



**HAL**  
open science

# Évolution physico-chimique des objets transneptuniens

Ulysse Marboeuf

► **To cite this version:**

Ulysse Marboeuf. Évolution physico-chimique des objets transneptuniens. Astrophysique [astro-ph]. Université de Franche-Comté, 2008. Français. NNT: . tel-00367102

**HAL Id: tel-00367102**

**<https://theses.hal.science/tel-00367102>**

Submitted on 10 Mar 2009

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

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

# THÈSE

présentée à

L'UFR DES SCIENCES ET TECHNIQUES  
DE L'UNIVERSITÉ DE FRANCHE-COMTÉ

pour obtenir le

**GRADE DE DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ  
DE FRANCHE-COMTÉ**  
Spécialité Physique

**Evolution Physico-Chimique des Objets  
Transneptuniens.**

par

**Ulysse Marboeuf**

**Soutenue le 25 novembre 2008 devant la Commission d'Examen:**

<b>Président</b>	A.Ch. Levasseur-Regourd	Professeur à l'Université Paris VI
<b>Rapporteurs</b>	Jacques Crovisier	Astronome Adjoint à l'observatoire de Paris-Meudon
	Bernard Schmitt	Directeur de Recherche au LPG, Grenoble
<b>Examineurs</b>	Willy Benz	Directeur du «Physikalisches Institut», Berne
	Guy Moreels	Professeur à l'Université de Franche-Comté
<b>Co-directeurs</b>	Olivier Mosis	Maître de Conférences à l'université de Franche-Comté
	Jean-Marc Petit	Directeur de recherche à UTINAM, Besançon







## Remerciements

*J'aimerais remercier dans cette section toutes les personnes qui ont contribué, de manière générale, à l'élaboration de ce manuscrit et à me former en tant que chercheur.*

*Le travail présenté ici a été effectué au laboratoire UTINAM-observatoire de Besançon dirigés respectivement par Georges Jolicard et François Vernotte.*

*Je remercie premièrement Jean-Marc Petit et Olivier Mousis pour m'avoir proposé ce sujet de recherche. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma reconnaissance. Je les remercie plus particulièrement pour leur disponibilité, la confiance et la liberté qu'ils m'ont octroyé tout au long de mes études. J'espère que ce manuscrit, et le travail réalisé durant ces trois années de thèse, auront été à la hauteur de la confiance qui m'a été accordée.*

*Je tiens à remercier l'ensemble des membres du jury : Madame Anny-Chantal Levasseur-Regourd pour avoir accepté de présider la commission d'examen, Monsieur Willy Benz et Monsieur Guy Moreels pour avoir accepté de participer au jury de cette thèse et tout particulièrement Jacques Crovisier ainsi que Bernard Schmitt qui ont accepté de juger ce travail et d'en être les rapporteurs.*

*Je veux adresser également mes remerciements à Fabien Picaud pour son aide précieuse à la préparation de ma soutenance de thèse. Grâce à ses conseils et à ses suggestions, la présentation de mon travail n'a pu que gagner en clarté et précision.*

*Mes remerciements vont aussi à l'ensemble du personnel de l'observatoire de Besançon pour leur sympathie et leur disponibilité.*

*Au delà des considérations scientifiques et techniques, j'aimerais remercier tous ceux qui ont contribué à faire de cette thèse une expérience agréable. Je remercie en ce sens mes amis doctorants Caroline Thomas, Delphine Vardanega et Gyorgy Hantal et je leur adresse mes plus sincères voeux de bonheur et de réussite. Je tiens, en particulier, à remercier chaleureusement Caroline pour les relectures assidues de ce mémoire. Enfin, je remercie ma famille et en particulier Audrey qui m'a accompagné et influencé quotidiennement, et à qui je dois l'accomplissement de ce doctorat. Je profite donc de ces dernières lignes pour lui dédier ce manuscrit.*



# Table des matières

Table des matières	i
Introduction Générale	1
<b>1 Origine et Formation des Planétésimaux</b>	<b>5</b>
1.1 Introduction	5
1.2 Différenciation Physico-Chimique du Système Solaire en Fonction de la Distance au Soleil	6
1.3 Formation des planétésimaux dans la nébuleuse primitive	9
1.3.1 Phase gazeuse	9
1.3.2 Formation des glaces dans le disque protoplanétaire	11
1.4 Application du modèle de formation des glaces aux objets formés dans les systèmes solaires externes	15
1.4.1 Composition des glaces dans les planètes extrasolaires de faible masse	16
1.4.2 Applications à la formation du système solaire externe	22
1.5 Conclusions	31
<b>2 Le Modèle Physique de Noyau Cométaire</b>	<b>33</b>
2.1 Introduction	33
2.2 Conservation de l'énergie	36
2.2.1 La Capacité Calorifique volumique du noyau $\rho.c$	37
2.2.2 Terme de divergence du flux thermique $K \cdot \frac{\partial T}{\partial r}$	38
2.2.3 Termes de Transfert de Chaleur $Y$	45
2.2.4 Bilan énergétique en Surface	49
2.3 Conservation de la Masse	52
2.3.1 Variation temporelle de la quantité de gaz dans les pores $\frac{\partial \rho_g}{\partial t}$	52
2.3.2 Terme de divergence du flux de gaz $G_x \cdot \frac{\partial P_x}{\partial r}$	53
2.3.3 Termes d'apport ou de perte de matière $Q_g$	55
2.4 Conclusion	56
<b>3 Le Modèle Numérique</b>	<b>57</b>
3.1 Introduction	57
3.2 Méthode Numérique	58
3.2.1 Intégration Spatiale	59



## TABLE DES MATIÈRES

---

3.2.2	Intégration Temporelle . . . . .	65
3.3	Comparaison du bilan de masse avec d'autres modèles . . . . .	71
3.3.1	Paramètres d'entrée . . . . .	72
3.3.2	Résultats . . . . .	73
3.4	Conclusions . . . . .	81
<b>4</b>	<b>Etude Collisionnelle des Planétésimaux dans la Région Transneptunienne</b>	<b>87</b>
4.1	Introduction . . . . .	87
4.2	Apport Energétique dans le Noyau Cible . . . . .	89
4.2.1	Considérations physiques et modélisation de l'apport énergétique	89
4.2.2	Adaptation du Schéma Numérique & Mathématique. . . . .	95
4.3	Paramètres . . . . .	98
4.4	Résultats. . . . .	108
4.4.1	Etude de l'influence des différents paramètres pour une seule collision . . . . .	108
4.4.2	Etude d'une série de collisions . . . . .	131
4.5	Conclusion . . . . .	141
	<b>Conclusion Générale</b>	<b>144</b>
<b>A</b>	<b>Intégration de l'équation de conservation de la masse</b>	<b>149</b>
A.1	Integration Spatiale . . . . .	149
A.2	Intégration Temporelle . . . . .	151
<b>B</b>	<b>Estimation des variables aux interfaces des volumes de contrôle</b>	<b>153</b>
<b>C</b>	<b>TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm; Patankar, 1980)</b>	<b>155</b>
C.1	Traitement des conditions aux limites : conditions de type Dirichlet et Neumann . . . . .	155
C.2	Algorithme de Thomas ou TDMA . . . . .	156
<b>D</b>	<b>Expressions de vapeur saturante</b>	<b>161</b>
<b>E</b>	<b>Expressions de l'Enthalpie de Transition de Phase</b>	<b>165</b>
<b>F</b>	<b>Constantes physiques utilisées</b>	<b>167</b>
<b>G</b>	<b>Taux de sublimation d'une espèce à la surface du noyau</b>	<b>169</b>
<b>H</b>	<b>Publications de l'auteur reliées au chapitre 1</b>	<b>171</b>
H.1	Composition des glaces dans les planètes extrasolaires de faible masse	171
H.2	Origine des volatils dans la ceinture principale . . . . .	180
<b>I</b>	<b>Publications et communications</b>	<b>193</b>
I.1	Publications dans des revues à comité de lecture . . . . .	193
I.2	Proceedings de conférences . . . . .	194

## TABLE DES MATIÈRES

---

I.3	Présentations lors de conférences . . . . .	195
I.4	Séminaires du laboratoire UTINAM . . . . .	196
<b>J</b>	<b>Table des différents symboles utilisés</b>	<b>197</b>
	Bibliographie . . . . .	201
	<b>Liste des tableaux</b>	<b>211</b>
	<b>Liste des figures</b>	<b>212</b>
	<b>Résumé</b>	<b>219</b>



# Introduction Générale

Les petits corps du système solaire, et en particulier ceux situés au delà de la ceinture d'astéroïdes, comme les noyaux cométaires (à courte et longue périodes), les Centaures et les Objets Transneptuniens (OTNs), sont encore considérés comme les vestiges directs de la nébuleuse primitive, qui a donné naissance à notre système solaire. La disparité géographique de ces objets (excepté les comètes à longue période,  $P > 200$  ans) dissimulerait en réalité une origine commune. Ils se seraient donc formés dans la région transneptunienne (Fernandez, 1980; Morbidelli, 2004) et auraient une composition physico-chimique identique (Coradini et al., 2008).

La particularité de ces objets, considérés comme “primitifs”, est qu'ils sont pourvus d'une grande quantité de volatils  $H_2O$ ,  $CH_3OH$ ,  $CO$ ,  $N_2$ ,  $CH_4$ ,  $CO_2$ ... (Fornasier et al., 2004; Bockelée-Morvan et al., 2004; Barucci et al., 2008) et d'éléments réfractaires. L'éloignement de ces corps par rapport au Soleil depuis leur formation et le faible apport énergétique qui en résulte, cautionnent l'idée que les glaces qu'ils contiennent ont été peu modifiées depuis leur création. Cette hypothèse de préservation des volatils à l'intérieur de ces petits corps semble confirmée par l'observation de la surface des objets de Kuiper ou du dégazage des noyaux cométaires en volatils tels que  $H_2O$ ,  $CH_4$  et  $CO$  (Fornasier et al., 2004; Barucci et al., 2008). Leur petite taille et l'absence de différenciation physico-chimique qui en résulte, laissent penser qu'ils constituent les résidus des planétésimaux formés dans le disque protoplanétaire au moment de la formation du système solaire. L'ensemble de ces considérations justifie alors l'hypothèse d'une composition physico-chimique “primitive” de ces objets. Pourtant, le “space weathering” comme le rayonnement cosmique, les impacts de grains interstellaires, le rayonnement UV, le vent solaire ainsi que les collisions entre objets (Stern, 2003; Orosei et al., 2001) pourraient avoir engendré un changement de phase des espèces volatiles contenues à l'intérieur de ces derniers. Parallèlement aux effets “corrosifs” provenant de l'environnement extérieur, la radioactivité de certains composants, comme l' $^{26}Al$ , contenus dans la matrice solide de ces objets, constitue une source de chaleur non négligeable pouvant altérer structurellement ces corps glacés (Merk & Prialnik, 2003) au cours de leur évolution.

