quad (\text{D.59})$$

trace la variation de composition des couches en fonction de la pression. Elle est nécessaire au calcul de l'apparition d'une instabilité thermique ou non (voir le chapitre 3) par exemple et à tous les processus de mélange en général.

Formule générale

On écrit P et ρ dans les nouveaux jeux de variable $C = (\ln T, \rho, \mu)$ et $D = (\ln T, \ln f, \mu)$:

$$d \ln P = \chi_\rho d \ln \rho + \chi_T d \ln T + \chi_\mu d \ln \mu \quad (\text{D.60})$$

$$= \phi_f d \ln f + \phi_T d \ln T + \phi_\mu d \ln \mu \quad (\text{D.61})$$

$$d \ln \rho = \rho_T d \ln T + \rho_f d \ln f + \rho_\mu d \ln \mu \quad (\text{D.62})$$

En combinant D.62 dans D.60, on obtient:

$$\chi_\mu + \chi_\rho \rho_\mu = \phi_\mu \quad (\text{D.63})$$

Par ailleurs, on peut écrire P et μ en fonction de T et ρ : $C = (\ln T, \rho, \mu)$ et $D = (\ln T, \ln f, \mu)$:

$$d \ln P = z_\rho d \ln \rho + z_T d \ln T \quad (\text{D.64})$$

$$d \ln \mu = \xi_T d \ln T + \xi_\rho d \ln \rho \quad (\text{D.65})$$

En combinant D.65 dans D.60 et en comparant à D.64, on obtient: En combinant D.62 dans D.60, on obtient:

$$Z_\rho = \chi_\rho + \chi_\mu \xi_\rho \quad (\text{D.66})$$

La combinaison de D.63 et D.66 donne:

$$\chi_\mu = \left(\frac{\phi_\mu \perp z_\rho \rho_\mu}{1 \perp \rho_\mu \xi_\mu} \right) \quad (\text{D.67})$$

Cette formule a l'avantage d'éliminer χ_ρ , quantité difficile à calculer autrement que comme *résultat* de D.66 en formalisme $(\ln f, \ln T)$. En opérant le changement de variable 2.91 et en se rappelant que $\mu = \alpha^{\perp 1}$, on s'aperçoit que deux quantités sont connues:

$$\xi_\rho = \perp \frac{\partial \ln \alpha}{\partial \ln f} \Big|_T \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \quad (\text{D.68})$$

$$z_\rho = \frac{\partial \ln P}{\partial \ln f} \Big|_T \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \quad (\text{D.69})$$

Les dérivées de ρ s'obtenant à partir de l'équation 2.66:

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln x} \Big|_y = \frac{\partial \ln n_e}{\partial \ln x} \Big|_y \perp \frac{\partial \ln \alpha_e}{\partial \ln x} \Big|_y \quad (\text{D.70})$$

$$\frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 n_e}{\partial \ln x \partial \ln y} \perp \frac{\partial^2 \alpha_e}{\partial \ln x \partial \ln y} \quad (\text{D.71})$$

Il reste donc $\phi_\mu = \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \mu} \Big|_{T,f}$ et $\rho_\mu = \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln \mu} \Big|_{f,T}$ à calculer.

Calcul de ϕ_μ

On cherche à déterminer, en formalisme $(\ln f, \ln T)$, de quelle manière peut varier P lorsque μ varie, à f et T constants! Est-ce que μ varie lorsque f et T sont constants? Oui, deux couches de l'étoile ayant mêmes f et T auront deux poids moléculaires moyens différents

si leur contenu nucléaire est différent et donc une pression différente. On rend compte de cette dépendance en écrivant μ :

$$d \ln \mu = \perp d \ln \alpha = \perp \mu d \left(\alpha_e + \sum_{ions} \alpha_i \right) \quad (D.72)$$

$$= \perp \mu d \left(\alpha_e + \sum_X y_X \perp \alpha_{H_2} \right) \quad (D.73)$$

$$d \ln \mu(\ln f, T, y_X) = \perp \mu \left[d \alpha_e(\ln f, T, y_X) + \sum_X dy_X \perp d \alpha_{H_2}(\ln f, T, y_X) \right] \quad (D.74)$$

$$= \mu_T d \ln T + \mu_f d \ln f + \sum_X \mu_X d \ln y_X \quad (D.75)$$

On écrit P dans le même jeu de variables:

$$d \ln P = \psi_T d \ln T + \psi_f d \ln f + \sum_X \psi_X d \ln y_X \quad (D.76)$$

