



HAL
open science

Turbulence dans la nébuleuse solaire primitive et formation du système solaire externe

F. Hersant

► **To cite this version:**

F. Hersant. Turbulence dans la nébuleuse solaire primitive et formation du système solaire externe. Astrophysique [astro-ph]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2002. Français. NNT : . tel-00316082

HAL Id: tel-00316082

<https://theses.hal.science/tel-00316082>

Submitted on 2 Sep 2008

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.

Ecole Doctorale d'Astronomie - Astrophysique d'Ile de France
Université Paris 7 Denis Diderot

THESE

présentée pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université Paris 7
Spécialité Astrophysique

par

Franck Hersant

Turbulence dans la nébuleuse solaire primitive et formation du système
solaire externe

Soutenue le 23 Octobre 2002 devant le Jury composé de

Jean-Paul Zahn *Président*

Wolfgang Duschl *Rapporteur*

Joel Sommeria *Rapporteur*

Pierre-Henri Chavanis *Examineur*

Marcello Fulchignoni *Examineur*

Alessandro Morbidelli *Examineur*

François Robert *Examineur*

Bérengère Dubrulle *Directeur de Thèse*

Daniel Gautier *Directeur de Thèse*

Laboratoire d'Etudes Spatiales et d'Instrumentation en Astrophysique,
Observatoire de Paris

Groupe Instabilités et Turbulence, Service de Physique de l'Etat Condensé,
Commissariat à l'Énergie Atomique - Saclay

Service d'Astrophysique,
Commissariat à l'Énergie Atomique - Saclay



A la mémoire de Thomas

Remerciements

La vie se divise en quatre parties variables en durée : l'ignorance, la croyance, la connaissance et la sagesse. Cependant, après l'ignorance arrive un dur combat entre conviction et connaissance donnant souvent lieu à deux possibilités antagonistes : certains croient plus qu'ils ne savent, aussi appelés *convaincus*, d'autres savent plus qu'ils ne croient, les *savants*. M'échappant à peine de l'ignorance la plus totale, je fais malheureusement partie du premier cas. Alors, cette thèse n'aurait jamais vu le jour sans l'aide de quelques personnes que je souhaiterais remercier ici.

D'abord, je souhaiterais remercier mes différents laboratoires d'accueil, qui m'ont toujours donné les moyens de réaliser mes travaux et de les diffuser largement : le DESPA sous la direction de Thérèse Encrenaz, le Service d'Astrophysique du CEA sous la direction de Laurent Vigroux puis Pierre-Olivier Lagage, le LESIA sous la direction de Jean-Louis Bougeret et le Groupe Instabilités et Turbulence sous la direction de François Daviaud. Merci à tous de m'avoir adopté.

J'ai eu la chance d'être encadré par deux *savants* dont la connaissance et la sagesse ne sont contestées que par eux-mêmes (et quelques *convaincus*) : Bérengère Dubrulle et Daniel Gautier. Sans eux, ces quelques lignes et les 200 pages qui suivent seraient à jamais restées dans mes rêves. Chers patrons, merci du fond du coeur.

Bien que Jean-Marc Huré n'ait jamais été mon chef et ne se soit jamais considéré comme tel, je le considère comme mon troisième directeur de thèse. Jean-Marc, merci pour tout.

Sur la route semée d'embûches qui mène à ce dernier diplôme universitaire, j'ai eu la chance de croiser quelques enseignants qui ont eu une importance toute particulière. Je souhaiterais remercier en particulier Messieurs Gilles et Laustriat qui m'ont enseigné le peu de rigueur que j'ai aujourd'hui.

Merci à Jean-Paul Zahn de m'avoir fait l'honneur d'accepter la présidence de mon jury. Merci à Wolfgang Duschl et Joël Sommeria d'avoir accepté de rapporter ma thèse. Merci à Pierre-Henri CHavanis, Marcello Fulchignoni, Alessandro Morbidelli et François Robert d'avoir accepté le travail ingrat d'examineur de mon travail. Si un jury de thèse peut ressembler par certains aspects à un jury de tribunal, il existe une différence majeure : outre me juger vous m'avez conseillé, vous m'avez aidé à améliorer ce travail. Dans ce manuscrit, il y a un peu de vous tous.

J'ai durant ces dernières années rencontré certaines personnes qui ont eu des rôles divers : Chantal Balkowski, Bruno Bézard, Richard Binzel, Mirel Birlan, Dominique

Bockelée-Morvan, Daniel Bonamy, Sébastien Charnoz, Laurent Chemin, Arnaud Chiffaudel, Olivier Dauchot, Anne-Marie Dumont, Hector Florès, Cécile Gasquet, Françoise Gaulier, Roland Grappin, Nicolas Iro, Toshiro Kawaguchi, Jean-Philippe Laval, Jacques Léorat, Nicolas Leprovost, Lopes, Jonathan Lunine, Louis Marié, Martine Mouchet, Olivier Mousis, Vincent Padilla, Christian Paris, Laurent Piau, Arnaud Prigent, Marie-Rose Rama Rao, Daniel Sheehan, Paolo Tanga, Geneviève Thiéry, Jacqueline Thouvy et Loïc Villain. Merci à tous et excusez-moi de vous avoir mis dans une liste alphabétique, vous ne le méritez pas....

Une thèse ne se limite pas aux heures de bureau. Ainsi, outre les sociétés Guinness, Malboro et Kawasaki que j'ai déjà remercié financièrement, je souhaiterais remercier ma famille, qui m'a toujours suivi et soutenu, ainsi que Stan Leroy, Jérôme Laheurte, Benoit Coasne, Mila Hersant (mon cousin), Vanessa Moreau, Emmanuel Galliano, Sébastien Foucaud, Franck Le Petit, Stéphanie Courty, Denis Richard et Régis Courtin, mes amis qui m'ont permis de ne pas oublier qu'il y a une vie après la nébuleuse...

Bien que je doive par tradition être l'unique auteur de cette thèse, il est clair pour moi que ce n'est pas le cas et que cette thèse, vous l'avez tous écrite un peu. Nous pourrions alors nous référer à ce manuscrit comme écrit par "Hersant et al."

Resumé

La turbulence est un phénomène physique majeur de la formation du système solaire. Malheureusement, la simulation numérique d'un fluide astrophysique réaliste est hors de portée des meilleurs super-calculateurs actuels. Pour surmonter cet écueil, on a généralement recours à des modèles qui permettent de réduire le nombre de degrés de liberté du problème. Nous avons utilisé une approche traditionnelle, de type champ moyen avec viscosité turbulente, pour identifier les phénomènes physiques directeurs de la formation du système solaire externe. En utilisant le fractionnement isotopique du rapport D/H entre l'eau et l'hydrogène moléculaire, nous avons déterminé avec précision les conditions thermodynamiques sous-jacentes à la formation des comètes et des planètes géantes. En particulier, nous avons pu reproduire les mesures actuelles sur la composition élémentaire des planètes géantes. Cependant, les objets du système solaire externe montrent une grande disparité de compositions qui semble être intimement liée aux fluctuations turbulentes dans la nébuleuse solaire primitive. Ces fluctuations étant explicitement évincées de l'approche traditionnelle, nous devons développer un modèle les prenant en compte. Les fondements théoriques d'un tel modèle ont été définis, puis appliqués à un écoulement cisailé simple : l'écoulement de Couette plan.

Abstract

Turbulence is a major physical process of the solar system formation. However, its direct numerical simulation by available computers remains impossible, due to the dramatic range of dynamical scales in the flow. To circumvent this difficulty, a model enabling an effective reduction of the degrees of freedom of the problem is actually used. For accretion disks it is classically done by calculating only the mean quantities of the flow and parameterizing the fluctuations with a turbulent viscosity. We have used this approach to isolate the main physical processes governing the whole process of planetary formation. By using the constraint relying in the D/H fractionation between water and hydrogen, we have precisely defined the thermodynamical properties of the solar nebula in which comets and giant planets formed. Especially, we have been able to interpret current observational data on giant planets composition. However, the outer solar system bodies exhibit a large variety in their compositions which seems closely related to turbulent fluctuations in the solar nebula. Since fluctuations are explicitly excluded from the standard approach, it seems necessary to develop a new model in which they are calculated. The theoretical basis of such model has been defined and applied to the simplest shear flow : the plane Couette flow.

Table des matières

1	Introduction : turbulence dans la nébuleuse solaire primitive ?	11
1.1	Système solaire et nébuleuse solaire primitive	11
1.2	Nébuleuse solaire primitive et disques circumstellaires	12
1.3	Les disques sont-ils turbulents ?	14
1.3.1	Tests observationnels	14
1.3.2	Justification théorique	17
1.4	Une approche turbulente pour les disques	21
2	Modéliser la turbulence : pourquoi et comment ?	23
2.1	Le paradigme de la turbulence	23
2.2	Relations de fermeture : méthodes explicites	26
2.2.1	Viscosité turbulente : le concept de séparation d'échelles	26
2.2.2	Quelques exemples de viscosités turbulentes	28
2.2.3	Qualités et défauts des viscosités turbulentes	30
2.3	Distorsion Rapide : méthode implicite	31
2.3.1	Principe	32
2.3.2	Validité	33
2.3.3	Formalisme général	38
3	Un modèle de champ moyen stationnaire pour la nébuleuse solaire primitive	43
3.1	Une approche de champ moyen pour les disques d'accrétion	43
3.1.1	Quelle longueur de mélange ?	43
3.1.2	Solutions stationnaires	44
3.1.3	Une pseudo-dépendance en temps	53
3.2	Calibration du modèle	54
3.2.1	Fractionnement du rapport D/H : l'essence de la contrainte	55
3.2.2	Le rapport D/H dans le système solaire	55
3.2.3	Chimie isotopique du rapport D/H en milieu turbulent	57
3.2.4	Contraintes additionnelles	59
3.2.5	Application du formalisme au modèle	60
3.3	Influence du traitement de l'advection	62
4	Formation du système solaire externe	67
4.1	Piégeage des éléments lourds	68

4.1.1	Piégeage des éléments volatils sous forme de clathrate-hydrates . . .	68
4.1.2	Enrichissement dynamique des éléments lourds	73
4.2	Application à la formation des planètes géantes	75
4.2.1	Une formation en trois étapes	76
4.2.2	Minoration du moment de l'effondrement : le concept "d'anneau réservoir"	76
4.2.3	Composition atomique de Jupiter	80
4.2.4	Composition atomique de Saturne	83
4.2.5	Le cas d'Uranus et Neptune	85
4.2.6	Quelques Remarques	87
4.3	Application à la formation des comètes	87
4.4	Le cas des comètes de Kuiper	89
4.5	Conclusions	90
5	Un nouveau modèle turbulent pour les écoulements cisailés	93
5.1	Principe de la SES	93
5.1.1	Implémentation	93
5.2	Écoulement de Couette plan	96
5.2.1	Généralités	96
5.2.2	Simulation SES de l'écoulement	99
5.3	Écoulements en rotation différentielle	101
5.3.1	Cas incompressible : l'écoulement de Couette-Taylor	101
5.4	Une analogie entre la convection en présence d'un cisaillement et l'écou- lement de Couette-Taylor	104
6	Conclusion et perspectives	107
A	Non locality of scale interactions in turbulent shear flows	109
B	A two-dimensional model for the primordial nebula constrained by D/H measu- rements in the solar system : Implications for the formation of giant planets	117
C	Turbulent radial mixing in the solar nebula as the source of crystalline silicates in comets	135
D	Enrichments in volatiles in Jupiter : A new interpretation of the Galileo measure- ments	149
E	Erratum : Enrichments in volatiles in Jupiter : A new interpretation of the Galileo measurements	155
F	An interpretation of the Nitrogen deficiency in comets	157
G	Momentum transport and torque scaling in Taylor-Couette flow from an analogy with turbulent convection	209

Chapitre 1

Introduction : turbulence dans la nébuleuse solaire primitive ?

Ce manuscrit s'articule autour de l'étude du rôle de la turbulence dans la formation du système solaire, de l'identification de ses caractéristiques principales et de la recherche d'une approche adéquate pour la modéliser.

Ce premier chapitre a pour but d'exposer la vision actuelle de la formation du système solaire, du concept de nébuleuse solaire primitive, de son origine et de ses propriétés. Ainsi deux questions seront abordées ici : qu'est-ce que la nébuleuse solaire primitive ? Pourquoi est-elle turbulente ?

1.1 Système solaire et nébuleuse solaire primitive

Le concept de nébuleuse solaire primitive a été introduit d'abord par Kant (1755) puis par Laplace (1796). Ils avaient remarqué que la presque parfaite coplanarité des planètes du système solaire semblaient indiquer que ces planètes provenaient d'un disque. Laplace lui donna son nom : nébuleuse solaire primitive. Ils s'étaient inspirés de Descartes (1644) qui avait déjà imaginé que les étoiles, comme les planètes se formaient dans de grands tourbillons (qui pour lui faisaient le lien entre la matière et l'éther).

L'extraordinaire clairvoyance de ces pères fondateurs suscite notre admiration et il n'y a en définitive presque rien à y ajouter. Ils avaient déjà compris que ce disque de gaz et de poussières évoluait et en se refroidissant permettait aux différents éléments chimiques de se condenser pour construire les briques des planètes.

Jusqu'au début des années 1990, aucune preuve directe ne fut avancée quand à l'existence passée de la nébuleuse. Pourtant la crédibilité de ce scénario fut renforcée grâce à l'observation des environnements circumstellaires par des télescopes modernes.

1.2 Nébuleuse solaire primitive et disques circumstellaires

On se rendit alors compte que environ 80% des étoiles jeunes étaient entourées d'un disque de matière assez dense. Il était alors logique de penser que la nébuleuse ne fût qu'un disque parmi d'autres et de rechercher des indices sur sa structure en étudiant les disques autour d'étoiles jeunes.

Jusqu'à il y a une dizaine d'années, les disques autour d'étoiles jeunes n'étaient observés que de façon très indirecte :

- Pour expliquer les profils de raie de type P Cygni inverse ainsi que l'excès ultraviolet des étoiles YY Orionis, Walker (1972) fut le premier à proposer l'existence d'un disque circumstellaire autour de ces étoiles.
- Lynden-Bell and Pringle (1974) proposèrent que l'excès du continuum des étoiles T Tauri pouvait être expliqué par la présence d'un disque d'accrétion turbulent. La confirmation de cette hypothèse ne vint qu'avec l'avènement des satellites IRAS (satellite infrarouge) et IUE (satellite ultraviolet) vers les années 1985.

Bien que de nombreux travaux aient supposé l'existence des disques circumstellaires et aient pu dans une certaine mesure les caractériser, il fallut attendre les années 1990 pour qu'ils soient observés directement. Les figures 1.1 et 1.2 montrent deux images de disques circumstellaires vus par la tranche.

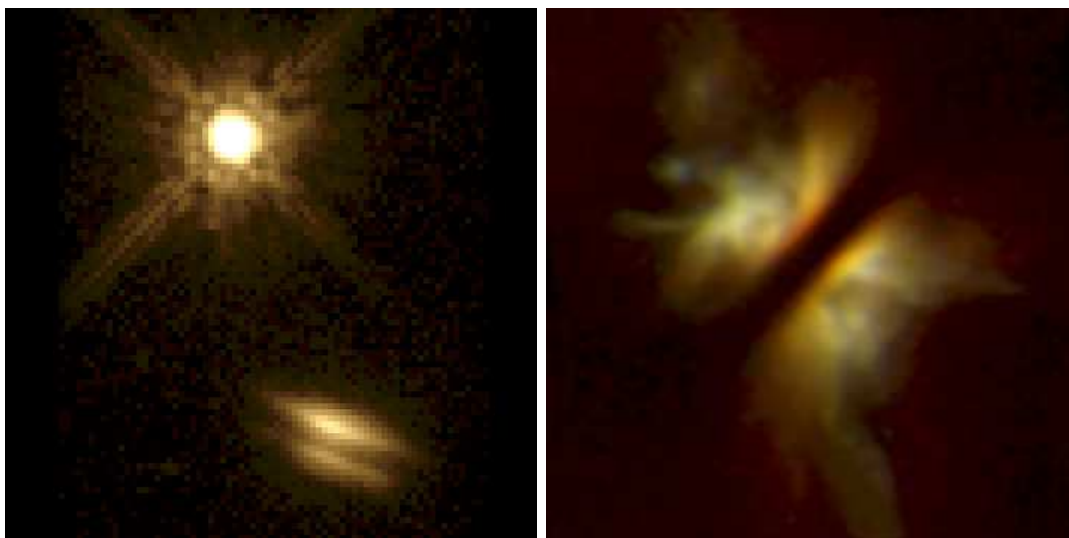


FIG. 1.1 – Image du disque de HK Tau vu par la tranche par la caméra grand champ du télescope spatial.
 FIG. 1.2 – Image du disque de IRAS 04302+2247 vu par la tranche par le télescope spatial.

Ces disques ont une taille comprise entre 100 et 1000 unités astronomiques (UA). Sachant qu'ils sont généralement situés dans le nuage du Taureau, situé à 150 parsec du système solaire, la puissance actuelle des moyens d'observation dont nous dispo-

sons permet de les résoudre spatialement¹. Par exemple le télescope spatial, qui a une résolution de l'ordre de 0.04 secondes d'arc ce qui correspond à cette distance à 6 unités astronomiques, a pu fournir les images parfaitement résolue des figures 1.1 et 1.2. Ces estimations sont bien sur à nuancer par le fait que le disque est beaucoup moins brillant que l'étoile centrale et donc sans coronographie, les régions centrales sont inobservables. De plus les longueurs d'onde accessibles au télescope spatial ne permettent pas de sonder l'intérieur du disque.

Néanmoins, les disques circumstellaires sont résolus spatialement et certaines propriétés de ces disques ont pu être déduites. Il existe en particulier deux approches principales permettant d'en estimer la structure radiale :

- Dans les longueurs d'onde visibles les images (celles des figures 1.1 et 1.2 par exemple) montrent la lumière diffusée par la surface du disque. La reproduction synthétique de ces images permet d'obtenir de puissantes contraintes sur la structure radiale de la densité dans le disque.
- Les raies rotationnelles de CO observées aux longueurs d'onde millimétriques permettent de sonder le disque en profondeur. Il est possible, à partir du décalage Doppler de ces raies et de leurs profils mesurés en différents points de l'espace, d'utiliser une méthode d'inversion pour tirer de nombreuses informations sur la structure radiale du disque dans les régions externes (au delà de 100 unités astronomiques) : profil de vitesse angulaire, de densité et de température. Cette méthode a en particulier permis de démontrer que le profil de vitesse angulaire est keplerien dans les région externes de plusieurs disques circumstellaires.

Ces deux méthodes sont basées sur des méthodes d'inversion impliquant un grand nombre de paramètres et le risque est toujours présent de trouver un minimum local dans l'espace de ces paramètres qui ne soit pas la solution réelle. Elles ont néanmoins permis d'apporter de précieuses contraintes sur la structure des disques circumstellaires. La table 1.1 montre quelques résultats de ces observations.

	p	β	q	Référence
HH 30	0.75	1.45		Burrows et al. (1996)
HK Tau	0.3 – 1.5	1.2		Stapelfeldt et al. (1998)
GG Tau	1.5	1.25	0.5	Dutrey et al. (1994)
DM Tau	~ 1.5	1.26	0.63	Guilloteau and Dutrey (1998)
GM Aur	1.57	1.18	0.64	Dutrey et al. (1998)

TAB. 1.1 – Structure radiale de quelques disques circumstellaires, où la densité surfacique suit la loi $\Sigma \propto R^{-p}$ où R est le rayon, l'épaisseur du disque la loi $H \propto R^\beta$ et la température la loi $T \propto R^{-q}$.

Ces mesures permettent en outre de connaître quelques caractéristiques physiques des disques circumstellaires. En particulier Guilloteau and Dutrey (1998) ont mesuré que

¹Une résolution angulaire d'une seconde d'arc se traduit par une résolution spatiale de 150 unités astronomiques pour un objet situé à 150 parsec.

la densité numérique de molécules suivait la loi :

$$n(R) = 10^8 \left(\frac{R}{100 \text{ UA}} \right)^{-2.75} \text{ cm}^{-3} \quad (1.1)$$

Sachant que le libre parcours moyen est donné par $\lambda = 1/(n\sigma)$ où σ est la section efficace de collision dans le gaz, en prenant une valeur typique $\sigma \simeq 10^{-16} \text{ cm}^2$ nous pouvons en déduire que le libre parcours moyen est de l'ordre de :

$$\lambda \simeq 10^{-5} \left(\frac{R}{100 \text{ UA}} \right)^{2.75} \text{ UA} \quad (1.2)$$

Sachant que l'échelle caractéristique de l'écoulement est de l'ordre de 1 UA , cela permet d'assurer que le nombre de Knudsen Kn défini par le rapport du libre parcours moyen aux échelles caractéristique de l'écoulement, est toujours plus petit que 1. Il atteint péniblement 10^{-2} à 1000 UA de l'étoile. Ceci permet de déduire que les disques circumstellaires sont *fluides*, ce qui n'était pas évident *a priori*².

Un autre résultat intéressant de Guilloteau and Dutrey (1998) est leur estimation du nombre de Mach turbulent. Ils ont en effet pu, en étudiant les profils des raies de CO , estimer la part thermique et la part non thermique de l'élargissement Doppler et on trouvé que le nombre de Mach dans les régions externes du disque est de l'ordre de $0.2 - 0.3$. Sachant que la température décroît avec la distance à l'étoile, cela permet de savoir que l'écoulement a un comportement *incompressible* dans les régions internes et qu'il ne devient *faiblement compressible* qu'après une centaine d'unités astronomiques.

1.3 Les disques sont-ils turbulents ?

La turbulence est un ingrédient communément admis de la physique des disques circumstellaires. Elle permet d'interpréter les excès de luminosité Lynden-Bell and Pringle (1974) et les échelles de temps d'évolution (Hartmann et al. 1998). Son utilité ne démontrant pas son existence, nous verrons ici les preuves observationnelles et théoriques de son existence plus en détail.

1.3.1 Tests observationnels

Les tests observationnels de l'existence de la turbulence dans les disques sont souvent très indirects et ne peuvent être considérés comme des preuves que si une modélisation réaliste et poussée accompagne l'intuition. Un bon exemple est l'excès infrarouge des étoiles T Tauri. Traditionnellement considéré comme la conséquence de la turbulence dans le disque (Lynden-Bell and Pringle 1974), cet excès est parfaitement explicable par une illumination d'un disque (éventuellement non-turbulent) par

²Remarquons tout de même que bien que le disque soit fluide, le libre parcours moyen du gaz à 100 UA de l'étoile est de l'ordre du millier de km !

l'étoile centrale (Chiang and Goldreich 1997).

Une des rares preuves directes que nous puissions retenir est la mesure précédemment évoquée d'une dispersion de vitesse non-thermique dans les disques circumstellaires (voir par exemple Guilloteau and Dutrey (1998)). Cette dispersion de vitesse peut être considérée comme une preuve de l'existence de la turbulence dans les régions externes de certains disques.

Cela ne résout pas le problème de son existence dans les régions internes, régions où les planètes sont supposées s'être formées. Ces régions sont responsables de l'excès de luminosité des étoiles T Tauri dans les longueurs d'onde visibles et ultraviolettes. Cette zone est la zone d'interaction des régions internes du disque avec l'étoile si le disque n'est pas magnétisé ou avec le champ magnétique stellaire si le disque est ionisé. Dans cette région le champ de vitesse du disque se raccorde à la vitesse de rotation de l'étoile par une couche limite. Une manifestation de l'existence de cette couche limite est l'excès de flux aux longueurs d'onde UV. Notons que certains disques ne présentent pas cet excès UV. Il faut alors imaginer un autre moyen de raccorder l'étoile et le disque. Une possibilité serait d'invoquer un fort champ magnétique dont les lignes de champ ancrées dans le disque l'entraîneraient de manière inertielle. Dans tous les cas, l'interaction disque/étoile se manifeste par une luminosité appelée luminosité d'accrétion qui peut s'exprimer par :

$$L = \frac{GM_*\dot{M}}{2R_*} \quad (1.3)$$

où M_* est la masse de l'étoile, R_* le rayon interne de cette zone d'interaction (le rayon de l'étoile dans le cas d'un disque non magnétisé) et \dot{M} le taux d'accrétion observationnel (déterminé à partir de la luminosité et de cette relation, voir Hartigan et al. (1995)). Cette luminosité est, dans l'état stationnaire, égale à la création d'énergie interne par dissipation visqueuse dans la couche limite. Dubrulle and Hersant (2002) ont montré que, dans le cas d'une couche limite, elle pouvait s'exprimer par :

$$\frac{L}{\tilde{L}} = 0.5 \frac{1}{\left(\ln[10^{-4} Re^2]\right)^{3/2}} \quad (1.4)$$

où $\tilde{L} = \Sigma R_*^4 \Omega_*^3$ et $Re = R_*^2 \Omega_* / \nu$, où Ω_* est la vitesse angulaire de l'étoile et ν la viscosité moléculaire du disque. Cette relation peut être réécrite en terme de taux d'accrétion en utilisant la relation 1.3 :

$$\frac{\dot{M}}{\tilde{M}} = 0.5 \frac{1}{\left(\ln[Re^2 10^{-4}]\right)^{3/2}} \quad (1.5)$$

où

$$\begin{aligned} \tilde{M} &= 2 \frac{R_* \tilde{L}}{GM_*} = 2 \frac{\Sigma R_*^5 \Omega_*^3}{GM_*} \\ &= 2.8 \times 10^{-6} M_\odot yr^{-1} \left(\frac{n_*}{10^{19} cm^{-3}}\right) \left(\frac{\Omega_*}{9 \times 10^{-6} s^{-1}}\right)^3 \left(\frac{R_*}{10^{11} cm}\right)^6 \left(\frac{M_\odot}{M_*}\right) \frac{H_*}{r_*}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Re &= \frac{R_*^2 \Omega_*}{\nu} \\
&= 9 \times 10^{13} \left(\frac{n_*}{10^{19} \text{cm}^{-3}} \right) \left(\frac{\Omega_*}{9 \times 10^{-6} \text{s}^{-1}} \right) \left(\frac{R_*}{10^{11} \text{cm}} \right)^2 \left(\frac{T_*}{10^4 \text{K}} \right)^{-1/2}
\end{aligned} \tag{1.6}$$

où :

n_* est la densité numérique de particules à R_* (valeur typique : 10^{19}cm^{-3}).

T_* est la température à R_* (valeur typique : 10^4K)

H_* est l'épaisseur du disque à R_* (valeur typique : $0.1 R_*$)

Ces valeurs peuvent être obtenues en extrapolant les mesures de Guilloteau and Dutrey (1998) jusqu'à R_* , mais restent des valeurs classiques trouvées par les modèles.

Une étoile T Tauri typique a une période de rotation de 7 jours (Bouvier et al. 1997), un rayon de $3 R_\odot$ et une masse de $0.5 M_\odot$ (Hartmann et al. 1997). Pour ce calcul nous supposons que le disque n'est pas magnétisé. L'application numérique de l'équation 1.5 donne alors :

$$\dot{M}_{typique} = 8 \times 10^{-8} M_\odot / \text{an} \tag{1.7}$$

pour un H_*/R_* typique de 0.1. Ce résultat est en très bon accord avec les taux d'accrétion typiques mesurés dans les étoiles T Tauri classiques qui sont de $10^{-7} M_\odot / \text{an}$.

Le nombre de Reynolds peut également être calculé à partir de ces paramètres typiques. De l'ordre de 10^{14} dans les régions les plus internes du disque, il suit une loi en $R^{-2.45}$, est de l'ordre de 10^6 à 1 unité astronomique et chute à 50 à 100 unités astronomiques.

Cette comparaison avec les couches limites turbulentes permet d'expliquer les luminosités moyennes observées dans les étoiles pré-séquence principale. Jusqu'ici nous nous sommes concentrés sur la luminosité moyenne des disques circumstellaires. Pourtant cette luminosité fluctue et ces fluctuations de luminosité peuvent apporter des informations importantes sur leur origine.

Ces fluctuations sont la contrepartie naturelle des fluctuations de dissipation d'énergie observées dans tout fluide turbulent. Ces fluctuations ont été étudiées en détail dans l'écoulement de Couette-Taylor (écoulement entre deux cylindres coaxiaux en rotation indépendante, dans le cas où le cylindre extérieur est au repos) par Lathrop et al. (1992). Ils ont trouvé que la statistique des fluctuations est log-normale et que ce comportement est universel, c'est-à-dire qu'il ne dépend pas du nombre de Reynolds.

Les figures 1.3 et 1.4 montrent conjointement les statistiques des fluctuations de luminosité respectivement de l'étoile Fu Ori V Cyg et de l'étoile T Tauri BP Tau comparées aux statistiques des fluctuations de puissance dissipée dans l'expérience de Lathrop et al. (1992).

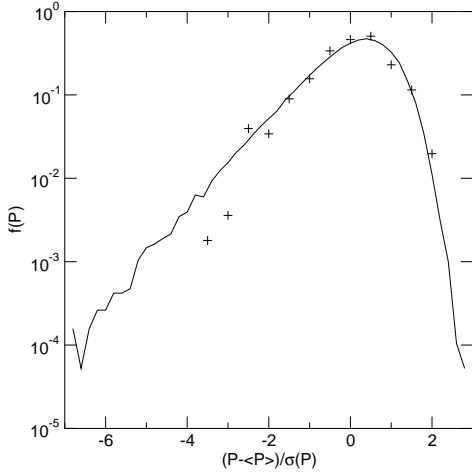


FIG. 1.3 – Statistiques des fluctuations : de luminosité de l'étoile Fu Ori V1057 Cyg (croix) et de puissance dissipée dans l'expérience de Lathrop et al. (1992)

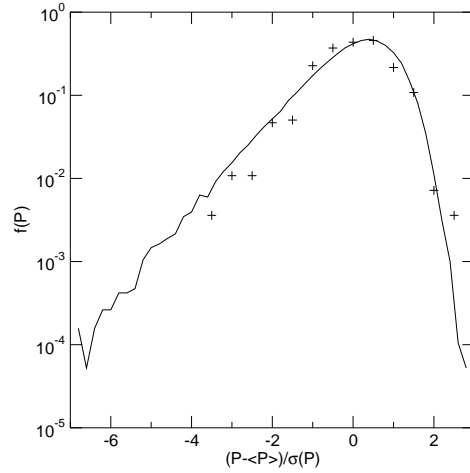


FIG. 1.4 – Statistiques des fluctuations : de luminosité de l'étoile T Tauri BP Tau (croix) et de puissance dissipée dans l'expérience de Lathrop et al. (1992)

Ces figures montrent que même les fluctuations de luminosité des étoiles jeunes ont un comportement très semblable aux couches limites turbulentes dans l'écoulement de Couette-Taylor. Le caractère log-normale des fluctuations dans les régions internes des disques a déjà été observé par Li and Fenimore (1996) et Negoro and Mineshige (2002) dans le cas de disques autour de trous noirs.

La similitude entre la turbulence dans les disques circumstellaires et celle dans l'écoulement de Couette-Taylor avait déjà été remarquée par Richard and Zahn (1999), qui l'ont utilisée pour contraindre le transfert turbulent de moment cinétique.

1.3.2 Justification théorique

Un pré-requis nécessaire de la turbulence est l'existence d'un mécanisme d'instabilité. Dans le cas présent nous supposons que l'état de base laminaire est keplerien (j'invite le lecteur à se reporter au chapitre 3 pour la justification). A l'heure actuelle au moins trois mécanismes d'instabilité ont été identifiés, deux faisant intervenir des mécanismes linéaires et un basé sur des perturbations d'amplitude finie. Cette section résume les études récentes sur la stabilité d'un écoulement laminaire keplerien dans différents cas.

Stabilité linéaire de l'écoulement keplerien incompressible

La stabilité linéaire des écoulements en rotation différentielle a été étudiée au début du siècle dernier par Rayleigh (1916). On entend par stabilité linéaire la stabilité

d'un écoulement soumis à une perturbation infinitésimale.

Notons $\Omega = \sqrt{GM/R^3}$ la vitesse angulaire keplerienne, u , v et w les trois composantes de la vitesse de la perturbation et p la perturbation de pression. La perturbation obéit à l'équation de Navier-Stokes linéarisée en coordonnées cylindriques :

$$\partial_t u + \Omega \partial_\phi u - 2\Omega v = -\partial_R p + \nu \Delta u \quad (1.8)$$

$$\partial_t v + \Omega \partial_\phi v + \frac{u}{R} \partial_R (R^2 \Omega) = -\frac{1}{R} \partial_\phi p + \nu \Delta v \quad (1.9)$$

$$\partial_t w + \Omega \partial_\phi w = -\partial_z p + \nu \Delta w \quad (1.10)$$

$$\frac{1}{R} \partial_R (Ru) + \frac{1}{R} \partial_\phi v + \partial_z w = 0 \quad (1.11)$$

où ν est la viscosité moléculaire du fluide et Δ le laplacien vectoriel en coordonnées cylindriques. Les termes faisant intervenir des produits de perturbations ont été négligés. Nous allons calculer la transformation de Fourier de ces équations. Pour ce faire, il faut utiliser l'approximation appelée WKB (ou approximation locale dans la littérature des disques) qui consiste à supposer que la perturbation s'étend sur des échelles spatiales bien inférieures (radialement) à celle du champ de vitesse keplerien, afin que localement, le champ de vitesse keplerien puisse être développé en série entière³. Cela revient à supposer que le nombre d'onde $k_R \gg 1/R$. Si nous définissons la transformation de Fourier par :

$$\hat{f}(\vec{k}) = \int f(\vec{r}) e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} d\vec{r} \quad (1.12)$$

La perturbation dans l'espace de Fourier suit alors (en oubliant les chapeaux) :

$$\begin{aligned} i\omega u - iR\Omega k_\phi u + (R\partial_R \Omega) k_\phi \partial_{k_R} u - 2\Omega v &= ik_r p - \nu(k_r^2 + k_\phi^2 + k_z^2)u \\ i\omega v - iR\Omega k_\phi v + (R\partial_R \Omega) k_\phi \partial_{k_R} v + \frac{1}{R} \partial_R (R^2 \Omega) u &= ik_\phi p - \nu(k_r^2 + k_\phi^2 + k_z^2)v \\ i\omega w - iR\Omega k_\phi w + (R\partial_R \Omega) k_\phi \partial_{k_R} w &= ik_z p - \nu(k_r^2 + k_\phi^2 + k_z^2)w \\ k_r u + k_\phi v + k_z w &= 0 \end{aligned} \quad (1.13)$$

où l'approximation WKB a été appliquée. Définissons la pulsation réduite $\tilde{\omega}$ par :

$$\tilde{\omega} = \omega - R\Omega k_\phi - i\nu(k_r^2 + k_\phi^2 + k_z^2) \quad (1.14)$$

- Modes axisymétriques

Dans le cas des modes axisymétriques, avec $k_\phi = 0$, le système se simplifie. D'abord $\tilde{\omega} = \omega - i\nu(k_r^2 + k_z^2)$. Ensuite en utilisant l'équation en z du système dans l'espace de Fourier, celui ci peut se réécrire :

$$\begin{pmatrix} i\tilde{\omega} & -2\Omega & -i\frac{k_r}{k_z} \tilde{\omega} \\ \frac{1}{R} \partial_R (R^2 \Omega) & i\tilde{\omega} & 0 \\ k_r & 0 & k_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = 0 \quad (1.15)$$

³L'approximation WKB sera développée plus largement au chapitre suivant.

où l'on a exclu les solutions avec $k_z = 0$. Ce système n'admet de solutions que si le déterminant de la matrice est nul, donc si :

$$\tilde{\omega}^2 - 2 \frac{k_z^2}{k^2} \frac{\Omega}{R} \partial_R (R^2 \Omega) = 0 \quad (1.16)$$

où $k^2 = k_r^2 + k_z^2$.

Une condition nécessaire d'instabilité est alors donnée par la condition de négativité de la partie imaginaire de $\tilde{\omega}$, c'est-à-dire :

$$\frac{\Omega}{R} \partial_R (R^2 \Omega) < 0 \quad (1.17)$$

Cette condition est connue sous le nom de critère de Rayleigh et n'est pas vérifiée pour les disques kepleriens.

- Modes non-axisymétriques

Dans ce cas, le système 1.13 ne permet pas d'obtenir simplement une relation de dispersion algébrique pour les modes. Au contraire il s'agit d'un système d'équations différentielles ordinaires et il s'avère que l'approche WKB n'est pas adaptée pour la résolution de ce problème. Une bonne méthode pour résoudre ce problème consiste à considérer la stabilité globale du système (c'est-à-dire qu'on ne se limite pas aux modes locaux). Celle-ci est développée dans Chandrasekhar (1961). Les développements analytiques étant assez longs, je renvoie le lecteur intéressé à la référence précédente et me contenterai de donner le résultat du calcul : *la stabilité linéaire des écoulements incompressibles en rotation différentielle est contrôlée par le critère de Rayleigh* : si il y a instabilité linéaire alors $\partial_R |R^2 \Omega| < 0$.

La condition nécessaire d'instabilité linéaire donnée par le critère de Rayleigh n'est pas vérifiée par l'écoulement keplerien.

Stabilité linéaire en présence d'un "catalyseur"

Le problème est tout autre si le système a un degré de liberté supplémentaire (Michel Tagger, communication personnelle). En effet l'ordre du système augmente et les critères de stabilité en sont fortement modifiés. Nous citerons ici deux exemples assez similaires de modification du critère de stabilité rendant l'écoulement keplerien instable :

- En présence d'un champ magnétique poloïdal faible, le critère d'instabilité devient $\partial_R |\Omega| < 0$, vérifié dans le cas des écoulements kepleriens. Cette instabilité porte le nom d'instabilité de Chandrasekhar-Velikhov (Chandrasekhar 1960, Velikhov 1959, Chandrasekhar 1961). Son application au cas des écoulements keplerien est due à Balbus and Hawley (1991).

- En présence d'une stratification verticale stable et faible, les modes *non-axisymétriques* sont instables si le nombre de Rossby :

$$Ro = \frac{R\partial_R\Omega}{2\Omega} \quad (1.18)$$

vérifie $Ro < -2/3$. Pour comparaison le critère d'instabilité de Rayleigh est $Ro < -1$. L'écoulement keplerien vérifie $Ro = -3/4$ et est donc sujet à cette instabilité linéaire. Cette instabilité fut d'abord découverte par Molemaker et al. (2001), puis appliquée au cas des écoulements kepleriens par Dubrulle et al. (2002). Le critère donné ici est le critère local de Dubrulle et al. (2002), critère ne faisant pas intervenir les bords.

Ces deux instabilité ont toutes deux le même caractère étonnant : elle proviennent de la combinaison de deux effets *stabilisants*. En effet, dans le cas où l'écoulement est sujet à une instabilité centrifuge (obéit au critère de Rayleigh), le champ magnétique et la stratification sont connus pour inhiber l'instabilité (en augmentant les nombres de Reynolds critiques par exemple).

Sans doute parce que surprenantes, ces instabilités n'ont été mises en évidence que récemment. Il reste que ces instabilités ne fournissent pas de réelle information sur les propriétés de la turbulence dans les régions où le nombre de Reynolds est élevé (les régions internes, là où les planètes se sont sans doute formées). En effet l'écoulement à haut nombre de Reynolds a atteint la saturation non-linéaire de ces instabilités linéaires et a subi *au moins* une autre *bifurcation*⁴.

Stabilité non-linéaire des disques

La plupart des écoulements cisailés (Couette plan, Poiseuille plan, Couette-Taylor, ...) sont sujets à des instabilités non-linéaires. Ces instabilités non-linéaires sont difficiles à décrire analytiquement car elles requièrent une perturbation d'amplitude finie ce qui rend non-linéaire l'équation d'évolution de la perturbation (d'où le nom de l'instabilité). Elles sont d'autre part très difficiles à atteindre numériquement car elles apparaissent à des nombres de Reynolds souvent inaccessibles aux plus puissants ordinateurs en fonctionnement aujourd'hui (Ce problème sera décrit au chapitre suivant).

Le cas des écoulements en rotation différentielle (Couette-Taylor, disques circum-stellaires) n'échappe pas à la règle et aucune analyse de stabilité non-linéaire convaincante de ces écoulements n'a jamais été effectuée. Pour ces écoulements dans le cas où l'instabilité linéaire centrifuge n'a pas lieu, seule l'expérience permet de répondre à la question : La turbulence est-elle possible ? Richard (2001) a étudié ce problème par une expérience d'écoulement de Couette-Taylor dans le régime où le profil de moment cinétique est comparable à celui d'un écoulement keplerien (c'est à dire qu'il

⁴Une bifurcation est une transition, analogue aux transitions de phase en thermodynamique, au cours de laquelle l'écoulement passe d'un état devenu instable à un autre. Les instabilités linéaires décrites ici sont des exemples d'instabilités à l'origine de bifurcations (celles-ci sont appelées super-critiques).

n'y a pas d'instabilité linéaire). Il a pu montrer que l'instabilité non-linéaire a lieu à un nombre de Reynolds de environ 2000.

Cette expérience a apporté des informations primordiales pour l'étude de la turbulence dans la nébuleuse solaire primitive :

- Elle montre de façon presque irréfutable que l'écoulement de Couette-Taylor (et donc les disques circumstellaires) est sujet à une instabilité non-linéaire. Ce résultat était déjà communément admis dans la communauté de la dynamique des fluides depuis les travaux de Wendt (1933), mais gardait quelques sceptiques dans la communauté astrophysique.
- Elle a permis d'étudier les propriétés de la turbulence dans un écoulement en rotation différentielle pleinement turbulent, ce que l'étude de stabilité linéaire ne peut pas faire. Malheureusement l'exploitation de ces résultats en vue d'une application aux disques circumstellaires reste à faire à ce jour.

1.4 Une approche turbulente pour les disques

En utilisant les données récoltées sur les disques circumstellaires, nous pouvons maintenant identifier les caractéristiques principales de la nébuleuse solaire primitive. C'est un disque principalement gazeux dont la température évolue pour permettre à certains composants chimiques de se condenser pour faire les briques des planètes actuelles. Ce disque de gaz est fluide et donc obéit aux équations de Navier-Stokes. Nous supposons dans ce manuscrit que le champ magnétique n'a pas d'influence majeure sur la dynamique du gaz. Nous avons pu montrer que ce disque est turbulent, et cette dernière propriété sera le fil conducteur de ce manuscrit.

Nous allons durant ces quelques pages apporter quelques éléments de réponse à la question : Comment modéliser la turbulence dans ce disque ?

Nous verrons dans une première partie le paradigme de la turbulence suivi de quelques grandes méthodes pour y remédier. Une approche de champ moyen est généralement utilisée pour modéliser les disques. Nous la développerons dans une seconde partie, la testerons à la lumière de contraintes observationnelles puissantes et définiront un jeu de paramètres libres en accord avec ces contraintes. Nous l'utiliserons dans une troisième partie pour étudier la formation du système solaire externe et les relations entre la turbulence et la formation planétaire. Cela nous permettra de sonder les limites de la méthode de champ moyen utilisée. La nécessité d'un nouveau modèle pour la turbulence dans les écoulements cisailés devenant pressante, nous verrons dans une dernière partie une approche radicalement différente de la turbulence dans ces écoulements, fondée sur un calcul explicite des fluctuations et des structures turbulentes à petite échelle. Cette méthode, choisie pour son adéquation pour le problème de la formation planétaire dans une nébuleuse turbulente sera dé-

veloppée dans le cas d'un écoulement cisailé simple : l'écoulement de Couette plan. Son extension aux écoulements en rotation différentielle sera formalisée.

Chapitre 2

Modéliser la turbulence : pourquoi et comment ?

Avant de s'intéresser au cas de la turbulence dans la nébuleuse solaire primitive, nous verrons ici pourquoi il faut *modéliser* la turbulence. En effet elle relève d'une physique ancienne dont les équations sont bien connues : il n'y en a qu'une, l'équation de Navier-Stokes. "Pourquoi faut-il modéliser la turbulence ?" est une question naturelle à laquelle ce chapitre a l'ambition de répondre. Ensuite nous verrons dans les grandes lignes comment la turbulence est modélisée, l'accent étant alors plus porté sur les écoulements cisailés.

2.1 Le paradigme de la turbulence

Pour comprendre la problématique de la turbulence et de sa modélisation, nous nous limiterons à l'équation de Navier-Stokes incompressible :

$$\partial_t v_i + \partial_j v_i v_j = -\partial_i p + \nu \partial_j \partial_j v_i \quad (2.1)$$

Où p est un *potentiel de pression* défini par $p = P/\rho$. Il est alors intéressant d'utiliser des variables adimensionnées pour étudier l'importance des différents termes. Pour ce faire, introduisons une échelle de longueur L , une échelle de temps T et donc une échelle de vitesse $U = L/T$. L'équation de Navier-Stokes adimensionnée s'écrit alors :

$$\partial_t v_i + \partial_j v_i v_j = -\partial_i p + \frac{1}{\mathfrak{Re}} \partial_j \partial_j v_i \quad (2.2)$$

Où \mathfrak{Re} est un nombre sans dimensions appelé nombre de Reynolds, défini par : $\mathfrak{Re} = \frac{UL}{\nu}$. Il est important de noter que le nombre de Reynolds est le seul paramètre sans dimension pertinent des écoulements incompressibles et que tout autre paramètre sans dimension que l'on pourrait définir s'exprimerait en fonction du nombre de Reynolds. Cette propriété est à l'origine de la *loi de similitude* (Reynolds 1883) qui peut s'exprimer ainsi : tous les écoulements de même type (même géométrie) ayant le même nombre de Reynolds sont semblables.

Toute tentative de simuler l'équation de Navier-Stokes sur une grille N^3 se retrouve confronté au problème suivant : à partir d'un certain nombre de Reynolds la simulation directe devient impossible. Ce phénomène s'explique très bien en regardant les échelles caractéristiques d'un écoulement turbulent. La plus grande échelle de l'écoulement est la taille caractéristique du système à laquelle on associe le nombre d'onde $k_{min} = 2\pi/L$. La plus petite échelle du système est quant à elle appelée échelle de dissipation (ou échelle de Kolmogorov) dont le nombre d'onde associé peut être relié à k_{min} dans le cas de turbulence homogène et isotrope par $k_{max} \simeq k_{min} \Re^{3/4}$ (Kolmogorov 1941). D'autre part dans une simulation sur une grille N^3 , la plus grande échelle du système est, sauf cas particulier, associée au nombre d'onde k_{min} , alors que la plus petite échelle accessible est donnée par $k_c = k_{min} N/2$. Deux cas sont possibles : soit k_c est plus grand que k_{max} , auquel cas toutes les échelles turbulentes sont résolues, soit k_c est plus petit que k_{max} , auquel cas on ne peut pas résoudre toutes les échelles. Dans le second cas, illustré par la figure 2.1, l'échelle de dissipation, à laquelle la viscosité prend effet, n'est pas résolue. La cascade turbulente d'énergie apporte en permanence de l'énergie à l'échelle k_c où elle n'est pas efficacement dissipée par la viscosité. Elle s'y accumule, induisant une instabilité numérique du code, voire son "explosion" pure et simple.

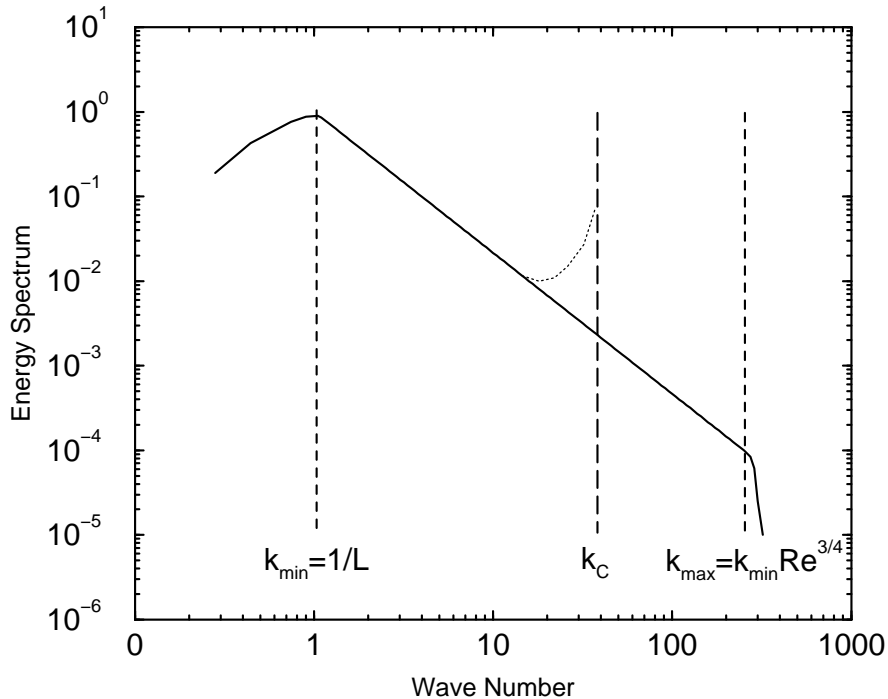


FIG. 2.1 – Spectre d'énergie turbulente de type Kolmogorov en fonction du nombre d'onde (trait plein). Le trait pointillé représente l'accumulation d'énergie à la dernière échelle résolue d'une simulation directe dans le cas où l'on ne résout pas l'échelle de dissipation.

De ces considérations vient la règle : sur une grille N^3 , le nombre de Reynolds maximal accessible par simulation directe est de l'ordre de $\Re_{max} \simeq N^{4/3}$. Sachant que les

plus grandes résolutions accessibles aux super-calculateurs sont de 1024^3 , le plus haut nombre de Reynolds accessible par simulation directe est de l'ordre de 10000 ¹.

A ce stade, le problème peut paraître soluble ! A partir de nombreux disques durs, même un ordinateur personnel familial peut atteindre une capacité mémoire suffisante pour stocker les informations spatiales d'un écoulement à un nombre de Reynolds supérieur à 10000 , au prix d'un ralentissement important de la simulation. La solution serait donc simple si la simulation directe ne se trouvait confrontée à un autre problème : le pas de temps qui doit être plus petit que ν/\bar{v} , doit être adapté au nombre de Reynolds suivant la loi $dt < C_t \Re^{-1/2}$, où C_t est une constante qui dépend de l'algorithme (mais est toujours de l'ordre de 1). Ainsi même avec la résolution spatiale requise pour simuler un écoulement turbulent à haut nombre de Reynolds, le temps de calcul serait prohibitivement long.

Dans le cas des disques circumstellaires, nous avons vu que le nombre de Reynolds dépasse 10^{10} et leur simulation directe est strictement impossible². Ne pouvant simuler toutes les échelles spatiales (et temporelles) de ces écoulements, il est alors nécessaire de faire un choix sur l'information spatio-temporelle à conserver. Faire ce choix revient mathématiquement à filtrer l'écoulement. Ce filtre peut revêtir de nombreuses formes et est directement lié à l'information que l'on souhaite conserver. Par exemple, une approche souvent utilisée consiste à ne conserver que les plus grandes échelles de l'écoulement (approche Large Eddy Simulation ou LES dans la littérature). Alors le filtre sera un filtre passe-bas en fréquences spatiales. Dans la suite nous appellerons cette approche "*approche grandes échelles*". Une autre approche très utilisée consiste à conserver les quantités moyennes d'un écoulement cisailé (approche Reynolds Averaged Navier-Stokes équations ou RANS dans la littérature), le filtre sera alors une moyenne statistique ou temporelle (L'équivalence entre les moyennes statistiques, aussi appelées moyennes d'ensemble, et les moyennes temporelles est reliée à la propriété d'ergodicité de la turbulence vue comme un processus aléatoire³). Dans la suite nous appellerons cette approche "*approche de champ moyen*". Ces exemples sont les plus courant et leurs filtres associés les plus répandus. Néanmoins le problème reste intact quelle que soit l'information à conserver et son filtre associé. Notons ce filtre par une barre, les quantités filtrées par des majuscules $V_i = \overline{v_i}$ et les informations sous-filtre (restantes après filtrage de champ total, qui *a priori* ne nous intéressent pas) par des primes $v'_i = v_i - V_i$. Nous supposons dans la suite que le filtre commute avec les dérivées spatiales et temporelles⁴. Ce filtre peut être appliqué à l'équation de Navier-Stokes (2.1) pour donner l'équation pour les grandeurs résolues :

$$\partial_t V_i + \partial_j \overline{V_i V_j} + \partial_j \overline{V_i v'_j} + \partial_j \overline{v'_i V_j} + \partial_j \overline{v'_i v'_j}$$

¹Cette résolution n'est atteinte qu'en géométrie périodique. Pour les écoulements cisailés simples (Channel flow par exemple) cette résolution maximale tombe à 384^3 !

²Elle nécessiterait une maille 31622777^3 !

³Dans tous les cas la moyenne temporelle doit être faite sur un temps infini pour qu'il y ait équivalence

⁴Cette propriété permet de simplifier les équations, mais peu de filtres la possèdent.

$$= -\partial_i P + \nu \partial_j \partial_j V_i \quad (2.3)$$

De même en soustrayant cette dernière équation (2.3) à l'équation de Navier-Stokes (2.1), on obtient l'équation pour les échelles sous-filtre :

$$\begin{aligned} \partial_t v'_i &+ \partial_j V_i V_j + \partial_j V_i v'_j + \partial_j v'_i V_j + \partial_j v'_i v'_j \\ &- \partial_j \overline{V_i V_j} - \partial_j \overline{V_i v'_j} - \partial_j \overline{v'_i V_j} - \partial_j \overline{v'_i v'_j} \\ &= -\partial_i p' + \nu \partial_j \partial_j v'_i \end{aligned} \quad (2.4)$$

Il est important de noter qu'à ce stade, aucune approximation n'a été faite et que la décomposition de l'équation (2.1) en deux équations (2.3) et (2.4) reste générale⁵. En l'occurrence la simulation de ces deux équations n'est pas moins coûteuse que l'équation originale ni en terme de quantité d'information (elle est restée inchangée), ni en terme de temps de calcul (deux fois plus d'équations à simuler). A ce stade, l'approximation la plus drastique consisterait à négliger purement et simplement les termes sous-filtre et d'intégrer l'équation 2.3 en posant $v'_i = 0$. Négliger ces trois termes qui assurent l'échange d'énergie entre l'information filtrée et l'information sous-filtre mène invariablement à une accumulation de l'énergie à l'échelle de coupure ainsi qu'illustré sur la figure 2.1.

Pour éviter cet écueil et néanmoins réduire la taille du problème à simuler, il faut trouver un moyen de refermer le problème à moindre coût, c'est à dire exprimer l'influence de l'information sous-filtre en fonction des grandeurs filtrées.

2.2 Relations de fermeture : méthodes explicites

Pour ce faire, une approche classique consiste à introduire dans l'équation 2.3 une relation entre les termes $W_{ij} = \overline{V_i v'_j} + \overline{v'_i V_j} + \overline{v'_i v'_j}$ et les grandeurs filtrées. Cette relation s'écrit formellement :

$$W_{ij} = f\left(V_i, \partial_i V_j, \dots, \Re, \text{Conditions aux limites}, \text{Force}\right) \quad (2.5)$$

où la force est un éventuel forçage extérieur. En pratique, si la turbulence est complètement développée, il est généralement supposé que la turbulence, par son caractère chaotique, perd l'information associée aux conditions aux limites, au nombre de Reynolds (directement relié aux conditions aux limites) et au forçage. Dans ce cas (c'est à dire à la limite $\Re = \infty$) les termes sous-filtre sont des fonctions du champ de vitesse filtré et de ses dérivées spatiales à tous les ordres (dérivées secondes, tierces, ...).

2.2.1 Viscosité turbulente : le concept de séparation d'échelles

Pour tenter de contraindre ces fonctions, considérons un cas idéalisé où le champ de vitesse sous-filtre est une perturbation à grande échelle d'une turbulence développée à petite échelle (voir croquis 2.2).

⁵Cette décomposition est souvent appelée décomposition de Reynolds

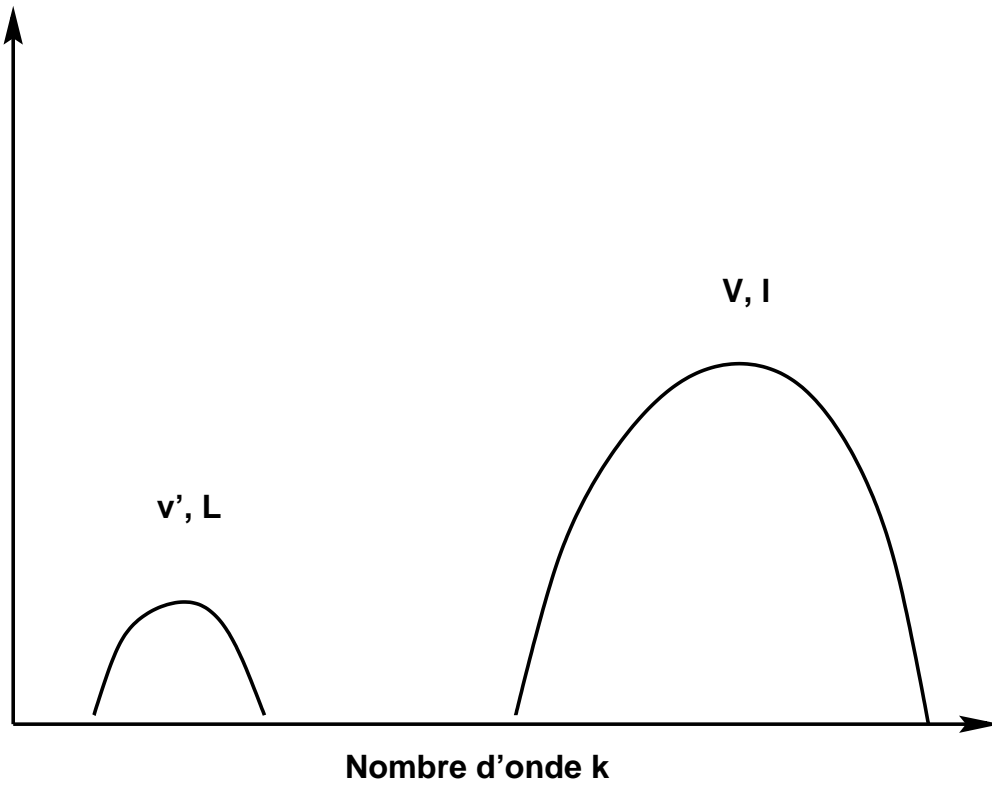


FIG. 2.2 – Schéma de principe du concept de séparation d'échelles.

Nous voulons ici exprimer un terme à grande échelle W_{ij} en fonction de termes à petite échelle. Pour ce faire, et travailler sur des termes comparables, faisons le changement de variable :

$$\tilde{x} = \frac{x}{\epsilon} \quad (2.6)$$

où $\epsilon = l/L$ est un petit paramètre caractérisant la séparation d'échelles (l étant l'échelle caractéristique de la turbulence à petite échelle et L celle de la perturbation). Nous pouvons alors réécrire l'équation 2.5 de manière perturbative en :

$$W_{ij} = f^0(V_k) + \epsilon f^1(\tilde{\partial}_k V_l) + \epsilon^2 f^2(\tilde{\partial}_k \tilde{\partial}_l V_m, \tilde{\partial}_k V_m \tilde{\partial}_l V_n) + \dots \quad (2.7)$$

Dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire, les fonction f^i sont linéaires (cela suppose que la perturbation soit de faible amplitude). Alors :

$$W_{ij} = \alpha_{ijk} V_k + \nu_{ijkl} \partial_k V_l + O(\nabla^2 V) \quad (2.8)$$

Le premier terme de la série est responsable de l'effet AKA (Anisotropic Kinetic Alpha effect), qui s'apparente à l'effet α en magneto-hydrodynamique (Frisch, She and Sulem 1987). Il produit des instabilités à grande échelle pouvant conduire à la formation de tourbillons (Kitchatinov, Rüdiger and Kholmenco 1994). Le second est le terme de viscosité turbulente. Plusieurs remarques s'imposent :

- Le terme d'ordre le plus bas est le terme AKA. Son absence requiert que la turbulence soit isotrope ou au moins invariante par parité (Frisch (1992), Dubrulle and Frisch (1991)). *L'effet de la turbulence n'est pas en général "diffusif"*.
- Même en l'absence d'effet AKA, la viscosité turbulente est un tenseur d'ordre 4. Elle n'est scalaire que si la turbulence est isotrope.

Nous avons vu ici une condition suffisante d'existence des termes de viscosité turbulente. Il faut retenir que son existence est intimement reliée à la séparation d'échelle, phénomène rarement rencontré dans les écoulements réels. Son expression nécessite l'utilisation de méthodes particulières, valables dans quelques cas particuliers. Par exemple Dubrulle and Frisch (1991) ont pu déterminer son expression dans le cas des écoulements parallèles invariants par parité par une approche multi-échelles.

Pour plus de détails sur les expansions asymptotiques ici à l'origine de la viscosité turbulente le lecteur intéressé pourra se référer à Bensoussan et al. (1978) et Dubrulle and Frisch (1991) pour une approche mathématique rigoureuse ou Moffatt (1974) pour une des premières approches des théories de champ moyen. Cet exemple idéalisé montre que l'action de la turbulence est loin d'être une diffusion. Dans le cas général, on peut s'attendre à ce que ce soit encore plus vrai, et que les modélisations classiques de type viscosité turbulente soient incapable de reproduire les détails de l'action de la turbulence. En effet, on a observé qu'elles étaient utiles pour garantir la conservation de l'énergie, mais ne pouvaient pas reproduire les mécanismes délicats comme le "backscatter" (transmission d'énergie des petites échelles vers les grandes). Nous proposerons plus loin une approche permettant de remédier à ce défaut. Dans l'immédiat, nous suivrons l'approche classique, supposerons que l'action des échelles sous-filtre se limite à une simple viscosité turbulente et étudierons ses différentes formes.

2.2.2 Quelques exemples de viscosités turbulentes

Viscosité turbulente spectrale

La théorie de la turbulence isotrope, homogène et développée de Kolmogorov (1941) permet de déterminer une viscosité turbulente dans l'espace de Fourier. Dans ce formalisme le spectre d'énergie cinétique turbulente est donné par :

$$E(k) = \frac{u^2}{k} = C_K \epsilon^{2/3} k^{-5/3} \quad (2.9)$$

où ϵ est le flux spectral d'énergie (transfert d'énergie des grandes vers les petites échelles) supposé constant dans une gamme de nombre d'onde, et C_K est une constante sans dimension appelée constante de Kolmogorov dont la valeur est d'environ 1.4, mais dont l'universalité reste une question ouverte.

Sachant la viscosité turbulente est le rapport du terme non-linéaire de l'équation de Navier-Stokes au Laplacien de la vitesse, dimensionnellement :

$$\nu_T = \frac{u}{k} = \sqrt{C_K} \epsilon^{1/3} k^{-4/3} \quad (2.10)$$

Ce type de viscosités turbulentes déterminé ici par des arguments dimensionnels peut être trouvé plus rigoureusement soit par des arguments de symétries (Kolmogorov 1941), soit en utilisant le groupe de renormalisation (Forster et al. 1977, Canuto and Dubovikov 1996). Ces viscosités turbulentes spectrales aussi appelées viscosités turbulentes "à la maille", sont très utilisées dans les approches grandes échelles, en général sous une forme dérivée appelée modèle de Smagorinski.

Modèle de Smagorinski

Le modèle de Smagorinski (Smagorinski 1963) est la viscosité turbulente la plus répandue aujourd'hui dans les modèles d'écoulements réels, industriels et météorologiques en particulier. Il consiste à définir cette viscosité turbulente par :

$$\overline{V_i v'_j} + \overline{v'_i V_j} + \overline{v'_i v'_j} = -\nu_T (\partial_j V_i + \partial_i V_j) \quad (2.11)$$

Cette expression n'est valable que dans le cas d'un filtre commutatif, c'est à dire que pour toute fonction f :

$$\overline{\partial_i f} = \partial_i \overline{f} \quad (2.12)$$

En pratique les filtres utilisés dans les approches grandes échelles sont rarement commutatifs. Dans ce cas on s'assure que la trace du tenseur de Reynolds (défini par $\tau_{ij} = \overline{v_i v_j} - V_i V_j$), soit nulle en la retranchant au résultat de la méthode précédente.

La viscosité turbulente est alors exprimée ainsi :

$$\nu_T \propto u \Delta \quad (2.13)$$

où u est la vitesse caractéristique des tourbillons d'échelle égale à l'échelle de filtrage Δ (dernière échelle résolue, taille de la grille). En utilisant des arguments dimensionnels de type Kolmogorov (voir section précédente), elle peut être réestimée par :

$$\nu_T \propto U \Delta^{4/3} L^{-1/3} \quad (2.14)$$

où U est la vitesse caractéristique des tourbillons d'échelle intégrale L . U peut être estimée par :

$$U \propto L \left(\overline{S_{ij} S_{ij}} \right)^{1/2} \hat{=} L \Sigma \quad (2.15)$$

où $S_{ij} = (\partial_i v_j + \partial_j v_i)$ est le tenseur des déformations et Σ est défini par la relation précédente. La viscosité turbulente peut alors être réécrite comme :

$$\nu_T = C_S^2 L^{2/3} \Delta^{4/3} \Sigma \quad (2.16)$$

où C_S est un paramètre libre appelé constante de Smagorinski. Dans le cas d'une turbulence isotrope à très grand nombre de Reynolds, cette constante peut être exprimée par (Lilly 1965) :

$$C_S = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{3C_K} \right) \quad (2.17)$$

Si la constante de Kolmogorov est prise de 1.4 cette expression donne une constante de Smagorinski de 0.18. La plupart des autres estimations de cette constante conduisent à des valeurs entre 0.1 et 0.2.

Modèle de Smagorinski dynamique

Récemment Germano et al. (1991) ont introduit une méthode pour estimer dynamiquement la constante de Smagorinski en faisant intervenir un filtre fictif. L'idée de cette méthode est d'évaluer les tensions de Reynolds sous-maille à partir de tensions de Reynolds résolues proches de l'échelle du maillage de la simulation en utilisant des arguments assez proches des méthodes dites de similarité d'échelles. Je ne détaillerai pas la méthode de similarité d'échelles, mais le lecteur intéressé pourra se référer à Bardina et al. (1980), l'article fondateur. Par ce biais le modèle de Smagorinski est le seul modèle de viscosité turbulente (à ma connaissance) sans paramètre arbitraire, ou plus précisément dont le paramètre arbitraire est calculé dynamiquement. Il est néanmoins difficile à mettre en oeuvre et son utilisation reste marginale.

Longueur de mélange

Dans le cas de moyennes statistiques (approche de champ moyen), l'approche la plus simple pour exprimer la viscosité turbulente est due à Prandtl (1925). Par analogie avec la viscosité cinématique des gaz, Prandtl proposa que la viscosité turbulente pouvait être exprimée par :

$$\nu_T = vl \quad (2.18)$$

où v est la vitesse caractéristique des tourbillons (analogue de la vitesse du son) et l est la longueur de mélange (analogue du libre parcours moyen), distance typique qu'un tourbillon parcourt dans le fluide avant de s'y dissoudre, généralement assimilée à la taille typique des tourbillons.

2.2.3 Qualités et défauts des viscosités turbulentes

En règle générale les viscosités turbulentes permettent une modélisation simple de la turbulence. Ce type d'approches permet en outre une interprétation physique assez intuitive, ce qui assure un bon contrôle du phénomène.

Néanmoins, l'intervention d'une viscosité turbulente, quand elle est raisonnable (voir section 2.2.1), a deux grands défauts :

- La viscosité turbulente est un paramètre libre (voire 27 paramètres libres dans le cas général non-isotrope). Elle est éventuellement calculable *a priori* (Dubrulle and Frisch 1991) ou déterminable dynamiquement (Germano et al. 1991) dans des cas simple. Dans les problèmes astrophysiques ou géophysiques, dont la géométrie est plus complexe, sa détermination devient incertaine et elle est considérée comme un paramètre libre plus ou moins bien contraint.
- Modéliser les termes sous-maille par une viscosité turbulente en ne gardant que l'équation sur les grandeurs filtrées revient formellement à réduire fortement le nombre de Reynolds du problème. En effet, une fois introduite, la viscosité turbulente n'est rien de plus qu'une viscosité cinématique dont la valeur a été augmentée pour

prendre en compte l'augmentation du transport de vecteurs dans l'écoulement. La seule différence formelle avec une viscosité moléculaire est alors la variation spatiale de la viscosité turbulente. Dans le cas d'une approche grandes échelles, le nombre de Reynolds effectif de la simulation est ramené à $\Re_\epsilon \simeq N^{4/3}$ où N est le nombre de points de mailles dans une direction. Dans le cas d'une approche de champ moyen, le nombre de Reynolds effectif est le nombre de Reynolds critique de l'écoulement. Ainsi, les propriétés de la turbulence ne pourront pas être les mêmes que celles de l'écoulement réel bien que certaines propriétés macroscopiques puissent être raisonnablement bien reproduites, l'essence même de la méthode de calcul aura détruit une quantité importante d'information, ce qui en limite fortement la puissance.

Les limites des relations de fermeture *explicit* nous incitent à étudier une autre méthode, dans laquelle le champ de vitesse sous-filtre n'est plus estimé mais calculé dynamiquement. Cette méthode permet d'éviter l'écueil des conditions de validité du principe de viscosité. De plus nous verrons comment la formaliser de façon systématique et générale et comment elle évite la multiplication de paramètres libres. Cette approche est basée sur la distorsion rapide.

2.3 Distorsion Rapide : méthode implicite

La théorie de la distorsion rapide (*Rapid Distortion Theory* ou RDT), introduite par Batchelor and Proudman (1954), est un vieux concept souvent considéré comme complémentaire des approches par viscosité turbulente.

L'idée de base de la distorsion rapide est de dire que dans un cisaillement les structures turbulentes interagissent moins entre elles qu'avec le cisaillement lui-même. Le nom de la méthode en découle : les structures turbulentes sont déformées et dissipées (ou incorporées au cisaillement moyen) rapidement, avant de pouvoir interagir entre elles.

A l'origine la RDT a été introduite pour calculer l'évolution de structures turbulentes tourbillonnaires dans un milieu homogène présentant en particulier un cisaillement constant. Hunt (1973) la généralisa au cas des cisaillements inhomogènes. La RDT s'apparentait alors à l'équation linéarisée d'évolution d'une turbulence fluctuante (traitée comme une perturbation d'un écoulement moyen) créant par rétroaction des tensions de Reynolds modifiant l'écoulement moyen. Remarquant cette analogie avec les études de stabilité, Nazarenko et al. (1999) développèrent une généralisation des approches WKB et RDT baptisée WKB-RDT permettant de calculer les écoulements moyens dans des géométries plus compliquées, de type couche limite en particulier (Nazarenko et al. 2000, Dubrulle et al. 2001).

Néanmoins jusqu'à récemment la RDT restait intimement reliée à l'approche de

champ moyen de la turbulence et à la présence de cisaillement moyen dans l'écoulement, donc *a priori* une méthode intéressante analytiquement mais peu utilisable dans le cas de simulations numériques sur grille, pour l'approche grandes échelles. Elle fut alors modifiée par (Laval 1999) qui développa et implémenta une méthode numérique basée sur la RDT pour calculer la turbulence bidimensionnelle en géométrie périodique sur un maillage régulier.

La RDT présente deux principaux avantages par rapport aux méthodes faisant intervenir une viscosité turbulente. Le premier est que la relation de fermeture est implicite et donc que la méthode repose sur moins d'hypothèses éventuellement contestables. Le second avantage qui présente beaucoup d'intérêt pour les écoulements astrophysiques et géophysiques est que *la RDT ne fait pas intervenir de paramètre libre*. La RDT est alors plus prédictive que les méthodes de fermeture explicite.

La contrepartie de la RDT est qu'elle reste relativement lourde numériquement par rapport aux méthodes de viscosité turbulente dans l'approche grandes échelles.

2.3.1 Principe

L'idée de la RDT est de garder l'équation des grandeurs filtrées 2.3 intacte et plutôt que d'utiliser une relation de fermeture explicite pour les termes faisant intervenir des grandeurs sous-filtre, utiliser une version linéarisée de l'équation sous-filtre 2.4. Nous verrons ici son principe dans le cas particulier de l'approche grandes échelles de la RDT, présentant l'avantage d'être assez intuitive. Néanmoins il ne faut pas perdre de vue que tout ce qui va suivre dépend dramatiquement du filtre utilisé et qu'en particulier l'interprétation physique des termes non-linéaires doit être prise avec circonspection : elle n'est valable que pour les filtres à la maille.

Dans le cas d'un filtre à la maille, les quatre termes non-linéaires de l'équation 2.4 peuvent être interprétés ainsi :

$\partial_j V_i V_j - \partial_j \overline{V_i V_j}$ caractérise la création de petites échelles par cascade d'énergie en provenance des grandes échelles. C'est un terme de forçage extérieur à l'équation.

$\partial_j V_i V_j - \partial_j \overline{V_i v'_j}$ est le terme d'advection des petites échelles par les grandes.

$\partial_j v'_i V_j - \partial_j \overline{v'_i V_j}$ est le terme d'advection des grandes échelles par les petites. Il est aussi responsable, par le principe d'action et de réaction de la déformation des petites échelles par le cisaillement des grandes.

$\partial_j v'_i v'_j - \partial_j \overline{v'_i v'_j}$ est le terme d'interaction des petites échelles entre elles. Faisant intervenir des grandeurs à petite échelle avec des dérivées prises à petite échelle également, ce terme est appelé le *terme local* (dans l'espace de Fourier).

Si la plupart de l'énergie cinétique est concentrée dans les grandeurs filtrées (à grande échelle), il est assez naturel d'imaginer que le terme local va être peu influent

dans la dynamique des petites échelles. Le troisième terme de la liste pourrait également être considéré comme négligeable : l'advection des grandes échelles par les petites est un processus peu efficace. Il est en effet peu influent dans l'énergie cinétique des petites échelles, comme nous le verrons dans la section suivante. Néanmoins il porte en son sein la déformation des petites échelles par le cisaillement (*vortex stretching*), et a donc une influence importante sur la dynamique des petites échelles.

Le terme local est en l'occurrence le seul terme non-linéaire de l'équation 2.4. S'il peut être linéarisé, l'équation 2.4 devient linéaire et son traitement s'en voit fortement simplifié. Cette approximation repose sur le concept de *non-localité de la dynamique sous-maille*.

2.3.2 Validité

Afin de tester l'influence du terme local, deux types de tests ont été effectués. Le premier, appelé test *a priori*, consiste à regarder la valeur moyenne de ce terme dans un champ soit expérimental, soit issu d'une simulation directe à grande résolution. Ce type de tests permettent d'évaluer le poids énergétique du terme local. Néanmoins, même un terme énergétiquement faible peut avoir une influence importante dans la dynamique de l'écoulement par le biais d'effets de phase, c'est le cas par exemple du terme de *vortex stretching*. C'est pourquoi afin de comprendre parfaitement l'effet du terme local, la seule méthode convaincante consiste à simuler directement l'équation 2.3 et l'équation 2.4 en ayant linéarisé le terme local. Ce dernier type de test est appelé test dynamique.

Tests *a priori*

Le test *a priori* consiste à étudier le poids des différents termes (locaux et non-locaux) à partir d'un champ de vitesse issu soit d'une simulation directe soit d'une expérience de laboratoire. Ce champ de vitesse est filtré pour séparer *a posteriori* les échelles. Le spectre des différents termes non-linéaires est alors tracé dans l'espace de Fourier.

Plusieurs test *a priori* ont déjà été effectués au sujet du terme local dans différentes géométries ;

- Turbulence bidimensionnelle en géométrie périodique (Laval et al. 1999).
- Turbulence tridimensionnelle en géométrie périodique (Laval et al. 2001).

Ces tests ont confirmé l'hypothèse de non-localité des interactions à petite échelle dans ces deux configurations. Je renvoie les lecteurs intéressés par ces géométries aux références précédentes. Nous nous intéresserons plus ici au cas des écoulements cisailés plans.

A ce jour une seule géométrie d'écoulement cisailé a été testée : les écoulements de canal :

Carlier et al. (2001) ont testé l'influence du terme local à partir d'un champ de vitesse expérimental issu d'un écoulement de couche limite en soufflerie à très haut nombre de Reynolds ($\Re_\epsilon = 20600$). Néanmoins, la technique de fil chaud ne leur a donné accès qu'à deux composantes de la vitesse : la composante dans la direction de l'écoulement moyen, notée v_1 et la composante dans la direction perpendiculaire aux murs, notée v_2 . L'absence de troisième composante de la vitesse ne leur a pas permis de calculer la divergence du tenseur $v_i v_j$ qui aurait permis de connaître l'influence réelle du terme local dans les trois équations de Navier Stokes projetées. Leurs résultats sont montrés sur la figure 2.3.

Hersant et al. (2000) ont effectué un travail semblable, mais à partir d'une simulation directe d'écoulement de canal (Moser et al. 1999). L'étude portait sur un écoulement à un nombre de Reynolds plus modeste ($\Re_\epsilon = 590$), mais a donné accès à toutes les composantes de la vitesse et donc à la divergence du tenseur $v_i v_j$. Pour information les grandeurs analogues à celle de la figure 2.3 sont montrées sur la figure 2.4. L'influence réelle du terme local dans les trois composantes de l'équation de Navier-Stokes est montrée sur les figures 2.5, 2.6 et 2.7.

Les résultats de ces tests sont globalement (à l'exception de la direction de la figure 2.6) dans le sens d'une faible influence énergétique des termes locaux dans la dynamique des échelles sous-maille. La comparaison des figures 2.3 et 2.4 montre à l'évidence que l'influence des termes locaux est d'autant plus faible que le nombre de Reynolds est grand. Néanmoins, ces seuls tests *a priori* ne sont pas suffisants pour trancher.

Tests dynamiques

Les tests dynamiques de l'hypothèse de non-localité de la dynamique sous maille consiste à simuler le plus directement possible les équations 2.3 et 2.4 (après traitement du terme local).

Ces tests ont été effectués de façon exhaustive par Laval et al. (1999) dans le cas de turbulence bidimensionnelle en géométrie périodique et par Laval et al. (2001) dans le cas de turbulence tridimensionnelle en géométrie périodique.

Dans le cas de turbulence bidimensionnelle le terme local n'a presque aucune influence sur la dynamique du système et peut être purement et simplement négligé ainsi que les tests *a priori* l'avaient suggéré. Un exemple de simulation avec et sans le terme local est montré sur la figure 2.8.

Le cas de la turbulence tridimensionnelle est en un certain sens plus intéressant. Les tests dynamiques montrent que la suppression "barbare" du terme local induit une augmentation de l'énergie dans les petites échelles de l'écoulement. En effet les termes

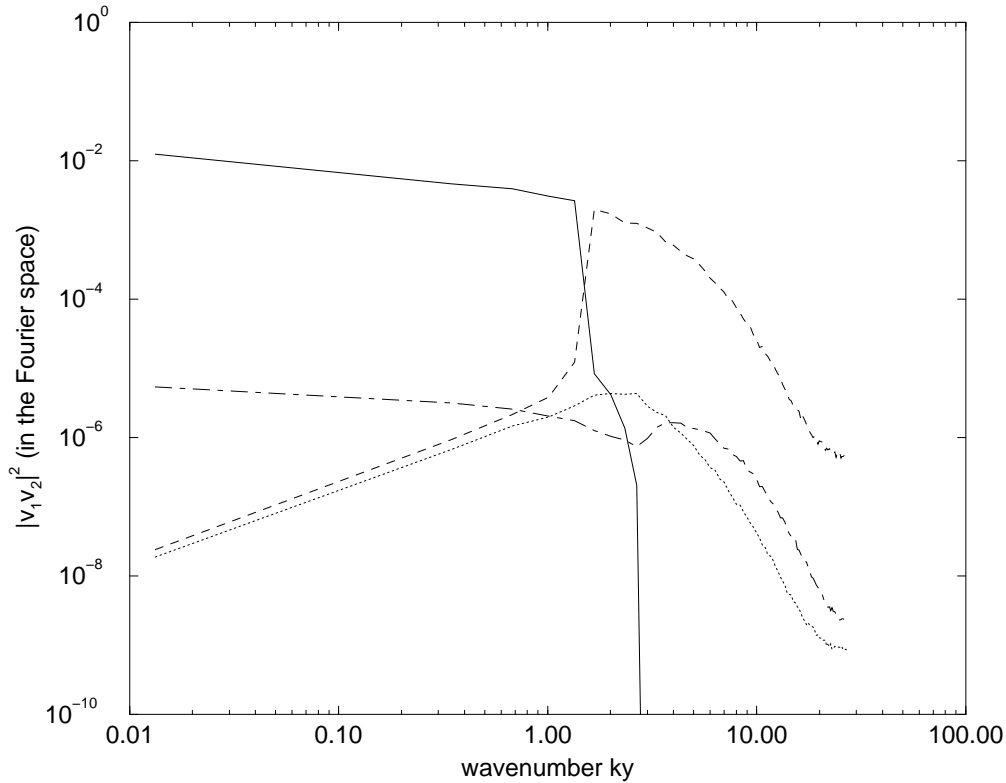


FIG. 2.3 – Spectre des 4 termes non-linéaires de l'équation 2.4 faisant intervenir les composantes de la vitesse le long de l'écoulement et perpendiculairement aux parois (V_1V_2 (trait plein), $V_1v'_2$ (tirets), v'_1V_2 (pointillés) et $v'_1v'_2$ (trait de cote)) dans l'espace de Fourier en fonction du nombre d'onde normalisé par l'inverse de la distance au mur dans l'expérience de Carlier et al. (2001).

locaux sont connus pour être à l'origine de la pente en $k^{-5/3}$ du spectre d'énergie. La suppression des termes locaux entraîne une diminution de la dissipation des petites échelles accompagnée d'une accumulation de l'énergie à l'échelle de coupure (effet "bottleneck"). Laval et al. (2001) ont montré que cet effet peut être facilement compensé par l'adjonction d'une viscosité turbulente dans l'équation 2.4 pour compenser la diminution de la dissipation et redresser la pente du spectre d'énergie. Il est néanmoins important de préciser que cette viscosité turbulente dans l'équation des quantités sous-filtre est formellement très différente des viscosités turbulentes évoquées précédemment dont l'effet était sur les grandeurs filtrées. En particulier, la dynamique du système est beaucoup moins dépendante de l'amplitude de la viscosité turbulente.

Les tests développés ici ont été effectués dans le cas particulier d'un filtre à la maille (approche grandes échelles). Les résultats restent cependant entiers avec un autre filtre, la seule véritable condition de validité de la RDT étant que le filtre doit conserver la majorité de l'énergie cinétique.

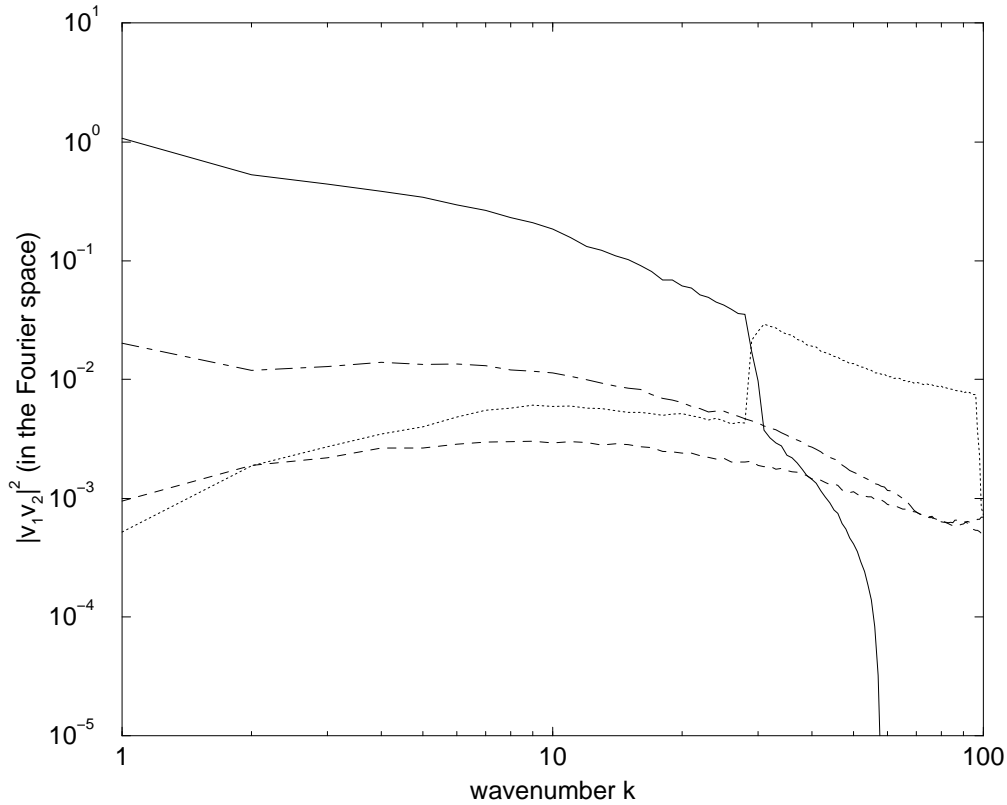


FIG. 2.4 – Spectre des 4 termes non-linéaires de l'équation 2.4 faisant intervenir les composantes de la vitesse le long de l'écoulement et perpendiculairement aux parois (V_1V_2 (trait plein), $V_1v'_2$ (pointillés), v'_1V_2 (tirets) et $v'_1v'_2$ (trait de cote)) dans l'espace de Fourier en fonction du nombre d'onde dans la simulation directe de Moser et al. (1999).

Implications pour les écoulements cisailés

Bien qu'aucun test dynamique n'ait été effectué dans le cas précis des écoulements cisailés, nous pouvons d'ores et déjà tirer quelques conclusions. En effet, les tests *a priori* effectués sur les écoulements de canaux montrent que pour deux des composantes de l'équation 2.4 (les deux composantes parallèles aux parois) le terme local a une influence minimale, même à bas nombre de Reynolds. En revanche la composante perpendiculaire aux parois semble montrer (au moins à bas nombre de Reynolds) une influence du terme local dans l'énergie cinétique sous-filtre du système.

Ce comportement peut s'interpréter ainsi : Dans les écoulements de canaux, la présence des parois empêche le développement d'une turbulence tridimensionnelle isotrope. Ainsi les deux directions parallèles aux parois sur lesquelles n'agit pas la contrainte des parois ont un comportement découplé de la dernière direction et développent un comportement bidimensionnel. La dernière direction garde à elle seule la géométrie tridimensionnelle de l'écoulement. Les tests dynamiques effectués sur les géométries périodiques de turbulence bidimensionnelle et tridimensionnelle montrent que dans le

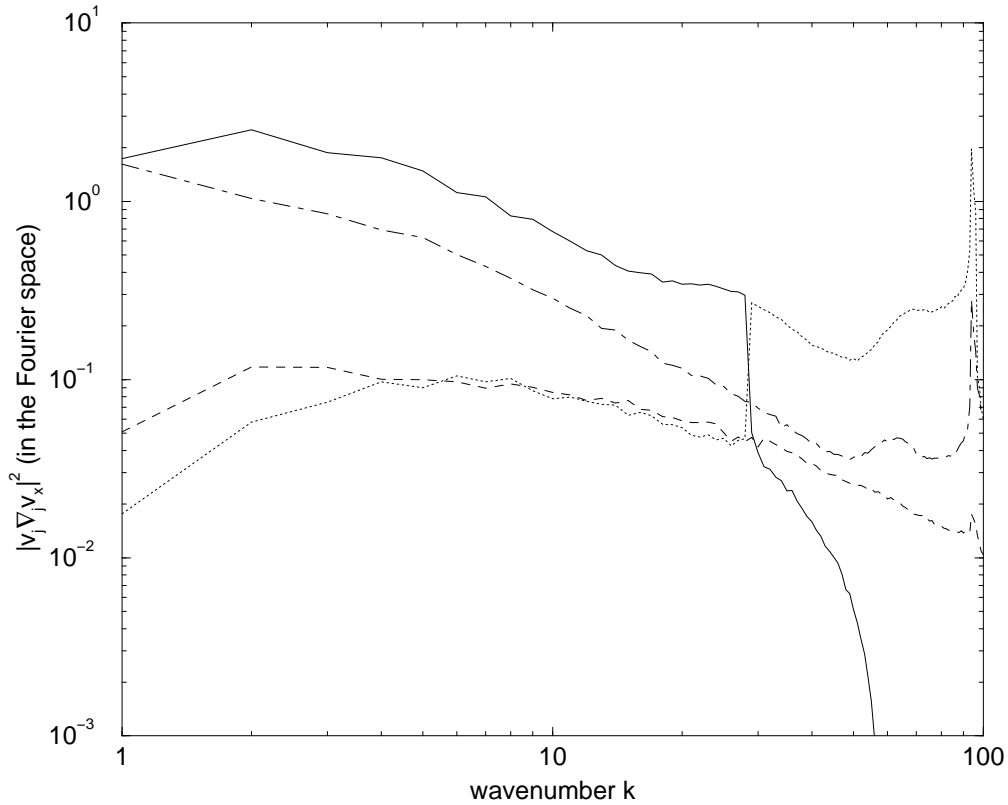


FIG. 2.5 – Spectre des 4 termes non-linéaires de l'équation 2.4 projetée dans la direction de l'écoulement moyen ($V_j \partial_j V_1$ (trait plein), $V_j \partial_j v'_1$ (pointillés), $v'_j \partial_j V_1$ (tirets) et $v'_j \partial_j v'_1$ (trait de cote)) dans l'espace de Fourier en fonction du nombre d'onde dans la simulation directe de Moser et al. (1999).

cas bidimensionnel le terme local peut être complètement oublié (ce qui se retrouve dans les tests *a priori* sur les écoulements de canal) alors que dans le cas tridimensionnel sa linéarisation requiert l'adjonction d'une viscosité turbulente dans l'équation des grandeurs sous-filtre.

On pourrait donc naturellement penser que le remplacement par une viscosité turbulente anisotrope, n'agissant que dans la direction 2, des termes locaux est la solution la plus logique. Néanmoins, il serait nécessaire d'élucider l'influence de l'échelle de coupure dans les tests *a priori* d'écoulements cisailés afin d'étudier la non-isotropie de la turbulence en fonction de l'échelle de coupure. En effet l'ajout d'une viscosité turbulente dans une seule composante est un exercice dangereux, qui fait en particulier perdre son caractère vectoriel au modèle. En l'absence de tels tests, la sécurité va nous obliger dans la suite à appliquer cette viscosité turbulente aux trois composantes de l'équation sous-filtre.