Plusieurs études ont été menées pour étudier l'influence de la porosité et des volatils (Mekler et al., 1990; Espinasse et al., 1991), celle des changements d'orbite (Coradini et al., 1997), de la formation d'une croûte de poussière (Espinasse et al.,

1993) et des éléments radioactifs (Merk & Prialnik, 2003) sur l'évolution physico-chimique et structurale de noyaux cométaires. En revanche, aucune étude n'a été effectuée sur les effets d'une série de collisions sur la différenciation physico-chimique d'un objet apparenté à la région transneptunienne. Stern & Colwell (1997) indiquent en effet que l'érosion collisionnelle et les éjections induites par les perturbations dynamiques auraient causé la perte de plus de 90% de la masse de cette région depuis sa formation. La surface des objets de Kuiper ne serait pas primordiale et aurait été modifiée par les multiples collisions (Durda & Stern, 2000). Les taux de collisions entre objets de la ceinture de Kuiper, estimés de manière statistique par Stern (1995), Davis & Farinella (1997) et Durda & Stern (2000), montrent que ceux qui ont une taille supérieure ou égale à 100 km, ont subi certainement des modifications structurales depuis leur formation mais qui ne les ont pas significativement altérés. Stern et al. (1996) indiquent, en revanche, que la population d'objets dont le rayon est compris entre 1 et quelques dizaines de km a été fortement érodée. Le profil de la distribution en taille de ces objets montre ainsi une rupture de pente sur cet intervalle de taille (Leinhardt et al., 2008). La plupart des comètes à courte période provenant du disque de Kuiper pourraient alors ne pas être physico-chimiquement primordiales et provenir ainsi de corps parents plus gros (Davis & Farinella, 1996; Coradini et al., 2008).

L'objet du travail présenté ici est de déterminer si la matière dite "primordiale", incorporée dans les Objets Transneptuniens, a perdu, d'une certaine manière la mémoire de ses origines, en subissant des transformations physico-chimiques profondes lors de collisions successives. A cette fin, on analyse dans une première phase les conditions de formation des glaces incorporées dans les planétésimaux et les structures de glace qui y sont associées. Je réalise un modèle numérique de planétésimal, à la composition physico-chimique simplifiée, qui assure la conservation des quantités physiques (masse et énergie), et permet l'étude à long terme des planétésimaux dans la région transneptunienne. Pour terminer, je détermine les laps de temps nécessaires entre deux collisions pour engendrer une évolution physico-chimique des objets cibles, à partir d'une composition originelle imposée.

Au début du **premier chapitre**, je rappelle les processus de formation des glaces au cours de la formation du système solaire et des systèmes planétaires en général. Les glaces formées dans la région externe des disques participent à la composition physico-chimique des planétésimaux, et permettent de contraindre la composition des objets formés à partir de ces derniers. Je présente ensuite de façon détaillée nos résultats concernant les implications de la composition des glaces sur les planètes formées dans la région externe des disques protoplanétaires. Les processus de formation des glaces, décrits dans ce chapitre, permettent d'élaborer la composition physico-chimique d'un modèle de planétésimal qui prend en compte l'ensemble des structures de glace possibles.

Le **deuxième chapitre** présente un modèle de planétésimal, ou noyau cométaire, simplifié (du point de vue de la composition des glaces). Ce modèle représente

une matrice poreuse composée d'éléments réfractaires et d'un mélange de différentes glaces. L'ensemble des processus physiques tels que les changements de phase (sublimation/condensation, cristallisation) et la modélisation des transferts thermiques et de masse y sont discutés.

Le **chapitre trois** est dédié à la conception numérique du modèle de noyau cométaire qui prend en compte les multiples changements de phase des différentes glaces qui peuvent avoir lieu simultanément à l'intérieur du système. On peut y trouver une discussion sur le choix de la méthode d'intégration numérique et sur le cadre mathématique de résolution des équations de conservation (masse et énergie). Le problème de la conservation des quantités physiques (masse et énergie) est abordé et l'erreur sur la conservation de la masse obtenue avec notre modèle est comparée à celle obtenue avec les modèles antérieurs d'Espinasse et al. (1991) et d'Orosei et al. (1999).

Enfin, j'étudie, dans le **quatrième chapitre**, l'influence d'une série de collisions sur des objets situés dans la région transneptunienne. La composition physique de ces objets, leurs tailles et les conditions d'impact affectent le résultat physique et énergétique d'une collision. J'analyse dans un premier temps l'influence de la composition physico-chimique et de l'ensemble des paramètres physiques sur l'évolution interne de planétésimaux qui auraient subi une unique collision. Puis, je recherche les laps de temps nécessaires entre deux collisions pour permettre l'évolution physico-chimique de la cible sur le long terme. Cela devrait confirmer ou infirmer l'hypothèse selon laquelle les Objets Transneptuniens peuvent être significativement affectés par le processus collisionnel.

## TABLE DES MATIÈRES

---

# Chapitre 1

## Origine et Formation des Planétésimaux

### Contents

---

<b>1.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>5</b>
<b>1.2</b>	<b>Différenciation Physico-Chimique du Système Solaire en Fonction de la Distance au Soleil</b>	<b>6</b>
<b>1.3</b>	<b>Formation des planétésimaux dans la nébuleuse primitive</b>	<b>9</b>
1.3.1	Phase gazeuse	9
1.3.2	Formation des glaces dans le disque protoplanétaire	11
<b>1.4</b>	<b>Application du modèle de formation des glaces aux objets formés dans les systèmes solaires externes</b>	<b>15</b>
1.4.1	Composition des glaces dans les planètes extrasolaires de faible masse	16
1.4.2	Applications à la formation du système solaire externe	22
<b>1.5</b>	<b>Conclusions</b>	<b>31</b>

---

### 1.1 Introduction

Les modèles actuels de formation du système solaire montrent qu'il existe, au sein des petits corps composés de glaces, deux principaux groupes d'objets aux origines bien distinctes. Le premier a été formé dans la région comprise entre Jupiter et Uranus. L'interaction gravitationnelle de ce premier groupe d'objets avec Jupiter aurait créé un énorme réservoir de noyaux cométaires, situé entre 1000 et 100000 UA, et appelé le nuage d'Oort. Ce nuage serait aujourd'hui la source des comètes dites à "longue période" ( $P > 200$  ans) aux orbites très excentriques. Le deuxième



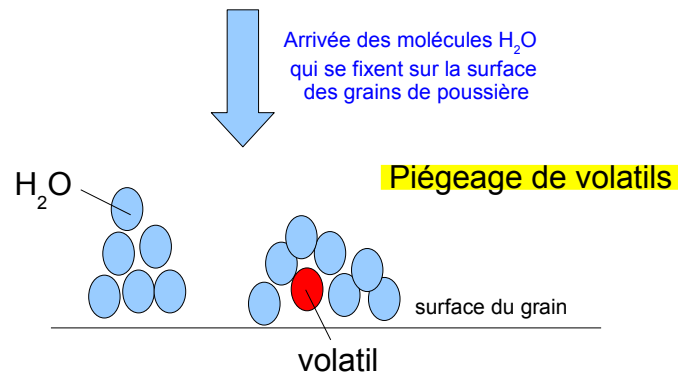
groupe a été formé dans la région transneptunienne et est la source des comètes dites à “courte période” ( $P < 200$  ans) et des Centaures. Si on fait l’hypothèse que la matière ne s’est pas mélangée durant la formation du système solaire, l’origine géographique distincte (5-10 UA pour le premier, 30 UA pour le second) de ces deux groupes suppose une composition originelle différente des objets.

L’objet de ce chapitre est de présenter les processus de formation des glaces à l’intérieur du disque protoplanétaire. Ces glaces participent à la composition physico-chimique des planétésimaux qui sont à l’origine de l’ensemble des objets créés au delà de la “ligne des glaces”. Dans une première section, nous décrivons ces processus de formation à partir du modèle de formation des glaces développé initialement par Mousis et al. (2006; 2008) dans le disque protoplanétaire. Dans une deuxième section, j’étudie les implications des variations d’abondances moléculaires dans le disque protoplanétaire sur la composition physico-chimique des planétésimaux et des planètes qu’ils ont formées.

### 1.2 Différenciation Physico-Chimique du Système Solaire en Fonction de la Distance au Soleil

La formation du système solaire trouve son origine dans l’existence d’une nébuleuse de gaz et de grains de poussière recouverts de glaces. Ce nuage de gaz en équilibre hydrostatique et à la température de 10 K (Kouchi et al., 1994) est constitué essentiellement d’hydrogène et d’hélium. Les grains de poussière sont constitués de silicates et de fer et sont recouverts de glace d’H<sub>2</sub>O amorphe (Kouchi et al., 1994). La formation de glace sur la surface des grains réfractaires se produit soit par une séquence de réactions chimiques  $O+H\rightarrow OH$  et  $OH+H\rightarrow H_2O$  (Kouchi et al., 1994), soit par la fixation aléatoire de molécules d’H<sub>2</sub>O existant en phase gazeuse. Ces molécules d’H<sub>2</sub>O se fixent de manière aléatoire tout autour du grain réfractaire par adsorption ou condensation. La température ambiante (10 K) lors de la condensation de ces molécules d’H<sub>2</sub>O n’est pas suffisante pour leur permettre de se réorganiser et de former une structure cristalline. Leur condensation aléatoire, et l’absence d’énergie leur permettant de se mouvoir autour du grain forment des cavités. D’autres éléments plus volatils que H<sub>2</sub>O, provenant du nuage de gaz, peuvent alors pénétrer à l’intérieur de ces cavités et y résider temporairement à cause de l’interaction de van der Waals. Ils peuvent y rester piéger si des molécules H<sub>2</sub>O fraîchement condensées viennent en fermer l’accès avant qu’ils n’aient pu s’en échapper (voir Fig. 1.1).

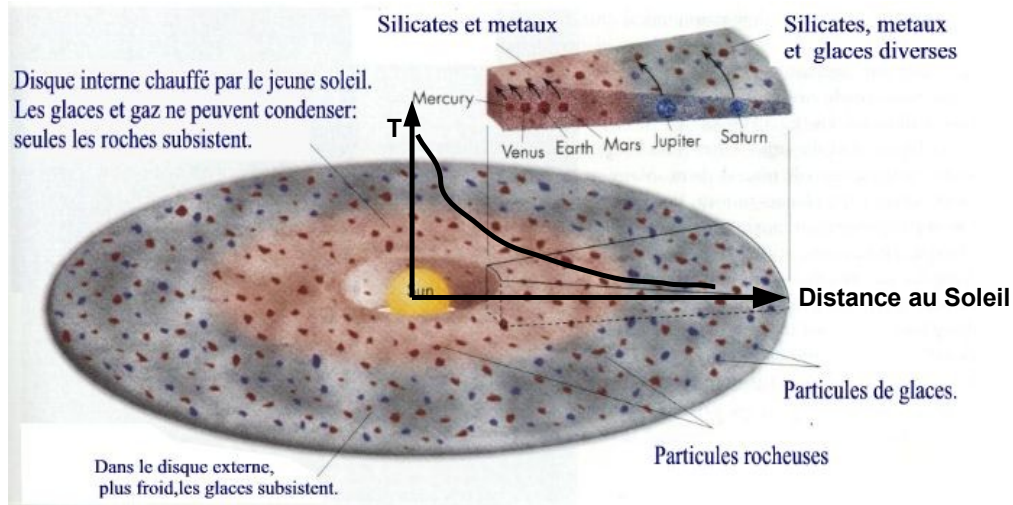
Le temps de piégeage d’une molécule dans une cavité encore ouverte dépend en partie de l’intensité de la force de van der Waals (et donc de la molécule elle-même). Quatre paramètres, que l’on peut regrouper en 2 catégories, peuvent faire varier la quantité de volatils piégée dans une cavité (Kouchi et al., 1994). Dans la première catégorie de paramètres on trouve la **température** du milieu et le **taux**



**Fig. 1.1** - Piégeage de volatils dans la glace H<sub>2</sub>O amorphe lors de sa formation.

**de recouvrement** des cavités par les molécules d'H<sub>2</sub>O. Plus la température est basse, moins les molécules disposent d'énergie, et donc plus le temps de résidence des volatils dans ces cavités augmente. Plus le taux de recouvrement des cavités par les molécules d'H<sub>2</sub>O est faible, plus les volatils ont le temps de s'échapper. La deuxième catégorie regroupe les paramètres dont dépend l'efficacité de la capture: la **polarisation** d'un volatil, qui détermine l'intensité de la force de van der Waals et la **taille** des volatils qui influe sur la quantité pouvant être piégée dans les cavités. La conjonction de tous ces paramètres peut permettre à la matrice de glace d'H<sub>2</sub>O amorphe, formée autour des grains réfractaires, de piéger des volatils dans sa structure. Des expériences de laboratoire (Bar-Nun et al., 1985; Schmitt et al., 1989; Hudson & Donn, 1991) ont illustré ce mécanisme de piégeage par la glace d'H<sub>2</sub>O lors de sa formation à basse température. Schmitt et al. (1989) ont notamment montré que la matrice de glace d'H<sub>2</sub>O amorphe pouvait contenir jusqu'à 10% en moles d'espèces chimiques différentes. Cet état métastable de la glace pourrait être préservé dans l'environnement interstellaire car le temps de cristallisation est plus long que le temps de vie du nuage à 10 K (10<sup>7</sup> ans; Kouchi et al., 1994). Lorsque la température du milieu augmente suffisamment pour que les molécules d'eau aient l'énergie nécessaire pour former une structure cristalline, leur réagencement peut permettre la réouverture des cavités et la libération des différents volatils qui y sont piégés (Bar-Nun et al., 1985; Schmitt et al., 1989; Hudson & Donn, 1991).