L'introduction de D.72 dans D.76 et la comparaison avec D.61 donne:

$$\phi_\mu = \frac{\psi_X}{\mu_X} \quad (D.77)$$

Calcul des dérivées par rapport à y_X

Comme $\alpha = \alpha_e + \sum_i \alpha_i$ et que la relation 2.2 lie α et μ , on peut écrire:

$$\frac{\partial \ln \mu}{\partial \ln y_X} \Big|_{f,T} = \perp \left(\frac{\alpha_e}{\alpha} \frac{\partial \ln \alpha_e}{\partial \ln y_X} \Big|_{f,T} + \frac{\sum_i \alpha_i}{\alpha} \frac{\partial \ln \sum_i \alpha_i}{\partial \ln y_X} \Big|_{f,T} \right) \quad (D.78)$$

Par ailleurs, on a $\psi_X = \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial \ln y_X} \Big|_{f,T} = \frac{1}{P} \frac{\partial}{\partial \ln y_X} \Big|_{f,T} (P_{elec} + P_{ion} + P_{rad} + P_{cor})$. La seule composante dépendant des y_X est la composante ionique. En utilisant son expression (équation 2.291) et en se souvenant de la définition de ρ (équation 2.66), on obtient:

$$\psi_X = \frac{P_{ion}}{P} \left(\frac{\partial \ln \sum_i \alpha_i}{\partial \ln y_X} \Big|_{T,f} \perp \frac{\partial \ln \alpha_e}{\partial \ln y_X} \Big|_{f,T} \right) \quad (D.79)$$

A partir de 2.157 pour α_e et 2.295 pour α_i , on écrit avec les notations de la partie 2.6.1:

$$\frac{\partial \ln \alpha_e}{\partial \ln y_X} \Big|_{f,T} = \frac{y_X}{\alpha_e} \left(D \frac{\partial \alpha_H}{\partial y_X} \Big|_{f,T} + \frac{\partial S}{\partial y_X} \Big|_{f,T} \right) \quad (D.80)$$

$$\frac{\partial \ln \sum_i \alpha_i}{\partial \ln y_X} \Big|_{f,T} = \frac{y_X}{\sum_i \alpha_i} \left(y_X \delta(X \perp i) \perp \frac{\partial \alpha_{H_2}}{\partial y_X} \Big|_{f,T} \right) \quad (D.81)$$

Reste ensuite à obtenir les dérivées par rapport à y_X de α_H , α_{H_2} et α_e^Z . D'après la section 2.6.1 (équations 2.157, 2.162, 2.154, 2.155, 2.156):

$$\left. \frac{\partial \alpha_{H_2}}{\partial y_X} \right|_{f,T} = \frac{1}{2} \left(\delta(H \perp X) \perp S \left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial y_X} \right|_{f,T} \right) \quad (D.82)$$

$$\left. \frac{\partial \alpha_H}{\partial y_X} \right|_{f,T} = \left(\frac{b \perp \sqrt{\Delta}}{2a\sqrt{\delta}} \right) \left. \frac{\partial b}{\partial y_X} \right|_{f,T} \perp \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \left. \frac{\partial c}{\partial y_X} \right|_{f,T} \quad (D.83)$$

$$\left. \frac{\partial b}{\partial y_X} \right|_{f,T} = S \left. \frac{\partial \alpha_e^Z}{\partial y_X} \right|_{f,T} \perp D\delta(H \perp Z) \quad (D.84)$$

$$\left. \frac{\partial c}{\partial y_X} \right|_{f,T} = \perp y_H \left. \frac{\partial \alpha_e^Z}{\partial y_X} \right|_{f,T} \perp S\delta(H \perp Z) \quad (D.85)$$