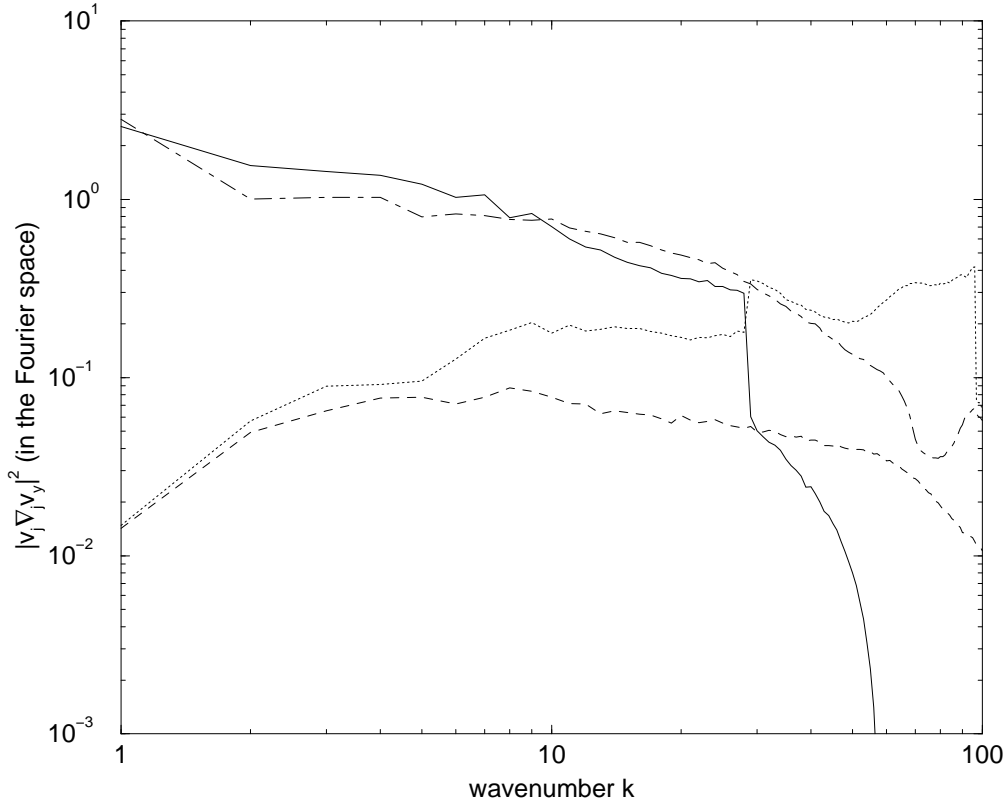


FIG. 2.6 – Spectre des 4 termes non-linéaires de l'équation 2.4 projetée dans la direction perpendiculaire aux parois ($V_j \partial_j V_2$ (trait plein), $V_j \partial_j v'_2$ (pointillés), $v'_j \partial_j V_2$ (tirets) et $v'_j \partial_j v'_2$ (trait de cote)) dans l'espace de Fourier en fonction du nombre d'onde dans la simulation directe de Moser et al. (1999).

2.3.3 Formalisme général

Une fois les hypothèses validées le système d'équations de la RDT généralisée est composé de deux équations vectorielles : une équation pour les grandeurs filtrées

$$\begin{aligned} \partial_t V_i + \partial_j \overline{V_i V_j} + \partial_j \overline{V_i v'_j} + \partial_j \overline{v'_i V_j} + \partial_j \overline{v'_i v'_j} \\ = -\partial_i P + \nu \partial_j \partial_j V_i \\ \partial_i V_i = 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

et une équation pour les grandeurs sous-filtre :

$$\begin{aligned} \partial_t v'_i + \partial_j V_i V_j + \partial_j V_i v'_j + \partial_j v'_i V_j \\ - \partial_j \overline{V_i V_j} - \partial_j \overline{V_i v'_j} - \partial_j \overline{v'_i V_j} \\ = -\partial_i p' + \nu \partial_j \partial_j v'_i \\ \partial_i v'_i = 0 \end{aligned} \quad (2.20)$$

Comme déjà mentionné, cette équation permet de calculer explicitement le système sous-filtre et donc les tensions de Reynolds. Ce formalisme possède plusieurs avantages intéressants :

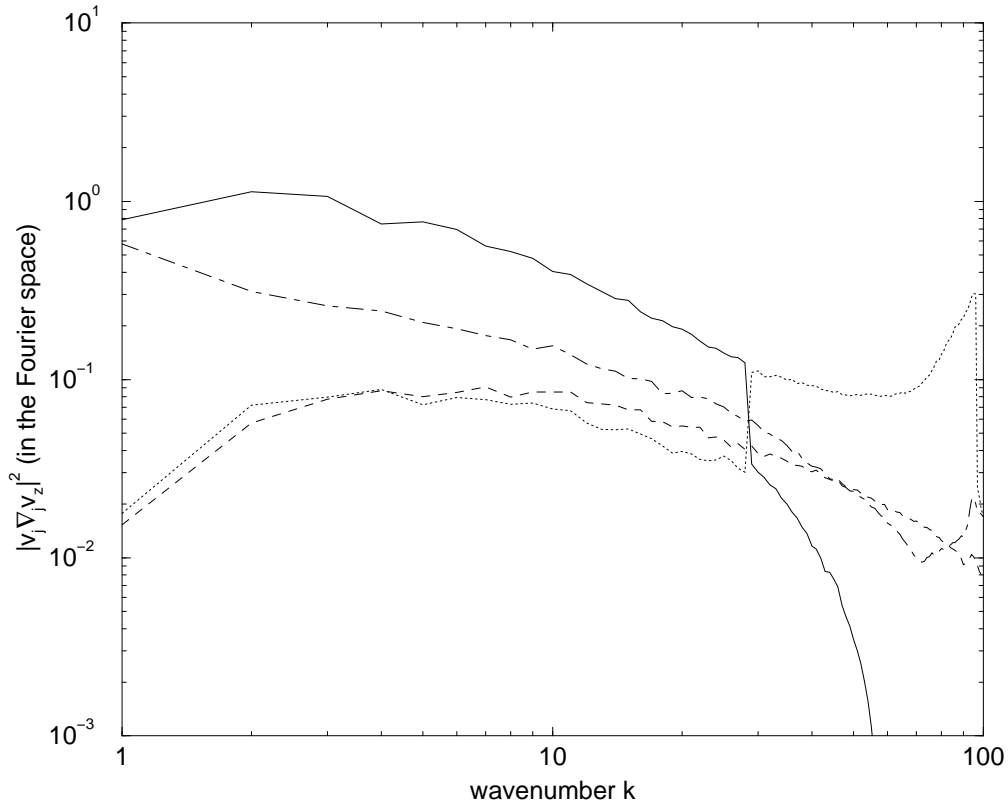


FIG. 2.7 – Spectre des 4 termes non-linéaires de l'équation 2.4 projetée dans la direction parallèle aux parois mais perpendiculaire à l'écoulement moyen ($V_j \partial_j V_3$ (trait plein), $V_j \partial_j v'_3$ (pointillés), $v'_j \partial_j V_3$ (tirets) et $v'_j \partial_j v'_3$ (trait de cote)) dans l'espace de Fourier en fonction du nombre d'onde dans la simulation directe de Moser et al. (1999).

- Il n'y a en principe pas de paramètre ajustable.
- Le caractère linéaire de l'équation sous-filtre facilite son intégration : d'une part des solutions analytiques sont accessibles dans certains cas, d'autre part, numériquement, un algorithme d'intégration lagrangien peut être utilisé dans lequel le pas de temps est calculé sur les échelles résolues, ce qui permet une accélération sensible des calculs.

L'équation 2.19 ne requiert *a priori* pas de traitement supplémentaire. Son implémentation est drastiquement dépendante du choix du filtre. En revanche, l'équation 2.20 ne peut pas être conservée telle qu'elle. En effet, bien qu'approximé, le système composé de ces deux équations contient autant d'information (de degrés de liberté) que le système composé des équations 2.3 et 2.4, donc que l'équation de Navier-Stokes elle-même. Cette prolifération de degrés de liberté est inutile. En effet l'observation d'écoulements turbulents, l'atmosphère par exemple, montre que les échelles spatiales ne coexistent que localement et donc qu'il est inutile de les calculer partout. Il a donc été suggéré qu'une décomposition sur des paquets d'onde locaux (comme des ondelettes, voir par exemple Farge 1992) serait plus appropriée que la décomposition classique en modes de Fourier et permettrait une meilleure sélection

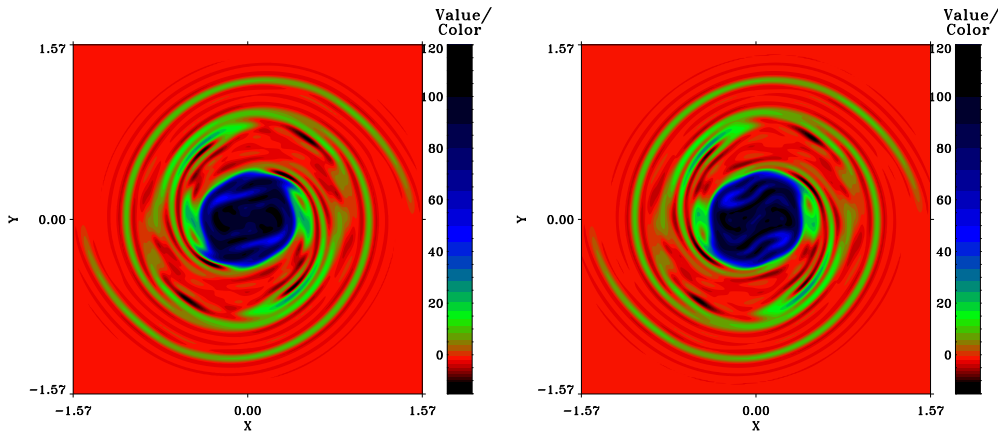


FIG. 2.8 – Comparaison de champs de vorticités issus d’une simulation directe (panneau de gauche) et d’une simulation sans le terme local (panneau de droite) de fusion de deux tourbillons (issu de Laval 1999).

des modes importants. Cela pourrait conduire à une forte réduction des degrés de liberté. Ici nous utiliserons une "fausse ondelette" appelée transformation de Gabor (Gabor 1946) qui ne possède pas les propriétés mathématiques des ondelettes (en particulier les modes de Gabor ne sont pas une base au sens mathématique du terme) mais garde des propriétés très proches de la transformation de Fourier, en particulier en ce qui concerne la dérivation. La transformation de Gabor permet aussi d’exploiter la linéarité de l’équation sous-filtre : analytiquement les équations deviennent des équations différentielles ordinaires (les dérivées spatiales deviennent des multiplications par un nombre d’onde), la pression est alors facilement calculable. Numériquement, la limitation du calcul à certains nombres d’onde locaux judicieusement choisis et calculés à l’aide d’une méthode lagrangienne permet un gain substantiel de mémoire vive et une diminution importante du pas de temps (le pas de temps devient calculé sur les échelles filtrées).

Transformation de Gabor

La transformation de Gabor d’une fonction quelconque $u(x, t)$ est définie comme suit⁶ :

$$\hat{u}(x, k) = \int f(x - x') e^{ik(x-x')} u(x') dx' \quad (2.21)$$

où f est une fonction décroissant rapidement à l’infini, une gaussienne par exemple, appelée fonction poids de Gabor. Physiquement, la transformation de Gabor consiste à envoyer dans l’espace de Fourier toute l’information sous l’échelle de la fonction poids de Gabor f et de conserver dans l’espace réel toute l’information à une échelle plus grande. Contrairement à la transformation de Fourier, la transformation de Gabor

⁶Pour simplifier nous verrons les propriétés de la transformation de Gabor en une seule dimension, la généralisation à trois dimension étant immédiate.

comporte une information à la fois spatiale et spectrale.

La transformation de Gabor inverse est simple :

$$u(x) = \frac{1}{2\pi f(0)} \int \hat{u}(x, k) dk \quad (2.22)$$

Notons qu'en trois dimensions, la transformation inverse est :

$$u(x) = \frac{1}{(2\pi)^3 f(0)} \int \hat{u}(x, k) dk \quad (2.23)$$

Si nous appelons λ l'échelle du poids de Gabor f , cette échelle étant son écart type dans le cas d'un poids gaussien, la transformation de Gabor de la dérivée de la fonction u est donnée par (résultat obtenu par intégration par parties) :

$$\widehat{\partial_x u}(x, k) = ik\hat{u} + \int f'(x - x') e^{ik(x-x')} u(x') dx' + S(x, k) \quad (2.24)$$

où f' est la dérivée de la fonction f et $S(x, k, t) = [u(x') f(x - x') e^{ik(x-x')}]_{bords}$ est un terme appelé terme de surface prenant effet près des bords du domaine d'intégration. Il est lié à la non-commutation éventuelle de la transformation de Gabor avec la dérivation spatiale. Ce terme disparaît en géométrie périodique et dans certains cas particuliers. Nous l'oublierons *temporairement* afin de ne pas alourdir les notations.

Donc pour tous les modes $k \gg 1/\lambda$ la transformation de Gabor a les mêmes propriétés que la transformation de Fourier pour la dérivation :

$$\widehat{\partial_x u} \simeq ik\hat{u} \quad \forall k \gg \frac{1}{\lambda} \quad (2.25)$$

De plus, le cas du produit d'un champ de vitesse filtré avec un champ de vitesse sous-filtré est aussi simplifié, si le filtre a une échelle plus grande que celle du poids de Gabor. En effet, le champ de vitesse filtré U peut être développé autour de tout point x :

$$U(x') = U(x) + \partial_x U(x)(x' - x) + O((x' - x)^2) \quad (2.26)$$

Alors :

$$\begin{aligned} \widehat{Uu'}(x, k) &= \int f(x - x') e^{ik(x-x')} U(x') u'(x') dx' \\ &= U(x) \hat{u}'(x, k) + i \partial_x U(x) \partial_k \hat{u}'(x, k) \end{aligned} \quad (2.27)$$

Ces deux dernières propriétés sont intimement reliées à l'approche WKB (déjà utilisée dans l'introduction de ce manuscrit) de la RDT.

Les propriétés de la transformation de Gabor ont ici été développées dans le cas particuliers d'une approche grandes échelles classiques. Elles restent entières dans la plupart des cas. Il faut néanmoins les vérifier au cas par cas.

Equation sous-filtre dans l'espace de Gabor

En appliquant la transformation de Gabor à l'équation 2.20, celle-ci devient :

$$\partial_t \hat{v}'_i + V_j \partial_j \hat{v}'_i - \partial_l (k_j V_j) \partial_{k_l} \hat{v}'_i + \hat{v}'_j \partial_j V_i = -i k_i \hat{p} - (\nu_T + \nu) k^2 \hat{v}'_i + \hat{\sigma}_i + \hat{F}_i \quad (2.28)$$

où $\hat{\sigma}_i$ représente les termes de surface associés à la non-commutation du filtre et de la transformation de Gabor avec les dérivées spatiales et $F_i = \partial_j V_i V_j - \partial_j \overline{V_i V_j} - \partial_j \overline{V_i} \overline{v'_j} - \partial_j \overline{v'_j} \overline{V_i}$ est un terme de forçage représentant la cascade d'énergie des échelles filtrées vers les échelles sous-filtre.

A cette équation est associée l'équation de continuité sous filtre qui s'écrit dans l'espace de Gabor :

$$k_i v'_i = 0 \quad (2.29)$$

Nous pouvons alors éliminer la pression en faisant le produit scalaire de l'équation 2.28 par k_i et en utilisant 2.29. Alors :

$$\partial_t \hat{v}'_i + V_j \partial_j \hat{v}'_i - \partial_l (k_j V_j) \partial_{k_l} \hat{v}'_i + \hat{v}'_j \partial_j V_i = \frac{2k_i}{k^2} \hat{v}'_l \partial_l (k_j V_j) - (\nu_T + \nu) k^2 \hat{v}'_i + \hat{\sigma}'_i + \hat{F}_i \quad (2.30)$$

$$\text{où } \hat{\sigma}'_i = \hat{\sigma}_i - \frac{k_i}{k^2} (k_j \hat{\sigma}_j)$$

Cette équation peut être réécrite ainsi :

$$D_t \hat{v}'_i = \frac{2k_i}{k^2} \hat{v}'_l \partial_l (k_j V_j) - (\nu_T + \nu) k^2 \hat{v}'_i + \hat{\sigma}'_i - \hat{v}'_j \partial_j V_i + \hat{F}_i \quad (2.31)$$

où :

$$D_t = \partial_t + \dot{x}_j \partial_j + \dot{k}_j \partial_{k_j} \quad (2.32)$$

$$\dot{x}_i = V_i \quad (2.33)$$

$$\dot{k}_i = -\partial_i (k_j V_j) \quad (2.34)$$

L'implémentation numérique plus précise dépend ensuite de l'écoulement et sera développée au chapitre 5.

Dans la suite nous utiliserons dans un premier temps l'approche classique de champ moyen avec une viscosité turbulente de type longueur de mélange, approche aujourd'hui de très loin la plus communément utilisée dans la communauté des disques d'accrétion. Ceci nous permettra d'avoir une première vision de la turbulence dans la nébuleuse solaire primitive, d'en comprendre certaines implications pour la formation du système solaire externe et d'en voir les limites d'application, ce qui nous conduira à considérer l'utilisation de l'approche RDT.

Chapitre 3

Un modèle de champ moyen stationnaire pour la nébuleuse solaire primitive

La première étape dans l'étude de la turbulence dans la nébuleuse solaire primitive est de lui appliquer un formalisme de champ moyen avec une viscosité de type longueur de mélange. Cette méthode est en effet la plus simple à mettre en oeuvre et permet de construire un modèle de nébuleuse quasi-analytique. Ce modèle de nébuleuse et de disques d'accrétion en général est appelé modèle standard. Ce modèle de disque peut être calibré sur les observations du système solaire et dans une moindre mesure sur celles des disques circumstellaires.

Nous verrons d'abord les équations de base du modèle puis leur application au cas de la nébuleuse solaire primitive. Ce modèle sera testé à la lumière d'une puissante contrainte : le fractionnement isotopique du deuterium entre l'eau et l'hydrogène moléculaire.

3.1 Une approche de champ moyen pour les disques d'accrétion

3.1.1 Quelle longueur de mélange ?

Le choix de la longueur de mélange (et de la vitesse associée) dans la viscosité turbulente est un problème qui reste d'actualité. Deux écoles s'affrontent sur le sujet :

- 1 Très tôt (historiquement), Shakura and Sunyaev (1973) ont proposé que la longueur de mélange ne pouvait pas être plus grande que l'épaisseur verticale H du disque, afin de ne paramétriser que la partie purement tridimensionnelle de la turbulence¹. Ils ont alors choisi une longueur de mélange $L_{turb} = \alpha_1 H$. Pour assurer le caractère subsonique de la turbulence la vitesse turbulente est choisie $V_{turb} = \alpha_2 c_S$ où c_S est la vitesse du son dans le disque. Ainsi la viscosité turbulente est donnée par $\nu_T = \alpha c_S H$ où $\alpha = \alpha_1 \alpha_2$.

¹En turbulence bidimensionnelle, le flux spectral d'énergie va des petites échelles vers les grandes. Une viscosité turbulente est alors peu appropriée.

2 Lynden-Bell and Pringle (1974) avaient proposé que la longueur de mélange dans les disques devait être proportionnelle au rayon R , l'épaisseur H ne jouant *a priori* pas de rôle dans le cisaillement (moteur de la turbulence). De même, pour eux, la vitesse caractéristique ne pouvait être que la vitesse keplerienne elle-même. Cela conduit à la viscosité turbulente $\nu_T = \beta\Omega R^2$. Plus récemment Richard and Zahn (1999), en analysant les données expérimentales de Wendt (1933), ont montré que les écoulements en rotation différentielle devaient pouvoir être bien modélisés par une viscosité turbulente du type $\nu_T = \beta R^3 \partial_R \Omega$ qui revient à la viscosité turbulente de Lynden-Bell and Pringle (1974) si Ω s'exprime comme une loi de puissance du rayon R (C'est le cas pour l'écoulement keplerien). Indépendamment, Duschl et al. (2000) ont abouti à la même conclusion en étudiant les échelles caractéristiques de l'écoulement. En utilisant la relation classique des viscosités turbulentes dans les approches de champ moyen $\nu_T/\nu = Re/Re_c$ Duschl et al. (2000) ont déduit que $\beta = 1/Re_c$ où Re_c est le nombre de Reynolds critique de l'écoulement.

Nous utiliserons dans la suite la viscosité α de Shakura and Sunyaev (1973), mais la viscosité β , fondée sur des arguments peut être plus solides est à tester. Un exemple de modèle de disques construit sur cette dernière viscosité turbulente est montré dans Huré et al. (2001).

3.1.2 Solutions stationnaires

Nous nous limiterons ici à la recherche de solutions stationnaires pour le champ de vitesse et les grandeurs thermodynamiques du disque. La justification de cette limitation sera développée dans la section 3.1.3 et nous la considérerons dans un premier temps comme admise.

Notons U, V, W les trois composantes respectivement radiale, azimutale et verticale du champ de vitesse moyen.

On suppose la structure en équilibre hydrostatique vertical de telle sorte que la vitesse moyenne verticale est nulle. Les équations du champ moyen du disque s'écrivent alors :

$$\partial_t U + U \partial_R U - \frac{V^2}{R} = -\frac{GM R}{(R^2 + z^2)^{3/2}} - \frac{1}{\rho} \partial_R P + \nu_T \partial_R \frac{1}{R} \partial_R R U \quad (3.1)$$

$$\partial_t V + U \partial_R V + \frac{UV}{R} = \nu_T \partial_R \frac{1}{R} \partial_R R V \quad (3.2)$$

$$0 = -\frac{GM z}{(R^2 + z^2)^{3/2}} - \frac{1}{\rho} \partial_z P \quad (3.3)$$

Détermination du champ de vitesse moyen

Afin de rendre possibles les calculs de façon analytique, le fluide est supposé polytropique avec un équation d'état $P = K\rho^\gamma$. Dans ce cas un *potentiel de pression* \tilde{P}

peut être défini de manière analogue au cas incompressible par :

$$\tilde{P} = K \frac{\gamma}{\gamma - 1} \rho^{\gamma-1} \quad (3.4)$$

Ainsi défini, le potentiel de pression vérifie la propriété $\nabla \tilde{P} = \frac{1}{\rho} \nabla P$ ². L'équation 3.3 intégrée entre z et H s'écrit :

$$\tilde{P}(R, z) = \tilde{P}(H) + \frac{GM}{(R^2 + z^2)^{1/2}} - \frac{GM}{(R^2 + H^2)^{1/2}} \quad (3.5)$$

On considère le cas où H est définie par une ligne iso-potentielle de pression. Alors, $\tilde{P}(H)$ ne dépend pas de R. La dérivée radiale de \tilde{P} s'exprime alors simplement :

$$\partial_R \tilde{P} = -\frac{GMR}{(R^2 + z^2)^{3/2}} + \frac{GMR}{(R^2 + H^2)^{3/2}} \left(1 + \frac{H d_R H}{R}\right) \quad (3.6)$$

En supposant la vitesse radiale moyenne négligeable devant la vitesse azimutale moyenne, l'équation 3.2 donne pour la vitesse azimutale :

$$\partial_t V - \frac{V^2}{R} = -\partial_R \tilde{P} - \frac{GMR}{(R^2 + z^2)^{3/2}} \quad (3.7)$$

En insérant l'équation 3.6 dans l'équation 3.7, on tire que les solutions stationnaires de l'équation s'écrivent :

$$\frac{V^2}{R} = \frac{GMR}{(R^2 + H^2)^{3/2}} \left(1 + \frac{H d_R H}{R}\right) \quad (3.8)$$

Dans le cas d'un disque mince, tel que $H/R \ll 1$, l'équation 3.8 peut être développée à l'ordre 1 en H^2/R^2 :

$$\frac{V^2}{R} = \frac{GM}{R^2} \left(1 - \frac{3H^2}{2R^2} + \frac{H d_R H}{R}\right) \quad (3.9)$$

Ainsi, si $H/R d_R H \ll 1$, à l'ordre 0 en H/R , la vitesse azimutale suit une loi keplerienne³ :

$$V = \sqrt{\frac{GM}{R}} \quad (3.10)$$

La vitesse radiale stationnaire est donnée par l'équation 3.3 qui peut s'exprimer par :

$$\frac{U}{R} \partial_R R V = \nu_T \partial_R \frac{1}{R} \partial_R R V \quad (3.11)$$

Dans le cas d'une vitesse azimutale keplerienne 3.10, la vitesse radiale moyenne devient :

$$U = -\frac{3}{2} \frac{\nu_T}{R} \quad (3.12)$$

²Il aurait également été possible de prendre une équation d'état un peu plus générale en supposant un fluide *barotropique*, c'est à dire dont la pression est une fonction quelconque de la densité seulement. Un potentiel de pression peut alors être défini par $\nabla \tilde{P} = \frac{1}{\rho} \nabla P$, de sorte que la pression et la densité ne s'expriment pas de façon simple en fonction du potentiel de pression, mais les développements pour déterminer le champ de vitesse moyen restent parfaitement identiques.

³Il est important de noter que la faible amplitude de la dérivée radiale de l'épaisseur du disque est une condition *sine qua non* du caractère keplerien de la vitesse azimutale, et donc qu'il faut non seulement que l'épaisseur du disque soit négligeable devant le rayon, mais aussi que ses variations radiales soient faibles.

Notons que ce champ de vitesse n'est qu'un cas particulier du champ de vitesse du modèle standard (Pringle 1981). En effet, le modèle standard prend en compte le raccordement de la vitesse radiale à la vitesse radiale (nulle) de l'objet central. J'invite le lecteur à se référer à Pringle (1981) pour l'expression générale. Dans le cas présent, nous poursuivrons une démarche de turbulence classique en nous concentrant sur la partie de l'écoulement où la turbulence est bien développée et ne dépend pas des bords. Notons que l'interaction disque/étoile reste un problème ouvert, en constante progression et il est probable que le champ magnétique y joue un rôle important (Bouvier et al. 1999). Loin de l'étoile le champ de vitesse développé ici est parfaitement équivalent aux solutions stationnaires du modèle standard.

Structure thermodynamique

Cette sous-section énonce les équations de base du modèle standard tel qu'il est défini dans Pringle (1981) et Shakura and Sunyaev (1973), mais en restant dans le cadre formel des équations sans proposer, pour le moment, de méthode pour les résoudre.

L'équation générale pour l'énergie interne du fluide est :

$$\rho c_V (\partial_t T + U \partial_R T) = \rho Q_\epsilon + \frac{1}{R} \partial_R R F_R + \partial_z F_z + \frac{1}{R} \partial_R \rho c_V R \kappa_T \partial_R T \quad (3.13)$$

Où :

Q_ϵ est la création d'énergie interne par dissipation turbulente (souvent appelée chauffage visqueux) donnée dans le cas général par $Q_\epsilon = \tau_{ij} \partial_j u_i$, ce qui devient dans le formalisme utilisé $Q_\epsilon = \nu_T (R \partial_R \frac{V}{R})^2$.

$F_i = \rho c_V \kappa_{Rad} \partial_i T$ est le flux radiatif du disque, avec $\kappa_{Rad} = 8/3 \sigma T^3 / (\rho^2 c_V \kappa_R)$, où κ_R est la moyenne de Rosseland du coefficient d'absorption radiative.

c_V est la capacité calorifique à volume constant du fluide.

κ_T est la diffusivité turbulente issue des termes sous-maille de l'équation scalaire de Fourier.

L'hypothèse de disque mince permet d'emblée de négliger le terme de diffusion radiative radiale devant son homologue vertical.

Les différents termes de l'équation 3.13 sont de poids différents et associés aux temps caractéristiques suivants :

$$\begin{aligned} \tau_{visc} &= \frac{R^2}{\nu_T} \\ \tau_{diff} &= \frac{R^2}{\kappa_T} \\ \tau_{cool} &= \frac{H^2}{\kappa_{Rad}} \\ \tau_Q &= \frac{c_V T}{\nu_T (R \partial_R \Omega)^2} \end{aligned}$$

Où τ_{adv} , τ_{diff} , τ_{cool} et τ_Q sont respectivement les temps caractéristiques visqueux, de diffusion turbulente, de refroidissement radiatif et de chauffage turbulent.

Au nombre de Prandtl turbulent près, les temps caractéristiques visqueux et de diffusion sont du même ordre de grandeur. Par ailleurs seuls les termes de refroidissement radiatif et de chauffage sont des termes de source (ou de puit) dans l'équation 3.13. C'est-à-dire que si le système est isolé, l'intégrale des autres termes est nulle⁴. Le rapport τ_{adv}/τ_Q , donné par

$$\frac{\tau_{adv}}{\tau_Q} = \frac{(R^2 \partial_R \Omega)^2}{c_V T} \sim \left(\frac{H}{R}\right)^2, \quad (3.14)$$

montre à l'évidence que si le disque est mince le chauffage visqueux ne peut pas, en régime stationnaire, être compensé par les termes d'advection ou de diffusion turbulente.

Ainsi, dans les limites de validité des approximations faites, les solutions stationnaires de l'équation 3.13 sont données par :

$$\partial_z F_z = \rho Q_\epsilon \quad (3.15)$$

Cette équation très simple relie les quantités dynamiques de l'écoulement aux quantités thermodynamiques du fluide. Couplée à une équation d'état et au supposé d'équilibre thermodynamique vertical elle permet de déterminer la structure thermodynamique locale du disque.

Un modèle de disque analytique

Une première approche pour résoudre les équations du modèle standard consiste à ne pas calculer explicitement la structure verticale du disque. Ceci nécessite quelques approximations supplémentaires, mais permet de résoudre les équations du disque mince de façon analytique (ou presque).

L'équation de conservation de la masse peut être intégrée verticalement (en z) pour donner :

$$\dot{M} = 2\pi R \Sigma | \langle U \rangle_F | \quad (3.16)$$

où \dot{M} est le flux radial de masse ou taux d'accrétion⁵, $\Sigma = \int \rho dz$ est la densité de surface du disque et $\langle U \rangle_F = \frac{1}{\Sigma} \int \rho U dz$ est la moyenne de Favre de la vitesse radiale.

Avec l'expression de la vitesse radiale donnée par l'équation 3.12, l'expression du taux d'accrétion devient :

$$\dot{M} = 3\pi \Sigma \langle \nu_T \rangle_F \quad (3.17)$$

⁴Bien entendu le système n'est pas forcément isolé... Dans ce cas ces termes apparaissent comme des termes de forçage *par les conditions aux limites*.

⁵Ce taux d'accrétion est la constante d'intégration de l'équation de continuité réduite $div \rho \vec{v} = 0$

De même, l'intégration de l'équilibre hydrostatique en z peut s'exprimer ainsi :

$$P(H) - P(0) = -\frac{GM}{2R^3}\Sigma\lambda \quad (3.18)$$

où λ est une longueur définie par :

$$\lambda = \frac{\int_0^H \rho z dz}{\int_0^H \rho dz} = 2\frac{\int_0^H \rho z dz}{\Sigma} \quad (3.19)$$

Dans la pratique, la pression à la surface du disque, égale à celle du milieu circumstellaire environnant, est de plusieurs ordres de grandeur plus faible que la pression centrale du disque (en $z = 0$). En notant P_c la pression centrale du disque, l'équation précédente devient :

$$P_c = \frac{1}{2}\Sigma\Omega^2\lambda \quad (3.20)$$

Par ailleurs, en utilisant l'équation 3.17, l'équation 3.15 intégrée verticalement devient :

$$F_z(H) = \frac{9}{8}\Sigma \langle \nu_T \rangle_F \Omega^2 = \frac{3}{8}\frac{\dot{M}}{\pi}\Omega^2 \quad (3.21)$$

On peut par ailleurs définir une température effective du disque (la température de rayonnement de l'anneau considéré) reliée au flux radiatif à la surface du disque par :

$$F_z(H) = \sigma T_{eff}^4 \quad (3.22)$$

Les équations 3.17, 3.21 et 3.22 sont les seules à ne pas nécessiter d'approximation supplémentaire. La dernière équation restante (structure verticale en température) ne peut pas être calculée analytiquement sans introduire d'hypothèse supplémentaire. Cette approximation à ajouter, souvent appelée "one zone", consiste à estimer les gradients verticaux à la surface d'une quantité Q par sa valeur centrale divisée par l'épaisseur du disque :

$$\partial_z Q \Big|_{z=H} = -\frac{Q(z=0)}{H} \quad (3.23)$$

En utilisant la définition de la profondeur optique τ

$$\partial_z \tau = -\kappa_R \rho \quad (3.24)$$

la définition du flux radiatif devient :

$$F_z(z) = \frac{8}{3}\sigma T^3 (\partial_z \tau)^{-1} \partial_z T \quad (3.25)$$

En $z = H$, cette équation et l'équation 3.23 permettent d'exprimer la température centrale par :

$$\frac{T_c^4}{4H} = \frac{3}{8}\frac{1}{\sigma}\frac{\tau_c}{H}F_z(H) \quad (3.26)$$

où les valeurs centrales (en $z = 0$) sont notées avec un petit c .

Finalement, en combinant cette dernière équation avec l'équation 3.21, la température centrale du disque est donnée par :

$$T_c(R) = \left(\frac{9}{16}\frac{\dot{M}}{\pi\sigma}\tau_c\Omega^2\right)^{1/4} \quad (3.27)$$

La dernière inconnue du système, qui en l'occurrence conditionne toute la structure du disque, est la profondeur optique centrale du disque. Son expression requiert un retour à sa définition 3.24. L'intégration verticale de l'équation 3.24 donne :

$$\tau_s - \tau_c = -\frac{1}{2}\Sigma < \kappa_R >_F \quad (3.28)$$

où le facteur 1/2 vient de la parité de la fonction $\partial_z \tau$.

Le coefficient d'absorption radiative est une fonction de la composition chimique du gaz et de la température (qui conditionne le degré d'excitation des espèces). Dans les régimes de densité et température qui nous intéressent, le gaz nébulaire est sous forme moléculaire. Dans ce cas, la composition chimique du gaz restent globalement inchangée (Le gaz est toujours composé principalement d'hydrogène moléculaire et les grains sont condensés) ce qui rend le coefficient d'absorption très peu dépendant de la densité.

Par ailleurs, le gaz est considéré comme parfait :

$$P_c = \frac{\rho_c R_B T_c}{\mu} \quad (3.29)$$

où R_B est la constante des gaz parfaits (8.314 en unités du système international) et μ est le poids moléculaire moyen du gaz (2.4 unités de masse atomique, en supposant un gaz de composition solaire).

Pour résoudre le système d'équations, restent à exprimer les moyennes de Favre de la viscosité $< \nu_T >_F$, du coefficient d'absorption $< \kappa_R >_F$, la longueur caractéristique λ et la densité centrale ρ_c en fonction des variables thermodynamiques qui nous intéressent, à savoir P_c, T_c, Σ et H . Par souci de simplicité, les approximations suivantes sont effectuées :

$$< \nu_T >_F = \alpha c_S(z=0)H \quad (3.30)$$

$$< \kappa_R >_F = \kappa_R(z=0) \quad (3.31)$$

$$\lambda = \frac{H}{2} \quad (3.32)$$

$$\rho_c = \frac{\Sigma}{2H} \quad (3.33)$$

Dans ce cas le système d'équations régissant la structure du disque est :

$$\Sigma = \frac{\dot{M}}{3\pi\alpha c_S(T)H} \quad (3.34)$$

$$T = \left(\frac{9}{16} \frac{\dot{M}}{\pi\sigma} \frac{1}{2} \Sigma \kappa_R(\rho, T) \Omega^2 \right)^{1/4} \quad (3.35)$$

$$H = \sqrt{2 \frac{R_B T}{\mu \Omega^2}} \quad (3.36)$$

$$P = \frac{\Sigma R_B T}{\mu H} \quad (3.37)$$

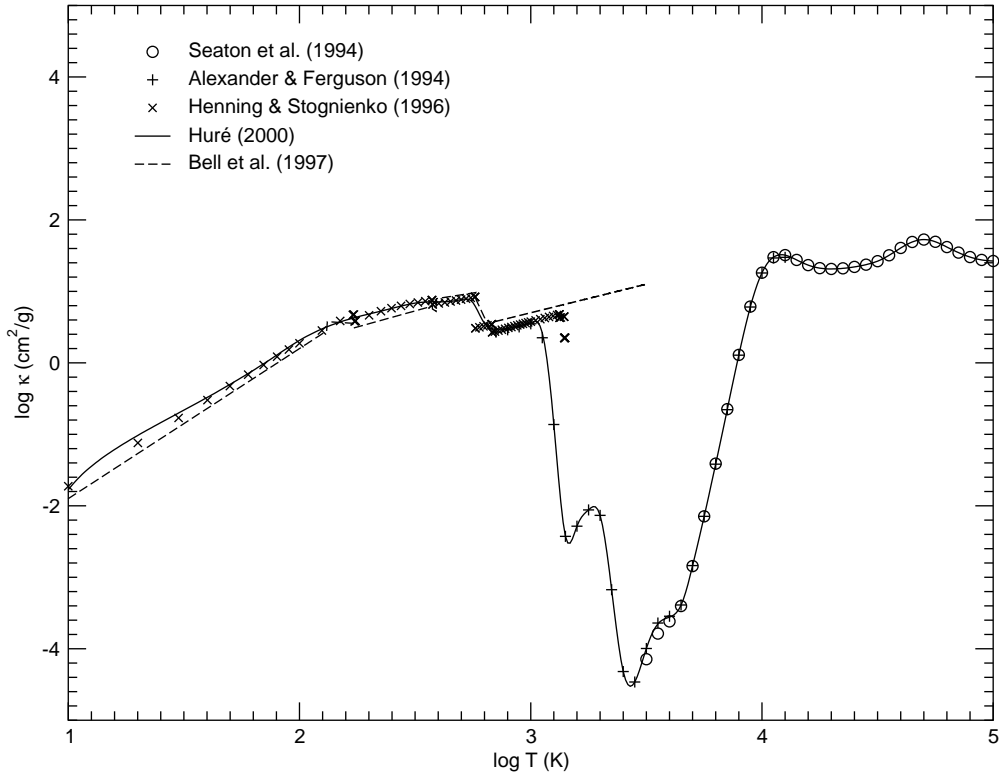


FIG. 3.1 – Moyenne de Rosseland du coefficient d'absorption radiative en fonction de la température (compilation issu de Huré (2000) incluant les travaux de Seaton et al. (1994), Alexander and Ferguson (1994), Henning and Stognienko (1996) et Bell et al. (1997)).

où les petits "c" en indice ont été oubliés pour alléger les notations.

Ces équations peuvent être réécrites de la façon suivante :

$$T^5 = 1.20 \times 10^{-6} \alpha^{-1} \kappa_R \dot{M}^2 \Omega^3 \quad (3.38)$$

$$\Sigma^5 = 1.80 \times 10^{-3} \alpha^{-4} \kappa_R^{-1} \dot{M}^3 \Omega^2 \quad (3.39)$$

$$H^{10} = 8.32 \times 10^3 \alpha^{-1} \kappa_R \dot{M}^2 \Omega^{-7} \quad (3.40)$$

où les grandeurs sont exprimées en cgs.

La résolution de ce système d'équations nécessite l'apport des coefficients d'absorption. En pratique ces coefficients sont tabulés et leur expression réaliste est montrée sur la figure 3.1.

Néanmoins, pour rendre analytique la résolution du système d'équations, nous utiliserons une version analytique approximée des coefficients d'absorption tirée de l'appendice de Ruden and Pollack (1991) à partir de Pollack et al. (1985). L'expression du coefficient d'absorption est dépendante de "zones" de température :

Pour $T < 150K$

$$\kappa_1 = 2 \times 10^{-4} T^2 \quad (3.41)$$

alors, en unités cgs (température en K , densité de surface en g/cm^2 et épaisseur en cm) :

$$T = 1.96 \times 10^7 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{1/2} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{2/3} \alpha^{-1/3} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-3/2} \quad (3.42)$$

$$\Sigma = 1.39 \times 10^2 \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{1/3} \alpha^{-2/3} \quad (3.43)$$

$$H = 1.85 \times 10^{14} \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{-1/4} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{1/3} \alpha^{-1/6} \left(\frac{R}{UA} \right)^{3/4} \quad (3.44)$$

Pour $150K < T < 180K$

$$\kappa_2 = 1.15 \times 10^{18} T^{-8} \quad (3.45)$$

alors :

$$T = 2.27 \times 10^3 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{3/26} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{2/13} \alpha^{-1/13} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-9/26} \quad (3.46)$$

$$\Sigma = 1.20 \times 10^7 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{5/13} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{11/13} \alpha^{-12/13} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-15/13} \quad (3.47)$$

$$H = 2.00 \times 10^{12} \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{-23/52} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{2/26} \alpha^{-1/26} \left(\frac{R}{UA} \right)^{12/13} \quad (3.48)$$

Pour $180K < T < 2 \times 10^3 \rho^{1/50} K$ (où ρ est en cgs)

$$\kappa_3 = 2 \times 10^{-2} T^{3/4} \quad (3.49)$$

alors :

$$T = 4.15 \times 10^5 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{6/17} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{8/17} \alpha^{-4/17} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-18/17} \quad (3.50)$$

$$\Sigma = 6.58 \times 10^4 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{9/34} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{9/17} \alpha^{-13/17} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-15/34} \quad (3.51)$$

$$H = 2.70 \times 10^{13} \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{-11/34} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{4/17} \alpha^{-2/17} \left(\frac{R}{UA} \right)^{33/34} \quad (3.52)$$

Pour $2 \times 10^3 \rho^{1/50} K < T < 2780 \rho^{1/48} K$

$$\kappa_4 = 1.57 \times 10^{60} \rho^{3/8} T^{-18} \quad (3.53)$$

alors :

$$T = 2.85 \times 10^3 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{135/1784} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{171/1784} \alpha^{-99/1784} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-405/1784} \quad (3.54)$$

$$\Sigma = 9.56 \times 10^6 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{757/1784} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{1613/1784} \alpha^{-1685/1784} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-2271/1784} \quad (3.55)$$

$$H = 2.27 \times 10^{12} \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{-1649/3568} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/an} \right)^{171/3568} \alpha^{-99/3568} \left(\frac{R}{UA} \right)^{4947/3568} \quad (3.56)$$

Pour $2780\rho^{1/48}K < T < 1.025 \times 10^4 \rho^{2/27}K$

$$\kappa_5 = 1.6 \times 10^{-2} \quad (3.57)$$

alors :

$$T = 5.71 \times 10^4 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{3/10} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/\text{an}} \right)^{2/5} \alpha^{-1/5} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-9/10} \quad (3.58)$$

$$\Sigma = 4.78 \times 10^5 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{1/5} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/\text{an}} \right)^{3/5} \alpha^{-4/5} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-3/5} \quad (3.59)$$

$$H = 1.00 \times 10^{13} \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{-1/4} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/\text{an}} \right)^{1/5} \alpha^{-1/10} \left(\frac{R}{UA} \right)^{21/20} \quad (3.60)$$

Pour $1.025 \times 10^4 \rho^{2/27}K < T < 3200K$

$$\kappa_6 = 2 \times 10^{34} T^{-9} \quad (3.61)$$

alors :

$$T = 5.53 \times 10^3 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{3/32} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/\text{an}} \right)^{1/8} \alpha^{-1/16} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-9/32} \quad (3.62)$$

$$\Sigma = 4.94 \times 10^6 \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{13/32} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/\text{an}} \right)^{1/16} \alpha^{-15/16} \left(\frac{R}{UA} \right)^{-39/32} \quad (3.63)$$

$$H = 3.12 \times 10^{12} \left(\frac{M_*}{M_\odot} \right)^{-29/64} \left(\frac{\dot{M}}{M_\odot/\text{an}} \right)^{1/16} \alpha^{-1/32} \left(\frac{R}{UA} \right)^{87/64} \quad (3.64)$$

Ce modèle analytique est assez semblable à ceux de Dubrulle (1993) et Huré (1998). Il est remarquable que bien qu'ils soient fondés sur les mêmes équations, aucun, de ce modèle et des deux autres, ne donne la même valeur numérique pour les grandeurs thermodynamiques. En effet, les nombreuses approximations effectuées pour dériver analytiquement la structure du disque peuvent prendre des formes diverses, souvent contestables. En l'occurrence le modèle ici développé ne diffère des deux précédemment cités que par le traitement de l'équilibre hydrostatique et la définition de l'épaisseur du disque.

Ainsi bien que les modèles analytiques permettent une résolution raisonnablement bonne des équations du disque (Huré and Galliano 2001), nous utiliserons dans la suite une approche numérique pour la résolution de ces équations. Cette approche, appelée approche à 1+1 dimensions, calcule sans approximation supplémentaire les équations développées dans la section 3.1.2.

Résolution numérique de la structure verticale

La deuxième approche pour résoudre le système d'équations du disque mince consiste à résoudre numériquement la structure verticale du disque. D'un point de vue

purement formel, cette approche est plus simple dans la mesure où elle ne nécessite pas de faire les approximations inhérentes à l'approche semi-analytique. Les équations résolues sont alors :

$$\partial_z F_z = \frac{9}{4} \rho \nu_T \Omega^2 \quad (3.65)$$

$$\partial_z T = \frac{3}{8} \frac{\rho \kappa_R}{\sigma T^3} F_z \quad (3.66)$$

$$\partial_z P = \rho \frac{GMz}{R^3} \quad (3.67)$$

$$(3.68)$$

3.1.3 Une pseudo-dépendance en temps

L'évolution temporelle de la structure du disque est par définition inaccessible aux solutions stationnaires. En toute généralité, pour la calculer, il faudrait utiliser une approche différente. Néanmoins si le temps d'ajustement dynamique du disque est suffisamment court devant le temps caractéristique d'évolution du disque, il est possible de modéliser l'évolution du disque par une suite de solutions stationnaires. Il est important de comprendre que l'évolution du disque est alors contrôlée par *l'évolution des conditions aux limites du système*. En pratique l'évolution du disque est contrôlée par l'évolution du flux de masse (accrétion) sur l'étoile. Les observations montrent en effet que le taux d'accrétion dans le disque semble varier avec l'âge de l'étoile et que cette variation peut être raisonnablement bien reproduite par une loi du type :

$$\dot{M}(t) = \dot{M}_0 \left(1 + \frac{t}{t_0}\right)^{-s} \quad (3.69)$$

où s est trouvé de l'ordre de 1.5 et \dot{M}_0 de l'ordre de $10^{-6} M_\odot / \text{an}$ (Hartmann et al. 1998, Calvet et al. 2000). Bien entendu ces valeurs sont très imprécises. La valeur de t_0 n'a jamais été déterminée.

Cette loi avait d'abord été introduite théoriquement par Makalkin and Dorofeyeva (1991) pour reproduire les simulations de Ruden and Pollack (1991). Ces mêmes auteurs avaient exprimé le temps caractéristique d'évolution du disque par :

$$t_0 = \frac{R_D^2}{3\nu_T(R_D)} \quad (3.70)$$

où R_D est le rayon externe initial du disque.

Il est important de noter que les solutions stationnaires calculées dans les sections précédentes sont par construction infinies en rayon. Pour leur donner une taille finie, ces solutions sont coupées *a posteriori* au rayon R_D . Ce rayon a une évolution alors indépendante des autres équations du système qui suit la loi (Drouart et al. 1999) :

$$\frac{dR_D}{dt} = \frac{3}{2} \frac{\nu_T}{R_D} \quad (3.71)$$

L'ajout des relations 3.69 et 3.71 vient compenser l'absence d'évolution temporelle inhérente à l'utilisation de solutions stationnaires. Physiquement la décroissance du

taux d'accrétion est la conséquence d'une part de la dilution de la masse du disque par diffusion turbulente et d'autre part de sa diminution par accrétion dans l'étoile. L'évolution du rayon du disque représente quant à elle la diffusion de la matière (et du moment cinétique) vers l'extérieur. Précisons que ces relations ont été calibrées sur l'étude de Ruden and Pollack (1991), où une approche réellement dépendante du temps avait été utilisée.

Les équations 3.69 et 3.71 gèrent à elles seules l'évolution temporelle du disque. Le système d'équations composé de ces deux dernières équations et des équations stationnaires de la structure thermodynamique du disque dépend de trois paramètres libres :

α la viscosité turbulente dédimensionnée (supposée indépendante du temps)

\dot{M}_0 le taux d'accrétion initial du disque

$R_D(t = 0)$ le rayon initial du disque (la condition initiale de l'équation 3.71)

3.2 Calibration du modèle

Afin de contraindre les valeurs des paramètres libres du modèle, il faut le comparer aux observations de disques circumstellaires. Malheureusement, les observations actuelles des disques fournissent peu d'information sur leurs régions internes, c'est à dire sur les régions contenues dans les 30 unités astronomiques les plus proches de l'étoile. Pour trouver des informations sur ces régions, où les planètes du système solaire sont contenues, il faut se tourner vers le seul disque où l'on ait suffisamment de résolution spatiale : la nébuleuse solaire primitive. Le problème peut sembler alors encore plus inextricable : la nébuleuse n'existe plus. Néanmoins, les objets du système solaire s'y sont formés et sont en un sens des reflets de ce qu'était ce disque. Le jeu est donc de trouver dans le système solaire des informations qui sont restées inchangées depuis sa formation. Cette information se trouve dispersée entre d'une part les météorites et les comètes (pour les phases condensées) et d'autre part les planètes géantes Jupiter et Saturne (pour la phase gazeuse non condensable). Les planètes géantes Uranus et Neptune sont, comme nous le verrons dans la prochaine section, à mi-chemin entre Jupiter et Saturne (planètes géantes essentiellement gazeuses) et les comètes glacées. Ces différents objets ont gardé la trace d'une puissante contrainte : le fractionnement isotopique du rapport D/H entre l'eau et l'hydrogène. Cette contrainte fut d'abord identifiée par Lécluse et al. (1996) puis appliquée dans sa forme actuelle par Drouart et al. (1999) au cas des solutions moyennées verticalement puis par Hersant et al. (2001) au cas des solutions verticalement résolues. Bien que le formalisme soit très semblable, c'est sur l'approche développée dans Hersant et al. (2001) que nous nous appuyons plus dans la suite.

3.2.1 Fractionnement du rapport D/H : l'essence de la contrainte

La réaction d'échange isotopique d'un atome de Deuterium entre l'eau et l'hydrogène est la suivante :



La constante d'équilibre de la réaction est donnée par :

$$K(T) = \frac{(HDO)(H_2)}{(H_2O)(HD)} \quad (3.73)$$

où les parenthèses représentent une activité thermodynamique. Dans le cas de gaz, l'activité d'une espèce chimique est égale à sa pression partielle.

On peut alors définir, indépendamment du fait que la réaction soit à l'équilibre ou pas un *facteur de fractionnement* par :

$$f = \frac{(HDO)(H_2)}{(H_2O)(HD)} \quad (3.74)$$

A l'équilibre, ce facteur de fractionnement est égal à la constante de réaction par définition. Or la constante d'équilibre d'une réaction est une fonction de la température et de la température seulement. Donc quand la réaction d'échange isotopique est à l'équilibre, le facteur de fractionnement est un puissant traceur de la température.

Le problème pourrait alors sembler d'une extrême simplicité ! Il suffirait de mesurer ce facteur dans un objet du système solaire pour en connaître la température de formation. *Malheureusement à basse température et dans un milieu non ionisé cette réaction est cinétiquement inhibée et n'atteint jamais l'équilibre.*

Dans ce cas, la diffusion turbulente des réactifs joue un rôle primordial dans l'évolution du facteur d'enrichissement et une approche hors équilibre doit être menée.

Néanmoins, son traitement tire avantage du fait que l'hydrogène était la molécule la plus abondante dans la nébuleuse et qu'il peut donc être considéré comme un réservoir de Deuterium. Le rapport D/H dans l'hydrogène moléculaire est très peu influencé par la présence de Deuterium dans d'autres molécules nettement moins abondantes, comme l'eau.

3.2.2 Le rapport D/H dans le système solaire

Les observations du rapport D/H dans le système solaire sont résumées sur la figure 3.2.

Le fait que Jupiter soit composé en majorité d'hydrogène permet de supposer que son rapport D/H mesuré dans l'hydrogène est la valeur protosolaire du rapport D/H dans l'hydrogène moléculaire. Cette intuition est en fait confirmée par l'estimation du rapport D/H protosolaire à partir du rapport ${}^3\text{He}/{}^4\text{He}$ dans le vent solaire (Geiss and

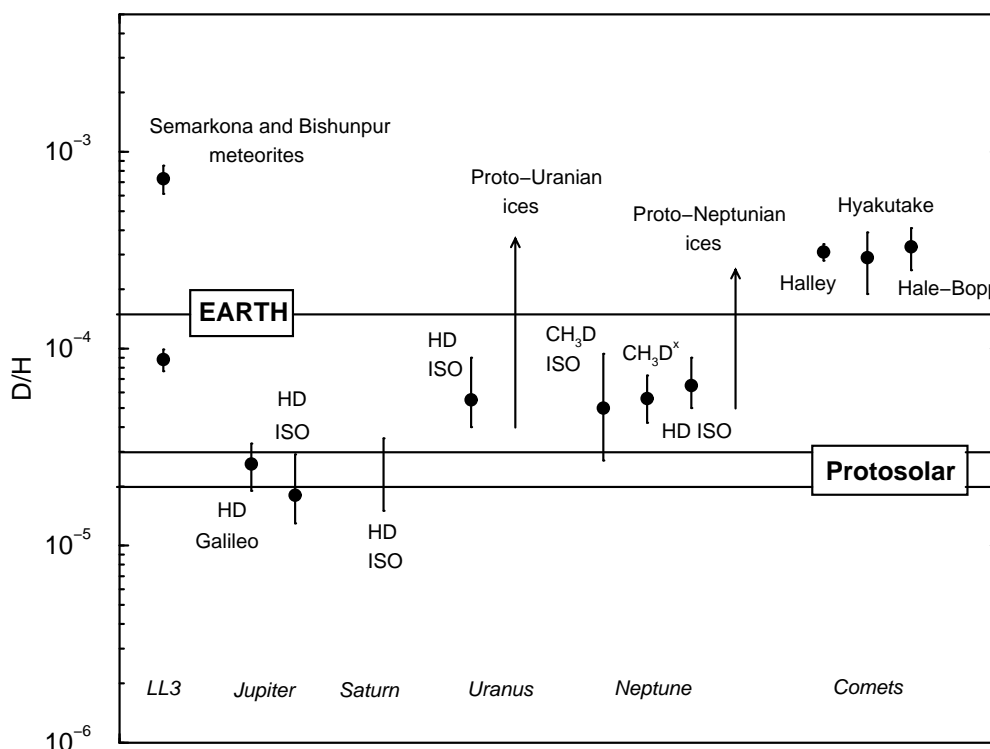


FIG. 3.2 – Abondance volumique du Deuterium par rapport à l’hydrogène dans le système solaire (issu de Hersant et al. (2001) à partir de Bockelée-Morvan et al. (1998))

Gloeckler 1998) qui, compte tenu des barres d’erreur, est en bon accord avec la mesure par spectroscopie de masse dans Jupiter, à partir de données de la sonde Galileo (Mahaffy et al. 1998) et la mesure du spectrographe infrarouge a bord du satellite ISO (Lellouch et al. 2001). Les mesures Galileo étant précises et n’ayant pas nécessité de modélisation additionnelle, elles reçoivent aujourd’hui plus de confiance auprès de la communauté. Afin de prendre en compte toutes les estimations du rapport D/H protosolaire, nous utiliserons dans la suite une moyenne pondérée (par l’inverse des barres d’erreur) de toutes ces mesures :

$$D/H(H_2)\Big|_{proto} = 2.5 \pm 0.5 \times 10^{-5} \quad (3.75)$$

D’autre part les météorites de Semarkona et Bishunpur (LL3) analysées par (Delouie et al. 1998) montrent la coexistence de phases minéralogiques dont le rapport D/H dans l’eau est fortement enrichi par rapport à la valeur solaire, par un facteur f de l’ordre de 30, avec des phases minéralogiques dont le rapport f est seulement de l’ordre de 3. En l’occurrence la valeur fortement enrichie des météorites LL3 est la plus forte valeur du rapport D/H dans l’eau mesurée dans le système solaire avec une valeur de 730 ± 120 ppm. Cette valeur sera donc supposée être la valeur protosolaire du rapport D/H dans l’eau :

$$D/H(H_2O)\Big|_{proto} = 7.3 \pm 1.2 \times 10^{-4} \quad (3.76)$$

A la vue de ces deux valeurs protosolaires pour les deux molécules qui nous in-

téressent il apparaît comme évident que la valeur du D/H mesurée dans les glaces cométaires est le produit d'un échange isotopique dans le gaz de la nébuleuse. Cette valeur correspondant à un f de l'ordre de 12 est donc une contrainte puissante sur l'échange isotopique dans la nébuleuse et donc sur sa structure thermodynamique.

Le cas des planètes géantes mérite alors quelques remarques : si Jupiter et Saturne ont un rapport D/H qui correspond à la valeur protosolaire dans H_2 , Uranus et Neptune ont un rapport D/H qui semble intermédiaire à la valeur protosolaire et la valeur des glaces cométaires. Après la formation de la planète, l'eau et l'hydrogène moléculaire équilibrent leur rapport isotopique, le rapport D/H de toute les molécules hydrogénées de l'enveloppe devient homogène et la valeur mesurée 4.5 milliards d'années plus tard dans l'hydrogène de la planète est une moyenne pondérée par leur abondance du rapport D/H dans toutes les molécules présentes dans le gaz et les planétésimaux qui ont formé la planète. Ainsi un simple regard sur leur rapport D/H permet de savoir que Jupiter et Saturne ont peu d'eau en proportion par rapport à l'hydrogène et ont donc un rapport D/H pratiquement égal à la valeur protosolaire dans H_2 , alors que Uranus en Neptune en ont beaucoup plus et ont un rapport D/H à mi-chemin entre la valeur protosolaire dans H_2 et la valeur des glaces cométaires.

La coexistence entre la valeur dite protosolaire dans l'eau et une valeur très faiblement enrichie dans les météorites est la plus puissante contrainte sur les modèles de nébuleuse. Les météorites (comme tous les planétésimaux) se sont formées à partir d'un agrégat de grains de glaces et de silicates dont le rapport D/H correspond à la valeur dans l'eau gazeuse au moment de sa condensation. Le modèle doit donc être capable d'expliquer que des grains de glace aient pu se condenser avec des valeurs pour f variant entre 3 et 30.

3.2.3 Chimie isotopique du rapport D/H en milieu turbulent

Le traitement du problème requiert la prise en compte de la diffusion turbulente des réactifs. En l'absence d'échange chimique, chaque espèce voit son rapport de mélange suivre une équation de diffusion classique :

$$\partial_t C + U \partial_R C = \frac{1}{R \Sigma} \partial_R \Sigma \kappa_T R \partial_R C \quad (3.77)$$

Notons C_1 le rapport de mélange HDO/H_2O et C_2 le rapport de mélange HD/H_2 . Le facteur de fractionnement isotopique f est alors donné par :

$$f = \frac{C_1}{C_2} \quad (3.78)$$

La seule espèce chimique à être influencée par l'échange isotopique est HDO , car HD est un réservoir de deuterium et H_2O est un réservoir "d'eau". Pour calculer le terme d'échange isotopique, écrivons les taux d'échange :



où les constantes de vitesse k_1 et k_2 sont reliées à la constante d'équilibre par :

$$K(T) = \frac{k_2}{k_1} \quad (3.80)$$

La réaction ne mettant *a priori* pas en jeu de collision à trois corps, l'évolution de l'activité chimique de HDO suit la loi :

$$\frac{d(HDO)}{dt} = k_2(H_2O)(HD) - k_1(HDO)(H_2) \quad (3.81)$$

De là :

$$\frac{dC_1}{dt} = k_2(HD) - k_1C_1(H_2) \quad (3.82)$$

Les deux équations de diffusion pour C_1 et C_2 sont donc :

$$\partial_t C_1 + U \partial_R C_1 = \frac{1}{R\Sigma} \partial_R \Sigma \kappa_T R \partial_R C_1 + k_2(HD) - k_1 C_1(H_2) \quad (3.83)$$

$$\partial_t C_2 + U \partial_R C_2 = \frac{1}{R\Sigma} \partial_R \Sigma \kappa_T R \partial_R C_2 \quad (3.84)$$

Sachant que

$$df = \frac{1}{C_2} dC_1 - \frac{C_1}{C_2^2} dC_2, \quad (3.85)$$

l'équation de diffusion pour le facteur de fractionnement s'écrit :

$$\partial_t f + U \partial_R f = \frac{1}{C_2 R \Sigma} \partial_R R \Sigma \kappa_T \partial_R C_1 - \frac{C_1}{C_2^2 R \Sigma} \partial_R R \Sigma \kappa_T \partial_R C_2 + k_2(H_2) - k_1 f(H_2) \quad (3.86)$$

En rassemblant les termes à l'aide des équations 3.80 et 3.85 l'équation de diffusion pour f s'écrit :

$$\partial_t f + U \partial_R f = \frac{1}{R\Sigma} \partial_R R \Sigma \kappa_T \partial_R f - 2\kappa_T \frac{\partial_R C_2}{C_2} \partial_R f + k_1(H_2) (K(T) - f) \quad (3.87)$$

Etant donné que HD est le réservoir principal de deuterium, il est facile de s'assurer que $\partial_R C_2$ est négligeable devant les autres termes de l'équation. Cette estimation est plus récente que les oeuvres publiées. A l'origine (Drouart et al. 1999, Hersant et al. 2001), ce terme avait été estimé de la façon suivante :

$$\frac{\partial_R C_2}{C_2} = \frac{\partial_R \Sigma}{\Sigma} \quad (3.88)$$

D'autre part l'activité d'un gaz est donnée par sa pression partielle. Dans le cas de H_2 , sa pression partielle étant la pression totale du gaz, son activité est $(H_2) = P$. Finalement :

$$\partial_t f + U \partial_R f = \frac{1}{R\Sigma} \partial_R R \Sigma \kappa_T \partial_R f + k(T) P (K(T) - f) \quad (3.89)$$

où le 1 en indice de la constante de vitesse a été oublié pour simplifier les notations.

Dans le cas des oeuvres publiées Drouart et al. (1999) et Hersant et al. (2001) l'équation de diffusion intégrée était :

$$\partial_t f + \left(U - 2\kappa_T \frac{\partial_R \Sigma}{\Sigma} \right) \partial_R f = \frac{1}{R\Sigma} \partial_R R \Sigma \kappa_T \partial_R f + k(T) P (K(T) - f) \quad (3.90)$$

Nous nous placerons dans ce dernier cas dans un premier temps pour discuter dans la section 3.3 de l'influence du traitement de $\partial_R C_2$.

Les dépendances de k et K sont tabulées dans Lecluse and Robert (1994) :

$$K(T) = e^{0.04 - \frac{13.17}{\sqrt{T}} + \frac{583.75}{T}} \quad (3.91)$$

$$k(T) = 5.376 \times 10^{-3} e^{-\frac{5170}{T}} \frac{273}{T} \quad (3.92)$$

où $k(T)$ est en $atm^{-1}s$.

Numériquement, cette équation est calculée suivant un schéma de Crank-Nicholson (Press et al. 1992). Ce schéma semi-implicite en temps assure une stabilité inconditionnelle aux calculs. La discrétisation spatiale suit une progression géométrique $R_{i+1} = 1.03R_i$. Le pas de temps est adapté à l'échange chimique et ne peut pas être plus grand que 50 ans pour assurer un bon traitement du transport diffusif.

3.2.4 Contraintes additionnelles

Le fractionnement isotopique du rapport D/H entre l'eau et l'hydrogène moléculaire est une puissante contrainte sur les profils radiaux de la température dans le gaz de la nébuleuse solaire primitive, et de son évolution temporelle. En l'occurrence, nous avons pu tester que les contraintes souvent rencontrées dans la littérature concernant la température de formation des météorites sont moins contraignantes que le fractionnement du D/H ⁶. Néanmoins un profil de température donné peut être atteint par plusieurs types de paramètres libres. En particulier les profils de température de modèles ayant un même rapport \dot{M}/α sont assez équivalents.

Ainsi pour limiter le jeu de paramètres libres possibles, nous avons choisi d'utiliser un jeu de contraintes physiques additionnelles sur les modèles :

Pour empêcher le disque de développer des instabilités gravitationnelles à grande échelle qui auraient mis en péril sa survie et sans doute dans une certaine mesure empêché la formation des planètes, nous avons limité sa masse à 0.3 masse solaires. Cette valeur limite a été tirée de l'article de Shu et al. (1990) qui ont étudié les conditions de développement de telles instabilités. Il est important de noter que la formation des planètes géantes fait intervenir une instabilité gravitationnelle *locale* qui n'est pas exclue par cette limitation de masse. Cette valeur limite de 0.3 masses solaires reste controversée : les disques de cette masse sont connus pour être auto-gravitants dans la région des planètes géantes (Huré 2000). Cette controverse devrait être levée dans un avenir proche par un traitement plus précis et auto-cohérent du champ de gravité du disque et de son rôle dans la dynamique (Jean-Marc Huré, communication personnelle).

⁶Dans les papiers un peu anciens, apparaît parfois une contrainte sur les températures de formation des planètes géantes. Cette contrainte, basée sur une conception aujourd'hui abandonnée de la formation planétaire (Lewis 1974), n'a plus lieu d'être et n'est plus utilisée dans les oeuvres récentes.

La masse des solides (glaces, silicates et métaux) dans le système solaire est de $3 \times 10^{-4} M_{\odot}$. Il faut donc qu'initialement ces solides aient été présents dans la nébuleuse. En supposant un rapport gaz/poussières initial de 100, cette propriété se traduit par le fait que la masse de la nébuleuse solaire primitive devait être initialement au minimum de $0.03 M_{\odot}$.

Nous avons forcé le rayon externe de la région turbulente à atteindre l'orbite de Neptune en moins de 250 000 ans après la formation du soleil. Cette contrainte est un peu arbitraire et sera sans doute à relâcher dans les travaux futurs. Elle présente néanmoins l'avantage de forcer les solutions du problème à être des disques d'extension radiale raisonnable ($\gtrsim 100$ unités astronomiques), comparables aux disques circumstellaires.

3.2.5 Application du formalisme au modèle

Le modèle comporte 3 paramètres libres : α , \dot{M}_0 et $R_D(t=0)$. Le traitement du fractionnement isotopique comme scalaire passif fait apparaître un quatrième paramètre libre : le nombre de Prandtl turbulent $P_R = \frac{\nu_T}{\kappa_T}$.

La figure 3.3 montre un exemple de calcul d'évolution de f dans une structure thermodynamique calculées avec un paramètre $\alpha = 0.009$, un taux d'accrétion initial de $5 \times 10^{-6} M_{\odot}/\text{an}$ et un rayon initial de 17 unités astronomiques. Ce modèle est un exemple caractéristique des modèles globalement satisfaisants. Ses profils de température, densité de surface et pression sont montrés sur les figure 3.4, 3.5 et 3.6.

Nous avons testé environ 240000 modèles pour trois valeurs de P_R . La gamme de paramètres libres est alors assez restreinte. Parmi les trois valeurs de P_R testées (0.196, 0.7, 1), la valeur $P_R = 0.7$ est associée au plus grand nombre de modèles possibles et a été choisie par principe de plus grande incertitude. Dans ce cas, les paramètres sont bornés de la façon suivante :

- Paramètre de viscosité turbulente : $0.006 < \alpha < 0.04$
- Taux d'accrétion initial : $2 \times 10^{-6} < \dot{M}_0 < 1 \times 10^{-5}$ masses solaires par an.
- Rayon initial : $12.8 < R_D < 39$ unités astronomiques

Les résultats pour $P_R = 0.7$ sont donnés sur la figure 3.7. Chaque symbole sur ces figures représente un modèle en mesure d'expliquer les contraintes que nous avons imposées (Dans un espace des paramètres libres : α, \dot{M}_0, R_D).

Ces résultats en définitive très précis sont fortement modifiés par la valeur du nombre de Prandtl. Par exemple pour un nombre de Prandtl égal à 1, l'espace des paramètres libres est très fortement réduit. Dans ce cas α est entre 0.005 et 0.007, \dot{M}_0 entre 1.8×10^{-6} et 2.6×10^{-6} masses solaires par an, alors que R_D est entre 19.8 et 22.2 unités astronomiques. La grande précision de la détermination des paramètres libres du modèle rend cette valeur du nombre de Prandtl peu réaliste.

Néanmoins, il apparaît comme évident que le nombre de Prandtl est un paramètre crucial de la méthode. Lathrop et al. (1992) ont mesuré sa valeur expérimentalement

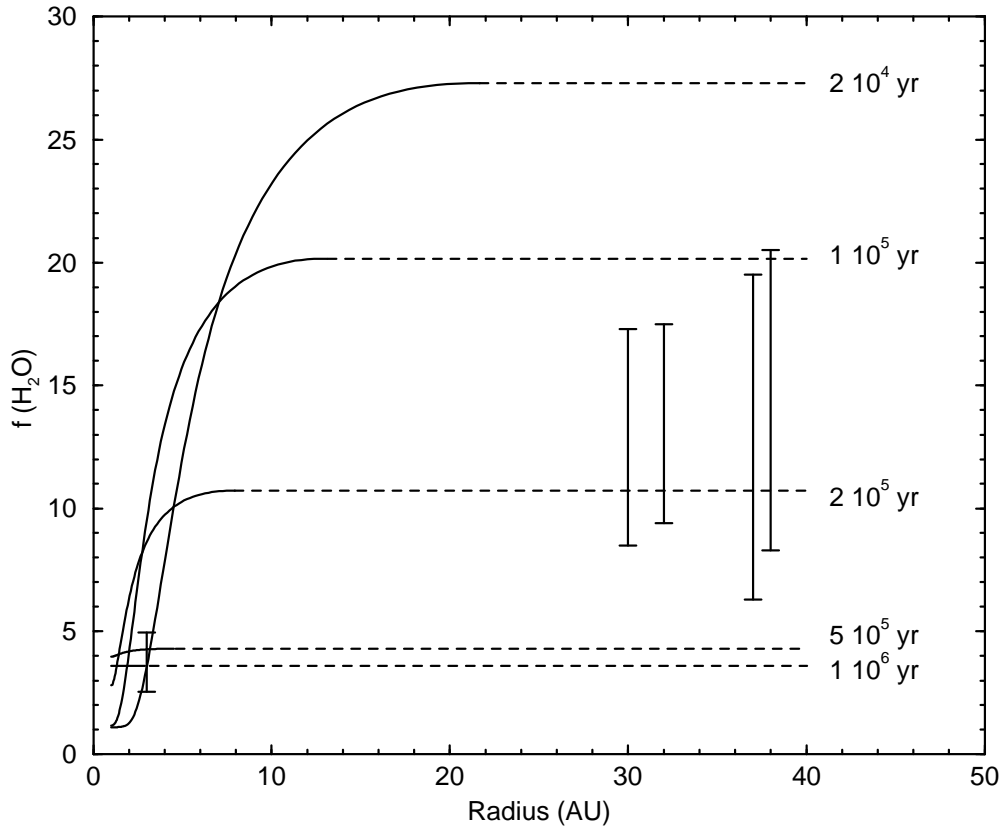


FIG. 3.3 – Structure radiale du facteur de fractionnement pour différents temps. Le trait plein représente la partie gazeuse de la nébuleuse. Les tirets marquent la région de la nébuleuse où la glace est condensée. La valeur indiquée par les tirets horizontaux est l'enrichissement minimal de la glace au temps correspondant. La position des comètes est arbitraire.

dans un écoulement de Couette-Taylor à haut nombre de Reynolds. Ils ont trouvé une valeur $P_R = 0.176$. Cette valeur n'est bien évidemment pas à prendre à la lettre dans la mesure où elle a été déterminée dans le régime avec cylindre intérieur tournant et le cylindre extérieur au repos. Comme nous l'avons vu au chapitre 1, ce régime est assez différent du régime cylindre *extérieur* tournant (plus proche des disques d'accrétion), ne serait-ce que par l'existence d'une instabilité linéaire dans ce régime. Par ailleurs Denis Richard (Richard 2001) a étudié expérimentalement l'écoulement de Couette-Taylor dans les deux régimes et a pu quantifier la non-isotropie de la turbulence. Son dispositif expérimental ne lui a malheureusement pas permis de mesurer le nombre de Prandtl dans l'écoulement, faute de pouvoir mesurer le couple résistif de l'écoulement sur un cylindre. Il m'a néanmoins suggéré (Denis Richard, communication personnelle) de corriger la valeur mesurée par Lathrop et al. (1992) de la non-isotropie de la turbulence dans l'écoulement et prendre par conséquent un nombre de Prandtl $P_R = 0.264^7$.

⁷En effet Lathrop et al. (1992) n'avaient mesuré la diffusion turbulente d'un scalaire passif que dans une direction, selon l'axe de rotation, alors que la diffusion dans la nébuleuse est plutôt radiale.

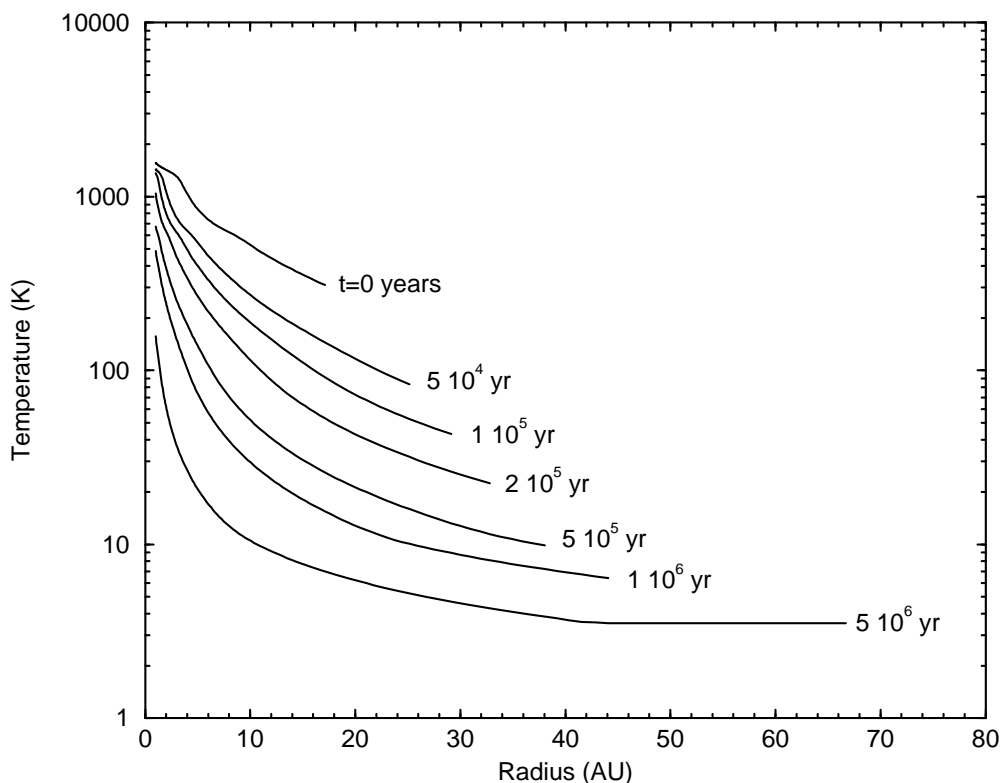


FIG. 3.4 – Structure radiale de la température pour différents temps. Les courbes sont tracées jusqu’au bord de la nébuleuse turbulente dont le rayon externe augmente avec le temps.

Le test de ces deux valeurs n’a pas permis, dans le cadre du formalisme des papiers Drouart et al. (1999) et Hersant et al. (2001), de reproduire le rapport D/H mesuré dans l’eau des météorites. En effet, les modèles capables d’expliquer les contraintes étaient alors caractérisés par un taux d’accrétion élevé engendrant en particulier un rapport H/R grand (plus grand que l’unité), brisant ainsi l’hypothèse de disque mince et donc sortant des limites de validité de ce type de modèles.

3.3 Influence du traitement de l’advection

Le traitement *a posteriori* plus judicieux du terme $\partial_R C_2$ de l’équation 3.87 par :

$$\frac{\partial_R C_2}{C_2} = 0 \quad (3.93)$$

change assez fortement les résultats. En particulier aucun modèle avec un nombre de Prandtl de 0.7 est alors en mesure de reproduire les observations du rapport D/H dans le système solaire (sans sortir des limites de validité du modèle de disque mince).

Néanmoins, avec un nombre de Prandtl plus bas, les modèles sélectionnés par Hersant et al. (2001) se retrouvent réhabilités. La figure 3.8 montre le résultat d’un cal-

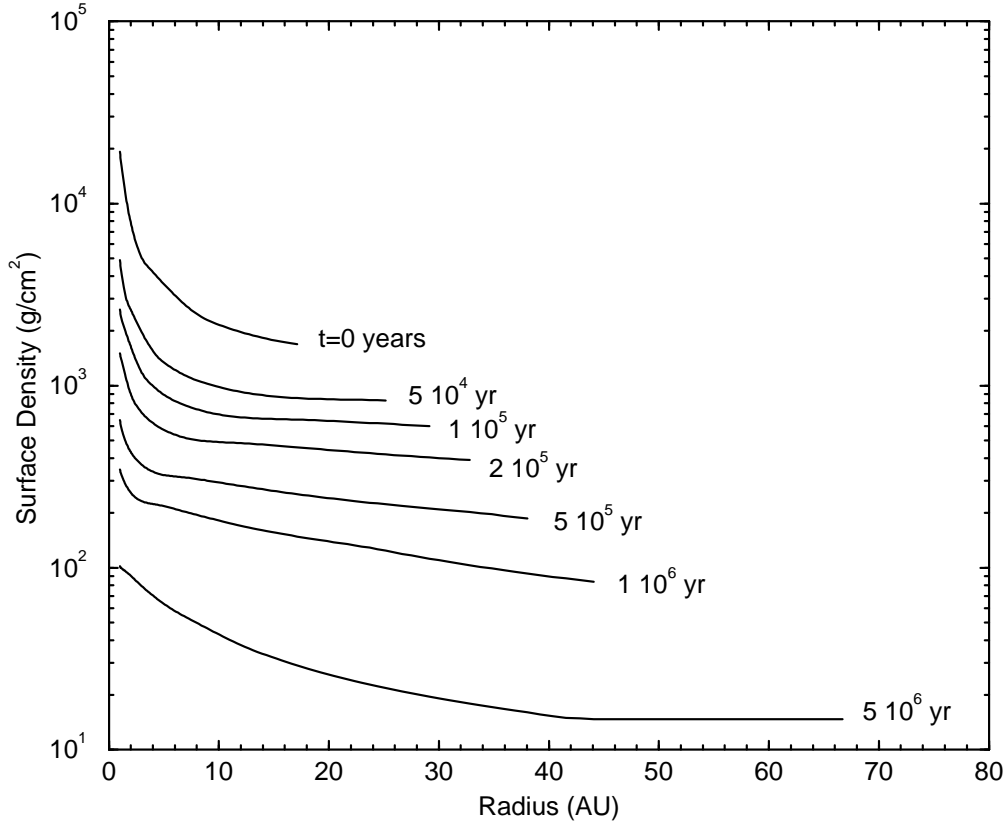


FIG. 3.5 – Structure radiale de la densité de surface pour différents temps. Les courbes sont tracées jusqu’au bord de la nébuleuse turbulente dont le rayon externe augmente avec le temps.

cul effectué avec le même modèle que celui de la figure 3.3 ($\alpha = 9 \times 10^{-3}$, $\dot{M}_0 = 5 \times 10^{-6} M_\odot / \text{an}$ et $R_D = 17 \text{UA}$), la différence résidant dans le traitement du terme advectif à l’aide de l’équation 3.89 et dans le nombre de Prandtl $P_R = 0.264$ correspondant à la valeur estimée à partir des expériences de Lathrop et al. (1992) et Denis Richard.

Nous avons défini dans ce chapitre les équations d’un modèle de champ moyen de la nébuleuse solaire primitive. Nous avons pu, grâce aux observations du fractionnement du rapport D/H entre l’eau et l’hydrogène moléculaire dans le système solaire, définir un jeu de paramètres en mesure de les reproduire. Notons que ce modèle a permis l’interprétation de la présence de silicates cristallins dans les comètes de Oort (Bockelée-Morvan et al. 2002). Au chapitre suivant nous allons utiliser la structure thermodynamique radiale et temporelle du disque ainsi déterminée afin d’explorer le lien entre turbulence et formation planétaire.

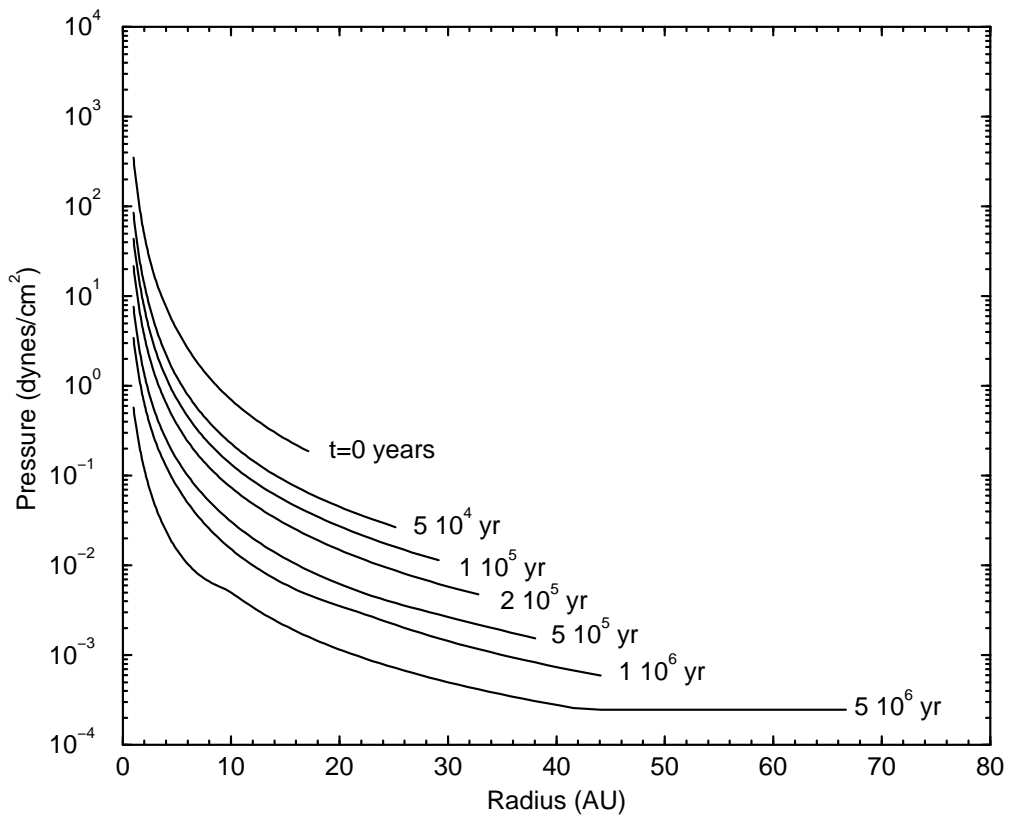


FIG. 3.6 – Structure radiale de la pression pour différents temps. Les courbes sont tracées jusqu’au bord de la nébuleuse turbulente dont le rayon externe augmente avec le temps.

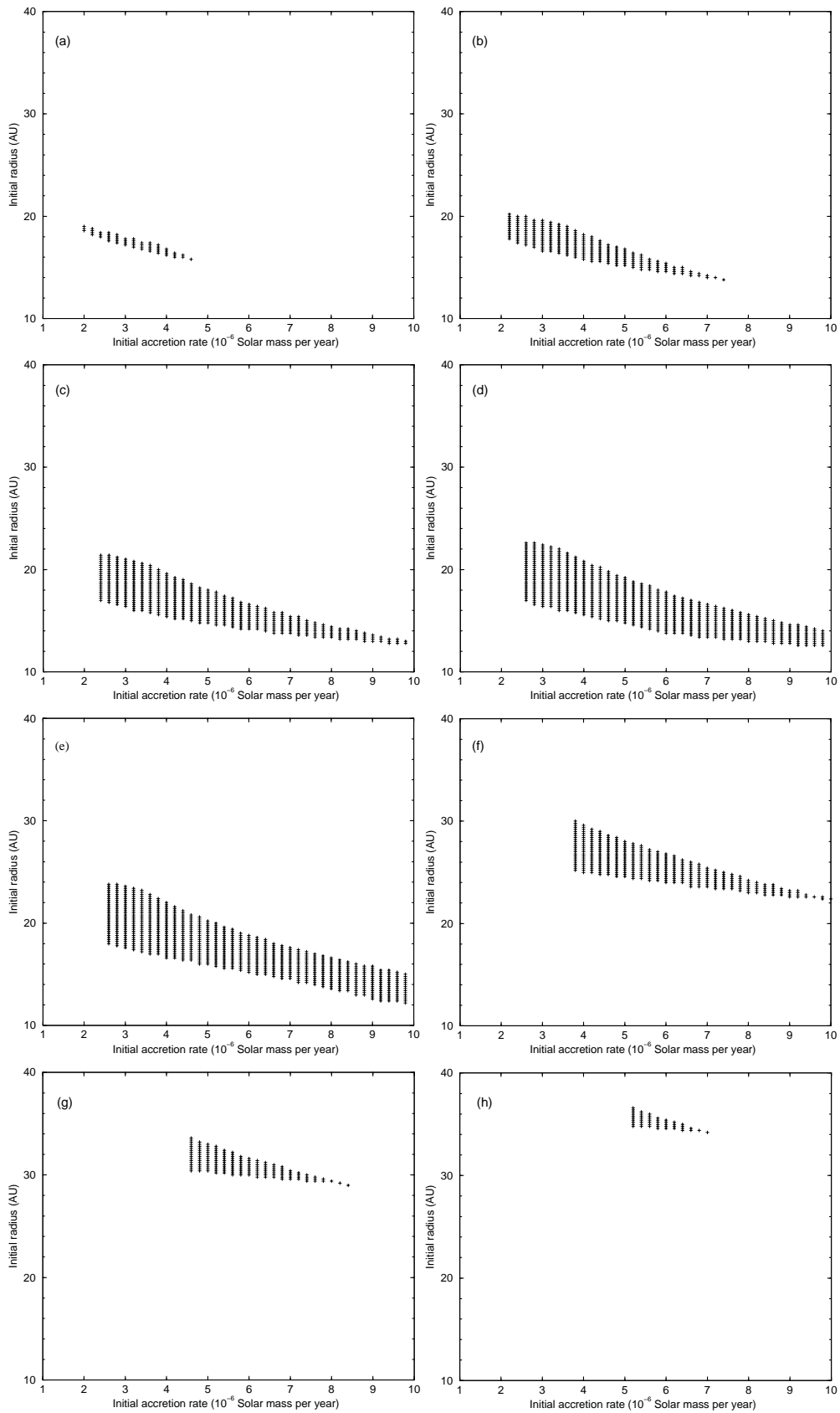


FIG. 3.7 – Représentation graphique des modèles satisfaisant les contraintes, chaque croix représente un modèle. Le rayon initial de la nébuleuse est en abscisse, le taux d'accrétion initial en ordonnée. Les huit graphiques correspondent aux huit valeurs de α : (a) $\alpha = 0.006$, (b) $\alpha = 0.007$, (c) $\alpha = 0.008$, (d) $\alpha = 0.009$, (e) $\alpha = 0.01$, (f) $\alpha = 0.02$, (g) $\alpha = 0.03$ et (h) $\alpha = 0.04$.

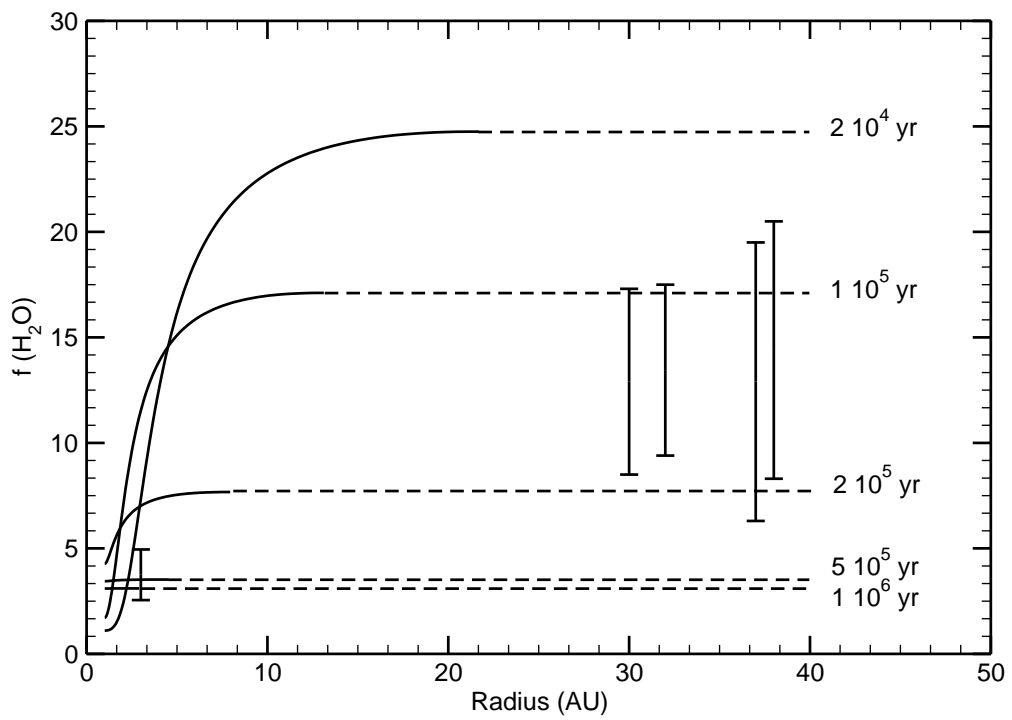


FIG. 3.8 – Structure radiale du facteur de fractionnement pour différents temps.