Lorsque le nuage s'effondre sur lui-même par instabilité gravitationnelle, il s'échauffe en son centre et adopte la forme d'un disque dans le plan équatorial de l'étoile. L'échauffement provoqué par l'effondrement du nuage est tel que l'ensemble des éléments présents à l'origine dans la nébuleuse interstellaire, sublime dans le disque formé (Kouchi et al., 1994; Chick & Cassen, 1997). Cependant, la température et la masse volumique de la nébuleuse solaire décroissent avec la distance héliocentrique. On obtient alors un profil radial décroissant de la température en fonction de la



**Fig. 1.2** - Formation des glaces dans le disque protosolaire: le disque non homogène thermiquement est globalement découpé en deux régions distinctes; au centre la température est si élevée que seuls les composants réfractaires (silicates et métaux) condensent; au delà de la "ligne des glaces", les composants volatils peuvent se solidifier et former les glaces correspondantes (Sources: Sébastien Charnoz; document "La Formation Du Système Solaire").

distance au centre de la proto-étoile. Ce gradient de température a une conséquence physico-chimique très importante sur la structure du futur système solaire: au cœur de la nébuleuse solaire, la température reste si élevée que seuls les éléments les plus réfractaires peuvent se condenser et former les grains de poussière solides (fer, silicates). Les éléments plus volatils dont les températures de sublimation sont plus basses restent en revanche en phase gazeuse. Sur les zones périphériques de la nébuleuse, la température décroît spatialement (avec la distance au proto-Soleil) et temporellement. Les éléments plus volatils peuvent alors recondenser sur les surfaces des grains réfractaires déjà formés aux températures plus élevées et créer ainsi les glaces cristallines correspondantes. On obtient ainsi une dichotomie physico-chimique du système solaire en fonction de la distance radiale à la jeune étoile et du caractère plus ou moins réfractaire des différents éléments. Il se crée une délimitation appelée "ligne des glaces": au cœur du nuage, on aura condensation des éléments les plus réfractaires, tandis qu'en périphérie du disque, on aura condensation de l'ensemble des composants chimiques (voir Fig. 1.2).

Malgré l'effondrement de la nébuleuse interstellaire, la température aux extrémités du disque protosolaire pourrait rester suffisamment froide (30-90K; Taylor, 1992; Kouchi et al., 1994; Mousis et al., 2000) pour que la glace amorphe qui recouvre les grains de poussière, issue directement du nuage interstellaire, reste intacte. Kouchi et al. (1994) indiquent que la température maximale que doit avoir l'extrémité du disque protosolaire pour préserver la glace amorphe est de 110-120 K ce qui correspond à une région du disque où  $r_h > 12$  UA (Kouchi et al., 1994) ou 30 UA (Chick &

Cassen, 1997). La région située au delà de Saturne pourrait donc être constituée de glaces amorphes si on suppose qu'elles ont été préservées dans le nuage moléculaire parent. L'origine distincte des deux groupes de comètes (courte et longue période) donnerait alors lieu à une structure physico-chimique différente. Les comètes originaires de la région transneptunienne seraient formées de glaces amorphes, et auraient donc la composition physico-chimique de la nébuleuse interstellaire, tandis que les comètes dont le matériel serait issu de la recondensation des glaces dans le disque protosolaire seraient constituées de glaces cristallines dont la composition et la structure dépendent des rapports d'abondances entre les différentes molécules. Il est possible de déterminer la composition des glaces qui recondensent dans le disque protosolaire et qui participent à la formation des planétésimaux à partir d'un modèle de formation des glaces dans la nébuleuse protosolaire. A partir de ce modèle, on peut montrer que les glaces, formées à partir de la phase gazeuse des différents volatils dans la nébuleuse protosolaire, sont un mélange d'hydrates, de clathrates hydrates et de condensats purs. L'utilisation de ce modèle permet alors de contraindre la composition initiale des planétésimaux constitués de glaces, et de l'ensemble des objets formés dans la région externe du système solaire.

## 1.3 Formation des planétésimaux dans la nébuleuse primitive

### 1.3.1 Phase gazeuse

On décrit ici la composition de la phase gazeuse à partir de laquelle la séquence de formation des différentes glaces est initiée dans le disque externe de la nébuleuse solaire. Afin de définir la composition de la phase gazeuse dans ce disque, on postule que tous les éléments O, C, N, S, Ar, Kr et Xe sont en abondance solaire (Lodders, 2003) et on applique cette hypothèse à l'ensemble des composants réfractaires (roches et organiques) et volatils. Les composants réfractaires incluent les roches qui contiennent environ 23% de l'oxygène total de la nébuleuse (Lodders, 2003). L'abondance du carbone organique représente 55% du carbone total de la nébuleuse (Pollack et al., 1994). Le rapport C:O:N inclus dans ces éléments organiques, fixé à 1:0,5:0,12 (Pollack et al., 1994; Sekine et al., 2005), a été déterminé par spectrométrie de masse sur la comète Halley lors de la mission VEGA-1 (Jessberger et al., 1988). On suppose que le restant de O, C, N existe uniquement sous la forme des molécules  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2$  et  $\text{NH}_3$  qui constituent la phase gazeuse initiale du disque protosolaire avec  $\text{H}_2$ . Les glaces du milieu interstellaire (ISM) contiennent aussi une faible fraction d' $\text{H}_2\text{CO}$  (du même ordre de grandeur que  $\text{CH}_4$ ). Malheureusement, puisqu'il n'existe aucune donnée à notre connaissance sur les courbes de stabilité de  $\text{H}_2\text{CO}$  sous forme de condensat pur et sous forme clathratée, cette molécule n'est pas considérée dans la composition de la phase gazeuse

du disque protoplanétaire modélisé.

La composition finale des glaces formées dépend des rapports d'abondances entre les molécules CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub> et NH<sub>3</sub> insérées dans le modèle de formation des glaces, de la cinétique des réactions possibles entre les molécules aux différentes températures. Les rapports d'abondances, imposés dans le modèle, déterminent la composition physico-chimique des planétésimaux qui sont à l'origine des planètes et des comètes. Il semble donc important d'examiner l'ensemble des rapports CO:CO<sub>2</sub>:CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>4</sub> et N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> dans l'ISM entre les principales molécules en phase gazeuse dans la nébuleuse. Dans le modèle, la température du disque est initialement assez élevée pour sublimer toutes les glaces de l'ISM qui y entrent (dans une région du disque comprise dans  $r_h < 12$  UA) et ce, en particulier, dans la zone de formation des planétésimaux qui constitueront les planètes. Les rapports molaires des molécules dans la phase gazeuse du disque protoplanétaire sont supposés similaires à ceux de l'ISM où les phases solide et gazeuse coexistent (Mousis et al., 2002). Cependant, dans certains cas, suivant la cinétique des réactions chimiques, la chimie de la phase gazeuse pourrait affecter ces rapports moléculaires dans le disque. En particulier, l'exemple du calcul de la distribution du soufre dans la nébuleuse solaire (Pasek et al., 2005) nous permet de supposer qu'il est présent dans le disque protoplanétaire sous la forme de H<sub>2</sub>S et d'autres composants réfractaires sulfurés. De plus, la valeur du rapport N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> est complètement incertaine dans la phase gazeuse de notre modèle de disque, même si les modèles chimiques courants de l'ISM prédisent que N<sub>2</sub> devrait être plus abondant que NH<sub>3</sub> (Irvine & Knacke, 1989). D'un autre côté, ce rapport N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> pourrait avoir été plus bas dans le disque puisque il a été montré que la conversion du N<sub>2</sub> en NH<sub>3</sub> peut être accélérée par des effets catalytiques sur les grains de Fe dans la nébuleuse solaire (Lewis & Prinn, 1980; Fegley, 2000). Cependant, la variation du rapport N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> dans l'intervalle [0,1:1 - 10:1] montre (voir section suivante) que, quel que soit le rapport adopté dans la phase gazeuse, les fractions molaires des glaces formées à partir des autres composants volatils sont peu influencées par ce paramètre.

Parallèlement, d'après Prinn & Fegley (1981, 1989), dans un gaz dominé par H<sub>2</sub>, les réactions reliant CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> et CO (principal réservoir de carbone en phase gazeuse dans le milieu interstellaire et la nébuleuse solaire; voir Pollack et al., 1994 et Sekine et al., 2005) sont



et



lesquelles s'effectuent préférentiellement vers la droite avec la décroissance de la température à pression constante. La réaction (1.1) a été étudiée par Talbi & Herbst (2002) qui ont démontré que son efficacité est négligeable, même à des températures

aussi élevées que 2000 K (de l'ordre de  $\sim 4,2 \cdot 10^{-22} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ). Une telle température n'est atteinte qu'aux distances vraiment proches de l'étoile au moment de la formation du disque protoplanétaire. On considère alors que la quantité de  $\text{CO}_2$  produite à travers cette réaction est négligeable durant toute la durée de vie du disque protoplanétaire. La réaction (1.2) a été étudiée par Lewis & Prinn (1980) et Mousis et al. (2002): les auteurs ont trouvé que le rapport initial  $\text{CO}:\text{CH}_4$  était faiblement affecté dans l'ensemble de la nébuleuse solaire, excepté très près du Soleil. On suppose donc que les rapports entre les molécules  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  et  $\text{CH}_4$  dans la phase gazeuse des disques protoplanétaires sont similaires à ceux déterminés dans l'ISM.