$$\left. \frac{\partial \alpha_e^Z}{\partial y_X} \right|_{f,T} = \left. \frac{\partial \alpha_e^{Z_s}}{\partial y_X} \right|_{f,T} + \left. \frac{\partial \alpha_e^{Z_{ns}}}{\partial y_X} \right|_{f,T} \quad (D.86)$$

$$\left. \frac{\partial \alpha_e^{Z_s}}{\partial y_X} \right|_{f,T} = \frac{1}{y_X} \sum_{q=1}^{Z_X} \alpha_{X_{q+}} \quad (D.87)$$

$$\left. \frac{\partial \alpha_e^{Z_{ns}}}{\partial y_X} \right|_{f,T} = Z_X \quad \text{si } \mathbf{totioniz} \quad (D.88)$$

$$(D.89)$$

où a, b, c et Δ sont les notations standards pour les coefficients et le déterminant de l'équation du second degré 2.162.

Calcul de ρ_μ

En comparant l'expression de ρ dans le jeu de variable $(\ln f, \ln T, \mu)$ (équation D.62) avec la combinaison de D.72 et de ρ en variables $(\ln f, \ln T, y_X)$, on a pour ρ une formule similaire à P :

$$\rho_\mu = \frac{\sigma_X}{\mu_X} \quad \text{avec} \quad \sigma_X = \left. \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln y_X} \right|_{f,T} \quad (D.90)$$

D'après l'expression 2.66 de ρ , on a:

$$\sigma_X = \perp \left. \frac{\partial \ln \alpha_e}{\partial \ln y} \right|_{f,T} \quad (D.91)$$

Conclusion

La quantité χ_μ est donc calculée à partir de l'équation D.67, en utilisant les expressions D.77, D.90, D.68 et D.69 donnent les quatre termes qui la compose. Les deux premières font appel à trois quantités dérivées par rapport à y_X : D.79, D.78 et D.91.

D.4 Dérivées Newton-Raphson

Pour la convergence, les dérivées des quantités Q , c_P , ∇_{ad} , z_ρ et z_T sont nécessaires. A partir des équations établies dans la première section de cette annexe, on peut écrire

directement les dérivées de Q :

$$\frac{\partial Q}{\partial \ln x} \Big|_{\ln y} = Q \left[\delta(x \perp T) + \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln x} \Big|_y + \left(\frac{\partial s}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \frac{\partial^2 s}{\partial \ln x \partial \ln f} \perp \left(\frac{\partial P}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \frac{\partial^2 P}{\partial \ln x \partial \ln f} \right] \quad (\text{D.92})$$

Les dérivées de c_P et ∇_{ad} sont exprimées à partir de celles de k :

$$\frac{\partial k}{\partial \ln x} \Big|_y = \frac{\partial P_T}{\partial \ln x} \Big|_y \frac{\partial s}{\partial \ln f} \Big|_T + P_T \frac{\partial^2 s}{\partial \ln x \partial \ln f} \perp \frac{\partial P_f}{\partial \ln x} \Big|_y \frac{\partial s}{\partial \ln T} \Big|_f \perp P_f \frac{\partial^2 s}{\partial \ln x \partial \ln T} \quad (\text{D.93})$$

Où l'on utilise la relation F.10 pour calculer les dérivées de P_f et P_T . On a alors:

$$\frac{\partial c_P}{\partial \ln x} \Big|_y = c_P \left[\frac{1}{k} \frac{\partial k}{\partial \ln x} \Big|_y \perp \frac{1}{P_f} \frac{\partial P_f}{\partial \ln x} \Big|_y \right] \quad (\text{D.94})$$

$$\frac{\partial \nabla_{ad}}{\partial \ln x} \Big|_y = \nabla_{ad} \left[\left(\frac{\partial s}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \frac{\partial^2 s}{\partial \ln x \partial \ln f} \perp \frac{1}{k} \frac{\partial k}{\partial \ln x} \Big|_y \right] \quad (\text{D.95})$$