Chapitre 4

Formation du système solaire externe

Au chapitre précédent, nous avons trouvé une solution satisfaisante des équations de champ moyen de la nébuleuse solaire primitive et un jeu de paramètres capable de reproduire les observations actuelles du système solaire. Ainsi nous disposons d'une structure thermodynamique radiale de la nébuleuse durant toute la phase de formation des planètes et nous verrons dans ce chapitre comment l'exploiter pour comprendre, à partir de modèles très simples, certains aspects de la formation du système solaire externe, des comètes et des planètes géantes. Le principal objectif de ce chapitre est d'élucider le problème suivant : comment à partir d'un nuage de gaz de composition solaire ont pu se former des corps glacés ayant une composition très différente ?

La table 4.1 résume la composition atomique et moléculaire de la nébuleuse solaire primitive initialement.

Espèce X	X/H ₂
<i>C</i>	7.17×10^{-4}
<i>N</i>	2.24×10^{-4}
<i>O</i>	1.71×10^{-3}
<i>H₂O</i>	1.11×10^{-3}
<i>CO</i>	5.97×10^{-4}
<i>CH₄</i>	9.94×10^{-5}
<i>N₂</i>	1.07×10^{-4}
<i>NH₃</i>	1.07×10^{-5}
<i>S</i>	3.51×10^{-5}
<i>Ar</i>	6.09×10^{-6}
<i>Kr</i>	1.27×10^{-9}
<i>Xe</i>	8.54×10^{-11}

TAB. 4.1 – Abondances par rapport à H₂ des principaux éléments dans la nébuleuse (D'après Anders and Grevesse (1989) avec CO/CH₄ = 5 et N₂/NH₃ = 10).

4.1 Piégeage des éléments lourds

De l'exploration du système solaire, par les sondes Voyager et Galileo notamment, et des observations depuis le sol a émergé un problème fondamental dans notre compréhension du système solaire : comment des éléments lourds volatils ont-ils pu être piégés dans les cométésimaux glacés qui ont servi d'embryons aux comètes et aux planètes actuelles ? Ce problème a pris toute son importance lorsque, le 7 Décembre 1995, la sonde Galileo a plongé dans l'enveloppe de Jupiter et son spectromètre de masse GCMS y a mesuré que les abondances du carbone, de l'azote, du soufre, de l'argon, du krypton et du xenon sont enrichies par un facteur de l'ordre de 3 par rapport à leurs abondances solaires (Owen et al. 1999). A cette date, on savait seulement que Jupiter était enrichi en carbone et en azote. Le carbone, l'azote et le soufre sont chimiquement actifs et présents sous des formes diverses dans l'univers dont certaines sont facilement condensables voire solides même à relativement haute température ¹. Il est concevable que certains composés de ces atomes se soient condensés, aient pu ne pas suivre l'hydrogène dans sa dynamique et se trouver enrichies dans Jupiter. Mais les gaz rares sont chimiquement inertes, difficilement condensables et sont donc *a priori* dynamiquement indissociables de l'hydrogène. Ces gaz requièrent donc un mécanisme différent pour se découpler de H_2 .

A ce jour, deux mécanismes ont été proposés pour séparer les éléments volatils lourds de l'hydrogène : l'adsorption sur la glace amorphe (Owen and Bar-Nun 1995) et le piégeage dans la glace cristalline sous forme de clathrate-hydrates (Gautier et al. 2001a).

Nous étudierons ici le mécanisme de piégeage des volatils sous forme de clathrates et le testerons sur les planètes géantes et les comètes du nuage de Oort.

4.1.1 Piégeage des éléments volatils sous forme de clathrate-hydrates

Les clathrates sont une structure cristalline de glace d'eau à l'intérieur de laquelle des cavités permettent l'accueil de molécules "invitées", alors que les molécules d'eau sont appelées molécules "hôtes".

Nous traiterons ici de deux structures de clathrates :

- La structure I capable d'accueillir en moyenne une molécule (ou atome) pour 5.75 molécules d'eau. Dans les régimes de température et de pression qui nous intéressent, les clathrates de CO , CH_4 , Xe et H_2S ont la structure I.
- La structure II capable d'accueillir une molécule pour 5.67 molécules d'eau. Dans les régimes de température et de pression qui nous intéressent les clathrates de N_2 , Ar et Kr ont la structure II.

¹A plus de 150K

Il existe une autre structure de clathrates appelée structure H ainsi que des dérivés des trois structures principales. Néanmoins, le rôle de la structure H et des structures dérivées est parfaitement négligeable pour le piégeage des espèces mesurées dans Jupiter par Galileo. Nous ignorerons donc leur existence ici et ne considérerons dans la suite que les structures I et II.

Une approche thermochimique de la stabilité des clathrates

La thermodynamique des clathrates est généralement traitée à partir du formalisme statistique de Van der Waals and Platteuw (1959). Son extension aux clathrates astrophysiques est due à Lunine and Stevenson (1985). Moyennant quelques hypothèses, ce formalisme permet de calculer théoriquement l'équilibre de clathration d'une et plusieurs espèces. Ici, nous utiliserons un formalisme simplifié basé sur une approche thermochimique de la réaction chimique de clathration d'un élément X :



où ν est le nombre d'hydratation du clathrate, le nombre de molécules d'eau moyen nécessaire pour piéger une molécule (ou un atome) de X (5.75 dans le cas de la structure I, 5.67 dans le cas de la structure II).

Une approche comparable est donnée dans le livre de référence sur les propriétés physiques des clathrates (Sloan 1998).

Dans un but de simplification, nous considérerons la cage fictive (composée de 5.75 ou 5.67 molécules d'eau) comme une entité chimique à part entière. La réaction 4.1 peut alors se réécrire de la façon formelle suivante :



L'avantage du formalisme qui va suivre est sa relative simplicité. Son inconvénient étant bien entendu l'absence de lien entre les grandeurs thermodynamiques de la réaction et les paramètres microscopiques caractérisant l'interaction entre l'élément X et les molécules d'eau de la cage. Le lecteur avide de renseignements sur le sujet et souhaitant connaître une approche plus détaillée et potentiellement plus prédictive, la physique statistique des clathrates, pourra se référer à Van der Waals and Platteuw (1959) ou Sloan (1998), ainsi qu'à Lunine and Stevenson (1985) et Iro et al. (2002) pour son application à la planétologie.

La constante d'équilibre de la réaction 4.2 est donnée par :

$$K(T) = \frac{(Cage\ pleine)}{(Cage\ vide)(X)} \quad (4.3)$$

Sachant que les activités des deux solides *Cage pleine* et *Cage vide* peuvent en première approximation être considérées comme égales à 1, et que l'activité du gaz

X considéré comme parfait est donné par sa pression partielle en bar, la constante d'équilibre de la réaction s'écrit :

$$K(T) = \frac{P_0}{P(X)} \quad (4.4)$$

où $P(X)$ est la pression partielle de X et $P_0 = 1 \text{ bar}$ est la pression de référence.

D'autre part, la loi dite de Van't Hoff de la thermochimie donne l'évolution thermique de la constante d'équilibre :

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta_r H^0}{RT^2} \quad (4.5)$$

où $\Delta_r H^0$ est l'enthalpie de réaction à la pression de référence $P_0 = 1 \text{ bar}$.

Ses variations avec la température sont données par :

$$\frac{d \Delta_r H^0}{dT} = \Delta_r c_p^0 \quad (4.6)$$

où $\Delta_r c_p^0 = c_p(\text{Cage pleine}) - c_p(\text{Cage vide}) - c_p(X)$ est le changement de capacité calorifique par la réaction de piégeage à la pression de référence P_0 .

Expérimentalement, $\Delta_r c_p$ peut être raisonnablement bien approximé par :

$$\Delta_r c_p^0 = \Delta_r c_p^0(T = 273.15 \text{ K}) + a(T - 273.15 \text{ K}) \quad (4.7)$$

où $\Delta_r c_p^0(T = 273.15 \text{ K})$ est trouvé de l'ordre de quelques $10 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et a de l'ordre de quelques $10^{-1} \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-2}$. Sachant que l'ordre de grandeur de $\Delta_r H^0$ est de 1000 J mol^{-1} , nous considérerons dans la suite qu'à l'ordre 0 $\Delta_r H^0$ est indépendant de la température. L'intégration de l'équation 4.5 est alors simple :

$$\ln K(T) = \ln K(T = \infty) - \frac{\Delta_r H^0}{R T} \quad (4.8)$$

où $K(T = \infty)$ et $\Delta_r H^0$ sont deux constantes à déterminer expérimentalement. Pour alléger les notations, $\ln K(T = \infty)$ sera noté κ_∞ dans la suite.

La courbe de dissociation du clathrate de X est alors donnée par :

$$P(X) = P_0 e^{-\kappa_\infty + \frac{\Delta_r H^0}{R T}} \quad (4.9)$$

Cette loi analytique à été ajustée aux données expérimentales de dissociation des clathrates à basse pression de CH_4 , CO , N_2 , H_2S , AsH_3 , PH_3 , Ar , Kr et Xe (Lunine and Stevenson (1985) et travaux ultérieurs non publiés, J. Lunine, communication personnelle). D'autre part l'hydrate simple de NH_3 a une courbe de dissociation parfaitement similaire, qui suit la même loi². Dans la suite nous assimilerons le traitement de l'hydrate simple $NH_3 - H_2O$ à celui des clathrates. La table 4.2 donne les paramètres de la courbe de dissociation de ces clathrates.

²En fait cette loi est classique des changements de phase à basse pression, en particulier la condensation de corps purs et d'hydrates simples suit un formalisme parfaitement similaire. En l'occurrence le travail à basse pression permet d'une part de considérer les gaz comme parfaits ce qui est déjà une simplification importante et d'autre part d'estimer les différents paramètres thermodynamiques du problèmes comme indépendants de la température. Le lecteur avisé aura remarqué que l'équation 4.9 n'est autre qu'un dérivé de la formule de Clapeyron pour la condensation des corps purs.

	κ_∞	$\Delta_r H^0/R$	$\Delta_r H^0$
CH_4	-11.1249	-2161.81	-17973.3
CO	-10.9946	-1685.54	-14013.6
N_2	-11.1919	-1677.62	-13947.7
NH_3	-16.4059	-2878.23	-23929.6
H_2S	-11.3801	-3111.02	-25865.0
AsH_3	-11.83.21	-4051.05	-33680.4
PH_3	-10.9937	-2889.77	-24025.5
Ar	-9.95523	-1481.78	-12319.5
Kr	-9.99046	-1987.5	-16524.1
Xe	-11.0354	-2899.18	-24103.8

TAB. 4.2 – Paramètres thermodynamiques des courbes de dissociation de quelques clathrates importants (dans les unités du système international).

Piégeage différentiel

La section précédente nous a permis de trouver la forme et à l'aide de données expérimentales l'expression approchée des courbes de dissociation (ou de stabilité) d'un clathrate donné. Une complication intéressante intervient quand la quantité de cages n'est pas suffisante pour que deux espèces puissent être piégées alors que leurs clathrates sont tous deux stables. Cette compétition est intuitivement à l'avantage du plus stable, c'est à dire celui qui a un $\Delta_r H^0$ le plus élevé. Cette section a donc pour but de quantifier l'intuition. Pour mener ceci à bien, la seule approche rigoureuse aurait consisté à minimiser l'énergie libre du système en ayant pris en compte la contrainte du nombre de cages *a priori*. Cette approche s'apparente à celle de Van der Waals and Platteuw (1959) et nécessite de reprendre le problème à la base, le système physique étant modifié. Un exemple d'utilisation de cette méthode est montré dans Lunine and Stevenson (1985) et Iro et al. (2002) (le second étant reporté en annexe du présent manuscrit). Ici, nous utiliserons la méthode moins rigoureuse qui consiste à introduire la contrainte du nombre de cages *a posteriori*. Elle a le défaut d'être plus grossière pour déterminer la solution d'équilibre, mais permet de prendre en compte certains effets cinétiques du piégeage : *lorsque l'élément le plus stable est piégé il ne peut plus être éjecté par l'autre*. Ainsi l'irréversibilité du piégeage de cet élément (piégé avant dans le temps) est prise en compte alors qu'une l'approche de Van der Waals and Platteuw (1959) permet l'expulsion d'un élément d'une cage.

Notons X_1 et X_2 les deux espèces volatiles en compétition, $Clath_1$ et $Clath_2$ leurs clathrates respectifs. Le nombre limité de cages, noté N_{tot} , intervient en ajoutant une contrainte supplémentaire au problème :

$$N_{tot} = n(Clath_1) + n(Clath_2) \quad (4.10)$$

où $n(Clath_1)$ et $n(Clath_2)$ sont les nombres de moles de clathrates de X_1 et X_2 .

Oublions dans un premier temps cette contrainte additionnelle. Le rapport des proportions piégées de X_1 et X_2 noté y est défini par :

$$y = \frac{n(\text{Clath}_2) N_1}{n(\text{Clath}_1) N_2} \quad (4.11)$$

où N_1 et N_2 sont respectivement les nombres de moles totaux des espèces X_1 et X_2 (sous formes gazeuses et piégées). Si $P(X_1)$ et $P(X_2)$ sont les pressions partielles de X_1 et X_2 sous forme gazeuse. Définissons les pressions fictives P_1 et P_2 correspondantes aux pressions partielles qu'auraient les deux espèces si elles n'étaient jamais piégées. Nous pouvons alors réécrire y sous la forme :

$$y = \frac{1 - \frac{P(X_2)}{P_2}}{1 - \frac{P(X_1)}{P_1}} \quad (4.12)$$

où les pressions partielles $P(X_1)$ et $P(X_2)$ sont données par l'équation 4.9. L'expression développée de y est donc :

$$y = \frac{1 - \frac{P_0}{P_2} e^{-\kappa_{\infty 2} + \frac{\Delta_r H_2^0}{R T}}}{1 - \frac{P_0}{P_1} e^{-\kappa_{\infty 1} + \frac{\Delta_r H_1^0}{R T}}} \quad (4.13)$$

Plusieurs remarques s'imposent à ce stade :

- Cette expression est vraie *uniquement* si les deux phases Clath_1 et Clath_2 sont stables, c'est à dire si elles existent. Dans les zones du diagramme Pression-Température (P-T) où au moins une des deux phases n'existe pas, l'équation 4.13 n'a strictement aucun sens ³.
- Si la température est suffisamment basse, l'équation 4.13 peut prédire, moyennant que P_1 et P_2 soient suffisamment grandes, une quantité piégée supérieur à la contrainte 4.10. Pourtant dans la nébuleuse le chemin suivi par le gaz à un rayon donné dans le diagramme P-T est, comme nous le verrons dans la suite, toujours vers une plus grande stabilité des deux clathrates. Dans ce cas (le cas de la nébuleuse) il existe une température critique définie par la température pour laquelle le système de contraintes est dégénéré, à savoir que les courbes de stabilité des deux clathrates prédisent une quantité piégée exactement égale au nombre de cages accessibles. Notons T_c cette température. Lorsque la nébuleuse se refroidit, dès que la température atteint T_c , y est figé.

Calculons cette température T_c . A partir des équations 4.12 et 4.10, $y(T_c)$ est donné par :

$$y(T_c) = \frac{P_1}{P_2} \left(\frac{N_{tot}}{n(\text{Clath}_1)} - 1 \right) \quad (4.14)$$

Sachant que $n(\text{Clath}_1) = N_1 - n(X_1)$ et que $P(X_1) = n(X_1)RT$, l'équation précédente s'écrit :

$$y(T_c) = \frac{P_1}{P_2} \left(\frac{N_{tot}}{N_1 - \frac{P(X_1)}{RT}} - 1 \right) \quad (4.15)$$

D'où, en utilisant 4.9 :

$$y(T_c) = \frac{P_1}{P_2} \left(\frac{N_{tot}}{N_1 - \frac{P_0}{RT} e^{-\kappa_{\infty} + \frac{\Delta_r H^0}{R T}}} - 1 \right) \quad (4.16)$$

³L'équation 4.13 le traduit bien : dans ce cas, y est négatif. De plus son expression diverge au moment du piégeage de X_1

où les constantes $-\kappa_\infty$ et $\Delta_r H^0$ sont celles de X_1 .

En appelant y_1 la valeur de $y(T_c)$ obtenue par 4.13 et y_2 celle obtenue par 4.16, la valeur de T_c est la solution de l'équation implicite :

$$y_1 = y_2 \quad (4.17)$$

Bien entendu cette équation n'a pas de solution analytique et requiert une résolution numérique.

4.1.2 Enrichissement dynamique des éléments lourds

Le piégeage des éléments lourds sous forme de clathrates ne suffit pas à lui seul pour comprendre les abondances relatives des éléments lourds dans les différents corps du système solaire externe. En effet un corps solide petit, comme le sont la plupart des éléments fraîchement condensés, reste couplé dynamiquement au gaz par les forces de frottement visqueux. La force de traînée peut être exprimée par :

$$\vec{F}_S = -\frac{C_D}{2} \pi s^2 \rho |\vec{v}| \vec{v} \quad (4.18)$$

où F_S est la force dite de "Stokes", s est la taille du corps supposé sphérique, ρ la densité du gaz, \vec{v} la vitesse relative du solide par rapport au gaz et $C_D \sim 0.5$ est une constante sans dimension. Cette expression n'est valable que si le libre parcours moyen du gaz est négligeable devant la taille de la particule. Dans le cas opposé, si la particule a une taille négligeable devant le libre parcours moyen, son mouvement devient brownien et la force de traînée dans ce régime dit d'"Epstein" devient :

$$\vec{F}_E = -A \bar{v} \rho s^2 \vec{v} \quad (4.19)$$

où \bar{v} est la vitesse moyenne du gaz et $A \simeq 4\pi/3$ est une constante sans dimension.

Il existe alors trois régimes différents pour la dynamique des solides dans la nébuleuse :

- 1 En deçà d'une taille de l'ordre du centimètre, les grains sont parfaitement couplés au gaz et suivent le mouvement de celui-ci. Les particules ont alors une vitesse azimutale un peu plus petite que la vitesse keplerienne (donnée par l'équation 3.8) et une vitesse radiale exactement égale à celle du gaz.
- 2 Entre quelques centimètres et environ 1 mètre, les particules ont trop d'inertie pour être réellement couplées au gaz, leur vitesse azimutale est presque exactement keplerienne (forcée par la gravité), mais la force de traînée leur fait perdre suffisamment de moment cinétique pour que leur vitesse radiale soit équivalente voir supérieure à celle du gaz.
- 3 Pour des tailles supérieures au mètre, les planétésimaux ne sont que faiblement couplés au gaz et peuvent poursuivre leur vie propre sur des échelles de temps assez longues.

Ces considérations sont classiques (Whipple (1971), Weidenschilling (1977), Adachi, Hayashi and Nakazawa (1976), pour les oeuvres fondatrices de la discipline), mais leur effet est fortement modifié dans le cas d'un milieu présentant de réelles structures turbulentes (Tanga et al. 1996, Barge and Sommeria 1995, Chavanis 2000). En particulier, en présence d'un tourbillon anticyclonique, des planétésimaux dans le deuxième régime de tailles, ne voient pas leur vitesse radiale augmenter, mais se retrouvent piégés par le tourbillon.

Pour simplifier le problème nous allons nous placer dans le cas limite où une fois condensées (ou piégées) les espèces fraîchement solidifiées grossissent rapidement sous l'effet des collisions jusqu'à se découpler du gaz. Cette approximation n'est pas supportée par les théories actuelles de la formation des planétésimaux. Toutefois elle est parfaitement cohérente avec une vision de la formation planétaire où les grains sont piégés dans des structures turbulentes à grande échelle. En effet cette approximation consiste en un découplage des scalaires passifs de la dynamique moyenne du gaz, phénomène courant dans les écoulements cisailés ou stratifiés.

Supposons deux éléments X_1 et X_2 dont le piégeage intervient à des températures T_1 et T_2 . A un rayon donné, dans la mesure où nous avons choisi une structure thermodynamique de la nébuleuse, ces températures sont directement associées à des temps, que nous noterons t_1 et t_2 . Ainsi dans un anneau d'extension radiale dR la masse de l'élément X_1 , supposée indépendante du temps à partir du moment où il est piégé, est donnée par :

$$dM_i = 2\pi R \Sigma(R, t_i) x_i dR \quad (4.20)$$

où x_i est l'abondance de l'élément par rapport à H_2 au moment du piégeage. Si les deux éléments avaient une abondance x_1 et x_2 par rapport à H_2 dans le gaz, et donc un rapport d'abondance x_1/x_2 , ce rapport n'étant rien d'autre que l'abondance de X_1 par rapport à X_2 dans le gaz, lorsqu'ils sont tous deux piégés, nous pouvons définir un facteur d'enrichissement y de l'abondance relative de X_1 par rapport à X_2 par :

$$y = \frac{x_1/x_2|_{\text{piege}}}{x_1/x_2|_{\text{gaz}}} \quad (4.21)$$

En utilisant l'équation 4.20, y est simplement donné par :

$$y = \frac{\Sigma(R, t_1)}{\Sigma(R, t_2)} \quad (4.22)$$

L'utilisation de cette équation très simple et permet, à partir d'une structure thermodynamique dépendante du temps de la nébuleuse, de calculer la composition des objets que ce disque a formés. Elle requiert un mode d'emploi :

- y est l'enrichissement par rapport à une référence qui est un certain rapport d'abondances dans le gaz au moment du piégeage des éléments. Donc à moins de mélanger des abondances molaires et massiques, il n'y a aucune correction à apporter dans le cas de calculs molaires ou massiques, l'équation 4.22 en est indépendante.

- Le Σ apparaissant dans l'équation 4.22 est la densité de surface *totale* du disque, pas celle de l'élément.

Cette section nous a permis de développer les relations qui nous seront utiles dans la suite. Cependant toutes les relations ne seront pas utiles à l'étude de tous les objets du système solaire externe :

- La composition des planètes géantes ne sera reproduite et/ou prédite qu'en utilisant la relation 4.22 qui donne l'enrichissement des éléments piégés. Les éléments non-piégés seront considérés en première approximation (sauf dans le cas particulier où ils sont apportés par un autre processus) comme absents.
- Nous utiliserons les relations du piégeage différentiel pour expliquer la sous-abondance de l'azote dans les comètes.

4.2 Application à la formation des planètes géantes

Les sections précédentes nous ont permis de développer un formalisme complet pour calculer la composition des corps *glacés* de la nébuleuse. Les planètes géantes sont majoritairement gazeuse. Nous verrons donc ici comment calculer la composition d'une planète géante à partir des clathrates.

Les premiers modèles de formation des planètes géantes (Cameron et al. 1982) faisaient intervenir une instabilité gravitationnelle directe du gaz de la nébuleuse très semblable à celles qui pense-t-on sont à l'origine de la formation des étoiles. Bien que ce processus ait des défenseurs, deux principaux problèmes se posent :

- Une telle instabilité requiert que le disque soit marginalement auto-gravitant et supporte une turbulence supersonique (capable d'induire des fluctuations de densité importantes). Cette possibilité n'est pas à exclure (Huré (1998), Huré (2000)), mais limite beaucoup la classe de modèles de disques capables de former des planètes géantes.
- Une planète se formant ainsi *a priori* une composition solaire. Bien que l'on puisse imaginer des processus annexes permettant de faire disparaître H_2 pour que les éléments lourds soient enrichis dans la planète (Shu et al. 1993), la composition de Jupiter et les quelques connaissances que nous avons sur la composition des autres planètes géantes semblent difficilement réconciliables avec ce processus.

C'est pourquoi Mizuno (1980) proposa que l'instabilité gravitationnelle à l'origine de la formation de l'enveloppe de Jupiter et Saturne peut être catalysée par la présence d'un noyau solide massif (de l'ordre de $10 M_{\oplus}$). C'est aujourd'hui le scénario le plus communément accepté pour la formation des planètes géantes dans le système solaire⁴.

⁴La détection de planètes extrasolaires géantes très proches de l'étoile centrale semble quant à elle peu compatible avec une formation *in situ* par ce mécanisme. Leur formation serait *a priori* soit la conséquence d'une instabilité gravitationnelle directe, soit le produit d'une migration de la planète pendant et après sa formation.

4.2.1 Une formation en trois étapes

Notre compréhension actuelle de la formation des planètes géantes implique un scénario en trois étapes (Pollack et al. 1996) :

- 1 Formation d'un coeur protoplanétaire : les grains principalement de silicates et de glaces s'agglomèrent pour former des planétésimaux. Les planétésimaux métriques ainsi formés croissent par collision entre eux pour former un coeur protoplanétaire de l'ordre de $15M_{\oplus}$. Cette première étape dure de l'ordre de 500000 ans. Cette phase reste mal comprise et plusieurs possibilités sont évoquées dans la littérature :
 - En vertu du caractère subsonique de la turbulence, les grains centimétriques sont souvent supposés sédimenter dans le plan de l'écliptique (voir par exemple Dubrulle et al. 1995).
 - Des anticyclones à grande échelle sont susceptibles de capturer les particules solides (voir par exemple Barge and Sommeria 1995, Tanga et al. 1996 ou Chavanis 2000).

Ces deux processus auraient donc pour effet de concentrer les solides dans une région confinée de l'espace, les rendant dynamiquement couplés sans être forcément agglomérés. Ces subtilités sont encore sujettes à controverse et nous résumerons de façon la plus générale possible cette phase par : un coeur protoplanétaire croît et se découple de la dynamique moyenne du gaz en laissant ouverte la question de sa forme, de sa structure et de son mécanisme de formation.

- 2 Le coeur est suffisamment massif et la nébuleuse environnante suffisamment froide pour qu'une proto-atmosphère puisse être retenue par le coeur protoplanétaire. La planète grossit lentement, la nébuleuse continue de se refroidir permettant une capture continue d'une masse croissante de gaz, alors que des planétésimaux continuent d'être également capturés par la planète. Cette phase est la plus longue, durant plusieurs millions d'années, d'autant plus longtemps que la planète est loin du Soleil ce processus étant essentiellement contrôlé par la température du gaz nébulaire.
- 3 Si la planète a pu grossir suffisamment dans une nébuleuse qui s'est suffisamment refroidie, elle peut déstabiliser le gaz nébulaire et une enveloppe gazeuse s'effondre alors en un temps très court (de l'ordre de 10000 ans, voir Wuchterl (1991) et Coradini et al. (1995)) sur la protoplanète.

Ce processus est résumé sur la figure 4.1.

4.2.2 Minoration du moment de l'effondrement : le concept "d'anneau réservoir"

Dans le cadre du scénario précédent, la phase 3 est si courte que tout se passe comme si un anneau entier du gaz nébulaire s'effondrait instantanément pour former l'enveloppe de la planète. Nous appellerons cet anneau "anneau réservoir" (Feeding

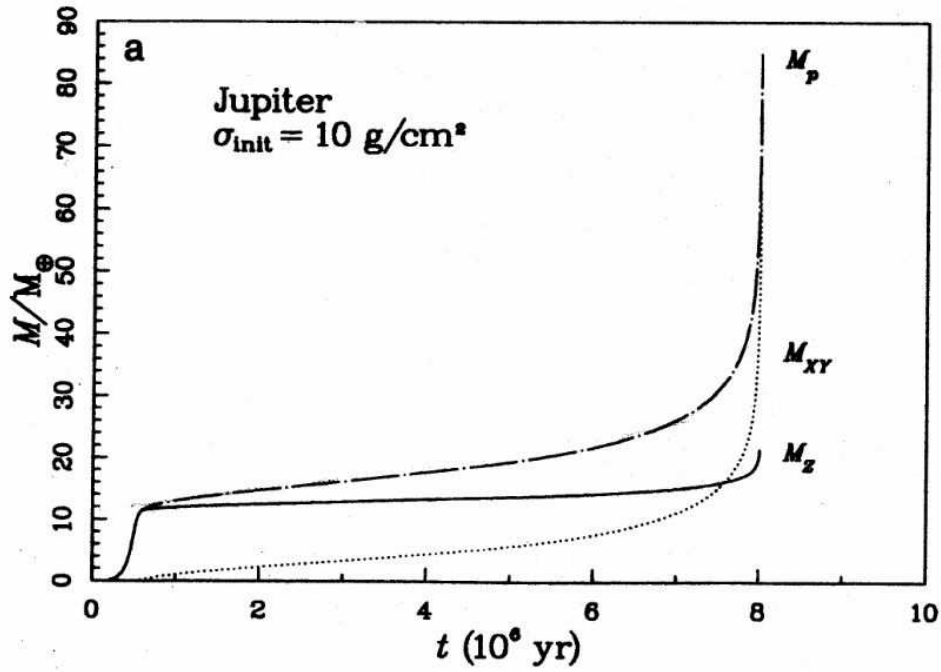


FIG. 4.1 – Evolution de la masse totale de Jupiter (trait plein), de la masse de gaz (trait pointillé) et de la masse de solides (traits de cotes) en fonction du temps pour un modèle de formation donné (D’après Pollack et al. (1996))

zone dans la littérature). Dans la mesure où nous avons choisi une structure de nébuleuse, il existe une relation évidente entre le moment de l’effondrement (supposé instantané), noté t_{coll} , et l’extension radiale de l’anneau réservoir. Notons M_{FZ} la masse contenue dans l’anneau réservoir. Cette masse est donnée par :

$$M_{FZ}(t) = \int_{R_p - R_{FZ}}^{R_p + R_{FZ}} 2\pi R \Sigma(R, t) dR \quad (4.23)$$

où l’anneau réservoir s’étend radialement autour de la position de la future planète R_p par une distance de R_{FZ} de chaque côté. L’effondrement a alors lieu lorsque la masse contenue dans cet anneau est égale à la masse de l’enveloppe de la planète M_p (Ces masses ont été estimées par Guillot (1999)). La relation implicite entre le moment de l’effondrement et la distance R_{FZ} est alors :

$$M_p = M_{FZ}(t_{coll}) = \int_{R_p - R_{FZ}}^{R_p + R_{FZ}} 2\pi R \Sigma(R, t_{coll}) dR \quad (4.24)$$

Plusieurs remarques s’imposent :

- Les grandeurs associées à l’anneau réservoir n’ont aucune réalité physique. En l’occurrence ces anneaux réservoirs sont purement fictifs et n’ont sans doute jamais existé, en tout cas sous la forme décrite ici. Néanmoins cet anneau fictif est un bon artifice de calcul permettant de minorer le moment de formation des planètes géantes.

- Ce raisonnement est un raisonnement "à l'envers". Plutôt que de décrire physiquement l'effondrement de l'enveloppe, nous avons admis son existence pour le caractériser. Un inconvénient majeur de cette approche est que le comportement des grandeurs de l'anneau fictif est difficilement comparable à des grandeurs intuitives de la formation planétaire. En réalité la masse de la protoplanète croît pendant que la nébuleuse se refroidit jusqu'au déclenchement d'une instabilité de Jeans. Au contraire la masse de l'anneau réservoir décroît jusqu'à atteindre la masse de l'enveloppe de la future planète.

A partir de simulations N-corps Greenzweig and Lissauer (1990) ont calculé l'action gravitationnelle de la protoplanète et son taux d'accrétion de solides et ont accessoirement pu estimer que l'extension radiale de l'anneau fictif pouvait être minorée par :

$$R_{FZ} > \sqrt{3}R_H \quad (4.25)$$

où $R_H = R_p \left(\frac{M_p}{3 M_\odot} \right)^{1/3}$ est le rayon de la sphère d'influence (ou rayon de Hill) de la planète. Bien entendu les simulations N-corps ne sont pas de bons outils pour calculer l'effondrement gravitationnel d'un gaz. En revanche elles permettent de le minorer avec sécurité. En effet, bien que les particules puissent prendre une trajectoire plus excentrique et plus inclinées que dans un fluide, les effets de pression et de turbulence comblent rapidement les défauts engendrés par l'effondrement. La valeur minimale de l'extension radiale de l'anneau réservoir déterminée par Greenzweig and Lissauer (1990) correspondant au minimum d'excentricité et d'inclinaison des particules est inférieure à celle qu'un fluide engendrerait, ainsi que nous le verrons dans la suite pour les cas de Jupiter et Saturne.

La figure 4.2 montre l'évolution de la masse de l'anneau fictif pour une extension radiale issue de 4.25. Cette figure est un calcul fait pour le cas de Jupiter donc avec $R_{FZ} = 1.23$ unités astronomiques.

Dans ce cas la formation de Jupiter n'a pas pu avoir lieu moins de 1 million d'années après la formation du soleil. Cette valeur est issue de Hersant et al. (2001). L'estimation de la validité de ces arguments nécessite quelques remarques :

- Le temps $t = 0$ est défini de façon très approximative.
- Le formalisme présenté est simplifié.
- Ces résultats sont très dépendants du modèle de disque utilisé. Bien que les contraintes liées au fractionnement isotopique du rapport D/H entre l'eau et le dihydrogène soient extrêmement puissantes, elles permettent de choisir les paramètres d'entrée du modèle, mais pas en l'état actuel de nos connaissances d'invalider des hypothèses qui ont été effectuées pour construire le modèle, en particulier sur la pseudo-dépendance en temps.

C'est pourquoi nous ne donnerons pas ici les valeurs exactes trouvées par Hersant et al. (2001), leur précision étant sans doute exagérée.

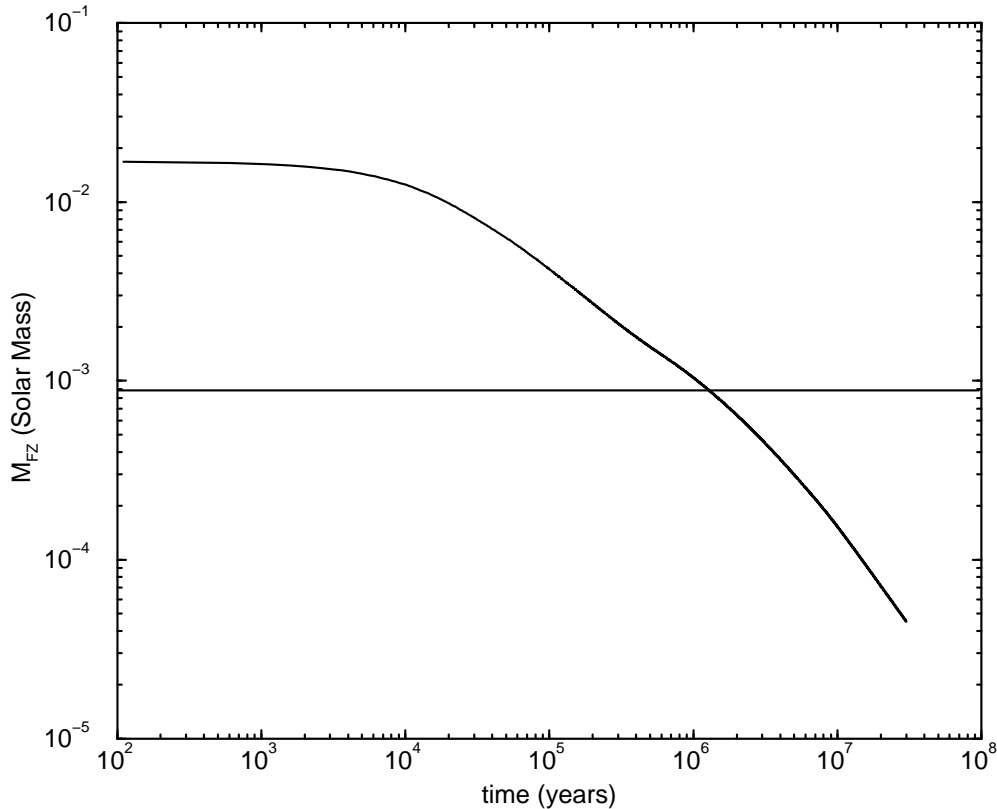


FIG. 4.2 – Evolution de la masse dans l’anneau réservoir de Jupiter en fonction du temps. La ligne horizontale représente la masse actuelle de gaz dans Jupiter (issue de Guillot (1999)). L’intersection des deux courbes donne le moment de formation de Jupiter.

L’application du même formalisme au cas de Saturne permet de trouver que la planète a subi un effondrement vers la fin de la vie de la nébuleuse, c’est à dire sans doute pas avant 6 millions d’années⁵.

La recherche du moment d’effondrement d’Uranus et Neptune par cette méthode donne le résultat suivant : dans le cadre de ce formalisme, avec le modèle défini au chapitre précédent, Uranus et Neptune ne peuvent pas s’être effondrés avant au moins 30 millions d’années. En comparant au temps de vie des disques (de l’ordre de 10 millions d’années pour les plus résistants), il semble très improbable que Uranus et Neptune aient jamais été suffisamment massifs pour déstabiliser le gaz nébulaire et voir leur enveloppe se former par effondrement. En d’autres termes, Uranus et Neptune n’ont pas eu de phase 3 dans leur processus de formation, le gaz nébulaire s’étant dissipé avant. Sachant que de même que la formation des étoiles est accompagnée, par conservation du moment cinétique (celui ci n’étant jamais rigoureusement nul...), par la formation d’un disque circumstellaire, la troisième phase de la formation planétaire est également accompagnée par la formation d’une subnébuleuse. Dans cette subnébuleuse se sont alors formés les satellites réguliers des planètes géantes. Neptune

⁵Les plus vieux disques circumstellaires découverts à ce jour sont âgés de 10 millions d’années environ

n'ayant pas de système de satellites réguliers, il a très tôt été compris qu'aucun effondrement gazeux n'a été à l'origine de sa formation. Mais Uranus (tout comme Jupiter et Saturne) a un système de Satellites réguliers. Le fait que Uranus n'ait probablement pas engendré d'effondrement gazeux pendant sa formation suggère que cette sub-nébuleuse a été formée par un autre mécanisme. Le candidat le plus probable est la collision qu'Uranus a subie et qui a fait basculer son axe de rotation propre. Un très gros corps, sans doute un embryon de planète géante est venu percuter la planète, a perturbé la rotation propre d'Uranus, en a également éjecté du gaz de l'enveloppe pour créer la subnébuleuse de la planète. Le lecteur intéressé par cette phase atypique de la formation d'Uranus pourra se référer à Pollack et al. (1991) ou Slattery et al. (1992).

4.2.3 Composition atomique de Jupiter

Les mesures du spectromètre de masse GCMS de la sonde Galileo en 1995 ont montré que tous les éléments lourds mesurés (C , N , S , Ar , Kr et Xe) sont enrichis par rapport à leur abondance solaire par un facteur de l'ordre de 3. Nous ferons l'hypothèse que tous ces éléments ont été piégés dans la glace sous forme de clathrates et qu'il n'y a pas eu de compétition entre eux. L'enrichissement de tous ces éléments est donc simplement donné par l'équation 4.22 (Gautier et al. 2001a).

A mesure que la nébuleuse s'est refroidie, les molécules ou atomes ont été piégés dans un ordre précis (H_2S , NH_3 , CH_4 , Xe , CO , N_2 , Kr , Ar). La figure 4.3 illustre ce phénomène. Sur cette figure, la pression en abscisse est la pression totale de la nébuleuse, c'est à dire que les abondances des différents éléments sont déjà incluses : ce sont les abondances solaires de Anders and Grevesse (1989) (voir la table 4.1, en ayant supposé un rapport $CO/CH_4 = 5$ et $N_2/NH_3 = 10$. Donc, à part H_2S sur lequel nous reviendrons plus tard, les abondances initiales de tous les clathrates sont déterminées.

Aussitôt qu'un élément est piégé, nous avons admis qu'il grossit très vite. Alors son abondance par rapport à l'hydrogène croît suivant l'équation 4.22 :

$$\frac{(X)}{(H)} = \frac{(X)}{(H)} \Big|_{\odot} \times \frac{\Sigma(5.2UA, t_X)}{\Sigma(5.2UA, t)} \quad (4.26)$$

où t_X est le temps auquel l'élément X a été piégé. L'abondance de l'élément X croît alors jusqu'au moment de l'effondrement (phase 3). Pour déterminer ce moment, il nous faut utiliser une des abondances observées dans Jupiter par Galileo comme référence. Dans Gautier et al. (2001b) nous avons utilisé la valeur de l'enrichissement du krypton Kr c'est à dire 2.7. A partir de cette calibration tous les enrichissements sont déterminés et représentés sur la figure 4.4 et la table 4.3.

En calibrant le calcul sur l'enrichissement observé du Krypton, nous avons implicitement choisi le moment de l'effondrement de Jupiter. Dans le cas présent, Jupiter s'est formé en 5.8×10^6 ans.

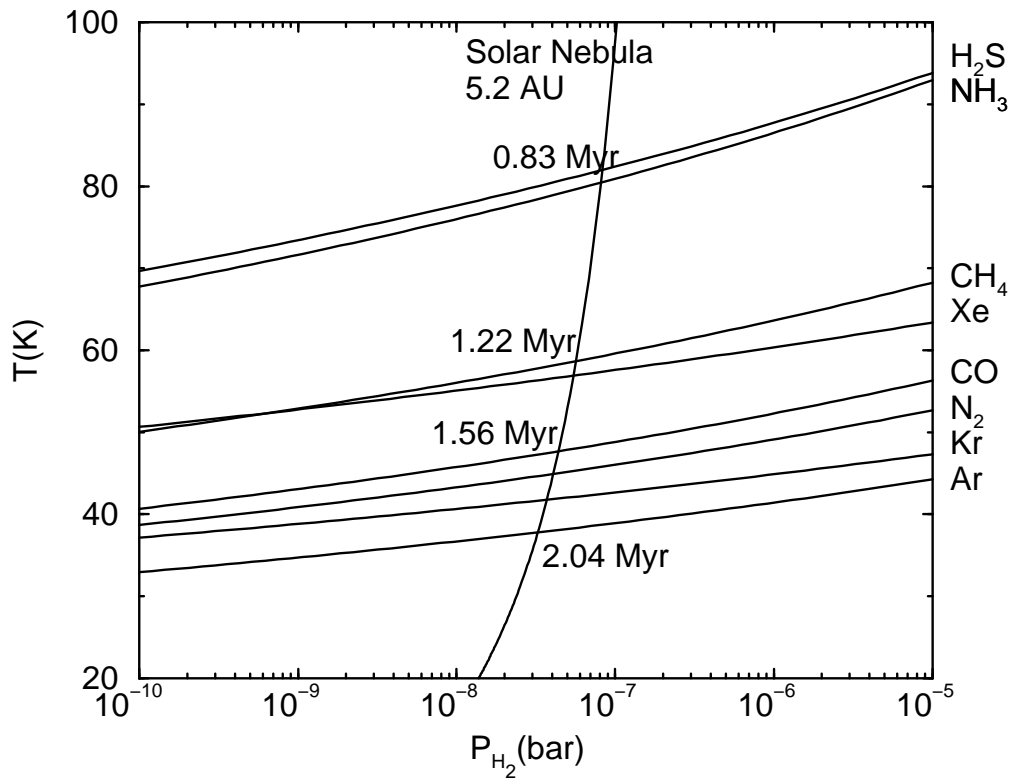


FIG. 4.3 – Courbes de stabilité des différents clathrates en jeu et évolution de la nébuleuse (à 5.2 unités astronomiques) dans le diagramme pression température . Le clathrate est formé lorsque la courbe d'évolution de la nébuleuse intersecte la courbe de stabilité du clathrate considéré. Les temps de formation sont indiqués pour information.

Les résultats du calcul sont en très bon accord avec les données du spectromètre, à l'exception de deux éléments :

Xe Le xenon est un gaz très peu abondant dans la nébuleuse solaire primitive. Sa pression partielle est au moment de la formation du clathrate de l'ordre 10^{-18} bar . La courbe dissociation de son clathrate ayant été déterminée à partir de trois points expérimentaux à des pressions de 1.2, 0.31 et $6.53 \times 10^{-2} \text{ bar}$ (Lunine and Stevenson 1985), pressions auxquelles le gaz n'est pas parfait, il est vraisemblable que l'extrapolation sur 16 ordres de grandeur de pression est hasardeuse.

H₂S Contrairement aux gaz rares, *H₂S* est une molécule chimiquement active dans la nébuleuse. En particulier *H₂S* est connu pour se combiner avec le fer pour former la troilite *FeS* (Gail 1998), cette même troilite étant avec le fer pur connue pour être une des phases majoritaires qui ont formé le noyau de la Terre. Ainsi, tout comme la Terre, Jupiter comporte certainement en son sein un noyau différencié composé de fer et de soufre (sous forme condensée), dont les éléments n'ont évidemment pas pu être détectés par GCMS, qui n'a sondé que la partie supérieure de l'enveloppe. Afin d'expliquer la valeur observée du soufre dans l'enveloppe de Jupiter il faut que la réaction chimique de formation de la troilite ait laissé 57% du soufre (en moles) sous forme de *H₂S*.

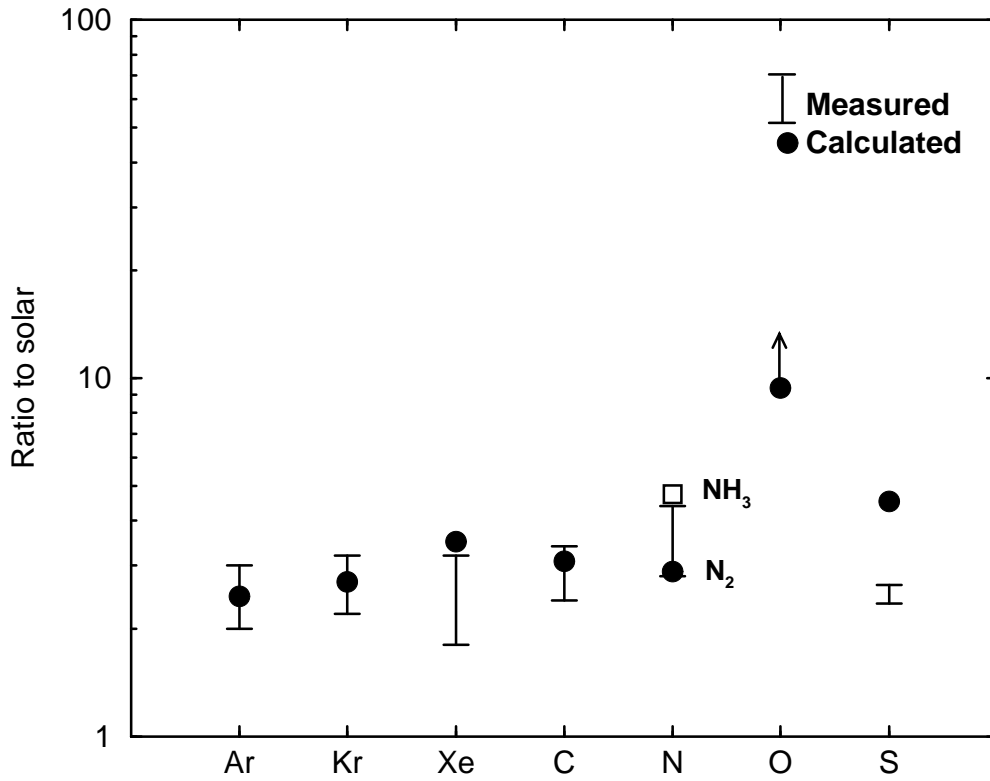


FIG. 4.4 – Enrichissements par rapport à leur valeur solaire de l’abondance des différents éléments lourds mesurés par Galileo. Les barres d’erreurs sont les valeurs mesurées, les points les valeurs calculées. Dans le cas de l’azote, le point est la valeur pour N_2 seul, le carré pour NH_3 seul.

Afin de piéger tous ces éléments, chaque clathrate de type I nécessitant 5,75 molécules d’eau par molécule piégée, chaque clathrate de type II 5,67 molécules d’eau par molécule piégée, il faut que l’abondance de l’eau dans Jupiter soit :

$$\frac{H_2O}{H_2} > 1.62 \times 10^{-2} \quad (4.27)$$

Toutes les cages de la structure cristalline n’étant pas forcément accessibles (il n’est pas évident que le piégeage de molécules dans un planétésimal déjà gros puisse se faire jusqu’au centre (Lunine and Stevenson 1985)), cette valeur est un minimum. La répartition de l’eau dans Jupiter n’est pas présumée par ce calcul, une partie de l’eau pouvant être sous forme de glace dans le noyau (externe). Cette abondance se traduit par un enrichissement de l’abondance l’eau par rapport à sa valeur solaire :

$$\frac{H_2O/H_2}{2\frac{O}{H}} \Big|_{\odot} = 9.5 \quad (4.28)$$

Tout comme les clathrates, l’eau s’enrichit par rapport à sa valeur nébulaire (sous forme gazeuse) suivant l’équation 4.22. Il en résulte une abondance de 7.27×10^{-3} si l’eau était uniformément répartie dans la nébuleuse. Il faut donc que dans la région de Jupiter les grains de glace aient été accumulés (Dans un vortex à grande échelle

Elément	Enrichissement mesuré	Enrichissement calculé
<i>Ar</i>	2.5 ± 0.5	2.46
<i>Kr</i>	2.7 ± 0.5	2.70
<i>Xe</i>	2.5 ± 0.7	3.50
<i>C</i>	2.9 ± 0.8	3.08
<i>N</i>	3.6 ± 0.8	2.95
<i>S</i>	2.5 ± 0.15	4.53

TAB. 4.3 – Enrichissements observés par Galileo et calculés des différents atomes dans Jupiter. Les valeurs calculés supposent un rapport CO/CH_4 de 5 et un rapport N_2/NH_3 de 10.

Elément	Enrichissement observé	Référence
<i>C</i>	2.9 ± 0.9	Kerola et al. (1997)
<i>N</i>	2.0 ± 0.5	Briggs and Sackett (1989)
<i>S</i>	12.5 ± 1.5	Briggs and Sackett (1989)

TAB. 4.4 – Compilation des enrichissements observées dans Saturne.

par exemple Tanga et al. 1996 ou Chavanis 2000) de telle sorte que la glace ait 2.2 fois plus abondante que la valeur précédente. Par rapport à l'abondance solaire de l'oxygène, reliée au rapport de mélange de l'eau par :

$$\frac{H_2O}{H_2} = 2 \frac{O}{H} \Big|_{\odot} - 2 \frac{CO/CH_4}{1 + CO/CH_4} \frac{C}{H} \Big|_{\odot} \quad (4.29)$$

(Car une partie de l'oxygène solaire est dans le monoxyde de Carbone CO), il faut que la concentration d'eau soit au moins égale à :

$$\frac{H_2O}{H_2} = 2.8 \frac{O}{H} \Big|_{\odot} \quad (4.30)$$

4.2.4 Composition atomique de Saturne

Saturne n'a pas été étudiée de façon aussi approfondie que Jupiter. En particulier, aucune sonde atmosphérique n'y a encore été envoyée. Par conséquent les abondances des différents éléments dans l'enveloppe sont assez mal connues. Les rares informations que nous possédions viennent d'observation spectroscopiques ayant pu sonder l'enveloppe assez profondément. Ces observations doivent toujours être prises avec circonspection : il faut s'assurer que la molécule observée soit à l'équilibre thermodynamique ou au moins que son gradient de composition soit suffisamment faible pour que l'abondance observée soit représentative de l'intérieur de la planète. Ces observations sont résumées dans la table 4.4.

Tout comme pour Jupiter, le calcul des enrichissements élémentaires dans Saturne requiert une calibration. Nous avons choisi le soufre, très précisément déterminé sur Jupiter. Dans le cas de Jupiter H_2S , le seul composé soufré dont le clathrate soit connu, représente 57% du soufre total. Nous avons supposé qu'au niveau de Saturne H_2S avait

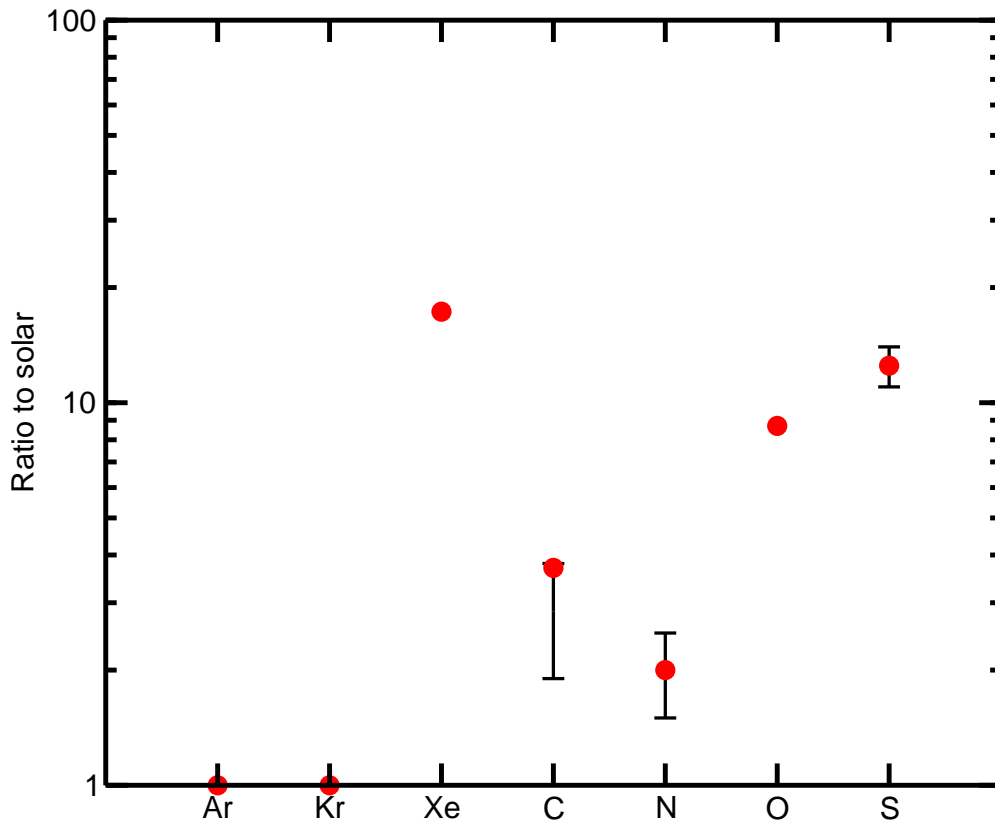


FIG. 4.5 – Enrichissements de l’abondance des éléments lourds dans Saturne. Les barres d’erreur sont les points mesurés, les cercles pleins le résultat du calcul.

le même rapport de mélange. Néanmoins étant donné que les températures de piégeage des différents clathrates sont relativement proches, la table 4.4 montre que les deux principaux porteurs de carbone, CO et CH_4 ne peuvent pas être tous les deux piégés pour expliquer les observations, de même que les deux principaux porteurs d’azote, N_2 et NH_3 , ne peuvent pas non plus être tous deux piégés. CH_4 et NH_3 sont piégés avant leur homologues CO et N_2 (voir figure 4.3). Nous supposons donc que la séquence de clathration s’arrête après le piégeage du xenon, de telle sorte que CO , N_2 , Ar et Kr ne sont pas piégés. Il est néanmoins important de comprendre que même si ces éléments n’ont pas trouvé de cages accessible pour être piégés, ils accompagnent l’hydrogène lors de la phase 3 de la formation de Saturne et donc leurs abondances dans Saturne sont nébulaires (voir table 4.1).

Le résultat du calcul est porté sur la figure 4.5.

La calibration sur l’enrichissement du soufre implique un temps de formation de 10 millions d’années. D’autre part l’arrêt de la séquence de clathration à CO implique (pour la même raison que pour Jupiter) que l’abondance de l’eau dont les cages sont accessibles est assez précisément déterminée :

$$\left. \frac{H_2O}{H_2} \right|_{accessible} = 1.48 \times 10^{-2} \quad (4.31)$$

Traduite en terme d'abondance par rapport à l'eau disponible, si la glace était uniformément distribuée, cette valeur correspond :

$$\frac{H_2O}{H_2} \Big|_{accessible} = 0.4 \frac{H_2O}{H_2} \Big|_{enrichie} \quad (4.32)$$

où $\frac{H_2O}{H_2} \Big|_{enrichie}$ est la valeur de H_2O/H_2 initial dans la nébuleuse, donnée par la relation 4.29, enrichie par le mécanisme de l'équation 4.22, à savoir :

$$\frac{H_2O}{H_2} \Big|_{enrichie} = 3.57 \times 10^{-2} \quad (4.33)$$

En terme de O/H solaire, l'eau nécessaire vaut :

$$\frac{H_2O}{H_2} \Big|_{accessible} = 0.54 \frac{O}{H} \Big|_{\odot} \quad (4.34)$$

Cette valeur très basse est à comparer avec celle nécessaire pour Jupiter. Contrairement à Jupiter où la glace a du s'être accumulée, Saturne s'est peut être formée dans une région où la glace était peu abondante. Bien entendu nos calculs ne peuvent pas permettre de l'assurer dans la mesure où si le piégeage a eu lieu dans des planétésimaux relativement gros, le nombre de cage peut être faible bien que la glace soit abondante.

4.2.5 Le cas d'Uranus et Neptune

Les données sur la composition globale d'Uranus et Neptune sont très peu abondantes et comportent de grandes incertitudes. Néanmoins un phénomène intéressant a lieu dans la haute atmosphère de ces deux planètes : NH_3 (principal porteur d'azote dans la stratosphère) se combine chimiquement avec H_2S pour former des nuages de NH_4SH . Ce processus a été introduit pour expliquer la sous abondance de NH_3 détectée sur les deux planètes (voir Gautier et al. (1995) pour une revue). Ceci nécessite une très forte abondance de H_2S , supérieure à celles de Saturne et *a fortiori* de Jupiter, planètes où la conversion de NH_3 en NH_4SH : elle est peu importante sur Saturne (B. Bézard, communication personnelle) et pratiquement absente sur Jupiter. Pour expliquer la sous abondance de NH_3 les modèles requièrent un rapport $H_2S/NH_3 \sim 10-100$ (Gautier et al. 1995). Seul le carbone (sous forme de méthane) a été mesuré sur ces deux planètes, avec une abondance enrichie d'un facteur de l'ordre de 40. Pour les valeurs observées, le lecteur intéressé pourra se référer à Gautier et al. (1995) pour une revue sur la question. Nous considérerons ici que les enveloppes de ces deux planètes ont la même composition, les mesures actuelles n'étant pas différenciables. Seuls CO et HCN , molécules peu abondantes dans ces deux planètes, semblent plus abondantes par respectivement un facteur 40 et un facteur 10 dans la stratosphère de Neptune que dans celle d'Uranus (Marten et al. 1993).

L'absence de troisième phase lors de la formation de ces deux planètes rend la méthode de calcul différente, les enrichissements ne pouvant pas être calculés par

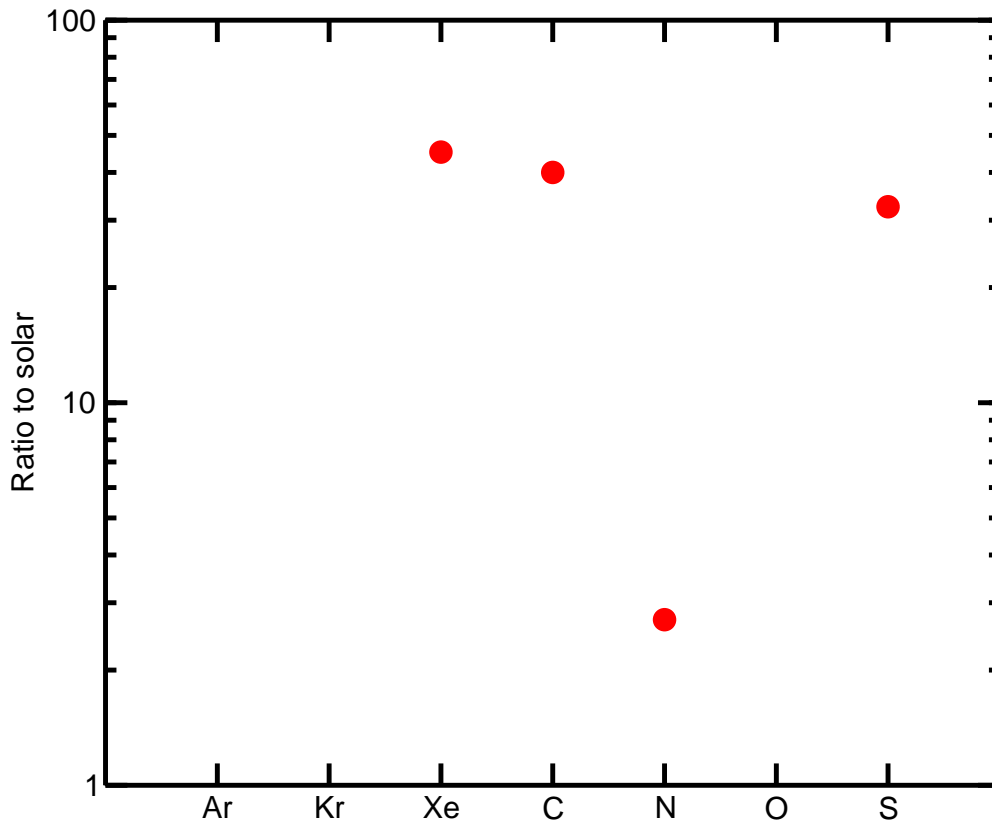


FIG. 4.6 – Enrichissements calculés dans Uranus et Neptune. A l'exception de l'oxygène, les éléments dont le point n'apparaît pas sont totalement absent en première approximation.

rapport au moment de l'effondrement. Néanmoins, tous les éléments lourds étant piégés dans le premier million d'années de la vie de la nébuleuse, sachant qu'une fois piégés leur rapport est constant, l'enrichissement du carbone de 40 par rapport à sa abondance solaire permet de déterminer les enrichissements de tous les autres éléments.

Nous avons supposé que Uranus et Neptune étaient intermédiaires entre Jupiter et Saturne du point de vue de la quantité de cages accessibles pour le piégeage. En pratique la séquence de piégeage s'arrête après CO . Comme nous le verrons dans la section suivante c'est, pense-t-on, également le cas pour les comètes.

L'absence d'effondrement, contrairement à Saturne, implique l'absence des éléments non-piégés. Par conséquent en première approximation leur abondance est nulle dans ces deux planètes. Les résultats du calcul sont montrés sur la figure 4.6.

Ainsi, le non-piégeage de l'azote moléculaire dans cette région de la nébuleuse, phénomène également observé dans les comètes (voir la section suivante), est sans doute à l'origine de la surabondance du soufre par rapport à l'azote dans les deux

planètes.

4.2.6 Quelques Remarques

Le calcul de la composition des planètes géantes à partir de l'équation 4.22 est extrêmement simple. Ce scénario et sa formalisation permettent en outre d'interpréter les compositions globales des planètes géantes. La quantité de cages accessibles semble varier radialement autour d'une valeur moyenne raisonnable (que nous appellerons cométaire, voir la section suivante) avec un pic du nombre de cages accessibles au niveau de Jupiter et un creux au niveau de Saturne.

Ce scénario est bien sûr à tester plus en détail. Malheureusement la seule façon de le tester réellement est d'envoyer un spectromètre de masse dans l'enveloppe des trois planètes encore presque vierges, Saturne, Uranus et Neptune. Si ces missions viennent un jour, les tests clefs du scénario, qui sont les implications annexes de ces calculs sont les suivants :

Saturne : *Argon et krypton solaires alors que le xenon serait enrichi par un facteur de l'ordre de 20.*

Uranus et Neptune : *Argon et krypton quasi-absents alors que le xenon serait enrichi par un facteur de l'ordre de 50.*

4.3 Application à la formation des comètes

Le calcul de la composition des comètes est assez semblable au calcul pour les planètes géantes, à deux exceptions près :

- Les abondances et enrichissements sont calculés par rapport à l'eau.
- Le calcul d'abondances d'éléments minoritaires (seulement partiellement piégés) requiert l'utilisation de l'équation implicite 4.17.

Iro et al. (2002) ont effectué une étude exhaustive de la composition des comètes en les différents éléments dont nous connaissons les clathrates. Je ne reprendrai pas ici la totalité des calculs et j'invite le lecteur intéressé à se référer à l'article d'Iro et al. (2002) en annexe du présent manuscrit.

Une caractéristique remarquable des comètes réside dans la très faible abondance de N_2 par rapport à CO (Cochran et al. 2000). Plus précisément, l'ion N_2^+ n'a été détecté que dans deux comètes (Bradfield et Halley) et n'a pas été détecté dans les comètes Hale-Bopp et De Vico, alors que l'ion CO^+ est lui toujours clairement détecté et abondant. Les calculs indiquent que le rapport N_2/CO doit être peu différent du rapport N_2^+/CO^+ (Wyckoff et al. 1991). Quantitativement le rapport N/C semble être inférieur de 3 à 4 ordres de grandeur au moins à sa valeur solaire (Cochran et al. 2000).

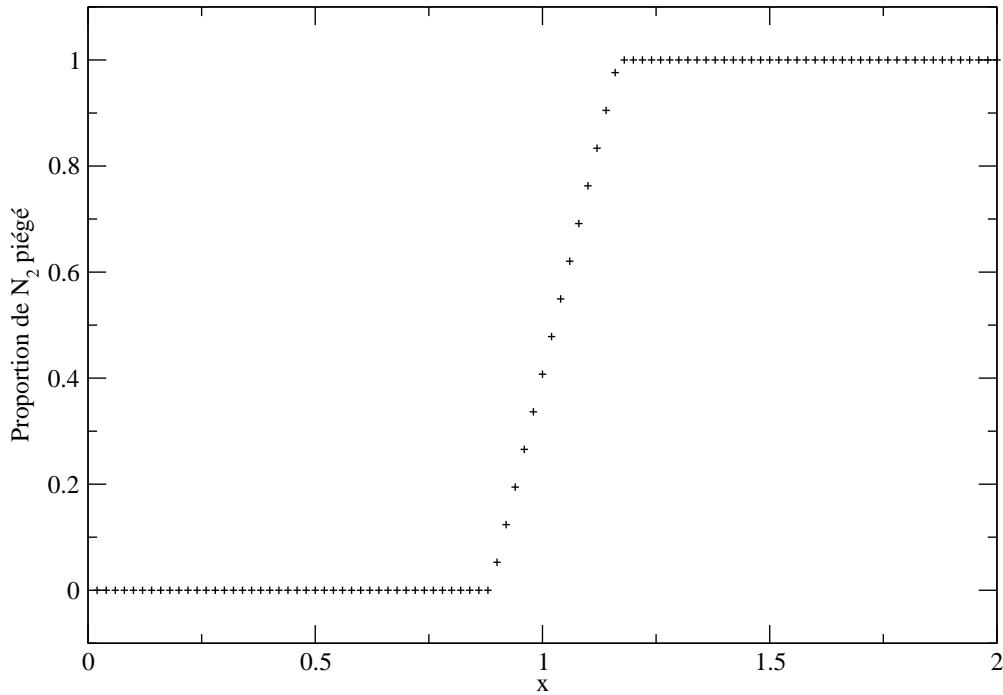


FIG. 4.7 – Proportion de N_2 piégé en fonction du nombre de cages accessibles exprimé en nombre de cages nécessaires pour piéger tout CO .

Reprenons l'approche de l'équation 4.17 en identifiant l'élément 1 à CO et l'élément 2 à N_2 . Etudions la dépendance du piégeage différentiel en fonction du nombre de cages accessibles (après piégeage des éléments précédents dans la séquence de piégeage montrée sur la figure 4.3). Pour ce faire notons $N_{tot} = xN_{CO}$. L'équation 4.16 devient alors :

$$y(T_c) = \frac{P_{CO}}{P_{N_2}} \left(\frac{x}{1 - \frac{P_0}{P_{CO}} e^{-\kappa_\infty + \frac{\Delta_r H^0}{R T_c}} - 1} - 1 \right) \quad (4.35)$$

Cette nouvelle expression permet de calculer à l'aide de la relation implicite 4.17 la proportion de N_2 piégée en fonction de x . La figure 4.7 montre le résultat de ce calcul en prenant des valeurs raisonnables pour les pressions fictives $P_{CO} = 5 \cdot 10^{-11} \text{ bar}$ et $P_{N_2} = 10^{-11} \text{ bar}$. Ce résultat est un peu différent de celui trouvé par Iro et al. (2002), l'approche thermodynamique étant plus radicale que la physique statistique.

Si nous supposons que la glace reste répartie uniformément pendant toute la formation du système solaire externe, qu'elle s'enrichit par rapport aux autres éléments par une quantité donnée par l'équation 4.22 et si nous supposons que toutes les cages sont accessibles pour la clathration des éléments, la séquence de piégeage s'arrête pendant le piégeage de CO . En l'occurrence seulement 47% du CO sera piégé. Dans ce cas, d'après la figure 4.7, aucune molécule de N_2 ne pourra être piégée. Bien entendu cette valeur nulle est à prendre avec des pincettes ! Les comètes sont formées d'aggrégats de grains formés éventuellement dans des endroits différents de la nébuleuse. Les valeurs mesurées résultent donc d'une moyenne sur les différents grains ayant pu piéger plus ou moins CO et donc éventuellement certains, tout comme Jupiter, ont

pu piéger N_2 . D'autre part il est probable (Barge and Sommeria 1995, Tanga et al. 1996, Chavanis 2000) que les comètes (ainsi que les protoplanètes) se soient formées dans des tourbillons anticycloniques à grande échelle. Ces vortex sont capables de concentrer efficacement les solides et en particulier mener l'abondance de glace à un niveau très supérieur (de plusieurs ordres de grandeur) à l'abondance moyenne (calculée en supposant comme précédemment qu'elle est répartie uniformément dans la nébuleuse). Cet effet de concentration est à son tour à contraster avec le fait évident que la croissance des grains et des planétésimaux glacés ferme rapidement l'accès aux cages cristallines de la maille de glace. Ainsi ces deux effets peuvent faire fluctuer beaucoup la quantité de cages accessibles, la concentration de la glace dans les vortex de Rossby l'augmentant, la croissance des planétésimaux la diminuant. Les observations de comètes semblent montrer cet effet : l'abondance de CO par rapport à H_2O variant d'une comète à l'autre de 0.5% à 26% (Iro et al. 2002).

4.4 Le cas des comètes de Kuiper

La section précédente traitait du cas des comètes du nuage de Oort (Oort 1950), formées vraisemblablement dans la région des planètes géantes puis expulsées par celles-ci. Il est naturel de s'interroger sur le cas des comètes de la ceinture de Kuiper.

Les comètes formées plus loin que l'orbite de Neptune n'ont pas été perturbées aussi efficacement par les planètes géantes que les comètes du nuage de Oort. La structure de la ceinture de Kuiper montre que les résonances avec Neptune ont vraisemblablement excité les excentricités et les inclinaisons de ces comètes, alors que les collisions ne sont pas assez fréquentes pour régulariser les orbites des corps excités (voir par exemple Morbidelli et al. 1995 ou Levison and Duncan 1993). Ainsi l'effet des planètes géantes est vraisemblablement à l'origine de la différence entre comètes de Oort et comètes de Kuiper.

Nous pouvons donc supposer qu'à l'origine les comètes de Oort et de Kuiper se sont formées de façon similaire et que les planètes géantes auraient séparé les comètes en deux populations : les comètes très perturbées, celles de Oort, formées dans la région des planètes géantes, et les comètes dont les orbites avaient un temps de vie plus long, les comètes de Kuiper, qui sont restées dans le disque.

La spectroscopie des objets de Kuiper commence à donner ses premiers résultats (voir par exemple Barucci et al. 2002 et Barucci et al. 2001), mais étant donnée leur très faible luminosité, leur composition reste presque inconnue. La mission Rosetta devrait lever le voile sur ces objets lorsqu'elle atteindra la comète Wirtanen en 2011. Sans information supplémentaire, nous pouvons proposer trois possibilités pour la composition de ces objets :

- 1 La nébuleuse était assez chaude dans la région de formation des objets de Kuiper

pour que la glace se soit recondensée sous forme cristalline. Si elle n'a jamais atteint des températures plus basses que 30 K , les objets de Kuiper sont semblables aux comètes de Oort. En particulier, N_2 y est presque absent.

- 2 La nébuleuse était assez chaude dans la région de formation des objets de Kuiper pour que la glace se soit recondensée sous forme cristalline. Si la nébuleuse a atteint des températures plus basses que 30 K à la fin de sa vie, les comètes de Oort ont été éjectées avant cette phase alors que les comètes de Kuiper sont restées, ont subi cette phase, et les éléments non-piégés ont pu se condenser. En particulier N_2 y est alors présent, légèrement sous-abondant par rapport à CO mais dans des quantités raisonnables (seulement de l'ordre de 10 fois moins).
- 3 La nébuleuse n'a jamais atteint la température de volatilisation de la glace amorphe interstellaire. Dans ce cas le mécanisme de piégeage sous forme de clathrates est impossible. Alors, les éléments ont pu s'adsorber sur la glace amorphe selon le mécanisme proposé par Owen and Bar-Nun (1995). Je renvoie le lecteur à la référence précédente pour les implications d'un tel processus.

4.5 Conclusions

L'approche très simple développée dans ce chapitre permet d'interpréter les propriétés chimiques moyennes des objets du système solaire externe. Bien que l'extrême simplicité du formalisme ne permette pas d'avoir une confiance absolue dans les abondances calculées, celui-ci permet de dégager les processus clés à l'origine de la composition du système solaire externe. D'autre part il permet d'expliquer les abondances mesurées précisément dans Jupiter par Galileo. Une question majeure surgit alors : pourquoi l'équation 4.22 reproduit-elle aussi précisément les mesures de Jupiter, un objet dont on connaît précisément la composition ? En effet elle réside implicitement sur une hypothèse de croissance instantanée des planétésimaux qui semble *a priori* peu raisonnable. La solution réside peut-être dans l'accumulation de solides dans les tourbillons anticycloniques de la nébuleuse. En effet l'équation 4.22 ne s'appuie pas tant sur une croissance instantanée des planétésimaux que sur un découplage des solides de la dynamique *moyenne* du gaz. C'est exactement l'effet d'un tourbillon de Rossby.

Il est d'autre part frappant de voir à quel point cette quantité de cages accessible, qui semble être à elle seule en mesure d'interpréter une grande part des propriétés chimiques du système solaire externe, peut fluctuer dans l'espace et le temps. Ces fluctuations sont à petite échelle, celle des comètes, mais aussi à beaucoup plus grande échelle, celle des planètes et semblent alors plus fortes encore, les deux planètes Jupiter et Saturne étant les deux extrêmes en composition du système solaire sur une échelle graduée en nombre de cages accessibles.

Les fluctuations turbulentes, plausibles parentes de ces variations observées dans le

système solaire, sont alors nécessaires. Les modèle de disque développé au chapitre 3 était basé sur une approche de champ moyen où pour modéliser la turbulence dans la nébuleuse le choix avait été fait d'y exclure toute fluctuation. Il semble nécessaire de développer un nouveau modèle de turbulence pour la nébuleuse où ces fluctuations seront calculées afin à terme de comprendre l'origine des immenses variations de propriétés chimiques que semblent nous montrer les objets du système solaire externe. L'approche RDT développée au chapitre 2 semble être un bon candidat.

Chapitre 5

Un nouveau modèle turbulent pour les écoulements cisailés

La nécessité d'un calcul d'une grande gamme d'échelles spatio-temporelles soulevée au chapitre précédent m'a conduit à implémenter mon approche SES de la RDT pour les écoulements cisailés. Ce chapitre présente l'implémentation *prototype* de la SES dans l'écoulement cisailé formellement le plus simple : l'écoulement de Couette plan. Les équations de base pour l'implémentation dans l'écoulement de Couette-Taylor (écoulement de laboratoire le plus proche de la nébuleuse solaire primitive) y sont également données. Nous développerons en fin de chapitre l'analogie entre les écoulements en rotation différentielle et la convection en présence d'un cisaillement moyen. Cette analogie, déjà utilisée dans l'introduction, s'avère un puissant allié dans notre quête de la compréhension de la turbulence dans la nébuleuse solaire primitive.

5.1 Principe de la SES

La SES (pour *Small Eddy Simulation*) est un cas particulier de la RDT utilisant une approche à mi-chemin entre l'approche grandes échelles (le filtre utilisé est spatial) et l'approche de champ moyen (le filtre utilisé est *idem-potent*¹, tout comme les moyennes d'ensemble). La SES s'apparente aux modèles de Langevin de la turbulence : elle est fondée sur un forçage stochastique des modes non-normaux du système sous-filtre 2.31, générant des tensions de Reynolds utilisées pour faire évoluer l'équation pour les grandeurs filtrées 2.19.

5.1.1 Implémentation

Dans le cas des écoulements cisailés, l'écoulement moyen se fait dans une direction privilégiée que nous noterons 1 (La direction du mouvement des plaques dans un écoulement de Couette plan, la direction du gradient de pression dans un écoulement de Poiseuille ou la direction azimutale dans un écoulement de Couette-Taylor ou dans la nébuleuse) et celui-ci ne varie que dans une direction perpendiculaire,

¹En le notant $\langle \rangle$, il vérifie la propriété $\langle \langle \rangle \rangle = \langle \rangle$.

notée 2 (la direction perpendiculaire dans les écoulements plans, la direction radiale dans un écoulement de Couette-Taylor ou dans la nébuleuse). La troisième direction est la direction du rotationnel de la vitesse (la vortacité), elle sera notée 3. Pour simuler ces écoulements il convient de choisir un domaine d'intégration adapté. Le choix classique consiste à utiliser les bornes physiques dans la direction 2 et supposer que les directions 1 et 3 sont périodiques. La périodicité azimutale des écoulements en rotation différentielle est évidente, mais pour le cas de la nébuleuse solaire primitive, la périodicité dans la direction 3 (celle du vecteur rotation) est bien entendu très contestable. Le cas de la nébuleuse solaire primitive présente de grandes similitudes avec celui de l'écoulement de Couette-Taylor. Pour son traitement en RDT j'assimilerai en première approximation la nébuleuse solaire primitive à un écoulement de Couette-Taylor².

Pour étudier les écoulements cisailés, j'ai choisi d'utiliser le filtre suivant :

$$\langle \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dx_1 dx_3 \quad (5.1)$$

Ce filtre possède quelques propriétés intéressantes :

- Il commute avec les dérivées et la transformation de Gabor (grâce aux propriétés de symétrie de la configuration spatiale utilisée), donc de génère pas de termes de surface dans les équations.
- Il fournit une information à grande échelle très semblable aux approches de champ moyen. Le champ moyen est obtenu avec une moyenne temporelle du champ filtré sur un temps raisonnablement court.
- Ce filtre est idem-potent, c'est à dire que $\langle \langle \rangle \rangle = \langle \rangle$. Cette propriété fait disparaître les termes $\overline{v_i v_j}$ et $\overline{v_i' V_j}$ des équations 2.19 et 2.20.
- Le fait que le champ filtré soit composé d'une unique composante dans une direction perpendiculaire à son gradient fait disparaître les termes $V_i V_j$ et $\overline{V_i V_j}$ des équations 2.19 et 2.20.

Ces deux dernières propriétés devraient en principe rendre le terme F_i rigoureusement nul. Il est néanmoins évident que ça ne peut pas être le cas. En effet ce filtre ne fait pas disparaître la cascade d'énergie, il le concentre dans les termes locaux. Pour ce filtre particulier la modélisation du terme local doit se faire non seulement en ajoutant une viscosité turbulente, mais aussi en ajoutant un forçage car les termes locaux sont ici seuls porteurs du transfert d'énergie.

Par symétrie le champ de vitesse filtré consiste en une unique composante de la vitesse V_1 variant selon l'unique direction non intégrée x_2 .

J'ai nommé cette approche de la RDT, a mi-chemin entre les approches grandes échelles et champ moyen du point de vue de la séparation de variables, SES (pour

²Pour les approches de champ moyen avec viscosité turbulente, beaucoup de travail existe dans la littérature et ce cas sera traité au chapitre suivant.

Small Eddy Simulation, ou simulation des petites échelles) car la grande simplicité du champ filtré le rend très léger à simuler, alors que les échelles sous-filtre sont quand à elles assez gourmandes relativement, à l'opposé de l'approche grandes échelles où ce sont les petites échelles qui sont exprimées simplement.

Une autre particularité de l'approche SES réside dans l'utilisation particulière de la transformation de Gabor. En effet le poids de Gabor choisi est le suivant :

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} e^{-\frac{x_2^2}{2\lambda^2}} \quad (5.2)$$

Ce poids particulier rend la transformation de Gabor très semblable à une transformation de Fourier dans les deux directions 1 et 3, alors qu'elle conserve son caractère particulier pour la direction 2. Grâce à ces propriétés, d'une part tous les termes dits de surfaces sont nuls, d'autre part les propriétés 2.25 et 2.27 sont vérifiées.

Forçage et viscosité turbulente

Ainsi que nous l'avons déjà vu, ces deux termes ont une influence mineure sur la dynamique et les effets de phase du problème. Ils sont toutefois responsables de la cascade d'énergie. Puisque l'équation sous-filtre est exprimée dans l'espace de Gabor, nous pouvons utiliser une viscosité turbulente spectrale analogue à celle donnée par l'équation 2.10. Néanmoins, la viscosité turbulente introduite dans l'équation 2.31 n'est pas une viscosité turbulente semblable à celles précédemment débattues. En effet elle ne modélise que le terme *local* de l'équation sous-filtre alors que les viscosités turbulentes classiques modélisent le terme non-linéaire dans sa totalité. Dans ce cas la viscosité turbulente utilisée est donnée par :

$$\nu_T = \mathfrak{R} \sqrt{C_K \epsilon}^{1/3} k^{-4/3} \quad (5.3)$$

où \mathfrak{R} est une constante que nous appellerons constante de Kraichnan (extrapolée de Kraichnan (1987)), représentant dans notre cas une estimation du rapport v'/v . L'équivalent spectral du filtre 5.1 présente deux fréquences de coupure : $k_1 = k_3 = 0$ et $k_2 \simeq 1/\lambda$. Sans pouvoir l'exprimer avec certitude, la théorie de Kolmogorov (1941) permet de s'assurer que la dépendance en nombre de Reynolds de la constante de Kraichnan est :

$$\mathfrak{R} \simeq A \mathfrak{R} \epsilon^{-9/4} \quad (5.4)$$

Le préfacteur est alors un paramètre libre dont l'influence est très modeste.

Il n'existe pas à ma connaissance d'expression générale du forçage turbulent. Néanmoins son spectre (donc son amplitude) doit vérifier une équation de conservation de l'énergie moyenne (voir par exemple Canuto and Dubovikov (1996)) :

$$\frac{F^2}{k} = 2\nu_T k^2 E(k) \quad (5.5)$$

où $E(k)$ est le spectre d'énergie, supposé de Kolmogorov, donc donné par l'équation 2.9.

Dans le cas de la SES, la phase du forçage est déterminée aléatoirement en s'assurant simplement de son caractère incompressible (solenoidal). Ce forçage aléatoire apparente la SES aux modèles dits de Langevin de la turbulence consistant à étudier les modes non normaux du système linéaire 2.31.

5.2 Écoulement de Couette plan

5.2.1 Généralités

L'écoulement de Couette plan est l'écoulement cisailé le plus simple. Dans sa forme théorique, ce sont deux plaques infinies se déplaçant dans la même direction en sens opposé, entre lesquelles se trouve le fluide. Sa version expérimentale est un ruban fermé en rotation comme montré sur la figure 5.1.

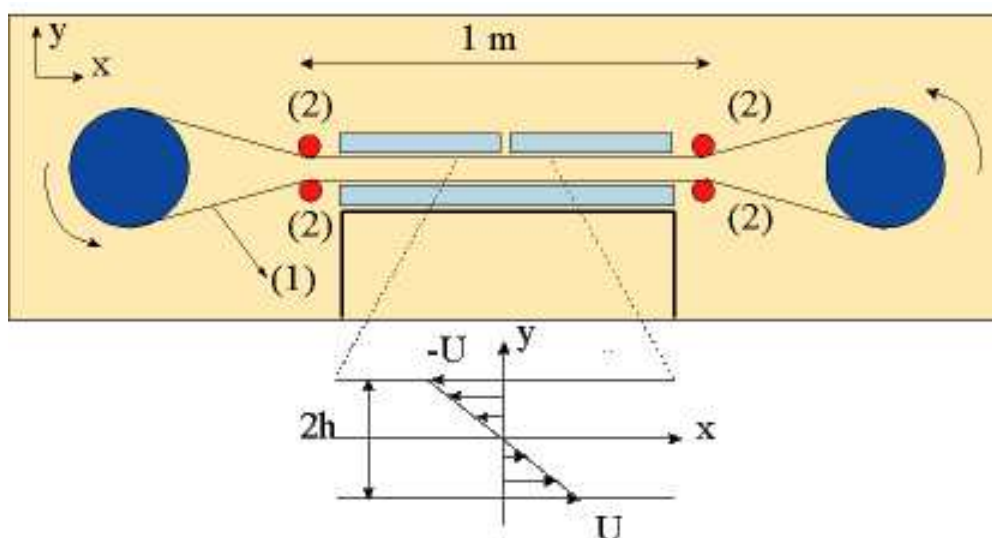


FIG. 5.1 – Schéma de l'écoulement de Couette plan expérimental (D'après Bottin (1998)), et écoulement moyen laminaire théorique.

Appelons x la coordonnée respectivement dans le sens de mouvement des parois, y celle perpendiculaire aux parois et z la dernière direction de telle sorte que la base soit orthonormée, et u, v, w les composantes de la vitesse suivant chacune des coordonnées, en gardant les conventions précédemment utilisées (lettres capitales pour les quantités filtrées, primes pour les quantités sous-filtre).

Quelques propriétés de l'écoulement laminaire

Par symétrie et invariance par translation, il est aisé de s'assurer que l'écoulement laminaire ne peut se faire qu'en x , direction à laquelle nous associerons la vitesse U et que cette vitesse ne peut varier que selon y .

Il est alors aisé de s'assurer que le champ de vitesse laminaire de l'écoulement est simplement donné par :

$$U(y) = U(-L/2) + \frac{U(+L/2) - U(-L/2)}{L}y \quad (5.6)$$

où y est la coordonnées sur l'axe perpendiculaire aux parois, $-L/2$ et $+L/2$ sont les deux limites en y (la position des deux parois).

Il est souvent plus simple d'utiliser des variables dédimensionnées

$$\eta = \frac{2y}{L} \quad (5.7)$$

$$\mathfrak{t} = \frac{tU}{L} \quad (5.8)$$

de telle sorte que les parois soient en $\eta = \pm 1$ et la vitesse des deux parois soit $\mathfrak{u} = \pm 1$.

Quelques propriétés de l'écoulement turbulent

L'écoulement de Couette plan est par certains aspects un cas d'école de la turbulence cisailée. La figure 5.2 montre le champ de vitesse moyen issu d'une simulation directe à $Re = 1300$ (Bech et al. 1995).

L'équation pour le champ moyen U est simplement donnée par :

$$\partial_t U + \partial_y \langle uv \rangle = \nu \partial_y^2 U \quad (5.9)$$

où u et v sont les vitesses fluctuantes dans la direction de l'écoulement moyen et dans la direction perpendiculaire aux murs respectivement, et $\langle \rangle$ la moyenne définissant le champ moyen, à savoir une moyenne statistique. Si l'hypothèse d'ergodicité est vérifiée, la moyenne statistique est équivalente à une moyenne temporelle et l'écoulement moyen est donné par :

$$\nu \partial_y U - \langle uv \rangle = \nu \partial_y U \Big|_{y=\pm 1} \quad (5.10)$$

Cette relation permet à elle seule de bien comprendre quelques propriétés de la turbulence dans l'écoulement de Couette plan. Définissons le nombre sans dimension :

$$\Lambda(y) = - \frac{\langle uv \rangle (y)}{\nu \partial_y U(y)} \quad (5.11)$$

Ce nombre s'apparente formellement à un nombre de Reynolds, il est construit de manière identique. En effet le nombre de Reynolds est une estimation dimensionnelle du rapport du terme non-linéaire sur le terme visqueux. D'après la loi de similitude de

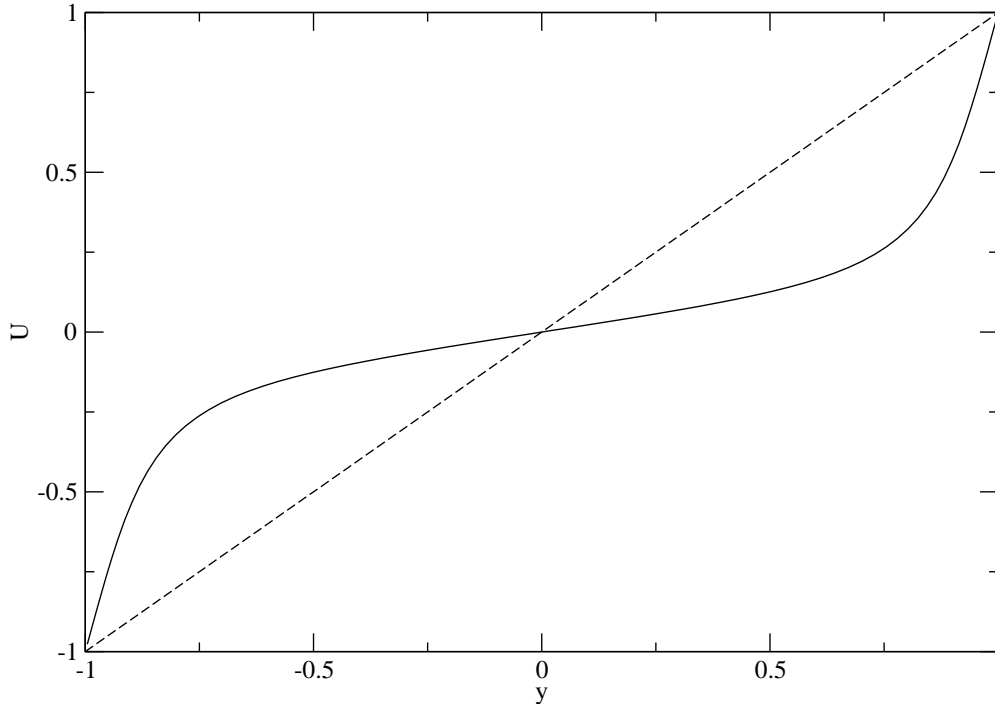


FIG. 5.2 – Champ de vitesse turbulent moyen dans une simulation directe à $Re = 1300$ (D'après Bech et al. (1995)), trait plein, et champ moyen laminaire correspondant, tirets.