A partir de ces considérations, on impose à la phase gazeuse du disque les rapports molaires  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:2:1$ , valeurs qui sont en accord avec les mesures effectuées dans l'ISM et qui incluent les contributions des phases gazeuse et solide (Frerking et al., 1982; Ohishi et al., 1992; Ehrenfreund & Schutte, 2000; Gibb et al., 2000). De plus, on suppose que S existe sous sa forme moléculaire volatile principale,  $\text{H}_2\text{S}$ , et sous la forme d'autres composants réfractaires sulfurés ( $\text{FeS}$ ,  $\text{MgS}$ ,  $\text{SiS}$ ,  $\text{CaS}$ ; voir Pasek et al., 2005). Cependant, dans une région comprise entre 1 et 1,6 UA (région interne du disque),  $\text{H}_2\text{S}$  disparaît totalement au profit des composants réfractaires sulfurés ( $\text{FeS}$  principalement). En revanche, au delà de 1,6 UA, les cinétiques de réaction sont trop lentes pour produire des composants réfractaires sulfurés à partir de  $\text{H}_2\text{S}$  (Pasek et al., 2005) qui a donc une abondance solaire au moment de la formation du disque protoplanétaire (Grevesse & Sauval, 1998). Dans cette région, au moment de la formation des glaces, la concentration initiale de  $\text{H}_2\text{S}$  s'homogénéise par diffusion avec la partie interne du disque.  $\text{H}_2\text{S}$  ne représente plus que 50% de  $\text{H}_2\text{S}_\odot$  formé dans la région externe du disque protoplanétaire (Pasek et al., 2005). Le rapport  $\text{H}_2\text{S}:\text{H}_2 = 0,5 \times (\text{S}:\text{H}_2)_\odot$  est alors adopté dans le modèle de formation des glaces. On considère également le rapport  $\text{N}_2:\text{NH}_3=1:1$  dans la phase gazeuse de la nébuleuse. Cette valeur est compatible avec les calculs thermochimiques dans le disque et prend en compte les effets catalytiques des grains de Fe mélangés au gaz sur la cinétique de conversion du  $\text{N}_2$  en  $\text{NH}_3$  (Fegley, 2000). Enfin, une fois que les abondances de ces molécules sont fixées, le restant de O donne l'abondance de  $\text{H}_2\text{O}$ .

### 1.3.2 Formation des glaces dans le disque protoplanétaire

La formation et la composition des glaces incorporées dans les planétésimaux est déterminée par leurs séquences respectives de condensation, clathration et d'hydratation lors du refroidissement du disque protoplanétaire. On postule que seules ces formes de glace (condensat pure, clathrate hydrate et hydrate) peuvent exister. Les clathrates hydrates sont composés d'une structure cubique de glace d' $\text{H}_2\text{O}$  cristalline qui forme des cages à l'intérieur desquelles des molécules hôtes en phase gazeuse sont piégées par des forces de type van der Waals. Cette structure clathrate, métastable en l'absence de gaz, nécessite un taux minimal de remplissage des cages

pour assurer sa stabilité et donc son existence. En deçà, cette structure disparaît et la glace adopte alors une structure cristalline classique (cubique ou hexagonale suivant la température) de type “condensat pure”. La structure hydrate correspond à la liaison d’une molécule  $x$  avec la molécule  $\text{H}_2\text{O}$ . Les conditions thermodynamiques de piégeage ou de condensation d’une espèce  $x$  à une distance donnée de l’étoile sont déterminées par l’intersection des courbes de stabilité de ses formes hydratées, clathratées et condensées (pures) avec la courbe de refroidissement (qui donne la température  $T$  et la pression  $P$ ) du disque protoplanétaire, calculée à une distance donnée de l’étoile. Les processus de clathration et d’hydratation résultent de la présence de glace d’ $\text{H}_2\text{O}$  cristalline formée à partir de 150 K et disponible au moment du piégeage des volatils dans la nébuleuse solaire. Ce postulat semble justifié si on considère que les scénarios courants de formation de la nébuleuse solaire suggèrent que la plupart des glaces provenant du nuage interstellaire tombent dans le disque, et sont vaporisées dès qu’elles pénètrent dans la nébuleuse solaire primitive (dans un rayon compris entre 12 et 30 UA autour de la proto-étoile; voir Kouchi et al., 1994 et Chick & Cassen, 1997). On suppose que la décroissance en température, en pression et en densité surfacique du disque protoplanétaire est suffisamment lente pour permettre à l’ensemble des molécules  $x$  de la phase gazeuse de former les glaces hydrates, clathrates ou pures correspondantes. Une fois formées, ces différentes glaces s’agglomèrent et sont incorporées dans les planétésimaux.

La courbe de refroidissement du disque protoplanétaire, issue d’un modèle turbulent d’accrétion du disque décrit dans Papaloizou & Terquem (1999) et Alibert et al. (2005), résulte de la détermination de la structure verticale du disque à une distance donnée de l’étoile. Ce modèle, qui reproduit la diffusion turbulente de l’ensemble des matériaux vers l’étoile, fournit, à partir de paramètres imposés (masse stellaire  $M_\star$ , turbulence du disque  $\alpha$  et position radiale à l’étoile  $r$ ), la température  $T$ , la pression  $P$  et la densité surfacique du gaz dans le disque protoplanétaire, à la distance  $r$  de l’étoile. Cependant, les conditions de piégeage des volatils (composition des glaces) restent approximativement identiques quelles que soient la distance  $r$  à l’étoile et les valeurs adoptées pour les paramètres ( $\alpha$ ,  $M_\star$ ) du modèle de disque (Section 1.4.1; Marboeuf et al., 2008). Ce résultat implique que la composition des glaces reste identique (avec une erreur de  $\sim 0.5\%$  en masse), indépendamment des paramètres de disque adoptés et de la région où elles sont formées.

Les courbes de stabilité des formes hydratées, clathratées et condensées pures dérivent de données expérimentales et théoriques. Les courbes de stabilité des hydrates et des clathrates de chaque volatil, données dans le tableau 1.1, proviennent de Lunine & Stevenson (1985). Les courbes de stabilité des condensats purs utilisées dans le modèle de formation des glaces dérivent quant à elles des données expérimentales et théoriques fournies dans le CRC Handbook de chimie et de physique (Lide, 2002) et sont données dans le tableau 1.2.

La figure 1.3 illustre le processus de piégeage des volatils à partir des courbes de stabilité des hydrates, clathrates et condensats purs de chaque espèce. Les courbes

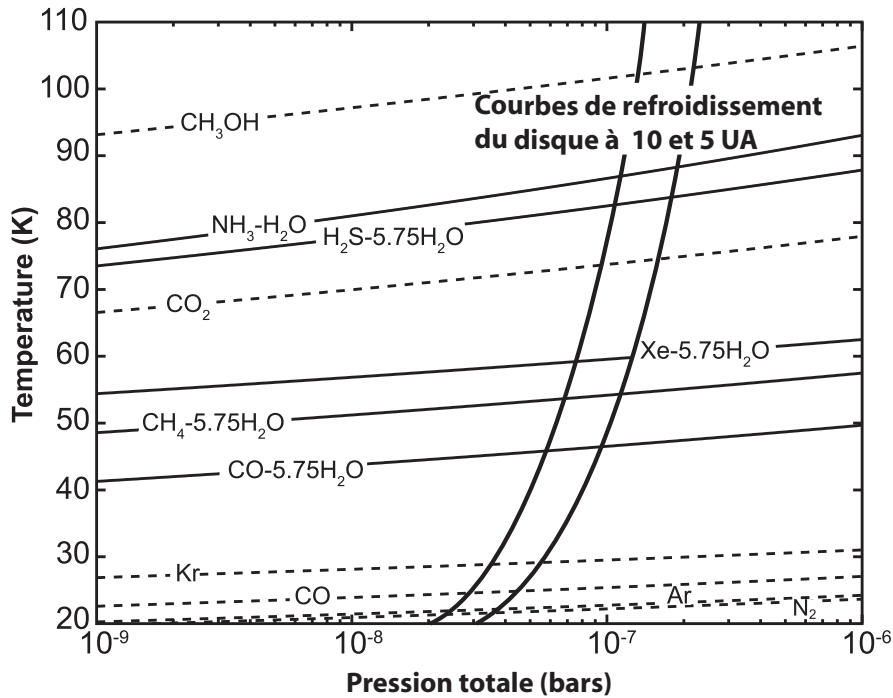
**Tab. 1.1** - Paramètres des courbes de stabilité des clathrates hydrates considérés (reproduits à partir de Hersant et al., 2004). Leurs équations sont de la forme  $\ln(P/1 \text{ bar}) = A/T + B$ , où  $P$  et  $T$  sont la pression partielle (bars) et la température (K) de l'espèce considérée, respectivement.  $A$  est en K et  $B$  est sans dimension.

Espèces	A	B
CH <sub>4</sub>	-2161,81	11,1249
CO	-1685,54	10,9946
CO <sub>2</sub>	-2663,17	12,3069
N <sub>2</sub>	-1677,62	11,1919
NH <sub>3</sub>	-2878,23	8,00205
H <sub>2</sub> S	-3111,02	11,3801
Ar	-1481,78	9,95523
Kr	-1987,5	9,99046
Xe	-2899,18	11,0354

**Tab. 1.2** - Paramètres des courbes de stabilité de condensats purs considérés. Leurs équations sont de la forme  $\log(P/1 \text{ bar}) = A/T + B$ , où  $P$  et  $T$  sont la pression partielle (bars) et la température (K) de l'espèce considérée, respectivement.  $A$  est en K et  $B$  est sans dimension.

Espèces	A	B
CH <sub>4</sub>	-475,61	4,28
CO	-411,24	5,24
CO <sub>2</sub>	-1365,9	7,025
N <sub>2</sub>	-359,19	4,786
NH <sub>3</sub>	-1565,0	6,788
H <sub>2</sub> S	-1153,7	5,5
Ar	-369,9	4,186
Kr	-603,46	5,106
Xe	-819,28	4,988





**Fig. 1.3** - Courbes de stabilité des hydrates ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ), clathrates ( $X\text{-5.75H}_2\text{O}$ ) (lignes solides), et condensats purs (lignes discontinues), et courbes de refroidissement de la nébuleuse solaire aux distances héliocentriques de 5 et 10 UA. Seules les glaces qui se forment réellement lors du refroidissement du disque protoplanétaire sont représentées ici. Au dessus de chaque courbe de stabilité, l'espèce correspondante reste en phase gazeuse. En dessous, elle est piégée comme clathrate ou condense sous forme cristalline.

de refroidissement du disque à 5 ou 10 UA interceptent ces courbes de stabilité à différentes conditions de température et pression. Seules les glaces qui se forment effectivement lors du refroidissement du disque protoplanétaire sont représentées ici. Pour chaque glace considérée, le domaine de stabilité est la région située sous la courbe de stabilité correspondante. Le processus de clathration des volatils par la glace d' $\text{H}_2\text{O}$  cristalline s'arrête quand il n'y a plus de molécules d' $\text{H}_2\text{O}$  disponibles. Dans les conditions de pression de la nébuleuse solaire, seul le  $\text{CO}_2$  cristallise à température plus élevée que sa forme clathrate associée. On suppose alors que la phase solide du  $\text{CO}_2$  existe uniquement sous cette forme dans cet environnement. Enfin, dans nos calculs, nous n'avons considéré que la formation de glace pure de  $\text{CH}_3\text{OH}$  puisqu'à notre connaissance, il n'existe aucune donnée expérimentale concernant la courbe de stabilité de sa forme clathrate associée dans la littérature.

Les résultats de la composition des glaces produites à partir d'une phase gazeuse de composition solaire, montrent que  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , Xe et  $\text{CH}_4$  sont entièrement

piégés par  $\text{H}_2\text{O}$ , sous forme d'hydrate  $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ , et de clathrates  $\text{H}_2\text{S-5,75H}_2\text{O}$ ,  $\text{Xe-5,75H}_2\text{O}$  et  $\text{CH}_4\text{-5,75H}_2\text{O}$ . Environ 60% du CO est piégé sous forme de clathrate ( $\text{CO-5,75H}_2\text{O}$ ), au delà, il n'y a plus de molécules d' $\text{H}_2\text{O}$  disponibles pour former le clathrate de CO. Le reste de CO, tout comme les volatils  $\text{N}_2$ , Kr et Ar, dont la clathration a lieu à plus basse température, reste dans la phase gazeuse jusqu'à ce que le disque refroidisse suffisamment pour permettre la formation de condensats purs (entre 20 et 30 K).