Les quantités z_T et z_ρ sont nécessaires pour certains calculs liés à la convection. Elles sont obtenues à partir des quantités P_T et P_f en appliquant le changement de variable sur les dérivées, l'équation 2.91 (ce calcul a déjà été fait pour z_ρ , voir l'équation D.69). Les dérivées de ces deux quantités dans le jeu de variable $(\ln f, \ln T)$ sont alors:

$$\frac{\partial z_T}{\partial \ln x} \Big|_y = \frac{\partial P_T}{\partial \ln x} \Big|_y \perp \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \left\{ \frac{\partial P_f}{\partial \ln x} \Big|_y \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \Big|_f + \right. \quad (\text{D.96})$$

$$\left. P_f \left[\frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial \ln x \partial \ln T} \perp \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \Big|_f \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial \ln x \partial \ln f} \right] \right\} \quad (\text{D.97})$$

$$\frac{\partial z_\rho}{\partial \ln x} \Big|_y = \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \left[\frac{\partial P_f}{\partial \ln x} \Big|_y \perp P_f \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln f} \Big|_T \right)^{\perp 1} \frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial \ln x \partial \ln f} \right] \quad (\text{D.98})$$

Annexe E

Détails de l'implémentation de la nouvelle équation d'état

La table E donne l'organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état . Les noms de procédures sont notés en noir et en majuscule si la procédure fait appel à un niveau supplémentaire ou en minuscule sinon. Les tests permettant l'accès aux niveaux supérieurs ont été reportés en bleu: ils s'appliquent à l'élément indenté immédiatement inférieur. Par exemple, tout au début du tableau, dans la procédure EOS (niveau 1): si flag vaut 1, alors une procédure de niveau 2, `initpar`, est exécutée. De même, si un des deux booléens, `eosderiv` ou `checkanum`, est vrai, alors la procédure de niveau deux `EOS_FOD` est exécutée. Ensuite, `truncexpo` est appelé sans conditions, alors que `SAVE_QUANTITIES_FOD` n'est appelée que si `printinfile` ≠ 0...

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état

Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
EOS	flag=0 initpar flag=0 initcons flag=0 initnbion flag=0 et not compavmass initlnm eosderiv ou checkanum				
	EOS_FOD	truncexpo printinfile $\neq 0$			
		SAVEQUANTITIES_FOD	truncln intchar lnnQ		
		DEGEN	truncln		
		ELECTRONIC_SOD	truncinv		
		chem Y compavmass			

A suivre ...

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état						
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6	
		INITLNMAV	truncIn			
		nonideal				
		NONPERFECT_FOD	fapprocou ou compionpres			
			FAPPROX_FOD	truncinv truncIn		
			fapprocou ou compionpres			
			ETAPPROX_FOD		DEGEN	truncIn
			compoulshiel			
			COULOMB_FOD	truncinv		
			compionpres			
			PRESSIOnI_FOD	truncinv truncIn truncexpo		
		neweta_fod				
		ZH_FOD	compH2eff et VardyaZH2			
A suivre ...						

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état					
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
			H2VARDYA_FOD	truncinv truncln truncexpo	
			compH2eff et IrwinZH2 h2Irwin_fod compZH0 et $T < T_{\text{maxirwin}}$ h_fod		
		ZZ_FOD	indx compZCNO et (z=6 ou z=7 ou z=8)		
			CNO_FOD	truncinv truncln truncexpo indx	
			compZHe et z=2 et $T < T_{\text{maxirwin}}$ he_fod		
		SAHAZ_FOD	truncexpo indx		
		freeelectronZ_fod			
		SAHAH_FOD			
A suivre ...					

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état					
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
			truncIn truncexpo egal		
			SECONDEGREE	TRUNCDIFF	egal
				improvereal	
			CHOICE	egal	
		GAZ_FOD	truncIn indx		
			LOGA_FOD	truncinv truncIn	
			lnnQ		
		nonideal dpecalc_fod nonideal dsecalc_fod nonideal duecalc_fod compionpress			
A suivre ...					

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état					
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
		NONPERFECT0_FOD			
			FAPPROX_FOD	truncinv truncln	
			ETAPPROX_FOD		
				DEGEN	truncln
			PRESSIONI_FOD	truncinv truncln truncexpo	
		compionpress dpecalc_fod compionpress dsecalc_fod compionpress duecalc_fod radiativ_fod dimelec_fod			
		TRANSDF TODRHO			
			TRUNCDIFF	egal	
		compkimu_fod			
A suivre ...					