Reynolds (Reynolds 1883) Λ est une fonction du nombre de Reynolds. Sachant que le taux de transfert d'énergie des échelles filtrées vers les échelles sous-filtre est donné par :

$$\epsilon = \tau_{ij} \partial_j U_i - \langle u'_i u'_j \rangle \partial_j U_i \quad (5.12)$$

et qu'en moyenne en turbulence tridimensionnelle le transfert d'énergie se fait vers les nombres d'onde croissants, Λ est une fonction positive, nulle aux bords. Par ailleurs, sa limite lorsque le nombre de Reynolds tend vers le nombre de Reynolds critique est nulle. Nous pouvons alors en déduire que Λ est une fonction positive croissante du nombre de Reynolds. Ces arguments très simples permettent alors de comprendre le comportement du champ moyen lorsque l'écoulement est turbulent :

- Au centre du canal, Λ est positif et croît avec le nombre de Reynolds : la turbulence diminue le gradient de la vitesse moyenne et le fait tendre vers 0 quand le nombre de Re devient infini.
- Près des parois, les conditions aux limites imposant à Λ d'être nul sur les parois, le gradient est au contraire augmenté pour compenser sa faible valeur au centre de l'écoulement et deux couches limites s'y développent. Sur les parois les fluctuations turbulentes sont par conditions aux limites nulles. Les échelles turbulentes sont contraintes par la présence des murs et ne peuvent atteindre leur taille maximale qu'au centre du canal. Ceci constitue une interprétation heuristique du comportement de la turbulence dans un écoulement cisailé borné.

5.2.2 Simulation SES de l'écoulement

En utilisant le filtre de la SES défini au chapitre 2, l'équation pour l'unique composante filtrée U est :

$$\partial_t U + \partial_y \langle uv \rangle = \nu \partial_y^2 U \quad (5.13)$$

Remarquons que cette équation est rigoureusement identique à l'équation 5.9 du champ moyen de l'écoulement dans une approche RANS, ce qui illustre assez bien la polyvalence du filtre de la SES.

D'autre part, le système sous-filtre se déduit simplement de l'équation 2.31 :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= U \\ \dot{y} &= 0 \\ \dot{z} &= 0 \\ \dot{k}_x &= 0 \\ \dot{k}_y &= -k_x S \\ \dot{k}_z &= 0 \\ \dot{u} &= 2 \frac{k_x^2}{k^2} S v - S v - (\nu + \nu_T) k^2 u + F_u \\ \dot{v} &= 2 \frac{k_x k_y}{k^2} S v - (\nu + \nu_T) k^2 v + F_v \\ \dot{w} &= 2 \frac{k_x k_z}{k^2} S v - (\nu + \nu_T) k^2 w + F_w \end{aligned} \quad (5.14)$$

où $S = \partial_y U$ est le cisaillement. La viscosité turbulente est exprimée à partir de l'équation 5.3, le forçage à partir de l'équation 5.5 avec le ϵ donné par l'équation 5.12.

Algorithme

Les variables du système et leurs conditions initiales sont résumées dans le tableau 5.1.

Variable	Notations	Valeur initiale
Champ de vitesse filtré	$U(y)$	$U(y) = y$
Positions des particules	x	Aléatoire entre 0 et 2π
	y	Aléatoire entre -1 et 1^*
	z	$z = 0^*$
Nombres d'onde des particules	k_x	Aléatoire*
	k_y	Aléatoire*
	k_z	Aléatoire*
Vitesses des particules	u	$u = 0$
	v	$v = 0$
	w	$w = 0$

TAB. 5.1 – Définition et conditions initiales des différentes du système (* voir texte).

Certains cas particulier méritent précision :

- Le tirage aléatoire en y se fait suivant un poids $\Phi(y)$ donné par $\Phi(y) = \Re e^{3/4} - 1/(1-|y|)$ si $|y| < 1 - \Re e^{-3/4}$ et $\Phi(y) = 0$ sinon. Ceci permet d'exclure la particules de la couche limite laminaire en évitant de la sorte les problèmes de conditions aux limites pour les particules. Le poids est normalisé en fonction du nombre de particules pour assurer $\int \Phi(y)dy = 1$
- Les nombres d'onde k_x et k_z sont indépendants du temps dans ce formalisme. D'autre part, les modes les plus stables sont ceux ayant un k_x et un k_z faible. C'est pourquoi pour ne pas disperser les ressources informatiques ces nombres d'onde sont tirés de telle sorte que $k_x^2 + k_z^2 < k_H^2$, où k_H est un nombre d'onde libre, petit, que j'ai pris en pratique égal à 10.
- Le nombre d'onde k_y est tiré de manière aléatoire entre le nombre d'onde $1/\lambda$ où λ est l'échelle du poids de Gabor et le nombre d'onde $\Re e^{3/4}$ correspondant à l'échelle de dissipation (échelle de Kolmogorov). Son signe est aléatoire.
- La variable z ne joue aucun rôle dans ce formalisme. Je l'ai alors considérée comme nulle. Pour étudier l'évolution d'un scalaire passif dans l'écoulement il serait nécessaire de la prendre en compte.

Une fois les conditions initiales déterminées, l'algorithme se décompose ainsi :

- 1 Détermination du pas de temps : $dt = K_{CFL} \times 1/S$ où K_{CFL} est une constante (condition de Courant) dépendant de l'algorithme d'intégration que j'ai préféré sous estimer. J'ai pris $K_{CFL} = 0.2$, alors que mon algorithme ("leapfrog") supporte facilement un $K_{CFL} = 0.7$.
- 2 Tirage aléatoire de la phase du forçage : Tirage d'un champ aléatoire bidimensionnelle avec une longueur de cohérence prise égale à $1/k_H$. Les valeurs de ce champ varient entre -1 et 1 .
- 3 A partir de la position y de chacune des particules, détermination du ϵ correspondant (à partir de l'équation 5.12). Pour le premier pas de temps j'ai pris $\epsilon = U^3/L$ c'est à dire 0.5 dans mes unités.
- 4 Détermination de la viscosité turbulente directement pour chaque particule.
- 5 Détermination du forçage : multiplication de la phase réelle du champ tiré lors de l'étape 2 par l'amplitude spectrale donnée par l'équation 5.5.
- 6 Intégration du système 5.15 pour chaque particule à l'aide d'un schéma de type *leapfrog*³
- 7 Par périodicité, recentrage des particules sortant de l'espace réel. Les particules ayant un k_y dont la valeur absolue sort du domaine $[1/\lambda, \Re e^{3/4}]$ subissent la transformation $k_y = -k_y$ sans modification d'amplitude pour leur vitesse.
- 8 Reconstruction du terme $\langle uv \rangle$ par transformation de Gabor inverse et application du filtre 5.1.

³Le schéma leapfrog est le suivant : supposons que nous intégrons $\dot{f}(t) = A(t)$, la valeur de f au temps $t + dt$ est donnée par $f(t + dt) = f(t) - 0.5A(t - dt)dt + 1.5A(t)dt$.

9 Intégration de l'équation 5.13 par un schéma de Crank-Nicholson (schéma adapté pour les équations de diffusion (Press, Teukolsky, Vetterling and Flannery 1992)).

Quelques résultats préliminaires

Les résultats de cette méthode inédite sont très prometteurs. Néanmoins le code de calcul lui-même nécessite encore quelques développements pour le perfectionner. En effet, l'inconvénient de cette approche particulière réside dans le fait que la reconstruction du champ de vitesse sur le maillage des grandes échelles, qui devrait théoriquement donner des vitesses exactement nulles, garde des fluctuations statistiques et ne l'est pas. Pour le moment ce problème est résolu en reconstruisant le champ sur un maillage plus fin que celui réellement utilisé pour l'intégration de l'équation 5.13 et en le moyennant pour l'y ramener. Cette méthode peu satisfaisante permet d'obtenir des résultats préliminaires intéressants, mais n'est pas viable et devra être abandonnée avant le portage du code vers des géométries différentes.

Les résultats préliminaires du code sont les suivants, pour une simulation à un nombre de Reynolds de 3000 :

Fig. 5.3 Champ moyen turbulent : moyenne temporelle du champ de vitesse $U(y)$.

Fig. 5.4 Champ de vorticit   à petite   chelle : montre la coexistence de r  gions laminaires et de r  gions turbulentes. Les structures sont plus marqu  es pr  s des parois.

Fig. 5.5 Densit   de probabilit   d'incr  ment de vitesse entre deux points s  par  s par une distance $l = 0.05$ (sachant que les deux plaques sont s  par  es par une distance   gale    2). L'  cart    la gaussienne est la cons  quence de la pr  sence de structures coh  rentes dans l'  coulement.

5.3 Ecoulements en rotation diff  rentielle

5.3.1 Cas incompressible : l'  coulement de Couette-Taylor

L'  coulement de Couette-Taylor est un   coulement entre deux cylindres coaxiaux tournant chacun avec sa vitesse angulaire propre. Nous ne d  dimensionnerons pas les variables dans cet   coulement. Les trois variables d'espace sont

R variant entre R_i , rayon du cylindre int  rieur, et R_o , rayon du cylindre ext  rieur, associ  e    la vitesse sous filtre u .

θ variant entre 0 et 2π , associ  e    la vitesse filtr  e V et    la vitesse sous-filtre v .

z suppos  e p  riodique, varier entre 0 et 2π et associ  e    la vitesse sous-filtre w

Les   quations de la SES pour l'  coulement de Couette-Taylor sont tr  s semblables    celles pour l'  coulement de Couette plan. L'  quation pour le champ de vitesse filtr   est :

$$\partial_t V + \frac{1}{R} \partial_R R \langle uv \rangle = \nu \partial_R \frac{1}{R} \partial_R R V \quad (5.15)$$

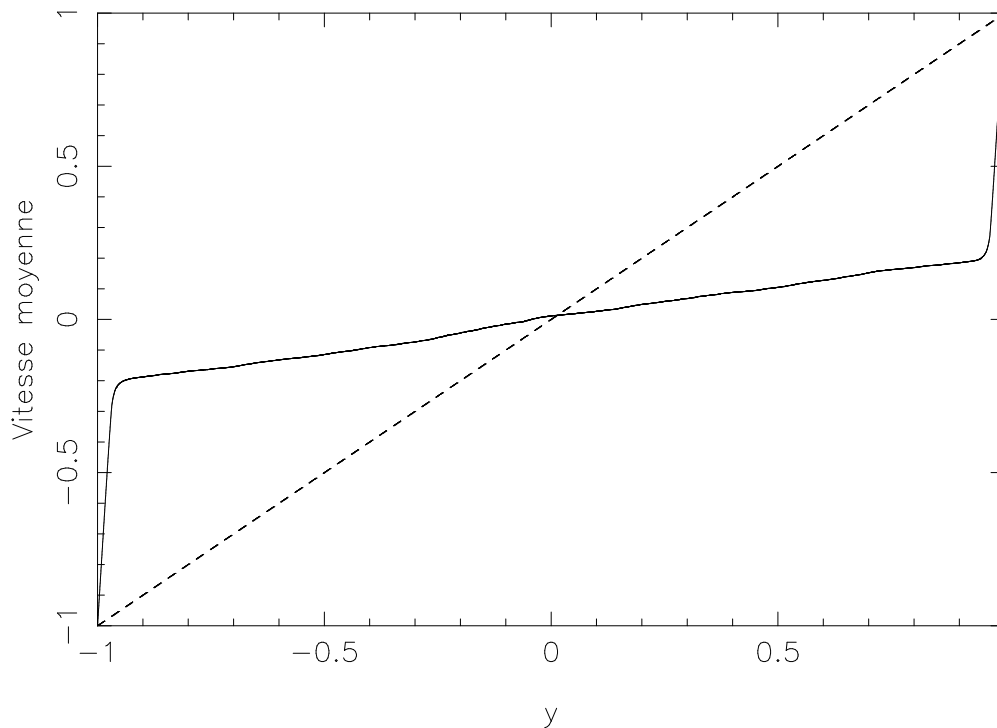


FIG. 5.3 – Champ de vitesse moyen dans une simulation pour un nombre de Reynolds de 3000 (trait plein) et champ de vitesse laminaire correspondant (tirets).

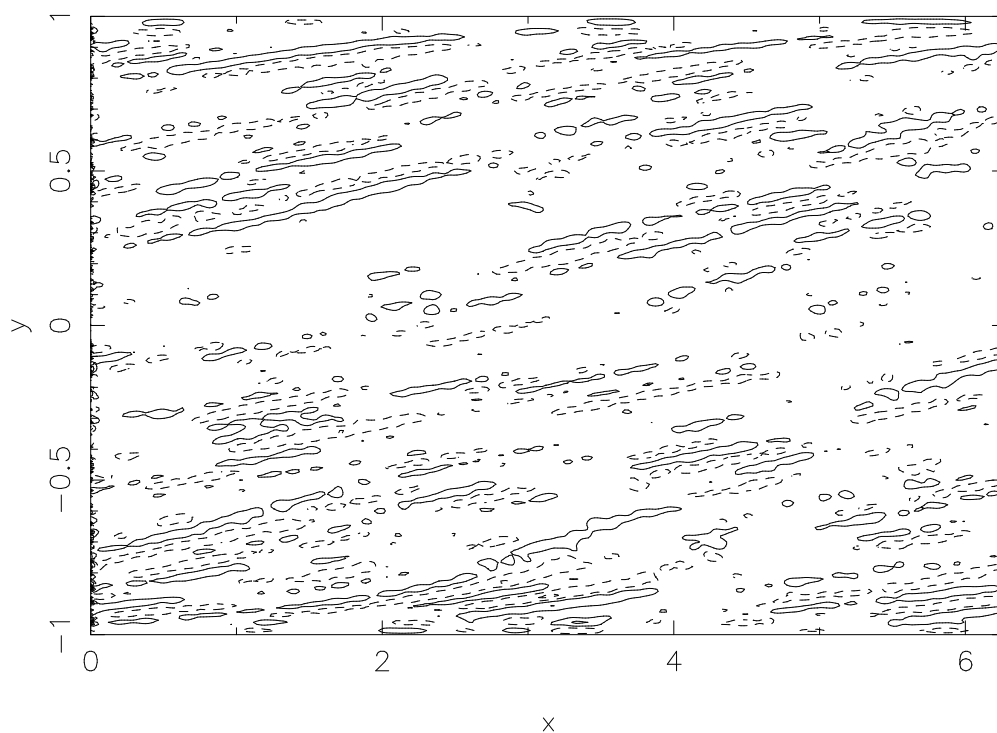


FIG. 5.4 – Champ de vorticité $\omega_z = \partial_x v - \partial_y u$ dans une simulation pour un nombre de 3000.

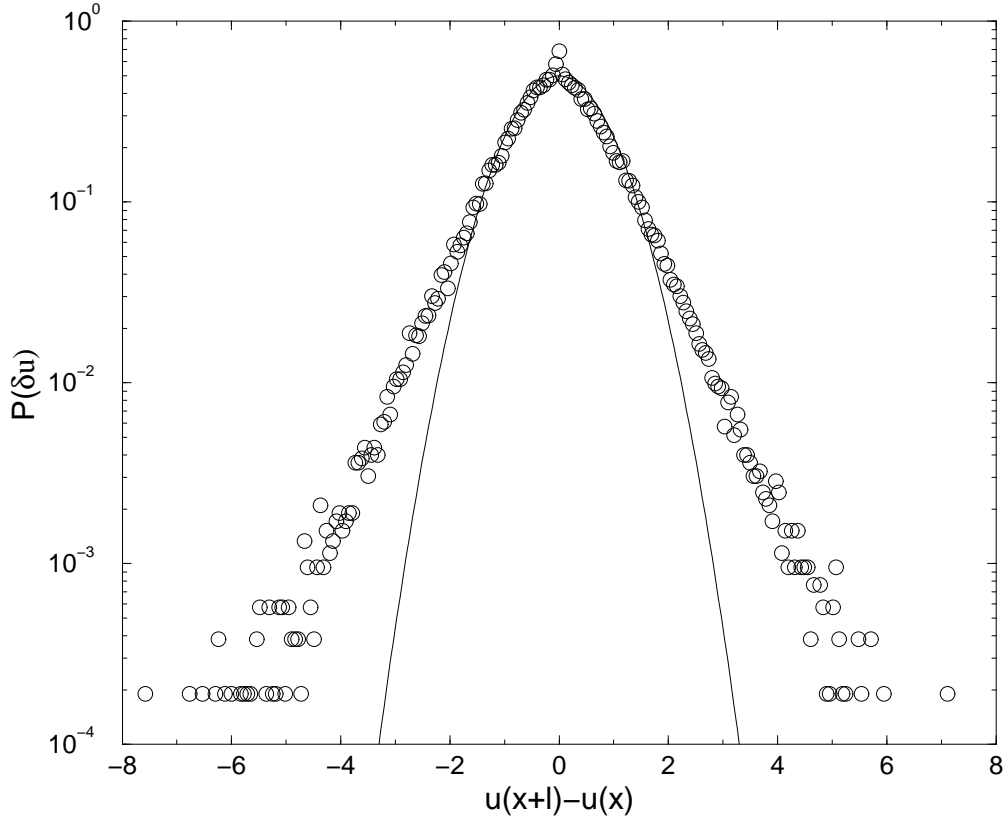


FIG. 5.5 – Densité de probabilité d’incrément de vitesse entre deux points espacés par une distance $l = 0.05$ dans une simulation pour un nombre de Reynolds de 3000 (cercles) et une gaussienne pour comparaison (trait plein).

Le système sous filtre dans l’espace de Gabor est :

$$\begin{aligned}
 \dot{R} &= 0 \\
 \dot{\theta} &= \Omega \\
 \dot{z} &= 0 \\
 \dot{k}_r &= -k_\theta S \\
 \dot{k}_\theta &= 0 \\
 \dot{k}_z &= 0 \\
 \dot{u} &= 2\frac{k_r k_\theta}{k^2}(\Omega + S)u + 2\Omega\left(1 - \frac{k_r^2}{k^2}\right) - (\nu + \nu_T)k^2 u + F_u \\
 \dot{v} &= 2\frac{k_\theta^2}{k^2}(\Omega + S)u - 2\frac{k_r k_\theta}{k^2}\Omega v - (2\Omega + S)v - (\nu + \nu_T)k^2 v + F_v \\
 \dot{w} &= 2\frac{k_\theta k_z}{k^2}(\Omega + S)u - 2\frac{k_r k_z}{k^2}\Omega v - (\nu + \nu_T)k^2 w + F_w
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

où $\Omega = V/R$ et $S = R\partial_R\Omega$.

L’implémentation numérique de ces équations reste encore à faire.

5.4 Une analogie entre la convection en présence d'un cisaillement et l'écoulement de Couette-Taylor

On sait depuis Bradshaw (1969) qu'une analogie parfaite existe entre les équations du mouvement d'un fluide en rotation différentielle et celles d'un écoulement stratifié en présence d'un cisaillement. Dubrulle and Hersant (2002) ont étendu cette analogie aux lois d'échelles de transport turbulent dans les deux systèmes et ont pu à partir des lois d'échelles calculées en convection turbulente prédire les lois d'échelles de l'énergie dissipée dans l'écoulement de Couette-Taylor. L'extension de l'analogie utilise une approche de type RDT. Nous avons déjà utilisé ces résultats en introduction pour interpréter les luminosités de disques observées.

Pour l'écoulement en rotation différentielle, les notations sont celles utilisées dans tout le manuscrit. L'écoulement convectif en présence d'un cisaillement sera décrit comme suit :

- Les deux "plaques" où la température est fixée sont en $z = 0$ et $z = H$.
- L'écoulement moyen U se fait dans la direction x et varie en fonction de z .
- La température moyenne est notée \mathcal{T} , la température sous filtre τ' .
- On note $\beta = -\frac{1}{\rho}\partial_T\rho$ le coefficient de dilatation thermique du fluide.

J'invite le lecteur à se référer à l'article Dubrulle and Hersant (2002) reporté en annexe pour les détails de l'analogie. Les variables analogues sont montrées dans la table 5.2.

Convection	Rotation différentielle
z	R
x	θ
$\partial_z U$	$R\partial_R\Omega$
βg	$2\frac{\Omega}{R}\frac{k_\theta^2}{k_\theta^2+k_z^2}$
$\partial_z \mathcal{T}$	$\frac{1}{R}\partial_R(R^2\Omega)$
w	u
τ'	$(rv - wk_\theta/k_z)$

TAB. 5.2 – Grandeurs analogues entre l'écoulement de Couette-Taylor et la convection en présence d'un cisaillement.

Cette analogie est très utile pour notre problème. En effet elle rend la nébuleuse solaire primitive similaire (peut être pas analogue car la nébuleuse est stratifiée) à un écoulement bien mieux connu : l'atmosphère, un écoulement convectif en présence de cisaillement présentant de nombreux régimes différents (régime "jour" où le sol est chaud, analogue au Couette-Taylor sujet à l'instabilité centrifuge et régime "nuit" où le sol est froid, analogue au Couette-Taylor stable vis-à-vis de l'instabilité centrifuge). Ainsi l'atmosphère peut, par certains aspects, être le laboratoire rêvé pour étudier la nébuleuse solaire primitive. Incidemment, l'analogue du nombre de Reynolds dans les

écoulements en rotation différentielle est le nombre de la racine carrée du nombre de Rayleigh dans les écoulements convectifs (à quelques facteurs correctifs près, voir Durbin and Hersant 2002). La couche limite atmosphérique est un écoulement à grand nombre de Rayleigh susceptible d'apporter de précieuses informations sur la nébuleuse solaire primitive.

L'exploitation de cette analogie n'a pas encore été menée de façon exhaustive. Quelques exemples de résultats qu'elle peut apporter ont été présentés en introduction, mais l'exploitation de données atmosphériques pour prédire certaines caractéristiques de la turbulence dans la nébuleuse solaire primitive est un travail prometteur qui devrait permettre des avancées importantes dans notre compréhension de la nébuleuse.

Cette analogie devrait permettre de calibrer la méthode SES appliquée à l'écoulement de Couette-Taylor et la nébuleuse solaire primitive. Ainsi, dans un avenir proche, l'utilisation combinée de la SES et de l'analogie avec la convection devrait permettre la naissance d'un modèle de la nébuleuse solaire primitive ayant les caractéristiques suivantes :

- Pas de paramètre libre dans le calcul des échelles sous-filtre, ni dans l'équation d'évolution du champ de vitesse, ni dans l'équation d'évolution des différentes quantités scalaires couplées à l'écoulement (Température, grains, réactifs chimiques, ...).
- Une information multi-échelles de la turbulence.
- Un modèle calibré sur des données de l'atmosphère, dont les caractéristiques sont mieux connues que celles des disques circumstellaires.

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

La turbulence dans la nébuleuse solaire primitive régit à elle seule tout le processus de la formation planétaire. Elle contrôle la structure thermodynamique du disque et conditionne son évolution. Elle retarde la mise à l'équilibre des réactions chimiques tout en augmentant le taux de réaction moyen en régénérant les réactifs. De plus les structures turbulentes bidimensionnelles (tourbillons de Rossby) sont des lieux préférentiels d'agglomération des planétésimaux. En d'autres termes, la turbulence contrôle l'efficacité de presque tous les autres processus physiques.

L'approche de champ moyen de la turbulence dans la nébuleuse solaire primitive permet de comprendre les grandes lignes de l'histoire de la nébuleuse. Néanmoins l'essence même de cette approche limite les propriétés de la turbulence qui peuvent être explorées. En particulier elle exclut l'étude explicite du rôle des structures turbulentes fluctuantes dans la nébuleuse, tourbillons dont le temps de vie reste court, mais qui sont perpétuellement recrées. Ainsi, à moins d'inclure *a posteriori* leur effet au prix de nombreux paramètres libres supplémentaires (éventuellement plus que de variables réelles), les structures turbulentes restent absentes de cette approche. Pourtant, si les grandeurs moyennes de la nébuleuse sont raisonnablement bien reproduites, les objets du système solaire témoignent de l'importance de structures turbulentes localisées et temporaires. En particulier les planètes géantes montrent une grande variété de compositions qui implique une variation spatio-temporelle de l'efficacité du piégeage des gaz volatils dans ces objets : si Uranus et Neptune semblent être des planètes "moyennes" de ce point de vue, Jupiter est le produit d'une très grande efficacité du piégeage des volatils, alors que Saturne a incorporé bien moins de gaz que la moyenne. De même, d'une comète à l'autre certaines molécules volatiles peuvent varier par un facteur 10, telles CO et CH_3OH par exemple.

Ces fluctuations sensibles dans les reliques de la nébuleuse que sont les planètes et les comètes sont sans doute un ingrédient fondamentale de la formation du système solaire. *Il apparaît donc nécessaire de développer un modèle de la nébuleuse solaire primitive dans lequel ces fluctuations et leurs implications seront explicitement calculées.* Une possibilité réside dans le modèle que j'ai appelé SES (pour Small Eddy

Simulation, ou simulation des petites échelles turbulentes) qui semble bien adapté à ce que nous comprenons aujourd'hui de la turbulence dans la nébuleuse. Son implémentation dans les écoulements cisailés a déjà conduit à un code numérique préliminaire capable de calculer les quantités fluctuantes à toute échelle dans l'écoulement de Couette plan. Il nécessite encore quelques développements afin de la stabiliser mais a déjà fourni des résultats très satisfaisants et un comportement dynamique très sain.

Son adaptation aux écoulements en rotation différentielle est envisageable dans un avenir proche et fait l'objet d'un projet post-doctoral que j'effectuerai sans doute en collaboration avec l'équipe de l'Institut d'Astrophysique Théorique de Heidelberg.

Elle devrait tirer avantages de l'analogie entre les écoulements en rotation différentielle et la convection en présence de cisaillement moyen. La calibration de du modèle devrait d'effectuer en utilisant trois approches :

- Comparaison avec l'atmosphère en utilisant l'analogie
- Comparaison avec les données expérimentales de l'écoulement de Couette-Taylor fournies par Denis Richard
- Calibration du modèle par le fractionnement du rapport D/H entre l'eau et l'hydrogène moléculaire mesuré dans le système solaire (météorites et comètes en particulier).

Une fois ce modèle construit il devrait permettre de développer une approche auto-consistante de la formation planétaire dont les différentes étapes seront calculées dynamiquement sans faire intervenir dans la mesure du possible d'intervention *a posteriori* de phénomènes physiques oubliés. Ainsi, ce modèle comportera peu de paramètres libres et permettra donc des prédictions plus sûres.

Il reste bien sur encore beaucoup de travail pour en arriver à ce stade, mais les premiers résultats arriveront vite et cet objectif devrait pouvoir être atteint dans les années à venir.

Annexe A

Non locality of scale interactions in turbulent shear flows

Reproduction d'un compte rendu de programme de recherche :
Center for Turbulence Research
Proceedings of the 2000 Summer Program
pages 285-291

Non-locality of scale interactions in turbulent shear flows

By **F. Hersant**[†], **B. Dubrulle**[†] AND **M. Wang**

The scale interactions in turbulent shear flow are evaluated using a channel flow DNS database at $Re_\tau = 590$. The velocity field is filtered using a sharp cut-off filter in the Fourier space, and the relative magnitudes of the advective terms in the small scale equations, derived from Navier-Stokes equations, are computed as a function of wavenumber. We show that the interactions at small scales are non-local in the direction of the mean flow, dominated by the advection of small scales by large scale vortices. This non-locality of interactions suggests that the subgrid-scale model of Dubrulle and Nazarenko (1997) for 2D turbulence is likely to be applicable to turbulent shear flows as well.

1. Introduction

Direct numerical simulation (DNS) based on the Navier-Stokes equations is only possible for relatively low Reynolds numbers. Therefore, filtering is often needed to capture the large-scale structure of the flow, hoping that the effect of small scale fluctuations can be more easily modeled. This is the basis for the classical large eddy simulations (LES) in which the subgrid scale (SGS) stresses are calculated through a statistical prescription. The most frequently used closure in LES is the Smagorinski model in which the SGS stresses are modeled in terms of a turbulent eddy viscosity with a model constant to be calibrated for specific flows.

The presence of the unknown model constant makes this procedure inappropriate for unfamiliar and non-measurable flows such as protoplanetary disks. Hence, it is desirable to develop new models in which arbitrary parameters are eliminated or at least have less impact on the dynamic evolution of the resolved scales. The dynamic SGS model of Germano *et al.* (1991) provides one such example. It employs a *test* filter to calculate the model constant as a function of time and position.

In 1997 Dubrulle and Nazarenko introduced an alternative subgrid scale model for 2D turbulence (hereafter referred to as DN model) based upon a generalization of the Rapid Distortion Theory. This model relies on linearized Navier-Stokes equations forced through the energy cascade mechanism. The assumption underlying this model is that the nonlinear interactions at small scales are mainly non-local and thus have to be treated exactly. This contrasts with the classical Kolmogorov theory of turbulence in which the main interactions are between comparable scales. In the DN model, the less important local interactions are represented by a turbulent viscosity, which plays a secondary role and can be neglected in some special situations (e.g. 2D turbulence).

Laval *et al.* (1999) implemented this model for 2D isotropic turbulence computations. The model gives a much cleaner treatment of the small scales than standard LES

[†] CNRS, CEA/DAPNIA/SAP, CE Saclay, F-91191 Gif sur Yvette Cedex, France

models and remains cheap in memory and computation time. In 3D homogeneous turbulence, numerical tests have also been performed by Laval *et al.* (2000). They showed that non-local interactions indeed dominate the dynamics, generating coherent structures and intermittency. The local interactions are responsible for energy saturation of the structures and can be modeled by a simple turbulent viscosity.

In many astrophysical and geophysical flows, both 2D and 3D dynamics coexist: when the rotation becomes dynamically important, i.e. for scales larger than the Taylor-Proudman scale, the turbulent eddies have a 2D behavior. On the other hand, these flows are characterized by a strong mean shear flow, which is not the case in the homogeneous turbulence studied by Laval *et al.* Intuitively, we would think that the presence of this mean flow enhances the advection of the small scales and thus renders the non-local approximation even better than in 3D homogeneous turbulence. We present here quantitative support of this idea based on *a priori* tests performed using a DNS database of a turbulent channel flow at $Re_\tau = 590$ (Moser *et al.* (1999)).

2. The Dubrulle and Nazarenko model

The Navier-Stokes equations for an incompressible flow are:

$$\begin{aligned}\partial_t v_i + v_j \partial_j v_i &= -\frac{1}{\rho} \partial_i p + \nu \partial_j \partial_j v_i \\ \partial_i v_i &= 0\end{aligned}\tag{2.1}$$

where v_i is the velocity component in the i^{th} direction, p the pressure, ρ the (constant) density, and ν the kinematic viscosity. As in standard LES, we define resolved and subgrid scale quantities using a filter function $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$:

$$\begin{aligned}v_i(\mathbf{x}, t) &= V_i(\mathbf{x}, t) + v'_i(\mathbf{x}, t) \\ V_i(\mathbf{x}, t) &\equiv \overline{v_i(\mathbf{x}, t)} = \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') v_i(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}'\end{aligned}\tag{2.2}$$

where V_i and v'_i are the resolved and subgrid scale velocity components in the i^{th} direction. The filter function used in the present report is a sharp cut-off in the Fourier space.

Using this filtering operation, one obtains two coupled sets of equations: one for the resolved scales and the other for the unresolved (subgrid) scales. The resolved scale equations are obtained by a mere filtering of Eq. (2.1):

$$\begin{aligned}\partial_t V_i + \partial_j \overline{V_i V_j} + \partial_j \overline{V_i v'_j} + \partial_j \overline{v'_i V_j} + \partial_j \overline{v'_i v'_j} \\ = -\frac{1}{\rho} \partial_i P + \nu \partial_j \partial_j V_i \\ \partial_i V_i = 0\end{aligned}\tag{2.3}$$

The subgrid scale equations are obtained by subtracting equations (2.3) from (2.1):

$$\begin{aligned}\partial_t v'_i + \partial_j V_i v'_j + \partial_j V_i v'_j + \partial_j v'_i V_j + \partial_j v'_i v'_j \\ - \partial_j \overline{V_i V_j} - \partial_j \overline{V_i v'_j} - \partial_j \overline{v'_i V_j} - \partial_j \overline{v'_i v'_j} \\ = -\frac{1}{\rho} \partial_i p' + \nu \partial_j \partial_j v'_i \\ \partial_i v'_i = 0\end{aligned}\tag{2.4}$$

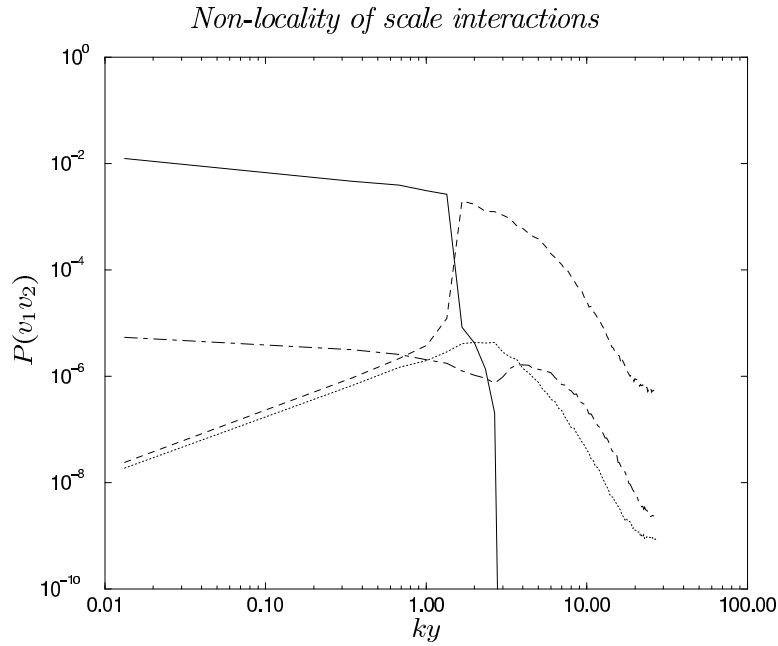


FIGURE 1. Wavenumber spectra of the four Reynolds shear stress components involving the streamwise and the wall-normal velocities, at $y^+ = 100$, for a cut-off wavenumber of $300m^{-1}$ (adapted from Carlier *et al.* (2000)): — V_1V_2 ; - - - V_1v_2' ; ····· v_1V_2 ; - · - v_1v_2' .

Several terms contribute to the nonlinear interactions: *non-local* terms involving the product of a resolved scale and a subgrid scale component, and a *local* term involving two subgrid scale components. The essence of subgrid scale modeling is to keep only the *non-local* terms and to model the local term by a turbulent viscosity.

The savings in memory achieved with this kind of model are not obvious since all the scales are computed. However the linearity of the subgrid scale equations allows several simplifications. First, they may be decomposed into localized linear modes, which can exploit the intermittency and inhomogeneity of the small scales, thereby decreasing the number of modes needed to reconstruct the subgrid field. Also, the linearity enables the use of semi-Lagrangian schemes of integration, which provides a significant reduction of the computational cost via an increase of the integration time step (see Laval *et al.* (1999) for details of 2D simulations).

3. A priori tests in a channel flow

Carlier *et al.* (2000) have studied the relative importance of local and non-local terms in a high Reynolds number wind tunnel boundary layer at a momentum-thickness based Reynolds number equal to 20600. The results are displayed in Fig. 1, which shows the power spectra of the four instantaneous Reynolds stress components involving v_1 and v_2 , defined as $P(v_1v_2) = |\widehat{v_1v_2}|^2$ where the caret denotes Fourier transform in the plane parallel to the wall at $y^+ = 100$. The horizontal axis represents the dimensionless wavenumber $k = (k_1^2 + k_3^2)^{1/2}$ (normalized by $1/y$). One sees that for wavenumbers larger than the cut-off, wavenumber ($= 300m^{-1}$), The non-local term V_1v_2' indeed dominates over the other terms by several orders of magnitudes. However, the hot wire anemometry technique used in the experiment prevents both the measurements of other components of the velocity field and the computation of spatial derivatives, thereby preventing a direct

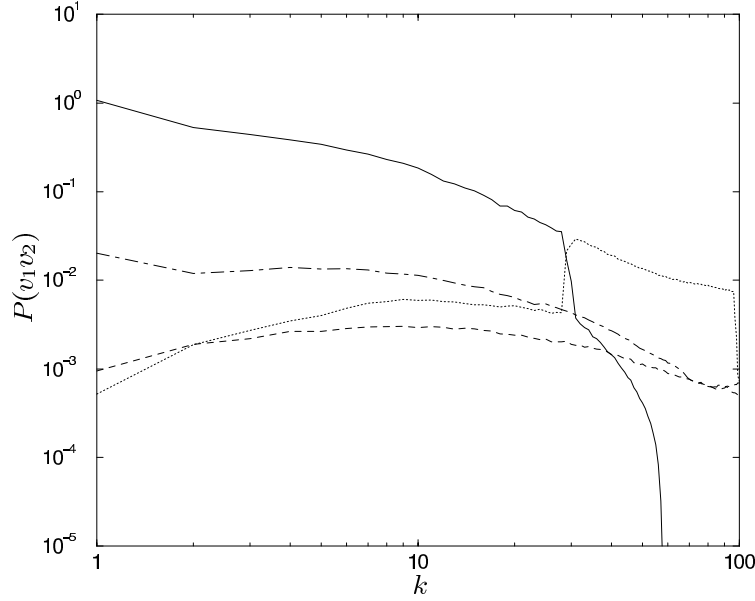


FIGURE 2. Wavenumber spectra of the four Reynolds stress components involving the stream-wise and the wall-normal velocities, at $y^+ = 50$, for a cut-off wavenumber of 30: — V_1V_2 ; $V_1v'_2$; ---- v'_1V_2 ; -.- $v'_1v'_2$.

check of the non-local hypothesis. It is, therefore, of interest to complement their study via *a priori* tests performed using a DNS database.

The database used in the present study is from the channel flow DNS of Moser *et al.* (1999) at $Re_\tau = 590$ based on the friction velocity and channel half-width. The DNS was conducted on a grid of $384 \times 257 \times 384$, covering a computational box of size $2\pi, 2, \pi$ in the streamwise (x_1), wall-normal (x_2 or y), and spanwise (x_3) directions, respectively. All the variables used are dimensionless, with velocities normalized by the mean friction velocity and spatial coordinates normalized by the channel half-width. The strong inhomogeneity of the mesh in the wall-normal direction prevents the use of Fourier analysis in that direction. Therefore, filtering was performed only in the planes parallel to the wall. A sharp cut-off filter with cut-off wavenumber $k = 30$ was used to separate large and small scales.

Our analysis was performed in two steps: first, we computed the four components of v_1v_2 and their power spectra $P(v_1v_2)$ ($= |\widehat{v_1v_2}|^2$) as a function of wavenumber $k = (k_1^2 + k_3^2)^{1/2}$, analogous to those plotted in Fig. 1, thereby allowing an estimate of the influence of the Reynolds number. The results are presented in Fig. 2. Then, we computed the advective terms in the three subgrid scale equations (2.4), complete with the spatial derivatives and summation over indices. The derivatives were calculated using spectral methods (Fourier in the streamwise and spanwise directions, and Chebychev in the wall-normal direction) consistent with the original DNS. The results, again expressed in terms of their wavenumber spectra $P(v_j\partial_jv_i) = |\widehat{v_j\partial_jv_i}|^2$, are shown in Figs. 3, 4 and 5. Notice that although the examples shown in Figs. 2–5 are for $y^+ = 50$, the same calculations have been repeated for $y^+ = 20$ and $y^+ = 100$ as well, and the results are found to be very similar to those depicted in the figures.

From a comparison of Figs. 1 and 2, one sees that the main influence of the higher Reynolds number (Fig. 1) is to increase the dominance of the non-local term with respect to the others. This is a consequence of the increased scale separation, which has been

Non-locality of scale interactions

289

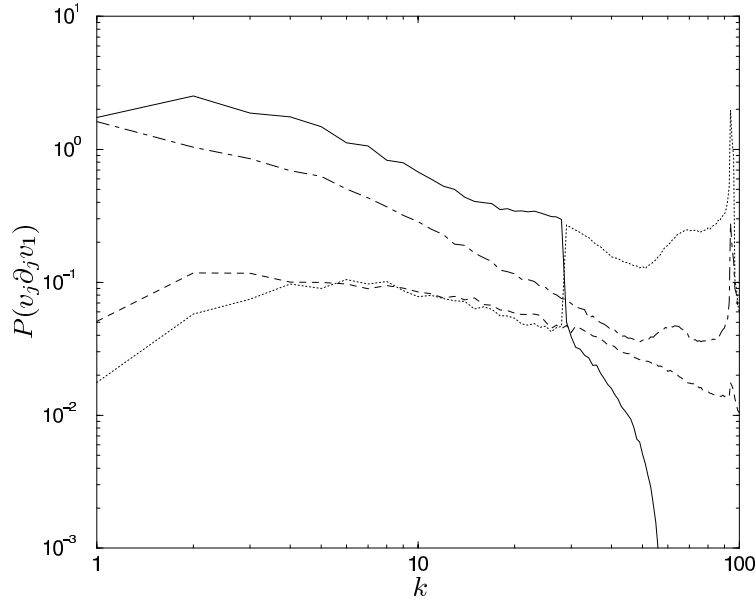


FIGURE 3. Wavenumber spectra of the four components of the divergence of the Reynolds tensor projected in the streamwise direction, at $y^+ = 50$, for a cut-off wavenumber of 30: — $V_j \partial_j V_1$; $V_j \partial_j v_1'$; ---- $v_j' \partial_j V_1$; -.- $v_j' \partial_j v_1'$.

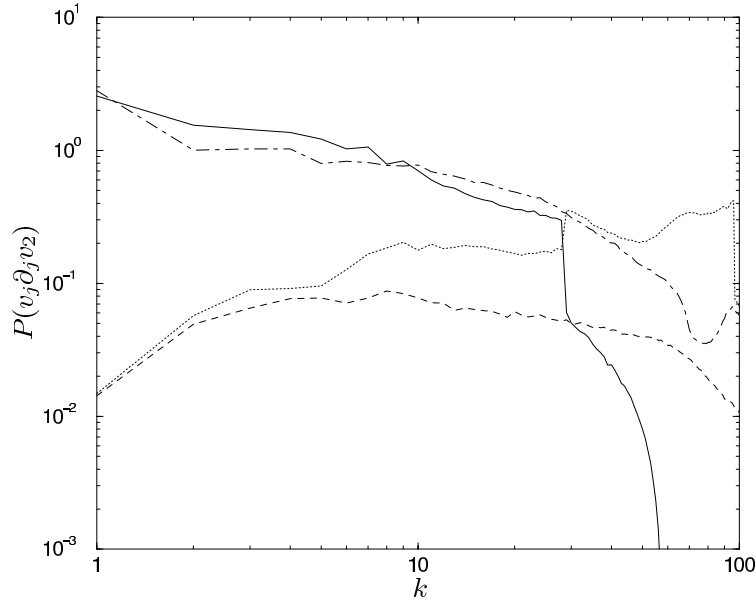


FIGURE 4. Wavenumber spectra of the four components of the divergence of the Reynolds tensor projected in the wall-normal direction, at $y^+ = 50$, for a cut-off wavenumber of 30: — $V_j \partial_j V_2$; $V_j \partial_j v_2'$; ---- $v_j' \partial_j V_2$; -.- $v_j' \partial_j v_2'$.

predicted and discussed in Dubrulle & Nazarenko (1997). When the other components of the velocity fields and the derivatives are taken into account, one may note that the non-local hypothesis remains valid for the subgrid scale equations (2.4) in the streamwise (Fig. 3) and spanwise (Fig. 5) directions, while it becomes clearly violated for the equation in the direction normal to the wall (Fig. 4). This is consistent with the belief that the

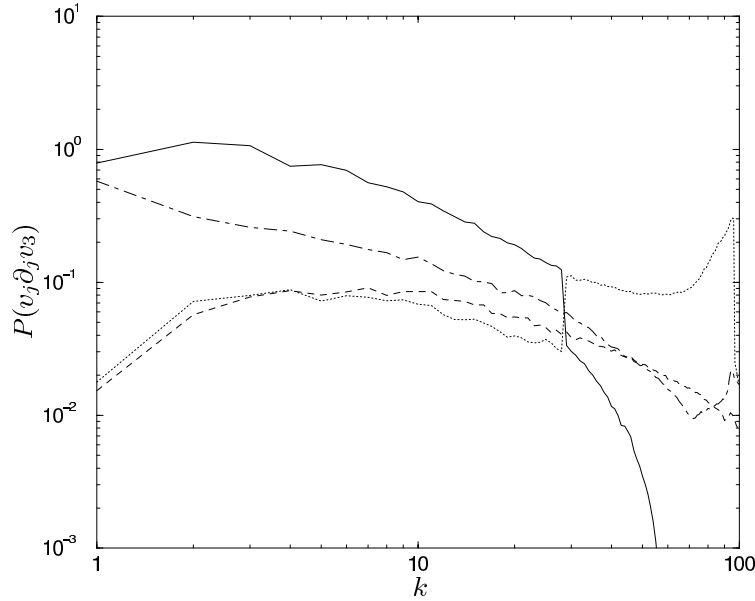


FIGURE 5. Wavenumber spectra of the four components of the divergence of the Reynolds tensor projected in the spanwise direction, at $y^+ = 50$, for a cut-off wavenumber of 30: — $V_j \partial_j V_3$; $V_j \partial_j v_3'$; ---- $v_j' \partial_j V_3$; -.- $v_j' \partial_j v_3'$.

presence of a mean flow (here in the streamwise direction) favors the development of non-local interactions even at moderate Reynolds numbers. In the absence of a mean flow (like in the direction normal to the wall, or in 3D homogeneous turbulence), the local terms need to be taken into account. On the whole, these results suggest that, in the streamwise and spanwise directions, the local interaction terms could be safely neglected (as in 2D turbulence), while in the direction normal to the wall, they should be modeled by a turbulent viscosity as in 3D homogeneous turbulence.

4. Conclusions

We have shown that, based on *a priori* tests in a channel flow, the model developed by Dubrulle & Nazarenko (1997) should be applicable in turbulent shear flows. As expected, nonlinear interactions in the presence of a mean flow are mainly dominated by the advection of small scales by the large scale motions, including the mean stream. The remaining interactions only involve a small fraction of the flow energy, and their dynamics can be modeled by, for example, a turbulent viscosity.

This is of great interest for protoplanetary disks. In fact accretion disks are believed to have many similarities with Couette-Taylor flows (see e.g. Richard & Zahn (1999)). The presence of rotation may induce some differences. However, the rotation tends to force the large scale motions to have a 2D behavior. Given the success of the Laval *et al.* (1999) model for 2D turbulence, it is hoped that the model will be also valid in 3D rotating shear flows. Obviously, the present *a priori* test results are very encouraging, but further investigations are required to evaluate the influence of rotation more precisely. Dynamical tests are also needed to validate this procedure for 3D turbulence in complex geometries.

Acknowledgments

This work was supported by the Center for Turbulence Research. We wish to thank Jessica Gullbrand and Oleg Vasilyev for their assistance during the CTR summer research program, and Jean-Philippe Laval for many useful discussions. We also thank Johan Carlier and Michel Stanislas for providing Fig. 1.

REFERENCES

- CARLIER, J., LAVAL, J. P. & STANISLAS, M. 2000 Some experimental support at large Reynolds number to a new hypothesis for turbulence modeling. Submitted to *C.R.A.S.*
- DUBRULLE, B. & NAZARENKO, S. V. 1997 Interactions of turbulence and large scale vortices in 2D incompressible flows. *Physica D.* **110**, 123-138.
- GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P. & CABOT, W. H. 1991 A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model, *Phys. Fluids A.* **3**, 1760-1765.
- LAVAL, J. P., DUBRULLE, B. & NAZARENKO, S. V. 1999 Fast Numerical simulations using a dynamical model for Small Scale Turbulent Motions. Submitted to *Phys. Fluids.*
- LAVAL, J. P. & DUBRULLE, B. 2000 Numerical Validation of a Dynamical Turbulent Model of Turbulence. Submitted to *Phys. Rev. Lett.*
- LAVAL, J. P., DUBRULLE, B. & NAZARENKO, S.V. 2000 Non-locality and intermittency in 3D Turbulence. Submitted to *Phys. Fluids.*
- MOSER, R. D., KIM, J. & MANSOUR, N. N. 1999 Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau=590$. *Phys. Fluids.* **11**, 943-945.
- RICHARD, D. & ZAHN, J. P. 1999 Turbulence in differentially rotating flows. What can be learned from the Couette-Taylor experiment. *Astron. Astrophys.* **347**, 734-738.

Annexe B

A two-dimensional model for the primordial nebula constrained by D/H measurements in the solar system : Implications for the formation of giant planets

Reproduction d'un article publié en 2001 :
Astrophysical Journal
volume 554
pages 391-407

THE ASTROPHYSICAL JOURNAL, 554:391–407, 2001 June 10
 © 2001. The American Astronomical Society. All rights reserved. Printed in U.S.A.

A TWO-DIMENSIONAL MODEL FOR THE PRIMORDIAL NEBULA CONSTRAINED BY D/H MEASUREMENTS IN THE SOLAR SYSTEM: IMPLICATIONS FOR THE FORMATION OF GIANT PLANETS

FRANCK HERSANT

Département de Recherche Spatiale, Unité Mixte de Recherche 8632 du Centre National de la Recherche Scientifique, Observatoire de Paris-Meudon, Place Jules Janssen, 92195 Meudon, CEDEX, France; and Unité Propre de Recherche 182 du Centre National de la Recherche Scientifique, SAp/Commissariat à l'Énergie Atomique/Saclay, L'Orme des Mérisiers, 91191 Gif-sur-Yvette, France; franck.hersant@obspm.fr

DANIEL GAUTIER

Département de Recherche Spatiale, Unité Mixte de Recherche 8632 du Centre National de la Recherche Scientifique, Observatoire de Paris-Meudon, Place Jules Janssen, 92195 Meudon, CEDEX, France; Daniel.Gautier@megasx.obspm.fr

AND

JEAN-MARC HURÉ

Département d'Astrophysique Extragalactique et de Cosmologie, Unité Mixte de Recherche 8631 du Centre National de la Recherche Scientifique, Observatoire de Paris-Meudon, Place Jules Janssen, 92195 Meudon, CEDEX, France; and Université Paris 7 (Denis Diderot), 2 Place Jussieu, 75251 Paris, CEDEX 05, France; jean-marc.hure@obspm.fr

Received 2000 September 27; accepted 2001 January 17

ABSTRACT

Using the density and temperature profiles resulting from a two-dimensional turbulent model of the solar nebula as well as an appropriate law for the time variation of the disk accretion rate, we integrate the equation of diffusion that rules the evolution of the D/H ratio in H₂O and HCN throughout the nebula. By fitting D/H measured in LL3 meteorites and comets or inferred in proto-Uranian and proto-Neptunian ices, we constrain the parameters of the model, namely, the initial accretion rate $\dot{M}(0)$, the initial radius of the turbulent disk R_D , and the α -coefficient of turbulent viscosity, and we find $2 \times 10^{-6} < \dot{M}(0) < 10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, $12.8 < R_D < 39 \text{ AU}$, and $0.006 < \alpha < 0.04$. Under the assumption that cometary cores are homogeneous, the microscopic icy grains that subsequently formed cometesimals were produced in the Uranus-Neptune region and no later than $3.5 \times 10^5 \text{ yr}$. The epochs of the formation of Jupiter and Saturn cannot be lower than 0.7 and 5.7 Myr, respectively, after the formation of the Sun. Uranus and Neptune were completed after the dissipation of the nebula. The enrichment in volatiles with respect to the solar abundance measured by the *Galileo* probe in Jupiter may result from the trapping of these gases in the form of clathrate hydrates in the feeding zone of the forming planet.

Subject headings: comets: general — planets and satellites: general — solar system: formation

1. INTRODUCTION

Drouart et al. (1999) have proposed an interpretation of the deuterium enrichment in water with respect to the protosolar value, measured in LL3 meteorites, Uranus and Neptune, and in three comets originating from the cloud of Oort. This was based on a pseudo-time-dependent one-dimensional turbulent α -disk model for the solar nebula (Dubrulle 1993). Drouart et al. (1999) showed that fitting the observed deuterium enrichments constrains the evolution with time of the temperature, pressure, and density radial profiles throughout the nebula. In turn, this determines the α -viscosity parameter, initial mass, and initial disk radius of the nebula. Subsequently, Mousis et al. (2000) have demonstrated that the nebulae selected in this way also account for the D/H ratio in HCN measured in comet Hale-Bopp.

In this report, we refine previous investigations using a pseudo-evolutionary two-dimensional model that accounts for the vertical structure of the disk (Huré 2000). Moreover, we redefine the physical and chemical data used to constrain the parameters of the model. Physical constraints concern the initial mass and initial temperature profile of the nebula, as well as the time to transport the angular momentum outward to the region where Neptune formed. Chemical constraints result from the enrichment in deuterium in water with respect to the protosolar value observed

in LL3 meteorites and comets or deduced from measurements of D/H in hydrogen in Uranus and Neptune. Another constraint is based on the deuterium enrichment in HCN measured in comet Hale-Bopp. Observations must be compared with theoretical calculations of the enrichment factor of D/H in the equatorial plan of the nebula. This is obtained by integrating the equation of diffusion of deuterated species in the nebula. Constraining the models has important implications on the theory of formation of the solar system. In particular, we may evaluate the region and the epoch of formation of cometary grains. We can estimate at what time Jupiter and Saturn were completed and determine the composition of the planetesimals which accreted onto these planets. We can also examine whether Uranus and Neptune were completed prior to the dissipation of the nebula gas.

The paper is organized as follows. Section 2 is devoted to the presentation of the two-dimensional evolutionary model. In § 3, we describe the data used to constrain the model parameters. The equation of diffusion that describes the evolution of the enrichment factor f in H₂O and in HCN with respect to the protosolar value for a given nebula model is described in § 4. The nebula models that satisfy all the observational constraints are selected in § 5. Section 6 is devoted to discussions and to the cosmogonical implications of our results. We conclude in § 7.

2. THE TURBULENT α -DISK TWO-DIMENSIONAL MODEL

2.1. General Considerations: The Thin Keplerian, Quasi-static Disk

Current accretion disk models are based on the α -prescription $\nu = \alpha_c H$ (Shakura & Sunyaev 1973), which defines the anomalous turbulent viscosity from dimensional grounds (c_s is the local sound speed, H is the half thickness of the disk, and α a dimensionless parameter, $\alpha \leq 1$). A subclass of these models known as “standard disk” models assumes a Keplerian rotation law, hydrostatic equilibrium, and energy balance between viscous heating and radiative losses (see Pringle 1981 for a review). The standard model widely used to model disks around T Tauri stars (e.g., Bell et al. 1997; D’Alessio et al. 1998) intrinsically fails for high accretion rates because high accretion rates make geometrically thick disks (or $H/R \gtrsim 0.1$, where R is the heliocentric distance) that cannot be Keplerian. Using power-law solutions (Huré 1998), it can be shown that the inconsistency appears as soon as $\dot{M} \gg 10^{-5} \sqrt{\alpha} M_\odot \text{ yr}^{-1}$. So, the earliest stages of the primordial disk involving high accretion rates cannot be properly described by the standard model. But as the Sun accretes material, the disk mass decreases in time if no external matter is injected into the disk. This assumes that the parent circumstellar envelope does not significantly modify the disk structure. According to the standard model, this means a monotonic decrease of the accretion rate. Thus, as time goes by, the disk becomes thinner and thinner and the Keplerian assumption gets rapidly justified. Following Makalkin & Dorofeyeva (1991), the accretion rate evolution would vary as a power law of time. In this paper, we use, as do Drouart et al. (1999), the law

$$\dot{M}(t) = \dot{M}(0) \left(1 + \frac{t}{t_0}\right)^{-3/2}, \quad (1)$$

where $\dot{M}(0)$ is the accretion rate at $t = 0$. We take for the origin of time, the moment when the Sun is almost complete. We define t_0 by

$$t_0 = \left[\frac{R_D^2}{3 \nu(R_D)} \right]_{t=0}, \quad (2)$$

where R_D is the disk size. Note that the disk has time to reach a steady state if the viscous timescale $\tau_{\text{vis}} \sim R_D^2/3\nu(R_D)$ measured at the outer edge R_D of the turbulent disk satisfies $\tau_{\text{vis}} \lesssim \tau_{\dot{M}}$, where $\tau_{\dot{M}} \sim \frac{2}{3}(t_0 + t)$ is the instantaneous variation timescale of the accretion rate. The viscous timescale increases with time for two reasons: first, the disk gets colder and colder, and thinner and thinner (i.e., $\nu(R_D)$ decreases); second, the disk stretches out (that is, R_D increases). In practical terms, τ_{vis} and $\tau_{\dot{M}}$ remain close (within a factor ~ 2 – 4) but the above inequality is never verified. It means that a time-dependent simulation allowing a natural expansion of the disk under the effect of angular momentum redistribution is indeed necessary (Ruden & Pollack 1991). Such a computation is beyond the scope of this paper. Despite the nonstationary character of the disk nebula, we treat the time-dependent problem by a series of steady state solutions with accretion rates changing according to equation (1).

2.2. Physical Quantities at the Equatorial Plane via the Two-dimensional Model

Drouart et al. (1999) used a one-dimensional disk model

to compute the temperature, pressure, density, and related quantities as a function of the radius and, subsequently, their temporal evolution. Let us recall that such a model is based on the “vertical averaging”: vertical gradients are replaced by a finite difference equation between the equatorial plane and the disk surface and implicitly assumes a vertically homogeneous disk. For instance, the scheme for the temperature T is

$$\frac{dT}{dz} \approx \frac{T(z=H) - T(z=0)}{H-0} \approx -\frac{T_c}{H}, \quad (3)$$

where $T_c \equiv T(z=0)$ is the midplane temperature. In this paper, we use a two-dimensional model to compute the physical quantities at the disk midplane (Huré 2000). It is based on the integration of three differential equations from the top down to the midplane, given boundary conditions. In principle, a two-dimensional model aiming to compute the vertical stratification in detail is physically more relevant than the one-dimensional model. In fact, the two models are in a good agreement (Huré & Galliano 2000). As Table 1 shows, there is only a 30% maximum deviation on the midplane temperature, with the two-dimensional model involving a slightly hotter disk than the vertically averaged model. The disk is also somewhat thicker and has a slightly larger surface density. Even a small difference in thermodynamic parameters is important for elaborating thermochemical models of the nebula since they are highly sensitive to the temperature, pressure, and surface density profiles.

The global (R, z) structure is determined mainly by the central mass M , mass accretion rate \dot{M} , and α -viscosity parameter. We show in Figure 1 an example of temperature distribution in the region 0.1–60 AU obtained for $\alpha = 9 \times 10^{-3}$ and $\dot{M} = 5 \times 10^{-8} M_\odot \text{ yr}^{-1}$ (these parameter values correspond to our nominal nebula model at $t = 0.65$ Myr; see § 5). The computations presented here systematically take into account the turbulent pressure that affects the hydrostatic equilibrium when $\alpha \gtrsim 0.1$ but neglect vertical convection, which plays only a minor role, vertical self-gravity, and illumination by the proto-Sun. From this point of view, our models involve optically thick disks and we have checked that disk irradiation has almost no effect on midplane quantities for luminosities typical of T Tauri stars.

An important input of the disk model is the law that fixes the viscous energy release between the midplane and the

TABLE 1
VALUES FOR A STANDARD DISK OBSERVED BETWEEN
TWO-DIMENSIONAL AND ONE-DIMENSIONAL MODELS

Key Quantity	Ratio	Range of Values
Thickness	h_{2D}/h_{1D}	1.0–3.3
Pressure	P_{2D}/P_{1D}	1.1–1.4
Density	ρ_{2D}/ρ_{1D}	0.4–1.4
Surface density	Σ_{2D}/Σ_{1D}	0.9–1.8
Temperature	T_{2D}/T_{1D}	1.0–1.3
Optical thickness	τ_{2D}/τ_{1D}	0.3–1.9

NOTE.—Minimum and maximum values for the ratio of some key quantities in a standard disk observed between a two-dimensional model and a one-dimensional model for $\alpha = 0.01$ and for accretion rates in the range of 10^{-9} – $10^{-5} M_\odot \text{ yr}^{-1}$ and over the domain 0.05–50 AU. Pressure, density, and temperature are those in the midplane of the disk (adapted from Huré & Galliano 2000).

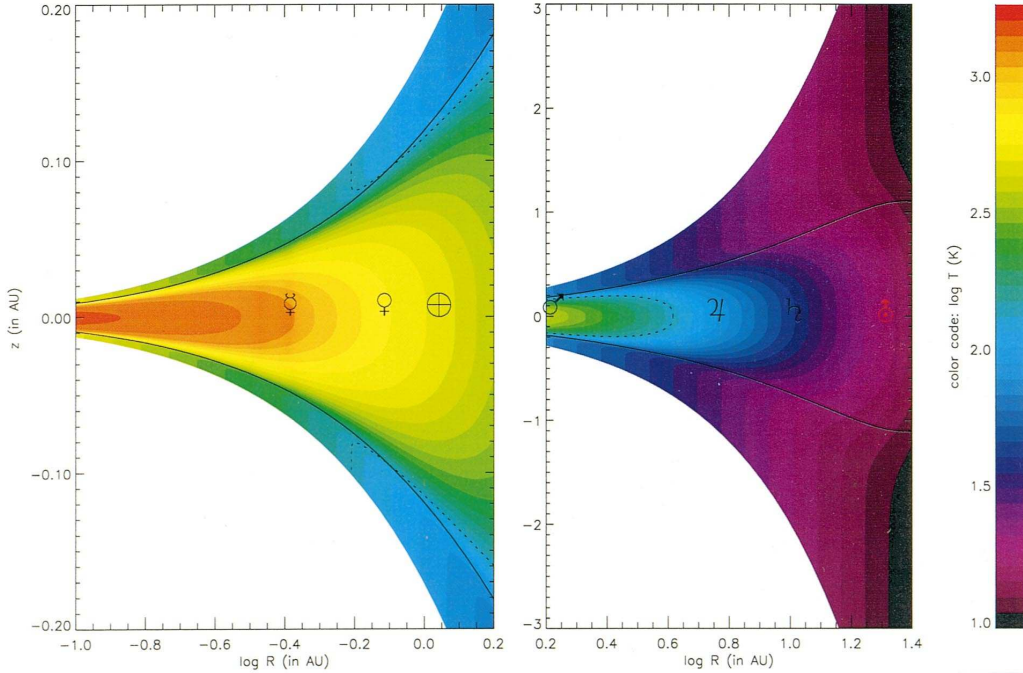


FIG. 1.—Temperature two-dimensional map in the disk for $\alpha = 9 \times 10^{-3}$ and $\dot{M} = 5 \times 10^{-8} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$ corresponding to the nominal solar nebula model at $t \simeq 0.65 \text{ Myr}$. *Thin lines*: bottom of the disk photosphere. *Dotted line*: $T = 150 \text{ K}$.

disk surface. In the present computations, we use the canonical law

$$v(z) \sim \alpha \frac{c_s^2(z)}{\Omega}, \quad (4)$$

where Ω is the Keplerian angular velocity.

We show in Figure 2 the relationship between the accretion rate and the radius of the disk R_D for a set of iso-values of the gas mass of the disk, $M_{\text{disk}}(R_D)$, defined by

$$M_{\text{disk}}(R_D) = 2\pi \int_{0.01 \text{ AU}}^{R_D} \Sigma(r) r dr, \quad (5)$$

where Σ is the disk surface density. Note that Drouart et al. (1999) used M_{disk} instead of \dot{M} as an input parameter. This is equivalent to our approach since the relation $M_{\text{disk}}(\dot{M}, R_{\text{disk}})$ can be inverted to provide a relation of the form $\dot{M}(R_{\text{disk}}, M_{\text{disk}})$. Very roughly, $M_{\text{disk}} \propto \dot{M}^{2/3} R^{4/3}$, which is in good agreement with what can be inferred from vertically averaged models (Huré 1998).

2.3. Evolution of the Nebula: Size and Thermodynamical Structure

Under the effect of angular momentum redistribution by turbulence, the nebula spreads out with time. Accordingly, the outer radius R_D of the disk varies at a rate

$$V_R(R_D) = + \frac{3}{2} \frac{v}{R_D}, \quad (6)$$

where v is defined by equation (4). Taking

$$V_R(R_D) \sim \frac{dR_D}{dt}, \quad (7)$$

the temporal evolution of the disk outer edge is therefore governed by the equation

$$\frac{dR_D}{dt} = \frac{3}{2} \frac{v}{R_D}. \quad (8)$$

To find $R_D(t)$, one must self-consistently solve this differential equation simultaneously with the equation $v(R, t)$ computed from the disk equation given the evolutionary law $\dot{M}(t)$. The initial radius of the nebula $R_D(0)$ is an input parameter which defines t_0 through equation (2) and constrains the subsequent evolution of the accretion rate by equation (1). An example of $R_D(t)$ is shown in Figure 3 for $\alpha = 0.009$, $\dot{M}(0) = 5 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, and $R_D(0) = 17 \text{ AU}$.

Figures 4, 5, and 6, respectively, display the midplane temperature of the gas, the pressure, and disk surface density versus the radius at different epochs ranging from $t = 0$ to 5 Myr. The disk parameters (initial radius, accretion rate, and α -parameter value) are the same as for Figure 3.

3. OBSERVATIONAL CONSTRAINTS

3.1. Physical Constraints

1. *Constraints on the mass of the disk.*—The minimum initial mass of the nebula must include the mass of the heavy elements required to form the solid bodies of the solar system. Adding the mass of the gas in solar proportion results in a firm lower limit of $0.01 M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$ since we do not include the mass in this estimate, which may be substantial, of comets presently in the Oort cloud (Hahn & Malhotra 1999). To satisfy the criterion of Shu et al (1990) for the gravitational stability of the disk, the mass of the disk is limited to $0.3 M_{\odot}$, whatever the time.

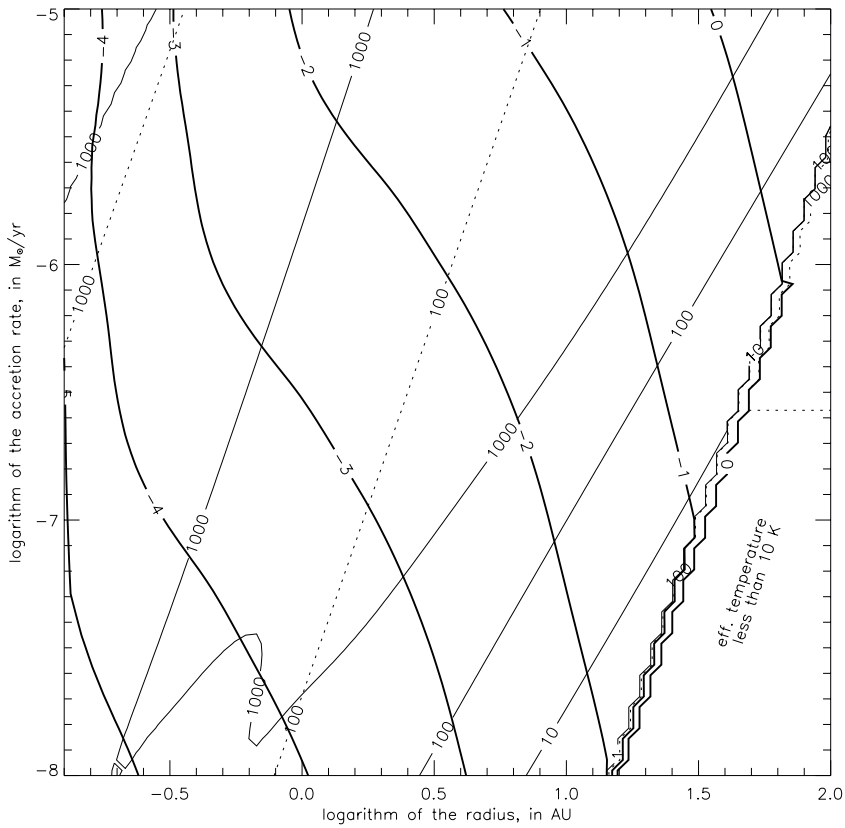


FIG. 2.—Iso-values of $\log M_{\text{disk}}/M_{\odot}$ (bold lines), effective temperature (in K, dotted lines), and midplane temperature (in K, thin lines) vs. the radius and the accretion rate for $\alpha = 0.01$.

2. Constraints from the transport of the angular momentum.—We assume that the angular momentum must have been transported outward to the farthest giant planet, namely, Neptune, by turbulence in a time t_N and communi-

cated to microscopic grains mixed with gas. These grains, composed mainly of rocky material and ices, subsequently grew, decoupled from gas, and produced both cometsimals as well as planetesimals which formed the core of Neptune. Taking the time for the formation of microscopic cometary

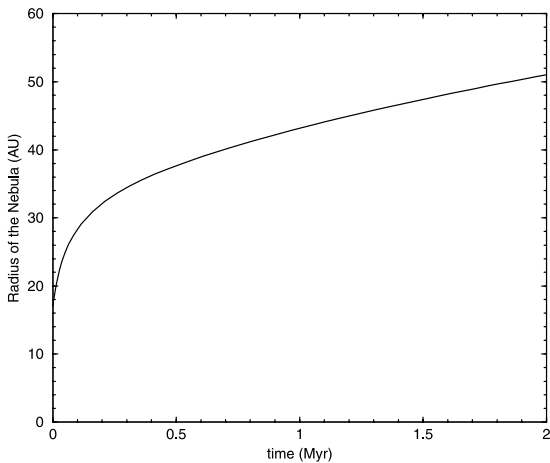


FIG. 3.—Evolution of the outer radius of the nebula with time for $\alpha = 0.009$, $\dot{M}(0) = 5 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, and $R_D(0) = 17 \text{ AU}$.

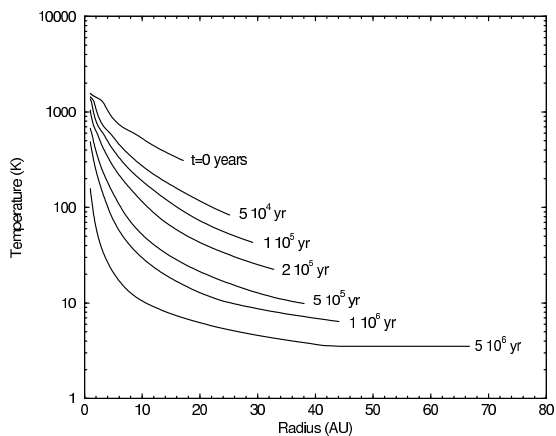


FIG. 4.—Temperature structure of the nebula at different times for $\alpha = 0.009$, $\dot{M}(0) = 5 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, and $R_D = 17 \text{ AU}$.

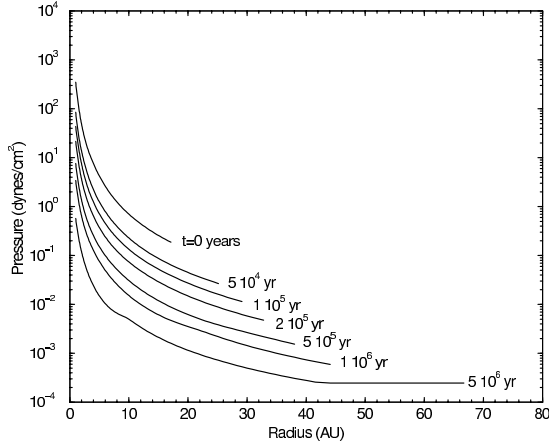


FIG. 5.—Pressure structure of the nebula at different times for $\alpha = 0.009$, $\dot{M}(0) = 5 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{yr}^{-1}$, and $R_D = 17 \text{AU}$.

icy grains evaluated by Mousis et al. (2000) (see also below, § 6), we adopt for t_N the value $2.5 \times 10^5 \text{yr}$. In principle, we could consider lower values and even the time $t_N = 0$, but this choice implies that one consider only nebulae for which the initial radius is at least equal to 30 AU. We will see in § 6.1 that, in this case, the range of models consistent with deuterium observations is unrealistically reduced. The case for $t_N = 500,000 \text{yr}$ has also been tested (§ 6.1).

3. *Constraints on the temperature of the nebula.*—We assume that the initial temperature of the nebula must have been no less than 1000 K inside 3 AU. This high temperature secures the crystallization of silicates (Gail 1998) observed in meteorites and in comets. The turbulent transport of crystallized silicates from the inner nebula to the region of formation of comets and its mixing with amorphous silicates originating from the presolar cloud are discussed by Bockelée-Morvan et al. (2001).

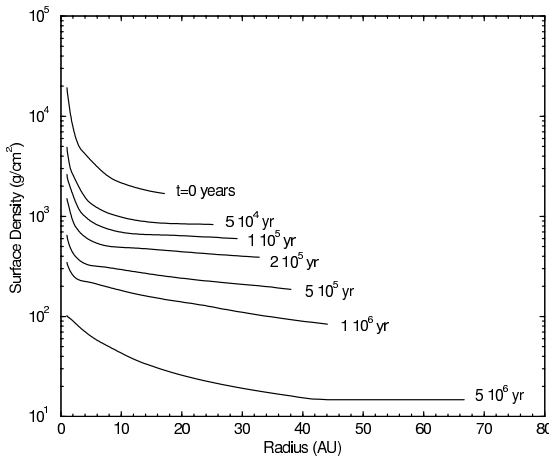


FIG. 6.—Surface density structure of the nebula at different times for $\alpha = 0.009$, $\dot{M}(0) = 5 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{yr}^{-1}$, and $R_D = 17 \text{AU}$.

3.2. Constraints from Deuterium Enrichments

The main reservoir of deuterium in the nebula is in hydrogen in the form of HD: the corresponding D/H ratio is named the protosolar deuterium abundance, while minor reservoirs of deuterium are in trace deuterated molecules. The deuterium enrichment observed in water constrains the temperature profile throughout the nebula (Drouart et al. 1999). At low temperatures ($T < 500 \text{K}$) deuterium tends to become heavily concentrated in H_2O , relative to H_2 (Richet, Bottinga, & Javoy 1977), so that the ratio of D/H in water to D/H in hydrogen H_2 , hereafter denoted f , in primitive objects should, in principle, reveal at what temperature the enrichment occurred in the nebula. The problem is not so simple, however, since the rate of isotopic exchange between neutral molecules present in the nebula vanishes for temperatures less than 200 K. In addition, the diffusive mixing occurring in the turbulent nebula tends to smooth the gradient of the D/H ratio in the nebula. The problem can be properly solved only by integrating the equation of diffusion that governs the evolution of f as a function of the heliocentric distance R and of the time t (see § 4). This equation depends on evolutionary temperature and density profiles of the nebula. Following Drouart et al. (1999), our strategy is to calculate $f(R, t)$ from various sets of the input parameters that define the two-dimensional models described in § 1 and to compare the resulting $f(R, t)$ profiles to the enrichments observed in object relics of isotopic hydrogen exchanges that occurred in the solar nebula 4.5 billion years ago. Models that do not permit us to fit D/H observations are rejected.

The values of D/H observed in water in LL3 meteorites and in comets are shown in Figure 7, updated from Bockelée-Morvan et al. (1998), together with determinations obtained in hydrogen in giant planets. D/H values are discussed extensively in Drouart et al. (1999). However, new results have appeared since then, which deserve some comments.

1. The protosolar value of 3×10^{-5} adopted by Drouart et al. (1999) must be revised since new determinations have been published recently. First, the D/H ratio in the atmosphere of Jupiter, measured in situ by the mass spectrometer aboard the *Galileo* probe was revised by Mahaffy et al. (1998) to $\text{D/H} = (2.6 \pm 0.7) \times 10^{-5}$. Since Jupiter is made up mainly of hydrogen, the Jovian D/H ratio must be representative of the protosolar value. Second, Lellouch et al. (1997) have also inferred from *Infrared Space Observatory (ISO)* infrared observations of Jupiter that $\text{D/H} = (1.8^{+1.1}_{-0.5}) \times 10^{-5}$. The calibration of the *ISO* data, however, is still subject to revision. Finally, the derivation of the protosolar D/H ratio from $^3\text{He}/^4\text{He}$ measured in the solar wind has also been revised down: Geiss & Gloecker (1998) conclude to a protosolar D/H ratio of $(2.1 \pm 0.5) \times 10^{-5}$, assuming some isotopic fractionation between He in the solar wind and He at the surface of the Sun. In this work, we adopt $\text{D/H} = (2.5 \pm 0.5) \times 10^{-5}$ for the protosolar ratio. All deuterium enrichments mentioned in this paper are calculated with respect to this value.

2. The D/H ratio in water ices entering the nebula has been taken as equal to $(73 \pm 12) \times 10^{-5}$ in Drouart et al. (1999). This is the highly enriched deuterium component measured in LL3 meteorites (Deloule, Doukhan, & Robert 1998). We believe that this component originated from the presolar cloud and was never reprocessed in the nebula.

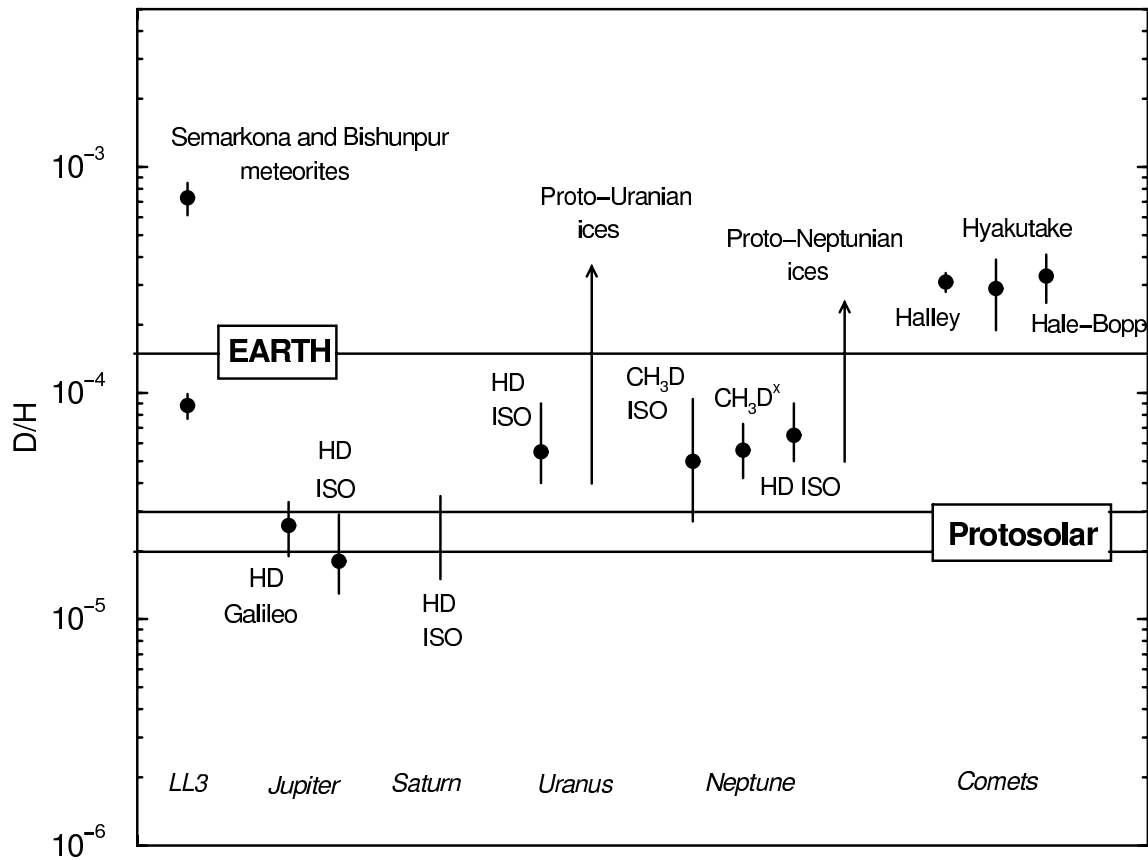


FIG. 7.—D/H ratios in the solar system. See text for explanations (updated from Bockelée-Morvan et al. 1998).

This assumption may be supported by the *ISO* detection of solid HDO in grain mantles obtained (Teixeira et al. 1999) with a corresponding D/H ratio between 40×10^{-5} and 150×10^{-5} . This range includes the value of the highly D-enriched component in LL3 meteorites. However, the reality of this detection is contested (d'Hendecourt 2000, private communication). On the other hand, the low enriched D-component measured in LL3 originates from water reprocessed in the nebula that combined with minerals around 3 AU to form clays present in the analyzed meteorites.

3. The present D/H ratio in hydrogen in Uranus and Neptune results from the mixing of the hydrogen originating from the nebula with the highly deuterium enriched ices that formed the cores of the two planets. The two components isotopically reequilibrated at high temperatures occurring in the interiors of the planets. In principle, it is possible to infer the D/H ratio in protoplanetary ices from the present D/H ratio today, provided that the relative proportions of ices and hydrogen can be estimated by models of planetary interiors. The D/H ratios in protoplanetary ices calculated by Drouart et al. (1999) from interior models available at this time (Podolak, Weizmann, & Marley 1995) were substantially less than the values in comets, suggesting that these objects have been formed at a different moment

or in a different region than Uranus and Neptune. However, new models have been published recently by Podolak, Podolak, & Marley (2000) which conclude to the possibility of a substantially higher amount of hydrogen in Uranus and Neptune than predicted by previous works. Figure 7 shows that proto-Uranian and proto-Neptunian ices exhibit D/H ratios that may be consistent with cometary values, as previously mentioned by Mousis et al (2000). This is in agreement with the current idea that comets and planetesimals that formed the cores of Uranus and Neptune originated from microscopic icy grains formed at the same time and in the same region.

4. The D/H ratio has also been measured in HCN in comet Hale-Bopp (Meier et al. 1998). Using the one-dimensional model of Drouart et al. (1999), Mousis et al (2000) have shown that the models fitting D/H in H_2O in comets also fit D/H in HCN in comet Hale-Bopp. This question is reexamined using our two-dimensional model (§ 6.3).

5. Because H_2O and HCN were trapped in cometary nuclei in solid phase, we need to calculate $f(R, t)$ for each species in solid phase. In fact, there is no isotopic exchange between gas and ice, the value of f in the condensed phase is that acquired by the considered species at the time and at the heliocentric distance where it condensed.

From all these considerations, the following constraints have been imposed:

1. $f(R, t)$ calculated by integrating the equation of diffusion from the two-dimensional model must fit at some point the low D-enriched component of LL3, supposed to be formed at 3 AU, namely, the condition $2.5 < f(3 \text{ AU}) < 5$ must be fulfilled.

2. A posteriori, we verify that $f(R, t)$ fits, in solid phase, somewhere in the turbulent nebula and, at some epoch, the enrichment measured in H_2O in the three observed comets and in HCN in comet Hale-Bopp. For H_2O , we must have $8 < f_{\text{H}_2\text{O}}(R, t) < 19$, and for HCN, $63 < f_{\text{HCN}}(R, t) < 135$.

4. EQUATION OF DIFFUSION

In the vapor phase, the derivative of $f(R, t)$ may be expressed as the sum of two terms: the first one describes the isotopic exchange between HD and the concerned deuterated molecule, here, namely, either H_2O or HCN (Lécluse & Robert 1994); the second term describes the diffusion in the nebula.

Let us examine first the diffusion term. Each species is characterized by a mixing ratio C with respect to H_2 , which follows the diffusion equation

$$\partial_t C + V_R \partial_R C = \frac{1}{\Sigma R} \partial_R (R \Sigma \kappa \partial_R C), \quad (9)$$

where V_R is the radial velocity given by $V_R = -3/2(v/R)$, and κ is the turbulent diffusivity. The turbulent diffusivity represents the advection of matter by the small scales of turbulence and is related to the turbulent viscosity via the Prandtl number Pr by

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{\kappa} = \frac{\alpha c_s^2 \Omega^{-1}}{\kappa}. \quad (10)$$

The Prandtl number defined here presumably has a spatial dependence, as well as α . It cannot be calculated from a turbulent viscosity model. However, Dubrulle & Frisch (1991) have demonstrated that Pr cannot be higher than unity, in agreement with arguments developed by Prinn (1990). To simplify calculations, Drouart et al. (1999) have assumed values of Pr depending on the opacity of the considered region. In this work, we prefer to assume that Pr has no spatial dependence. We considered three values for the Prandtl number: $\text{Pr} = 1$, which results in the lower limit of the efficiency of the turbulent mixing, $\text{Pr} = 0.7$, and $\text{Pr} = 0.176$, which is the value derived from laboratory measurements of turbulent rotating flows by Lathrop, Fineberg, & Swinney (1992). The question of the choice of the value of Pr is discussed in § 6.2.

The deuterium enrichment factor is defined for H_2O by

$$f_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{[\text{HDO}]}{[\text{H}_2\text{O}]} \frac{[\text{H}_2]}{[\text{HD}]} \quad (11)$$

and for HCN by

$$f_{\text{HCN}} = 2 \frac{[\text{DCN}]}{[\text{HCN}]} \frac{[\text{H}_2]}{[\text{HD}]} \quad (12)$$

Using a chain rule to express f from equation (9) we get

$$\partial_t f + \left(V_R - 2\kappa \frac{\partial_R [\text{HD}]}{[\text{HD}]} \right) \partial_R f = \frac{1}{\Sigma R} \partial_R (R \Sigma \kappa \partial_R f). \quad (13)$$

Assuming $\partial_R [\text{HD}]/[\text{HD}] \simeq \partial_R \Sigma/\Sigma$, we get an equation that depends only on Σ , T , and P . This approximation is quite acceptable since the isotopic exchange does not deplete in practice $[\text{HD}]$, which is the main reservoir of deuterium in the nebula.

The term of isotopic exchange between HD and the considered deuterated species now has to be introduced. It is equal to (Lécluse & Robert 1994)

$$k(T)P[A(T) - f], \quad (14)$$

where $k(T)$ is the rate of isotopic exchange, P is the total pressure of gas, and $A(T)$ is the isotopic fractionation at the equilibrium. Lécluse & Robert (1994) have measured $k(T)$ in the laboratory for H_2O and CH_4 isotopic exchanges with hydrogen. This parameter drastically decreases with temperature. For instance, in the case of the HDO-H_2 exchange, $k(T)$ decreases by 5 orders of magnitude when the temperature varies from 1000 to 300 K. Since no experimental determination of $k(T)$ is available for the isotopic exchange of DCN with H_2 , we used that of CH_4 , with the expression revised by Lécluse et al. (1996). Mousis et al. (2000) have shown that a tenfold increase or decrease of $k(T)$ for the DCN- H_2 exchange does not significantly affect the fit of D/H in HCN in comet Hale-Bopp, considering the error bars. $A(T)$ is taken from the tabulations of Richet, Bottinga, & Javoy (1977) for both $\text{HDO/H}_2\text{O}$ and DCN/HCN and is extrapolated for temperatures lower than 273 K.

Adding equation (14) to equation (13), we get finally

$$\begin{aligned} \partial_t f + \left(V_R - 2\kappa \frac{\partial_R \Sigma}{\Sigma} \right) \partial_R f \\ = \frac{1}{\Sigma R} \partial_R (R \Sigma \kappa \partial_R f) + k(T)P[A(T) - f]. \end{aligned} \quad (15)$$

Note that the isotopic exchange is practically zero at high temperatures, when both $A(T)$ and f are close to 1. The same situation occurs at temperatures lower than 200 K, at which point $k(T)$ vanishes to zero. In these two cases, the evolution of f is governed entirely by the diffusion processes, which tend to reduce any radial gradient of D/H ratios. This behavior becomes more and more pronounced as the nebula evolves. On the other hand, the isotopic exchange is efficient only at intermediate temperatures and tends to create or enhance radial gradients.

Another point is that initial conditions on the D/H ratio also affect the evolution of $f(R, t)$. The diffusion equation is integrated with the following boundary conditions:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial R} \right) = 0 \quad (16)$$

both at $R = 0.01 \text{ AU}$ and R_D . As discussed in § 3.2, we adopt for the initial enrichment factor in deuterium the value of the highly D-enriched component of LL3 meteorites, namely,

$$f(R, t = 0) = 30. \quad (17)$$

Drouart et al. (1999) have shown that it is not possible to fit D/H enhancements if the initial fractionation is null [i.e., $f(R) = 1$].

Equation (15) is valid as long as the considered species are in the vapor phase. As soon as the species condenses, no isotopic exchange occurs between the vapor phase and the

solid phase. In other words, the value of the enrichment in microscopic ices is that obtained at the time and at the location where the vapor condenses. As long as these ices do not exceed a few centimeters in size, they are well mixed with the nebula gas and are transported with it throughout the turbulent nebula (Dubrulle, Morfill, & Sterzik 1995).

5. RESULTS

5.1. D/H in H₂O and HCN

As an example, Figure 8 shows $f_{\text{H}_2\text{O}}$ computed with the following model parameters: $\dot{M}(0) = 5 \times 10^{-6}$, $R_D = 17$ AU, $\alpha = 9 \times 10^{-3}$, and $\text{Pr} = 0.7$.

At heliocentric distances less than 3 AU, where the temperature of the nebula is higher than several hundred degrees during at least 100,000 yr, HDO exchanges rapidly in vapor phase with H₂ and reequilibrates with the protosolar value. However, after some time the isotopic exchange vanishes to zero when the temperature becomes lower than about 200 K. On the other hand, the enrichment in water of the inner region is mixed by turbulent diffusion with the enrichment in the outer region so that a plateau, with $f > 1$, is finally reached. The enrichment in water ice is indicated by dashed lines. As mentioned in § 4, no isotopic exchange of ice with hydrogen occurs. Microscopic icy grains are uniformly mixed with gas and the D/H ratio in ices keeps the value acquired at the moment and the location when and where H₂O condenses.

At high heliocentric distances, the behavior is similar except that the temperature range in which an efficient isotopic exchange occurs is much more limited in space and time. Moreover, the minimum heliocentric distance at which water condensation takes place (currently called "condensation radius of water") rapidly decreases with time; therefore, the isotopic exchange occurs closer and closer to the Sun.

The comparison of calculated D/H in ices with values observed in comets reveals important constraints; this is possible because the cometsimals that formed comets kept the D/H acquired in microscopic icy grains when they condensed. Under the assumption that the D/H ratio is homogeneous in the observed comets, the nebula model used to

obtain the results of Figure 8 implies that, in order to fit the upper limit of D/H ratios measured in comet Hale-Bopp, cometary grains of water could not have formed farther than 14 AU and earlier than $t = 10^5$ yr after the formation of the Sun. To fit the lower limit of cometary D/H ratios, they could not have formed farther than 6 AU and later than $t = 3 \times 10^5$ yr. Once formed, microscopic icy grains propagate outward together with the nebula gas, grow up, and can form cometsimals at various heliocentric distances in the turbulent nebula (see § 6.3).