Les glaces formées après refroidissement du disque protoplanétaire participent à la composition physico-chimique des planétésimaux composés de glaces, et des objets qu'ils créent dans la région externe du disque. Les processus de formation des glaces ainsi que la composition chimique de la phase gazeuse qui ont été décrits pour le système solaire, restent valables quels que soient les systèmes planétaires étudiés.

## 1.4 Application du modèle de formation des glaces aux objets formés dans les systèmes solaires externes

A partir du modèle de formation des glaces décrit ci-avant, on examine les conditions primordiales menant à la formation des planétésimaux qui ont contribué à la formation des planètes dans la région externe des disques protoplanétaires. La composition des glaces est un paramètre clef dans les modèles de structure interne et d'évolution thermique des planètes. Les espèces "mineures" déterminent la composition atmosphérique de ces planètes, la structure des manteaux glacés et la possible présence de liquide (océans) à leur surface. Plus généralement, la composition des glaces dans les planétésimaux dépend de la composition initiale de la phase gazeuse et entre autres de l'abondance relative du carbone par rapport à l'oxygène C:O et de l'abondance molaire du  $\text{CO}_2$  par rapport au CO. On propose ci-après d'illustrer les applications du modèle de formation des glaces aux planètes extrasolaires, aux planètes géantes Jupiter et Saturne et à la formation de Titan. En Annexe H.2, le lecteur trouvera également un article (auquel l'auteur a participé) sur l'origine des volatils dans la ceinture d'astéroïde. Les glaces formées dans la région externe du disque protosolaire pourraient avoir été charriées par la migration du gaz dans la région interne (Cyr et al. 1998; Mousis & Alibert, 2005). Dans tous les cas d'études que nous présentons, nous imposons les rapports molaires donnés dans la section précédente, soient  $\text{CO:CH}_3\text{OH:CH}_4=70:2:1$  et  $\text{N}_2:\text{NH}_3=1:1$ .

### 1.4.1 Composition des glaces dans les planètes extrasolaires de faible masse

L'utilisation du modèle de formation des glaces peut contraindre la composition des petites planètes extrasolaires glacées telles que OGLE 390Lb (Beaulieu et al., 2006). OGLE 390Lb est un exemple de système planétaire froid dont les paramètres physiques ( $M_\star = 0.22_{-0.11}^{+2.1} M_\odot$  et le demi grand axe de la planète  $a = 2.6_{-0.6}^{+1.5}$  UA) en font un cas d'étude pertinent. Cette petite planète pourrait avoir été formée au delà de la ligne des glaces du disque protoplanétaire de son système stellaire, et avoir migré plus près de son étoile. Kuchner (2003) et Léger et al. (2004) ont suggéré que de telles planètes pourraient être composées à  $\sim 50\%$  en masse d'éléments volatils, tels que  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{N}_2$  et  $\text{H}_2\text{S}$ . Bien que les paramètres de ce système soient incertains, la variation des paramètres d'entrée du modèle de disque protoplanétaire (masse de l'étoile  $M_\star$ , position de la planète  $r$  et turbulence du disque  $\alpha$ ) ont peu d'influence sur les conditions de piégeage des volatils dans ce disque. Quels que soient les paramètres de disque adoptés et la région de formation des glaces, leurs compositions restent approximativement identiques (avec une erreur de  $\sim 0.5\%$ ). Les abondances des différentes espèces chimiques sont donc homogènes dans la phase gazeuse du disque. Nous choisissons par la suite de fixer  $M_\star = 0.22 M_\odot$ ,  $\alpha = 2 \times 10^{-3}$ , et  $r = 2.6$  UA pour l'obtention de la courbe de refroidissement du disque protoplanétaire du système OGLE 390Lb.

La composition des glaces dans les planétésimaux dépend donc essentiellement de la composition de la phase gazeuse imposée, indépendamment des paramètres du disque. On étudie l'influence de l'ensemble des rapports possibles sur la composition physico-chimique des planétésimaux. Tout d'abord, on choisit de tester la variation du rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  (ces molécules étant les plus abondantes des volatils carbonés) en phase gazeuse dans l'intervalle 0,1–1. Cet intervalle correspond aux valeurs extrêmes mesurées dans les phases solide et gazeuse de l'ISM (Ehrenfreund & Schutte, 2000; Gibb et al., 2004). Seul le rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  varie et les rapports molaires  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4$  et  $\text{N}_2:\text{NH}_3$  restent constants dans la phase gazeuse du modèle de disque protoplanétaire (70:2:1 et 1:1 respectivement). Parce que le rapport C:O peut varier dans le milieu interstellaire (Kuchner & Seager, 2005; Roberge et al., 2006), on étudie dans un second temps, l'influence de la variation de ce rapport dans le disque sur la composition physico-chimique des glaces formées. On rappelle que la variation du rapport  $\text{N}_2:\text{NH}_3$  ne change pas la composition finale des glaces des autres molécules.

#### A- Glaces produites dans une phase gazeuse de composition solaire

On calcule ici le rapport massique de chaque glace dans le disque protoplanétaire de composition solaire. La décroissance temporelle de la densité surfacique de l'ensemble des matériaux (par diffusion turbulente) engendre une variation des

abondances des volatils par rapport à la composition initiale de la phase gazeuse du disque. Au moment de l'hydratation, de la clathration ou de la condensation des volatils, les abondances des glaces diffèrent de la composition initiale du gaz suivant leurs températures et pressions de formation. Le rapport massique d'un volatil  $i$  par rapport à  $\text{H}_2\text{O}$  dans les planétésimaux accrétés est ainsi déterminé en utilisant les conditions de formation des différentes glaces (calculées à une distance héliocentrique donnée dans les disques protoplanétaires), et à partir des abondances dans la phase gazeuse. Ce rapport est déterminé par la relation donnée par Mousis & Gautier (2004):

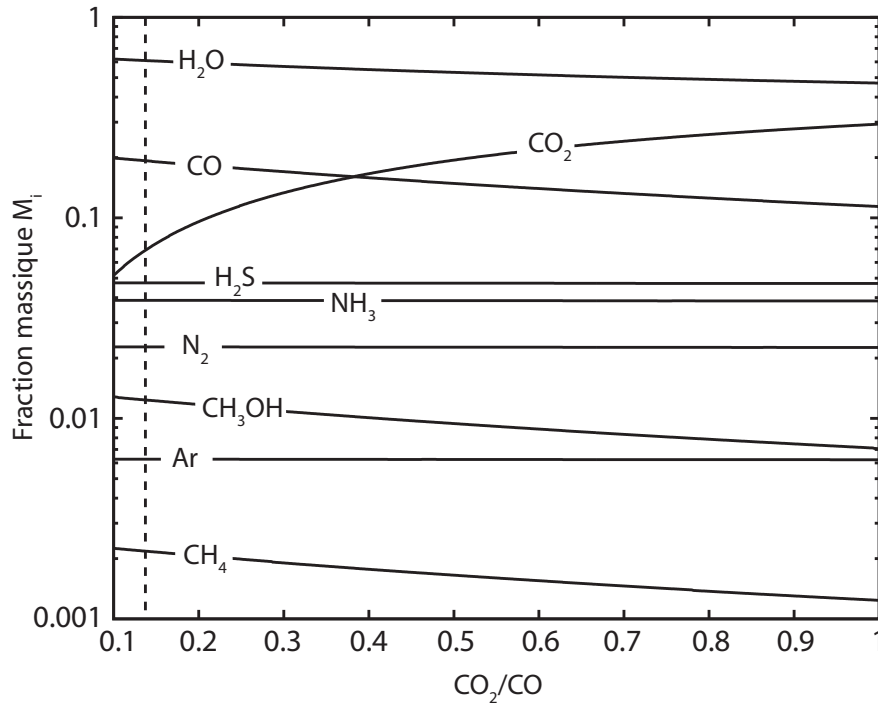
$$m_i = \frac{X_i}{X_{\text{H}_2\text{O}}} \frac{\Sigma(r; T_i, P_i)}{\Sigma(r; T_{\text{H}_2\text{O}}, P_{\text{H}_2\text{O}})} \quad (1.3)$$

où  $X_i$  et  $X_{\text{H}_2\text{O}}$  sont respectivement les rapports de masse des volatils  $i$  et  $\text{H}_2\text{O}$  par rapport à  $\text{H}_2$  dans le disque protoplanétaire.  $\Sigma(R; T_i, P_i)$  et  $\Sigma(R; T_{\text{H}_2\text{O}}, P_{\text{H}_2\text{O}})$  sont les densités surfaciques du disque à la distance  $r$  de l'étoile au moment de l'hydratation, de la clathration ou de la condensation des espèces  $i$ , et au moment de la condensation de  $\text{H}_2\text{O}$  respectivement. A partir de  $m_i$ , il est possible de déterminer la fraction massique  $M_i$  de chaque espèce  $i$  par rapport à l'ensemble des volatils qui prennent part à la formation du planétésimal glacé:

$$M_i = \frac{m_i}{\sum_{j=1,n} m_j}, \quad (1.4)$$

avec  $\sum_{i=1,n} M_i = 1$ .

La figure 1.4 montre la variation de composition des planétésimaux formés dans les disques en fonction du rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  (présenté pour des valeurs entre 0,1:1 et 1:1 respectivement), avec les rapports molaires  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4$  et  $\text{N}_2:\text{NH}_3$  initiaux dans la phase gazeuse (70:2:1 et 1:1). Les espèces Kr et Xe n'y figurent pas car leurs fractions massiques sont très faibles (respectivement environ  $1,04 \cdot 10^{-5}$  et  $2,65 \cdot 10^{-6}$ ). On rappelle que la composition des glaces dans la Fig. 1.4 est valide pour les solides formés à n'importe quelle distance à l'intérieur du disque protoplanétaire.  $\text{H}_2\text{O}$  reste la glace la plus abondante en masse, quelle que soit la valeur du rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  adopté dans la phase gazeuse du disque. Il est intéressant de constater que le CO est l'espèce carbonée principale piégée à l'intérieur des planétésimaux pour  $\text{CO}_2:\text{CO} \leq 0,4$  dans la phase gazeuse et que le rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  est plus grand dans les planétésimaux que dans la phase gazeuse d'un facteur 2,5–3. Aux rapports de  $\text{CO}_2:\text{CO}$  plus élevés,  $\text{CO}_2$  devient l'espèce carbonée principale incorporée dans les glaces. Parce qu'on fixe les rapports  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4$  et  $\text{N}_2:\text{NH}_3$ , les quantités relatives de  $\text{H}_2\text{O}$  et des autres espèces carbonées diminuent à mesure que le rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  augmente.



**Fig. 1.4** - Composition des glaces incorporées dans les planétésimaux produits dans un disque où les abondances de tous les éléments sont solaires, en fonction du rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  adopté dans la phase gazeuse initiale du disque. La composition est exprimée en rapport massique (masse de glace  $m_i$  sur la masse totale de l'ensemble des glaces). Les abondances des éléments considérés sont solaires avec  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:2:1$  et  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  dans la phase gazeuse. L'intersection de la ligne verticale en traits discontinus avec les autres courbes donne les rapports des fractions massiques des glaces formées à partir de  $\text{CO}:\text{CO}_2:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:10:2:1$  et  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$ , notre modèle nominal de composition de la phase gazeuse.