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état					
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
		TRUNCDIFF	egal		
		fordiffusion_fod prininfile≠0			
		SAVEQUANTITIES_FOD	truncn intchar lnnQ		
			truncinv		
	truncinv not eosderiv EOS_SOD				
		truncexpo printinfile≠0			
		SAVEQUANTITIES_SOD	truncn intchar lnnQ		
		DEGEN	truncn		
		ELECTRONIC_SOD			
		chem Y	truncinv		
A suivre ...					

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état

Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
		compavmass			
		INITLNMAV	truncIn		
		nonideal			
		NONPERFECT_SOD	fapprocoul ou compionpres		
			FAPPROX_SOD	truncinv truncIn	
			fapprocoul ou compionpres		
			ETAPPROX_SOD		
				DEGEN	truncIn
			compcoulshiel		
			COULOMB_SOD	truncinv	
			compionpres		
		PRESSIONI_SOD	truncinv truncIn truncexpo		
		neweta_sod			
		ZH_SOD			

A suivre ...

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état					
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
			compH2eff et VardyaZH2		
			H2VARDYA_SOD	truncinv truncln truncexpo	
			compH2eff et IrwinZH2 h2Irwin_sod compZH0 et $T < T_{\text{maxirwin}}$ h_sod		
		ZZ_SOD	indx		
			compZCNO et (z=6 ou z=7 ou z=8)		
			CNO_SOD	truncinv truncln truncexpo indx	
			compZHe et z=2 et $T < T_{\text{maxirwin}}$ he_sod		
		SAHAZ_SOD	truncexpo indx		
		freeelectronZ_sod			
A suivre ...					

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état					
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
		SAHAH_SOD	truncn truncexpo egal		
			SECONDEGREE		
				TRUNCDIFF	egal
				improvereal	
			CHOICE	egal	
		GAZ_SOD	truncn indx		
			LOGA_SOD	truncinv truncn	
			lnnQ		
		nonideal dpecalc_sod nonideal dsecalc_sod nonideal duecalc_sod			
A suivre ...					

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état					
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
		compionpress			
		NONPERFECT0_SOD	FAPPROX_SOD	truncinv trunch	
			ETAPPROX_SOD	DEGEN	trunch
			PRESSIONI_SOD	truncinv trunch truncexpo	
		compionpress dpecalc_sod compionpress dsecalc_sod compionpress ducalc_sod radiativ_sod dimelec_sod			
		TRANSDF TODRHO			
			TRUNCDIFF	egal	
A suivre ...					

Organigramme détaillé de la nouvelle équation d'état					
Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4	Niveau 5	Niveau 6
		compkimu_sod			
		TRUNCDIFF	egal		
		fordiffusion_sod prininfile $\neq 0$			
		SAVEQUANTITIES_SOD	truncn intchar lnnQ		
		truncinv			
Fin.					

Annexe F

Petit formulaire physique et mathématique

F.1 Unités atomiques

Si M_{12C} est la masse du **noyau** de carbone 12, on a :

$$\mathcal{N} \stackrel{def}{=} \frac{12g}{M_{12C}} \quad (F.1)$$

$$uma \stackrel{def}{=} \frac{M_{12C}}{12} \quad (F.2)$$

En combinant ces deux définitions, on obtient $uma \cdot \mathcal{N} = 1g$. De plus, en supposant que

- $M_n = M_p = M$
- et $6 M_p + 6 M_n = M_{12C}$ (on néglige l'énergie de liaison du carbone 12)

la définition F.2 donne $uma = M$. La masse d'une "espèce nucléaire" étant donnée par $M_x = A_x \cdot uma$, la masse molaire est $M_x^{mol} = \mathcal{N} \cdot M_x = A_x g$.