Water ice condenses at 3 AU at $t \sim 10^6$ yr, with an f value consistent with the low D-enrichment analyzed in clays in LL3 meteorites. This suggests that water combined with minerals present in the low D-enriched sample in LL3 meteorites later than 10^6 yr, unless water has reacted in vapor phase with minerals.

Figure 9 shows $f_{\text{HCN}}(R, t)$ obtained with the same set of model parameters. In this case, we do not know a priori the initial enrichment; it will be evaluated in § 6.3. Enrichments shown in Figure 9 result from an initial enrichment of 120. Our model implies that all the HCN ices entering the turbulent part of the nebula vaporized for $t \leq 5 \times 10^4$ yr. An obvious difference with the behavior seen in Figure 8 is that D/H in HCN is much less reprocessed than D/H in H₂O, in agreement with the low value of the isotopic exchange rate between DCN and H₂ we have adopted in § 4. This results in a plateau value of $f \sim 90$ with respect to the protosolar value. HCN ices exhibiting a D/H ratio consistent with values measured in comet Hale-Bopp could not have condensed farther than $R = 24$ AU and earlier than 5×10^4 yr.

5.2. Selected Models of Nebula

We have carried out a large number of models by varying the initial accretion rate $\dot{M}(0)$ in the range 10^{-6} – $10^{-5} M_\odot \text{ yr}^{-1}$ (step $2 \times 10^{-6} M_\odot \text{ yr}^{-1}$), the initial radius R_D between 5 and 45 AU (step of 0.2 AU), and the α -coefficient from 0.001 to 0.06. Besides, we have considered $t_N = 250,000$ and 500,000 yr and two values of the Prandtl number, $\text{Pr} = 1$ and 0.7. About 200,000 models were investigated for each pair (t_N , Pr).

Models that did not satisfy the physical and chemical

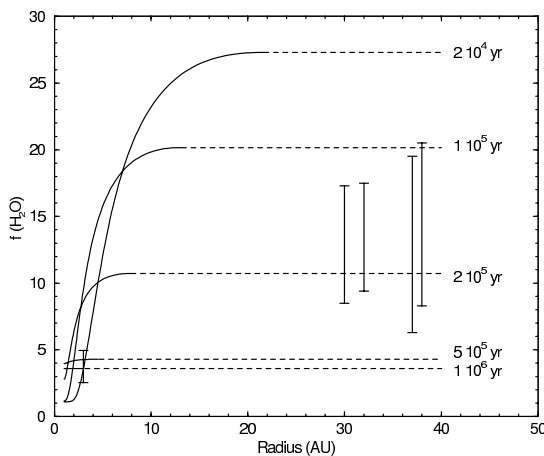


FIG. 8.—Deuterium enrichment in H₂O fit for $\alpha = 0.009$, $\dot{M}(0) = 5 \times 10^{-6} M_\odot \text{ yr}^{-1}$, and $R_D = 17$ AU.

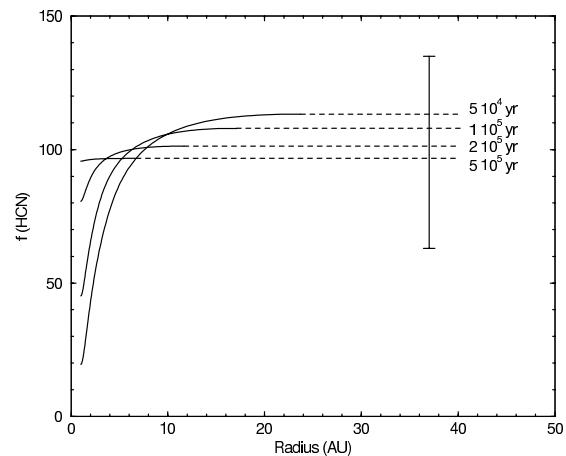


FIG. 9.—Deuterium enrichment in HCN fit for $\alpha = 0.009$, $\dot{M}(0) = 5 \times 10^{-6} M_\odot \text{ yr}^{-1}$, and $R_D = 17$ AU.

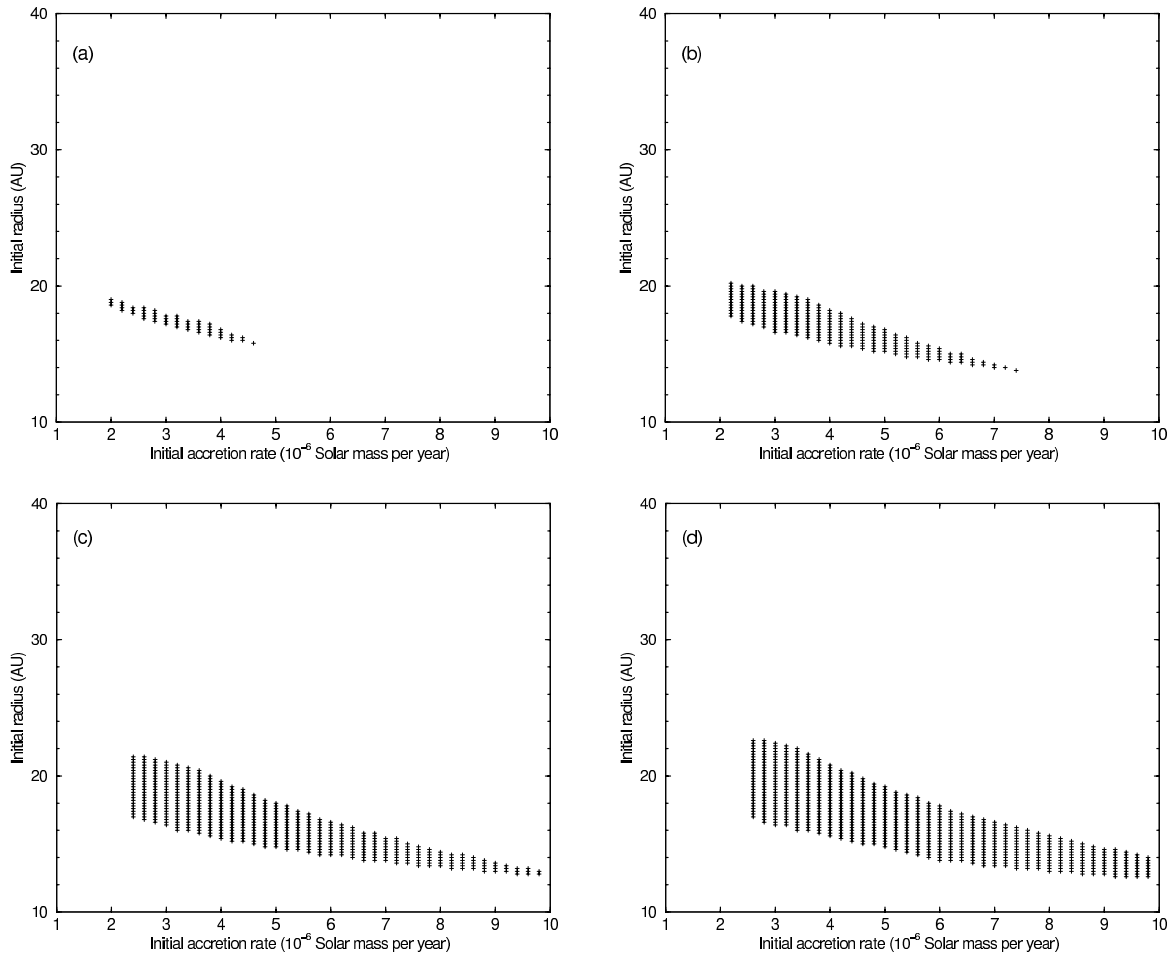


FIG. 10.—Variation of the initial radius of the selected nebulae as a function of their initial accretion rate for the following values of the α -coefficient of turbulent diffusion: (a) $\alpha = 0.006$, (b) $\alpha = 0.007$, (c) $\alpha = 0.008$, (d) $\alpha = 0.009$, (e) $\alpha = 0.01$, (f) $\alpha = 0.02$, (g) $\alpha = 0.03$, and (h) $\alpha = 0.04$. The selection of nebulae has been made for $\text{Pr} = 0.7$.

constraints indicated at the end of § 3 were rejected. The input parameters $[R_D(0), \dot{M}(0), \alpha]$ satisfying the required constraints are shown in Figures 10a–10h for the selected values of α : 0.006, 0.007, 0.008, 0.009, 0.01, 0.02, 0.03, and 0.04. Calculations shown on this figure were performed for $t_N = 250,000$ yr and $\text{Pr} = 0.7$.

It clearly appears that α must be between 0.006 and 0.04. The initial radius of the turbulent nebula must be between 12.8 and 39 AU. The initial accretion rates must be between 2.2×10^{-6} and $10^{-5} M_\odot \text{ yr}^{-1}$, this upper limit being reached only for $\alpha = 0.01$. These values are consistent with those derived by Stepinski (1998) for circumstellar disks. The agreement may be fortuitous, however, considering the difficulty of precisely inferring these data parameters from observations corresponding at various ages of the disks and the large spread obtained in such determinations.

The nominal model detailed in § 2.3 appears among the possible models of Figure 10, for $\alpha = 0.009$, $\dot{M} = 5 \times 10^{-6} M_\odot \text{ yr}^{-1}$ and $R_D = 17$ AU. The initial mass of the disk is $0.243 M_\odot$. For the purpose of modeling the chemistry of the

nebula, it is useful to define the “cold” and “warm” nebulae for the same t_N and Pr . For instance, these models provide upper and lower limits for the region and epoch where and when amorphous silicates are crystallized in the inner nebula (Bockelée-Morvan et al. 2001). The characteristics of the extreme nebulae compared with those of the nominal one are given in Table 2. Note that the three nebulae are initially rather massive. The warm nebula exhibits an initial mass of $0.29 M_\odot$, close to the maximum

TABLE 2
MAIN CHARACTERISTICS OF THE COLD, NOMINAL, AND WARM NEBULAE

Characteristic	Cold Nebula	Nominal Nebula	Warm Nebula
α	0.02	0.009	0.008
\dot{M}_0	4×10^{-6}	5×10^{-6}	9.8×10^{-6}
R_D (AU)	27	17	12.8
Initial mass	0.24	0.24	0.29

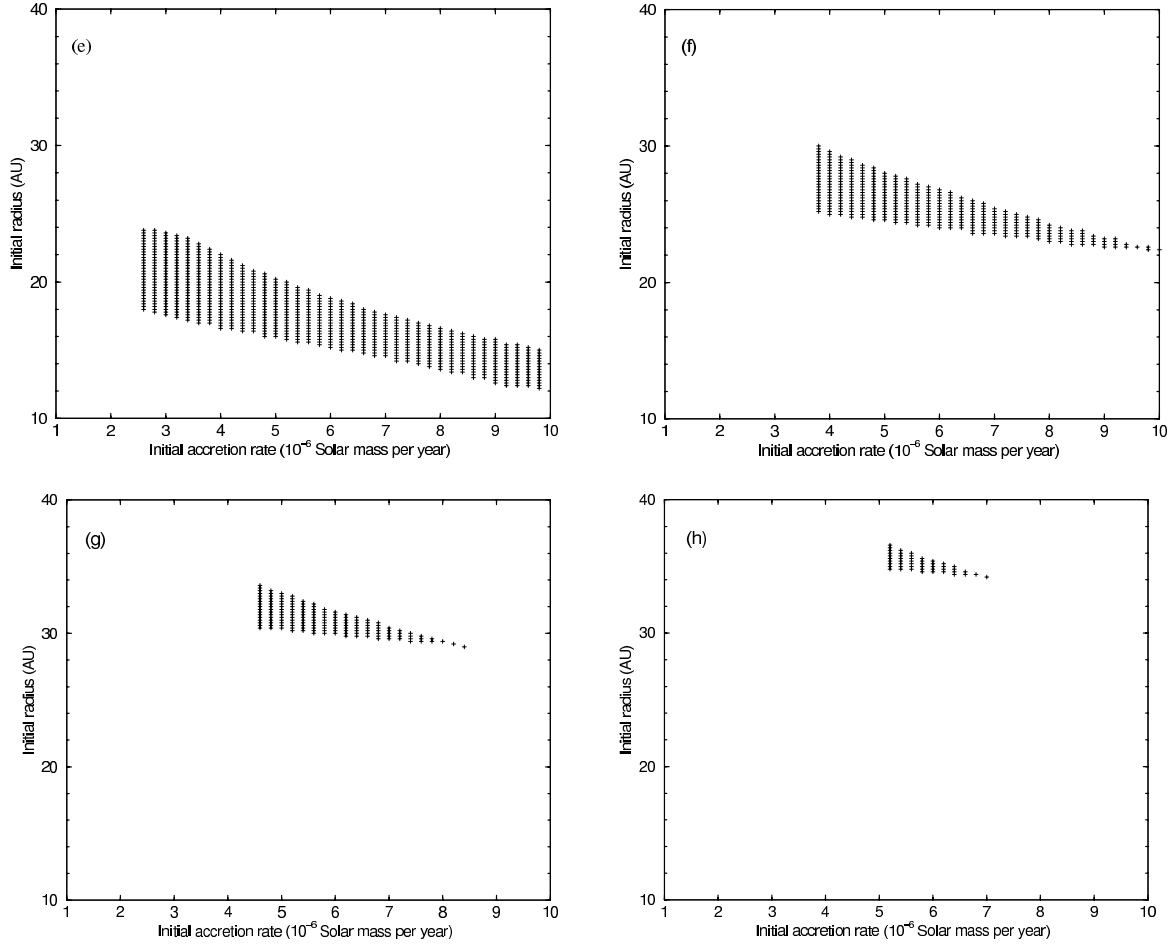


FIG. 10.—Continued

of $0.3 M_{\odot}$ permitted by the criterion of Shu et al. (1990). Note that the analysis of all selected nebulae indicates that the minimum mass required to fit D/H data is $0.15 M_{\odot}$. Consequently, the so-called minimum solar nebula with $M_{\text{disk}} \sim 0.01\text{--}0.03 M_{\odot}$ is unable to match deuterium observations because it is not massive enough.

6. DISCUSSIONS

6.1. Influence of t_N on the Selection of Models

So far, we have presented results corresponding to the case in which the angular momentum is transported outward to 30 AU in 250,000 yr. We have also considered the case in which the angular momentum was already transported outward to the Neptune region at $t = 0$, namely, for $t_N = 0$. In this case, only values of α in the range 0.02–0.04 are compatible with the observational constraints. Actually, lower values of α would imply a disk with a mass larger than the limit of $0.3 M_{\odot}$ (see § 3.1). The choice $t_N = 0$ thus appears too constrained to be wisely adopted. Interestingly enough, our selection of models is not different if we consider that Neptune was formed at 25 AU and subsequently

migrated to its current location at 30 AU (Malhotra, Duncan, & Levison 2000).

Models with $t_N = 500,000$ yr have also been considered. The results show that α must be between 0.005 and 0.04, the initial radius between 10 and 36.6 AU, and the initial accretion rate between 1.75×10^{-6} and $10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$. These estimates are not substantially different from the case in which $t_N = 250,000$ yr. It seems that the uncertainty on the velocity of the momentum transport does not significantly affect our results, except if the time of transport to Neptune is assumed to be quite small.

6.2. Influence of the Prandtl Number

The Prandtl number has a strong influence on the result of the integration of equation (15). Unfortunately, its value is uncertain. As previously mentioned, Pr cannot exceed unity (Dubrulle & Frisch 1991). We have used the same procedure for selecting models of nebula, assuming Pr = 1. The results are shown in Figure 11 where the resulting initial R_D is plotted as a function of the initial accretion rate: α must be between 0.005 and 0.007, the initial accretion rate between 1.8×10^{-6} and $2.6 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, and the initial radius R_D between 18.5 and 23 AU. The number

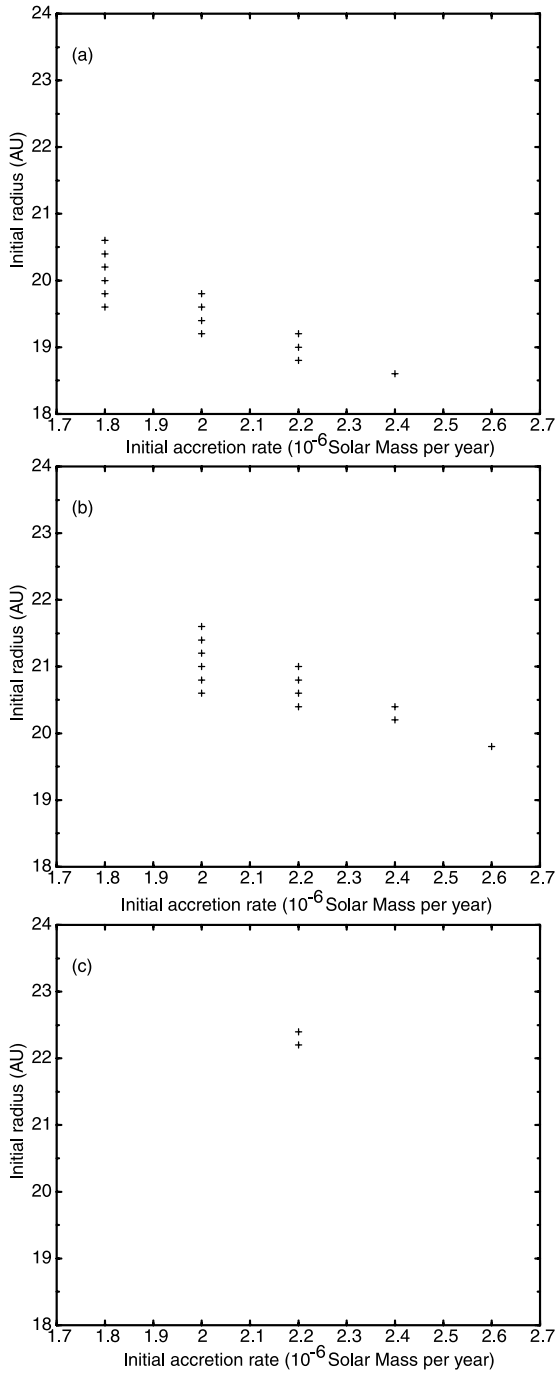


FIG. 11.—Variation of the initial radius of the selected nebulae as a function of their initial accretion rate for the following values of the α -coefficient of turbulent viscosity: (a) $\alpha = 0.005$, (b) $\alpha = 0.006$, (c) $\alpha = 0.007$. The selection of nebulae has been made for $\text{Pr} = 1$.

of possible models is much reduced compared with the case in which $\text{Pr} = 0.7$, and it would not be conservative enough to adopt this selection of models. On the other hand, adopting the value $\text{Pr} = 0.176$ measured in the laboratory by Lathrop et al. (1992) leads us to a conflict with our assumption of a geometrically thin disk model. Indeed, such a low Pr value implies very high accretion rates corresponding to geometrically thick disks. In fact, this experimental determination of Pr was made in the linearly unstable regime, namely, in the case in which the angular decreases outward, while in the nebula, it increases outward. Therefore, this Pr value is probably not applicable to the actual solar nebula.

6.3. Formation of Cometesimals in the Nebula

Using a one-dimensional model of the solar nebula, Mousis et al. (2000) determined a range of locations and epochs for the formation of cometesimals from observations. The measurements of D/H in both H_2O and HCN in comet Hale-Bopp has been used by Mousis et al. (2000) from a one-dimensional model for determining the location and the time of formation of cometesimals. Here, we follow their approach using our two-dimensional model.

Figure 12 shows the values of f_{HCN} and $f_{\text{H}_2\text{O}}$ at the heliocentric distances where HCN and H_2O respectively condensed. Calculations correspond to the nominal model and several initial HCN enrichments $f_{\text{HCN}}(R,0)$. Condensation isochrones correspond to each $f_{\text{HCN}}(R,0)$. Horizontal lines indicate the range of deuterium enrichments in HCN measured on comet Hale-Bopp. Vertical lines indicate the range of observed enrichments in water in the same comet. This procedure defines a rectangle containing acceptable values of $f_{\text{HCN}}(R,0)$. The initial deuterium enrichment in HCN then must have been between 70 and 160, which corresponds to D/H between 1.75×10^{-3} and 4×10^{-3} , in agreement with the values of the order of 3×10^{-3} found in hot cores (Schilke et al. 1992).

Interestingly enough, acceptable values of $f_{\text{HCN}}(R,0)$ are practically independent of the choice of the models selected in Figure 10. The inferred values for $f_{\text{HCN}}(R,0)$ are slightly lower than those derived by Mousis et al. (2000), which reflects the difference between their one-dimensional model and our two-dimensional model.

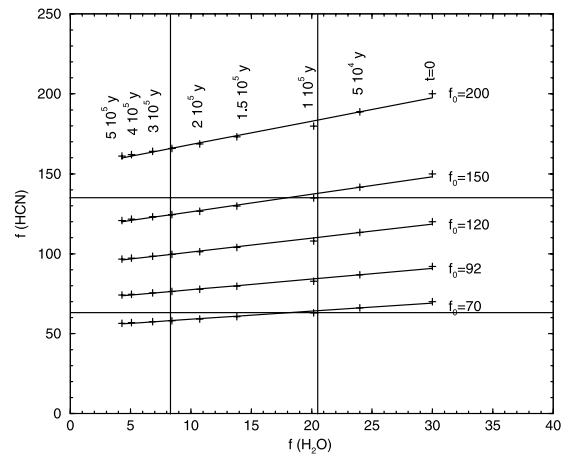


FIG. 12.— $f_{\text{H}_2\text{O}}$ with respect to f_{HCN} for $\alpha = 0.009$, $\dot{M} = 5 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, and $R_p(0) = 17 \text{ AU}$.

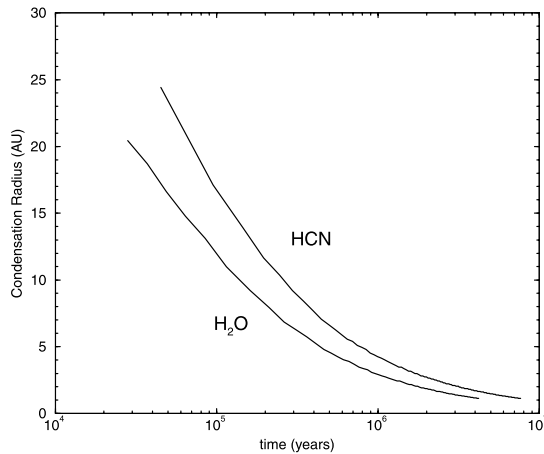


FIG. 13.—Condensation radius of H₂O and HCN with respect to time for $\alpha = 0.009$, $\dot{M} = 5 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, and $R_p(0) = 17 \text{ AU}$.

Figure 13 shows the radius of condensation of H₂O and HCN as a function of time for the nominal nebula. The range of epochs for which both the D/H ratio in both condensed H₂O and condensed HCN are consistent with comet Hale-Bopp observations are deduced from Figure 12. *Under the assumption that comets are homogeneous*, these times are 10^5 and 2.5×10^5 yr, respectively. From Figure 13, the corresponding radius of condensation for H₂O is located between 7 and 12 AU and that for HCN is between 10 and 17 AU. Ices of both species are very rapidly mixed in our selected nebulae in a time of a few ten thousand years (Bockelée-Morvan et al. 2001).

This analysis has been made for the whole set of selected models (for $t_N = 250,000$ yr and $\text{Pr} = 0.7$). We conclude that cometary icy grains of H₂O and HCN were formed between 18 AU at $t = 10,000$ yr and 7 AU at $t = 350,000$ yr, after the formation of the Sun. Grains moved outward with time together with gas in the expanding nebula.

Discussing the formation of comets from a swarm of microscopic particles is beyond the scope of this paper. Among an abundant literature on the question, Weidenschilling (1997) has calculated that the timescale for forming kilometer-sized comets from a uniform mixture of microscopic grains embedded in the nebula around 30 AU is less than 250,000 yr. However, he did not take into account turbulence in the disk. According to S. J. Weidenschilling (2000, private communication), introducing turbulence and continuous addition of icy grains for 350,000 yr would result in substantially longer formation times. As a result, comets could have incorporated icy grains with D/H ratios somewhat lower than the mean value presently observed. Cores of comets could be inhomogeneous and exhibit some variation in the deuterium enrichment. Present available measurements do not permit us to test this hypothesis.

We can, however, reasonably estimate that comets of the Oort cloud were formed during the first million years. The evolution of their radial repartition in the nebula during their formation is still uncertain (Stepinski & Valageas 1997). Our analysis seems at least not incompatible with the growing of the cometesimals in the Uranus-Neptune region.

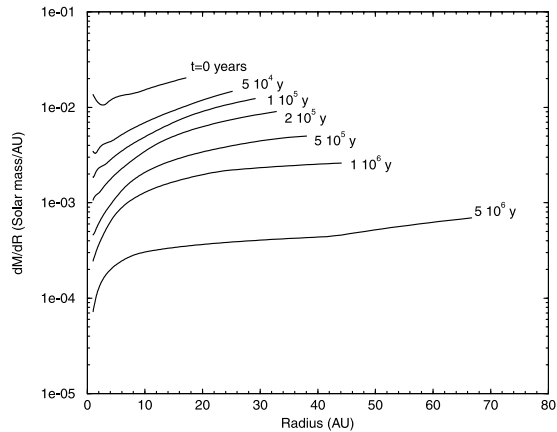


FIG. 14.—Mass of gas contained within 1 AU width rings for the nominal nebula ($\dot{M} = 5 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, $\alpha = 0.009$, and $R_p(0) = 17 \text{ AU}$), as a function of the heliocentric distance.

6.4. Implications on the Formation Time of the Giant Planets

6.4.1. Jupiter and Saturn

The nebula models we have calculated provide radial distributions of the gaseous mass throughout the nebula which evolve with time, as shown in Figure 14 for the nominal nebula. This figure clearly shows that most of the mass of nebula was in its outer part and, in fact, in the region where the giant planets are located today. This is because the surface density profile decreases with radius slower than $1/R$. However, the fact that Uranus and Neptune are much less massive than Jupiter and Saturn must be explained. The calculation of the temporal evolution of the mass permits us to evaluate the time of formation of giant planets based on the fact that all hydrogen currently present in these objects originated from the nebula.

This approach is based on current scenarios of the formation of giant planets (Pollack et al. 1996), which can be summarized as follows:

1. In phase 1, a core of the order of 10 Earth masses (EM) is accreted from a swarm of planetesimals in no more than 500,000 yr.

2. Phase 2 is characterized by a slow accretion of gas and planetesimals on the primary core from a region surrounding the planet and named the “feeding zone”: planetesimals are supposed to be uniformly mixed in the feeding zone $2R_{\text{FZ}}$, which has sizes of 1.23 to 1.42 AU and of 1.54 to 1.74 AU for Jupiter and Saturn, respectively (Pollack et al. 1996). Note that from numerical three-dimensional simulations, A. Coradini (2000, private communication) concludes to substantially larger feeding zones. The Hill radius is 0.335 AU for Jupiter and 0.435 AU for Saturn (Pollack et al. 1996). Phase 2 continues until a critical mass of the core is reached, for which the gas of the nebula contained in the feeding zone collapses onto the core. According to Pollack et al. (1996), phase 2 for Jupiter and Saturn could have lasted between 1 and 10 millions of years.

3. Phase 3 corresponds to the hydrodynamic collapse of the nebula gas onto the core of the planet, which drastically depletes the feeding zone. This process was not modeled by

Pollack et al. (1996). The temporal evolution of the accretion during phase 3 has been developed in depth during the last years at the University of Roma using a three-dimensional hydrodynamics code. Preliminary results have been published by Coradini et al. (1995) and Forni et al. (1998). The latter conclude that the gas of the nebula collapses onto the core of Jupiter and that of Saturn in 30,000 and 20,000 yr, respectively.

The collapse of hydrogen is quasi-instantaneous compared with the duration of phase 1 and phase 2. We can thus estimate the time when Jupiter and Saturn were completed by equating their present hydrogen mass to the mass of hydrogen in the feeding zone M_{FZ} , defined at time t by

$$M_{FZ} = \int_{R_{\text{planet}} - R_{FZ}}^{R_{\text{planet}} + R_{FZ}} 2\pi R \Sigma dR. \quad (18)$$

M_{FZ} is plotted as a function of time on Figure 15 for Jupiter at 5 AU from the nominal nebula model. The complex dynamic interactions the protoplanets might have experienced with the disk are not taken into account here. In other words, no migration is considered.

The mass of hydrogen in Jupiter indicated by the horizontal line is estimated from the models of interiors of the planet recently proposed by Guillot (1999). This author concludes that the total mass of heavy elements in the interior is between 11 and 42 EM, so that the mass of hydrogen is between 276 and 307 EM. From Figure 15, we can then derive that the formation of Jupiter was completed around 1.4×10^6 yr after the formation of the Sun.

Similarly, Figure 16 shows the variation of M_{FZ} in the feeding zone of Saturn. According to Guillot (1999), the mass of heavy elements in the interior of the planet is between 19 and 31 EM. The mass of hydrogen is then between 64 and 76 EM. Figure 16 implies that, for the nominal model of nebula, Saturn was formed 1.1×10^7 yr after the formation of the Sun.

However, these results are highly dependent upon the model of nebula. We have explored the whole domain of our selected models in the prospect to determine the lower and upper limits for the time of formations of Jupiter and Saturn. The sensitive parameter in this case is the term t_0 in

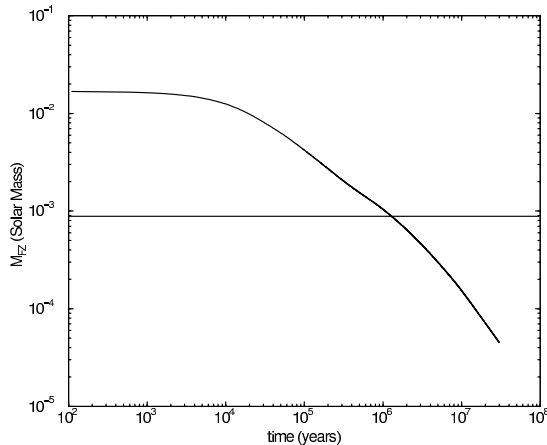


FIG. 15.—Total mass of gas present in the feeding zone of Jupiter, centered at 5 AU, as a function of time, for the nominal nebula. The current mean mass of Jupiter is ~ 291 EM (horizontal line; Guillot 1999).

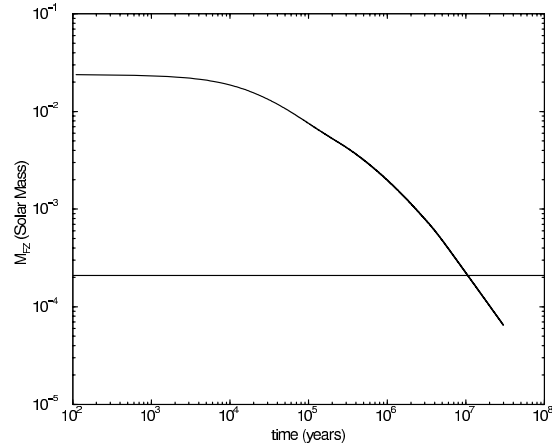


FIG. 16.—Same as Fig. 15, but for Saturn with gas mass ~ 70 EM at 10 AU.

equation (1) of Makalkin & Dorofeyeva (1991), which is the characteristic time for the evolution of the nebula. The extreme values of t_0 are given in Table 3, together with the parameters of the nebula and the time of planetary formation.

From Table 3, we conclude that the formation of Jupiter was completed between 7×10^5 and 2.8×10^6 yr after the formation of the Sun. On the other hand, Saturn ended its formation between 5.7×10^6 and 2.1×10^7 yr after the formation of the Sun. The upper limit for the time of formation of Saturn creates a problem, considering the fact that most of the circumstellar disks seem to not survive after 10 Myr (Calvet, Hartmann, & Strom 2000). Around 20 Myr, the nebula may have been already dissipated by solar winds and UV solar radiation. Note also that from their model, Pollack et al. (1996) evaluate this upper limit to 10 millions of years. However, for the moment, considering uncertainties on both observations and models, we cannot firmly rule out that Saturn was completed as late as 21 millions of years after the formation of the Sun.

6.4.2. The Case of Uranus and Neptune

It is not possible to derive the times of formation of

TABLE 3
MAIN CHARACTERISTICS OF THE NEBULAE WHICH FORM JUPITER AND SATURN AT EXTREMUM TIMES

Characteristic	Minimum Value	Nominal Value	Maximum Value
α	10^{-2}	9×10^{-3}	6×10^{-3}
$\dot{M}_0 (M_{\odot} \text{ yr}^{-1})$	9.8×10^{-6}	5×10^{-6}	2×10^{-6}
R_D (AU)	12.2	17	19
t_0 (yr)	12476	29853	76191
t_{jup} (yr)	7×10^5	1.3×10^6	2.8×10^6
t_{sat} (yr)	5.7×10^6	1.1×10^7	2.1×10^7
T_{jup} (K)	63	55	42
T_{sat} (K)	9	8	7

NOTE.—The values t_{jup} and t_{sat} are the times of the end of Jupiter and Saturn formation, respectively, while T_{jup} and T_{sat} are the corresponding temperatures in the nebula at these times.

Uranus and Neptune by using the same approach. Indeed, even assuming a lifetime of 30 Myr for the nebula, the gas contained in the feeding zones of Uranus and Neptune when $t = 30$ Myr exceeds by a substantial factor the amount of gas present in the interiors of these planets. Podolak et al. (2000) have recently estimated that the maximum gas content for Uranus is about 4.2 EM and about 3.2 EM for Neptune. Our calculations indicate that the gas in the feeding zones of the two planets are 5 and 10 times more abundant than in Uranus and Neptune, respectively.

This result implies that the two planets never reached phase 3 of the scenario of Pollack et al. (1996). The gas present in Uranus and Neptune today was acquired during phase 2 together with accreting planetesimals. Pollack et al. (1996) indicate that, assuming infalling planetesimals of 100 m radius, the current mass of Uranus is reached in 16 millions of years. This implies that the gas of the nebula was already dissipated at this age and rules out the maximum value for Saturn indicated in Table 3.

6.4.3. Composition of Planetesimals in the Feeding Zones of Jupiter and Saturn

It is well known that the outer envelopes of the four giant planets are enriched in carbon with respect to the solar abundance (Gautier & Owen 1989). This is currently considered as being caused by the infalling of planetesimals onto the forming planet, as detailed in the scenario of Pollack et al. (1996). The question, however, is whether carbon was trapped in the form of CO or CH₄ (or both) and in what amount other volatiles were trapped. The abundance ratios for volatiles have been estimated by assuming their trapping by amorphous ice as measured at low temperature in the laboratory (Owen & Bar-Nun 1995), or their trapping in the form of clathrate hydrates, as advocated by Lunine & Stevenson (1985).

The determination of the atmospheric composition of Jupiter by the *Galileo* probe has provided new observational constraints (Folkner, Woo, & Nandi 1998; Atreya et al. 1999; Owen et al. 1999). These authors show that Ar, Kr, Xe, C, N, and S abundances relative to hydrogen are enhanced by a factor of 2 to 4 with respect to the solar abundance. This enrichment is not consistent with the trapping of ices by amorphous ice, unless one considers unconventional scenarios for the formation of Jupiter. Our evolutionary model permits us to propose an interpretation of these enrichments based on the trapping of volatiles by clathrate hydrates.

The qualitative composition of planetesimals is governed by the temperature of the condensation of their components. Solid silicates are present very early in the history of the nebula. Water ices infalling from the presolar cloud onto the nebula discoid immediately vaporized in all our models at $R < R_D$ at $t = 0$. This is the case, for instance, of the nominal model outward to 17 AU (see Fig. 4). Subsequently, the nebula cools down and H₂O condenses around 150 K. In this case, water ices are inevitably crystallized (Kouchi et al. 1994; Mousis et al. 2000). Since the saturated vapor pressure decreases extremely rapidly with temperature, most of the available H₂O gas condensed in crystalline form well above 130 K. Once formed, the crystalline ice is never converted into the amorphous variety. At much lower temperatures, the remaining H₂O gas vapor could form amorphous ice (Bar-Nun et al. 1985; Kouchi et al.

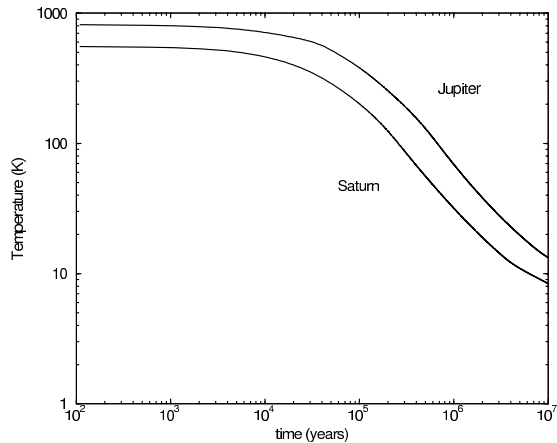


FIG. 17.—Temperatures of the nominal nebula at 5 AU (Jupiter) and 10 AU (Saturn) as a function of time.

1994) but in too small an amount to substantially trap volatiles in the way advocated by Bar-Nun et al. (1985), at least in the Jupiter-Uranus region.

Since volatiles were not trapped by amorphous ice in the feeding zones of Jupiter and Saturn, they are expected to have been trapped in the form of clathrate hydrates, as detailed below. In Figure 17, the temperature at 5 AU (Jupiter) and 10 AU (Saturn) is plotted as a function of time for the nominal model of nebula. The formation of icy grains in the feeding zone may be crudely estimated from the time when H₂O condenses, namely, at 3×10^5 yr for Jupiter and 1.3×10^5 yr for Saturn. Subsequently, icy grains grew, decoupled from gas, and produced planetesimals. The key point is that the mass of gas continuously decreases with time within the feeding zone while the mass of planetesimals tends to keep that acquired at their formation. Accordingly, the ratio of solid elements to gases continuously increases with time in this zone.

Figure 17 shows that the temperature in the feeding zones of both planets decreases rapidly and reaches values where clathrate hydrates can be formed and aggregated to planetesimals. If the time between the formation of planetesimals and the epoch of the hydrodynamic collapse of gas is substantial, planetesimals that fell onto the planet and vaporized in its envelope enriched the latter in volatiles. Temperatures in the feeding zones at the time of the collapse are given in Table 3 for the models of nebula we labeled minimum, nominal, and maximal. Let us consider, for instance, the nominal nebula, for which the collapse temperature is 55 K.

From the curves of stability of clathrate hydrates provided by O. Mousis (2000, private communication) from the analysis of Lunine & Stevenson (1985), we may evaluate, Table 4, for temperatures consistent with our model of nebula at 5 AU, the pressures at which the various volatiles are trapped in the form of hydrate NH₃ · H₂O, clathrate hydrates of type I: X · 5.75 H₂O, or clathrate hydrates of type II: X · 5.66 H₂O, where X is the guest molecule and the factors 5.75 and 5.66 indicate the number of water molecules per cage in the considered clathrate hydrate. The values for CO · 5.75 H₂O, identified at the laboratory by

TABLE 4
STABILITY OF CLATHRATE HYDRATES

Clathrate Hydrate	T (K)	P (bar)
$\text{H}_2\text{S} \cdot 5.75 \text{H}_2\text{O}$	112	1.16×10^{-7}
$\text{Xe} \cdot 5.75 \text{H}_2\text{O}$	106	1.09×10^{-7}
$\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	86.5	8.8×10^{-8}
$\text{CH}_4 \cdot 5.75 \text{H}_2\text{O}$	77.7	7.8×10^{-8}
$\text{Kr} \cdot 5.66 \text{H}_2\text{O}$	73.4	7.3×10^{-8}
$\text{CO} \cdot 5.75 \text{H}_2\text{O}$	59.4	5.75×10^{-8}
$\text{N}_2 \cdot 5.75 \text{H}_2\text{O}$	59.0	5.7×10^{-8}
$\text{Ar} \cdot 5.66 \text{H}_2\text{O}$	54	5.13×10^{-8}

NOTE.—The factors 5.75 and 5.66 are for the ratio of the number of water molecules to the number of cages of the clathrate for type I and type II, respectively.

Davidson et al. (1987), are from J. I. Lunine (2000, private communication).

Pressures indicated in the third column of Table 4 are the minimum values required for the stability of the considered clathrate hydrate at the temperature indicated in column 2. Alternatively, the temperature indicated in the second column is the maximum value for the stability of the clathrate at the pressure indicated in column 3. For example, $\text{CH}_4 \cdot 5.75 \text{H}_2\text{O}$ at $T = 77.7$ K is stable at pressures higher than 7.8×10^{-8} bar. Note that the curves of stability have been extrapolated down at temperatures lower than those of laboratory measurements, which may introduce some uncertainty on the calculation.

Comparing the numbers in Table 4 with the variation of temperature at 5 AU, Figure 17, and the temperature density profile of the nominal nebula, shown in Figure 18, it then appears that H_2S , Xe, NH_3 , and CH_4 should have been trapped in the form of hydrate or clathrate hydrates a long time before the collapse of the feeding zone: they were presumably incorporated in planetesimals infalling with gas onto the core of Jupiter during the hydrodynamic collapse.

On the other hand, N_2 and Ar were trapped only if the nebula was a little closer to the maximum model of Table 3. Another approach is to keep the same nebula but to

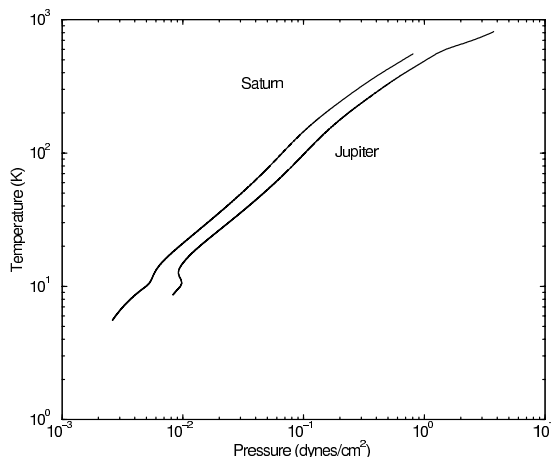


FIG. 18.—Temperature-pressure profiles of the feeding zones of Jupiter and Saturn.

increase the width of the feeding zone. Accordingly, the mass of hydrogen in the feeding zone is larger, so that the collapse occurs at a later epoch and thus at a lower temperature. Whatever the adopted assumption, CO, N_2 , and Ar were trapped at a time nearer the epoch of phase 3 than the three species mentioned above and must have been mixed mainly with hydrogen in the gaseous envelope of Jupiter. Altogether, and under the assumption that the curves of stability of clathrate hydrates are correctly extrapolated at low temperatures, this scenario provides a qualitative interpretation of the enrichment observed in Jupiter for the six elements previously mentioned (Ar, Kr, Xe, C, N, and S). We note, however, that the formation of clathrate hydrates of CO, N_2 , and Ar would not have occurred in models close to the minimal nebula of Table 3, unless we adopt unrealistic large feeding zones. In the framework of our scenario, this suggests that Jupiter was completed later than 1.3 Myr after the formation of the Sun.

Estimating the resulting abundances in the gaseous envelope of Jupiter requires additional modeling, which will be the subject of a forthcoming paper (Gautier et al. 2001).

The trapping of volatiles by clathrate hydrates would be even more efficient in the case of Saturn since the temperature of the feeding zone was much lower than that of Jupiter. As a matter of fact, the temperature was so low at the time of the collapse of hydrogen (see Table 3) that all gaseous molecules, except hydrogen and helium, condensed on the grains, so that volatiles were trapped, whatever the invoked mechanism. Thus, a substantial enrichment in heavy elements must have occurred in the gaseous envelope of the planet: the enrichment, however, is presumably higher by clathration than by condensation that occurred later in the feeding zone. The atmosphere of Saturn has effectively been found enriched in carbon, phosphorus, and possibly nitrogen (Gautier & Owen 1989). Recent ground-based microwave measurements indicate that the abundance of PH_3 is 10 times solar in the deep atmosphere of the planet (Orton, Serabyn, & Lee 2000). Theoretical calculations of dissociation pressures for the PH_3 clathrate have been made by Lunine & Stevenson (1985) on the basis of laboratory measurements and suggest that PH_3 could have been trapped by this mechanism in the feeding zone of Saturn a long time before the hydrodynamic collapse of the zone, which is consistent with the high observed enrichment.

The abundance of noble gases in Saturn will unfortunately not be determined until a probe descends into the atmosphere of the planet.

7. CONCLUSION

Measurements of the D/H ratio in LL3 meteorites and comets permit us to constrain the input parameters of the evolutionary two-dimensional model we have derived from that of Huré (2000). At the time $t = 0$ of our model, namely, when the Sun is almost complete, we find that the accretion rate was between 2.2×10^{-6} and $10^{-5} M_\odot \text{yr}^{-1}$ and the radius of the nebula was between 12.8 and 39 AU. The α -coefficient of turbulent viscosity was between 0.006 and 0.04.

These ranges are determined when assuming a value of the Prandtl number equal to 0.7 in the equation of diffusion that rules the evolution of the enrichment in deuterium in trace species throughout the nebula. The selection of nebula

models is rather sensitive to the adopted Prandtl number. We conclude from our analysis that the value $Pr = 1$ is unlikely, but we cannot test cases for Pr less than 0.7 since, as mentioned in § 6.2, we would have to assume that the disks are geometrically thick, which is in conflict with the basic assumption of our model. Laboratory measurements permitting an estimate of Pr in conditions applicable to the nebula would be very useful.

Under the assumption that cometary cores are homogeneous in deuterium composition, the model permits us to conclude that microscopic icy grains which subsequently formed cometsimals were produced in the Uranus-Neptune region and no later than 3.5×10^5 yr. This may provide a starting point for models of formation of cometsimals and planetesimals (see, for instance, Stepinski & Valageas 1997; Weidenschilling 1997; Supulver & Lin 2000).

Following Coradini et al. (1995), we assume that the amount of hydrogen present in the feeding zones of Jupiter and Saturn hydrodynamically collapsed onto the cores of the planets. This leads us to estimate that Jupiter and Saturn were formed between 0.7 and 2.8 Myr and 2.8 and 21 Myr, respectively. Note that the upper limit of 21 Myr is higher than current estimates of the lifetime of young stars' circumstellar disks. We emphasize that our estimate of the times of formation of Jupiter and Saturn depends on the size of the feeding zone. In this work, we have calculated this quantity from the formulas given by Pollack et al. (1996). Should the feeding zone be larger than our adopted value, as suggested by three-dimensional numerical calculations made at the University of Roma (A. Coradini 2000, private communication), the times of formation of the two planets would be increased.

This approach cannot be used for evaluating the time of

formation of Uranus and Neptune because the mass of hydrogen in these planets is so small that even at 30 Myr it is much less than the mass of gas in plausible feeding zones of both planets. Therefore, we must admit that Uranus and Neptune never reached the stage of hydrodynamic collapse, and we cannot estimate their time of formation. These planets presumably accreted their hydrogen along with planetesimals onto the forming core during phase 2 of the formation in the scenario of Pollack et al. (1996). According to these authors, the present mass of Uranus was reached in no more than 16 Myr, which then would be an upper limit for the lifetime of the gaseous nebula.

Finally, our evolutionary model permits us to propose a new scenario for the composition of icy planetesimals that enriched Jupiter with respect to the solar abundance. These objects, formed in the feeding zone of the planets, progressively incorporated volatiles, trapped in the form of clathrate hydrates, when the nebula was cooling down. We emphasize that most of water vapor present in the early nebula necessarily condensed in crystalline form (Mousis et al. 2000), which then permitted the formation of clathrate hydrates. Most of the planetesimals fell with the gas into the envelope of the planet when the hydrodynamic collapse occurred. The quantitative modeling of our scenario will be the subject of a forthcoming paper.

We thank D. Bockelée-Morvan and R. Courtin for stimulating discussions and the revision of the manuscript, A. Coradini for enlightening explanations on her theory for planet formation, O. Mousis for calculating the curves of stability of clathrate hydrates, J. Lunine for providing us with unpublished clathrate hydrate CO data, and D. Richard for precious comments on laboratory measurements of the Prandtl number.

REFERENCES

- Atreya, S. K., Wong, M. H., Owen, T. C., Mahaffy, P. R., Niemann, H. B., De Pater, I., Drossart, P., & Encrenaz, T. 1999, *Planet. Space Sci.*, 47, 1243
- Bar-Nun, A., Germann, G., Laufer, D., & Rappaport, M. L. 1985, *Icarus*, 63, 317
- Bell, K. R., Canen, P. M., Klahn, H. H., & Henning, Th. 1997, *ApJ*, 486, 372
- Bockelée-Morvan, D., Gautier, D., Huré, J.-M., Hersant, F., & Robert, F. 2001, *Icarus*, submitted
- Bockelée-Morvan, D., Gautier, D., Lis, D. C., Young, K., Keene, J., Phillips, T., Owen, T., Crovisier, J., Goldsmith, P. F., Bergin, E. A., Despois, D., & Wooten, A. 1998, *Icarus*, 133, 147
- Calvet, N., Hartmann, L., & Strom, S. T. 2000, in *Protostars and Planets IV*, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell (Tucson: Univ. of Arizona Press), 377
- Coradini, A., Federico, C., Forni, O., & Magni, G. 1995, *Survey in Geophysics*, 16, 533
- D'Alessio, P., Canto, G., Calvet, N., & Ligano, S. 1998, *ApJ*, 500, 411
- Davidson, D. W., Desando, M. A., Gough, S. R., Handa, Y. P., Ratcliffe, C. I., Ripmeester, J. A., & Tse, J. S. 1987, *Nature*, 328, 418
- Deloué, E., Doukhan, J.-C., & Robert, F. 1998, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 62, 3367
- Drouart, A., Dubrulle, B., Gautier, D., & Robert, F. 1999, *Icarus*, 140, 129
- Dubrulle, B. 1993, *Icarus*, 106, 59
- Dubrulle, B., & Frisch, U. 1991, *Phys. Rev. A*, 43, 5355
- Dubrulle, B., Morfill, G., & Sterzik, M. 1995, *Icarus*, 114, 237
- Folkner, W. M., Woo, R., & Nandi, S. 1998, *J. Geophys. Res.*, 103, 22847
- Forni, O., Federico, C., Coradini, A., & Magni, G. 1998, in *Solar System Ices*, ASSL Series 227 (Dordrecht: Kluwer), 367
- Gail, H.-P. 1998, *A&A*, 332, 1099
- Gautier, D., Hersant, F., Mousis, O., & Lunine, J. 2001, *ApJ*, 550, L227
- Gautier, D., & Owen, T. C. 1989, in *Origin and Evolution of Planetary and Satellite Atmospheres*, eds. S. K. Atreya, J. Pollack, & M. S. Matthews (Tucson: Univ. of Arizona Press), 487
- Geiss, J., & Gloecker, G. 1998, *Space Sci. Rev.*, 84, 239
- Guillot, T. 1999, *Planet. Space Sci.*, 47, 1183
- Hahn, J., & Malhotra, R. 1999, *AJ*, 117, 3041
- Huré, J.-M. 1998, *A&A*, 337, 625
- , 2000, *A&A*, 358, 378
- Huré, J.-M., & Galliano, F. 2000, *A&A*, 366, 359
- Kouchi, A., Yamamoto, T., Kozasa, T., Kuroda, T., & Greenberg, J. M. 1994, *A&A*, 290, 1009
- Lathrop, D. P., Fineberg, J., & Swinney, H. L. 1992, *Phys. Rev. A*, 46, 6390
- Lécluse, C., & Robert, F. 1994, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 58, 2297
- Lécluse, C., Robert, F., Gautier, D., & Guiraud, M. 1996, *Planet. Space Sci.*, 44, 1579
- Lellouch, E., Feuchtgruber, H., de Graauw, T., Encrenaz, T., Bézard, B., & Griffin, M. 1997, *A&A*, in press
- Lunine, J. I., & Stevenson, D. J. 1985, *ApJS*, 58, 493
- Mahaffy, P. R., Donahue, T. M., Atreya, S. K., Owen, T. C., & Niemann, H. B. 1998, *Space Sci. Rev.*, 84, 251
- Makalkin, A. B., & Dorofeyeva, V. A. 1991, *Izv. Earth Phys.*, 27, 650
- Malhotra, R., Duncan, M. J., & Levison, H. F. 2000, in *Protostars and Planets IV*, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell (Tucson: Univ. of Arizona Press), 1231
- Meier, R., et al. 1998, *Science*, 279, 1707
- Mousis, O., Gautier, D., Bockelée-Morvan, D., Robert, F., Dubrulle, B., & Drouart, A. 2000, *Icarus*, 148, 513
- Orton, G. S., Serabyn, E., & Lee, L. T. 2000, *Icarus*, 146, 48
- Owen, T., & Bar-Nun, A. 1995, *Icarus*, 116, 215
- Owen, T. C., Mahaffy, P., Niemann, H. B., Atreya, S., Donahue, T., Bar-Nun, A., De Pater, I. 1999, *Nature*, 402, 269
- Podolak, M., Podolak, J. I., & Marley, M. S. 2000, *Planet. Space Sci.*, 48, 143
- Podolak, M., Weizman, A., & Marley, M. 1995, *Planet. Space Sci.*, 43, 1517
- Pollack, J. B., Hubickyj, O., Bodenheimer, P., Lissauer, J. J., Podolak, M., & Greenzweig, Y. 1996, *Icarus*, 124, 62
- Pringle, J. E. 1981, *ARA&A*, 19, 137
- Prinn, R. G. 1990, *ApJ*, 348, 725
- Richtel, P., Bottinga, Y., & Javoy, M. 1977, *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, 5, 65
- Ruden, S. P., & Pollack, J. B. 1991, *ApJ*, 375, 740

Schilke, P., Wamsley, C. M., Pineau des Forêts, G., Roueff, E., Fower, D. R., & Guilloteau S. 1992, *A&A*, 256, 595
Shakura, N. I., & Sunyaev, R. A. 1973, *A&A*, 24, 337
Shu, F. H., Tremaine, S., Adams, F. C., & Ruden, S. P. 1990, *ApJ*, 358, 495
Stepinski, T. 1998, *ApJ*, 507, 361

Stepinski, T., & Valageas, P. 1997, *A&A*, 319, 1007
Supulver, K. D., & Lin D. N. C. 2000, *Icarus*, 146, 525
Teixeira, T. C., Devlin, J. P., Buch, V., & Emerson, J. P. 1999, *A&A*, 347, 19
Weidenschilling, S. J. 1997, *Icarus*, 127, 290

Annexe C

Turbulent radial mixing in the solar nebula as the source of crystalline silicates in comets

Reproduction d'un article publié en 2002 :
Astronomy & Astrophysics
volume 384
pages 1107-1118

Turbulent radial mixing in the solar nebula as the source of crystalline silicates in comets

D. Bockelée-Morvan¹, D. Gautier¹, F. Hersant¹, J.-M. Hure^{1,2}, and F. Robert³

¹ Observatoire de Paris, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon, France

² Université de Paris 7, 2 place Jussieu, 75251, Paris Cedex 05, France

³ Laboratoire de Minéralogie, Muséum d'Histoire Naturelle, 61 rue Buffon, 75005 Paris, France

Received 3 October 2001 / Accepted 9 January 2002

Abstract. There is much debate about the origin of crystalline silicates in comets. Silicates in the protosolar cloud were likely amorphous, however the temperature of the outer solar nebula was too cold to allow their formation in this region by thermal annealing or direct condensation. This paper investigates the formation of crystalline silicates in the inner hot regions of the solar nebula, and their diffusive transport out to the comet formation zone, using a turbulent evolutionary model of the solar nebula. The model uses time-dependent temperature and surface density profiles generated from the 2-D α -disk model of Hersant et al. (2001). It is shown that turbulent diffusion is an efficient process to carry crystalline silicates from inner to outer disk regions within timescales of a few 10^4 yr. The warmest solar nebula models which reproduce the D/H ratios measured in meteorites, comets, Uranus and Neptune (Hersant et al. 2001) provide a mass fraction of crystalline silicates in the Jupiter-Neptune region in agreement with that measured in comet Hale-Bopp.

Key words. solar system: formation – comets: general – comets: individual: C/1995 O1 (Hale-Bopp) – planetary systems: fonction – planetary systems: protoplanetary disks

1. Introduction

The origin of cometary silicates is controversial. Infrared spectra obtained from ground-based telescopes and the Infrared Space Observatory (ISO) have shown that Mg-rich olivines and pyroxenes are present in cometary grains in both amorphous and crystalline form (Hammer et al. 1994; Hayward et al. 2000; Crovisier et al. 1997, 2000; Wooden et al. 1999). Since the formation of crystalline silicates requires high temperatures, in contrast to the amorphous variety, the puzzling question is how comets could have incorporated both high- and low temperature materials, including ices.

Crystalline silicates are encountered in various environments. They are found in interplanetary dust particles (IDPs), sometimes coexisting with the amorphous form in the aggregate IDPs thought to be of cometary origin (Bradley et al. 1992, 1999). Silicates in chondritic meteorites, formed in the inner hot solar nebula, are entirely crystalline. Crystalline silicates have been detected in disks around pre-main-sequence Herbig Ae/Be stars (e.g., Malfait et al. 1998; Bouwman et al. 2001). These disks, surrounding intermediate-mass stars ($2\text{--}20 M_{\odot}$),

are believed to be similar to the primitive solar nebula from which the Solar System was formed. Crystalline silicates are also found in the debris disks present around young main sequence stars as, e.g., β -Pic (Knacke et al. 1993). On the other hand, there is no spectral evidence for their presence in the diffuse interstellar medium or molecular clouds, nor in young stellar objects (Demyk et al. 1999; Hammer et al. 1998). It is thus likely that the crystalline silicates present in cometary grains were produced during or after the collapse of the presolar cloud. Crystalline silicates can form at high temperature by direct condensation or thermal annealing of amorphous silicates. This latter process requires temperatures of at least 800 K (e.g., Gail 1998). The detection of silica SiO₂ in Herbig Ae/Be systems and comets is consistent with compositional changes associated to thermal annealing of amorphous grains (Bouwman et al. 2001).

We follow the current opinion that silicates infalling from the presolar cloud onto the nebula discoid were all amorphous. Chick & Cassen (1997) studied the thermal processing of silicates during the collapse of the presolar cloud in order to assess their survivability. Combining results of envelope radiative heating with heating in the accretion shock above the disk (Neufeld & Hollenback 1994), they show that grains of silicates infalling at distances

Send offprint requests to: D. Bockelée-Morvan,
 e-mail: dominique.bockelee@obspm.fr

larger than 1 AU from the Sun escaped vaporization. From the temperature radial profiles they compute, we can deduce that, during this stage, the formation of crystalline silicates by annealing of amorphous silicates was inefficient at distances greater than 2–3 AU.

Gail (1998) improved the analysis of the problem. Assuming that the nebula was already formed, he studied the fate of amorphous silicates radially infalling onto the Sun. Using a stationary model of the nebula, he showed that the annealing of amorphous silicates was inefficient at heliocentric distances greater than 1.5 AU. In other words, the temperature was too cold in the outer nebula where comets are currently supposed to have been formed, for the interstellar silicate grains to be thermally processed prior to their incorporation to comets. Therefore, either crystallization was initiated by a low temperature process, as proposed for disks around evolved stars (Molster et al. 1999), or there was a significant radial mixing between the warm and cold parts of the solar nebula. However, Gail (1998) did not take into account in his calculations any mixing process. More recently, Gail (2001) studied mixing by turbulent diffusion in a stationary Keplerian α -disk.

We investigate here the thermal annealing of amorphous silicates in the hot regions of the solar nebula and their diffusive transport out to the comet formation zone by using a turbulent evolutionary model of the nebula. In fact, large-scale radial mixing in the nebula has previously been shown to be a requisite in order to fit measurements of the D/H ratio in water in LL3 meteorites and Oort cloud comets (Drouart et al. 1999; Mousis et al. 2000). While these authors used a 1-D turbulent model, we take advantage here of the recent 2-D evolutionary model of Hersant et al. (2001) which provides an improved description of the nebula. The model generates time-dependent temperature, density, and pressure profiles throughout the nebula. Hersant et al. further studied the radial distribution and time evolution of the deuterium enrichment in water in the solar nebula due to isotopic exchange with H_2 (the main reservoir of deuterium) and diffusive turbulent transport. Using the D/H values measured in LL3 meteorites and Oort cloud comets, they constrained the parameters of the nebula, namely its initial accretion rate \dot{M}_0 , initial outer radius R_{D0} , and the coefficient of turbulent viscosity α (Shakura & Sunyaev 1973).

The goal of the present paper is to investigate whether the solar nebula models selected by Hersant et al. (2001), which fit the D/H ratio in comets, are also able to explain the amount of crystalline silicates detected in these objects. Section 2 summarizes observational constraints obtained on the nature of silicates in comets. The model is presented in Sect. 3 and the results are discussed in Sect. 4.

2. Cometary silicates

Measurements concerning cometary silicates are reviewed in detail by Hanner et al. (1997) and Hanner (1999). A summary is given here.

The nature of cometary silicates was mainly investigated from their Si-O stretching bands falling around $10 \mu\text{m}$. Low resolution 8–13 μm spectra have been acquired for a dozen comets (see Hanner et al. 1994; Hanner 1999 and references therein). Strong structured emission features were observed for half of them. The detection of a peak at 11.2–11.3 μm in 1P/Halley and some of the later observed comets pointed out the presence of Mg-rich crystalline olivines mixed with Fe-bearing amorphous olivines and pyroxenes (Hanner et al. 1994; Wooden et al. 1999).

Observations of comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) provided new insights on silicate mineralogy (Hanner et al. 1997; Hayward et al. 2000; Wooden et al. 1999; Crovisier et al. 1997, 2000). The 10- μm spectra exhibit several discrete peaks, which have been attributed to the presence of at least five different Mg-rich silicates in cometary dust: amorphous pyroxene, amorphous olivine, crystalline ortho-pyroxene, crystalline clino-pyroxene, and crystalline olivine (Wooden et al. 1999). ISO observations of the full 2–45 μm spectra of comet Hale-Bopp showed several broad emission features longward 16 μm , all attributed to bending mode vibrations of Mg-rich crystalline olivine (Crovisier et al. 1997, 2000; Brucato et al. 1999a; Colangeli et al. 1999).

All interpretations of Hale-Bopp spectra agree on the presence of olivines and pyroxenes in both amorphous and crystalline form. However, they differ quantitatively. A summary of inferred relative abundances is given in Table 1. The relative mass fraction of silicates in crystalline form inferred from Hale-Bopp spectra varies from 30 to 90%. Not included in Table 1 is the estimation made by Hayward et al. (2000) of 20% of crystalline silicates. As explained by Hanner (1999), it is difficult to determine accurately the relative abundances of minerals in cometary dust from their infrared spectra. With respect to other results, Wooden et al. (1999) suggest a much higher mass fraction of crystalline pyroxenes (Table 1). In contrast to other studies, they attribute the 9.3 μm peak to crystalline pyroxene. In order to reproduce the relative strength of this feature observed at various heliocentric distances with a similar relative mass fraction of crystalline pyroxenes with respect to the other dust components, they argue that crystalline pyroxenes must be cooler than other silicate components, hence the different result. As discussed by Wooden et al., this requires that pyroxene crystals are separate particles in the Hale-Bopp's coma. This doesn't fit with current views of cometary dust as porous aggregate particles mixing silicates and carbonaceous material, and might deserve further studies (see the discussion of Hayward et al. 2000).

10- μm spectra obtained in other long-period comets indicate a silicate mineralogy in these comets similar to that in comet Hale-Bopp (Wooden et al. 1999). However, significant spectral differences are seen between comets. Colangeli et al. (1995, 1996) attribute these differences to variations in the relative amounts of the various silicates or in the Mg/Fe ratio. Hayward et al. (2000) argue that they

Table 1. Relative mass fractions of silicates in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp).

Date	r_h [AU]	Cry Ol	Cry Pyr	Am Ol	Am Pyr	Cry Tot ^a	Reference
7 Oct. 1996	2.8	0.22	0.08	– ^b	0.72	0.30	Crovisier et al. (2000)
		0.50	– ^b	0.10	0.40	0.50	Colangeli et al. (1999) ^c
11 Apr. 1997	0.93	0.33	0.20	0.31	0.13	0.54	Wooden et al. (1999)
		0.08	0.80 ^d	0.08	0.03	0.88	Wooden et al. (1999) ^e
28 Dec. 1997	3.9	0.22	0.14	– ^b	0.64	0.56	Crovisier et al. (2000)

^a Relative mass fraction of silicates in crystalline form, to be directly compared to model calculations of C_c .

^b Silicate component not considered in the fit of the spectrum.

^c Spectral fit includes amorphous carbon. Silicate mass fractions have been here renormalized.

^d Sum of ortho- and clino-pyroxene contributions. Ortho-pyroxene contribution is dominant.

^e In contrast to other spectral analyses, crystalline pyroxenes are assumed to be cooler than other silicates.

might rather reflect variations in the dust size distribution and temperature.

Data on short-period comets, presumably formed in the Kuiper Belt, are very sparse. They usually exhibit weak and broad featureless 10 μm emission, presumably due to their deficiency in small particles (Hanner et al. 1994). However, crystalline olivines might be present in short-period comets as well, as suggested by the ISO spectrum of comet 103P/Hartley 2 which shows the presence of a peak at 11.3 μm (Crovisier et al. 1999, 2000).

3. Model

3.1. Outlines

The goal of our modelling is to investigate whether crystalline silicates formed in the inner warm regions of the solar nebula can be efficiently transported by turbulent diffusion to the outermost cold regions where comets presumably formed. This model treats both the amorphous-to-crystalline phase transition of small silicate particles and their diffusive transport throughout the nebula as a function of time.

We use a simplistic approach in which only two dust components are considered, regardless of their mineralogy: amorphous and crystalline silicates. The amorphous-to-crystalline transition by thermal heating can be treated thanks to recent laboratory measurements (Sect. 3.3).

The model solves time-dependent equations which describe the diffusive transport of small dust particles in a turbulent accretion disk (Morfill & Völk 1984). Defining ρ as the mass density of the disk (dominated by H_2 and He), and ρ_k as the mass density of dust particles of chemical index k , we have:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{v}\rho_k) = \text{div} \left[\kappa \rho \mathbf{grad} \left(\frac{\rho_k}{\rho} \right) \right] + Q_k \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{v}\rho) = 0. \quad (2)$$

The second term in the left part of Eqs. (1) and (2) is the advection term describing inward mass transport towards the central object at the velocity \mathbf{v} . We assume that the dust particles are well mixed with the gas

(Dubrulle et al. 1995), so that their radial velocity v_r is the same as that of the gas. In the case of a thin Keplerian disk, v_r is equal to $-3\nu_t/2r$, where ν_t is the turbulent viscosity and r is the radial distance. The effect of the turbulence in the solar nebula is to smooth out any concentration gradient. This diffusion is represented by the first term in the right part of Eq. (1): the turbulent diffusivity κ is set to the ratio of turbulent viscosity ν_t to the Prandtl number P_r . For reasons discussed in Hersant et al. (2001), P_r is taken equal to 0.7. Q_k is a source or sink term which describes local production and destruction processes. Equation (2) is the equation of continuity of the total mass flow.

Using Eqs. (1) and (2), it can be shown that, in the midplane of the disk, the relative concentration $C_k = \rho_k/\rho$ follows the diffusion equation:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + v_r \frac{\partial C_k}{\partial r} = \frac{1}{\Sigma r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Sigma \kappa \frac{\partial C_k}{\partial r} \right) + \frac{Q_k}{\rho}, \quad (3)$$

where Σ is the surface density of the disk.

The annealing process of amorphous silicates and the diffusive transport of crystalline silicates in the outer regions of the solar nebula can be investigated by solving two diffusion equations which are coupled by source and sink terms:

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} + v_r \frac{\partial C_a}{\partial r} = \frac{1}{\Sigma r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Sigma \kappa \frac{\partial C_a}{\partial r} \right) - \frac{Q}{\rho}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_c}{\partial t} + v_r \frac{\partial C_c}{\partial r} = \frac{1}{\Sigma r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Sigma \kappa \frac{\partial C_c}{\partial r} \right) + \frac{Q}{\rho}. \quad (5)$$

The indices “a” and “c” refer to amorphous and crystalline silicates, respectively, and Q is the coupling term representing the annealing process. If t_{ann} is the characteristic timescale for annealing (Sect. 3.3), then $Q = C_a \rho / t_{\text{ann}}$ and we have:

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} + v_r \frac{\partial C_a}{\partial r} = \frac{1}{\Sigma r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Sigma \kappa \frac{\partial C_a}{\partial r} \right) - \frac{C_a}{t_{\text{ann}}}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial C_c}{\partial t} + v_r \frac{\partial C_c}{\partial r} = \frac{1}{\Sigma r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Sigma \kappa \frac{\partial C_c}{\partial r} \right) + \frac{C_a}{t_{\text{ann}}}. \quad (7)$$

Equations (6) and (7) do not include sublimation and condensation terms. Sublimation is taken into account in

the boundary conditions by setting $C_a = C_c = 0$ at the distance r where the temperature of the nebula is high enough to allow efficient sublimation (Sects. 3.2 and 3.3). We do not consider the re-formation of silicates which subsequently occurs as the hot gas is cooling down (see the discussion in Sect. 4).

Solving Eqs. (6) and (7) requires an evolutionary solar nebula model giving surface density and temperature radial profiles in the midplane of the disk as a function of time.

3.2. Solar nebula model

We sum up here the solar nebula model that we use, and which is described in length by Hersant et al. (2001). The temporal evolution of the solar nebula is modelled by a sequence of stationary solutions provided by the 2-D accretion disk model of Huré (2000), where the vertical stratification of the physical quantities is explicitly calculated. In a 2-D model, the midplane temperature, pressure, and volumetric density are generally slightly higher than in a 1-D model where a vertically homogeneous disk is assumed (Huré & Galliano 2001). This model uses the well known α prescription of Shakura & Sunyaev (1973), which permits modellers to parameterize the effects of small scale turbulence. The prescription consists of writing the turbulent viscosity as $\nu_t = \alpha C_s^2 / \Omega$, where C_s is the sound velocity and Ω is the Keplerian angular velocity. α is a non-dimensional parameter whose value depends on the nature of the turbulence and is usually taken, for simplicity, as constant with respect to the heliocentric distance in the disk and time.

The 2-D model is calculated for a given accretion rate \dot{M} which governs the inflow of matter from the disk onto the proto-Sun. As the disk evolves and cools down, the turbulence is less and less efficient, and this accretion rate \dot{M} diminishes. The evolutionary model begins when the formation of the Sun is almost complete. The subsequent evolution of the nebula is obtained by calculating 2-D models for a temporal sequence of accretion rates following the prescription of Makalkin & Dorofeyeva (1991). These authors have shown that the evolution of \dot{M} as a function of time can be described by a simple power law which depends upon the accretion rate and the outer radius of the nebula R_{D0} at $t = 0$ according to:

$$\dot{M}(t) = \dot{M}_0 (1 + t/t_0)^{-1.5}, \quad (8)$$

with

$$t_0 = \frac{R_{D0}^2}{3\nu_t(R_{D0})}, \quad (9)$$

where $\nu_t(R_{D0})$ is the coefficient for turbulent viscosity at the initial outer radius of the nebula. Such evolution agrees with the numerical evolutionary models of Ruden & Lin (1986) or Ruden & Pollack (1991). It is also consistent with the decrease of the mass accretion rate with increasing age observed in T Tauri stars (Hartmann et al. 1998).

Table 2. Solar nebula models.

Type	α	\dot{M}_0 [$M_\odot \text{yr}^{-1}$]	R_{D0} [AU]
cold	2×10^{-2}	4.0×10^{-6}	27.0
nominal	9×10^{-3}	5.0×10^{-6}	17.0
warm	8×10^{-3}	9.8×10^{-6}	12.8

The model takes also into account that, under the action of turbulence, the nebula spreads out viscously with time. It is assumed that the evolution of its outer radius R_D follows:

$$\frac{dR_D}{dt} = \frac{3}{2} \frac{\nu_t}{R_D}. \quad (10)$$

The model input parameters are finally the initial radius R_{D0} and accretion rate \dot{M}_0 of the nebula, and α .

With this solar nebula model, Hersant et al. studied the radial distribution and time evolution of the deuterium enrichment in water in the solar nebula due to isotopic exchange with H_2 and diffusive turbulent transport. Assuming that the highly D-enriched component measured in LL3 meteorites ($\text{D}/\text{H} = (73 \pm 12) \times 10^{-5}$) is representative of the grains in the presolar cloud (Drouart et al. 1999; Mousis et al. 2000), Hersant et al. were able to explain the D/H value of $\sim 30 \times 10^{-5}$ measured in cometary water as due to some mixing between water vapor reprocessed in the inner regions of the solar nebula by isotopic exchange with H_2 , and the unprocessed component of its outer regions. Hersant et al. (2001) showed that the three parameters defining the nebula can be constrained by the deuterium enrichments measured in LL3 meteorites, comets, proto-Uranian and proto-Neptunian ices, taking into account a few other physical constraints, namely: 1) the mass of the nebula cannot exceed $0.3 M_\odot$ in order to maintain the stability of the disk (Shu et al. 1990); 2) the angular momentum must have been transported outward to Neptune by turbulence in 2.5×10^5 yr; 3) the initial temperature of the nebula was higher than 1000 K inside 3 AU to secure the crystallization of silicates in the inner regions.

Hersant et al. concluded that \dot{M}_0 was in between 2.2×10^{-6} and $10^{-5} M_\odot \text{yr}^{-1}$, R_{D0} between 12.8 and 39 AU, and α between 0.006 and 0.02. For the purpose of this paper in which the temperature of the nebula is crucial for determining where and when the conversion of amorphous silicates into the crystalline variety occurred, they selected among all nebulae fitting observational constraints one of the coldest and one of the hottest nebulae, named cold nebula and warm nebula, respectively. Their parameters are given in Table 2. They also selected a nebula intermediate between the cold and warm nebulae, called nominal nebula (Table 2). Radial profiles of Σ and T as a function of time are shown in Fig. 1 for these three nebulae. Adiabats (P, T) of the nominal solar nebula at various epochs are shown in Fig. 2.

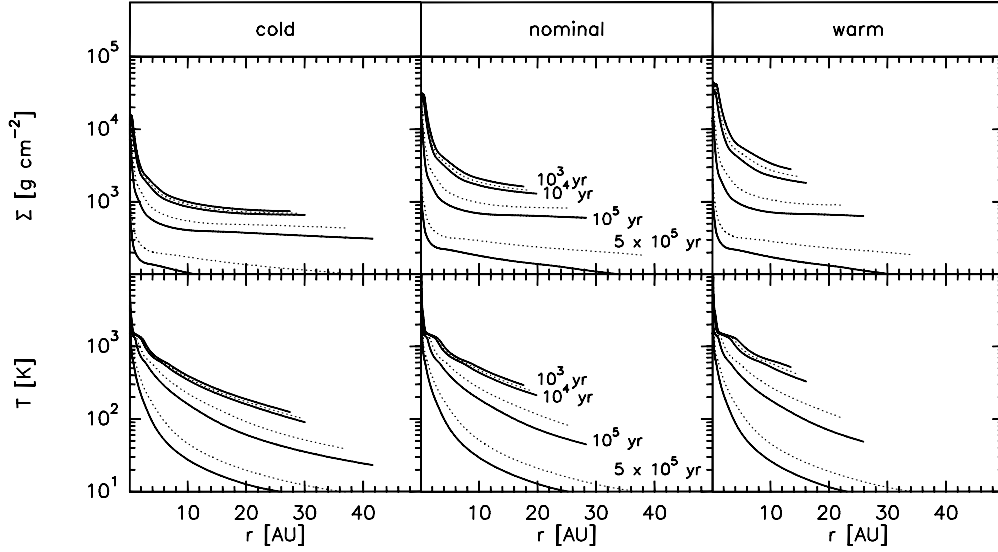


Fig. 1. Surface density (Σ) and temperature (T) radial profiles as a function of time for the three nebulae defined in Table 2. Plain lines are for times 10^3 , 10^4 , 10^5 , and 10^6 years. Dotted lines are for times 5×10^3 , 5×10^4 , and 5×10^5 years.

3.3. Silicates crystallization and sublimation

Solving Eqs. (6) and (7) requires, in addition to a solar nebula model, data on silicates crystallization and sublimation.

The thermally induced amorphous-to-crystalline transition has been studied both theoretically (see Gail 1998 and references therein) and in the laboratory (e.g. Ashworth et al. 1984; Nuth & Donn 1982; Hallenbeck et al. 1998; Brucato et al. 1999b; Fabian et al. 2000). The crystallization process corresponds, on a microscopic scale, to the movement of oxygen and silicon atoms to new locations characterized by deeper local energy minima. The characteristic timescale for the amorphous-to-crystalline transition can be expressed as:

$$t_{\text{am}} = \nu^{-1} e^{E_a/kT}, \quad (11)$$

where ν is a characteristic vibrational frequency and E_a acts as an activation energy (Lenzuni et al. 1995). In experimental determinations of E_a , ν is set to $2\text{--}2.5 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, the average value between the frequencies of the stretching and bending modes of the SiO_4 tetrahedron (Lenzuni et al. 1995; Gail 1998). From thermal annealing experiments made at ~ 1100 and 1300 K on ~ 20 -nm sized smoke particles, Brucato et al. (1999b) estimated an activation temperature E_a/k of 47500 K for amorphous Mg-rich pyroxenes (hereafter referred to as MgSiO₃, enstatite). Brucato et al. (1999b) derived a temperature of 45500 K from the annealing experiment of Hallenbeck et al. (1998). Experiments made at 1000 K by Fabian et al. (2000) on nanometre-sized smoke particles of Mg-rich pyroxene and Mg-rich olivine (Mg₂SiO₄, forsterite) give activation temperatures of 42040 and

39100 K, respectively. The difference in the measured activation energies for Mg-rich pyroxene between Brucato et al. (1999b) and Fabian et al. (2000) comes from a different definition of the annealing time. Both studies monitored the evolution of IR spectra of silicates undergoing annealing. While Fabian et al. define the annealing time as the time when the first crystalline IR features appear, Brucato et al. define it as the time when crystalline IR features no longer evolve. Between these two stages, Hallenbeck et al. (1998) observed a stall phase in the spectra before the features sharpened due to the crystal becoming more ordered.

Experiments revealed a significant distinction in the amorphous-to-crystalline transition between micrometre-sized glass and smoke particles (Fabian et al. 2000). This is something interesting to consider, especially given the large size of interstellar dust (typically $\sim 0.1 \mu\text{m}$) compared to that of the laboratory smokes. First, the timescale at 1000 K for crystallization of MgSiO₃ glass particles exceeds that of MgSiO₃ smoke particles. In addition, the activation temperature determined for these micrometre particles with $\nu = 2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ decreases with increasing annealing temperature (Fabian et al. 2000). We performed a least-square fit to the annealing times measured for temperatures between 1030 K and 1121 K (median values of Table 3 in Fabian et al. 2000), which shows that the measurements can be fitted by an exponential law (Eq. (11)) with $\nu = 4.7 \times 10^{24} \text{ s}^{-1}$ and $E_a/k = 70060$ K (note that the uncertainties on ν and E_a/k are large: respectively at least ± 2 orders of magnitude and ± 5000 K, taking the range of estimated annealing times as the uncertainty on the measurements). Although this law may not apply over a large temperature range, it permits us

Table 3. Laws for annealing timescales.

Law ^a	Compound	ν [s ⁻¹]	E_a/k [K]	t_{ann} 1000 K [s]
(1)	Mg ₂ SiO ₄ smoke	2×10^{13}	39 100	4.8×10^4
(2)	MgSiO ₃ smoke	2×10^{13}	42 040	9.1×10^4
(3)	MgSiO ₃ smoke	2.5×10^{13}	47 500	1.7×10^7
(4)	MgSiO ₃ glass	5×10^{24}	70 000	5.0×10^5
(5)	MgSiO ₃ glass	2.5×10^{26}	70 000	1.0×10^4

^a Timescale laws for crystallization parameterized by ν and E_a/k : (1) Mg₂SiO₄ smoke, Fabian et al. (2000); (2) MgSiO₃ smoke, Fabian et al. (2000); (3) MgSiO₃ smoke, Brucato et al. (1999b); (4) MgSiO₃ glass, Fabian et al. (2000), see text; (5) MgSiO₃, 0.1 μm glass, see text.

to investigate larger timescales for crystallization with respect to those derived for nanometre smoke particles.

Table 3 gives the laws for t_{ann} considered in this paper and t_{ann} values at $T = 1000$ K. The laws (1) to (3) come from the mentioned experiments on smoke particles. Law numbered (4) is that derived in the paragraph above, from measurements on micrometre grains. The law numbered (5) ($\nu = 2.5 \times 10^{26} \text{ s}^{-1}$ and $E_a/k = 70\,000$ K) is possibly more appropriate for 0.1 μm sized particles. It was derived from law (4), assuming the linear grain size dependence suggested by annealing experiments made on silicate glassy sheets (Fabian et al. 2000).

The annealing timescales we use are those determined for nearly pure magnesium silicates. It can be objected that these measurements are not fully appropriate for our purpose, since amorphous silicates in the protosolar cloud contained some iron. Demyk et al. (1999) studied the infrared signatures of the silicates around two massive protostellar objects and showed that they can be well reproduced with Mg-Fe pyroxenes amorphous grains with a Fe/Mg ratio of about 0.5. It would be thus interesting to use annealing timescales characteristic of such compounds. Annealing experiments have been made for pure iron-silicate and magnesium-iron silicates (Hallenbeck et al. 1998), but the activation temperatures required for our model are not available. Hallenbeck et al. (1998) found that annealing timescales are much larger for iron silicates than for magnesium silicates. On the other hand, the evolution of mixed magnesium-iron silicates resembles that of magnesium silicate samples (Hallenbeck et al. 1998).

The stability of Mg-rich silicates against vaporization has been studied by Duschl et al. (1996). It is shown that silicates decompose in a near equilibrium process with the gas phase and gradually disappear over a finite temperature interval of ~ 300 K. We have considered the (P_{sat}, T) equilibrium curve with $f = 0.9$ given in Fig. 4 of this paper, which corresponds to the situation where a fraction $f = 0.9$ of the Si is still bound into grains. This curve is plotted in Fig. 2 over the (P, T) adiabat of the solar nebula. The last grains disappear at a temperature ~ 100 K higher (Duschl et al. 1996). Taking the (P_{sat}, T)

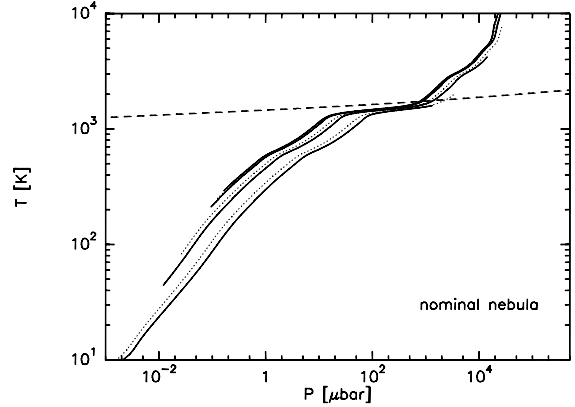


Fig. 2. Adiabats (P, T) of the nominal nebula as a function of time. Curves from top to bottom correspond to increasing times. Plain lines are for times 10^3 , 10^4 , 10^5 , and 10^6 years. Dotted lines are for times 5×10^3 , 5×10^4 , and 5×10^5 years. The dashed line shows the equilibrium curve against vaporization of silicates taken from Duschl et al. (1996). This equilibrium curve intersects the nebula adiabat at $r \sim 0.7, 0.6, 0.4, 0.3$, and 0.1 AU for times of 10^3 , 10^4 , 5×10^4 , 10^5 , and 5×10^5 years, respectively.

equilibrium curve with $f = 0$ that corresponds to the full disappearance of silicate grains would not change significantly our results, keeping in mind that sublimation curves depend somewhat on the silicate composition.

3.4. Integration of the diffusion equations and boundary conditions

Numerical integration of the coupled partial differential Eqs. (6) and (7) requires initial conditions and boundary conditions at the inner r_0 and outer R_D radii at any time. This is a classical *initial value* problem which can be solved by finite differencing, given a r -grid and time step.

Equations (6) and (7) mix advective and diffusion terms, each of them requiring a specific differencing scheme to avoid numerical dissipation and stability problems. Therefore, we used the “operator splitting” method and computed separately, and successively within one time step, the time evolution of C_a and C_c due to the advective and diffusion terms. The time evolutions resulting from the chemical and diffusion terms were treated together.

For the transport term, we used the explicit spatial differencing scheme suggested by Hawley et al. (1984) (Sect. II.c.ii) which mixes the second-order (in space) averaging scheme of Wilson (1978) and the first-order upwind scheme. For treating the diffusion, we used the Crank-Nicholson differencing scheme which is second-order in both space and time (see Drouart et al. 1999).

The r -grid has been defined between $r_0 = 0.1$ AU and R_D with logarithmic steps such that $r_{i+1} = r_i \times 1.03$. The time step has been set to $\min[t_{\text{ann}}(r_0)/100, 50 \text{ yr}]$.

For minimizing the computer time, t_{ann} values less than 50 yr (5 yr for the cold nebula) were set to 50 yr (5 yr for the cold nebula).

As initial condition, we took $C_a = Ct$ and $C_c = 0$ at any r , where Ct is a constant setting the relative mass concentration of silicates with respect to H_2 . Since Eqs. (6) and (7) are linear in Ct and we are interested in the relative fraction of crystalline versus amorphous silicates, we took $Ct = 1$. C_a and C_c then provides directly the relative mass fractions of amorphous and crystalline silicates, respectively. With this initial condition, we assume that the silicates are only in amorphous form throughout the nebula at $t = 0$. Due to hot temperatures at small r , the initial concentrations are in fact determined by the thermal radial profile of the nebula at $t = 0$. Figure 3 shows that silicates are essentially amorphous at distances larger than 10 AU for the considered nebulae. These initial conditions are valid, providing that the grains outside 10 AU were not thermally processed in the preceding stages of solar nebula formation and evolution. As discussed in Sects. 1 and 4.1, silicates suffered little processing during the collapse phase (Chick & Cassen 1997).

The boundary spatial condition $\frac{\partial C_{a(c)}}{\partial r} = 0$ was taken at $r = R_D$. This implies that we neglect radial influx of material from the outside. When the sublimation boundary r_{sub} extends farther than $r_0 = 0.1$ AU, the inner spatial boundary condition is $C_a = C_c = 0$ at $r \leq r_{\text{sub}}$. When this is not the case (for the considered nebulae, this happens only at $t > 5 \times 10^5$ yr, Fig. 3), we assumed, for simplicity, $\frac{\partial C_{a(c)}}{\partial r} = 0$.

4. Results and discussion

The temporal and radial evolution of the relative mass fraction of crystalline silicates C_c is shown in Fig. 3, for the three considered nebulae. In Fig. 4 is plotted the mass fraction of crystalline silicates integrated over the whole nebula C_c^{int} as a function of time:

$$C_c^{\text{int}} = \frac{\int_{r_0}^{R_D} 2\pi r C_c \Sigma dr}{\int_{r_0}^{R_D} 2\pi r \Sigma dr}. \quad (12)$$

The calculations shown in Figs. 3–4 refer to the annealing timescales t_{ann} computed with the law (1) at the top of Table 3, namely $\nu = 2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ and $E_a/k = 39100 \text{ K}$ (Fabian et al. 2000). The calculations made with the other laws given in Table 3 provide qualitatively the same results.

At time slightly above 0 yr, silicate grains are vaporized or are in crystalline form within some distance which depends on the initial thermal structure of the nebula. This distance, that we call the crystalline front, is ~ 5 to 7 AU for the considered nebulae. As time goes on, amorphous silicates, present in the outer regions, are transported towards the inner regions by advection and turbulent diffusion, and then thermally annealed. This radial inward flux of amorphous material inside the region where crystallization takes place balances the loss

of crystalline silicates by advective transport within the evaporation zone. As shown in Fig. 4, the integrated mass fraction of crystalline silicates is maintained to a value that slightly exceeds the value acquired at $t \approx 0$ up to times $\sim 2 \times 10^4$ yr due to on-going crystallization. When mass input from crystallization no longer balances loss by evaporation, the integrated mass fraction of crystalline silicates then decreases to reach a plateau value. The ratio between this long term plateau value and the crystalline mass fraction at $t \approx 0$ is more than 25% for the nebulae considered here (Fig. 4). This shows that turbulent diffusion of both amorphous and crystalline silicates is an efficient process for maintaining a high proportion of crystalline silicates in the solar nebula, as it is cooling down.

The effects of turbulent diffusion are seen on the radial profiles of C_c shown in Figs. 3A–C. Crystalline silicates are progressively mixed with the amorphous grains present in the outer regions, so that C_c continuously increases in the outer regions to finally reach a plateau equal to the C_c^{int} plateau value mentioned above. In turn, the crystalline front moves towards the Sun, as the nebula cools with time.

The characteristic timescale for radial mixing is approximately given by the accretion rate timescale t_0 defined by Eq. (9) and equal to $\sim 4.0 \times 10^4$, 3×10^4 and 1.6×10^4 yr for the cold, nominal and warm nebulae, respectively (Hersant et al. 2001). Figure 3 shows that, indeed, the plateau is reached faster for the warm nebula than for the nominal nebula, and faster for the nominal nebula than for the cold nebula. For example, at $t = 10^4$ yr, the value of C_c at $r = 15$ AU is $\sim 80\%$ the plateau value for the warm nebula, while, at the outermost distances of the cold nebula, the silicates are still essentially amorphous. At times larger than $\sim 5\text{--}10 \times 10^4$ yr, the mass fraction of crystalline silicates at $r > 10$ AU no longer evolves for the three nebulae considered here. The timescale for radial mixing is governed by the diffusion timescale $\tau_{\text{diff}} = r^2/\nu$, which increases rapidly with increasing distance, and also increases significantly with increasing time, due to decreasing temperature and disk thickness with time (Fig. 5).