Au contraire, les fractions massiques de  $\text{NH}_3$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , et des gaz rares sont très peu influencées par la variation du rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  dans la phase gazeuse.

## B- Glaces produites dans une phase gazeuse riche en carbone ou en oxygène

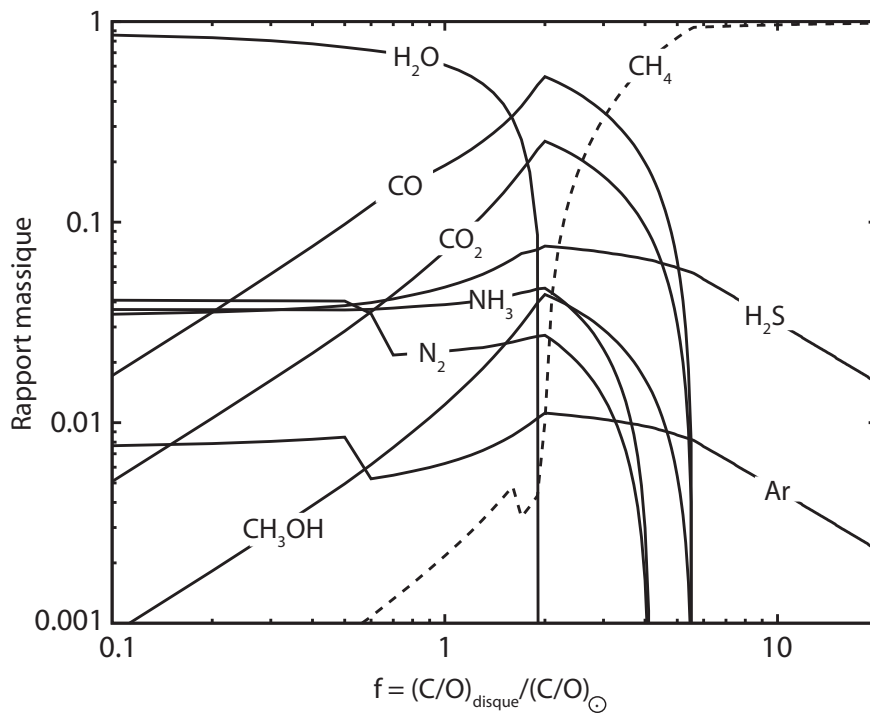
On suppose maintenant que le rapport atomique C:O pourrait différer de la valeur protosolaire. En effet, on a admis jusqu'à présent que la composition des glaces qui se formaient dans un disque avec un rapport C:O donné était obtenue en supposant que la phase gazeuse de tous les éléments restait solaire. On postule maintenant que

le rapport atomique C:O pourrait différer de la valeur protosolaire ( $(\text{C:O})_{\odot} \sim 0.5$ ; Lodders, 2003), et on définit un facteur d'enrichissement carbone sur oxygène,  $f \equiv (\text{C:O})_{\text{disque}} / (\text{C:O})_{\odot}$ . Effectivement, Kuchner & Seager (2005) ont suggéré que les systèmes extrasolaires pouvaient être formés à partir de nuages riches en carbone où  $f > 2$ . De plus, les observations des disques de débris autour de  $\beta$  Pic indiquent un enrichissement extrême en carbone de l'environnement post-protoplanétaire ( $f \sim 18$ ; Roberge et al., 2006). Cependant, les glaces peuvent avoir cristallisé dans les disques protoplanétaires formés de nuages riches en oxygène. Pour le moment, seules les observations d'Orion rapportent un facteur  $f \sim 0,5$  (Walmsley et al., 1999). Dans l'étude qui suit, nous couvrons l'intervalle des valeurs observées et mentionnées ci-dessus en faisant varier  $f$  entre 0,1 et 20.

La figure 1.5 montre la composition des glaces formées dans les disques protoplanétaires en fonction de  $f$  pour  $\text{CO}:\text{CO}_2=70:10$ . Les autres rapports molaires ne changent pas. Pour de faibles valeurs de  $f$  (0,1 à 1,6),  $\text{H}_2\text{O}$  est le constituant majoritaire des glaces (86 à 34% en masse, respectivement). Pour  $1,6 < f < 3,0$ , la glace principale dans les planétésimaux est le CO ( $\geq 34\%$  en masse, avec un pic à 53% en masse pour  $f = 2$ ). On rappelle que C, O et N sont distribués dans les éléments organiques, suivant le rapport C:O:N = 1:0,5:0,12, et réfractaires. L'augmentation de l'abondance du carbone ( $f > 1$ ) accroît la quantité d'éléments organiques produits (avant les volatils) dans le disque, lesquels incorporent également l'oxygène et l'azote. Dans les environnements riches en carbone ( $f > 1$ ), ce sont les molécules carbonées, et *a priori*, les molécules les plus simples comme le CO, qui se forment en premier dans la phase gazeuse. Les autres molécules carbonées ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_4$ ) sont formées ensuite. L'augmentation du rapport  $f$  accroît donc naturellement la production de ces molécules carbonées dans la phase gazeuse du disque. Le pic en masse, à  $f = 2$ , des espèces carbonées (CO,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ) correspond à l'incorporation maximale de l'oxygène, alloué à la phase gazeuse, dans ces molécules. D'ailleurs, pour ce rapport, il n'y a plus d'oxygène pour former la molécule  $\text{H}_2\text{O}$ . Pour des rapports  $f$  plus grands, l'oxygène (capté initialement lors de la formation des éléments réfractaires et organiques) vient à manquer et les abondances des molécules CO,  $\text{CO}_2$  et  $\text{CH}_3\text{OH}$  décroissent. De même, l'azote (en abondance solaire), incorporé dans les éléments organiques, diminue dans la phase gazeuse du disque et les abondances des molécules  $\text{N}_2$  et  $\text{NH}_3$  décroissent. Pour  $f \geq 3$ ,  $\text{CH}_4$  devient le composant glacé principal ( $\geq 33\%$  en masse): l'essentiel du carbone sert à former  $\text{CH}_4$ . Pour  $f \geq 5$ , tout l'oxygène va dans les éléments réfractaires et organiques:  $\text{CH}_4$  devient la seule espèce carbonée présente dans le disque.

## C- Résumé

Dans ce travail, nous avons quantifié les espèces mineures incluses dans les glaces des planétésimaux produits dans les disques protoplanétaires. En utilisant une composition solaire des abondances élémentaires dans la phase gazeuse, nous avons dé-



**Fig. 1.5** - Composition des glaces (en % massique) dans les planétésimaux produits dans un disque où tous les éléments sont solaires, excepté le carbone, en fonction du facteur d'enrichissement C/O  $f \equiv (C/O)_{\text{disque}} / (C/O)_{\odot}$  dans la phase gazeuse initiale.

terminé que H<sub>2</sub>O restait l'élément dominant quel que soit le rapport molaire CO<sub>2</sub>:CO adopté. D'autre part, les planètes formées dans un environnement riche en carbone sont appauvries en glace d'H<sub>2</sub>O et sont essentiellement formées de CO ou de CH<sub>4</sub>. Ces résultats ont des implications non négligeables (voir ci-après) sur la structure interne et l'évolution thermique des planètes formées dans ces environnements.

**Implications pour les planètes extrasolaires froides de faible masse.** Ehrenreich et al. (2006) ont rapporté que les planètes extrasolaires froides et de faible masse pourraient être décrites comme des “planètes océan” gelées, avec une couche subsurfacique liquide d'H<sub>2</sub>O entre des couches de basse et haute pression. La source de chaleur permettant l'existence d'une couche liquide pourrait être une énergie issue d'éléments radioactifs à l'intérieur du manteau rocheux. Comme cette source de chaleur décroît avec le temps, l'océan en sous-sol pourrait geler en quelques millions d'années (Ehrenreich et al., 2006). Cependant, la glaciation de cet océan pourrait être plus lente si la cryosphère de la planète contenait de faibles quantités de NH<sub>3</sub>, puisque l'eau qui en contient a un point de gel plus bas en température que l'eau pure. Un océan d'eau avec de l'ammoniac pourrait alors exister en sous-sol tant que l'eau reste le constituant majeur des glaces pour  $f \leq 1,6$  solaire, tandis que la fraction massique de glace d'NH<sub>3</sub> reste quasi identique avec  $\sim 3,7\text{--}4,3\%$  (voir Fig. 1.5).

**Implications pour les “planètes océan” chaudes.** Nos résultats peuvent être utilisés pour contraindre la composition des phases solide et gazeuse des planètes chaudes qui ont été formées initialement dans le disque externe et qui ont migré près de leur étoile. C'est le cas des planètes océan décrites par Kuchner (2003), Léger et al. (2004), et Selsis et al. (2007). La présence de CO<sub>2</sub> dans ces planètes océan pourrait dramatiquement changer l'évolution de leur refroidissement et de leurs structures, parce que le CO<sub>2</sub> maintiendrait l'atmosphère dans un état chaud, empêchant la formation d'un manteau de glace ou d'un océan. Une faible quantité de CO<sub>2</sub> dans les glaces à l'origine des planétésimaux qui ont formé les planètes océan représenterait en absolu plusieurs centaines de fois la quantité de CO<sub>2</sub> dans l'atmosphère de Vénus, puisque la fraction glace sur roche de ces planètes est de l'ordre de 1. Cette faible quantité de CO<sub>2</sub> serait donc suffisante pour provoquer cet effet de serre. En postulant une composition solaire dans le disque, on prédit que  $\sim 7\%$  de la masse de glace est composée de CO<sub>2</sub>, avec un pic à 25% pour  $f = 2$ . L'augmentation du CO<sub>2</sub> dans la planète aurait pour conséquence d'augmenter la densité moyenne des planètes océan. Il serait alors difficile de les différencier des super-Terres dans les missions de détection de planètes extrasolaires telles Corot et Kepler (Selsis et al., 2007). Une planète océan formée dans un environnement riche en carbone pourrait être également une “planète carbonée” (voir ci-après).

**Implications pour les “planètes carbonées”.** Kuchner & Seager (2005) ont envisagé l'existence de planètes formées dans un environnement riche en carbone. Les



“planètes carbonées” pourraient en effet être formées avec un rapport  $f > 1,6$  dans la phase gazeuse. De tels environnements pourraient inclure des milieux stellaires riches en carbone, comme les disques de débris autour de  $\beta$  Pic (Roberge et al., 2006). Le principal élément réfractaire composant ces hypothétiques planètes devrait être le SiC, davantage que les métaux et les silicates usuellement considérés dans les planètes formées avec un rapport C:O solaire. Notre étude nous permet de contraindre la phase volatile de telles planètes. La glace majoritaire est le CO, avec des fractions massiques entre  $\sim 34$  et  $53\%$  pour  $1,6 \leq f \leq 3,0$ . D’après la figure 1.5, quand  $f$  augmente, le CO, le CO<sub>2</sub> et le CH<sub>4</sub> deviennent les composants majoritaires. Il est intéressant de noter que ces planètes devraient être complètement asséchées, rendant la quantité d’eau négligeable. Pour des valeurs de  $f$  plus élevées, CH<sub>4</sub> devient la glace la plus abondante dans les planètes carbonées ( $\geq 80\%$  en masse pour  $f \geq 5$ ).