F.2 Constantes fondamentales

La cohérence de l'ensemble des valeurs des constantes physiques a été renforcé en choisissant seulement un petit nombre de constantes fondamentales pour exprimer toutes les autres en fonctions de celles-ci. Le système d'unité choisi est le cgs. Ainsi, on a

- $c = 2.99792458 \cdot 10^{10} cm \cdot s^{-1}$
- $\mathcal{G} = 6.67259 \cdot 10^{-8} dyn \cdot cm^2 \cdot g^{-2}$
- $k = 1.380658 \cdot 10^{-16} erg/K$
- $h = 6.6260755 \cdot 10^{-27} erg \cdot s$
- $\mathcal{N} = 6.0221367 \cdot 10^{23}$
- $e = 1.60217733 \cdot 10^{-19} ucgs$
- $M_e = 9.1093897 \cdot 10^{-28} g$

On a alors pour les constantes dérivées:

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} \sim 5.66961 \cdot 10^{-5} ucgs$$

$$- R = \mathcal{N}k \sim 8.3144538 \cdot 10^7 \text{ucgs}$$

$$- \lambda_c = \frac{h}{M_e c} \sim 2.426311 \cdot 10^{+10} \text{cm}$$

F.3 Formules mathématiques utiles

F.3.1 Formule de Stirling:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} (\ln(x!)) = x \ln(x) \perp x \quad (\text{F.3})$$

F.3.2 Analyse vectorielle:

On rappelle les propriétés suivantes:

$$\Delta x = \text{div}(\vec{\nabla} x) \quad (\text{F.4})$$

$$\vec{\nabla}(\vec{x} \cdot \vec{y}) = \vec{x} \wedge \text{rot}(\vec{y}) + \vec{y} \wedge \text{rot}(\vec{x}) + (\vec{x} \cdot \vec{\nabla})\vec{y} + (\vec{y} \cdot \vec{\nabla})\vec{x} \quad (\text{F.5})$$

$$\text{rot}(\vec{x} \wedge \vec{y}) = (\vec{y} \cdot \vec{\nabla})\vec{x} \perp (\vec{x} \cdot \vec{\nabla})\vec{y} \perp \vec{y} \text{div}(\vec{x}) + \vec{x} \text{div}(\vec{y}) \quad (\text{F.6})$$

$$\text{rot}(\text{rot}(\vec{x})) = \vec{\nabla} \text{div}(\vec{x}) \perp \Delta \vec{x} \quad (\text{F.7})$$

$$\text{div}(\text{rot}(\vec{x})) = \text{rot}(\vec{\nabla} y) = 0 \quad (\text{F.8})$$

F.3.3 Dérivation de β :

Si $\beta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{kT}$, on a:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \beta^n}{\partial \ln x} \right|_y &= \beta^n \left. \frac{\partial \ln \beta^n}{\partial \ln x} \right|_y \\ &= n \beta^n \left. \frac{\partial \ln \ln \beta}{\partial \ln x} \right|_y \\ &= \perp n \beta^n \left. \frac{\partial \ln T}{\partial \ln x} \right|_y \end{aligned}$$

D'où

$$\left. \frac{\partial \beta^n}{\partial \ln x} \right|_y = \perp n \beta^n \delta(x \perp T) \quad (\text{F.9})$$

F.3.4 Dérivées logarithmiques

Le passage de la dérivée $\frac{\partial^2 \ln}{\partial \ln x \partial \ln y}$ à la dérivée $\frac{\partial^2}{\partial \ln x \partial \ln y}$ de fait de la manière suivante:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d \ln x} \left(\left. \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \right|_x \right) &= \frac{d}{d \ln x} \left(\frac{1}{A} \left. \frac{\partial A}{\partial \ln y} \right|_x \right) \\ &= \frac{1}{A} \frac{\partial^2 A}{\partial \ln x \partial \ln y} + \frac{\perp 1}{A^2} \left. \frac{\partial A}{\partial \ln x} \right|_y \frac{\partial A}{\partial \ln y} \Big|_x \end{aligned}$$

D'où la formule:

$$\frac{\partial^2 A}{\partial \ln x \partial \ln y} = A \left(\frac{\partial^2 \ln A}{\partial \ln x \partial \ln y} + \left. \frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \right|_y \left. \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \right|_x \right) \quad (\text{F.10})$$