Table 4. Crystalline mass fraction in the outer solar nebula at infinite time.

Law ^a	Compound	C_c		
		Solar nebula		
		cold	nominal	warm
(1)	Mg_2SiO_4 smoke	0.022	0.123	0.58
(2)	MgSiO_3 smoke	0.018	0.094	0.44
(3)	MgSiO_3 smoke	0.013	0.064	0.29
(4)	MgSiO_3 glass	0.013	0.066	0.30
(5)	MgSiO_3 , 0.1 μm glass	0.015	0.076	0.35

^a Timescale laws for silicate crystallization labelled according to Table 3.

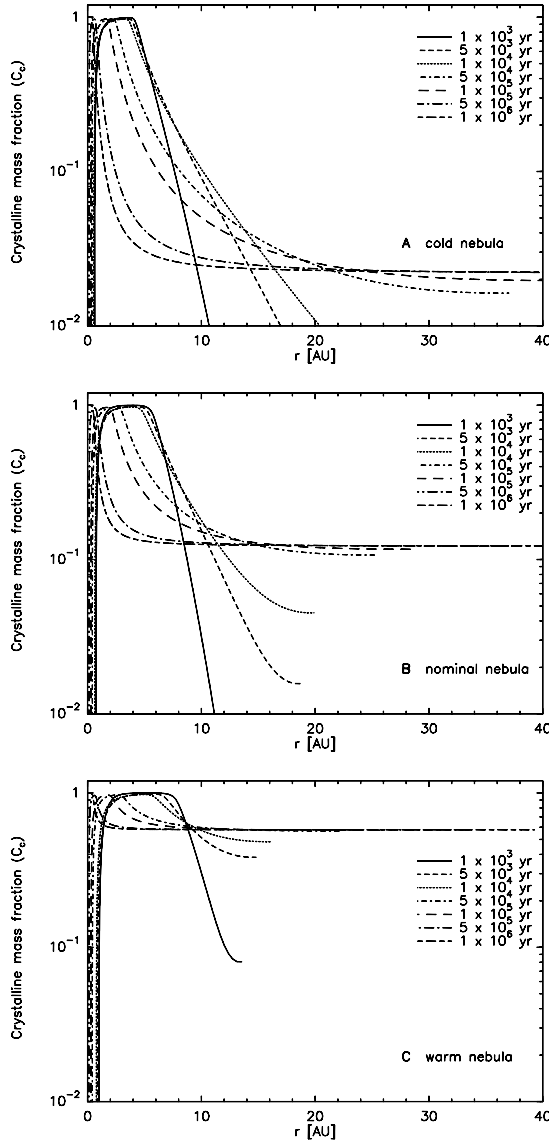


Fig. 3. Mass fraction of crystalline silicates as a function of radius and time in the solar nebula. Thermal annealing is modelled using law (1) of Table 3 ($\nu = 2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ and $E_a/k = 39\,100 \text{ K}$; Fabian et al. 2000). **A)** cold nebula. **B)** nominal nebula. **C)** warm nebula.

The mass fraction of crystalline silicates in the plateau is, as expected, strongly dependent on the thermal structure of the early nebula. The cold and warm nebulae considered here are extreme, so that the crystalline fraction varies from ~ 0.02 to 0.6 for the annealing timescales considered in the calculations shown in Fig. 3. Table 4 shows that, in contrast, the degree of crystallinity reached in the plateau is not very sensitive to the t_{ann} law. Comparing

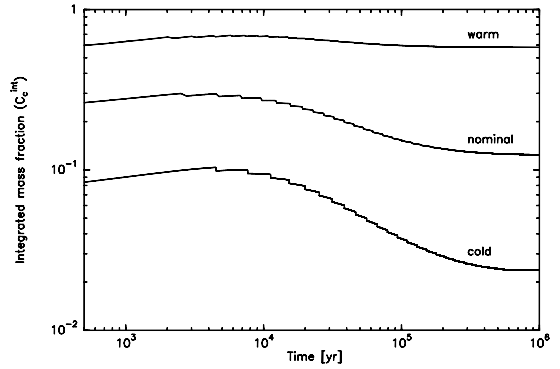


Fig. 4. Mass fraction of crystalline silicates integrated over the whole nebula C_c^{int} (Eq. (12)) as a function of time. Thermal annealing is modelled using law (1) of Table 3. Calculations for the three nebulae are shown.

results obtained for laws (1) and (2), the model predicts similar (within 30%) degrees of crystallinity for olivine and pyroxene grains. The degree of crystallinity is lower for Mg-rich pyroxene grains than for olivine, due to their slightly higher activation temperature E_a/k . The t_{ann} laws used for modelling the annealing of MgSiO_3 glass particles (laws (4) and (5)) provide results not very different (within 40%) from those derived using experimental data on smoke MgSiO_3 particles (law (2)).

4.1. Formation of silicates from vapor phase

The present work is based on the assumption that crystalline silicates were formed from the annealing of amorphous silicates moving radially in the disk equatorial plane towards the inner hot regions. Another mechanism for the formation of crystalline silicates may result from the recondensation of silicates. Silicates infalling onto the disk underwent heating in the collapsing presolar cloud or during the shock when arriving onto the disk. Chick & Cassen (1997) have investigated the temperatures experienced by infalling interstellar grains during this early stage of Solar System formation and conclude that silicates evaporate within 1 AU. Both theoretical considerations and compositional constraints from meteorites argue that the thermal regime experienced in the midplane of the accretion disk was more severe and controlled the vaporization distances of refractory grains (Chick & Cassen 1997). In the solar nebula models investigated here, the vaporization distance of silicates is ~ 1 AU, a value less than the value $r_{\text{sub}} \sim 2$ AU required to explain the relative abundances of moderately volatile elements of carbonaceous meteorites (Cassen 1996, 2001).

We do not take into account in our model the condensation of silicates in the vapor phase which takes place near the Sun when the nebula cools down. This would require a kinetic treatment of the chemical surface reactions during grain growth for which data are lacking

(Gail 1998; Gail & Sedlmayr 1999), and would demand a coupling of the dust and gas diffusion equations. Should the condensation of silicates actually produce the crystalline form, as is expected, neglecting this process leads to an underestimation of the relative fraction of crystalline silicates with respect to the amorphous variety. Since the mass of material located within the sublimation region is much smaller than the mass located outside (<10% for the selected nebulae; see Fig. 14 of Hersant et al. 2001), we believe that neglecting the contribution of crystalline silicates condensed from the vapor phase does not significantly affect our results. There are however presumptions that vapour phase condensates are present in cometary grains. A class of very porous interplanetary dust particles called CP, and suspected to be of cometary origin, shows Mg-rich pyroxene crystals with whisker and platelet morphologies (Bradley et al. 1983). These micro-structures are expected to grow by condensation from a relatively low-pressure vapour phase.

4.2. Silicates in meteorites

Silicates in meteorites are all in crystalline form. However, crystalline silicates in meteorites were not necessarily produced by the annealing process investigated in the present work. Therefore, we cannot discuss the crystallinity of meteorites only in the context of our model, although there is no apparent conflict, since Fig. 3 shows that silicates within 3 AU remain essentially crystalline at times less than 10^5 yr.

Most meteorites – stony, stony-iron and iron – record melting events related to the metamorphism and magnetism of at least, seventy small parent bodies (Scott 1991). In addition, a large number of asteroids seem differentiated. Although the mechanism that yielded this increase in temperature of the asteroidal parent body is still largely debated, no amorphous interstellar silicates present in the protosolar nebula would have survived such thermal stress linked to the planetesimal formation and evolution. Therefore, in the inner zone of the solar system, all solid bodies appear crystalline.

Among the classes of meteorites that could have preserved a partial record of the crystalline state of their amorphous silicate precursors, are the carbonaceous and the unequilibrated type 3 chondrites (especially the type LL3.0). These meteorites consists of chondrules and matrix.

Chondrules are 100 to 1000 μm size spheroidal silicates, mainly made of olivine and pyroxene, which constitute the dominant fraction (up to 70%) of chondrites. They are the products of partial melting of precursor silicates – possibly the amorphous interstellar dust – with negligible contribution of sulphides, oxides and iron. Although the conditions of formation of chondrules are not totally understood, experimental simulations have allowed a precise reconstruction of their thermal history. (1) Their heating time during which sub-melting was taking

place varied from 100 s (Tsuchiyama & Nagahara 1981) to 20 h (Lofgren & Russell 1988). (2) Essentially based on the distribution of the chemical elements between the different mineralogical phases coexisting in chondrules (as for example the Fe/Mg partitioning coefficients) cooling rates were estimated to lie between 100 to 2000 $^{\circ}\text{C}/\text{hr}$ (Radomsky & Hewins 1990). (3) The range of heating temperature depends almost exclusively on the Mg-Al-Si chemical proportions of the chondrules and ranges from 1200 to 1700 $^{\circ}\text{C}$. The occurrence of the three common textures (granular in Mg-rich olivine chondrules, pophyritic in Fe-rich olivine chondrules, radiating in pyroxene chondrules) are experimentally reproduced by heating the precursor silicates to near-liquidus temperature (1300–1800 $^{\circ}\text{C}$) but not higher (Hewins & Radomsky 1990).

These short heating and cooling times associated with these high silicate melting temperatures are consistent with the idea that chondrules formed by transient heating phenomena (as those involved in electric discharges) in the dust-rich regions of the protosolar nebula. These conditions are not accounted for in the present model. It is clear that amorphous precursors of chondrules, if any, would not have survived through such a violent thermal history.

As far as the matrix is concerned, its origin is poorly documented mainly because of its very fine grain structure. The matrix is essentially composed of broken fragments of chondrules, of clay minerals and sub-micronic silicates and sulfides which are also found as relic grains in chondrules. Matrix lumps are sometimes enclosed in chondrule rims and therefore the formation of the matrix post-date the chondrule formation. The fact that amorphous mineral are extremely rare in the matrix cannot be taken as an evidence that the dust was entirely crystalline at the time and location of the matrix formation. Indeed, an intense circulation of water in the parent body meteorites is attested by the presence of low temperature phyllosilicates (such as smectite) essentially located in the matrix. For a given chemical composition, the formation rate of clay minerals is enhanced for amorphous compared to crystalline silicates. Although the alteration rates of amorphous silicate has not been experimentally measured, it seems possible that all the pre-existing interstellar amorphous silicates – if any – would have been transformed in clays during mild hydrothermal events.

To summarize this discussion on silicates in meteorites, the post-formation geological processes have likely erased the amorphous structures of interstellar precursors.

4.3. Cometary silicates

We discuss now the model results in the context of the amount of crystalline silicates present in the dust of long-period comets such as Hale-Bopp. Dynamical considerations suggest that these comets formed mainly in the Uranus-Neptune zone. Our model shows that microscopic grains made of crystalline silicates present in the inner

regions of the solar nebula are efficiently transported outwards to the comet formation zone by turbulence in timescales of a few $\sim 10^4$ yr.

The mass fraction of crystalline silicates in the dust of comet Hale-Bopp is estimated between 0.3–0.5 to 0.9 (Table 1). Comparing with model results obtained in the outer regions (Table 4), we see that our model well explains the low range of measured values in the case of the warm nebula, regardless the crystallization law t_{ann} adopted. On the other hand, the interpretation of the high degree of crystallinity $C_c = 90\%$ inferred by Wooden et al. (1999) would require a still warmer nebula.

Radial mixing by turbulence is efficient as long as the grains are coupled to the gas. The decoupling occurs when particles agglomerate and grow up to sufficiently large sizes. There is no general consensus on the critical size for decoupling: it is about 1 m according to Weidenschilling (1997) and Supulver & Lin (2000), while Stepinski & Valageas (1996) advocate for centimetre, or even smaller, sizes. To be valid, our proposed scenario requires that timescales for grain growth from micrometre sizes to centimetre or metre sizes are not too short with respect to the diffusion timescale for radial mixing. Dust coagulation in protoplanetary disks is a complex problem, which is not yet well understood (see the review of Beckwith et al. 2000). The sticking process depends both on the chemical and physical properties of the grains, and on their relative velocity induced by thermal and turbulent motions, gas drag and sedimentation. Theoretical calculations predict that particle growth from sub-micron to metre sizes is very rapid and occurs in timescales of typically a thousand orbital revolutions, that is $\sim 10^3$ to $\sim 10^4$ yr from 1 to 10 AU (Weidenschilling & Cuzzi 1993; Stepinski & Valageas 1996; see also Weidenschilling 1997, for results obtained at 30 AU). Such short coagulation timescales are in conflict with observational evidence that disks around T Tauri and Herbig Ae/Be stars of ages $\sim 10^5$ – 10^7 years are still dominated in mass by millimetre grains (see the review of Natta et al. 2000). On the other hand, fast coagulation seems a requisite to explain the presence of planets in the Solar System (Stepinski & Valageas 1996). The coagulation timescales given above can be compared to our diffusion timescales. These latter are plotted as a function of radial distance and time in Fig. 5, for the warm nebula parameters which fit cometary silicate measurements. Coagulation timescales are somewhat lower, but by a factor of 5 at most, than the diffusion timescales computed at $t < 10^5$ yr. Therefore, given actual uncertainties on grain growth, destruction processes by collisions (Benz 2000), and transport through turbulent eddies, we conclude that turbulent radial mixing of dust grains in the solar nebula is a plausible mechanism for explaining the large amount of crystalline silicates in comets.

In order to explain the D/H ratios in cometary H_2O and HCN, Hersant et al. (2001) concluded that microscopic grains of H_2O and HCN ices, which subsequently accreted into cometesimals, condensed and were mixed together in the 10–20 AU range at times of typically $\sim 10^5$ yr.

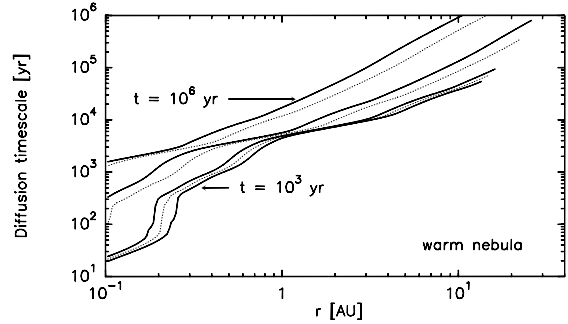


Fig. 5. Diffusion timescale r^2/ν_i in the warm nebula as a function of time. Curves from bottom to top correspond to increasing times. Plain lines are for times 10^3 , 10^4 , 10^5 , and 10^6 years. Dotted lines are for times 5×10^3 , 5×10^4 , and 5×10^5 years.

Interestingly enough, this is also the time when the crystalline mass fraction in this heliocentric range has reached the plateau value (Fig. 3). In other words, at times of $\sim 10^5$ yr, silicates and icy particles with observed cometary properties were available in the comet formation zone. Their sticking and coagulation into kilometre-sized bodies could have then proceeded rapidly. With a vertical 1-D model run at $r = 30$ AU which does not include turbulence, Weidenschilling (1997) shows that the formation of comets could have been completed in about 2×10^5 yr. To conclude, our nebula model permits us to consistently explain both siliceous and deuterium cometary composition by large scale turbulent radial mixing in the solar nebula. In turn, the amount of crystalline silicates in comets provides us with additional constraints on the parameters of the 2-D model of Hersant et al. (2001).

4.4. Implications on the parameters of the 2-D solar nebula model

One of our primary goals was to investigate whether solar nebulae models which fit deuterium enrichments in primitive Solar System bodies (Hersant et al. 2001), would be able to explain the amount of crystalline silicates measured in cometary dust. In fact, the present analysis based on three selected nebulae shows that producing the amount of cometary crystalline silicates requires the warm nebula. Since a number of other warm nebulae fitting deuterium enrichments can be generated by the 2-D model, the relative proportion of crystalline silicates in comets can be used as an additional constraint to the selection of nebulae. Based on the observational data (Table 1), we adopted the value of $C_c = 0.3$ for this constraint. A number of nebulae were then calculated, as in Hersant et al., each one defined by the initial accretion rate \dot{M}_0 and radius R_{D0} of the nebula, and the coefficient of turbulent viscosity α . The equations of diffusion 6 and 7 were then integrated as a function of radial distance and time, using the surface density and temperature radial profiles of these nebulae. Nebulae which

do not provide adopted constraints were rejected. The ranges of acceptable nebula parameters fitting both D/H and C_c measurements are substantially reduced with respect to those obtained by Hersant et al. (2001). They are: $0.008 < \alpha < 0.01$, $7 \times 10^{-6} < \dot{M}_0 < 10^{-5} M_\odot \text{yr}^{-1}$, and $12.4 < R_{D0} < 14.8 \text{ AU}$.

The derived ranges of acceptable α , \dot{M}_0 and R_{D0} values are very small and should not be taken too seriously. First, the adopted physical and chemical constraints might not be fully appropriate. Indeed, there are still large uncertainties on D/H values and silicate composition in comets. More important, among physical constraints adopted by Hersant et al. (2001), the initial mass of the solar nebula was limited to masses smaller than $0.3 M_\odot$, in order to satisfy the criterion of gravitational stability of the disk, and the radius of the solar nebula was forced to reach Neptune distance in the first $2.5 \times 10^5 \text{ yr}$. These assumptions, which could be certainly somewhat relaxed, result in the rejection of nebulae with warm temperatures in their early life and constrain the initial radius of the nebula to a small range. The second point to consider is that the results are model dependent and obtained under several assumptions. Among these, the value of the Prandtl number, which is not well known, has a strong influence on the derived α , \dot{M}_0 and R_{D0} ranges (Hersant et al. 2001). The uncertainties on the timescales for isotopic exchanges and thermal annealing are significant. Finally, the validity of the disk model may be also questioned. Standard α -disks are known to be not extended and warm enough to explain observations of circumstellar disks. Many alternative and controversial solutions have been proposed and are beyond the scope of the present paper. The initial high accretion rate of $\sim 10^{-5} M_\odot \text{yr}^{-1}$ that we derived would correspond to that of Class 0 protostars when mass infall from the envelope is feeding the disk (André et al. 2000). Admittedly, this stage of the early nebula is not well treated in our model and might affect the initial and boundary conditions of our transport equations. However, we must point out that time-dependent models describing the early stages of the solar nebula when most of its chemical evolution occurs, are not yet available.

5. Summary

This paper presents a model to explain the presence of a high amount of crystalline silicates in comets. The proposed scenario is that crystalline silicates formed in the inner warm regions of the solar nebula by the thermal annealing of amorphous silicates. They were then transported out to the comet formation zone by turbulent diffusion. This paper follows those of Drouart et al. (1999), Mousis et al. (2000) and Hersant et al. (2001), which interpret the variety of deuterium enrichments observed in primitive objects of the Solar System by isotopic exchange in the solar nebula and turbulent radial mixing.

Our study makes use of the 2-D evolutionary solar nebula model developed by Hersant et al. (2001). It takes into account the rapid evolution of temperatures and pressures

during disk evolution. Such an approach is necessary to investigate quantitatively whether the proposed scenario is plausible, since both thermal annealing and turbulent mixing processes are strongly temperature dependent.

Using solar nebula parameters which fit D/H ratios in comets, we show that turbulent diffusion is an efficient mechanism for mixing amorphous and crystalline grains in the comet formation zone. The timescale required for radial mixing is typically $\sim 1\text{--}5 \times 10^4 \text{ yr}$, depending on the solar nebula model. These values are comparable, within a factor of a few, to theoretical expectations concerning the characteristic timescales for particle growth in the solar nebula. It is also well below the time needed to form kilometer-sized comets from a population of microscopic grains (Weidenschilling 1997). Therefore, given actual uncertainties on grain growth in the solar nebula, it seems likely that fast dust coagulation did not preclude large-scale radial mixing, allowing the transport of crystalline silicates from inner to outer regions.

One of the aims of our modelling was to investigate whether the solar nebulae selected by Hersant et al. (2001) to fit cometary D/H ratios would also explain quantitatively the high amount of crystalline silicates. Our calculations show that fitting both observational constraints is possible, provided that we use model parameters which generate warm nebulae. Using the mass fraction of crystalline silicates estimated in comet Hale-Bopp as an additional constraint to the model of Hersant et al. (2001), we derived the ranges of nebula parameters α , \dot{M}_0 and R_{D0} which fit both cometary and silicate composition. The ranges of acceptable parameters are small and may not represent the number of uncertainties and assumptions in our model. However, this study qualitatively demonstrates the need of high temperatures in an extended zone of the solar nebula, to explain both D/H and the properties of cometary silicates. In addition, it shows that, in essence, the amount of crystalline silicates in comets should permit us to check the validity of any model of the solar nebula in which the temperature distribution is calculated. More conclusive studies will have to await for the availability of more realistic time-dependent models for solar nebula early evolution.

Our model predicts that, in a few 10^4 yr , the crystalline/amorphous silicates ratio reaches the same value in almost the whole nebula, except in the innermost regions. This might imply that all comets formed in the turbulent part of the solar nebula could have the same crystalline/amorphous silicates ratio, a result not in conflict with available data on long-period comets (Sect. 2). However, firm conclusions should await for more detailed models which include grain coagulation, since this process affects the efficiency of radial mixing by turbulence. In addition, measurements of the crystalline/amorphous silicates ratio in comets are still too sparse to allow detailed comparison with model predictions. Data on Jupiter family comets coming from the Kuiper Belt are specifically required. They may reveal a lower content of crystalline

silicates, if they were formed in a non-turbulent part of the outer nebula.

Acknowledgements. We thank D. Fabian, for providing us with laboratory results before publication, and P. Michel and J. R. Brucato for enlightening discussions. This work was supported by the Programme national de planétologie de l'Institut national des sciences de l'univers (INSU) and the Centre de la recherche scientifique (CNRS).

References

- André, P., Ward-Thompson, D., & Barsony, M. 2000, in *Protostars and Planets IV*, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell (The University of Arizona Press, Tucson), 59
- Ashworth, J. R., Mallinson, L. G., Hutchinson, R., & Biggar, G. M. 1984, *Nature*, 308, 259
- Beckwith, S. V. W., Henning, T., & Nakagawa, Y. 2000, in *Protostars and Planets IV*, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell (The University of Arizona Press, Tucson), 553
- Benz, W. 2000, *Space Sci. Rev.*, 92, 279
- Bouman, J., Meeus, G., de Koter, A., et al. 2001, *A&A*, 375, 950
- Bradley, J. P., Brownlee, D. E., & Veblen, D. R. 1983, *Nature*, 301, 473
- Bradley, J. P., Humecki, H. J., & Germani, M. S. 1992, *ApJ*, 394, 643
- Bradley, J. P., Keller, L. P., Snow, T., et al. 1999, *Science*, 285, 1716
- Brucato, J. R., Colangeli, L., Mennela, V., Palumbo, P., & Bussoletti, E. 1999a, *P&SS*, 47, 773
- Brucato, J. R., Colangeli, L., Mennela, V., Palumbo, P., & Bussoletti, E. 1999b, *A&A*, 348, 1012
- Cassen, P. 1996, *Meteoritics & Planetary Science*, 31, 793
- Cassen, P. 2001, *Meteoritics & Planetary Science*, 36, 671
- Chick, K. M., & Cassen, P. 1997, *ApJ*, 477, 398
- Colangeli, L., Brucato, J. R., Ferrini, et al. 1999, *Adv. Space Res.*, 23, 1243
- Colangeli, L., Mennela, V., Rotundi, A., Palumbo, P., & Bussoletti, E. 1995, *A&A*, 293, 927
- Colangeli, L., Mennela, V., Rotundi, A., Palumbo, P., & Bussoletti, E. 1996, *A&A*, 312, 643
- Crovisier, J., Brooke, T. Y., Leech, K., et al. 2000, in *Thermal emission spectroscopy and analysis of dust disks, and regoliths*, ed. M. L. Sitko, A. L. Sprague, & D. K. Lynch, *Astron. Soc. Pac. Conf. Ser.*, 196, 109
- Crovisier, J., Encrenaz, T., Lellouch, E., et al. 1999, in *The Universe seen by ISO*, ed. P. Cox, & M. F. Kessler, *ESA SP-427*, 161
- Crovisier, J., Leech, K., Bockelée-Morvan, D., et al. 1997, *Science*, 275, 1904
- Demyk, K., Jones, A. P., Dartois, E., Cox, P., & d'Hendecourt, L. 1999, *A&A*, 349, 267
- Drouart, A., Dubrulle, B., Gautier, D., & Robert, F. 1999, *Icarus*, 140, 129
- Dubrulle, B., Morfill, G., & Sterzik, M. 1995, *Icarus*, 114, 237
- Duschl, W. J., Gail, H.-P., & Tschamuter, W. M. 1996, *A&A*, 312, 624
- Fabian, D., Jäger, C., Henning, Th., Dorschner, J., & Mutschke, H. 2000, *A&A*, 364, 282
- Gail, H.-P. 1998, *A&A*, 332, 1099
- Gail, H.-P. 2001, *Radial mixing in protoplanetary accretion disks. I. Stationary disc models with annealing and carbon combustion*, *A&A*, 378, 192
- Gail, H.-P., & Sedlmayr, E. 1999, *A&A*, 347, 594
- Hallenbeck, S. L., Nuth, J. A., & Daukantas, P. L. 1998, *Icarus*, 131, 198
- Hanner, M. S. 1999, *Space Sci. Rev.*, 90, 99
- Hanner, M. S., Brooke, T. Y., & Tokunaga, A. T. 1998, *ApJ*, 502, 871
- Hanner, M. S., Gehrz, R. D., Harker, D. E., et al. 1997, *Earth, Moon, and Planets*, 79, 247
- Hanner, M. S., Lynch, D. K., & Russel, R. W. 1994, *ApJ*, 425, 274
- Hartmann, L., Calvet, N., Gullbring, E., & D'Alessio, P. 1998, *ApJ*, 495, 385
- Hawley, J. F., Smarr, L. L., & Wilson, J. R. 1984, *ApJ*, 55, 211
- Hayward, T. L., Hanner, M. S., & Sekanina, Z. 2000, *ApJ*, 538, 428
- Hersant, F., Gautier, D., & Huré, J.-M. 2001, *ApJ*, 554, 391
- Hewins, R. H. 1997, *Ann. Rev. Earth. Planet. Sci.*, 25, 61
- Hewins R. H., & Radosky, P. M. 1990, *Meteoritics*, 25, 309
- Huré, J.-M. 2000, *A&A*, 358, 378
- Huré, J.-M., & Galliano, F. 2001, *A&A*, 366, 359
- Knacke, R. F., Fajardo-Acosta, S. B., Tedesco, C. M., et al. 1993, *ApJ*, 418, 440
- Lenzuni, P., Gail, H.-P., & Henning, Th. 1995, *ApJ*, 447, 848
- Lofgren, G. E., & Russell, W. J. 1988, *Cochim. Cosmochim. Acta*, 50, 1715
- Makalkin, A. B., & Dorofeyeva, V. A. 1991, *Izv. Earth Phys.*, 27, 650
- Malfait, K., Waelkens, C., Waters, L. B. F. M., et al. 1998, *A&A*, 332, L25
- Molster, F. J., Yamamura, I., Waters, L. B. F. M., et al. 1999, *Nature*, 401, 563
- Morfill, G. E., & Völk, H. J. 1984, *ApJ*, 287, 371
- Mouis, O., Gautier, D., Bockelée-Morvan, D., Robert, F., & Dubrulle, B. 2000, *Icarus*, 148, 513
- Natta, A., Grinin, V. P., & Mannings, V. 2000, in *Protostars and Planets IV*, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell (The University of Arizona Press, Tucson), 559
- Neufeld, D. A., & Hollenbach, D. J. 1994, *ApJ*, 428, 170
- Nuth, J. A., & Donn, B. 1982, *ApJ*, 257, L103
- Radosky, P. M., & Hewins, R. H. 1990, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 54, 3475
- Ruden, S. P., & Lin, D. N. C. 1986, *ApJ*, 308, 883
- Ruden, S. P., & Pollack, J. B. 1991, *ApJ*, 375, 740
- Scott, E. R. D. 1979, *Mineral. Mag.*, 43, 415
- Shakura, N. L., & Sunyaev, R. A. 1973, *A&A*, 24, 337
- Shu, F. H., Tremaine, S., Adams, F. C., & Ruden, S. P. 1990, *ApJ*, 358
- Stepinski, T. F., & Valageas, P. 1996, *A&A*, 309, 301
- Supulver, K. D., & Lin, D. N. C. 2000, *Icarus*, 146, 525
- Wilson, J. R. 1978, in *Source of Gravitational Radiation*, ed. L. Smarr (Cambridge University Press, Cambridge), 423
- Tschiyama, A., & Nagahara, H. 1981, in *Proceedings of the 6th symposium on Antarctic Meteorites*, ed. T. Nagata, *Mem. Nat. Inst. Polar Res., Spec. Issue*, 20, 175
- Weidenschilling, S. J. 1997, *Icarus*, 127, 290
- Weidenschilling, S. J., & Cuzzi, J. N. 1993, in *Protostars and Planets III*, ed. E. H. Levy, & J. I. Lunine (The University of Arizona Press, Tucson), 1031
- Wooden, D. H., Harker, D. E., Woodward, C. E., et al. 1999, *ApJ*, 517, 1034

Annexe D

Enrichments in volatiles in Jupiter : A new interpretation of the Galileo measurements

Reproduction d'un article publié en 2001 :
Astrophysical Journal Letters
volume 550
pages 227-230

THE ASTROPHYSICAL JOURNAL, 550:L227–L230, 2001 April 1
 © 2001. The American Astronomical Society. All rights reserved. Printed in U.S.A.

ENRICHMENTS IN VOLATILES IN JUPITER: A NEW INTERPRETATION OF THE *GALILEO* MEASUREMENTS

D. GAUTIER, F. HERSANT,^{1,2} AND O. MOUSIS³

DESPA/Observatoire de Meudon, CNRS-UMR 8632, F-92195 Meudon, France; daniel.gautier@obspm.fr

AND

J. I. LUNINE

Lunar and Planetary Laboratory, University of Arizona, Space Sciences Building, P.O. Box 210092, Tucson, AZ 85721

Received 2001 January 8; accepted 2001 February 21; published 2001 March 21

ABSTRACT

Using an evolutionary model of the solar nebula, we fit all enrichments in volatiles with respect to the solar abundance measured in Jupiter by the *Galileo* probe. We argue that volatiles were trapped in the form of solid clathrate hydrates in the cooling feeding zone of Jupiter while the gas mass of the nebula was continuously decreasing with time. Enrichments in Jupiter are those acquired in planetesimals at the time of the hydrodynamic collapse of the feeding zone. The O/H ratio in Jupiter is predicted to be at least 8 times solar.

Subject headings: planets and satellites: formation — planets and satellites: individual (Jupiter) — solar system: formation

1. INTRODUCTION

Owen et al. (1999) have shown that the abundances of Ar, Kr, Xe, C, N, and S measured by the *Galileo* probe in Jupiter are all enriched by similar amounts with respect to the solar abundance. These results were not expected from the theory in which volatiles were initially trapped in amorphous ice and subsequently incorporated in planetesimals that fell into the gaseous envelope of Jupiter unless all volatiles were trapped in amorphous ice at a temperature as low as 30 K (Owen & Bar-Nun 1995). Therefore, Owen et al. (1999) proposed that either Jupiter was formed beyond 30 AU and subsequently migrated to its present position, or the solar nebula was much cooler at 5 AU than predicted by conventional models, or icy material formed in the nascent interstellar cloud survived the formation of the solar nebula. These three alternatives represent perspectives. However, the first would result in a time of formation of Jupiter much longer than the estimated lifetime of the nebula (Pollack et al. 1996) owing to the low collision frequency at large heliocentric distances. The second and the third are incompatible with observational evidence for the occurrence of high temperatures in the inner nebula derived from the analysis of meteorites and from the measurements of the effective temperature of circumstellar disks (Cassen & Chick 1997).

We propose an alternative interpretation of the observed enrichments in Jupiter based on current scenarios of formation of the planet and on the assumption that volatiles were trapped in the form of clathrate hydrates in the feeding zone of Jupiter while the nebula was cooling down.

2. FORMATION OF JUPITER FROM NEBULA GAS AND PLANETESIMALS

We follow the scenario of Pollack et al. (1996) in which Jupiter is formed in three phases from gases and planetesimals

¹ Also at CEA/DAPNIA/SAP, CNRS-UPR 182, L'Orme des Merisiers, F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France.

² Visitor at CEA/DRECAM/SPEC, L'Orme des Merisiers, F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France.

³ Also at Laboratoire de Planétologie et Géodynamique, CNRS-UMR 6112, Faculté des Sciences et des Techniques, 2, rue de la Houssinière, BP 92208, F-44300 Nantes Cedex 3, France.

contained in its feeding zone. In phase 1, a solid core of silicates and ices is formed in about 0.5 Myr. The most recent models of the interior of Jupiter indicate that the mass of the solid core must not exceed $11 M_{\oplus}$ (Guillot 1999). In phase 2, which can take several millions of years, a relatively small amount of planetesimals and some gas fall onto the core and form a “primary” gaseous envelope in which presumably planetesimals are vaporized. The increase of the mass of the planet during this phase is mainly due to gas and may not exceed $10 M_{\oplus}$. In phase 3, not modeled by Pollack et al. (1996), but calculated in detail by Coradini et al. (1995), most of the gas and the material contained in the feeding zone of Jupiter hydrodynamically collapses in a time no longer than 3×10^4 yr. Solids incorporated in infalling planetesimals vaporize in the hot interior of the planet, and their vapors are mixed with hydrogen in the gaseous envelope.

As shown by Hersant, Gautier, & Huré (2001) from their evolutionary two-dimensional model of the solar nebula, the mass of gas in the feeding zone continuously decreased with time (Fig. 1). The mass of hydrogen in Jupiter today does not exceed $276 M_{\oplus}$ (Guillot 1999). Most of this mass was acquired during phase 3, hydrodynamical collapse; Figure 1 shows that the mass of the feeding zone was equal to $276 M_{\oplus}$ ($9 \times 10^{-4} M_{\odot}$) at 3.3 Myr, which is thus the time when Jupiter was completed (for the model of nebula considered here).

This is calculated for a feeding zone of 2.84 AU width, for reasons given in § 5. The next step is to evaluate the relative proportions of heavy elements in the feeding zone at the time of the hydrodynamic collapse.

3. COMPOSITION OF PLANETESIMALS IN THE FEEDING ZONE OF JUPITER

The temperature T of the feeding zone centered at 5 AU continuously decreases with time (Hersant et al. 2001), as shown in the Jupiter adiabat plotted in Figure 2. When $T = 150$ K, water vapor condenses and forms microscopic ices. This occurs at $t = 0.3$ Myr. The key point is that *the ice formed is crystalline* (Kouchi et al. 1994; Mousis et al. 2000). When T continues to decrease, almost all initially available water vapor is rapidly transformed into crystalline ice so that, with the small amount of vapor remaining, only a negligible amount of amorphous ice can be produced. This implies that volatiles

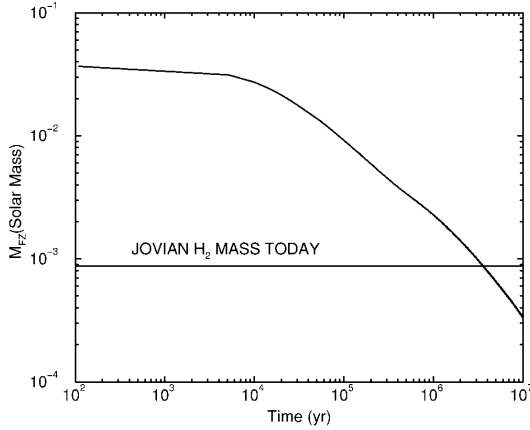


FIG. 1.—Mass of the feeding zone of Jupiter, in solar mass units, as a function of time in units of years. The total width of the feeding zone, centered at 5.2 AU, is equal to 2.84 AU. Calculations are made for the nominal nebula of the model of Hersant et al. (2001). The mass of hydrogen in Jupiter today is shown for comparison.

are primarily trapped in the form of clathrate hydrates, except NH_3 , which forms the $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ hydrate. Surface adsorption trapping of volatiles in amorphous ice does not play a role here. Clathrate hydrates may be of type I ($X\text{-}5.75\text{ H}_2\text{O}$), or type II ($X\text{-}5.66\text{ H}_2\text{O}$), where X is the guest molecule and the numbers 5.75 and 5.66 indicate the ratio of the number of H_2O molecules to the number of cages of each type that may host molecules. The curves of stability of clathrate hydrates of species observed by *Galileo* in Jupiter, calculated from Lunine & Stevenson (1985), are shown in Figure 2.

Each curve in the figure assumes a binary reaction in which only the labeled guest species is present and in contact with the water ice. The various clathrate hydrates are stable in the domains located below the curves. Since, in fact, all of the labeled species will be present in the nebular gas at the same time, the reaction is not binary, and the actual formation temperatures for the first occurrence of clathrate will be somewhat higher than shown. Because the stability curves for the most abundant guest species (H_2S , CH_4 , CO) are widely separated in temperature, this upward shift of the stability lines is a small effect (for the case of N_2 , see the discussion in § 4). The intersection of the Jupiter adiabat $T-P$ at 5 AU with these curves permits us to determine at what time the clathrate hydrates were formed in the feeding zone.

Microscopic clathrated ices rapidly agglomerate and form planetesimals or are incorporated in existing planetesimals. As soon as they reach centimeter to meter sizes, they are decoupled from the gas (Weidenschilling 1997) and orbit around the Sun. At this time, the mass of the clathrate hydrate does not increase any longer, while the mass of the gases (mainly H_2) continues to decrease. As a result, the per mass ratio of the clathrate hydrate to hydrogen *increases with time*, until the collapse of the feeding zone begins. Since infalling planetesimals are subsequently melted in the Jupiter envelope, the final mixing ratio of any particular volatile in Jupiter is, to a first approximation, that reached in the feeding zone at the time of the hydrodynamic collapse. Since the stability curves of clathrate hydrate on Figure 2 are nearly horizontal, the small decline in pressure as-

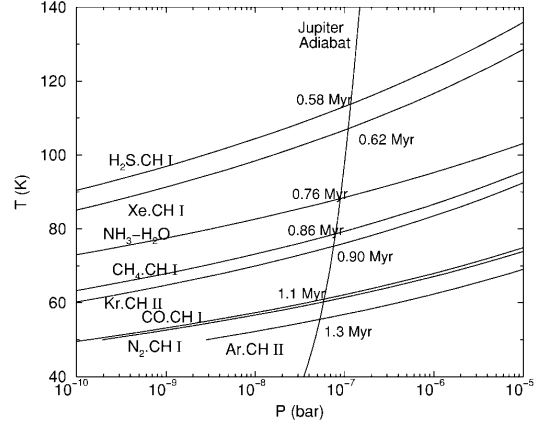


FIG. 2.—Curves of stability of clathrate hydrates of H_2S , Xe , CH_4 , CO , N_2 , and Ar , together with the Jupiter adiabat from the nominal nebula of the model of Hersant et al. (2001). CH I and CH II refer to clathrate hydrates of type I and type II, respectively (see text for more details). The condensation curve of the $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ hydrate is also shown.

sociated with phase 2 does not destabilize the clathrate hydrate even for the argon.

4. ENRICHMENT OF HEAVY ELEMENTS IN JUPITER

In order to model the enrichments in the envelope of Jupiter, we use the following procedure. After clathrated planetesimals form, their growth in size is expected to be very quick with respect to the evolution timescale of the nebula (the so-called viscous time). Therefore, their decoupling from gasdynamics must be very fast, and the mass of the decoupled elements is constant with time. At the time when the third phase of Jupiter's formation occurs, all the mass contained in the feeding zone collapses. An element i gets trapped/condensed at time t_i , defined by the intersection of Jupiter's adiabat and the stability curve of the corresponding clathrate hydrate (Fig. 3). The total mass of element i in the feeding zone is therefore given by

$$M_i = \int_{5.2 \text{ AU} - R_{FZ}}^{5.2 \text{ AU} + R_{FZ}} 2\pi\Sigma(5.2 \text{ AU}, t_i)X_i R dR, \quad (1)$$

where X_i is the initial mixing ratio with respect to H_2 of the element, R_{FZ} is half of the radial extent of the feeding zone, and Σ is the total surface density of the nebula (mainly that of H_2).

On the other hand, when the collapse occurs, the mass of hydrogen infalling onto the core of Jupiter is given by

$$M_{\text{H}_2} = \int_{5.2 \text{ AU} - R_{FZ}}^{5.2 \text{ AU} + R_{FZ}} 2\pi\Sigma(5.2 \text{ AU}, t_{\text{coll}})R dR. \quad (2)$$

Since the enrichment with respect to the solar value is given by

$$Y_i = \frac{M_i}{M_{\text{H}_2}} \frac{1}{X_i}, \quad (3)$$

one gets, after collecting terms, a simple expression for the

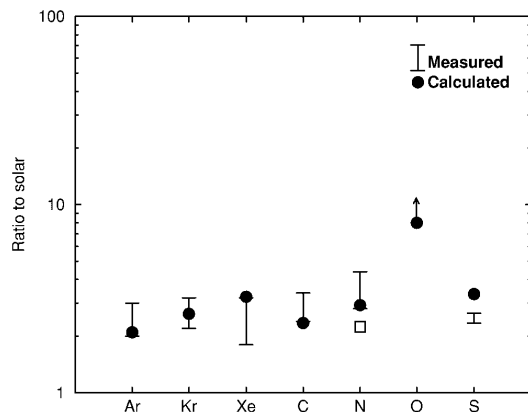


FIG. 3.—Ratio of Jovian to solar abundances. Measured values for Ar, Kr, Xe, C, N, and S are from Atreya et al. (1999), Owen et al. (1999), and Mahaffy et al. (2000). Calculated values are indicated by filled circles. For N/H, the filled circle corresponds to the case where all nitrogen is in the form of NH_3 ; the square corresponds to the case where all nitrogen is in the form of N_2 . The arrow above the circle for O indicates that the calculated number is only a lower limit. The measured value of O would be less than unity on the graph but likely reflects meteorological processes (see the text).

enrichment of the element i with respect to the solar value:

$$Y_i = \frac{\Sigma(5.2 \text{ AU}, t_i)}{\Sigma(5.2 \text{ AU}, t_{\text{coll}})} \quad (4)$$

In other words, the enrichment of the element i is given by the ratio of the *total* surface density of the nebula at 5.2 AU at the time of clathration of i to the *total* surface density of the nebula when hydrogen collapses.

5. RESULTS AND DISCUSSION

The calculated enrichments in elements are shown in Figure 3, together with the values observed by *Galileo*. The calculations were made under the assumption that Ar, Kr, Xe, and H_2S gases were in solar abundance prior to being trapped in the form of clathrate hydrates. Moreover, we adopt for the width of the feeding zone the value that permits us to fit the central value of the measured enrichment in krypton. We assumed that carbon (C) was in solar abundance, partly in the form of CO and partly in the form of CH_4 , and that ices of both species originating from the presolar cloud vaporized when entering into the nebula. Since the initial CO/ CH_4 ratio was not significantly modified throughout the nebula, except quite close to the Sun (Lewis & Prinn 1980), we adopted for this ratio in the early feeding zone the value of 5 measured by the *Infrared Space Observatory* in W33A (Gibb et al. 2000). Nitrogen has been initially taken to be equal to solar abundance but in various forms as discussed below.

Figure 3 shows that our calculations fit measured Ar and Kr enrichments within error bars as well as the upper limit of Xe. The calculated Xe/Ar ratio differs from that given in Lunine & Stevenson (1985), because those authors have calculated the ratio at a fixed temperature while in our model clathration occurs in an evolving nebula in which the mass of gases continuously decreases with time. As mentioned above, a clathrate formed at a given temperature decouples rapidly from the gas; clathrates

formed at a lower temperature and thus at later times (Ar) are less enriched with respect to their initial solar abundance.

On the other hand, the calculated S/H ratio is substantially higher than the observed one. This can be explained by the fact that hydrogen sulfide H_2S corrodes Fe alloy grains in the 500–720 K temperature range in the nebula to form troilite FeS (Gail 1998; Fegley 2000). This reaction consumes a substantial amount of H_2S in the inner nebula. We calculate that we can fit the central value of the observed S/H if we assume that the initial $\text{H}_2\text{S}/\text{H}_2$ ratio in the feeding zone of Jupiter was 0.65 times solar.

So far, we have assumed that C in the nebula was in the form of CO and CH_4 only, resulting in an enrichment close to the lower limit of the observed C/H. There is evidence, however, that the bulk of the organic matter in the interstellar medium (ISM) contains a substantial amount of the total carbon; the ratio of carbon in refractory organics to the total carbon is estimated to be between 10% and 40% (Ehrenfreund et al. 1991; Pendleton et al. 1994). Organics infalling from the presolar cloud onto the nebula may or may not have survived at 5 AU (Cassen & Chick 1997) or could have been partly dissociated in simpler organics. In any case, the carbon ultimately liberated around 1100 K in the inner nebula (Robert et al. 1987) was in the form of microscopic graphite grains and would have mixed with H_2 in the nebula. If these grains were incorporated in icy planetesimals at the moment when water condensed, the calculated enrichment in carbon in Jupiter increases. When 40% of carbon is in organics, the enrichment is then equal to 3.2.

Nitrogen in the nebula may be in the forms of N_2 , NH_3 , or N_2 gas mixed with solid N-bearing organics presumably originating from the presolar cloud (Langer et al. 2000). If nitrogen is mainly in the form of N_2 , the calculated enrichment is equal to 2.3 (Fig. 3, *square*). Under the assumption that the conversion of N_2 into NH_3 in the nebula was sufficiently accelerated by the catalytic effect of local Fe grains (Lewis & Prinn 1980; Fegley 2000), NH_3 may have become the major nitrogen compound, and the enrichment in N would then be equal to 2.9 (Fig. 3, *circle*). If a substantial amount of nitrogen was trapped in organic grains, and if these microscopic grains did not evaporate in the nebula and were incorporated in forming icy planetesimals, the N/H ratio may be substantially enhanced. Assuming that 50% of the whole nitrogen was trapped in organics, the enrichment is 3.2.

6. COMPARISON WITH OTHER MODELS AND PREDICTIONS FOR THE JOVIAN OXYGEN ABUNDANCE

In this model the condensate is a crystalline ice, rather than amorphous. Hence, the principal mechanism of volatile trapping becomes that of volumetric inclusion in clathrate hydrates. Clathrate formation is relevant because the crystalline water ice is exposed for several hundred thousand years to a nebular gas containing partial pressures of volatiles sufficient to produce clathrate formation. As noted in Lunine & Stevenson (1985), collisions among planetesimals can continuously expose fresh, unclathrated ice to the gas, inducing clathration and volatile uptake. More recently, Benz (2000) has emphasized from three-dimensional numerical simulations the pervasiveness of collisions between growing planetesimals.

A key test to distinguish between this scenario and the model of Owen et al. (1999) would be to measure the oxygen abundance in the bulk of Jupiter. Water is the principle carrier of volatiles in both models, yet the ratio of volatiles to water ice is different for amorphous ice formed at low temperature versus

the clathrate hydrate formed here. Calculating the amount of ice required for obtaining the theoretical enrichments shown in Figure 3, and comparing to the hydrogen mass in Jupiter, we estimate that the H_2O/H_2 ratio in the deep gaseous envelope of the planet should be at least 8 times solar. This implies that the mass of water ice formed in the region of Jupiter was about twice the solar abundance. A large excess of ice due to the cold-trapping of vapor from the inward condensation has been predicted by a number of authors (e.g., Cyr, Sears, & Lunine 1998). The nature of amorphous ice adsorption is such that the Owen et al. (1999) model should predict a much lower enhancement of oxygen in Jupiter than we calculate here. It is thus possible to distinguish between the two formation scenarios for Jupiter by measuring the water abundance, and hence the O/H ratio, in the deep atmosphere of the planet. The *Galileo* probe value of 0.35 times solar is almost certainly not representative of the bulk of the planet but reflects dynamical processes drying the deep troposphere, as pointed out by a number of workers (see the review of Lunine, Owen, & Brown 2000).

Future space missions will have to attempt the fundamental objective of determining O/H in Jupiter.

Finally, we note that the present analysis is based on the nominal model of the solar nebula calculated by Hersant et al. (2001). All models calculated by these authors have been selected in order to fit deuterium enrichments observed in the solar system; they all exhibit similar structure and evolution. The choice of any of the selected models different from the nominal one could change the calculated time of formation of Jupiter and the required width of the feeding zone but would still permit us to consistently interpret the *Galileo* measurements.

We thank Toby Owen for stimulating remarks about the composition of the ISM and François Robert for providing us with very useful information on the carbon content of organics present in meteorites. D. G., F. H., and O. M. acknowledge support from the Programme National de Planétologie de l'INSU (CNRS). J. I. L. acknowledges support from the NASA Origins Program.

REFERENCES

- Atreya, S. H., Wong, M. H., Owen, T. C., Mahaffy, P. R., Niemann, H. B., de Pater, I., Drossart, P., & Encenaz, T. 1999, *Planet. Space Sci.*, 47, 1243
 Benz, W. 2000, *Space Sci. Rev.*, 92, 279
 Cassen, P., & Chick, K. M. 1997, in *Astrophysical Implications of the Laboratory Study of Presolar Material*, ed. T. J. Bematowicz & E. K. Zinner (New York: AIP), 697
 Coradini, A., Federico, C., Fomi, O., & Magni, G. 1995, *Survey Geophys.*, 16, 533
 Cyr, K. E., Sears, W. D., & Lunine, J. I. 1998, *Icarus*, 135, 537
 Ehrenfreund, P., Robert, F., d'Hendecourt, L., & Behar, F. 1991, *A&A*, 252, 712
 Fegley, B., Jr. 2000, *Space Sci. Rev.*, 92, 177
 Gail, H. P. 1998, *A&A*, 332, 1099
 Gibb, E. L., et al. 2000, *ApJ*, 536, 347
 Guillot, T. 1999, *Planet. Space Sci.*, 47, 1183
 Hersant, F., Gautier, D., & Huré, J.-M. 2001, *ApJ*, in press
 Kouchi, A. T., Yamamoto, T., Kozasa, T., Kuroda, T., & Greenberg, J. M. 1994, *A&A*, 290, 1009
 Langer, W. D., van Dishoeck, E. F., Bergin, E. A., Blake, G. A., Tielens, A. G. G. M., Velusamy, T., & Whittet, D. C. B. 2000, in *Protostars and Planets IV*, ed. V. Manning, A. P. Boss, & S. S. Russell, (Tucson: Univ. Arizona Press), 29
 Lewis, J. S., & Prinn, R. G. 1980, *ApJ*, 238, 357
 Lunine, J. I., Owen, T. C., & Brown, R. H. 2000, in *Protostars and Planets IV*, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell (Tucson: Univ. Arizona Press), 1055
 Lunine, J. I., & Stevenson, D. J. 1985, *ApJS*, 58, 493
 Mahaffy, P. R., Niemann, H. B., Alpert, A., Atreya, S. K., Demick, J., Donahue, T. M., Harpold, D. N., & Owen, T. C. 2000, *J. Geophys. Res.*, 105, 15,061
 Mousis, O., Gautier, D., Bockelée-Morvan, D., Robert, F., Dubrulle, B., & Drouart, A. 2000, *Icarus*, 148, 513
 Owen, T., & Bar-Nun, A. 1995, *Icarus*, 116, 215
 Owen, T. C., Mahaffy, P., Nieman, H. B., Atreya, S., Donahue, T., Bar-Nun, A., & de Pater, I. 1999, *Nature*, 402, 269
 Pendleton, Y. J., Sandford, S. A., Allamandola, L. J., Tielens, A. G. G. M., & Selgren, K. 1994, *ApJ*, 437, 683
 Pollack, J. B., Hubickyj, O., Bodenheimer, P., Lissauer, J. J., Podolak, M., & Greenzweig, Y. 1996, *Icarus*, 124, 62
 Robert, F., Javoy, M., Halbout, J., Dimon, D., & Merlivat, L. 1987, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 51, 1787
 Weidenschilling, S. J. 1997, *Icarus*, 127, 290

Annexe E

Erratum : Enrichments in volatiles in Jupiter : A new interpretation of the Galileo measurements

Reproduction d'un article publié en 2001 :

Astrophysical Journal Letters

volume 559

page 183

ERRATUM

In the Letter “Enrichments in Volatiles in Jupiter: A New Interpretation of the *Galileo* Measurements” by D. Gautier, F. Hersant, O. Mousis, and J. I. Lunine (ApJ, 550, L227 [2001]), the authors have revised their calculations of the curves of stability of clathrate hydrates of H₂S, Xe, CH₄, Kr, CO, N₂, and Ar. This reanalysis was prompted by the fact that the authors realized that, except for the NH₃-H₂O hydrate, the temperature had been calculated as a function of the total pressure, neglecting the mixing ratio of each species. When taking this into account, the clathration temperature as a function of the total pressure is somewhat lower. Revised calculations, shown in Figure 1, have been done for a solar composition of all considered elements and assuming CO/CH₄ = 5 and N₂/NH₃ = 10. The main differences with the previous calculations are that the Xe clathrate curve is now located on the *T-P* diagram below that of CH₄ and the Kr curve is located below that of N₂. In addition, the clathration at 5.2 AU occurred later in the history of the nebula than previously calculated. Clathrations of H₂S, NH₃, CH₄, Xe, CO, N₂, Kr, and Ar occur now at $t = 0.83, 0.85, 1.22, 1.24, 1.56, 1.65, 1.80,$ and 2.04 Myr respectively.

The calculations of the resulting enrichments in Jupiter are shown in Figure 2. They have been calibrated on the central value of Kr (almost equal to that of Ar), resulting in a total width of the feeding zone of Jupiter centered at 5.2 AU equal to 4.46 AU and in a collapse of the hydrogen envelope of the planet occurring 5.85×10^6 yr after the formation of the Sun. The calculated Xe enrichment is slightly higher than the upper limit of the observed one, but should the calculation be calibrated on the lower limit of Ar or Kr, it would be easily within the error bars of the Xe measurements. The fit of the calculated C enrichment to the measurements is better than in the original Letter (Gautier et al. 2001). Interestingly enough, the calculated N enrichment when all nitrogen is assumed to be in the form of N₂ in the solar nebula is now compatible with the observed enrichment. The calculated value when all nitrogen is assumed to be in the form of NH₃ is slightly above the upper limit of the observed N enrichment, but this assumption is in conflict with predictions of the models of composition of the nebula. All N₂/NH₃ ratios higher than 10 are consistent with observations. The discrepancy between the calculated S enrichment and the observation is the same as in Gautier et al. (2001). The predicted O/H enrichment is at least 9.4 times solar, requiring an H₂O/H₂ ratio in the nebula at 5 AU, when water condenses, to be at least 2.5 times (O/H) solar. In summary, the reanalysis of the calculations of Gautier et al. (2001) does not change the conclusions developed in their article. The main changes are that the N enrichment is now easily explained for a high N₂/NH₃ ratio and that Jupiter is completed at $t = 5.85 \times 10^6$ yr. Moreover, it is no longer necessary to assume that some N was trapped in organics in the feeding zone of Jupiter.

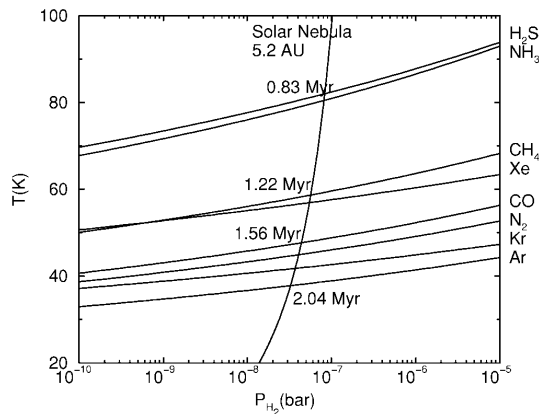


FIG. 1.—Curves of stability of clathrate hydrates of H₂S, CH₄, Xe, CO, N₂, Kr, and Ar. The curve of condensation of the NH₃-H₂O is also plotted. Temperatures are given as a function of the total pressure of hydrogen in the solar nebula, taking into account the relative abundances of various elements in solar abundance. For CO, CH₄, N₂, and NH₃, their abundances are calculated assuming that all C is in the form of CO and CH₄ and that all N is in the form of N₂ and NH₃. CO/CH₄ and N₂/NH₃ ratios were taken equal to 5 and 10, respectively. The intersection of the solar nebula adiabat at 5 AU (derived from Hersant, Gautier, & Huré 2001) with the curves of stability indicates the epoch of clathration or hydration of the considered species. The origin of time is the moment when the Sun was completed.

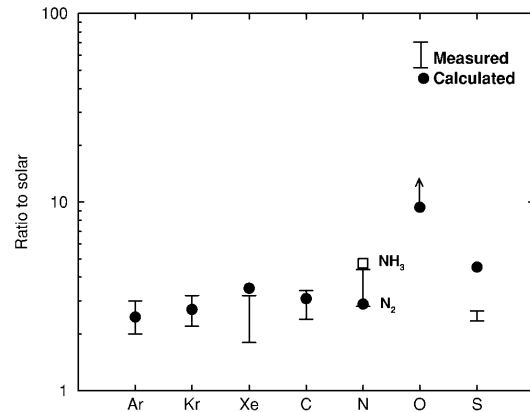


FIG. 2.—Ratios of the measured abundances in Jupiter to the solar abundance. Measured values and their error bars are as in Gautier et al. (2001). Filled circles correspond to calculated values. For nitrogen, the filled circle corresponds to the case where all N is in the form of N₂, while the square corresponds to the case where all N is in the form of NH₃. The filled circle surmounted by a vertical arrow indicates the calculated lower limit of O/H in the upper Jovian atmosphere, assuming that all O is in the form of H₂O.

REFERENCES

Hersant, F., Gautier, D., & Huré, J.-M. 2001, ApJ, 554, 391

Annexe F

An interpretation of the Nitrogen deficiency in comets

Reproduction d'un article accepté par Icarus en 2002 :
50 pages

An interpretation of the nitrogen deficiency in comets

Nicolas Iro, Daniel Gautier, Franck Hersant, Dominique Bockelée-Morvan

LESIA, Observatoire de Paris-Meudon, 5 Place Jules Jansen, 92195 Meudon CEDEX, France

and

Jonathan. I. Lunine

Lunar and Planetary Laboratory, University of Arizona, Space Sciences Building, P.O. Box 210092, Tucson, AZ 85721

ABSTRACT

We propose an interpretation of the composition of volatiles observed in comets based on their trapping in the form of clathrate hydrates in the solar nebula. The formation of clathrates is calculated from the statistical thermodynamics of Lunine and Stevenson (1985) and occurs in an evolutionary turbulent solar nebula described by the model of Hersant *et al.* (2001). It is assumed that clathrate hydrates were incorporated into the icy grains that formed cometesimals. The strong depletion of the N₂ molecule with respect to CO observed in some comets is explained by the fact that CO forms clathrate hydrates much more easily than does N₂. The efficiency of this depletion, as well as the amount of trapped CO, depends upon the amount of water ice available in the region where the clathration took place. This might explain the diversity of CO abundances observed in comets. The same theory, applied to the trapping of volatiles around 5 AU, explains the enrichments in Ar, Kr, Xe, C and N with respect to the solar abundance measured in the deep troposphere of Jupiter (Gautier *et al.* 2001a,b).

Subject headings: Clathrates – Comets – Solar nebula

1. Introduction

The composition of comets is frequently considered as reflecting that of the presolar cloud from which the solar nebula was formed. However, there is evidence that at least part of the genuine interstellar material was reprocessed in the nebula prior to the formation of pre-cometary grains (Irvine *et al.* 2000). The overall nitrogen deficiency in comets and the low N₂ abundance is particularly puzzling. The elemental N/O abundance measured in the dust of comet 1P/Halley is depleted by a factor of 3 with respect to the solar abundance $(N/O)_{\odot} = 0.13$ (Jessberger and Kissel 1991). Combining measurements of various N-bearing molecules, Wyckoff *et al.* (1991a) concluded that there is a deficiency in the ice component of comet Halley by a factor of 75 with

– 2 –

respect to $(N/O)_{\odot}$, and an overall (dust+ice) elemental nitrogen deficiency of 6. From the detection of a few new N-bearing volatile species, Bockelée-Morvan *et al.* (2000) inferred a N/O elemental depletion of 15 relative to the solar ratio in the gas phase of comet C/1995 O1 (Hale-Bopp). This elemental nitrogen depletion in comets is likely linked to the low abundance of N_2 in cometary ices, a compound believed to be the main carrier of nitrogen in the early solar nebula.

Cochran *et al.* (2000) recently published observations of N_2^+ and CO^+ performed at high spectral resolution in comets 122P/deVico and Hale-Bopp. From their non detection of N_2^+ and clear detection of CO^+ , they derived upper limits for N_2^+/CO^+ of 3.0×10^{-4} and 0.7 to 1×10^{-4} for deVico and Hale-Bopp, respectively. The N_2^+/CO^+ ratio is almost equal to the N_2/CO ratio. These upper limits, compared to the NH_3 and CO abundances relative to water measured in comets (Sect. 5.2), correspond to a very low abundance of N_2 in cometary ice. In comet Hale-Bopp, the N_2/NH_3 ratio is less than 0.001. Comparing with laboratory experiments on the deposition of various gases along with H_2O amorphous ice (Bar-Nun *et al.* 1988), Cochran *et al.* (2000) concluded that N_2/CO is strongly depleted in these two comets. On the other hand, the N_2 depletion does not appear so important in other comets in which N_2^+ was possibly detected: C/1987 P1 (Bradfield) observed by Lutz *et al.* (1993), 1P/Halley (Wyckoff *et al.* 1991a), and a few other comets observed since 1908, and recently reanalysed by C. Arpigny (private communication quoted by Cochran *et al.* 2000). Cochran *et al.* (2000) extensively discussed the results obtained in comets deVico and Hale-Bopp and presented various arguments or speculations for explaining the nitrogen depletion. They concluded that either a mechanism must be found to deplete the N_2 abundance in cometary ices after the formation of comets, or we have to understand how cometary icy grains depleted in N_2 may originate from a presolar cloud in which N_2 is currently estimated, according to photochemical models of the ISM, to be much abundant than NH_3 .

The purpose of this paper is to propose a mechanism for the depletion of N_2 in comets. It is based on the formation of clathrate hydrates in the solar nebula, following the theory for the stability of clathrate hydrates developed by Lunine and Stevenson (1985). These solid structures are made of cages of water which trap guest molecules in their interior at given temperature and pressure. CO and N_2 can be trapped in similar thermodynamical conditions. However, the theory predicts that CO will be much more easily trapped than N_2 , when the number of cages is not large enough to trap all molecules around the cages. Clathrate hydrates were subsequently incorporated in cometesimals. When comets come close to the Sun, clathrate hydrates decompose at pressure and temperature conditions which depend upon the clathrate, and liberate the guest gas molecules.

In section 2, we describe the evolutionary model of the solar nebula we use. In section 3, we examine the various possibilities for trapping volatiles in such a nebula: direct condensation, trapping in amorphous water ice or formation of clathrate hydrates. For comparison with abundances of the major cometary volatiles and future prospects concerning noble gases, we consider a nebula composed of H_2 , He, CO , CH_4 , N_2 , NH_3 , H_2S , Ar, Kr and Xe. We show that none of these species can condense as pure ice prior to being incorporated in clathrates or stoichiometric hydrates (for NH_3) in the cooling nebula and recall that the formation of amorphous water ice is excluded in the

– 3 –

solar nebula. In Section 4, the abundances of volatiles trapped in clathrate hydrates are calculated using the theory of clathration. The comparison with measurements in comets is made in Section 5. Low amounts of water ice result in very low N_2/CO ratios, in agreement with observations. Large amounts of water ice result in a N_2/CO ratio in clathrated ices close to the N_2/CO value assumed in gas phase in the early nebula. In Section 6, we calculate the abundances of argon, krypton and xenon that could be trapped in comets in the form of clathrate hydrates as a function of the amount of available water ice. Section 7 is devoted to discussions of the results and their implications.

2. The model of the solar nebula

A number of models of the primitive solar nebula have been developed and discussed in the literature (see for instance the review by Cassen 1994). However, most were not compared to solar system data or observations of circumstellar disks. To be approximatively representative of the actual solar nebula, models must satisfy the following constraints:

- (i) The angular momentum must be transported throughout the nebula. It is currently assumed that the transport is made by turbulence because this seems to be the most plausible way to explain the excess of luminosity emitted by disks surrounding stars. Since the calculation of small scale turbulence requires much computer time, modelers adopt the approximation of Shakura and Sunyaev (1973) which consists of discarding small scale features via the introduction of a turbulent viscosity ν which relaminarizes the mean flow: ν is assumed to be equal to the product of a dimensionless coefficient α multiplied by the velocity of sound and the half-height H of the disk. In addition, the nebular disk is assumed to be geometrically thin, namely the ratio H/R , where R is the heliocentric distance, must be substantially less than unity. Under this approximation, all models of the solar nebula exhibit similar structures characterized by the fact that H increases proportionally to R . The choice of α is generally arbitrary. Another key parameter is the mass accretion rate $\dot{M} = dM/dt$.
- (ii) The mass of the disk must be within 0.03 and 0.3 solar masses. The lower value corresponds to the actual mass of the current solar system to which hydrogen and helium are added in solar proportions with respect to heavy elements. The upper limit is that required to maintain the stability of the disk (Shu *et al.* 1990).
- (iii) The evolution of the nebula must be consistent with observations of circumstellar disks. This is a key point because the accretion rate is observed to decrease with time in disks (Calvet *et al.* 2000; Hartmann 2000), while solar nebula models found in the literature are frequently assumed to be stationary. In other words, their radial distributions of temperature and pressure throughout the nebula are assumed not to vary with time. This led some authors to erroneously consider that comets and planets each formed at a given (fixed) temperature, whereas the formation of these objects was a slow and inhomogeneous process that lasted up

– 4 –

to several millions of years for Jupiter and Saturn (Pollack *et al.* 1996; Hersant *et al.* 2001), and hence involved time-varying temperatures. Since a number of physico-chemical processes depends upon temperature, as for instance the condensation of water, the variation must be included.

- (iv) The temperature of the inner (1–5 AU) early nebula must have been within the temperature range of formation of meteorites estimated by Bell *et al.* (2000) to be between 400 and 1400 K. The upper edge is suggested from volatility-fractionation patterns seen in the most refractory compounds, while the lower edge is attested by the presence of volatile metals in primitive chondrites.
- (v) The model must be able to explain the D/H values in water in meteorites and comets.

Since this last constraint has been used only recently by a few authors (Drouart *et al.* 1999; Mousis *et al.* 2000; Robert *et al.* 2000; Hersant *et al.* 2001), it deserves some explanation.

The main reservoir of deuterium in the solar nebula is in hydrogen in the form of HD: the D/H ratio in the solar nebula is usually referred to as the protosolar abundance and is equal to about 2.5×10^{-5} (Hersant *et al.* 2001). Minor reservoirs of deuterated molecules may result from two processes. The first one concerns molecules formed at high temperature in the inner nebula, that were initially in isotopic equilibrium with hydrogen. For these molecules, isotopic fractionation leading to deuterium enhancement occurred when the nebula cooled down. The fractionation was modest because the rate of isotopic exchange between neutral molecules and hydrogen decreases rapidly to zero when the temperature decreases, inhibiting deuterium fractionation at $T < 250$ K. The second process accounts for the fact that molecules were strongly enriched in deuterium in the presolar cloud through ion-molecule reactions at low temperature. Ices with high D-enrichments fell onto the nebula disc. Molecules released from these ices isotopically exchanged with hydrogen. Equilibrium was never reached however, except in the inner nebula where the temperature exceeded 1000 K. Drouart *et al.* (1999) and Hersant *et al.* (2001) show that water ices indeed vaporized in the outer nebula.

The D/H ratios in water in the solar system are reviewed by Hersant *et al.* (2001). The key point is that the D/H ratio measured in the major component of LL3 meteorites (Deloule *et al.* 1998) exhibits an enrichment of ~ 3 with respect to the protosolar value, which is substantially less than enrichments of ~ 12 measured in comets Halley, C/1996 B2 (Hyakutake) and Hale-Bopp. Calculations show that, at 3 AU, the enrichment due to isotopic exchanges with H_2 never exceeded 1.5 times the protosolar value, a point emphasized a long time ago by Geiss and Reeves (1981). Therefore, the only way to interpret the D-enrichments in LL3 meteorites is to assume that water vapor at 3 AU did not come from the hot inner nebula only, but in fact mainly originated from the outer nebula. The D/H ratio at 3 AU is due to the reprocessing, *in the vapor phase*, of the outer component and to its mixing with the inner component. The water must have vaporized because no isotopic exchange can occur between hydrogen and water in solid phase. Note that the condensation of water does not introduce any significant deuterium fractionation (Laufer *et al.* 1999).

– 5 –

Detailed calculations require the integration of the diffusion equation which governs the evolution of the enrichment of D/H in the evolutionary nebula as a function of time and heliocentric distance. This has been made by Drouart *et al.* (1999), and Mousis *et al.* (2000), using a 1-D model. In the present work, we use the 2-D evolutionary model of Hersant *et al.* (2001), derived from the stationary model of Huré (2000). With respect to a 1-D model, a 2-D model provides more accurate estimates of the temperature and surface density in the mid-plane of the disk, where comets and planets formed.

The model of Hersant *et al.* (2001) is a geometrically thin model which satisfies all constraints (i) to (v) mentioned above. It computes the temperature, surface density, and pressure radial distributions as a function of time, once the initial accretion rate $\dot{M}(0)$ and radius R_D of the nebula, as well as the coefficient of turbulent diffusion α , have been defined. The temporal evolution of the physical parameters of the nebula results from a prescription on the evolution of the accretion rate $\dot{M}(t)$ taken from Makalkin and Dorofeyeva (1991), which is found to be fairly consistent with the observations of circumstellar disks (Hartmann *et al.* 1998).

Hersant *et al.* (2001) determined the ranges of values of the three parameters of their model which reproduce the D/H values measured in LL3 meteorites and comets. They found that $2 \times 10^{-6} < \dot{M}(0) < 1 \times 10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, $12.8 < R_D < 39 \text{ AU}$, and $0.006 < \alpha < 0.04$. From these ranges of model parameters, they estimated that microscopic icy cometary grains were produced between 18 AU at $t = 10,000 \text{ yr}$ after the formation of the Sun, and 7 AU at $t = 350,000 \text{ yr}$. These estimates of heliocentric distances and epochs of formation are, of course, model dependent. However the temperature distribution in the nebula is fairly tightly constrained by the deuterium data.

The temperature and pressure profiles of the *nominal* model of Hersant *et al.* (2001) in the mid-plane of the nebula are shown in Fig. 1. The coldest and warmest profiles of the model consistent with constraints (i) to (v) are shown in Fig. 1 of Bockelée-Morvan *et al.* (2002). Note that even the coldest profile implies that water ices infalling from the presolar cloud vaporized in the early nebula as far as 20 AU, at least.

3. Mechanisms for trapping cometary volatiles in the solar nebula.

It is generally presumed that water ice is present in cometary nuclei in amorphous form. The temperature of condensation of some volatiles detected in comets, as CO and CH₄, and those which may be present, as N₂ and noble gases, is very low (see Section 3.2 and Fig. 3). Some authors argue that these low abundances, considered in the context of laboratory experiments in cold-finger trapping of gases, imply that such volatiles did not condense but were trapped in amorphous ice, in conditions similar to those occurring in the interstellar medium (Bar-Nun *et al.* 1985, 1986, 1988; Owen and Bar-Nun 1995).

As Mousis *et al.* (2000) point out, this mechanism could not occur in the turbulent region of the nebula because water ice was not in amorphous form. Given the thermodynamic conditions

– 6 –

of the cooling nebula (Fig. 1), water vapor condensed in the outer nebula at about 150 K in the form of *crystalline* ice (Kouchi *et al.* 1994). When temperatures and pressures reached values allowing amorphous ice formation, the remaining amount of water vapor was negligible. Therefore, we propose that volatiles present in Oort cloud comets were trapped in the nebula in the form of solid clathrate hydrates. We will show in Sect 3.3.1 that the gases we consider were incorporated into clathrate hydrates much earlier in the cooling nebula than the epoch when they could have condensed. Note that the mechanism for trapping volatiles could be different for comets formed in the Kuiper Belt. If amorphous ices infalling from the presolar cloud never vaporized beyond 30 AU, Kuiper Belt comets could have trapped volatiles by the mechanism proposed by Bar-Nun *et al.* (1985).

3.1. A simplified composition of the nebula: CNO compounds and noble gases

Our calculations of the temperatures of condensation and clathration in the nebula require an estimate of the mixing ratios with respect to H_2 for the gases we consider. In the present work, we consider only H_2S , CH_4 , CO , N_2 , NH_3 , and the noble gases Ar, Kr and Xe. The main reason is that data on clathrate hydrates are not yet available for other volatiles detected or inferred to be in cometary atmospheres (see discussion in Sect. 7). This composition will also allow us to compare fractionation effects by clathration to elemental and noble gases abundances measured in Jupiter: Gautier *et al.* (2001a,b) show that the formation of clathrate hydrates around 5 AU explains the observed enrichments with respect to solar values.

We assumed that all considered elements are in solar abundance as given by Anders and Grevesse (1989). Relevant values with respect to H_2 are given in Table 1. Concerning sulfur, we assumed that it is entirely in the form of H_2S . We thus did not consider other sulfur-bearing molecules (e.g. OCS , CS , SO , SO_2) detected in significant amount with respect to H_2S in comets (see the review of Irvine *et al.* 2000). We did not take into account either that the formation of troilite FeS in the hot inner nebula consumed some sulfur (Gail 1998). For C-bearing and N-bearing species, we assumed that C was entirely in the form of CO and CH_4 and N in the form of N_2 and NH_3 . In other words, we did not consider volatile or refractory organics. For instance, we ignored volatile hydrocarbons, as C_2H_2 and C_2H_6 , present in comets, but likely to be only trace carriers of carbon in the nebula.

Under these assumptions, the two following relations allow us to compute the partial pressures of CO , CH_4 , N_2 and NH_3 :

$$\frac{CO}{H_2} + \frac{CH_4}{H_2} = \left(\frac{C}{H_2} \right)_{\odot} = 2 \times \left(\frac{C}{H} \right)_{\odot} \quad (1a)$$

$$2 \frac{N_2}{H_2} + \frac{NH_3}{H_2} = \left(\frac{N}{H_2} \right)_{\odot} = 2 \times \left(\frac{N}{H} \right)_{\odot} \quad (1b)$$

– 7 –

The calculations require assumptions regarding the CO/CH_4 and N_2/NH_3 ratios in the early nebula. Results of calculations for assumed values of these ratios are given in Table 1. For CO/CH_4 , we adopted nominal values equal to 5 and to 20. $\text{CO}/\text{CH}_4 = 5$ corresponds to the value measured by ISO in ices towards W33A (Gibb *et al.* 2000). On the other hand, Allamandola *et al.* (1999) review a number of observations and find CO/CH_4 values in interstellar ices from 1 to 40. The N_2/NH_3 ratio in interstellar ices is also very uncertain: Allamandola *et al.* (1999) suggest a ratio varying from 1 to 8. We tentatively adopted N_2/NH_3 values equal to 10 and 100 in Table 1. In order to evaluate the effect of the uncertainty of the N_2/NH_3 ratio upon the estimation of N_2/CO in the nebula, we have plotted in Fig. 2 the variation of this ratio as a function of N_2/NH_3 for $\text{CO}/\text{CH}_4 = 5$ and 20. It can be seen that even the lowest value of $\text{N}_2/\text{NH}_3 = 1$ is equivalent to an N_2/CO value higher by three orders of magnitude than the upper limit of $(0.7\text{--}3) \times 10^{-4}$ obtained by Cochran *et al.* (2000) in comets Hale-Bopp and deVico.

The $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$ mixing ratio is given by the equation:

$$\frac{\text{H}_2\text{O}}{\text{H}_2} = 2 \frac{\text{O}}{\text{H}} \left(1 - \frac{\text{CO}/\text{CH}_4}{\text{CO}/\text{CH}_4 + 1} \times \frac{\text{C}}{\text{O}} \right) \quad (2)$$

$\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$ is then between $1.16 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$, when all carbon is in the form of CO, and $2.0 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$, when all carbon is in the form of CH_4 . For $\text{CO}/\text{CH}_4 = 5$, $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$ is equal to $1.3 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$.

However, the mass of ice available at a given heliocentric distance, which is a key parameter of our analysis, is not necessarily equal to the mass of the vapor which condensed at the same distance. Morfill and Völk (1984) and Stevenson and Lunine (1988) calculated that, in a stationary nebula, turbulent diffusion would result in an enhancement of the mass of ices with respect to the mass of water in vapor phase. Using a more sophisticated approach for describing the evolution of ices, Stepinski and Valageas (1997) concluded that the ice abundance varied in fact with both radial distance and time. A similar result was obtained by Cyr *et al.* (1999) and Supulver and Lin (2000). The importance of these results for the present study will appear in Section 5.3.

3.2. Condensation of volatiles in the nebula

The pure condensation curves, expressed as temperature versus pressure, for the different gases are shown in Fig. 3. Curves describing the temporal evolution of the temperature T versus pressure $P(\text{H}_2)$ in the nebula (i.e., adiabats), corresponding to the nominal model of Hersant *et al.* (2001), are also shown for heliocentric distances of 5, 10 and 15 AU. It can be seen that the condensation of CH_4 , Kr, CO, N_2 , and Ar requires very low temperatures which occurred late in the history of the nebula. At 5 AU, condensation might even occur later than the dissipation of the feeding zone of Jupiter (Hersant *et al.* 2001), resulting in solar Ar and Kr abundances with respect to H_2 in the planet that are not consistent with observations (Owen *et al.* 1999). Note also that N_2 and CO

– 8 –

condense at comparable temperatures, so that the depletion of N_2 with respect to CO observed in comets cannot be explained by this mechanism.

3.3. Trapping volatiles by clathration

3.3.1. Clathrate hydrates

Clathrate hydrates are water-ice compounds in which water molecules form a lattice of cages where *gaseous* molecular species can be trapped. The latter molecules are named *guest* molecules, whereas water molecules forming cages are named *host* molecules. Guest molecules, except the largest ones, within each cavity retain a very high number of internal degrees of freedom (rotation, vibration, etc..., see Sloan 1998). Guest molecules considered in the present work do not exhibit diameters higher than 5 \AA . In this case, two possible structures can exist for clathrate hydrates: structure I and structure II (Sloan 1998). Their properties are summarized in Table 2. The minimum water/guest ratio, which is the maximum number of trapped molecules, is respectively $5\frac{3}{4}$ for structure I and $5\frac{2}{3}$ for structure II. The formation of a structure I or II depends on the properties of the guest molecules which stabilize the cavities.

Clathrate hydrates considered in this work are listed in Table 3. In addition we considered the simple stoichiometric hydrate $NH_3.H_2O$, in which both nitrogen and hydrogen undergo hydrogen bonding and form a common lattice structure.

Clathrate hydrates are stable only under given conditions of temperature and partial pressure, which depend on the species under consideration. Lunine and Stevenson (1985) calculated the curves of stability of various clathrate hydrates in the temperature-pressure space. The equations are in the form $\log P = A/T + B$, where P and T are the temperature and pressure, respectively, and where A and B are constants determined by fitting laboratory measurements (Lunine and Stevenson 1985). The curve of stability of CO has been specially recalculated for this paper.

Such curves are shown in Fig. 4 for the species listed in Table 3 and for mixing ratios with respect to hydrogen given in Table 1. The stability curve of the hydrate of NH_3 is also shown. The domains of stability of clathrates are those located below each curve. Note that the abscissa refers to the H_2 pressure in the nebula. The adiabats of the nebula at $R = 5, 10$ and 15 AU are also shown. Clathration becomes possible as soon as the adiabat intercepts the curve of stability for the species under consideration. Figure 4, compared to Fig. 3, shows that volatiles detected in comets and studied in the present work did not originate from condensation in the nebula. Rather, they were trapped in the form of clathrate hydrates (or a stoichiometric hydrate in the case of NH_3), in the following chronological order throughout the nebula: NH_3 , H_2S , Xe , CH_4 , Xe , CO , N_2 , Kr and Ar .

– 9 –

3.3.2. Clathration versus abundance of water ice

The formation of clathrate hydrates consumes water ice, which may be or may not be locally available in a sufficient amount. Two possible scenarios are possible:

- **High-mass ice scenario.** The local abundance of water ice was not limited, that is, was large enough to trap all available CO and N₂ gases in the form of clathrate hydrates. Other gases have lower abundances than CO and N₂, and were trapped as well. Since CO and N₂ were accreted as clathrates at almost the same epoch (Fig. 4), the N₂/CO ratio expected in this case in comets should not be significantly different from that in nebular gas at early epochs. This scenario requires an amount of water ice such that H₂O/H₂ $\sim 2.8 \times (O/H)_{\odot}$ per number, at least. This minimum value can be estimated as follows: trapping one molecule of CO requires 5.75 molecules of H₂O, since the CO clathrate hydrate is of type I (Table 3), trapping one molecule of CH₄ requires the same number of water molecules, and trapping one molecule of N₂ requires 5.66 water molecules since the N₂ clathrate is of type II. On the other hand, the NH₃ hydrate requires only one molecule of H₂O (two for the dihydrate, which is technically stable but kinetically difficult to form). The other elements we considered are in negligible amounts with respect to C and N. Summing all molecules of water required for incorporating the volatiles results in the minimum H₂O/H₂ value mentioned above, a number which depends only slightly upon the assumed CO/CH₄ and N₂/NH₃ ratios. This minimum value is a lower limit since it is calculated under the assumption that all available cages are occupied. An incomplete occupancy would require additional water ice. Gautier *et al.* (2001a,b) showed that this minimum H₂O/H₂ value allows the trapping of all C, N, S, Ar, Kr, and Xe elements present in the nebula at 5 AU in clathrates, and leads to enrichments with respect to the solar abundance in Jupiter consistent with the observations.
- **Low-mass ice scenario.** The H₂O/H₂ ratio was less than $2.8 \times (O/H)_{\odot}$. In this case, a large amount of the available ice was first consumed in the cooling nebula to form the NH₃.H₂O hydrate and the H₂S and CH₄ clathrates. The reservoir of ice was then not large enough to trap all remaining volatiles. The limitation on the abundance of water was crucial in determining the ratio of CO and N₂ which form clathrates at similar temperatures (Fig. 4). The theory of clathrates (Lunine and Stevenson 1985) then predicts that CO has a higher propensity to form clathrate hydrates than N₂ does. This results in a very low N₂/CO ratio in ices clathrated in the nebula, and could explain the deficiency in N₂ in comets.

4. Calculations

In the present section, we calculate, following Lunine and Stevenson (1985), the relative abundance of guests incorporated in clathrate hydrates from a coexisting gas of specified composition. In contrast to these authors, however, the clathration is investigated in the context of an evolving

– 10 –

turbulent nebula in which both the temperature and density of gases are decreasing with time. Calculations are made in the high-mass ice and low-mass ice scenarios described above.

4.1. High-mass ice scenario

In this scenario, the whole mass of volatiles considered in this paper is trapped in the form of hydrates or clathrate hydrates. The calculation of the abundance of the trapped species is then as follows.

The mass of the guest molecule under consideration i within a ring of width δR and centred at the heliocentric distance R is given as a function of the total surface density Σ (assumed to be that of H_2) by:

$$M_i = \Sigma(R, t_i) \times X_i \times 2\pi R \delta R, \quad (3)$$

where t_i is the time when clathration occurs, X_i is the mixing ratio of the guest molecule i with respect to H_2 in the nebula, at the distance R .

The mass of ice at the time t_{cond} when water condensation occurs is:

$$M_{\text{H}_2\text{O}} = \Sigma(R, t_{cond}) \times X_{\text{H}_2\text{O}} \times 2\pi R \delta R, \quad (4)$$

where $X_{\text{H}_2\text{O}}$ is the mixing ratio of water in the nebula.

Combining the two previous equations, the relative abundance F_i of species i with respect to water is:

$$F_i = \frac{\Sigma(R, t_i)}{\Sigma(R, t_{cond})} \times \frac{X_i}{X_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (5)$$

Since the volatiles are always accreted into clathrates later than the epoch when water condenses (Fig. 4) and since the surface density continuously decreases with time, Equation 5 shows that the relative abundances of trapped volatiles with respect to water are always less than their abundances in the early nebula prior to the condensation of water. On the other hand, the ratio of CH_4 to Xe remains solar since the two species are clathrated almost simultaneously and completely.

4.2. Low-mass ice scenario

This is the case where the local amount of ice was limited ($\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2 < 2.8 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$). NH_3 , H_2S , and CH_4 present in gas phase were fully accreted as hydrates and clathrates. However, there was not enough water ice to trap all CO and N_2 species, and competition between the clathration of CO and N_2 occurred (Sect. 3.3.2). In order to determine the relative abundances of CO and

– 11 –

N_2 trapped in the clathrate, we must use the statistical theory of clathrate formation, whereas, for gases trapped earlier than CO, the calculation is the same as that developed in Sect. 4.1.

Statistical thermodynamics provides a link between the molecular crystal structure and the macroscopic thermodynamical properties of clathrate hydrates. The first accurate model was generated by Van der Waals and Platteuw (1959) and revisited by McKoy and Sinanoğlu (1963). From the partition function, one obtains (see Appendix for the complete study) that the occupancy fraction of a species K for a i type cage can be written:

$$y_{K_i} = \frac{C_{K_i} P_K}{1 + \sum_J C_{J_i} P_J}, \quad (6)$$

where P_K, P_J denotes the partial pressure of K, J species, and C_{K_i}, C_{J_i} are the *Langmuir constants* of species K, J in cage i .

The Langmuir constants are determined by integrating the molecular potential within the cavity:

$$C_{K_i} = \frac{4\pi}{kT} \int_0^{R_c} \exp\left(-\frac{w(r)}{kT}\right) r^2 dr \quad (7)$$

where R_c is the radius of the cage and $w(r)$ is the spherically averaged potential which describes all the pair interactions guest-host in a cell. As suggested by McKoy and Sinanoğlu (1963) and detailed in the Appendix, we assumed that the pair potential can be represented by the Kihara core potential. By fitting experimental data on clathrate dissociation, we can determine the parameters describing the Kihara potential, then compute the Langmuir constants, and then determine the relative propensities for trapping among the different volatiles.

In order to avoid the somewhat tedious calculation of the Langmuir constants of all gases, we can define the relative abundance of species K and L by the ratio:

$$f_{KL} = \frac{a_{K_1} y_{K_1} + a_{K_2} y_{K_2}}{a_{L_1} y_{L_1} + a_{L_2} y_{L_2}}, \quad (8)$$

which becomes, introducing the Langmuir constants of K and L species (Eq. 7):

$$f_{KL} = \left(a_{K_1} \frac{C_{K_1} P_K (1 + C_{K_2} P_K + C_{L_2} P_L)}{1 + C_{K_1} P_K + C_{L_1} P_L} + a_{K_2} C_{K_2} P_K \right) \times \left(a_{L_1} \frac{C_{L_1} P_L (1 + C_{K_2} P_K + C_{L_2} P_L)}{1 + C_{K_1} P_K + C_{L_1} P_L} + a_{L_2} C_{L_2} P_L \right)^{-1}. \quad (9)$$

Here, the subscripts 1 or 2 indicate whether the clathrate is of structure I or II, respectively. a_{X_y} is the number of type y ($y = 1$ or 2 for structures I or II) cages formed by species X , with $X = K, L$.

– 12 –

For the purpose of our calculations, we only needed the parameters of the Kihara potential for CO and molecules for which the clathration began after that of CO, namely N₂, Ar and Kr (see Fig. 4). These data are given in Table 4. Abundances of N₂, Ar and Kr (i.e., f_{KL} values) were computed relative to CO ($L = \text{CO}$) using Eq. 8. Abundances relative to water could be then calculated from the amount of available water ice, taking into account the number of water molecules participating to clathrates of H₂S, CH₄ and Xe and to the NH₃.H₂O hydrate.

5. Results

5.1. Radial and temporal dependence

Figure 5 shows calculated abundances of clathrated volatiles with respect to water for the composition of the nebula given in Table 1 with CO/CH₄ = 5 and N₂/NH₃ = 10. For CO/CH₄ = 5, the H₂O/H₂ ratio at the time of condensation is equal to 1.3 (O/H)_⊙. We assume here that the amount of water ice results only from the condensation (i.e., we neglect diffusion processes). The calculations correspond to the low-mass ice scenario.

We considered clathrates formed between 5 and 23 AU, and at epochs between 0.1 and 0.7 Myr after the formation of the Sun. The calculations are not made beyond 23 AU in the nebula because, in the nominal model of Hersant *et al.* (2001) that we use, water never vaporizes at these distances. Figure 5 shows that, as expected, the heliocentric distances where the various species are accreted as clathrates decrease with time. Another result apparent in Fig. 5 is that the abundances of trapped volatiles do not vary significantly with heliocentric distance or time. This behaviour results from the assumption that the amount of water ice is the same everywhere in the nebula and from the fact that the curves of stability are parallel, and the nebular adiabats are also parallel (Fig. 4).

Figure 5 also shows that the H₂O/H₂ ratio of $1.3 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$ in these calculations results in a very small amount of N₂ accreted as clathrate compared to the amount of clathrated CO. In the following, we will see that varying the mass of water ice with R in the nebula results in dramatic variations for the amount of trapped CO and N₂. In contrast, the abundances of NH₃, H₂S, and CH₄ incorporated into clathrates (or stoichiometric hydrates for NH₃) are not very sensitive to this parameter, as long as the H₂O/H₂ ratio is larger than $0.2\text{--}0.7 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$. These limits of H₂O/H₂ = $0.2 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$ (respectively $0.7 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$) correspond to the amount of water ice required to fully trap all NH₃, H₂S, and CH₄ gases into clathrates under the assumption of CO/CH₄ = 20 (respectively 5) in the gas phase. For H₂O/H₂ ratios larger than these values, calculated NH₃/H₂O, H₂S/H₂O, and CH₄/H₂O ratios in clathrates are inversely proportional to the assumed H₂O/H₂ value.

– 13 –

5.2. Comparison with molecular abundances in comets

Table 5 shows abundances of CO, CH₄, N₂, NH₃ and H₂S with respect to water measured in a number of comets. Comets have been arranged from top to bottom in order of decreasing CO abundance.