## 1.4.2 Applications à la formation du système solaire externe

### A- Détermination de la masse minimale d’éléments lourds dans les atmosphères de Jupiter et Saturne.

La capture des volatils sous la forme de clathrates hydrates durant la formation des planétésimaux dans la nébuleuse solaire externe, est un mécanisme réaliste pour interpréter leurs enrichissements observés dans les atmosphères des planètes géantes. Jusqu’à présent, le processus de clathration était supposé efficace à 100%. Les modèles passés (Alibert et al., 2005) adoptaient une abondance de l’oxygène supérieure à la valeur solaire, de manière à former suffisamment d’H<sub>2</sub>O pour clathrater l’ensemble des volatils et reproduire l’abondance des volatils dans les atmosphères des planètes Jupiter et Saturne. Cependant, les masses minimales de glace nécessaires pour reproduire ces enrichissements dépassent les prédictions des masses d’éléments lourds (élément plus lourd que H) dans les atmosphères des deux planètes géantes: 29 à 42  $M_{\oplus}$  pour Jupiter, et 0 à 10  $M_{\oplus}$  pour Saturne (Fortney & Hubbard, 2003; Guillot, 2005). On montre dans cette section qu’il est possible de reproduire les enrichissements en volatils des atmosphères de Jupiter et Saturne en postulant une efficacité partielle des processus de clathration et en utilisant une abondance solaire de l’oxygène.

Les processus de formation des glaces, illustrés en Fig. 1.3 et 1.6, sont déterminés en utilisant les courbes de stabilité des hydrates, des clathrates et des condensats purs, et la courbe de refroidissement du disque protoplanétaire détaillant l’évolution de la température et de la pression à 5 et 10 UA pour un processus de clathration efficace à 100 et 0% respectivement. On rappelle que les rapports molaires utilisés sont CO:CO<sub>2</sub>:CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>4</sub> = 70:10:2:1 et N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> = 1:1. Ces valeurs sont cohérentes avec les mesures dans l’ISM (voir section 1.3).

La figure 1.6 montre la séquence de formation des glaces en l’absence de cla-

1.4 APPLICATION DU MODÈLE DE FORMATION DES GLACES AUX OBJETS  
FORMÉS DANS LES SYSTÈMES SOLAIRES EXTERNES

---

thration dans le disque protosolaire. L'ensemble des volatils, excepté  $\text{NH}_3$  qui forme l'hydrate  $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ , condense sous forme cristalline à mesure que le disque se refroidit jusqu'à 20-30 K.

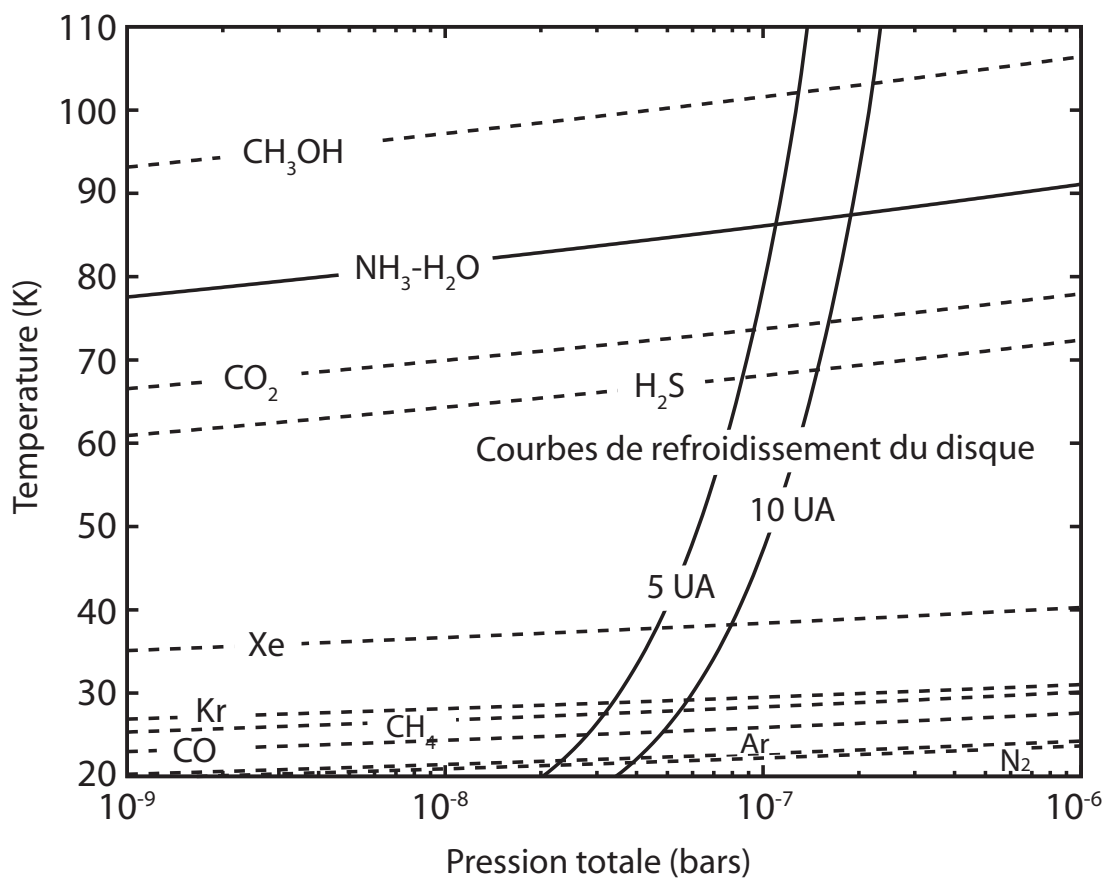
Les tableaux 1.3 et 1.4 donnent les enrichissements en volatils observés et calculés dans Jupiter et Saturne respectivement, avec une efficacité de 100 et 0%, et les mêmes rapports molaires dans la phase gazeuse initiale. Le modèle reproduit les enrichissements mesurés dans les atmosphères des deux planètes géantes avec une efficacité de clathration de 100 (a) et 0 (b) %, pour une abondance solaire de l'ensemble des éléments (y compris O).

**Tab. 1.3** - *Enrichissements en volatils observés dans Jupiter, et calculés pour  $\text{CO}:\text{CO}_2:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:10:2:1$ ,  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  et  $\text{H}_2\text{S}/\text{H}_2 = 0,5 \times (S/\text{H}_2)_\odot$ . (a) = abondance solaire de O avec une efficacité de clathration égale à 100% et (b) = abondance solaire de O mais avec une efficacité de clathration égale à 0 %.*

Espèces	Observations	(a)	(b)
C	$4,1 \pm 1$	3,1	3,1
N	$4,15 \pm 1,6$	3,0	3,7
S	$2,4 \pm 0,6$	2,6	2,8
Ar	$2,15 \pm 0,4$	2,0	2,4
Kr	$2 \pm 0,4$	2,6	3,2
Xe	$2 \pm 0,4$	4,3	3,9

La composition des glaces dépend des rapports molaires imposés dans la phase gazeuse et de l'efficacité du processus de clathration, qui nous est inconnue. Afin d'étudier l'influence de l'ensemble des rapports molaires qui peuvent exister, sur la masse de glace nécessaire pour reproduire les enrichissements en volatils des atmosphères de Jupiter et Saturne, on choisit dans un premier temps de tester la variation du rapport molaire  $\text{CO}_2:\text{CO}$  en phase gazeuse et d'étudier dans un second temps l'influence de l'efficacité de la clathration des volatils. Le rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  a une influence non négligeable sur la formation des glaces qui comprennent C. Les rapports molaires  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4$  et  $\text{N}_2:\text{NH}_3$  demeurent constants (70:2:1 et 1:1 respectivement) dans la phase gazeuse du modèle quelles que soient les variations du rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$  imposées.

**$\alpha$ - Glaces produites avec variation du rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$ .** On détermine la masse minimale de glace nécessaire pour reproduire les abondances molaires observées dans les atmosphères de Jupiter et Saturne en fonction du rapport  $\text{CO}_2:\text{CO}$ . Ce



**Fig. 1.6** - Figure identique à la figure 1.3, mais avec 0% d'efficacité de clathration des volatils. Seule les condensats purs et les hydrates sont formés dans la nébuleuse Solaire.

1.4 APPLICATION DU MODÈLE DE FORMATION DES GLACES AUX OBJETS  
FORMÉS DANS LES SYSTÈMES SOLAIRES EXTERNES

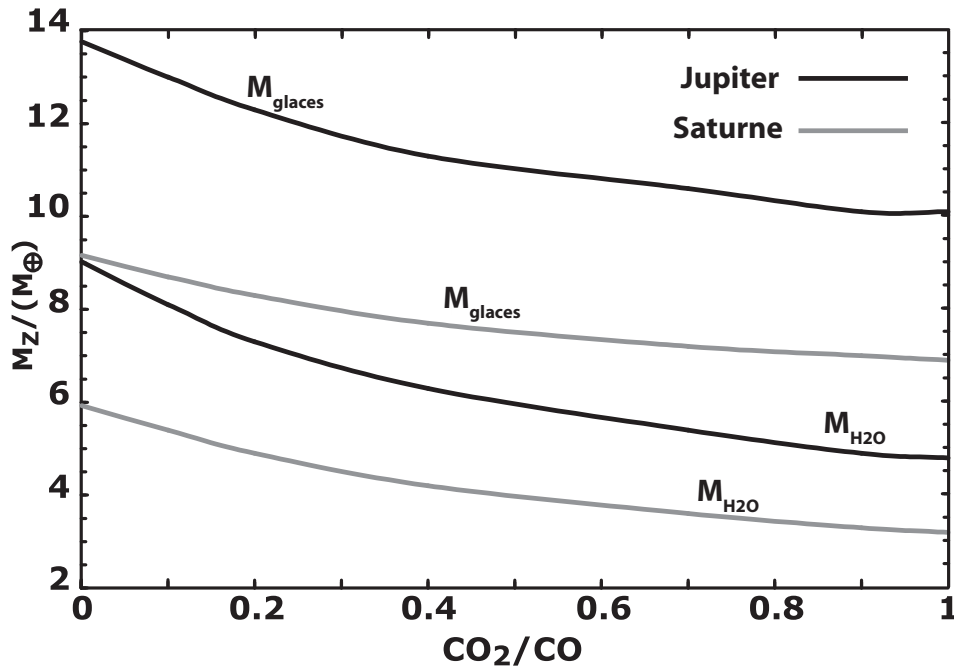
**Tab. 1.4** - *Enrichissements en volatils observés dans Saturne, et calculés pour  $CO:CO_2:CH_3OH:CH_4 = 70:10:2:1$ ,  $N_2:NH_3 = 1:1$  et  $H_2S/H_2 = 0,5 \times (S/H_2)_\odot$ . (a) = abondance solaire de O avec une efficacité de clathration de 100% et (b) = abondance solaire de O mais avec une efficacité de clathration de 0 %.*

Espèces	Observations	(a)	(b)
C	$8,8 \pm 1,7$	7,1	7,1
N		7,0	8,5
S		5,6	6,3
Ar		4,7	5,7
Kr		5,95	7,2
Xe		9,5	8,8

dernier varie dans l'intervalle [0–1] qui correspond aux valeurs extrêmes mesurées dans la phase solide et gazeuse de l'ISM (Ehrenfreund & Schutte, 2000; Gibb et al., 2004). Pour une efficacité de clathration égale à 100%, la figure 1.7 donne les masses minimales de l'ensemble des glaces (y compris  $H_2O$ ) et la masse minimale de la glace d'  $H_2O$  (uniquement). Ces masses permettent de reproduire les abondances en volatils mesurées dans chacune des atmosphères des planètes Jupiter et Saturne, en fonction du rapport  $CO_2:CO$  imposé dans la phase gazeuse de la nébuleuse protoplanétaire.