D'autre part, le passage de la dérivée $\frac{\partial \ln^2}{\partial \ln x \partial \ln y}$ à la dérivée $\frac{\partial^2 \ln}{\partial \ln x \partial \ln y}$ doit être très prudent car l'ordre des dérivations devient important. En effet, si les dérivées secondes croisées sont égales, ce n'est pas le cas pour les dérivées logarithmiques. Vérifions le :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 A}{\partial \ln x \partial \ln y} &= \frac{\partial^2 A}{\partial \ln y \partial \ln x} \\ \frac{d}{dx} \left(\frac{A}{y} \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x \right) &= \frac{d}{dy} \left(\frac{A}{x} \frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \\ x \frac{d}{dx} \left(A \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x \right) &= y \frac{d}{dy} \left(A \frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \\ \frac{d}{d \ln x} \left(A \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x \right) &= \frac{d}{d \ln y} \left(A \frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y \right) \\ \frac{\partial A}{\partial \ln x} \Big|_y \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x + A \frac{\partial^2 \ln A}{\partial \ln x \partial \ln y} &= \frac{\partial A}{\partial \ln y} \Big|_x \frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y + A \frac{\partial^2 \ln A}{\partial \ln y \partial \ln x} \\ \frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x + \frac{\partial^2 \ln A}{\partial \ln x \partial \ln y} &= \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x \frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y + \frac{\partial^2 \ln A}{\partial \ln y \partial \ln x} \end{aligned}$$

On trouve bien que :

$$\frac{\partial^2 \ln A}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\partial^2 \ln A}{\partial \ln y \partial \ln x} \quad (\text{F.11})$$

Mais alors :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d \ln y} \left(\frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y \right) &= \frac{d}{d \ln x} \left(\frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x \right) \\ \frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y \frac{d \ln}{d \ln y} \left(\frac{\partial \ln A}{\partial \ln x} \Big|_y \right) &= \frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x \frac{d \ln}{d \ln x} \left(\frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x \right) \end{aligned}$$

D'où :

$$\frac{\partial \ln^2 A}{\partial \ln x \partial \ln y} = \frac{\frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x}{\frac{\partial \ln A}{\partial \ln y} \Big|_x} \frac{\partial \ln^2 A}{\partial \ln y \partial \ln x} \quad (\text{F.12})$$

F.3.5 Relations de changement de variables

Lorsque l'on passe de l'expression d'une quantité A en fonction de x et y , $A(x, y)$, à une expression en fonction de u et v , $A(u, v)$ avec les relations $x = f(u, v)$ et $y = g(u, v)$, la différentielle de A doit rester la même. On a donc égalité des deux lignes ci-dessous :

$$dA = \frac{\partial A}{\partial u} \Big|_v du + \frac{\partial A}{\partial v} \Big|_u dv \quad (\text{F.13})$$

$$dA = \frac{\partial A}{\partial x} \Big|_y dx + \frac{\partial A}{\partial y} \Big|_x dy \quad (\text{F.14})$$

Les différentielles de x et y sont :

$$dx = \frac{\partial x}{\partial u} \Big|_v du + \frac{\partial x}{\partial v} \Big|_u dv \quad (\text{F.15})$$

$$dy = \frac{\partial y}{\partial u} \Big|_v du + \frac{\partial y}{\partial v} \Big|_u dv \quad (\text{F.16})$$

En remplaçant ces expressions dans l'équation F.14, on obtient:

$$dA = \left(\frac{\partial A}{\partial x} \Big|_y \frac{\partial x}{\partial u} \Big|_v + \frac{\partial A}{\partial y} \Big|_x \frac{\partial y}{\partial u} \Big|_v \right) du + \left(\frac{\partial A}{\partial x} \Big|_y \frac{\partial x}{\partial v} \Big|_u + \frac{\partial A}{\partial y} \Big|_x \frac{\partial y}{\partial v} \Big|_u \right) dv \quad (\text{F.17})$$