5.2.1. The case of H₂S, NH₃, and CH₄

As mentioned above, these three species were the first to be clathrated (NH₃.H₂O formation for NH₃) in the cooling nebula, and predicted abundances are not very sensitive to the assumed H₂O/H₂ ratio. Tables 6 and 7 show the results of calculations with H₂O/H₂ = 1.3 × (O/H)_⊙.

The H₂S abundance with respect to H₂O has been measured in nine comets among those listed in Table 5, and varies from 0.4 % to 1.5%. The value calculated from our model is 1.4% (Fig. 5, Table 7), somewhat higher than most of the observed values. However, we have mentioned in Section 4 that we ignored in our calculations that S in the nebula could be in the form of OCS, SO₂, CS₂, and H₂CS, which have been detected in comets. Nor did we take into account the formation of troilite FeS in the nebula. We have then overestimated the abundance of H₂S in the nebula, and accordingly the amount of trapped H₂S.

The abundance of NH₃ was estimated in three comets only, with a value varying from 0.2 to 1.5%. Our model predicts a NH₃/H₂O ratio in enclathrated ices of 0.4% and 1.3% for N₂/NH₃ = 10 and 3, respectively.

CH₄ has been detected in five comets in the sample, and upper limits of 0.8%, 1.6%, and 0.3% have been derived in 1P/Halley, C/1999 T1 (McNaught-Hartley), and C/1990 K1 (Levy), respectively. If we exclude the measurement of Mumma *et al.* (2001a) in C/1999 S4 (LINEAR), a comet which the authors conclude has an atypical composition and which fragmented several times prior to its final breakup in late July 2001, the observed CH₄ abundance varies from 0.6% to 1.4%. Therefore, there is no firm evidence, taking into account measurement uncertainties, of large differences in the CH₄ abundance among comets. Our model predicts an abundance of the CH₄ trapped by clathration equal to 3.7% for CO/CH₄ = 5, and of 1.1 % for CO/CH₄ = 20.

5.2.2. The case of CO

CO has been detected in many comets. CO abundances for eleven comets are compiled in Table 5. There is observational evidence in comets 1P/Halley and C/1995 O1 (Hale-Bopp) that part of the CO observed in the coma is produced by a distributed source (Eberhardt *et al.* 1987; DiSanti *et al.* 2001). For these two comets, and possibly for comet Hyakutake, the lower value given in Table 5 may better reflect the abundance of CO ices in the nucleus. For the other comets, the

– 14 –

question of the abundance of the CO released from the nucleus is open. However, Table 5 shows that the CO abundance exhibits large variations. Even if we ignore the very low value measured in C/1999 S4 (LINEAR), the CO/H₂O varies from less than 1.7 % to possibly $\sim 15\%$, taking into account distributed sources. Such a large variation cannot be explained by our model if we assume that the amount of water ice initially available had the same value throughout the nebula. We propose an interpretation of this variation in the following section.

5.3. The enigma of the low N₂/CO ratio

From visible observations with high spectral resolution, Cochran *et al.* (2000) derived upper limits on the N₂⁺/CO⁺ ratio in comets 122P/deVico and Hale-Bopp. Assuming that the main mechanisms for production and loss of both ions are respectively photoionization and dissociative recombination (Wyckoff *et al.* 1991a), the upper limits of $(1-3) \times 10^{-4}$ are, within 10% of uncertainty, equal to the upper limits for N₂/CO ratios. They are shown on Fig. 6. A similar upper limit was recently derived for comet C/2002 C1 (Ikeya-Zhang) (A. Cochran, private communication). Figure 6 shows the calculated N₂/CO ratio for a mass of ices corresponding to a H₂O/H₂ ratio equal to $1.3 \times (O/H)_{\odot}$ (low-mass ice scenario), and CO/CH₄ = 5, N₂/NH₃ = 10 initially in gas phase. The calculated N₂/CO value is 4.2×10^{-6} , which is well below the upper limits deduced in comets deVico and Hale-Bopp.

On the other hand, the values derived in other comets in which N₂⁺ has been tentatively detected are much higher than the upper limits derived for comets deVico and Hale-Bopp (Cochran *et al.* 2000). Comet C/1987 P1 (Bradfield), for instance, exhibits N₂⁺/CO⁺ ~ 0.015 (Lutz *et al.* 1993; Cochran *et al.* 2000). Cochran *et al.* (2000) also report estimates of N₂⁺/CO⁺ made by Arpigny (personal communication to these authors) from photographic observations of Oort cloud comets obtained since 1908. Although it is difficult to evaluate the quality of these measurements, it is striking to note that most values exceed 0.02 and some are as high as 0.09. Finally, Wyckoff *et al.* (1991a) derived a N₂⁺/CO⁺ ratio of the order of 0.0025 in comet Halley. There is thus suspicion that the N₂/CO ratio varies substantially among comets, although A. Cochran (private communication) argues that the feature attributed to N₂⁺ could be due in fact to C₃.

In order to interpret these results, we have calculated N₂/CO under conditions in which our high-mass ice scenario would be valid, which requires H₂O/H₂ > $2.8 \times (O/H)_{\odot}$. Let assume CO/CH₄ = 5 and N₂/NH₃ = 10 in the vapor phase before clathration. Using Eq. 5 with H₂O/H₂ = $2.8 \times (O/H)_{\odot}$, we then obtain a N₂/CO ratio in clathrates of 0.170, close to the N₂/CO value of 0.179 in gaseous form in the early nebula. This result can be compared to the observations of comet Bradfield and comet Halley in Fig. 6. The N₂⁺/CO⁺ ratios measured in these two comets are lower than the calculated value by factors of ~ 10 and 70. Similar conclusions would have been obtained starting with different CO/CH₄ and N₂/NH₃ values in the gaseous phase (Fig. 2).

Our calculations shown on Fig. 6 clearly show that the N₂/CO ratio in clathrates depends on

– 15 –

the available amount of ice in the nebula. This prompted us to calculate the dependence of the CO/H₂O and N₂/H₂O ratios in clathrated ices on the H₂O/H₂ ratio. This exercise is all the more interesting because, as previously mentioned, Stepinski and Valageas (1997), Cyr *et al.* (1999) and Supulver and Lin (2000) argue that the amount of water ice must have varied with R and t in the solar nebula, and could have locally exceeded the so-called solar abundance.

Figure 7a shows the CO and N₂ abundances relative to the total available water ice (on a logarithmic scale), as a function of the H₂O/H₂ ratio, which sets the amount of water ice. For clarity, this last quantity is expressed with respect to the solar O/H ratio. The CO/H₂O and N₂/H₂O ratios are those expected to be present in cometary nuclei. In other words, it is assumed that all locally available water ice is trapped in cometesimals, even if it exceeds the amount required to trap all volatiles.

At low H₂O/H₂ ratios, the CO/H₂O ratio first rapidly increases when the amount of water ice increases. The maximum amount of trapped CO is reached for a water abundance of $2.5 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$, and increases with increasing CO/CH₄ (Fig. 7b). At this point, N₂ is not yet substantially trapped. The maximum trapped N₂ is reached for a solar abundance of $2.8 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$, as previously mentioned. Additional water ice then progressively decreases the relative abundances of CO and N₂ with respect to H₂O since there is no more CO and N₂ in the gas phase. As shown on Fig. 7a, for H₂O/H₂ > $2.8 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$ the ratio N₂/CO remains constant as the H₂O abundance increases.

Our calculations summarized in Fig. 7 suggest that at least two families of comets could exist with regard to the N₂/CO ratio. Comets formed in the region of the nebula where the H₂O/H₂ ratio was less than $2.8 (\text{O}/\text{H})_{\odot}$ should be strongly depleted in N₂ with respect to CO. This would explain the low N₂/CO ratios in comets Hale-Bopp and deVico. The CO abundance for this family may strongly vary from a comet to another, depending on the amount of water ice. Comet Hale-Bopp, which is rich in CO, might have been formed in a region where H₂O/H₂ is close to $2.5 (\text{O}/\text{H})_{\odot}$. On the other hand, comets formed in regions of the nebula where H₂O/H₂ exceeds $2.8 (\text{O}/\text{H})_{\odot}$ should exhibit nearly solar N/C ratios. Such comets seem to exist in the list provided by Arpigny (private communication to Cochran *et al.* 2000), under the assumption that the identification of N₂⁺ is correct. For instance, the N₂⁺/CO⁺ in comet C/1947 S1 (Bester) is given as between 0.05 and 0.09, corresponding to a depletion of only ~ 2.5 with respect to the nebular value of 0.179.

Comets formed around 5 AU should exhibit nebular N₂/CO ratios, if we assume that they have the same composition as the planetesimals that enriched the envelope of Jupiter in heavy elements. This statement is based on the calculations of Gautier *et al.* (2001a,b) who showed that the trapping of volatiles in the form of clathrate hydrates in the feeding zone of Jupiter can explain the C/H, N/H, Ar/H, Kr/H and Xe/H enrichments (about a factor 2–3) with respect to the solar abundance measured by the Galileo probe (and S/H if sulfur was only partly in the form of H₂S in the nebula). The C/N/S/Ar/Kr/Xe/S ratios observed in Jupiter are approximately solar, which corresponds to the high-mass ice scenario. According to the analysis of Hersant *et al.* (2001), comets formed near Jupiter could exhibit HDO/H₂O ratios significantly lower than the values measured in comets

– 16 –

Halley, Hyakutake, and Hale-Bopp – indeed, even lower than the SMOW value on Earth.

Another conclusion of our calculations is that the CO abundance measured in comets is related to the abundance of ice available in the nebula, at the heliocentric distance where cometsimals were produced. However, the amount of trapped CO depends also upon the CO/CH₄ ratio in the nebula, as can be seen on Fig. 7. Considering present uncertainties in modeling and the difficulty in constraining the primordial CO content in cometary nuclei, it is premature to attempt to derive from observations a precise value of the CO/CH₄ in the nebula. High abundances of CO measured in comets Hale-Bopp and McNaught-Hartley would favor large CO/CH₄ ratios in the nebula, however. Comet C/1999 H1 (Lee) and C/2001 A2 (LINEAR) exhibit a low CO abundance and a CH₄ abundance similar to that measured in CO rich comets, namely CO/CH₄ ratios between 1 and 5. This would be consistent with the trapping of CH₄ earlier than that of CO. Gaseous methane present in the nebula in the region of formation of this comet could have been entirely trapped while CO gas was not, due to the deficiency of water ice. Finally, comet C/1999 S4 (LINEAR), which presents both low CO/H₂O and CH₄/H₂O, appears atypical in this context.

6. Predictions for noble gases abundances

Noble gases have not yet been firmly detected in comets. Stern *et al.* (2000) claimed the detection of argon in comet Hale-Bopp, but the signal to noise ratio is very low. Feldman *et al.* (2001a,b) did not detect ³⁶Ar (the main isotope) in comet C/2001 A2 (LINEAR) using the Far Ultraviolet Spectroscopic Explorer (FUSE). They derived an upper limit Ar/H₂O < 0.02%, which is much lower than the Ar/H₂O value inferred by Stern *et al.* (2000) in comet Hale-Bopp. This upper limit corresponds to a ratio Ar/O less than 10% of the solar value (³⁶Ar/O)_⊙ = 0.36%.

Future measurements expected from space missions to comets should test the scenario we propose for trapping volatiles. Anticipating this prospect, we have calculated the abundances of Ar, Kr and Xe that could be trapped in comets in the form of clathrate hydrates. We excluded neon because it is a very poor clathrate former (Lunine and Stevenson 1985). Noble gases are assumed to be in solar abundance in the nebula. Figure 8 shows the abundances of noble gases trapped in clathrates with respect to water, as a function of heliocentric distance and at the epochs of their clathration. Calculations are made for a H₂O/H₂ mixing ratio in the nebula equal to 1.3 × (O/H)_⊙. Xenon behaves roughly as methane in its propensity for being trapped, so that Xe/O is only slightly less than the solar Xe/O ratio. In contrast, argon is strongly depleted with respect to the Ar/O solar ratio. Although krypton is trapped at a temperature low relative to that for xenon, its Langmuir constant is so high that it can be easily incorporated into water ice, even for the assumed low abundance of water. As for C and N-bearing species (Fig. 5), the abundances of trapped Ar, Kr and Xe do not vary with *R* and *t*, when the amount of available ice H₂O/H₂ is taken as constant with *R*. However, we have shown in the previous section that the interpretation of cometary observations requires that the amount of water ice must vary with *R*. Hence, Fig. 9 shows the variation of Ar/H₂O, Kr/H₂O and Xe/H₂O ratios as a function of the H₂O/H₂ ratio

– 17 –

expressed relative to $(\text{O}/\text{H})_{\odot}$.

The case of argon is especially interesting since its relative abundance jumps to potentially detectable values when the water ice is abundant enough. The upper limit obtained by Feldman *et al.* (2001a,b) in comet C/2001 A2 (LINEAR) is lower than the Ar/O ratio calculated in the high-mass ice scenario. However, it is consistent with our calculations in the low-mass ice scenario. This scenario also predicts CO/H₂O ratios as low as 1–4%, as measured in this comet (Table 5), for low values of H₂O/H₂ (Fig. 7). This suggests that the Ar/H₂O ratio measured in comets in the future could be an efficient tracer of the original distribution of ice throughout the solar nebula. Figure 9 shows that, in comparison with Ar, the abundances of Kr and Xe do not vary substantially with the amount of available ice. The Kr/Xe ratio is predicted to be solar in all Oort cloud comets.

7. Discussion

The assumption that volatiles were trapped in water ice in the form of clathrate hydrates during the nebular phase of planet formation allows us to explain the strong depletion of N₂ with respect to CO observed in several comets. The same mechanism provides an interpretation of the diversity of cometary CO abundances. It is also consistent with the roughly uniform enrichment in heavy elements observed in Jupiter with respect to the solar abundance (Gautier *et al.* 2001a,b).

However, our theory assumes the four following conditions to be valid: (i) the nebula continuously cooled down with time from a temperature higher than that of the condensation of water to a temperature as low as about 45 K (at 15 AU); (ii) water ice condensed in crystalline form; (iii) clathrate hydrates were stable over the temperature and density distributions that prevailed in the nebula; (iv) a sufficient amount of microscopic icy grains was present in the solar nebula so that clathration of at least some CO was achieved.

Condition (i) is consistent with observations of disks surrounding young stars (Hartmann *et al.* 1998).

The validity of condition (ii) is attested to by crystallographic laboratory measurements and the careful theoretical analysis of Kouchi *et al.* (1994), and is consistent with the detection of abundant crystalline ices in the cold part of the dusty circumstellar disk surrounding the young star HD 142527 (Malfait *et al.* 1999).

The validity of condition (iii) is based on a number of laboratory experiments made two or three decades ago on all species considered in the present work, and on some others. These experiments are listed in Lunine and Stevenson (1985). Although some measurements were made at low temperature and pressure (e.g., the clathrate of CH₄ observed at 82 K and 2×10^{-7} bar), most were at higher temperature. Experiments performed under solar nebula conditions are desirable for H₂S, CO, N₂, and noble gases, in order to improve the accuracy of the stability curves of their clathrates. We showed that, while both condensation and clathration could be envisaged *a priori* in the solar

– 18 –

nebula, condensation was unlikely for the species studied in the present work. The question remains open for most of the other volatiles detected in comets. In addition to CH₄, N₂, CO, H₂S and noble gases, available data on the stability of clathrate hydrates encompass only CO₂, C₂H₄, and SO₂. The existence of the clathrate of CH₃OH, a major compound of cometary atmospheres, is indicated from electronic microscopy (Blake *et al.* 1991) and far-infrared spectroscopy (Moore and Hudson 1994), but no laboratory dissociation pressures are available. Further experimental investigations relative to the clathration of species detected in comets are definitely needed in order to develop a more general theory of the origin of volatiles in comets.

The validity of condition (iv) is more difficult to establish. Clathration is fast in laboratory experiments provided techniques are used to replenish microscopic ices, with consequently high surface areas (see references in Lunine and Stevenson 1985). For instance, Barber and Edge (1967) obtained essentially complete conversion of the ice to clathrate hydrates of noble gases by agitating the water ice with steel balls. Schmitt (1986) formed clathrate hydrates by continuously pulverizing ice grains. However, this does not tell us whether clathration was efficient in the solar nebula. A large cross section of fresh microscopic ice must have been in contact with the guest molecules when the thermodynamic conditions for clathration were satisfied, because the diffusion of gas through large icy grains to form clathrate is slow at the relevant temperatures of the nebula (Lunine and Stevenson 1985). Unfortunately, the evolution of solid particles in the solar nebula is far from well understood (see, for a review, Weidenschilling and Cuzzi 1993). A few considerations suggest that clathration was enabled in the nebula. Once formed, grains eventually agglomerated with other grains embedded in the nebula and therefore grew. When grains reached centimeter to meter sizes on timescales of typically 10³ to 10⁴ yr (Weidenschilling and Cuzzi 1993), they decoupled from the gas of the nebula and entered Keplerian orbits (Dubrulle *et al.* 1995), where they contributed to the growth of cometsimals. The most recent numerical model of the formation of comets has been published by Weidenschilling (1997). For our purpose, the key point of that work is that collisions continuously replenished the supply of smaller particles at all sizes, including the micrometric grains most important for clathration. Unfortunately, the efficiency of this process is model dependent, the amount of replenished particles as a function of size is uncertain, and no appropriate laboratory experiments are available so far. A sophisticated analysis of the physics of collisions of grains and aggregates can be found in Dominik and Tielens (1997). This work illustrates the complexity of the phenomena which should be taken into account in a rigorous theoretical approach to the coagulation and disruption of dust. Radiometric continuum observations of disks around young (T Tauri or Herbig Ae) stars suggest massive dust disks of millimeter-sized grains (Beckwith *et al.* 2000), which disappear at an age of a few 10⁶ to 10⁷ yr (Natta *et al.* 2000; Haisch *et al.* 2001). We conclude that, at this point, there is no strong argument against the clathration of a significant amount of water ice in the region of formation of comets. We believe that the comparison of our calculations with the N₂/CO ratios derived in comets today supports our scenario. Note that no other convincing explanation of the N₂ deficiency has been proposed so far.

The principal objective of our modelling was to explain the low N₂/CO ratio measured in

– 19 –

comets. A by-product of this analysis is that it provides abundances relative to water of a number of volatile compounds observed in cometary atmospheres. However, explaining the whole set of data concerning the volatile composition of comets and its overall diversity is beyond the scope of the present paper. We are restricted from doing so in part because we assumed a very simplified nebular composition. This may affect the results of our calculations in different ways. For species which incorporated first into clathrates in the cooling nebula, the consequences of our simplification are easily quantified. As seen in Table 6, calculated NH_3 and CH_4 abundances in clathrated ices increase proportionally to the NH_3 and CH_4 abundances assumed to be present initially in the gas phase. Thus, the accuracy of our predicted NH_3 and CH_4 abundances is affected by the fact that our carbon and nitrogen budgets do not include refractory organics and several volatile organics detected in comets. This adds to the uncertainty caused by the poorly known N_2/NH_3 and CO/CH_4 ratios in the early nebula. We note that our calculated CH_4 abundances in clathrate are compatible with the mean cometary values when $\text{CO}/\text{CH}_4 \sim 20$ in gas phase. We anticipate that including in our model other volatile organics present in comets, such as C_2H_2 or C_2H_6 , would result in a similar agreement for those species, and provide a slightly higher CH_4/CO gas phase ratio. The same qualitative discussion holds for NH_3 and H_2S . For NH_3 , we note that NH_3 abundances measured in comets would suggest $\text{N}_2/\text{NH}_3 \sim 10$ in the early nebula, but it may be premature to draw firm conclusions. Regarding H_2S , in addition to other sulfur-bearing species detected in comets, we did not take into account the fraction of sulfur converted into troilite (FeS) in the hot inner nebula, which affected the sulfur budget in the outer nebula via turbulent diffusion. This implies that our calculations somewhat overestimate the amount of H_2S in the nebula and thus in comets. Interestingly enough, most measured $\text{H}_2\text{S}/\text{H}_2\text{O}$ abundances are lower by a factor 2 to 4 than the calculated value of 1.4%, though there is close agreement between measurements and predictions for comet Hale-Bopp and C/2001 A2. The diversity of H_2S abundances relative to water in comets, as well as variations observed for NH_3 and CH_4 (by a factor of 5 at most, if we exclude comet C/1999 S4) are difficult to predict in the context of our model, unless we invoke spatial inhomogeneities in nebular composition within the formation regions of comets, or large variations in the water ice distribution. In the latter case, we would not expect variations in the relative abundances of $\text{H}_2\text{S}/\text{NH}_3/\text{CH}_4$ between comets, but only variations in the abundances relative to water (Sect. 5.1). Additional cometary data are required to determine whether such a trend is present.

The abundances of other gases incorporated as clathrates and not included in this study may be readily estimated. If their clathration was not limited by the available amount of water ice, the abundances in clathrates should largely reflect initial gas phase abundances in the early nebula, as computed for CH_4 , NH_3 and H_2S . As clathration consumes water, neglecting other guest species in our model somewhat underestimates the minimum amount of water ice required for the full trapping of CO and N_2 , here found to be $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2 = 2.8 \times (\text{O}/\text{H})_{\odot}$ with our simplified nebula composition. On the other hand, this should not significantly affect our conclusions concerning the N_2/CO ratio in clathrated ices.

The key point of our interpretation of the variations of the $\text{CO}/\text{H}_2\text{O}$ and N_2/CO abundances in

– 20 –

comets is that the distribution of water ice varied substantially with radius throughout the nebula. This is in agreement with the results of a number of other theoretical treatments, as previously mentioned. The oversolar abundance of water required to interpret the composition of Jupiter formed at 5 AU may imply a subsolar abundance in other regions of the nebula, inward of 5 AU and perhaps in the regions of formation of Saturn, Uranus and Neptune where Oort cloud comets presumably formed. Under the assumption that planetesimals and cometesimals had a similar composition, measurements of noble gases abundances by probes launched into the atmospheres of these three planets could permit us to test our scenario without conducting direct measurement of the oxygen abundances, which would require technologically challenging deep probes.

A more direct way for testing our model would be of course to measure the abundances of CO, N₂, and noble gases in a significant sample of comets. Such measurements will be obtained from planned space missions toward Jupiter family comets, presumably formed in the Kuiper Belt. The determination of their composition will be certainly quite informative, but the interpretation could be ambiguous because volatiles outgassing from such comets may have been initially trapped in amorphous ice embedded in the presolar cloud. Therefore, observations of Oort cloud comets from Earth orbiting and ground based observatories are essential for testing our theory.

Acknowledgments

We thank Michael Mumma for providing us with preliminary results on recent cometary observations, Anita Cochran for kindly informing us on her recent observations of comet C/2002 C1 (Ikeya-Zhang), and Bernard Schmitt for very helpful discussions on clathrate hydrates. Jonathan Lunine gratefully acknowledges support from the NASA Origins of Solar Systems program.

Appendix

Statistical theory of clathrate formation

Four fundamental assumptions have been made in developing the model (Sloan 1998):

1. The free energy of the water lattice is independent of the occupation of the cavity. This implies that guest molecules do not distort the cavity. This assumption is valid for small gas molecules like CH₄, but can be questioned for molecules like CO₂, for instance.
2. Each encaged molecule is confined in a cavity which can contain at most one guest. This guest can rotate freely within the cage.
3. There is no interaction between encaged molecules. This means that the partition function describing the motion of each guest molecule is independent of the number and type of other

– 21 –

encaged molecules. This is valid for moderated-size guest molecules (Davidson 1971).

4. No quantum effects are needed ; classical statistics are valid. This is not true for the smallest molecules H₂, He and Ne.
5. We assume that the stability of clathrate hydrates was not affected in the nebula by any ion bombardment, or X-ray and UV radiations. Fromang *et al.* (2002) recently showed that the ionization at early epochs of the solar system was negligible at heliocentric distances beyond 0.2 AU.

Notations The system studied is the water lattice containing N_Q molecules, in a volume V and at a temperature T , in which absolute chemical activities of the gas J molecules are λ_J (where J goes from 1 to M , M being the number of different gases). As a convenient starting point, the grand canonical partition function is developed from the canonical partition function. Table 8 summarizes the main notations used hereafter.

Determination of the partition function The canonical function is written as the product of three factors:

1. the exponential of the empty lattice free energy divided by the Boltzmann's constant and the temperature:

$$\exp\left(\frac{-F^\beta}{kT}\right) \quad (1)$$

2. the number of way to distribute N_{1_i}, \dots, N_{M_i} indistinguishable guest molecules in $\nu_i N_Q$ distinguishable type i cavities with a maximum of one guest per cavity:

$$\frac{(\nu_i N_Q)!}{\left(\nu_i N_Q - \sum_J N_{J_i}\right)! \prod_J N_{J_i}!} \quad (2)$$

3. the product of all individual partition functions to the power of the number of J particles in a cavity i :

$$\prod_J h_{J_i}^{N_{J_i}} \quad (3)$$

Multiplying factors 1, 2 and 3 over type i cavities, we obtain, following Van der Waals and Platteuw (1959), the canonical partition function:

$$Q = \exp\left(\frac{-F^\beta}{kT}\right) \prod_i \left\{ \frac{(\nu_i N_Q)!}{\left(\nu_i N_Q - \sum_J N_{J_i}\right)! \prod_J N_{J_i}!} \prod_J h_{J_i}^{N_{J_i}} \right\} \quad (4)$$

- 22 -

In order to obtain the grand canonical partition function Ξ , we use the standard transformation:

$$\Xi = \sum_N Q e^{\mu N/kT} = \sum_{N_{J_i}} Q \prod_{i,J} \lambda_{J_i}^{N_{J_i}}, \quad (5)$$

which gives

$$\Xi = \exp\left(\frac{-F\beta}{kT}\right) \sum_{N_{J_i}} \prod_i \left\{ \frac{(\nu_i N_Q)!}{(\nu_i N_Q - \sum_J N_{J_i})! \prod_J N_{J_i}} \prod_J h_{J_i}^{N_{J_i}} \lambda_{J_i}^{N_{J_i}} \right\} \quad (6)$$

Using the binomial formula, Equation 6 can be written finally:

$$\Xi = \exp\left(\frac{-F\beta}{kT}\right) \prod_i \left(1 + \sum_J h_{J_i} \lambda_{J_i}\right)^{\nu_i N_Q}. \quad (7)$$

From this equation, we can derive all the thermodynamical quantities of the system, using the following relations:

$$-dF_{tot} = d(kT \ln \Xi) = SdT + PdV + \sum_K N_K d\mu_K - \mu_Q dN_Q \quad (8a)$$

$$= SdT + PdV + \sum_K kT N_K \frac{d\lambda_K}{\lambda_K} - \mu_Q dN_Q \quad (8b)$$

For example, we can derive the total number of guest molecules K over all the cavities i , using Equations 7 and 8:

$$N_K \equiv \sum_i N_{K_i} = \lambda_K \left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda_K} \right)_{T,V,N_Q,\lambda_{J \neq K}} = \frac{\sum_i \nu_i N_Q h_{K_i} \lambda_K}{1 + \sum_J h_{J_i} \lambda_{J_i}}. \quad (9)$$

Thus, we obtain by identification: $N_{K_i} = \frac{\nu_i N_Q h_{K_i} \lambda_K}{1 + \sum_J h_{J_i} \lambda_{J_i}}$.

This equation allows us to determine the probability of finding a molecule K in a i type cavity (also named the occupancy fraction). This value is defined by dividing the number of K molecules in a cavity i by the number of i type cavities:

$$y_{K_i} = \frac{N_{K_i}}{\nu_i N_Q} = \frac{h_{K_i} \lambda_K}{1 + \sum_J h_{J_i} \lambda_{J_i}} \quad (10)$$

– 23 –

If we assume, in addition, that gas phase species behave as an ideal gas, absolute activities λ_K can be written as a function of the individual partition function of the K molecule and its pressure p_K :

$$\lambda_K = \exp\left(\frac{\mu_K}{kT}\right) = p_K \frac{1}{kT\Phi_K(T)}, \quad (11)$$

where λ_K is the individual partition function of the K gas.

When the gas is non-ideal, the pressure must be replaced by the fugacity f_K . Equation 11 can be rewritten, introducing the *Langmuir constant* of the K gas molecules in a type i cavity C_{K_i} :

$$C_{K_i} \equiv \frac{1}{kT} \frac{h_{K_i}(T, V)}{\Phi_K(T)} = \frac{h_{K_i}(T, V)\lambda_K}{f_K} \quad (12)$$

The occupancy fraction of the K gas molecules for each type of cavity y_{K_i} is then determined from these molecular Langmuir constants by the following relation:

$$y_{K_i} = \frac{C_{K_i} f_K}{1 + \sum_J C_{J_i} f_J}. \quad (13)$$

In the present work, we used the ideal gas approximation for the coexisting phase of the guest species.

Relating the Langmuir constants to cell potential parameters The Langmuir constants represent interactions between gas molecules engaged in a cavity and water molecules. In order to determine them, one has to link them to experimental variables. We must first make two other assumptions: the cell has a spherical symmetry and the partition function of the guest molecule is the same as that of an ideal gas, which is not affected by enclathration. The engaged gas molecular partition function is then:

$$h_{K_i}(T, V) = \Phi_{cage} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{R_c} \exp\left(-\frac{w(r)}{kT}\right) r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr, \quad (14)$$

where Φ_{cage} is then equal to $\Phi_K(T, V)$, the molecular partition function of an ideal gas. The Langmuir constant can be written considering the cell potential $w(r)$:

$$C_{K_i} = \frac{4\pi}{kT} \int_0^{R_c} \exp\left(-\frac{w(r)}{kT}\right) r^2 dr, \quad (15)$$

where $w(r)$ is the averaged potential which takes into account all the pair interactions guest-host of a cell and R_c is the radius of the free cavity.

In order to calculate $w(r)$, we have to consider the fundamental intermolecular potential between a water molecule of the cavity wall and a guest molecule. McKoy and Sinanoğlu (1963) have suggested that the Kihara core potential is better than the Lennard-Jones 6-12 pair potential

- 24 -

originally used by Van der Waals and Platteuw (1959). The analytical expression of this potential is:

$$\begin{aligned} \Phi(r) &= \infty && \text{for } r \leq 2a \\ \Phi(r) &= 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r-2a} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r-2a} \right)^6 \right] && \text{for } r > 2a \end{aligned} \quad (16)$$

where a is the radius of the spherical core which represents the gas molecule, σ is the cores separation at zero potential ($\Phi(r = \sigma + 2a) = 0$) and ϵ is the maximum attractive potential.

In the equation for $r > 2a$, the first term represents the repulsive part, which dominates at small intermolecular distances. σ , a and ϵ are the three parameters of this potential. They are given by fitting experimental data for clathrate dissociation. An example of such a potential is shown in Figure 10. Once we know the interaction potential between two molecules, we have to integrate it for each water molecule surrounding a guest molecule. For spherical molecules, one obtains (McKoy and Sinanoğlu 1963):

$$w(r) = 2z\epsilon \left[\frac{\sigma^{12}}{R_c^{11}r} \left(\delta^{10} + \frac{a}{R_c} \delta^{11} \right) - \frac{\sigma^6}{R_c^5 r} \left(\delta^4 + \frac{a}{R_c} \delta^5 \right) \right], \quad (17)$$

where

$$\delta^N = \frac{1}{N} \left[\left(1 - \frac{r}{R_c} - \frac{a}{R_c} \right)^{-N} - \left(1 + \frac{r}{R_c} - \frac{a}{R_c} \right)^{-N} \right]. \quad (18)$$

An example of this potential is shown in Figure 11. r is the distance of the guest molecule from the cavity center. R_c is the radius of the cavity assumed to be spherical. z is the coordination number of the cell.

Knowing the three parameters σ , a and ϵ allows us to calculate the integral given in Eq. 15, which defines the Langmuir constant for molecules whose occupancy fraction is required.

REFERENCES

- Allamandola, L. J., M. P. Bernstein, S. A. Sandford, and R. L. Walker 1999. Evolution of interstellar ices. *Space Science Reviews* **90**, 219–232.
- Altwegg, K., H. Balsiger, and J. Geiss 1994. Abundance and origin of the CH_n^+ ions in the coma of comet P/Halley. *Astron. Astrophys.* **290**, 318–323.
- Anders, E., and N. Grevesse 1989. Abundances of the elements - meteoritic and solar. *Geochim. Cosmochim. Acta* **53**, 197–214.

– 25 –

- Bar-Nun, A., G. Herman, D. Laufer, and M. L. Rappaport 1985. Trapping and release of gases by water ice and implications for icy bodies. *Icarus* **63**, 317–332.
- Bar-Nun, A., J. Dror, E. Kochavi, D. Laufer, D. Kovetz, and T. Owen 1986. Trapping and release of gases by water ice and implications for icy bodies. *Origins of Life* **16**, 220.
- Barber, R. M., and A. V. I. Edge 1967. Gas hydrates containing argon, krypton and xenon: kinetics and energetics of formation and equilibria. *Proc. Roy. Soc. London, A.* **300**, 1–24.
- Bar-Nun, A., I. Kleinfeld, and E. Kochavi 1988. Trapping of gas mixtures by amorphous water ice. *Phys. Rev. B* **38**, 7749–7754.
- Beckwith, S. V. W., T. Henning, and Y. Nakagawa 2000. Dust properties and assembly of large particles in protoplanetary disks. In *Protostars and Planets IV* (V. Mannings, A. P. Boss, and S. S. Russell, Eds.), pp 533–558. University of Arizona Press, Tucson.
- Bell, K. R., P. M. Cassen, J. T. Wasson, and D. S. Woolum 2000. The FU Orionis phenomenon and Solar nebula material. In *Protostars and Planets IV* (V. Mannings, A. P. Boss, and S. S. Russell, Eds.), pp 897–926. University of Arizona Press, Tucson.
- Bird, M. K., P. Janardhan, T. L. Wilson, W. K. Huchtmeier, P. Gensheimer, and C. Lemme 1997. K-band radio observations of comet Hale-Bopp: detections of ammonia and (possibly) water. *Earth Moon and Planets* **78**, 21–28.
- Biver, N. 1997. Molecules cométaires: observations et modelisations. PhD thesis, Université de Paris 7.
- Biver, N., D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier, J. K. Davies, H. E. Matthews, J. E. Wink, H. Rauer, P. Colom, W. R. F. Dent, D. Despois, R. Moreno, G. Paubert, D. Jewitt, and M. Senay 1999. Spectroscopic monitoring of comet C/1996 B2 (Hyakutake) with the JCMT and IRAM radio telescopes. *Astron. J.* **118**, 1850–1872.
- Biver, N., D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier, F. Henry, J. K. Davies, H. E. Matthews, P. Colom, E. Gérard, D. C. Lis, T. G. Phillips, F. Rantakyö, L. Haikala, and H. A. Weaver 2000. Spectroscopic observations of comet C/1999 H1 (Lee) with the SEST, JCMT, CSO, IRAM, and Nançay radio telescopes. *Astron. J.* **120**, 1554–1570.
- Blake, D., L. Allamandola, S. Sandford, D. Hudgins, and F. Freund 1991. Clathrate hydrate formation in amorphous cometary ice analogs in vacuum. *Science* **254**, 548–551.
- Bockelée-Morvan, D., N. Biver, R. Moreno, P. Colom, J. Crovisier, E. Gérard, F. Henry, D. C. Lis, H. Matthews, H. A. Weaver, M. Womack, and M. C. Festou 2001. Outgassing behavior and composition of comet C/1999 S4 (LINEAR) during its disruption. *Science* **292**, 1339–1343.

– 26 –

- Bockelée-Morvan, D., D. Gautier, F. Hersant, J. M. Huré, and F. Robert 2002. Turbulent radial mixing in the solar nebula as the source of crystalline silicates in comets. *Astron. Astrophys.* **384**, 1107–1118.
- Bockelée-Morvan, D., D. C. Lis, J. E. Wink, D. Despois, J. Crovisier, R. Bachiller, D. J. Benford, N. Biver, P. Colom, J. K. Davies, E. Gérard, B. Germain, M. Houde, D. Mehringer, R. Moreno, G. Paubert, T. G. Phillips, and H. Rauer 2000. New molecules found in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp). Investigating the link between cometary and interstellar material. *Astron. Astrophys.* **353**, 1101–1114.
- Brooke, T. Y., A. T. Tokunaga, H. A. Weaver, G. Chin, and T. R. Geballe 1991. A sensitive upper limit on the methane abundance in comet Levy (1990c). *Astrophys. J.* **372**, L113–L116.
- Calvet, N., L. Hartmann, and S. E. Strom 2000. Evolution of disk accretion. In *Protostars and Planets IV* (V. Mannings, A. P. Boss, and S. S. Russell, Eds.), pp 1159–1200.
- Cassen, P. 1994. Utilitarian models of the solar nebula. *Icarus* **112**, 405–429.
- Cochran, A. L., W. D. Cochran, and E. S. Barker 2000. N_2^+ and CO^+ in comets 122P/1995 S1 (deVico) and C/1995 O1 (Hale-Bopp). *Icarus* **146**, 583–593.
- Crovisier, J., and D. Bockelée-Morvan 1999. Remote observations of the composition of cometary volatiles. *Space Science Reviews* **90**, 19–32.
- Crovisier, J., D. Bockelée-Morvan, P. Colom, D. Despois, and G. Paubert 1991. Microwave observations of hydrogen sulfide and searches for other sulfur compounds in comets Austin (1989c1) and Levy (1990c). *Icarus* **93**, 246–258.
- Crovisier, J., N. Biver, R. Moreno, D. C. Lis, D. Bockelée-Morvan, M. Womack, P. Colom, F. Henry, A. Lecacheux, G. Paubert, D. Despois, and H. A. Weaver 2001. Spectroscopic investigation of comets C/1999 T1 (McNaught-Hartley) and C/2001 A2 (LINEAR) at radio wavelengths: evidence for chemical diversity. *BAAS* **33**, 4306.
- Cyr, K. E., C. M. Sharp, and J. I. Lunine 1999. Effects of redistribution of water in the solar nebula chemistry. *J. Geophys. Res.* **104**, 19,003–19,014.
- Davidson, D. W. 1971. The motion of guest molecules in clathrate hydrates. *Canadian J. Chem.* **49**, 1224–1242.
- Deloule, E., J. C. Doukhan, and F. Robert 1998. Interstellar hydroxyls in meteorite chondrules: implications for the origin of water in the inner Solar System. *Geochem. Cosmochim. Acta.* **62**, 3367–3378.
- Diaz Peña, M., C. Pando, and J. A. R. Renuncio 1982. Combination rules for intermolecular potential parameters. I. Rules based on approximation for the long-range dispersion energy *J. Chem. Phys.* **76**, 325–332.

– 27 –

- DiSanti, M. A., M. J. Mumma, N. Dello Russo, and K. Magee-Sauer 2001. Carbon monoxide production and excitation in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp): Isolation of native and distributed CO sources. *Icarus* **153**, 361–390.
- Dominik, C., and A.G.G.M. Tielens 1997. The Physics of dust coagulation and the structure of dust aggregates in space. *Astrophys. J.* **480**, 647–673.
- Drouart, A., B. Dubrulle, D. Gautier, and F. Robert 1999. Structure and transport in the Solar nebula from constraints on deuterium enrichment and giant planets formation. *Icarus*, **140**, 129–155.
- Dubrulle, B., G. Morfill, and M. Sterzik 1995. The dust subdisk in the protoplanetary nebula. *Icarus*, **114**, 237–246.
- Eberhardt, P., D. Krankowsky, W. Schulte, U. Dolder, P. Lammerzähl, J. J. Berthelier, J. Woweries, U. Stubbemann, R. R. Hodges, J. H. Hoffman, and J. M. Illiano 1987. The CO and N₂ abundance in comet P/Halley. *Astron. Astrophys.* **187**, 481–484.
- Eberhardt, P., R. Meier, D. Krankowsky, and R. R. Hodges 1994. Methanol and hydrogen sulfide in comet P/Halley. *Astron. Astrophys.* **288**, 315–329.
- Feldman, P. D., A. F. Davidsen, W. P. Blair, C. W. Bowers, W. V. Dixon, S. T. Durrance, H. C. Ferguson, R. C. Henry, R. A. Kimble, G. A. Kriss, J. W. Kruk, K. S. Long, H. W. Moos, O. Vancura, and T. R. Gull 1991. Observations of comet Levy (1990c) with the Hopkins Ultraviolet Telescope. *Astrophys. J.* **379**, L37–L40.
- Feldman, P. D., M. C. Festou, G. P. Tozzi, and H. A. Weaver 1997. The CO₂/CO abundance ratio in 1P/Halley and several other comets observed by IUE and HST. *Astrophys. J.* **475**, 829–834.
- Feldman, P. D., K. B. Fournier, V. P. Grinin, and A. M. Zvereva 1993. The abundance of ammonia in comet P/Halley derived from ultraviolet spectrophotometry of NH by ASTRON and IUE. *Astrophys. J.* **404**, 348–355.
- Feldman, P. D., H. A. Weaver, and E. B. Burgh 2001a. Comet C/2001 A2 (LINEAR). *IAU Circ.* **7681**, 2.
- Feldman, P. D., H. A. Weaver, and E. B. Burgh 2001b. FUSE observations of CO and H₂ emission in Comet C/2001 A2 (LINEAR). *BAAS* **33**, 4301.
- Fromang, S., C. Turquem, and S. A. Balbus 2002. The ionization fraction in alpha models of protoplanetary discs. *MNRAS* **329**, 18–28.
- Gail, H.-P. 1998. Chemical reactions in protoplanetary accretion disks. IV. Multicomponent dust mixture. *Astron. Astrophys.* **332**, 1099–1122.

– 28 –

- Gautier, D., F. Hersant, O. Mousis, and J. I. Lunine 2001a. Enrichments in volatiles in Jupiter: a new interpretation of the Galileo measurements. *Astrophys. J.*, **550**, L227–L230.
- Gautier, D., F. Hersant, O. Mousis, and J. I. Lunine 2001b. Erratum: enrichments in volatiles in Jupiter: a new interpretation of the Galileo measurements. *Astrophys. J.*, **559**, L183–L183.
- Geiss, J. and H. Reeves 1981. Deuterium in the Solar System. *Astron. Astrophys.* **93**, 189–199.
- Gibb, E. L., D. C. B. Whittet, W. A. Schutte, A. C. A. Boogert, J. E. Chiar, P. Ehrenfreund, P. A. Gerakines, J. V. Keane, A. G. G. M. Tielens, E. F. van Dishoeck, and O. Kerkhof 2000. An inventory of interstellar ices toward the embedded protostar W33A. *Astrophys. J.* **536**, 347–356.
- Haisch, K. E., Jr., E. A. Lada, and C. J. Lada 2001. Disk frequencies and lifetimes in young clusters. *Astrophys. J.* **553**, L153–L156.
- Hartmann, L. 2000. Observational constraints on transport (and mixing) in pre-main sequence disks. *Space Science Reviews* **92**, 55–68.
- Hartmann, L., N. Calvet, E. Gullbring, and P. D’Alessio 1998. Accretion and the evolution of T Tauri disks. *Astrophys. J.* **495**, 385–400.
- Hersant, F., D. Gautier, and J. M. Huré 2001. A two-dimensional model for the primordial nebula constrained by D/H measurements in the Solar System: implications for the formation of giant planets *Astrophys. J.* **554**, 391–407.
- Huré, J.-M. 2000. On the transition to self-gravity in low mass AGN and YSO accretion discs. *Astron. Astrophys.* **358**, 378–394.
- Irvine, W. M., F. P. Schloerb, J. Crovisier, B. Fegley, and M. J. Mumma 2000. Comets: a link between interstellar and nebular chemistry. In *Protostars and Planets IV* (V. Mannings, A. P. Boss, and S. S. Russell, Eds.), pp 1159–1200. University of Arizona Press, Tucson.
- Jessberger, E. K., and J. Kissel 1991. Chemical properties of cometary dust and a note on carbon isotopes newblock In *Comets in the post-Halley era* R.L. Newburn, Jr, M. Neugebauer, and J. Rahe, pp. 1075–1092.
- Kawakita, H., and J. Watanabe 1998. NH₂ and its parent molecule in the inner coma of comet Hyakutake (C/1996 B2) *Astrophys. J.* **495**, 946–950.
- Kouchi, A., T. Yamamoto, T. Kozasa, T. Kuroda, and J. M. Greenberg 1994. Conditions for condensation and preservation of amorphous ice and crystallinity of astrophysical ices. *Astron. Astrophys.* **290**, 1009–1018.
- Laufer, D., G. Notesco, A. Bar-nun, and T. Owen 1999. From the interstellar medium to Earth’s oceans via comets – an isotopic study of HDO/H₂O. *Icarus* **140**, 446–450.

– 29 –

- Lunine, J. I., and D. J. Stevenson 1985. Thermodynamics of clathrate hydrate at low and high pressures with application to the outer solar system. *Astrophys. J. Suppl.* **58**, 493–531.
- Lutz, B. L., M. Womack, and R. M. Wagner 1993. Ion abundances and implications for photochemistry in Comets Halley (1986 III) and Bradfield (1987 XXIX). *Astrophys. J.* **407**, 402–411.
- Makalkin, A. B., and V. A. Dorofeyeva 1991. Temperatures in the protoplanetary disk : models, constraints and consequences for the planets. *Izv. Earth Phys.* **27**, 650.
- Malfait, K., C. Waelkens, J. Bouwman, A. de Koter, and L. B. F. M. Waters 1999. The ISO spectrum of the young star HD 142527. *Astron. Astrophys.*, **345**, 181–186.
- McKoy, V., and O. Sinanoğlu 1963. Theory of dissociation pressures of some gas hydrates. *J. Chem. Phys.* **38**, 2946–2956.
- McPhate, J. B., P. D. Feldman, H. A. Weaver, M. F. A’Hearn, G.-P. Tozzi, and M. C. Festou 1996. Ultraviolet CO emission in comet C/1996 B2 (Hyakutake). *BAAS*, **28**, 1093–1094.
- Meier, R., P. Eberhardt, D. Krankowsky, and R. R. Hodges 1994. Ammonia in comet P/Halley. *Astron. Astrophys.* **287**, 268–278.
- Moore, M.H., and R. L. Hudson 1994. Far-infrared spectra of cosmic-type pure and mixed ices. newblock *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **103**, 45–56.
- Morfill, G. E. and H. J. Völk 1984. Transport of dust and vapor and chemical fractionation in the early protosolar cloud. *Astrophys. J.*, **287**, 371–395.
- Mousis, O., D. Gautier, D. Bockelée-Morvan, F. Robert, B. Dubrulle, and A. Drouart 2000. Constraints on the formation of comets from D/H ratios measured in H₂O and HCN. *Icarus* **148**, 513–525.
- Mumma, M. J. , M. A. DiSanti, N. dello Russo, M. Fomenkova, K. Magee-Sauer, C. D. Kaminski, and D. X. Xie 1996. Detection of abundant ethane and methane, along with carbon monoxide and water, in comet C/1996 B2 Hyakutake: Evidence for interstellar origin. *Science* **272**, 1310–1314.
- Mumma, M. J., N. Dello Russo, M. A. DiSanti, K. Magee-Sauer, R. E. Novak, S. Brittain, T. Rettig, I. S. McLean, D. C. Reuter, and L. Xu 2001a. Organic composition of C/1999 S4 (LINEAR): a comet formed near Jupiter ? *Science*, **292**, 1334–1339.
- Mumma, M. J., I. S. McLean, M. A. DiSanti, J. E. Larkin, N. D. Russo, K. Magee-Sauer, E. E. Becklin, T. Bida, F. Chaffee, A. R. Conrad, D. F. Figer, A. M. Gilbert, J. R. Graham, N. A. Levenson, R. E. Novak, D. C. Reuter, H. I. Teplitz, M. K. Wilcox, and L. Xu 2001b. A survey of organic volatile species in comet C/1999 H1 (Lee) using NIRSPEC at the Keck Observatory. *Astrophys. J.* **546**, 1183–1193.

– 30 –

- Natta, A., V. P. Grinin, and V. Mannings 2000. Properties and evolution of disks around pre-main-sequence stars of intermediate mass. In *Protostars and Planets IV* (V. Mannings, A. P. Boss, and S. S. Russell, Eds.), pp 559–588. University of Arizona Press, Tucson.
- Owen, T., P. Mahaffy, H. B. Niemann, S. Atreya, T. Donahue, A. Bar-Nun, and I. de Pater 1999. A low temperature origin for the planetesimals that formed Jupiter. *Nature* **402**, 269–270.
- Owen, T., and A. Bar-Nun 1995. Comets, impacts and atmospheres. *Icarus* **116**, 215–226.
- Pollack, J. B., O. Hubickyj, P. Bodenheimer, J. J. Lissauer, M. Podolak, and Y. Greenzweig 1996. Formation of the giant planets by concurrent accretion of solids and gas. *Icarus* **124**, 62–85.
- Robert, F., D. Gautier, and B. Dubrulle 2000. The Solar System D/H ratio: observations and theories. *Space Science Reviews* **92**, 201–224.
- Schmitt, B. 1986. Structure, Dynamique et Interactions. Implications Astrophysiques. *PhD Thesis*, Université de Grenoble.
- Shakura, N. I., and R. A. Sunyaev 1973. Black holes in binary systems. Observational appearance. *Astron. Astrophys.* **24**, 337–355.
- Shu, F. H., S. Tremaine, F. C. Adams, and P. Ruden 1990. Sling amplification and eccentric gravitational instabilities in gaseous disks. *Astrophys. J.* **258**, 495–514.
- Sloan, E. D. Jr. 1998. *Clathrate hydrates of natural gases*. Marcel Dekker Inc., New York.
- Sparks, K. A., J. W. Tester, Z. Cao, and B. L. Trout 1999. Configuration properties of water clathrates : Monte carlo and multidimensional integration versus Lennard-Jones and Devonshire approximation. *J. Phys.Chem. B* **103**, 6300–6308.
- Stepinski, T. F., and P. Valageas 1997. Global evolution of solid matter in turbulent protoplanetary disks. II. Development of icy planetesimals. *Astron. Astrophys.*, **319**, 1007–1019.
- Stern, S. A., D. C. Slater, M. C. Festou, J. W. Parker, G. R. Gladstone, M. F. A’Hearn, and E. Wilkinson 2000. The discovery of argon in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp). *Astrophys. J.* **544**, L169–L172.
- Stevenson, D. J., and J. I. Lunine 1988. Rapid formation of Jupiter by diffuse redistribution of water vapor in the solar nebula. *Icarus*, **75**, 146–155.
- Supulver, K. D., and D. N. C. Lin 2000. Formation of icy planetesimals in a turbulent solar nebula. *Icarus* **146**, 525–540.
- Tozzi, G. P., P. D. Feldman, and M. C. Festou 1998. Origin and production of C(¹D) atoms in cometary comae. *Astron. Astrophys.* **330**, 753–763.

– 31 –

- Van der Waals, J. H., and J. C. Platteuw 1959. Clathrate solutions. In *Advances in Chemical Physics*, volume 2, pp 1–57. Interscience Publishers Inc., New York.
- Weaver, H. A., T. Y. Brooke, G. Chin, S. J. Kim, D. Bockelée-Morvan, and J. K. Davies 1997a. Infrared spectroscopy of comet Hale-Bopp. *Earth Moon and Planets* **78**, 71–80.
- Weaver, H. A., T. Y. Brooke, M. A. Disanti, M. J. Mumma, A. Tokunaga, G. Chin, M. F. A’Hearn, T. C. Owen, and C. M. Lisse 1997b. The methane abundance in comet Hyakutake (C/1996 B2). *BAAS* **29**, 3405.
- Weidenschilling, S. J. 1997. The origin of comets in the solar nebula: a unified model. *Icarus* **127**, 290–306.
- Weidenschilling, S. J., and J. N. Cuzzi 1993. Formation of planetesimals in the solar nebula. In *Protostars and Planets III* (E. H. Levy, J. I. Lunine, Eds), pp 1031–1060. University of Arizona Press, Tucson.
- Woods, T. N., P. D. Feldman, K. F. Dymond, and D. J. Sahnou 1986. Rocket ultraviolet spectroscopy of comet Halley and abundance of carbon monoxide and carbon. *Nature* **324**, 436–438.
- Wootten, A., B. Butler, D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier, D. Despois, P. Palmer, and D. Yeomans 1996. Detection of ammonia in comet C/1996 B2 Yakutake. In *Asteroids, Comets, Meteors 1996*, IAU Colloquium 10, book of abstracts, pp 39.
- Wyckoff, S., S. C. Tegler, and L. Engel 1991a. Nitrogen abundance in Comet Halley. *Astrophys. J.* **367**, 641–648.
- Wyckoff, S., S. C. Tegler, and L. Engel 1991b. Nitrogen abundance in Comet Halley. *Astrophys. J.* **368**, 279–286.

- 32 -

Table 1: Assumed gas-phase abundances relative to H₂ in the nebula.

species	X/H ₂
C	7.17×10^{-4} (1)
N	2.24×10^{-4} (1)
O	1.71×10^{-3} (1)
CO	5.97×10^{-4} (a) / 6.82×10^{-4} (b)
CH ₄	9.94×10^{-5} (a) / 3.41×10^{-5} (b)
N ₂	1.07×10^{-4} (c) / 1.11×10^{-4} (d)
NH ₃	1.07×10^{-5} (c) / 1.11×10^{-6} (d)
H ₂ S	3.51×10^{-5}
Ar	6.09×10^{-6} (1)
Kr	3.20×10^{-9} (1)
Xe	3.36×10^{-10} (1)

(1) From Anders and Grevesse (1989). For Ar, only the most abundant isotope ³⁶Ar is considered, in contrast to other noble gases.

(a) With CO/CH₄ = 5 in the gas phase.

(b) With CO/CH₄ = 20 in the gas phase.

(c) With N₂/NH₃ = 10 in the gas phase.

(d) With N₂/NH₃ = 100 in the gas phase.

Table 2: Geometry of the cavities.

Clathrate structure	I		II	
Number of water molecules	46		136	
Formula at maximum occupancy	X.5.75H ₂ O		X.5.66H ₂ O	
Cavity type	Small	Large	Small	Large
Number of cavities / unit cell	2	6	16	8
Average cage radius ¹ , Å	3.905	4.326	3.902	4.682
Coordination number ^a : <i>z</i>	20	24	20	28
Hydratation number ^b : <i>ν</i>	1/23	3/23	2/17	1/17

¹From Sparks *et al.* (1999).

^aInverse of the number of unit cell water molecules per cage.

^bNumber of water molecules surrounding a guest molecule.

- 33 -

Table 3: Structure and properties of studied clathrates.

Trapped molecule	Hydrate structure	Temperature range for considered pressures (10^{-8} - 10^{-7} bar)
CH ₄	I	55-56 K
N ₂	II	41-43 K
CO	I	45-46 K
Ar	II	35-36 K
Kr	II	40-41 K
Xe	I	54-55 K
H ₂ S	I	77-80 K

Table 4: Parameters of the Kihara potential for studied molecules, from Diaz Peña *et al.* (1982). k is the Boltzmann constant and σ , a and ϵ are the intermolecular separation at zero potential, the core radius and the maximum of the Kihara potential, respectively.

Molecule	σ (Å)	$2a$ (Å)	ϵ/k (K)
N ₂	2.728	0.770	145.45
CO	3.101	0.568	134.95
Ar	2.829	0.452	155.30
Kr	3.094	0.614	212.70

- 34 -

Table 5: Relative molecule abundances measured in comets at 1 AU from the Sun.

Comet	Abundances relative to water [%]					References ^a
	CO	CH ₄	NH ₃	N ₂	H ₂ S	
C/1999 T1 (McNaught-Hartley)	17-26	< 1.6			0.7	1-2
C/1995 O1 (Hale-Bopp)	12-24 ^b	0.6	0.7	< 0.0016 ^c	1.5	3-7
C/1996 B2 (Hyakutake)	6-22 ^b	0.7-1.0	0.3-0.5		0.8	8-14
1P/Halley	6-17 ^b	< 0.8	0.2-1.5	0.03 ^d	0.4	15-22
C/1990 K1 (Levy)	7-11	< 0.3			0.4	17, 23-26
109P/Swift-Tuttle	6				0.6	17, 26
C/1999 H1 (Lee)	1.8-4	0.8			< 0.9	27-28
C/1979 Y1 (Bradfield)	4					17
C/2001 A2 (LINEAR)	1.3-3.5	1.4			1.0	1-2, 29
C/1989 X1 (Austin)	1.7				0.4	17, 26, 30
C/1999 S4 (LINEAR)	0.5-1	0.15			0.3	31-32
122P/deVico	< 15					26
C/1991 T2	< 1.8					33
103P/Hartley 2	< 1.2					33

C/1999 T1: CO: [1] Crovisier et al. (2001), [2] Mumma (private communication); H₂S: [1]; **C/1995 O1:** CO: [3] Disanti et al. (2001), [4] Bockelée-Morvan et al. (2000); CH₄: [5] Weaver et al. (1997a); NH₃: [6] Bird et al. (1997); N₂: [7] Cochran et al. (2000); H₂S: [4]; **C/1996 B2:** CO: [8] Biver et al. (1999), [9] Mumma et al. (1996), [10] McPhate et al. (1996); CH₄: [9], [11] Weaver et al. (1997b); NH₃: [12] Kawakita and Watanabe (1998), [13] Wootten et al. (1996), [14] Crovisier and Bockelée-Morvan (1999); H₂S: [8]; **1P/Halley:** CO [15] Eberhardt et al. (1987), [16] Woods et al. (1986), [17] Tozzi et al. (1998); CH₄: [18] Altwegg et al. (1994), NH₃: [19] Meier et al. (1994), [20] Wyckoff et al. (1991b), [21] Feldman et al. (1993); H₂S: [22] Eberhardt et al. (1994); **C/1990 K1:** CO: [17], [23] Feldman et al. (1991); CH₄: [24] Brooke et al. (1991); H₂S: [25] Crovisier et al. (1991), [26] Biver (1997); **109P/Swift-Tuttle:** CO: [17]; H₂S: [26]; **C/1999 H1:** CO: [27] Biver et al. (2000); [28] Mumma et al. (2001b); CH₄: [28]; H₂S: [27]; **C/1979 Y1:** CO: [17]; **C/2001 A2:** CO: [29] Feldman et al. (2001b); H₂S: [1]; **C/1989 X1:** CO: [17]; H₂S: [30] Crovisier et al. (1991), [26]; **C/1999 S4:** CO: [31] Mumma et al. (2001a); CH₄: [31]; H₂S: [32] Bockelée-Morvan et al. (2001); **122P/deVico:** CO: [26]; **C/1991 T1:** CO: [33] Feldman et al. (1997); **103P/Hartley 2:** CO: [33]. ^b evidence for a CO distributed source; the lower value might better reflect nuclear ices. ^c from the N₂⁺/CO⁺ upper limit measured by Cochran et al. (2000), using CO/H₂O = 24 %. ^d from the N₂⁺/CO⁺ ratio of Wyckoff et al. (1991a), using CO/H₂O = 15 %.

Table 6: Calculated abundances in clathrated ices for C and N-bearing species, assuming H₂O/H₂ = 1.3 (O/H)_⊙.

Molecule	Abundance relative to water [%]				
	$\frac{\text{CO}}{\text{CH}_4} = 5$	$\frac{\text{CO}}{\text{CH}_4} = 20$	$\frac{\text{N}_2}{\text{NH}_3} = 1$	$\frac{\text{N}_2}{\text{NH}_3} = 10$	$\frac{\text{N}_2}{\text{NH}_3} = 100$
CO	12	15			
CH ₄	3.7	1.1			
N ₂			2.7×10^{-5}	4.2×10^{-5}	4.7×10^{-5}
NH ₃			4	0.4	0.04

- 35 -

Table 7: Calculated abundances in clathrated ices for S-bearing species, Ar, Xe, and Kr assuming $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2 = 1.3 (\text{O}/\text{H})_{\odot}$.

Molecule	Abundance relative to water [%]
H_2S	1.4
Ar	2×10^{-6}
Xe	1×10^{-5}
Kr	7×10^{-5}

Table 8: Notations.

Term	Definition
F^{β}	Free energy of the empty lattice
F_{tot}	Total free energy: $F_{tot} = F^{\beta} + F_{guest}$
k	Boltzmann constant
ν_i	Number of type i cavities per water molecule
N_Q	Total number of water molecules
N_{J_i}	Number of guest molecules of type J in a type i cavity
h_{J_i}	Partition function of a J molecule in a type i cavity
λ_J	Absolute chemical activity of guest molecule J
μ_J	Chemical potential of guest molecule J ($\mu_J = kT \ln \lambda_J$)

– 36 –

Fig. 1.— (a) Radial distribution of the temperature in the nebula at different epochs. (b) Radial distribution of the pressure in the nebula at different epochs. The values correspond to the nominal solar nebula of Hersant *et al.* (2001).

Fig. 2.— N_2/CO ratio in the vapor phase as a function of the N_2/NH_3 ratio, for ratios of $CO/CH_4 = 5$ and 20.

Fig. 3.— Curves of saturation $T = f(P)$ of H_2S , NH_3 , CH_4 , Xe , CO , N_2 , Kr and Ar , together with the nebular adiabats of the nominal model of Hersant *et al.* (2001) at heliocentric distances of 5, 10 and 15 AU. S , N , C , Xe , Kr and Ar are in solar abundance with respect to H_2 . The CO/CH_4 and N_2/NH_3 ratios have been taken equal to 5 and 10, respectively. Species are in the vapor phase in the domains located below the curves of saturation. Epochs when species condense are indicated at the intersections of the adiabats with the curves of saturation.

Fig. 4.— Curves of stability $T = f(P)$ of clathrate hydrates of H_2S , CH_4 , Xe , CO , N_2 , Kr and Ar together with the nebula adiabats of the nominal model of Hersant *et al.* (2001) at heliocentric distances of 5, 10 and 15 AU. The CO/CH_4 and N_2/NH_3 ratios have been taken equal to 5 and 10, respectively. Clathrate hydrates are stable in the domains located below the curves of stability. Clathrated molecules are indicated on the right side of the figure. Epochs when species are accreted as clathrates are indicated at the intersections of the adiabats with the curves of stability. The stability curve of the $NH_3.H_2O$ hydrate is also shown.

Fig. 5.— Abundances with respect to water of clathrate hydrates of CO , CH_4 , H_2S , NH_3 , and H_2 formed in the nebula, as a function of the heliocentric distance R , in AU. Various epochs of clathration, in units of Myr, are also indicated, as a function of R . Calculations were made for a H_2O/H_2 mixing ratio in the nebula at the time of condensation of water equal to $1.3 \times (O/H)_\odot$. The CO/CH_4 et N_2/NH_3 ratios have been taken equal to 5 and 10, respectively. The relative abundances of trapped molecules are nearly constant with R and time and equal to 12% for CO , 1.4% for H_2S , 0.4 % for NH_3 , 3.7% for CH_4 and $4.2 \cdot 10^{-5}\%$ for N_2 .

Fig. 6.— Comparison of the N_2^+/CO^+ ratios measured in comets C/1995 O1 (Hale-Bopp), 122P/deVico, 1P/Halley and C/1987 P1 Bradfield with N_2/CO ratios calculated from our model when the H_2O/H_2 mixing ratio in the nebula prior to the condensation of water is equal to 1.3 and 2.8 times the solar O/H ratio. The N_2/CO ratio in the nebula calculated from Table 4 is also shown. We assumed $N_2/NH_3 = 10$ and $CO/CH_4 = 5$. Observations are from Wyckoff *et al.* (1991a) for comet Halley, from Lutz *et al.* (1993) for comet Bradfield and from Cochran *et al.* (2000) for comets deVico and Hale-Bopp.

Fig. 7.— Abundances relative to water of CO and N_2 trapped as clathrates, as a function of the amount of water ice in solar units. (a) in logarithmic scale; (b) in linear scale.

Fig. 8.— Abundances relative to water of clathrates of noble gases as a function of the heliocentric distance. Calculations have been made for a H_2O/H_2 mixing ratio in the nebula equal to $1.3 \times$

– 37 –

$(\text{O}/\text{H})_{\odot}$. Values of the abundances are $7 \times 10^{-5} \%$ for Kr, $10^{-5} \%$ for Xe and $2 \times 10^{-6} \%$ for Ar.

Fig. 9.— Ar, Kr and Xe abundances with respect to water in clathrates as a function of the $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$ mixing ratio in the nebula at the time of the condensation of water, expressed in solar O/H units. Ar is poorly trapped when the $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$ ratio is less than 2.6 times $(\text{O}/\text{H})_{\odot}$. Kr and Xe are fully trapped for all plausible amounts of water ice, so that the Kr/Xe ratio is always solar.

Fig. 10.— Typical Kihara potential as a function of the distance from the molecule. Chosen parameters correspond to the CO molecule (see text for details).

Fig. 11.— Typical spherically symmetrical potential function between guest and cell as a function of the distance from the center of the cell. T is the temperature and k the Boltzmann constant. Input parameters are those of the CO molecule. Note that the strongly attractive potential near the cell center and repulsive potential near the cell wall maintain the guest molecule localized in the center.

Fig. 1a

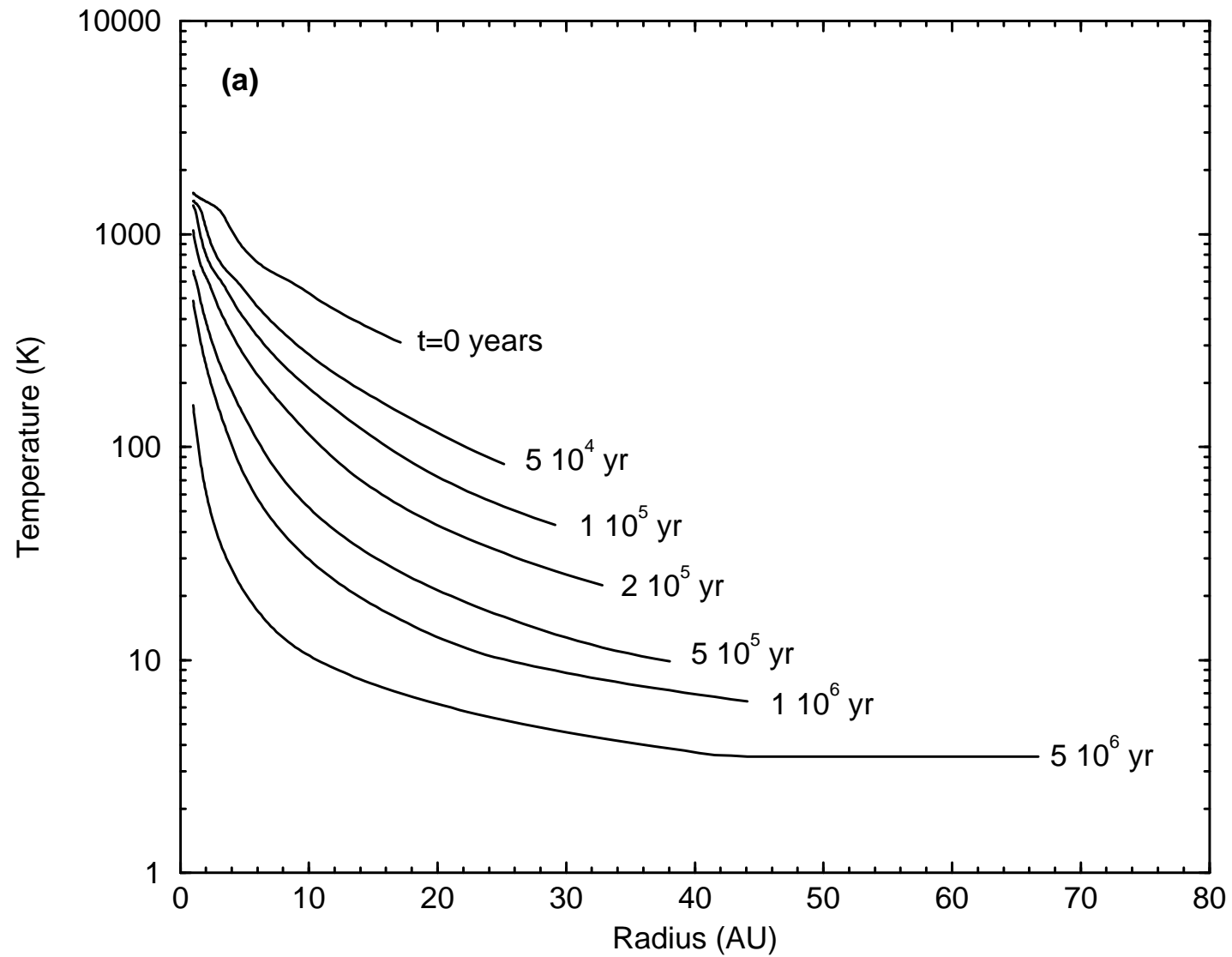
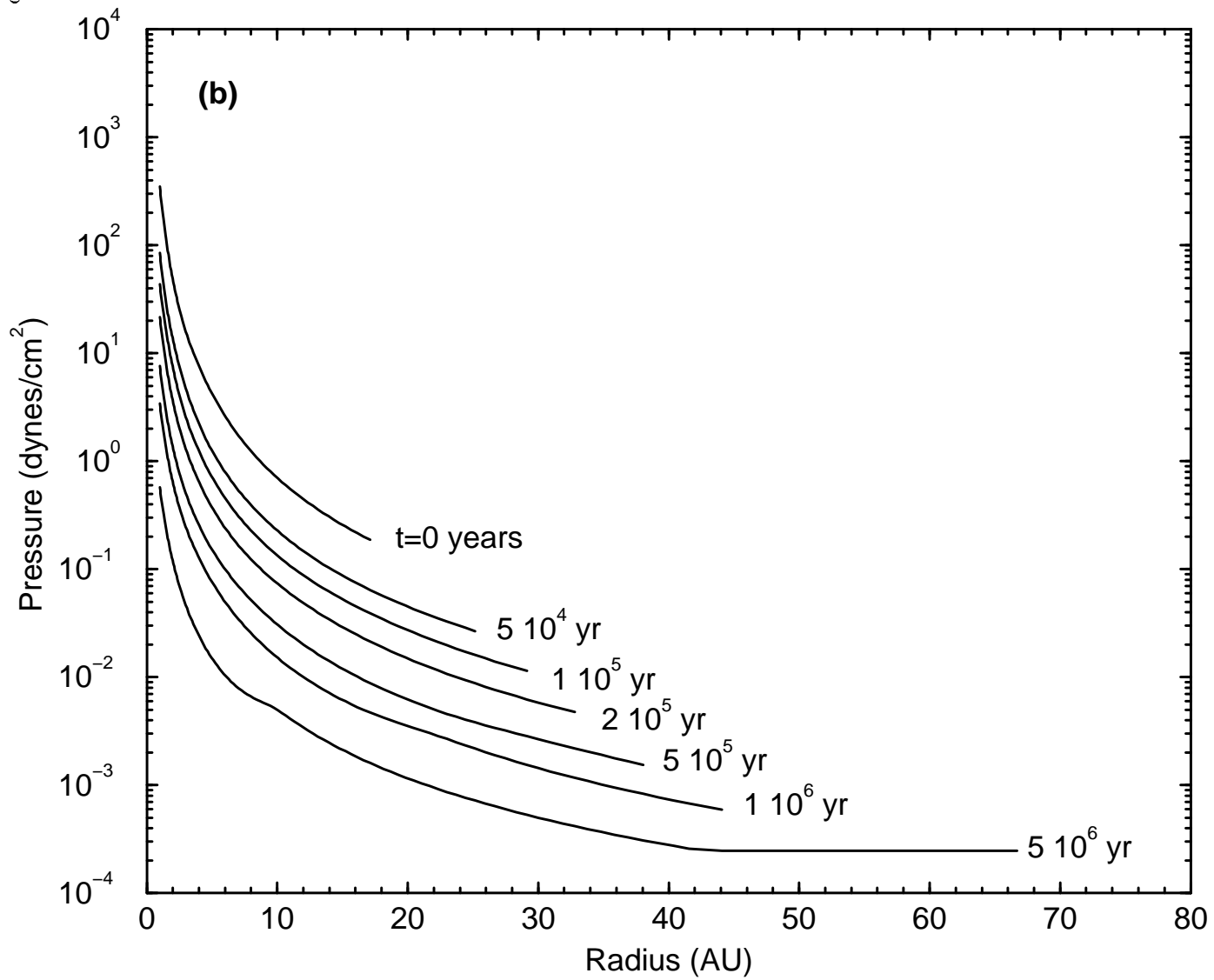