En comparant avec l'équation F.13, on obtient la relation de changement de variable:

$$\frac{\partial A}{\partial u} \Big|_v = \frac{\partial A}{\partial x} \Big|_y \frac{\partial x}{\partial u} \Big|_v + \frac{\partial A}{\partial y} \Big|_x \frac{\partial y}{\partial u} \Big|_v \quad (\text{F.18})$$

$$\frac{\partial A}{\partial v} \Big|_u = \frac{\partial A}{\partial x} \Big|_y \frac{\partial x}{\partial v} \Big|_u + \frac{\partial A}{\partial y} \Big|_x \frac{\partial y}{\partial v} \Big|_u \quad (\text{F.19})$$

Ces relations serviront à plusieurs reprises dans le calcul de la nouvelle équation d'état .

Annexe G

Rappels d'électromagnétisme

On souhaite juste ici mettre à disposition les quelques relations de base de l'électromagnétisme qui sont nécessaires au chapitre 4. Le champ électromagnétique dans la matière est défini en général par plusieurs jeux d'équations.

G.1 Equations constitutives

Elles prennent en compte les propriétés de la matière:

$$\vec{D} = [\epsilon]\vec{E} \quad (\text{G.1})$$

$$\vec{B} = [\mu]\vec{H} \quad (\text{G.2})$$

$$\vec{J} = [\sigma]\vec{E} \quad (\text{G.3})$$

G.2 Equations de base

Les équations de Maxwell du champs électromagnétique sont:

$$\text{div}(\vec{B}) = 0 \quad (\text{G.4})$$

$$\text{div}(\vec{D}) = \rho \quad (\text{G.5})$$

$$\text{rot}(\vec{E}) + \frac{d\vec{B}}{dt} = \vec{0} \quad (\text{G.6})$$

$$\text{rot}(\vec{H}) \perp \frac{d\vec{D}}{dt} = \vec{J} \quad (\text{G.7})$$

Le champ est défini à partir des potentiels scalaire et vecteur de la façon suivante:

$$B = \text{rot}(\vec{A}) \quad (\text{G.8})$$

$$E = -\vec{\nabla}\Phi \perp \frac{d\vec{A}}{dt} \quad (\text{G.9})$$

G.3 Equations dérivées

Les relations de Maxwell contiennent toutes les informations sur le champs. En particulier: Une équation de conservation de la charge en prenant la divergence de G.7:

$$\frac{d\rho}{dt} + \text{div}(\vec{J}) = 0 \quad (\text{G.10})$$

Une équation de conservation de l'énergie évaluant le travail $\vec{E} \cdot \vec{J}$:

$$\frac{d\epsilon}{dt} + \text{div}(\vec{\Sigma}) = \perp \vec{E} \cdot \vec{J} \quad (\text{G.11})$$

$$\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\vec{E} \cdot \vec{D} + \vec{B} \cdot \vec{H}) \quad (\text{G.12})$$

$$\Sigma \stackrel{\text{def}}{=} \vec{E} \wedge \vec{H} \quad (\text{G.13})$$

Les équations de propagation en introduisant dans les équations de Maxwell la définition des potentiels et un choix de jauge:

$$\Delta \vec{A} \perp \epsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{A}}{dt^2} = \perp \mu \vec{J} \quad (\text{G.14})$$

$$\Delta \Phi \perp \epsilon \mu \frac{\partial^2 \Phi}{dt^2} = \perp \frac{\rho}{4\pi \epsilon} \quad (\text{G.15})$$

$$\frac{d\Phi}{dt} + \epsilon \mu \text{div}(\vec{A}) = 0 \quad (\text{G.16})$$

Leurs solutions, les potentiels retardés, sont:

$$\Phi(\vec{r}, t) = \int |\vec{r} \perp \vec{x}|^{\perp 1} \rho \left(\vec{x}, t \perp \frac{|\vec{r} \perp \vec{x}|}{v} \right) dV \quad (\text{G.17})$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = c \int |\vec{r} \perp \vec{x}|^{\perp 1} \vec{J} \left(\vec{x}, t \perp \frac{|\vec{r} \perp \vec{x}|}{v} \right) dV \quad (\text{G.18})$$

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon \mu}} \quad (\text{G.19})$$