Fig. 1b



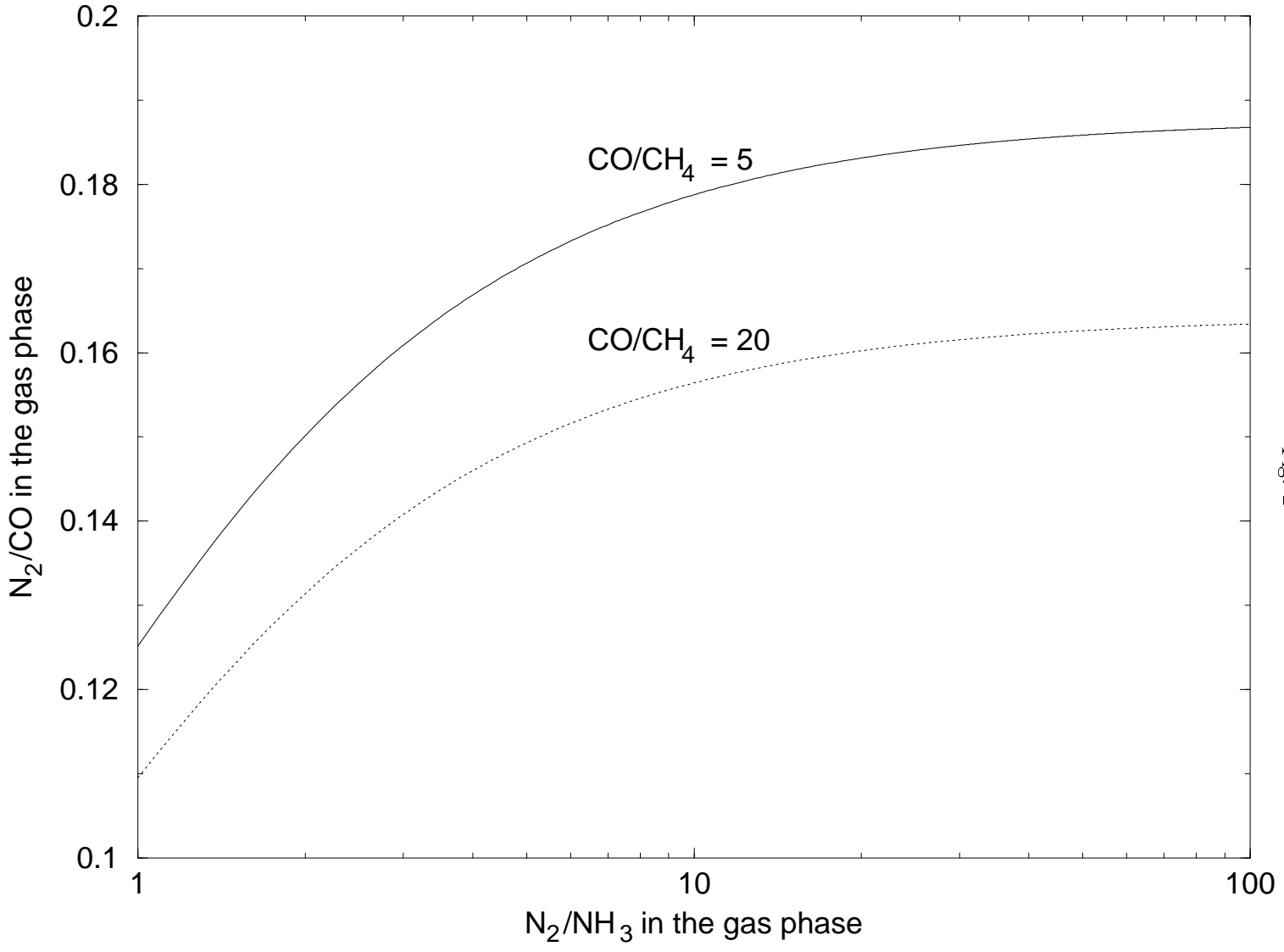


Fig. 2

- 40 -

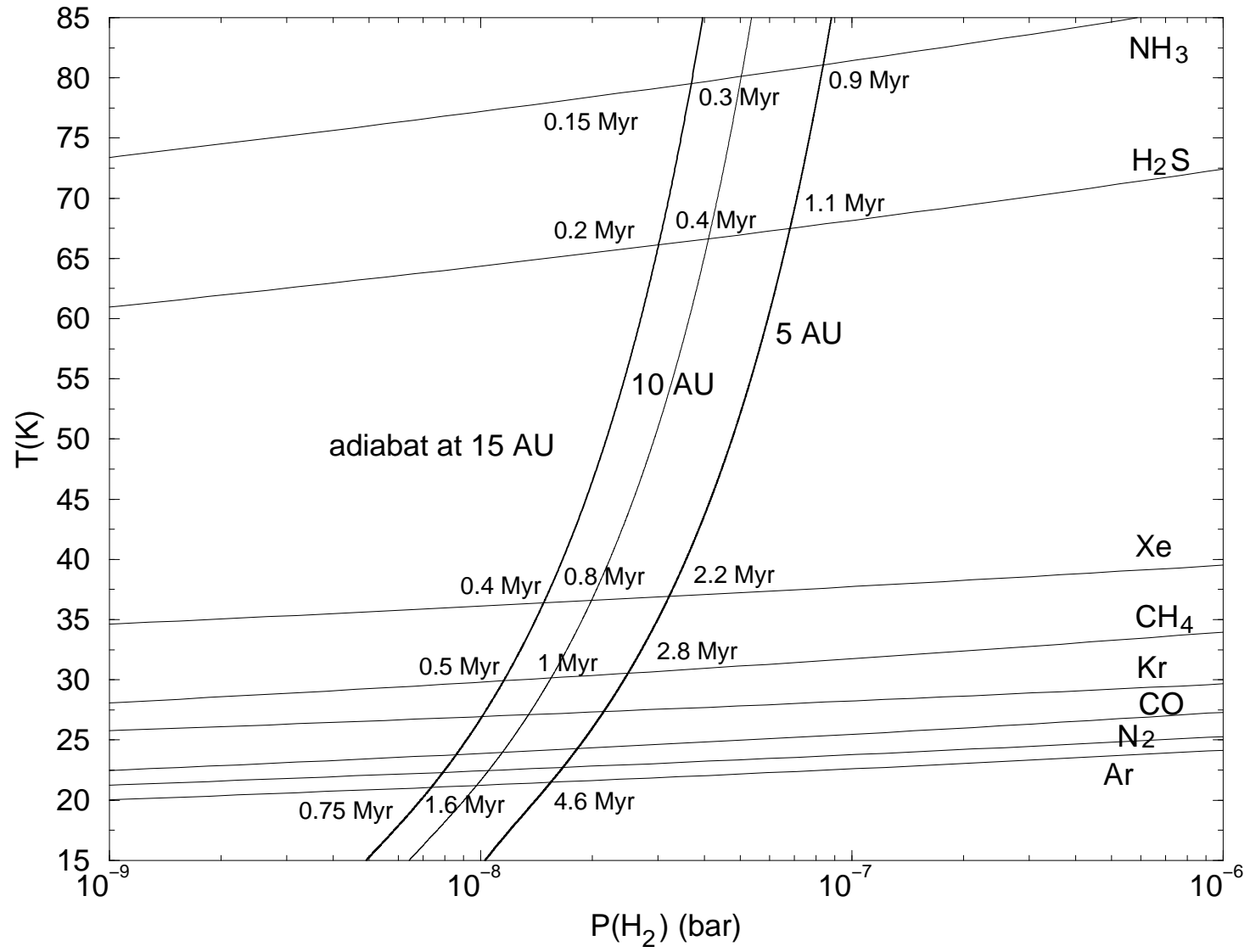


Fig. 3

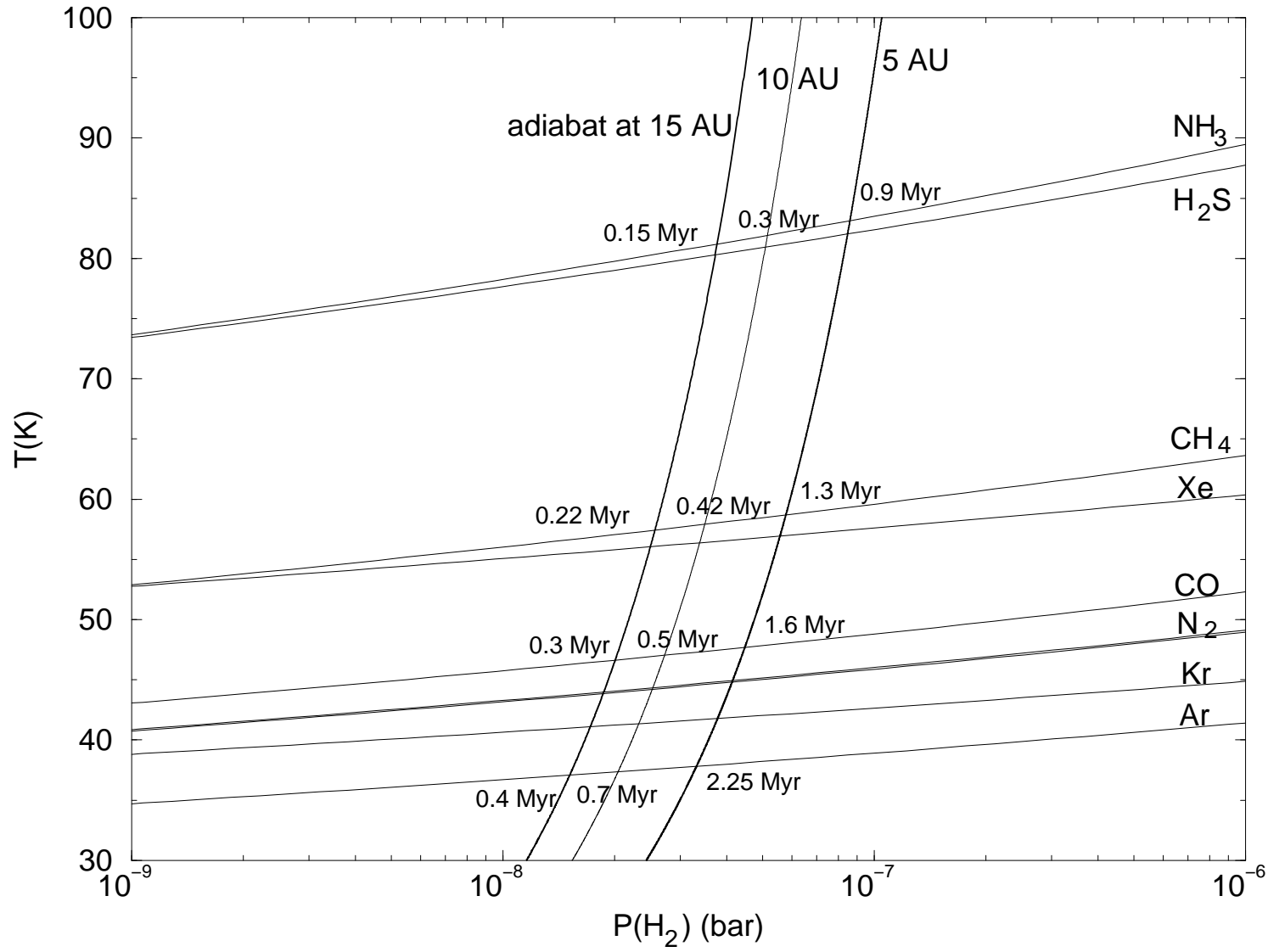


Fig. 4

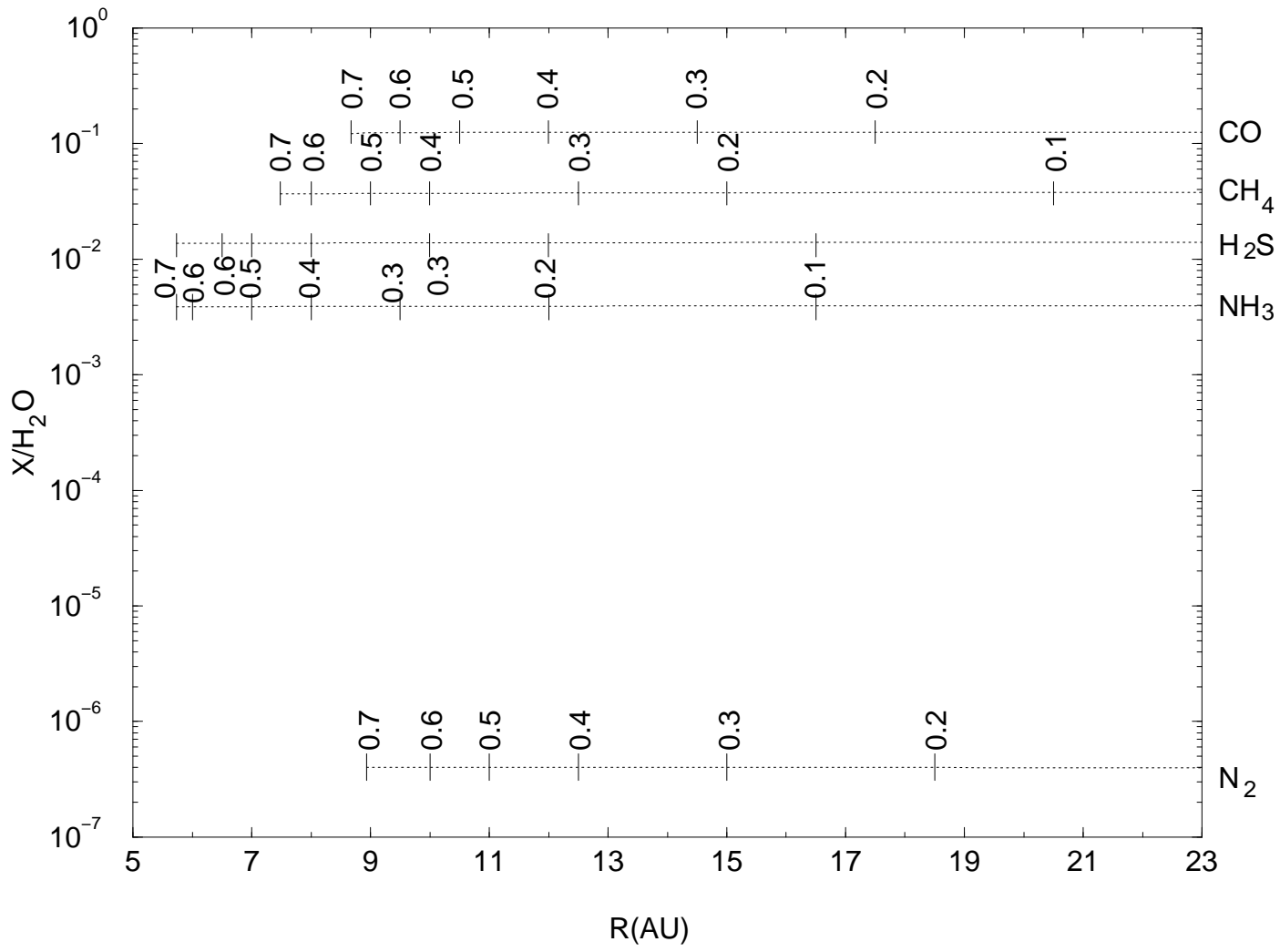


Fig. 5

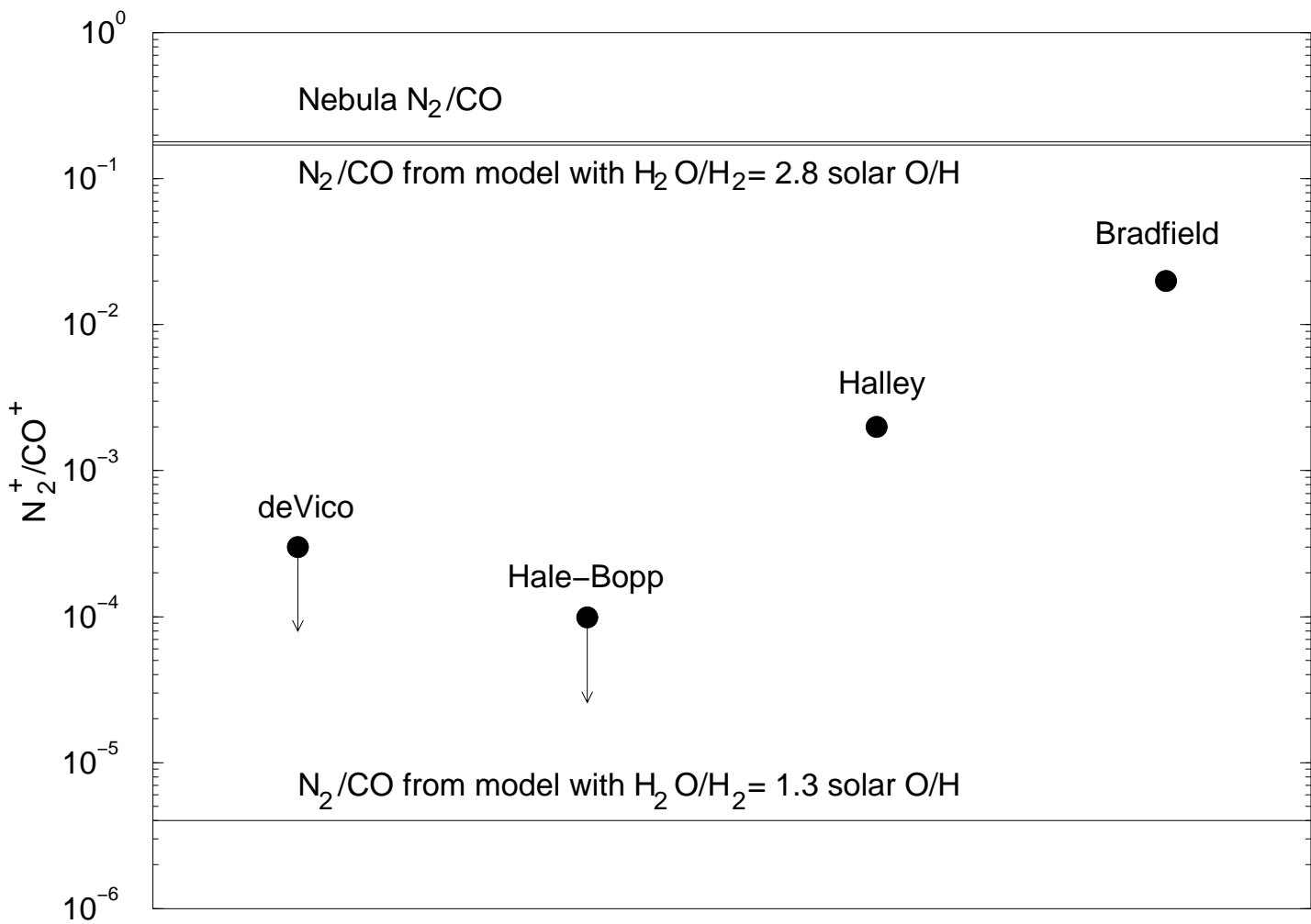


Fig. 6

Fig. 7a

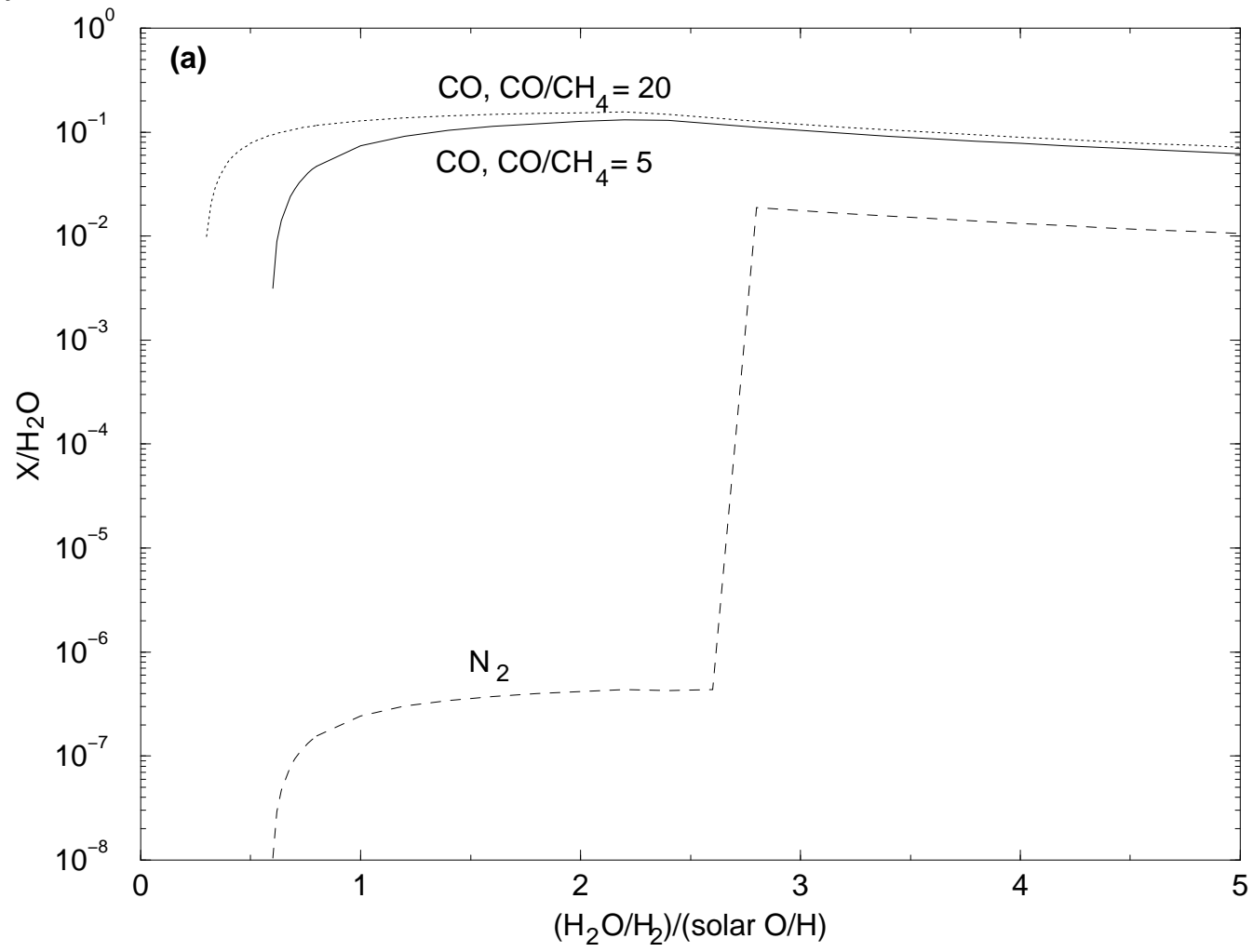


Fig. 7b

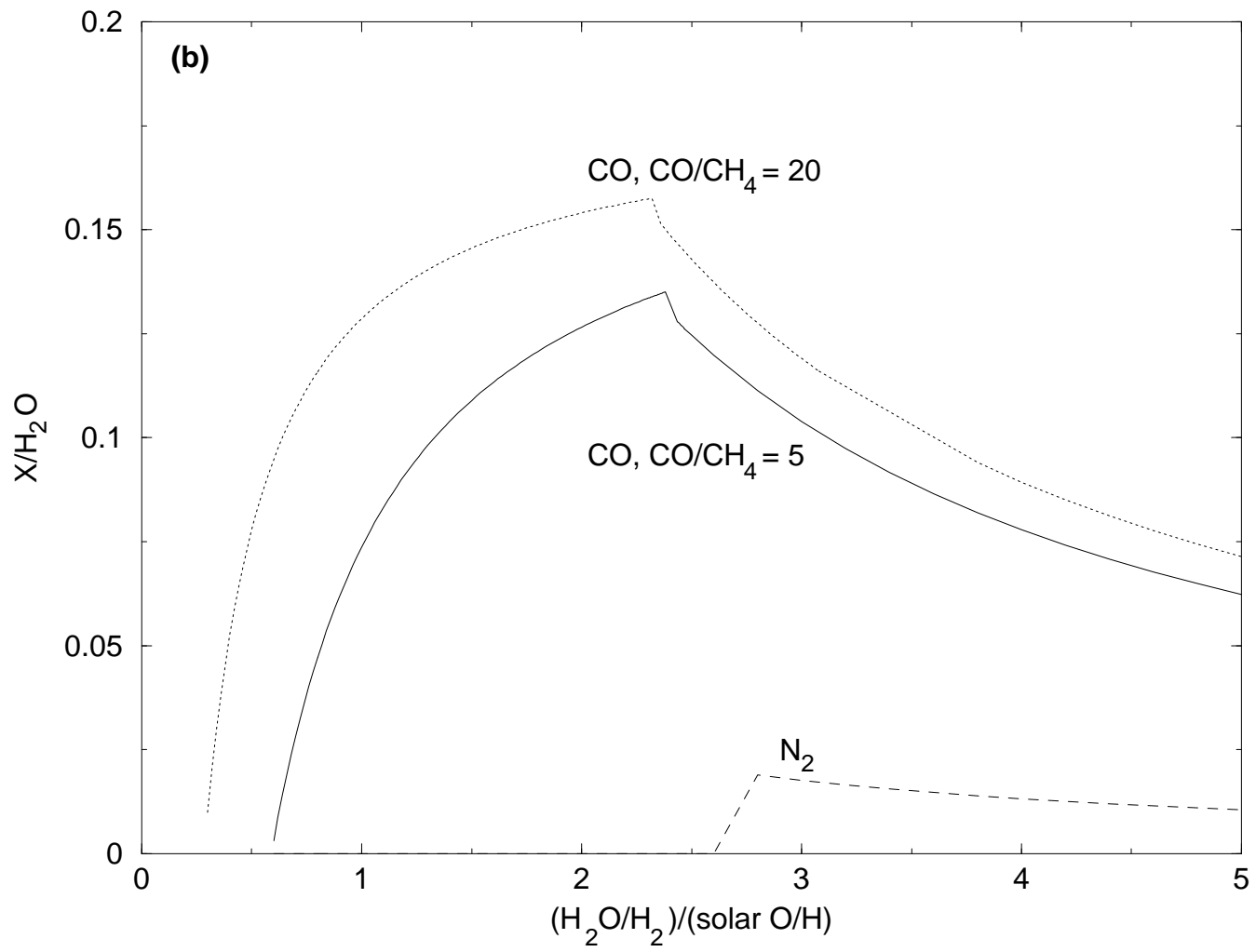


Fig. 8

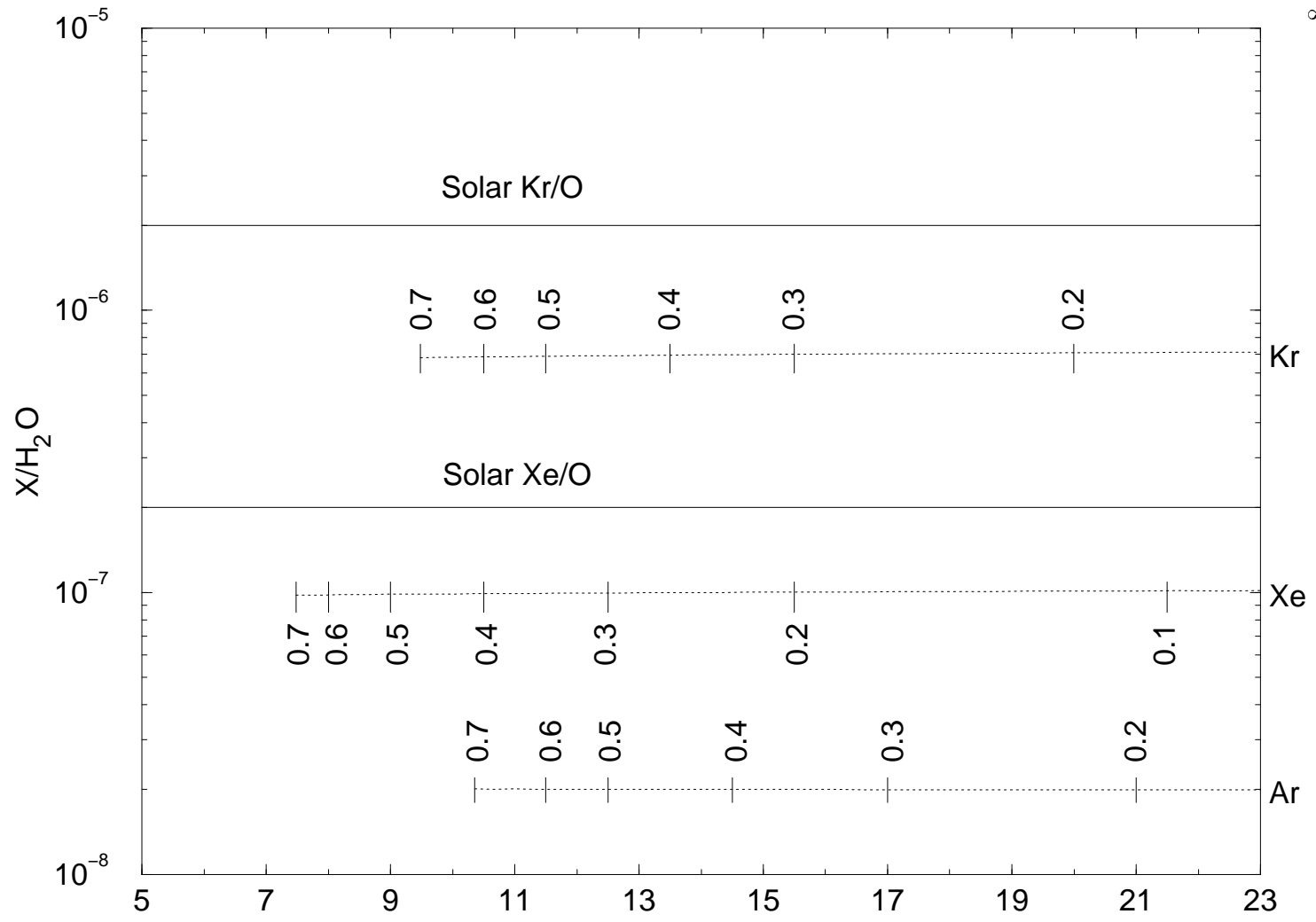


Fig. 9

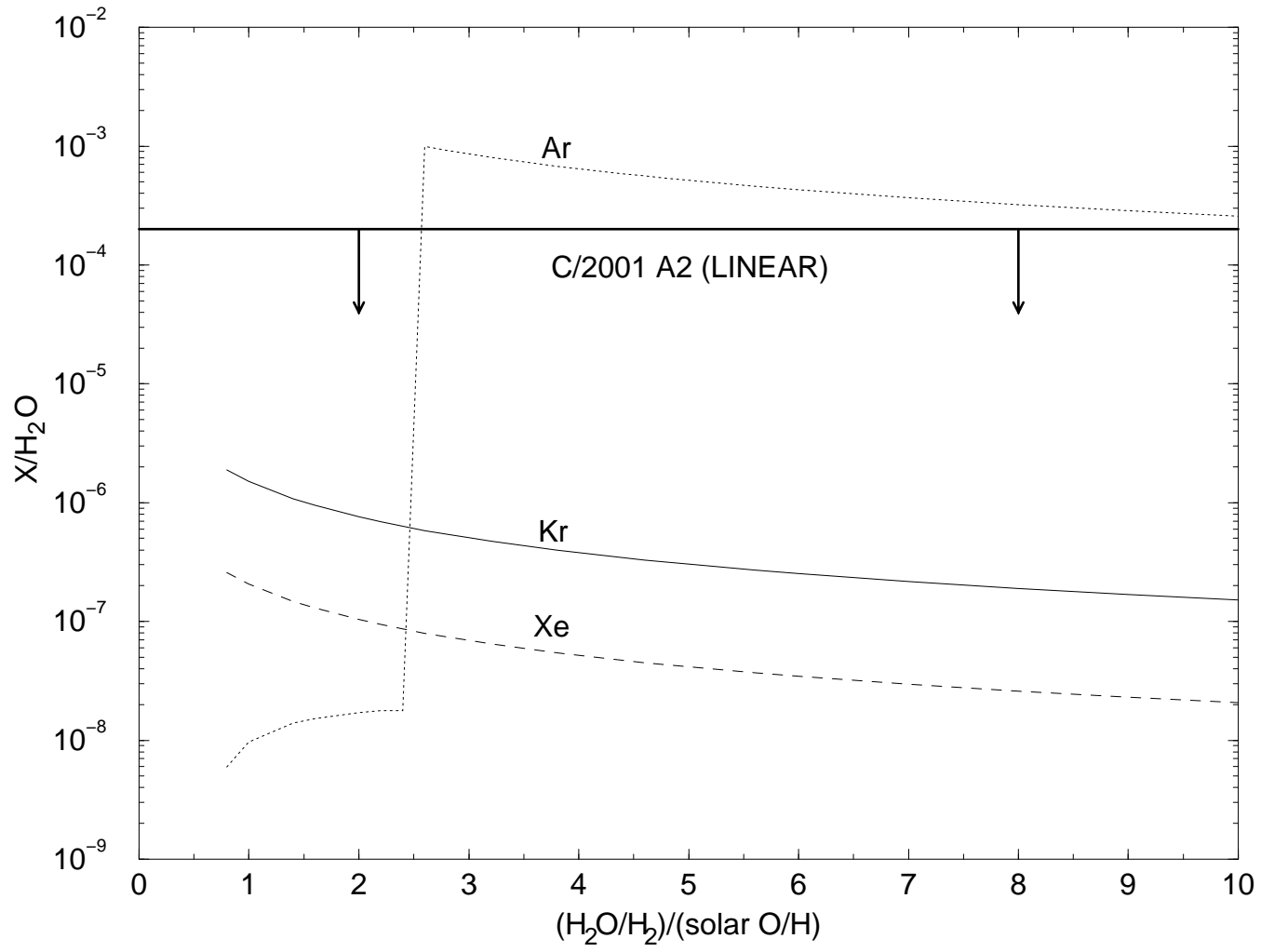
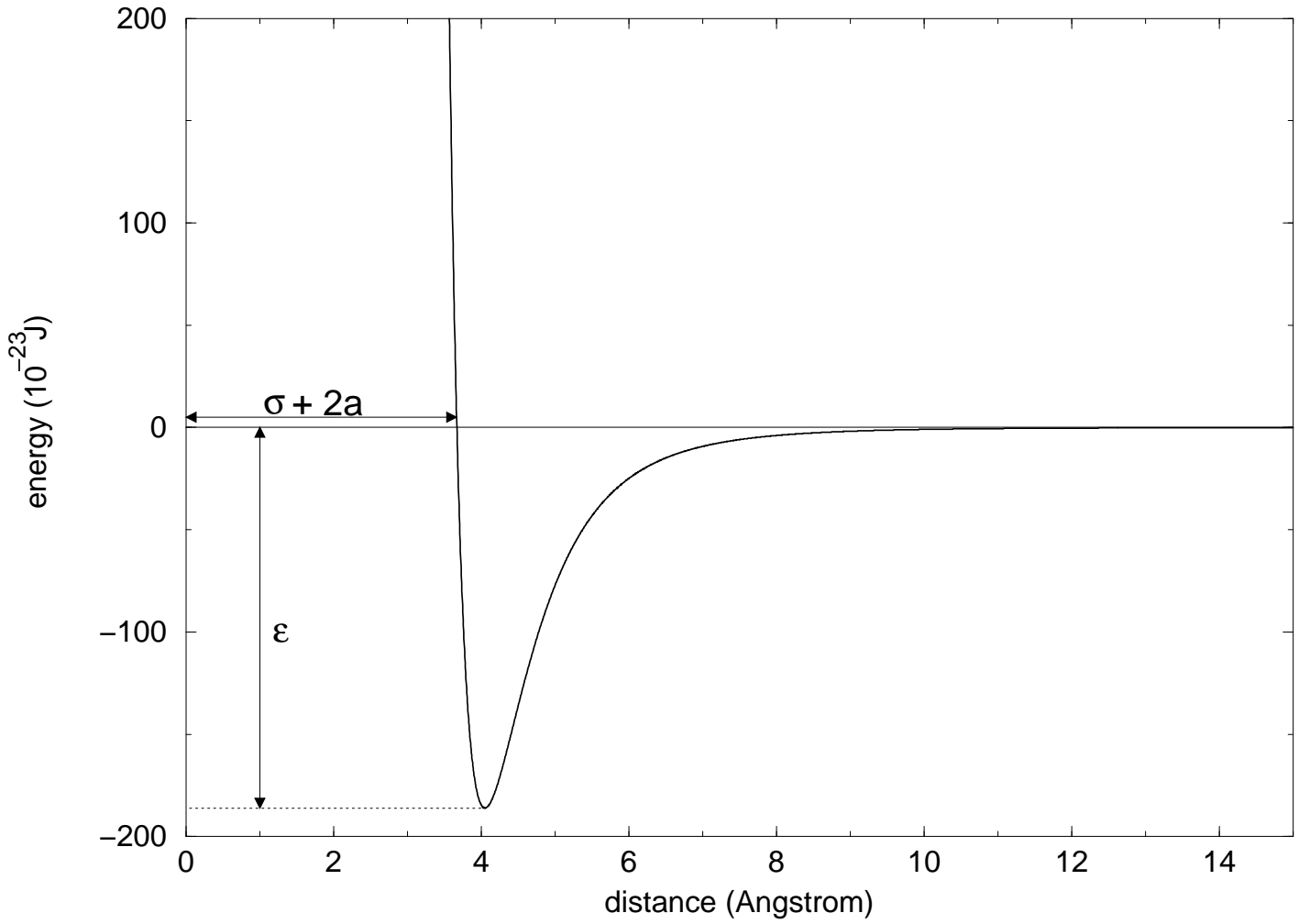
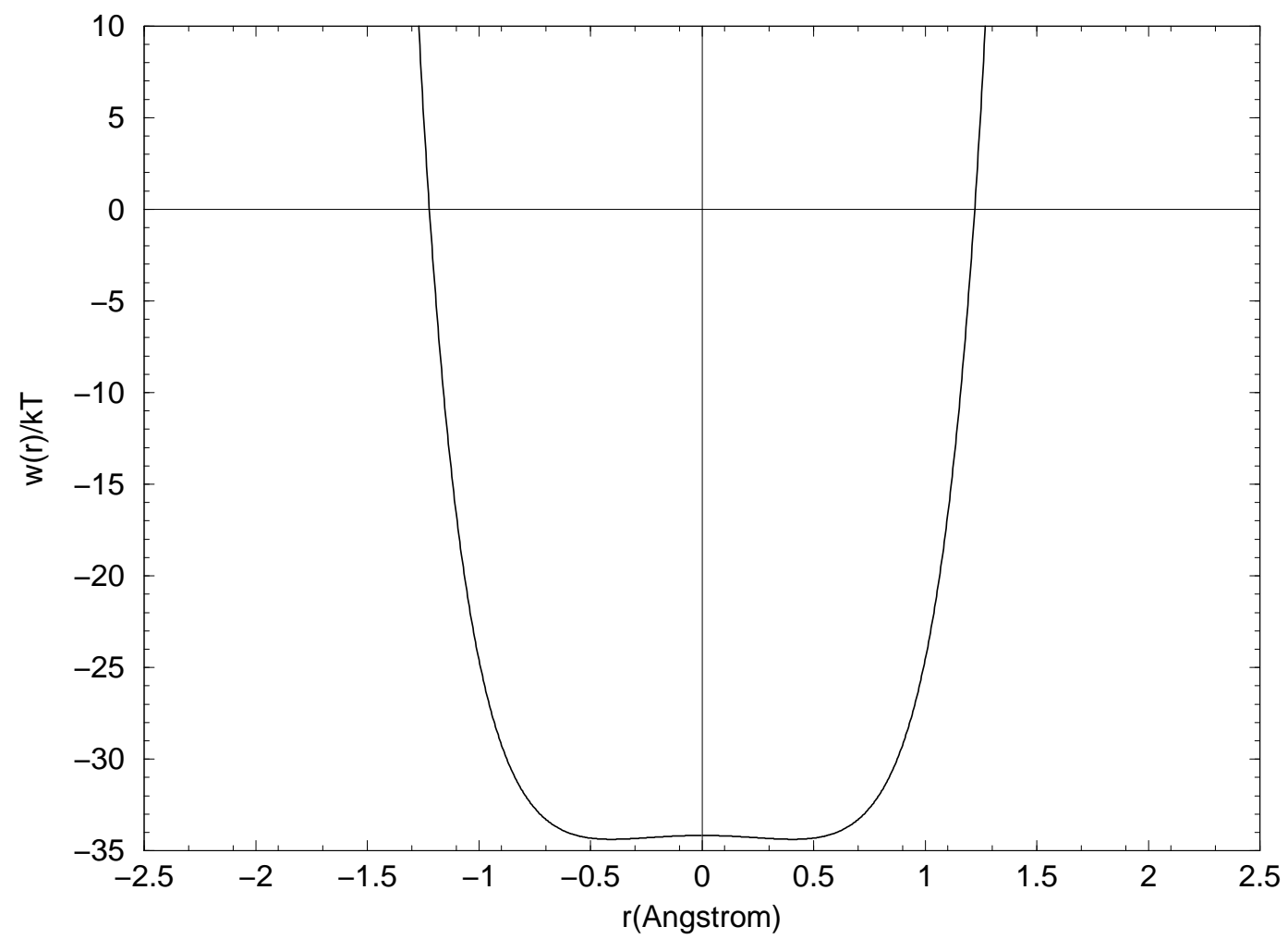


Fig. 10



- 50 -

Fig. 11



Annexe G

Momentum transport and torque scaling in Taylor-Couette flow from an analogy with turbulent convection

Reproduction d'un article publié en 2002 :
European Physical Journal B
volume 26
pages 379-386

Momentum transport and torque scaling in Taylor-Couette flow from an analogy with turbulent convection

B. Dubrulle^{1,a} and F. Hersant^{2,3}¹ CNRS, Groupe Instabilité et Turbulence, CEA/DRECAM/SPEC, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France² CNRS, Service d'Astrophysique, CE Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France³ CNRS, FRE2461, Laboratoire d'Études Spatiales et d'Instrumentation en Astrophysique, Observatoire de Meudon, 92195 Meudon Cedex, France

Received 7 June 2001 and Received in final form 7 December 2001

Abstract. We generalize an analogy between rotating and stratified shear flows. This analogy is summarized in Table 1. We use this analogy in the unstable case (centrifugally unstable flow *vs.* convection) to compute the torque in Taylor-Couette configuration, as a function of the Reynolds number. At low Reynolds numbers, when most of the dissipation comes from the mean flow, we predict that the non-dimensional torque $G = T/\nu^2 L$, where L is the cylinder length, scales with Reynolds number R and gap width η , $G = 1.46\eta^{3/2}(1-\eta)^{-7/4}R^{3/2}$. At larger Reynolds number, velocity fluctuations become non-negligible in the dissipation. In these regimes, there is no exact power law dependence of the torque *versus* Reynolds. Instead, we obtain logarithmic corrections to the classical ultra-hard (exponent 2) regimes: $G = 0.50 \frac{\eta^2}{(1-\eta)^{3/2}} \frac{R^2}{\ln[\eta^2(1-\eta)R^2/10^4]^{3/2}}$. These predictions are found to be in excellent agreement with available experimental data. Predictions for scaling of velocity fluctuations are also provided.

PACS. 47.27.-i Turbulent flows, convection and heat transfer – 47.27.Eq Turbulence simulation and modeling – 47.27.Te Convection and heat transfer

1 Motivation and objectives

At sufficiently large Reynolds number, the fluid between co-rotating coaxial cylinders becomes turbulent, and a significant momentum transport occurs between the two cylinders. In the case with rotating inner cylinder and resting outer one (the so-called Taylor-Couette flow), detailed measurements show that the torque applied at cylinders by the turbulent flow is a function of the Reynolds number R . There is no clear consensus about this dependence yet: marginal stability computation of King *et al.* [1] or Barcilon and Brindley [2] predict that the non-dimensional torque $G = T/\nu^2 L$, where L is the cylinder height should vary like $G \sim R^{5/3}$. Old experimental data indicated the existence of two scaling regimes, one for $R > 10^4$ where the exponent is 1.5, and one for larger Reynolds number, where the exponent switches towards 1.7 – 1.8 [3–5]. Recent high precision experimental data yielded no region of constant exponent, and revealed a transition with a marked change of approximate slope of G as a function of R [6,7]. This observation led Eckhardt *et al.* [8] to propose a new theory, in which the dependence G *versus* R is

through a superposition of scaling laws (describing contribution from a boundary layer and the bulk flow). They claim that this superposition fits the data better than the Prandtl-Karman skin friction law proposed by [6,9,7]. Note that all the scalings are within the theoretical bound derived by Doering and Constantin [10], which implies that the non-dimensional torque cannot increase faster than R^2 .

The observational features are reminiscent of heat transport in turbulent thermal convection, where approximate scaling laws and transition between different regimes have also been observed (for a review see [11]). In fact, this similarity is pointed out in [6], and in [8], and similar techniques are used in [1,12] and in [11,8] to derive theoretically the scaling regimes in the Rayleigh-Bénard system, and in the Taylor-Couette system. However, the similarity is more than superficial: as well known since several decades [13], there is an exact analogy between equations of motions of rotating and stratified shear flows (stable or not). There must therefore exist an exact analogy between the momentum and heat transport in these two systems, although it has so far never been explored. Our goal here is to derive this analogy, and examine its consequences in the unstable regime, where the angular momentum or

^a e-mail: bdubru@discovery.saclay.cea.fr

temperature stratification leads to a linear instability. We thus in this paper mainly focus on the analogy between centrifugally unstable Taylor-Couette flow, and convection.

2 The analogy

2.1 Reminder

The root of the analogy can be found in the Lamb formulation of the Navier-Stokes equations:

$$\partial_t \mathbf{u} - \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} = -\nabla \left(p + \frac{u^2}{2} \right) + \nu \Delta \mathbf{u}, \quad (1)$$

where $\boldsymbol{\omega}$ is the vorticity, p is the pressure and ν the molecular viscosity. The constant density has been set equal to one for simplicity. In a rotating shear flow $\mathbf{u} = V(r)\mathbf{e}_\theta$, the vorticity is only in the axial direction and the Lamb vector $\mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega}$ acts only in the radial direction. Its contribution can be split in two parts:

$$\mathbf{e}_r \cdot (\mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega}) = VS + 2\frac{\Omega}{r}\mathcal{L}, \quad (2)$$

where $\mathcal{L} = rV$ is the angular momentum, $\Omega = V/r$ is the angular velocity and $S = r\partial_r\Omega$ is the shear. The first contribution is the exact analog of the Lamb vector of a pure shear flow, in a plane parallel geometry. The second contribution reflects the stabilizing influence of the Coriolis force. Its analog would be produced by temperature stratification in the spanwise direction of a planar shear flow. The equation of angular momentum conservation then suggests to split further this analogy by requiring that $2\Omega/r \sim \beta g$, where g is the gravity, and β a coefficient of thermal expansion, and $\mathcal{L} \sim \Theta$, the potential temperature. This remark is at the heart of the analogy between the stability properties of rotating and stratified shear flows, and has been used in the past (see *e.g.* [13]...). Our point here is to show that it can be extended into the turbulent regime, *via* a new Langevin model of small-scale turbulence. This new model is based on Rapid Distorsion Theory, *i.e.* on linearized equations for the small-scale motions. This linear structure explains the possibility of extension of the analogy towards the turbulent regime.

2.2 The turbulent model

The turbulent model has been described and tested in [14] for general 3D flows, in [15,16] for shear flows and in [17–20] for stratified shear flows. In this model, the dynamics of the turbulent flow is obtained from solutions of two coupled sets of equations. The first one described the dynamics of the mean velocity \mathbf{U} :

$$\partial_t U_i + \partial_j U_i U_j + \partial_j \langle u'_i u'_j \rangle = -\partial_i P + \nu \partial_j \partial_j U_i, \quad (3)$$

Here, the primes denote fluctuating quantities and $\langle \rangle$ the averaging. To close the system, we need $\langle u'_i u'_j \rangle$. They are obtained as solution of a linear, stochastic equation valid for localized wave-packets of velocity and temperature:

$$\begin{aligned} D_t \hat{u}_i &= -ik_i \hat{p} - \hat{u}_j \partial_j U_i - \nu_t k^2 \hat{u}_i + \hat{f}_i \\ k_i \hat{u}_i &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

where

$$\hat{u}(\mathbf{x}, \mathbf{k}, t) = \int g(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \mathbf{u}(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}', \quad (5)$$

g being a function which decreases rapidly at infinity. We have dropped primes on fluctuating quantities for convenient notations and introduced the total derivative $D_t = \partial_t + U_j \partial_j - \partial_j (U_i k_i) \partial_{k_j}$. Once the solutions of (4) have been computed, the Reynolds stress is found by an inverse Gabor transform as:

$$\begin{aligned} \langle u'_i u'_j \rangle &= \int d\mathbf{k} (u'_i(\mathbf{k}, \mathbf{x}, t) u'_j(-\mathbf{k}, \mathbf{x}, t) \\ &\quad + (u'_i(-\mathbf{k}, \mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{k}, \mathbf{x}, t))). \end{aligned} \quad (6)$$

Note that the linear part of (4) is exact and describes non-local interactions between the mean and the fluctuating part. The major approximation of the model is to lump the non-linear terms describing local interactions between fluctuations into a turbulent viscosity ν_t . The force f appearing in (4) is a small scale random forces which is introduced to model the seeding of small scales by energy cascades (for example *via* turbulent structures, detaching from the wall).

2.3 The Taylor-Couette case

In the Taylor-Couette (rotating shear flow) case, the equations for the azimuthal component of the velocity $V(r)$ simplify into:

$$\partial_t V + \frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \langle uw \rangle = \nu \left(\nabla^2 V - \frac{V}{r^2} \right). \quad (7)$$

The equation for the fluctuations (u, v, w) become:

$$\begin{aligned} D_t \hat{u} &= 2\frac{k_r k_\theta}{k^2} (\Omega + S) \hat{u} + 2\Omega \hat{v} \left(1 - \frac{k_r^2}{k^2} \right) \\ &\quad - \nu_t k^2 \hat{u} + \hat{f}_r, \\ D_t \hat{v} &= 2\frac{k_\theta^2}{k^2} \hat{u} (\Omega + S) - 2\frac{k_r k_\theta}{k^2} \hat{v} \Omega - (2\Omega + S) \hat{u} \\ &\quad - \nu_t k^2 \hat{v} + \hat{f}_\theta, \\ D_t \hat{w} &= 2\frac{k_\theta k_z}{k^2} \hat{u} (\Omega + S) - 2\frac{k_r k_z}{k^2} \hat{v} \Omega - \nu_t k^2 \hat{w} + \hat{f}_z. \end{aligned} \quad (8)$$

Table 1. The detailed analogy between stratified and rotating shear flow. The notations for the stratified case are from [17].

stratified shear flow	rotating shear flow
z	r
x	θ
$\partial_z U$	$r\partial_r \Omega$
βg	$2\frac{\Omega}{r} \sin^2 \phi$
$\partial_z \Theta$	$\frac{1}{r}\partial_r(r^2\Omega)$
w	u
θ	$(rv - w \cot \phi)$

Here, we have used the incompressibility to eliminate the pressure. These equations have to be supplemented by the equations describing the ray trajectories:

$$\begin{aligned} \dot{r} &= 0, & \dot{\theta} &= \Omega, & \dot{z} &= 0, \\ \dot{k}_r &= -k_\theta S, & \dot{k}_\theta &= 0, & \dot{k}_z &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

We now introduce a pseudo-temperature

$$\hat{\theta} = r(\hat{v} - \frac{k_\theta}{k_z}\hat{w}) = ir\frac{\hat{\omega}_r}{k_z}, \quad (10)$$

where $\hat{\omega}_r$ is the radial vorticity. With this temperature and using the incompressibility condition $\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} = 0$, we can rewrite (8) as:

$$D_t \hat{u} = 2S \frac{k_r k_\theta}{k^2} \hat{u} + 2\frac{\Omega}{r} \frac{k_z^2}{k^2} \hat{\theta} - \nu_t k^2 \hat{u} + \hat{f}_r, \quad (11)$$

$$D_t \hat{\theta} = (2\Omega + S)r\hat{u} - \nu_t k^2 \hat{\theta} + \hat{f}_\theta. \quad (12)$$

The set of equation (12) is the exact analog of the equations describing the behavior of vertical and temperature fluctuations in a stratified shear flow (see [17–20] for their expression), provided the correspondence summarized in Table 1 holds. Note that the analog of the temperature is not the angular momentum, but related to the z -integral of the radial vorticity (in Gabor variable, integration on z is done *via* division by k_z). At large scale, since the velocity profile is axi-symmetric, this integral of the radial vorticity reduces to the angular momentum, as previously suggested [13].

2.4 Stability and importance of axi-symmetric modes

The correspondence described in Table 1 generalizes the well-known analogy established previously [13] for the stability analysis under axi-symmetric perturbations (case where $k_\theta = 0$). In particular, from (12), one can write a compact differential equation for $\omega = uk^2$:

$$D_t^2 \omega + \kappa^2 k_z^2 \frac{\omega}{k^2} - \nu k^2 \omega + f_\omega = 0, \quad (13)$$

where $\kappa^2 = 2\Omega(2\Omega + S)$ is the epicyclic frequency. Using the ray equation (9), one can then define a non-dimensional number $B = \kappa^2 k_z^2 / (k_\theta^2 + k_z^2)$ (the Bradshaw number) which governs the stability of the wave packet along the trajectory. This number is the analog of Richardson number in stratified shear flow. For example, it can be shown that in the absence of diffusion, the amplitude of the wavepacket has a monotonic (growing for one mode, decaying for another one) behavior at late time for $B < 1/4$, while it becomes oscillatory for $B > 1/4$. Clearly, the oscillatory behavior creates dephasing effects for the Reynolds stresses, which may lead to its pure cancellation, thereby removing the influence of the small scales onto the large scale. We therefore identify the regime with $B > 1/4$ as a regime with purely laminar motions, where turbulence effects are strongly suppressed. This property tends to favor bi-dimensional modes (those for which $k_z = 0$) since in this case the epicyclic frequency can take any value for non-oscillatory behavior. The inclusion of diffusion changes the mode selection. One can indeed check that the viscous decay is proportional to $\exp(-R^{-1}tS)$ rather than $\exp(-R^{-1}(tS)^3)$ for non-axi-symmetric perturbations. This shows that axi-symmetric perturbation (with $k_\theta = 0$) are favored with respect to non-axi-symmetric perturbation. In this case, the Bradshaw number becomes independent of the wavenumber of the wave packet, and one can identify a new boundary of stability according to its sign: when it is positive, axi-symmetric perturbations can be exponentially amplified and superseed viscous decay. We call this regime “unstable”. It is the analog of the convective regime in the stratified case. In the sequel (Sect. 3), we shall concentrate on this regime, leaving the other regime for further study.

2.5 Completion of the analogy in the unstable case

For axi-symmetric modes, $\omega_r/k_z = v$ and the equation for the mean angular momentum \mathcal{L} can then be written in equivalent form:

$$\partial_t \mathcal{L} + \frac{1}{r} \partial_r (r \langle u\theta \rangle) = \nu \left(\nabla^2 \mathcal{L} / r - \frac{\mathcal{L}}{r^2} \right). \quad (14)$$

Comparing this equation with the equation giving the mean temperature profile, we finally remark that the only difference lies in the viscous terms, because in cylindrical coordinates, the Laplacian includes terms describing curvature effects. In the most general case, this forbids the analogy to be drawn at the level on mean profile (*i.e.* after integration over r of equation (7): for example, it is well known that in stratified shear flow, the laminar temperature profile is linear, while its analog, the laminar angular momentum profiles varies like: $L \sim Ar^2 + B$. In many Taylor-Couette experiments, however, the gap between the two cylinders is small, and curvature effects can be neglected. One can for example check that the angular momentum in the experiments by [6] is linear in the laminar regime, while it flattens at the center of the gap in

the turbulent regime, exactly like its temperature analog. In the sequel, we shall assume a small gap geometry, and neglect curvature effects.

3 Application of the analogy in the unstable case

The present analogy is the turbulent generalization of a previously known analogy for axi-symmetric modes. In the sequel, we shall use previous considerations about stability of axi-symmetric modes to assume that the turbulent properties are dominated by the contribution of the axi-symmetric modes, *i.e.* restrict ourselves to these modes. The relevance of this approximation will be tested by comparisons of its predictions regarding some characteristic quantities measured, in the turbulent regime with experimental data.

3.1 Stability

In the unstable regime, a classical parameter describing the intensity of the convection is the Rayleigh number:

$$Ra = \frac{\beta g D^3 \Delta \Theta}{\kappa \nu}, \quad (15)$$

where D is the size of the cell in the stratified direction, $\Delta \Theta$ is the temperature gradient applied. In most convection experiments, this number is unambiguously defined because of the constancy of the gravity at the scale of the experiment. In the Taylor-Couette case, the gravity depends on the perturbation, and one may wonder how to define this Rayleigh number in a general way. In a recent analysis of stability of Taylor-Couette experiment, Esser and Grossman [21] suggested to evaluate this factor at the gap center, $r_c = (r_1 + r_2)/2$, leading to

$$\begin{aligned} Ra_* &\equiv -2 \frac{\Omega}{r} \partial_r \mathcal{L} \frac{d^4}{\nu^2} \Big|_{r=r_c}, \\ &= 4 \frac{\eta^2}{(1-\eta^2)^2} \left(\frac{d^2}{r_c^2} - \frac{d^2}{r_2^2} \right) R^2, \\ &= 4 \frac{\eta^2(1-\eta)(3+\eta)}{(1+\eta)^4} R^2. \end{aligned} \quad (16)$$

In the sequel, we shall use a star label to refer to analog quantities. In (16), we have used $\kappa_* = \nu$ and introduced the Reynolds number $R = r_1 d \Omega_1 / \nu$, where r_1 is the internal radius, Ω_1 the rotation rate at the inner radius, d the gap width and $\eta = r_1 / r_2$. Note that the analog Rayleigh number Ra_* varies with the radial aspect ratio η . In the small gap approximation $\eta \rightarrow 1$, experiments show that the critical Rayleigh number tends to a constant $Ra_* \approx 1706$. This value is very close to the value $Ra = 1707.762$ obtained in Rayleigh-Bénard convection for rigid boundary conditions [22]. In sheared convection, the critical Rayleigh number is modified with respect to this theoretical value, and display corrections

quadratic in the Reynolds number based on the shear. In the present case, these correction are proportional to $(1-\eta)^4 \rightarrow 0$, and the critical Rayleigh number stays close to the un-sheared value $Ra = 1707.762$. A last modification of the critical Rayleigh number occurs because of lateral wall effects. As a result, the critical Rayleigh number increases with decreasing aspect ratio Γ (lateral width over radial width). For example, for $\Gamma = 5, 2, 1, 0.5$, $Ra_c = 1779, 2013, 2585, 12113$. In most Taylor-Couette experiments, the aspect ratio is very large (typically above 8 or so). So the analog critical Rayleigh number is close to 1708. However, many modern convection experiment (reaching very large Rayleigh numbers) deal with a rather small aspect ratio ($\Gamma \sim 1$). This unfortunately limits the possibilities of direct comparisons between the Taylor-Couette experiments and the convective experiments to values close to the onset of instability. For larger values of Rayleigh numbers, we shall use extrapolations.

3.2 Angular momentum transfer

A second interesting quantity in convection is the non-dimensional heat transfer $Nu = Hd/\kappa \Delta T$, where H is the heat transfer. *Via* the analogy, the analog of this is the non-dimensional angular momentum transfer, which can be computed using the non-dimensional torque $G = T/\nu^2 L$, where L is the cylinder length:

$$\begin{aligned} Nu_* &\equiv \frac{G}{G_{\text{laminar}}}, \\ &= \frac{G(1+\eta)(1-\eta)^2}{R 4\pi\eta}. \end{aligned} \quad (17)$$

The normalization by G_{laminar} ensures that in the laminar case, $Nu_* = 1$, like in the convective analog.

3.2.1 Instability onset

Theoretical [23] and experimental [24] studies of convection near threshold lead to identification of two regimes just above the critical Rayleigh number:

for $\epsilon = \frac{Ra - Ra_c}{Ra_c} \leq 1$, a linear regime in which

$$(Nu - 1) \frac{Ra}{Ra_c} = K_1 \epsilon. \quad (18)$$

The constant K_1 depends on the Prandtl number. For $Pr = 1$, it is $K_1 \approx 1/0.7 = 1.43$ [23].

For larger ϵ , a scaling regime in which [24]

$$(Nu - 1) \frac{Ra}{Ra_c} = K_2 \epsilon^{1.23}. \quad (19)$$

Here, K_2 is a constant which is not predicted by the theory. In Figure 1, we show how the results of Wéndt obtained with $\eta = 0.935$ near the instability threshold compare with these two predictions. One sees that the linear regime is indeed obtained for $\epsilon \leq 10$, while the scaling regime is obtained for larger values of $10 < \epsilon < 100$. Further from the threshold, one needs to compare with the turbulent theories of convection.

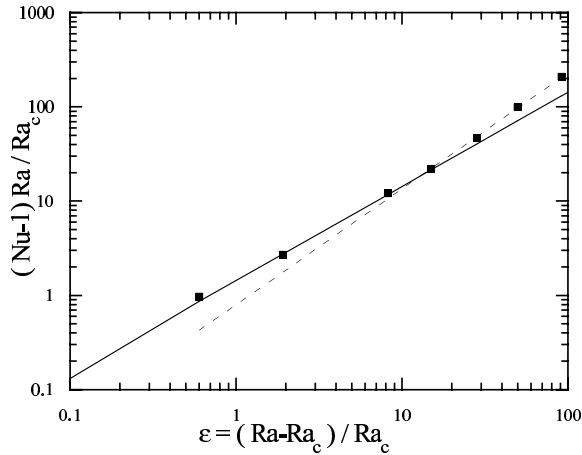


Fig. 1. Comparison of the theoretical near instability onset behavior with the data of Wendt [3]. The symbols are the experimental measurements. The two lines are the theoretical formula predicted by analogy with convection for $\epsilon < 1$ ($(Nu - 1)Ra/Ra_c = 1.43\epsilon$) and for $\epsilon > 1$ ($(Nu - 1)Ra/Ra_c \sim \epsilon^{1.23}$). In the latter case, the proportionality constant is not constrained by the analogy, and needs to be adjusted for a best fit.

3.3 The classical turbulent regimes

Using (17), we can single out some interesting regimes. Note that since $\kappa_* = \nu$, we are in the case of unit Prandtl number convection, *i.e.* for example convection in helium ($Pr > 0.7$). In the classical theory of convection, one usually considers three regimes: a first one, labeled as “soft turbulence”, in which $Nu \sim Ra^{1/3}$, $5 \times 10^5 < Ra < 2 \times 10^7$ [25]; then for $2 \times 10^7 < Ra < 10^{11}$, a “hard turbulence” regimes in which $Nu \sim Ra^{2/7}$ [26]; finally for $Ra > 10^{11}$, a ultra-hard turbulence regime in which $Nu \sim Ra^{1/2}$ [27,28]. Using the analogy, we see that these three regimes translate into: for $707 < R\eta(1 - \eta)^{1/2} < 4472$, $G \sim R^{5/3}$; for $4472 < R\eta(1 - \eta)^{1/2} < 3 \times 10^5$, $G \sim R^{11/7}$; for $(1 - \eta)^{1/2}\eta R > 3 \times 10^5$, $G \sim R^2$. To evaluate the boundary between the two regimes, we have used (16) at $\eta = 1$.

The first regime has been predicted by [2,1] using marginal stability analysis. The third regime can be derived from Kolmogorov type arguments (see *e.g.* [6]). It also corresponds to some upper-bound in the angular momentum transport [10]. The intermediate regime is new, and leads to a scaling exponent of 1.57. Experimentally, some of this scaling regimes have been reported, but not in the same sequence: in his experiments with $0.680 < \eta < 0.935$, Wendt [3] reports a scaling exponent of 1.5 for $400 < R < 10^4$, followed by a scaling exponent 1.7 for $10^4 < R < 10^5$. In more recent experiments, Lathrop *et al.* [6] measure a “local” exponents $d \ln(G)/d \ln(R)$ which varies continuously from 1.2 to 1.9, with a transition at $R \sim 1.3 \times 10^4$ (for $\eta = 0.7246$). This transition was later found to correspond to a modification of coherent structures in the flow [7]. Remarkably enough, the analog Rayleigh number characterizing this transition

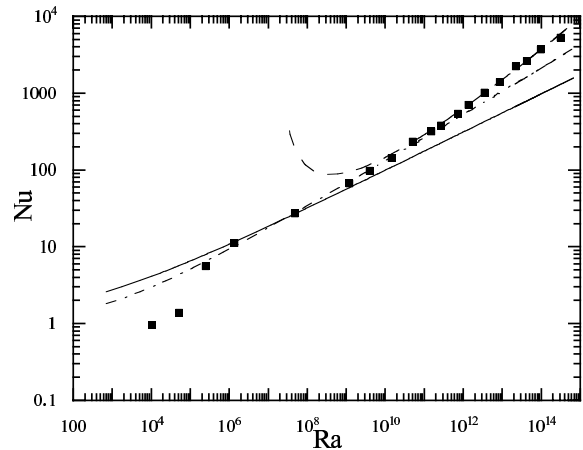


Fig. 2. Illustration of the three scaling regimes found in convection in helium for Nusselt *vs.* Rayleigh. The symbols are experimental measurements by [28]. The lines are theoretical prediction by [19] using an analytical model of turbulent convection: “Soft” turbulence regime (mean flow dominated): power law $Nu \sim Ra^{1/4}$ (full line); “Hard” turbulence regime: (velocity fluctuation dominated) $Nu \sim Ra^{1/3}/(\ln(Ra))^{2/3}$ (dotted line); “Ultra-hard” turbulent regime: (temperature fluctuations dominated) $Nu \sim Ra^{1/2}/(\ln(Ra))^{3/2}$ (dashed line).

is $Ra_* = 2 \times 10^7$, like in convection. We may therefore interpret it as the boundary between “soft” and “hard” turbulence. However, the scaling reported in [6] does not seem to fully correspond to the soft and hard turbulence scaling. In the sequel, we wish therefore to explore a new possibility, based on logarithmic corrections to scaling.

3.4 The logarithmic turbulent regimes

The observation by [6] that no scaling prevails for the angular momentum transport has in fact its counterpart for the heat transport in convection [11]. In a recent work, we used the turbulent model to analytically compute the heat transport in a convective cell. At $Pr = 1$, we found 3 different regimes: at low Rayleigh number, the dissipation is dominated by the mean flow, and $Nu = K_1 Ra^{1/4} Pr^{-1/12}$; at larger Rayleigh number, the kinetic energy dissipation starts being dominated by velocity fluctuations, and the heat transport becomes $Nu Pr^{1/9} = K_2 Ra^{1/3}/\ln(Ra Pr^{2/3}/20)^{2/3}$. Finally at very large Rayleigh number, the heat dissipation becomes also dominated by (heat) fluctuations, and $Nu = K_3 Ra^{1/2}/\ln(Ra/Ra_c)^{3/2}$. Figure 2 shows the illustration of these 3 regimes in a helium experiment of [28], with the three fits corresponding to these 3 regimes. From this graph, we obtain $K_1 = 0.31$, $K_2 = 0.45$, $K_3 = 0.023$ and $Ra_c = 2 \times 10^7$, for an aspect ratio of 0.5. These constants tend to decrease slightly for larger aspect ratio by an asymptotic factor of about 0.75 (at $Ra = 10^8$, see Tab. 1 of [28]). The small aspect ratio of the experiment also increases the critical Rayleigh for instability

from near 1708 to near 4×10^4 . The boundary between the regime 1 and 2 lies at $Ra = 1.5 \times 10^8$. It is characterized by a change in the temperature statistics, going from nearly Gaussian to exponential. The boundary between the regime 2 and 3 is somehow ill defined, and lies between $Ra = 2 \times 10^{10}$ and $Ra = 10^{11}$. Note that in a similar experiment, ran by another group, the third regime was not detected, even at $Ra = 10^{15}$ [29]. The reason of this difference is not yet known. A possibility would be that different boundary conditions may or may not allow the growth of the temperature perturbation, thereby favoring or inhibiting this last regime [19].

The translation of the three logarithmic regimes using the analogy gives *a priori* three possible regimes in the Taylor-Couette experiments.

In the regime 1, we get:

$$G = K_4 \frac{\eta^{3/2}}{(1-\eta)^{7/4}} R^{3/2}. \quad (20)$$

In the regime 2, we get:

$$G = K_5 \frac{\eta^{2/3}}{(1-\eta)^{5/3}} \frac{R^{5/3}}{\ln[\eta^2(1-\eta)R^2/K_6]^{2/3}}, \quad (21)$$

while in the regime 3, we get:

$$G = K_7 \frac{\eta^2}{(1-\eta)^{3/2}} \frac{R^2}{\ln[\eta^2(1-\eta)R^2/K_8]^{3/2}}. \quad (22)$$

In these expressions, we have introduced 5 unknown coefficients, which *a priori* depend on the aspect ratio. Since there is no available large Rayleigh number large aspect ratio convection experiments, we shall extrapolate or fit these coefficients by comparison with Taylor-Couette data.

3.5 Comparison with experiments

For this, we use torque measurements from Wendt [3] and [6,7]. The regime 1 should be observed at rather moderate Reynolds numbers. Therefore, it explains very well the old measurements by Wendt [3] who found the same exact dependence in η and R for $400 < R < 10^4$, and with a prefactor of $K_4 = 1.45$. The analogy with convection predicts that $K_4 = 2\pi K_1$. The small aspect ratio convective experiment extrapolated at large aspect ratio gives $K_1 = 0.75 \times 0.31$, which translates into $K_4 = 1.46$. This is in very good agreement with the prefactor measured by Wendt.

The second regime predicts torque varying more slowly than $R^{5/3}$. It could therefore only marginally explain the second regime observed by Wendt, for $R > 10^4$, in which $G \sim R^{1.7}$. However, it could explain the regime obtained by [6,7] for $R \sim 10^4$, in which a continuously varying scaling exponent was obtained. This is shown in Figure 3, where the fit to the data of [7] is compared with the theoretical formula (21). The comparison is made using coefficients extrapolated from the small aspect ratio convection experiment: $K_6 = 20$, $K_5 = 2\pi K_2$ with $K_2 = 0.75 \times 0.45$. It may happen however that this regime 2 does not exist

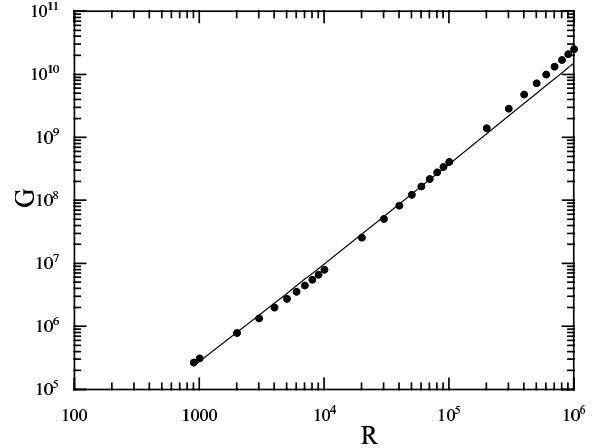


Fig. 3. Torque *vs.* Reynolds in Taylor-Couette experiments. The symbols are the data of [7]. The line is the theoretical formula obtained in the hard turbulence regime and computed using the analogy with convection $G = AR^{5/3}/(\ln(R/B))^{2/3}$. The two constants A and B are not fitted to the data, but are analytically computed using the analogy with convection.

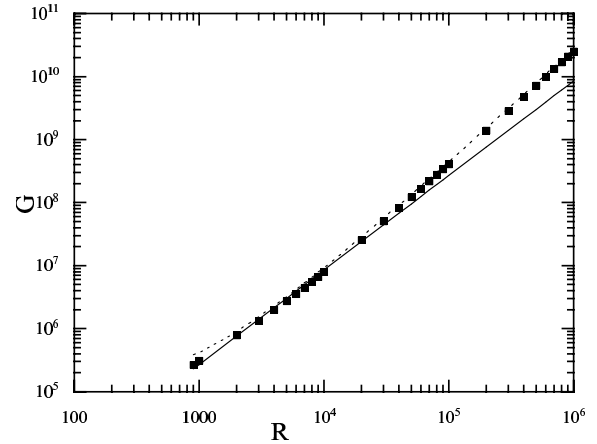


Fig. 4. Torque *vs.* Reynolds in Taylor-Couette experiments. The symbols are the data of [7]. The lines are the theoretical formula obtained in the soft and ultra-hard turbulence regimes and computed using the analogy with convection. Soft turbulence equation (20) (full line); ultra-hard turbulence equation (22) (dotted line). In the former case, all the constants are analytically computed using the analogy. In the latter case, we have seek the best adjustment with data by adjusting the two constants.

in Taylor-Couette experiments. Indeed, since the temperature analog is related to the velocity, it might be impossible to excite velocity fluctuations without exciting pseudo-temperature fluctuations. This would mean a direct transition from regime 1 (mean flow dominated) to regime 3 (fluctuation dominated). This possibility is explored in Figure 4, where we show the best fit of the measurements of Lewis and Swinney, with formula (22). This fit uses $K_7 = 0.50$ and $K_8 = 10^4$. Notice the big difference between these constants and their extrapolation from the

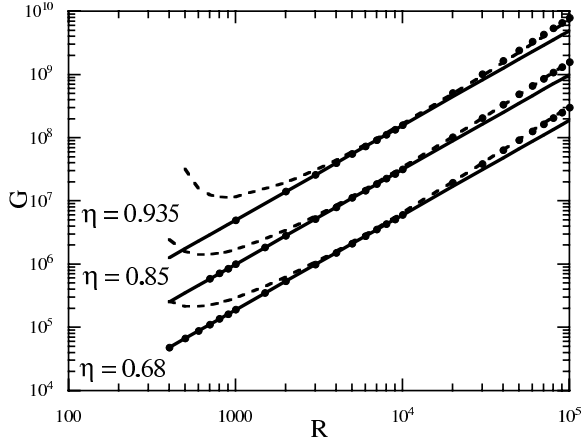


Fig. 5. Torque *vs.* Reynolds in Taylor-Couette experiments for different gap widths $\eta = 0.68$, $\eta = 0.85$ and $\eta = 0.935$. The symbols are the data of [3]. The lines are the theoretical formula obtained in the soft and ultra-hard turbulence regimes and computed using the analogy with convection. Soft turbulence equation (20) (full line); ultra-hard turbulence equation (22) (dotted line). There is no adjustable parameter in this comparison, all the constants being fixed either by the analogy with convection, or by the comparison with the data of [7].

convective case $K_7 = 0.145$ and $K_8 = 2 \times 10^7$. This may reflect the sensitivity to boundary conditions of the regime 3. Note however that the fit is excellent from $R = 10^3$ up to $R = 10^6$. Below $R = 10^4$, the regime 1 with $K_2 = 1.46$ fits the data very well also. As a last check, we have compared this regime 3 with the constant fitted for Lewis and Swinney's data, to the data of Wendt. The result is shown in Figure 5, for 3 different gap $\eta = 0.68, 0.85, 0.935$. The agreement is excellent.

3.6 Velocity fluctuations

The analogy can also be used to predict the behavior of velocity fluctuations. In [7], the azimuthal turbulent intensity $i_\theta = \sqrt{\langle u_\theta^2 \rangle} / U_\theta$ was measured at midgap with hot film probes. Above 1×10^4 , a fit yields

$$i_\theta = 0.10R^{-0.125}. \quad (23)$$

Using the analogy, this intensity is related to the temperature fluctuations at mid-gap, in the ultra hard turbulent regime (regime 3). The total analog temperature fluctuation in fact also includes vertical velocity fluctuations (see Tab. 1). In an axisymmetric turbulence, one could therefore expect that the turbulent intensity measured by Lewis and Swinney is proportional to the temperature analog. Recent measurements of this quantity at Rayleigh number up to $Ra = 10^{15}$ have been measured by [29] in a low aspect ratio helium experiment. They found $\theta/\Delta T = 0.37Ra^{-0.145}$, but this was obtained in a regime where the Nusselt number varies like in regime 2 (velocity fluctuation dominate but NOT temperature fluctuation). Using the analogy, this would translate into a

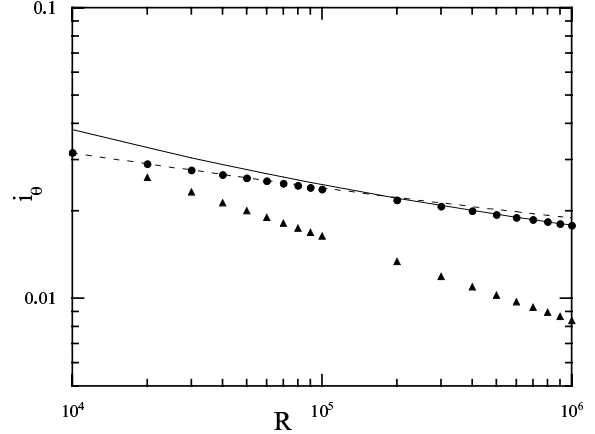


Fig. 6. Azimuthal velocity fluctuations in Taylor-Couette flow. The circles are the power-law fits of experimental measurements by [7]. The triangles are the power-law fit to the temperature fluctuations (analog of azimuthal velocities) in helium by [29]. The line is the prediction obtained with the analog of the free-convective regime [30]. The dotted line is the theoretical formula predicted by our model equation (26).

regime where $i_\theta \sim R^{-0.29}$, in clear contradiction with the data of Lewis and Swinney, see Figure 6. This might therefore be another proof of the absence of the regime 2 in Taylor-Couette experiment.

Unfortunately, we are not aware of temperature measurements in convective turbulence in the ultra-hard regime. In previous analysis of temperature fluctuations in the atmospheric boundary layer, Deardoff and Willis [30] showed that temperature fluctuations follow the free convection regime

$$\frac{\theta}{\Delta T} \propto \frac{Nu}{(PrRaNu)^{1/3}}, \quad (24)$$

where the proportionality constant is of the order 1. Figure 6 shows the application of this scaling to the data of Lewis and Swinney, where the analogy was used to translate torque and Reynolds into Nusselt and Rayleigh. The best agreement with the experimental fit of Lewis and Swinney is obtained for a prefactor 1.8. We can also compare the results with the theoretical prediction given by the convective model. In this model [19], the temperature fluctuations in the boundary layer obey:

$$\frac{\langle \theta'^2 \rangle}{\Delta T^2} = \lambda_u \frac{Nu^{5/2}}{(RaPr)^{1/2}} \frac{\sqrt{1 + (z/\lambda_u)^2}}{1 + (zNu)^2}, \quad (25)$$

where λ_u is the height of the viscous velocity layer. The value at the height of the boundary layer is obtained for $z = \lambda_{BL}$, the size of the boundary layer, which was shown to vary like $\lambda_{BL} \sim (RaNu)^{-1/8} / \sqrt{\ln(RaNu)}$. Assuming that the value at mid-gap equals this maximal value, we obtain:

$$\frac{\sqrt{\langle \theta'^2 \rangle}}{\Delta T} = K_{10} \frac{Nu^{5/16}}{Ra^{3/16}} (\ln(RaNu/K_{11}))^{1/4}. \quad (26)$$

This prediction is shown in Figure 6, using a fitted prefactors of $K_{10} = 0.16$ and $K_{11} = 1$. It is in very good agreement with the experimental fit of Lewis and Swinney.

4 Conclusion

In this paper, we have shown how a well-known analogy between stratified and rotating shear flows, for axisymmetric perturbations, can be extended into the turbulent regime. Assuming predominance of the axisymmetric perturbation in the turbulence dynamics, we used this analogy in the unstable case (analogy between convection and centrifugally unstable Taylor-Couette flow) to predict the scaling of the momentum transfer and velocity fluctuations. Our prediction is that at low Reynolds number, the non-dimensional torque follows (20) while at $R > 10^4$, it follows (22). The analogy can also be used to discriminate between theories about Taylor-Couette turbulent quantities. For example, we have shown that the “classical” $Nu \sim Ra^{1/3}$ regime, translate into a $G \sim Ra^{5/3}$ in the Taylor-Couette flow (both being unobserved experimentally at large Rayleigh or Reynolds number).

The analogy also sheds new light on the recent theory of Eckhardt *et al.* [8]. It predicts a dependence: $G = c_1 Re^{3/2+5\xi/2} + c_2 Re^{2+3\xi}$, where $\xi = -0.051$ is a parameter which has been adjusted to a best fit. When translated using this analogy, this formula would give in the convective case: $Nu = c_1 Ra^{1/4+5\xi/4} + c_2 Ra^{1/2+3\xi/2}$. This has to be compared with the theoretical prediction of Grossman and Lohse [11], made using the same theory, which leads to $Nu = c_1 Ra^{1/4} + c_2 Ra^{1/3}$. Clearly, there is no value of ξ which can reconcile the two formulae. It would therefore be interesting to see whether the analog of the Grossman and Lohse formula, namely: $G = c_1 = Re^{3/2} + c_2 Re^{5/3}$ would not fit the data equally well than the Eckhardt *et al.* formula. This would reduce the number of unknown parameter by one.

It would now be interesting to study in more details consequences of the analogy in the stable case (*i.e.* stably stratified flow *vs.* centrifugally stable flow). There are many observational, numerical and experimental results in the case of stably stratified flows. However, their counterpart in the centrifugally stable rotating case is presently missing. Recent experiments by Richard [31] performed on flows between counter-rotating cylinders could help filling this gap.

Finally, the analogy is of great interest for astrophysical and geophysical applications. In astrophysics, for example, many objects are differentially rotating, and are characterized by very large Reynolds number. These Reynolds numbers cannot be reached in laboratory experiments. On the other hand, we have at our disposal a natural high Rayleigh (and Reynolds number) laboratory of stratified turbulence: the atmospheric boundary layer. We believe that we could use all the data collected in our atmosphere to get great insight about large Reynolds number behavior of rotating, astrophysical shear flows, using the analogy sketched in the present paper.

We thank François Daviaud for comments on the manuscript.

References

1. G.P. King, Y. Li, W. Lee, H.L. Swinney, P.S. Marcus, *J. Fluid Mech.* **41**, 365 (1984).
2. A. Barcilon, J. Brindley, *J. Fluid Mech.* **143**, 429 (1984).
3. F. Wendt, *Ingenieur-Archiv.* **4**, 577 (1933).
4. G.I. Taylor, *Proc. R. Soc. London A* **157**, 546 (1936).
5. P. Tong, W.I. Goldburg, J.S. Huang, T.A. Witten, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2780 (1990).
6. D.P. Lathrop, J. Fineberg, H.L. Swinney, *Phys. Rev. A* **46**, 6390 (1992).
7. G.S. Lewis, H.L. Swinney, *Phys. Rev. E* **59**, 5457 (1999).
8. B. Eckhardt, S. Grossman, D. Lohse, *Eur. Phys. J. B* **18**, 541 (2000).
9. R.L. Panton, *C.R. Acad. Sci, Ser. II* **315**, 1467 (1992).
10. C.R. Doering, P. Constantin, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1648 (1992).
11. S. Grossmann, D. Lohse, *J. Fluid Mech.* **407**, 27 (2000).
12. W.V.R. Malkus, G. Veronis, *J. Fluid Mech.* **4**, 225 (1958).
13. P. Bradshaw, *J. Fluid Mech.* **36**, 177 (1969).
14. J.-P. Laval, B. Dubrulle, S. Nazarenko, *Phys. Fluids* **13**, 1995 (2001).
15. S. Nazarenko, N. Kevlahan, B. Dubrulle, *Physica D* **139**, 158 (2000).
16. B. Dubrulle, J.-P. Laval, S. Nazarenko, N. Kevlahan, *Phys. Fluids* **13**, 2045 (2001).
17. B. Dubrulle, J.-P. Laval, P. Sullivan, *J. Atmosph. Sci.* **59**, 877 (2002), preprint available at <http://www.atmos.ucla.edu/laval/PUBLI/publi.html>.
18. B. Dubrulle, *Europhys. Lett.* **51**, 513 (2000).
19. B. Dubrulle, *Euro. Phys. J. B* **21**, 295 (2001).
20. B. Dubrulle, J.-P. Laval, P. Sullivan, J. Werne, *J. Atmosph. Sci.* **59**, 861 (2002), preprint available at <http://www.atmos.ucla.edu/laval/PUBLI/publi.html>.
21. A. Esser, S. Grossmann, *Phys. Fluids* **8**, 1814 (1996).
22. S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and hydromagnetic stability* (Clarendon, 1970).
23. A. Schlüter, D. Lortz, F. Busse, *J. Fluid Mech.* **23**, 129 (1965).
24. J.K. Platten, J.C. Legros, *Convection in liquids* (Springer-Verlag, 1984).
25. F. Heslot, B. Castaing, A. Libchaber, *Phys. Rev. A* **36**, 5870 (1987).
26. B. Castaing, G. Gunaratne, F. Heslot, L. Kadanoff, A. Libchaber, S. Thomae, X-Z. Wu, S. Zaleski, G. Zanetti, *J. Fluid Mech.* **204**, 1 (1989).
27. R. Kraichnan, *Phys. Fluids* **5**, 1374 (1962).
28. X. Chavanne, F. Chilla, B. Castaing, B. Hébral, B. Chabaud, J. Chaussy, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3648 (1997).
29. J.J. Niemela, L. Skrbek, K.R. Sreenivasan, R.J. Donnelly, *Nature* **404**, 837 (2000).
30. J.W. Deardoff, G.E. Willis, *J. Fluid Mech.* **28**, 675 (1967).
31. D. Richard, *Instabilités hydrodynamiques dans les écoulements en rotation différentielle*, Thèse de l'Université Paris 7, 2001.

Références

- Adachi I., Hayashi C., Nakazawa K., 1976, *The gas drag effect on the elliptical motion of a solid body in the primordial solar nebula.*, *Progress of Theoretical Physics*, 56, 1756–1771.
- Alexander D.R., Ferguson J.W., 1994, *Low-temperature Rosseland opacities*, *ApJ*, 437, 879–891.
- Anders E., Grevesse N., 1989, *Abundances of the elements - Meteoritic and solar*, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 53, 197–214.
- Balbus S.A., Hawley J.F., 1991, *A powerful local shear instability in weakly magnetized disks. I - Linear analysis. II - Nonlinear evolution*, *ApJ*, 376, 214–233.
- Bardina J., Ferziger J.H., Reynolds W.C., eds., 1980, *Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation* (1980).
- Barge P., Sommeria J., 1995, *Did planet formation begin inside persistent gaseous vortices ?*, *A&AL*, 295, L1–L4.
- Barucci M.A., Boehnhardt H., Dotto E., Doressoundiram A., Romon J., Lazzarin M., Fornasier S., de Bergh C., Tozzi G.P., Delsanti A., Hainaut O., Barrera L., Birkle K., Meech K., Ortiz J.L., et al., 2002, *Visible and near-infrared spectroscopy of the Centaur 32532 (2001 PT₁₃). ESO Large Program on TNOs and Centaurs : First spectroscopy results*, *A&A*, 392, 335–339.
- Barucci M.A., Fulchignoni M., Birlan M., Doressoundiram A., Romon J., Boehnhardt H., 2001, *Analysis of Trans-Neptunian and Centaur colours : continuous trend or grouping ?*, *A&A*, 371, 1150–1154.
- Batchelor G.K., Proudman I., 1954, *The effect of rapid distortion of fluid in turbulent motion*, *Quart. Journ. Mech. and Applied Math.*, 7, 83–103.
- Bech K.H., Tillmark N., Alfredson P.H., Andersson H.I., 1995, *An investigation of turbulent plane Couette flow at low Reynolds numbers*, *J. Fluid Mech.*, 286, 291–325.
- Bell K.R., Cassen P.M., Klahr H.H., Henning T., 1997, *The Structure and Appearance of Protostellar Accretion Disks : Limits on Disk Flaring*, *ApJ*, 486, 372–+.
- Bensoussan A., Lions J.L., Papanicolaou G., *Asymptotic analysis for periodic structures* (North-Holland 1978).
- Bockelée-Morvan D., Gautier D., Hersant F., Huré J.M., Robert F., 2002, *Turbulent radial mixing in the solar nebula as the source of crystalline silicates in comets.*, *A&A*, 384, 1107–1118.

- Bockelée-Morvan D., Gautier D., Lis D.C., Young K., Keene J., Phillips T., Owen T., Crovisier J., Goldsmith P.F., Bergin E.A., Despois D., Wootten A., 1998, *Deuterated Water in Comet C/1996 B2 (Hyakutake) and Its Implications for the Origin of Comets*, *Icarus*, 133, 147–162.
- Bottin S., 1998, *Structures cohérentes et transition vers la turbulence par intermittence spatio-temporelle dans l'écoulement de Couette plan*, Thèse de l'Université Paris 11.
- Bouvier J., Chelli A., Allain S., Carrasco L., Costero R., Cruz-Gonzalez I., Dougados C., Fernández M., Marín E.L., Ménard F., Mennessier C., Mujica R., Recillas E., Salas L., Schmidt G., et al., 1999, *Magnetospheric accretion onto the T Tauri star AA Tauri. I. Constraints from multisite spectrophotometric monitoring*, *A&A*, 349, 619–635.
- Bouvier J., Forestini M., Allain S., 1997, *The angular momentum evolution of low-mass stars.*, *A&A*, 326, 1023–1043.
- Bradshaw P., 1969, *The analogy between streamline curvature and buoyancy in turbulent shear flows*, *J. Fluid Mech.*, 36, 177.
- Briggs F.H., Sackett P.D., 1989, *Radio observations of Saturn as a probe of its atmosphere and cloud structure*, *Icarus*, 80, 77–103.
- Burrows C.J., Stapelfeldt K.R., Watson A.M., Krist J.E., Ballester G.E., Clarke J.T., Crisp D., Gallagher J.S., Griffiths R.E., Hester J.J., Hoessel J.G., Holtzman J.A., Mould J.R., Scowen P.A., Trauger J.T., et al., 1996, *Hubble Space Telescope Observations of the Disk and Jet of HH 30*, *ApJ*, 473, 437–+.
- Calvet N., Hartmann L., Strom S.E., 2000, *Evolution of Disk Accretion*, *Protostars and Planets IV*, 377+.
- Cameron A.G.W., Decamp W.M., Bodenheimer P., 1982, *Evolution of giant gaseous protoplanets embedded in the primitive solar nebula*, *Icarus*, 49, 298–312.
- Canuto V.M., Dubovikov M.S., 1996, *A dynamical model for turbulence. I. general formalism*, *Phys. Fluids*, 8, 571–586.
- Carlier J., Laval J.P., Stanislas M., 2001, *Some experimental support at a high Reynolds number to a new hypothesis for turbulence modeling*, *C.R.A.S.*, 329, 35–40.
- Chandrasekhar S., 1960, *The stability of non-dissipative Couette flow in hydromagnetics*, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 46, 253–257.
- Chandrasekhar S., *Hydrodynamic and hydromagnetic stability* (Clarendon Press 1961).
- Chavanis P.H., 2000, *Trapping of dust by coherent vortices in the solar nebula*, *A&A*, 356, 1089–1111.
- Chiang E.I., Goldreich P., 1997, *Spectral Energy Distributions of T Tauri Stars with Passive Circumstellar Disks*, *ApJ*, 490, 368–+.

- Cochran A.L., Cochran W.D., Barker E.S., 2000, N_2^+ and CO^+ in Comets 122P/1995 S1 (deVico) and C/1995 O1 (Hale-Bopp), *Icarus*, 146, 583–593.
- Coradini A., Federico C., Forni O., Magni G., 1995, *Origin and thermal evolution of icy satellites*, *Surv. Geophys.*, 16, 533.
- Deloule E., Doukhan J.C., Robert F., 1998, *Interstellar hydroxyls in meteorite chondrules : Implications for the origin of water in the inner solar system*, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 62, 3367.
- Descartes R., *Principia philosophiae* (1644).
- Drouart A., Dubrulle B., Gautier D., Robert F., 1999, *Structure and Transport in the Solar Nebula from Constraints on Deuterium Enrichment and Giant Planets Formation*, *Icarus*, 140, 129–155.
- Dubrulle B., 1993, *Differential rotation as a source of angular momentum transfer in the solar nebula*, *Icarus*, 106, 59–+.
- Dubrulle B., Frisch U., 1991, *Eddy viscosity of parity-invariant flow*, *Phys. Rev. A*, 43, 5355–5364.
- Dubrulle B., Hersant F., 2002, *Momentum transport and torque scaling in Taylor-Couette flow from an analogy with turbulent convection*, *European Physical Journal B*, 26, 379–386.
- Dubrulle B., Laval J.P., Nazarenko S., K.-R. Kevlahan N., 2001, *A dynamic subfilter-scale model for plane parallel flows*, *Phys. Fluids*, 13, 2045–2064.
- Dubrulle B., Morfill G., Sterzik M., 1995, *The dust subdisk in the protoplanetary nebula*, *Icarus*, 114, 237–246.
- Dubrulle B., Normand C., Richard D., Hersant F., Prigent A., Dauchot O., Daviaud F., Zahn J.P., 2002, *A local shear instability in stratified disks*, *A& A*, submitted.
- Duschl W.J., Strittmatter P.A., Biermann P.L., 2000, *A note on hydrodynamic viscosity and selfgravitation in accretion disks*, *A& A*, 357, 1123–1132.
- Dutrey A., Guilloteau S., Prato L., Simon M., Duvert G., Schuster K., Menard F., 1998, *CO study of the GM Aurigae Keplerian disk*, *A& A*, 338, L63–L66.
- Dutrey A., Guilloteau S., Simon M., 1994, *Images of the GG Tauri rotating ring*, *A& A*, 286, 149–159.
- Farge M., 1992, *Wavelet transforms and their applications to turbulence*, *Ann. Rev. of Fluid Mech.*, 24, 395–457.
- Forster D., Nelson D.R., Stephen M.J., 1977, *Large distance and long time properties of a randomly stirred fluid*, *Phys. Rev. A*, 16, 732–749.
- Frisch U., *Turbulence, the legacy of A.N. Kolmogorov* (Cambridge : University Press 1992).
- Frisch U., She Z.S., Sulem P.L., 1987, *Large-scale flow driven by the anisotropic kinetic alpha effect*, *Physica D*, 28, 382–392.
- Gabor D., 1946, *Theory of communication*, *J. Inst. Elect. Eng.*, 93, 429–457.
- Gail H.P., 1998, *Chemical reactions in protoplanetary accretion disks. IV. Multi-component dust mixture*, *A&A*, 332, 1099–1122.

- Gautier D., Conrath B.J., Owen T., De Pater I., Atreya S.K., *The troposphere of Neptune*, in D.P. Cruikshank, ed., *Neptune and Triton* (Tucson : University of Arizona Press, c1995. 1995), pp. 547–611.
- Gautier D., Hersant F., Mousis O., Lunine J.I., 2001a, *Enrichments in Volatiles in Jupiter : A New Interpretation of the Galileo Measurements*, *ApJL*, 550, L227–L230.
- Gautier D., Hersant F., Mousis O., Lunine J.I., 2001b, *Erratum : Enrichments in Volatiles in Jupiter : A New Interpretation of the Galileo Measurements*, *ApJL*, 559, L183–LL183.
- Geiss J., Gloeckler G., 1998, *Abundances of Deuterium and Helium-3 in the Protosolar Cloud*, *Space Science Reviews*, 84, 239–250.
- Germano M., Piomelli U., Moin P., Cabot W.H., 1991, *A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model*, *Phys. Fluids*, 3, 1760–1765.
- Greenzweig Y., Lissauer J.J., 1990, *Accretion rates of protoplanets*, *Icarus*, 87, 40–77.
- Guillot T., 1999, *A comparison of the interiors of Jupiter and Saturn*, *Planet. Space Sci.*, 47, 1183–1200.
- Gulloteau S., Dutrey A., 1998, *Physical parameters of the Keplerian protoplanetary disk of DM Tauri*, *A& A*, 339, 467–476.
- Hartigan P., Edwards S., Ghandour L., 1995, *Disk Accretion and Mass Loss from Young Stars*, *ApJ*, 452, 736–+.
- Hartmann L., Calvet N., Gullbring E., D’Alessio P., 1998, *Accretion and the Evolution of T Tauri Disks*, *ApJ*, 495, 385+.
- Hartmann L., Cassen P., Kenyon S.J., 1997, *Disk Accretion and the Stellar Birthline*, *ApJ*, 475, 770–+.
- Henning T., Stognienko R., 1996, *Dust opacities for protoplanetary accretion disks : influence of dust aggregates.*, *A& A*, 311, 291–303.
- Hersant F., Dubrulle B., Wang M., *Non-locality of scale interactions in turbulent shear flows*, in *Proceedings of the 2000 Summer Program* (Center of Turbulence Research 2000), pp. 285–291.
- Hersant F., Gautier D., Huré J., 2001, *A Two-dimensional Model for the Primordial Nebula Constrained by D/H Measurements in the Solar System : Implications for the Formation of Giant Planets*, *ApJ*, 554, 391–407.
- Hunt J.C.R., 1973, *A theory of turbulent flow round two-dimensional bluff bodies*, *J. Fluid Mech.*, 61, 625–706.
- Huré J.M., 2000, *On the transition to self-gravity in low mass AGN and YSO accretion discs*, *A& A*, 358, 378–394.
- Huré J.M., Galliano F., 2001, *The global structure of thin, stratified alpha-discs and the reliability of the one layer approximation*, *A& A*, 366, 359–362.
- Huré J.M., Richard D., Zahn J.P., 2001, *Accretion discs models with the β -viscosity prescription derived from laboratory experiments*, *A& A*, 367, 1087–1094.

- Huré J.M., 1998, *Properties of self-gravitating alpha -discs in AGN revisited. General scaling laws*, A& A, 337, 625–649.
- Iro N., Gautier D., Hersant F., Bockelée-Morvan D., Lunine J., 2002, *An interpretation of the Nitrogen deficiency in comets, Icarus*, accepted.
- Kant I., *Allgemeine Naturgeschichte und Theorie Des Himmels* (1755).
- Kerola D.X., Larson H.P., Tomasko M.G., 1997, *Analysis of the Near-IR Spectrum of Saturn : A Comprehensive Radiative Transfer Model of Its Middle and Upper Troposphere*, Icarus, 127, 190–212.
- Kitchatinov L.L., Rüdiger G., Khomenko G., 1994, *Large-scale vortices in rotating stratified disks*, A& A, 287, 320–324.
- Kolmogorov A., 1941, *The local structure of turbulence in an incompressible viscous liquid*, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 30, 538.
- Kraichnan R.H., 1987, *An interpretation of the Yakhot-Orszag turbulence theory*, Phys. Fluids, 30, 2400–2405.
- Laplace P.S., *Exposition du système du Monde* (1796).
- Lathrop D., Fineberg J., Swinney H., 1992, *Transition to shear-driven turbulence in Couette-Taylor flow*, Phys. Rev. A, 46, 6390.
- Laval J., Dubrulle B., Nazarenko S., 1999, *Nonlocality of Interaction of Scales in the Dynamics of 2D Incompressible Fluids*, Phys. Rev. Letters, 83, 4061–4064.
- Laval J.P., 1999, *Développement d'un nouveau modèle dynamique pour la turbulence, applications aux écoulements bidimensionnels et aux écoulements plans*, Thèse de l'Université Paris 6.
- Laval J.P., Dubrulle B., Nazarenko S., 2001, *Nonlocality and intermittency in three-dimensional turbulence*, Phys. Fluids, 13, 1995–2012.
- Lecluse C., Robert F., 1994, *Hydrogen isotope exchange reaction rates : Origin of water in the Solar System*, Geochim. Cosmochim. Acta, 58, 2927–2939.
- Lécluse C., Robert F., Gautier D., Guiraud M., 1996, *Deuterium enrichment in giant planets*, Planet. Space Sci., 44, 1579–1592.
- Lellouch E., Bézard B., Fouchet T., Feuchtgruber H., Encrenaz T., de Graauw T., 2001, *The deuterium abundance in Jupiter and Saturn from ISO-SWS observations*, A& A, 370, 610–622.
- Levison H.F., Duncan M.J., 1993, *The gravitational sculpting of the Kuiper belt*, ApJL, 406, L35–L38.
- Lewis J.S., 1974, *The temperature gradient in the solar nebula*, Science, 186, 440–443.
- Li H., Fenimore E.E., 1996, *Log-normal Distributions in Gamma-Ray Burst Time Histories*, ApJL, 469, L115–+.
- Lilly D.K., 1965, *On the computational stability of numerical solutions of time-dependent, nonlinear, geophysical fluid dynamics problems*, Mon. Wea. Rev., 93, 11.

- Lunine J.I., Stevenson D.J., 1985, *Thermodynamics of clathrate hydrate at low and high pressures with application to the outer solar system*, *ApJS*, 58, 493–531.
- Lynden-Bell D., Pringle J.E., 1974, *The evolution of viscous discs and the origin of the nebular variables.*, *MNRAS*, 168, 603–637.
- Mahaffy P.R., Donahue T.M., Atreya S.K., Owen T.C., Niemann H.B., 1998, *Galileo Probe Measurements of D/H and $^3\text{He}/^4\text{He}$ in Jupiter's Atmosphere*, *Space Science Reviews*, 84, 251–263.
- Makalkin A., Dorofeyeva V., 1991, *Temperatures in the protoplanetary disk : Models, constraints, and consequences for the planets*, *Izvestiya, Earth Phys.*, 27, 650.
- Marten A., Gautier D., Owen T., Sanders D.B., Matthews H.E., Atreya S.K., Tilanus R.P.J., Deane J.R., 1993, *First observations of CO and HCN on Neptune and Uranus at millimeter wavelengths and the implications for atmospheric chemistry*, *ApJ*, 406, 285–297.
- Mizuno H., 1980, *Formation of the Giant Planets*, *Progress of Theoretical Physics*, 64, 544–557.
- Moffatt H.K., 1974, *The mean electromotive force generated by turbulence in the limit of perfect conductivity*, *J. Fluid Mech.*, 65, 1–10.
- Molemaker M.J., McWilliams J.C., Yavneh I., 2001, *Instability and Equilibration of Centrifugally Stable Stratified Taylor-Couette Flow*, *Phys. Rev. Lett.*, 86, 5270–5273.
- Morbidelli A., Thomas F., Moons M., 1995, *The resonant structure of the Kuiper belt and the dynamics of the first five trans-Neptunian objects*, *Icarus*, 118, 322–.
- Moser R.D., Kim J., Mansour N.N., 1999, *Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau = 590$* , *Phys. Fluids*, 11, 943–945.
- Nazarenko S., Kevlahan N.K.R., Dubrulle B., 1999, *WKB theory for rapid distortion of inhomogeneous turbulence*, *J. Fluid Mech.*, 390, 325–348.
- Nazarenko S., Kevlahan N.K.R., Dubrulle B., 2000, *Nonlinear RDT theory of near-wall turbulence*, *Physica D*, 139, 158–176.
- Negoro H., Mineshige S., *Log-Normal Distributions in Cygnus X-1 : Possible Physical Link with Gamma-Ray Bursts and Blazars*, in *5 pages 3 figures : accepted for publication in PASJ. Preprint no. 2299L. (2002)*, pp. 8311–+.
- Oort J.H., 1950, *The structure of the cloud of comets surrounding the Solar System and a hypothesis concerning its origin*, *Bull. Astron. Inst. Neth.*, 11, 91–110.
- Owen T., Bar-Nun A., 1995, *Comets, impacts and atmospheres.*, *Icarus*, 116, 215–226.
- Owen T., Mahaffy P., Niemann H.B., Atreya S., Donahue T., Bar-Nun A., de Pater I., 1999, *A low-temperature origin for the planetesimals that formed Jupiter*, *Nature*, 402, 269–270.
- Pollack J.B., Hubickyj O., Bodenheimer P., Lissauer J.J., Podolak M., Greenzweig Y., 1996, *Formation of the Giant Planets by Concurrent Accretion of Solids and*

- Gas, Icarus, 124, 62–85.
- Pollack J.B., Lunine J.I., Tittlemore W.C., *Origin of the Uranian satellites*, in *Uranus* (1991), pp. 469–512.
- Pollack J.B., McKay C.P., Christofferson B.M., 1985, *A calculation of the Rosseland mean opacity of dust grains in primordial solar system nebulae*, Icarus, 64, 471–492.
- Prandtl L., 1925, *Bericht über Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz*, Zs. angew. Math. Mech., 5, 136–139.
- Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., *Numerical recipes in FORTRAN. The art of scientific computing* (Cambridge : University Press, 1c1992, 2nd ed. 1992).
- Pringle J., 1981, *Accretion discs in astrophysics*, ARA& A, 19, 137.
- Rayleigh L., 1916, *On the dynamics of revolving fluids*, Proc. Roy. Soc. London A, 93, 148–154.
- Reynolds O., 1883, *An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water in parallel channels shall be direct or sinuous and of the law of resistance in parallel channels*, Phil. Trans. Royal Society.
- Richard D., 2001, *Instabilités Hydrodynamiques dans les Ecoulements en Rotation Différentielle*, Thèse de l'Université Paris 7.
- Richard D., Zahn J., 1999, *Turbulence in differentially rotating flows. What can be learned from the Couette-Taylor experiment*, A& A, 347, 734–738.
- Ruden S.P., Pollack J.B., 1991, *The dynamical evolution of the protosolar nebula*, ApJ, 375, 740–760.
- Seaton M.J., Yan Y., Mihalas D., Pradhan A.K., 1994, *Opacities for Stellar Envelopes*, MNRAS, 266, 805–+.
- Shakura N., Sunyaev R., 1973, *Black Holes in binary systems. Observational appearance*, A& A, 24, 337.
- Shu F.H., Johnstone D., Hollenbach D., 1993, *Photoevaporation of the solar nebula and the formation of the giant planets*, Icarus, 106, 92–+.
- Shu F.H., Tremaine S., Adams F.C., Ruden S.P., 1990, *Sling amplification and eccentric gravitational instabilities in gaseous disks*, ApJ, 358, 495–514.
- Slattery W.L., Benz W., Cameron A.G.W., 1992, *Giant impacts on a primitive Uranus*, Icarus, 99, 167–174.
- Sloan E.D.J., *Clathrates hydrates of natural gases* (Marcel Dekker, Inc. New York 1998).
- Smagorinski J., 1963, *General circulation experiment with the primitive equations, part I : The basic experiment*, Mon. Wea. Rev., 91, 99.
- Stapelfeldt K.R., Krist J.E., Menard F., Bouvier J., Padgett D.L., Burrows C.J., 1998, *An Edge-On Circumstellar Disk in the Young Binary System HK Tauri*, ApJL, 502, L65–+.

- Tanga P., Babiano A., Dubrulle B., Provenzale A., 1996, *Forming Planetesimals in Vortices*, *Icarus*, 121, 158–170.
- Van der Waals J.H., Platteuw J.C., *Clathrate solutions*, in *Advances in Chemical Physics*, volume 2 (Interscience Publishers Inc., New York 1959), pp. 1–57.
- Velikhov E.P., 1959, *Stability of an ideally conducting liquid flowing between cylinders rotating in a magnetic field*, *J. Expl. Theoret. Phys.*, 36, 1398–1404.
- Walker M.F., 1972, *Studies of Extremely Young Clusters. VI. Spectroscopic Observations of the Ultraviolet-Excess Stars in the Orion Nebula Cluster and NGC 2264*, *ApJ*, 175, 89–+.
- Weidenschilling S.J., 1977, *Aerodynamics of solid bodies in the solar nebula*, *MNRAS*, 180, 57–70.
- Wendt F., 1933, *Turbulente Strömungen zwischen zwei rotierenden konaxialen Zylindern*, *Ing. Arch.*, 4, 577–595.
- Whipple F.L., *On certain aerodynamic processes for asteroids and comets*, in *From plasma to planet* (Wiley & Sons, New York 1971), pp. 211–232.
- Wuchterl G., 1991, *Hydrodynamics of giant planet formation. III. Jupiter's nucleated instability.*, *Icarus*, 91, 53–64.
- Wyckoff S., Tegler S.C., Engel L., 1991, *Ammonia abundances in four comets*, *ApJ*, 368, 279–286.