La masse de glace nécessaire pour reproduire les enrichissements en volatils de l'atmosphère de Jupiter est de 10 à 14  $M_\oplus$ . Cette quantité reste largement en deçà des estimations de Fortney & Hubbard (2003) et Guillot (2005) sur la masse d'éléments lourds dans l'atmosphère de cette planète. Toutefois, une fraction des éléments réfractaires participe à la formation de l'atmosphère des planètes géantes (Alibert et al., 2005b; Alibert & Mousis, 2007). Le modèle que nous utilisons ne donne que les contributions en volatils provenant de la phase gazeuse du disque protoplanétaire. Par conséquent, on ne connaît pas la quantité de roches impliquée dans la formation de ces planètes et qui aurait pu participer à l'élaboration des atmosphères. Néanmoins, pour obtenir une masse totale de 29 à 42  $M_\oplus$  pour la planète Jupiter, on peut supposer que les éléments réfractaires participent à au moins approximativement 50% de la masse de l'atmosphère.

Pour Saturne, la masse de glace est comprise entre 6,7 et 9,5  $M_\oplus$ . La masse de glace déterminée pour reproduire les enrichissements en volatils de l'atmosphère de Saturne reste dans l'intervalle de valeur donné par Fortney & Hubbard (2003) et Guillot (2005) (soit 0–10 $M_\oplus$ ), quel que soit le rapport molaire  $CO_2:CO$ . Cela implique que la masse de roche qui participe à la masse totale d'éléments lourds



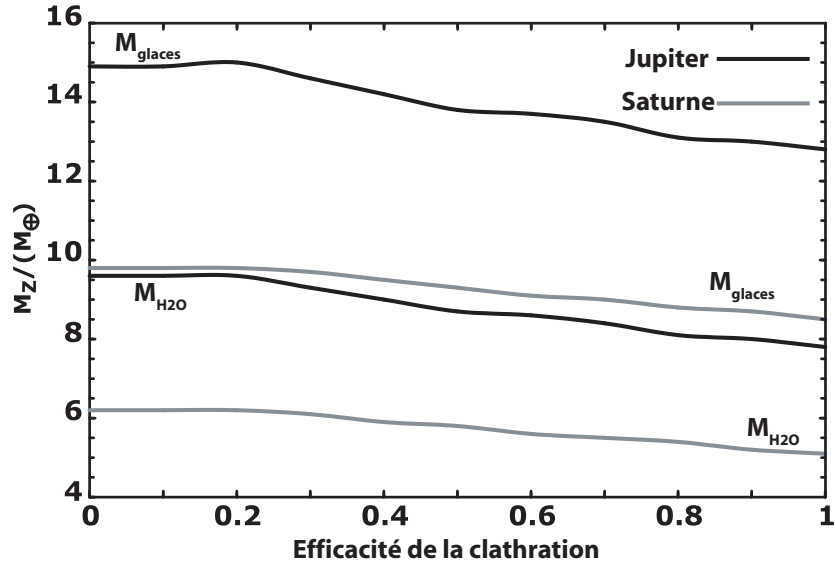
**Fig. 1.7** - Masses minimales des glaces et de H<sub>2</sub>O dans les enveloppes de Jupiter et Saturne nécessaires pour reproduire les abondances des volatils mesurés dans chacune des atmosphères en fonction du rapport CO<sub>2</sub>:CO imposé dans la phase gazeuse de la nébuleuse solaire.

dans l'atmosphère serait inférieure à environ 3  $M_{\oplus}$ .

La figure 1.7 donne également la masse de glace d'H<sub>2</sub>O que contiennent les atmosphères de Jupiter et Saturne. Ainsi, l'atmosphère de Jupiter contient entre 5 et 9  $M_{\oplus}$  de glace d'eau tandis que celle de Saturne en contient entre 3 et 6  $M_{\oplus}$  pour une variation du rapport de CO<sub>2</sub>:CO comprise entre 0 et 1.

**$\beta$ - Glaces produites avec une variation de l'efficacité de la clathration.** On fixe maintenant le rapport CO:CO<sub>2</sub> à 70:10. L'efficacité de la clathration dans la nébuleuse est inconnue et on recherche alors quelle peut être son influence sur la composition et la masse de glace nécessaire pour reproduire les enrichissements en volatils (par rapport à la valeur solaire) observés dans les atmosphères de Jupiter et Saturne. La figure 1.8 donne les masses minimales de l'ensemble des glaces (y compris H<sub>2</sub>O) et la masse minimale d'H<sub>2</sub>O nécessaires pour reproduire les enrichissements en volatils (par rapport à la valeur solaire) mesurés dans les atmosphères des deux planètes, en fonction de l'efficacité de la clathration des volatils par la glace d'H<sub>2</sub>O disponible dans leur zone de formation (5 et 10 UA).

La masse de glace est comprise entre 13 et 15  $M_{\oplus}$  pour Jupiter et entre 8,5 et 10  $M_{\oplus}$  pour Saturne. Ces masses restent respectivement sous et dans les intervalles



**Fig. 1.8** - *Masses minimales de l'ensemble des glaces et de  $H_2O$  uniquement dans les atmosphères de Jupiter et Saturne nécessaires pour reproduire les abondances des volatils mesurées dans chacune des atmosphères, en fonction de l'efficacité de la clathration des volatils par la glace d'eau cristalline disponible dans la zone de formation des deux planètes géantes.*

de valeur donnés par Fortney & Hubbard (2003) et Guillot (2005) (soit 29–42  $M_{\oplus}$  pour Jupiter et 0–10  $M_{\oplus}$  pour Saturne), quelle que soit l'efficacité de la clathration dans le disque protoplanétaire. La masse de glace d' $H_2O$  correspondante est égale à 8–9,5  $M_{\oplus}$  pour Jupiter et 5–6  $M_{\oplus}$  pour Saturne, avec une efficacité de clathration des volatils allant de 0 à 100%.

**Conclusion:** Le modèle de formation des glaces permet de donner une estimation de la masse de glace (et implicitement celle du noyau) nécessaire pour reproduire les enrichissements en volatils observés dans les atmosphères des deux planètes géantes. Les résultats montrent que, quelle que soit l'efficacité de la clathration et le rapport  $CO_2:CO$  dans la phase gazeuse de la nébuleuse protoplanétaire, les masses de glaces entrent dans les intervalles de valeurs prédits pour les éléments lourds par Fortney & Hubbard (2003) et Guillot (2005) pour Saturne et en deçà pour Jupiter. Le processus de clathration ne semble donc pas être un processus physico-chimique nécessaire pour reproduire les enrichissements observés dans les atmosphères des planètes géantes.

## B- Origine de Titan et de son atmosphère

L'origine de Titan et de son atmosphère dominée par  $N_2$  et  $CH_4$  (Owen, 1982; Niemann et al., 2005) demeure incertaine. La non détection des gaz rares  $^{38}Ar$ , Kr et Xe lors de l'exploration de Huygens (Niemann et al., 2005), pourtant présents dans l'atmosphère de Jupiter et probablement dans celle de Saturne, ainsi que le faible rapport  $CO:CH_4$  (de l'ordre de  $10^{-3}$ ) dans l'atmosphère de Titan (Lopez-Valverde et al., 2005), alors que le CO devrait être plus abondant que le  $CH_4$  dans la nébuleuse primitive (Prinn et al., 1981; Johnson et al., 2005), placent une forte contrainte sur l'origine du satellite ou sur son évolution à long terme.

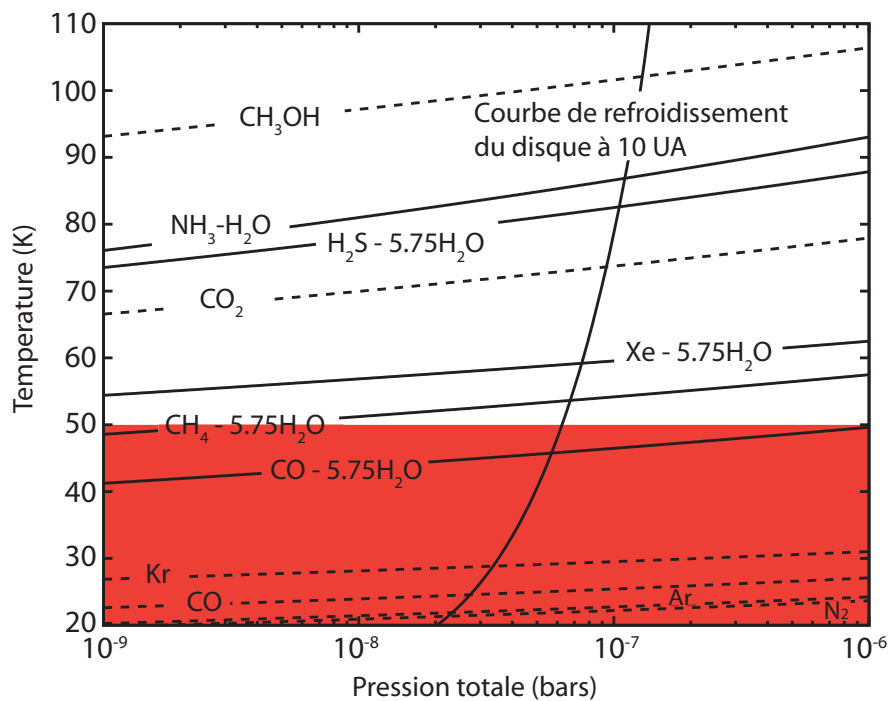
Des hypothèses sur la formation de  $N_2$  par des réactions de photolyse ou de choc chimique avant la formation du satellite ont été proposés pour expliquer son abondance dans l'atmosphère (Atreya et al., 1978; McKay et al., 1988). De même, la valeur du rapport D:H dans le  $CH_4$ , plus grand que la valeur protosolaire, résulterait de photochimie atmosphérique (Lunine et al., 1999; Cordier et al., 2008).

A partir du modèle de formation des glaces décrit en section 1.2, il est possible de présenter un scénario de formation des glaces qui serait à l'origine de la composition physico-chimique de l'atmosphère de Titan: les glaces, produites dans le disque externe de la nébuleuse solaire et à l'origine de la formation de Titan, pourraient avoir été partiellement appauvries durant leurs migrations à l'intérieur de la subnébuleuse de Saturne.

En conservant les mêmes hypothèses (abondance solaire de l'oxygène dans la phase gazeuse), la figure 1.9 montre que les glaces formées dans la partie externe de la nébuleuse primitive sont composées d'un mélange de clathrates, d'hydrates et de condensats purs qui sont, excepté pour le  $CO_2$  et le  $CH_3OH$ , produits à des températures comprises entre 20 et 50 K. Une fois formées, les différentes glaces sont agglomérées et incorporées dans les planétésimaux qui grossissent.

Jusqu'à présent, nous avons toujours considéré que le processus de clathration piégeait une unique espèce de volatils. En réalité, la formation d'une structure clathrate autour des molécules du gaz  $X$  considéré peut piéger simultanément d'autres espèces de volatils  $i$ . Suivant la méthode décrite par Thomas et al. (2007) nous avons déterminé les abondances relatives des molécules  $X$  ( $H_2S$ , Xe et  $CH_4$ ; voir Fig. 1.9) piégées sous forme de clathrates dans la nébuleuse solaire. La table 1.5 donne les fractions des abondances des volatils  $i$  ( $CO_2$ , Xe,  $CH_4$ , CO, Kr, Ar et  $N_2$ ) piégés dans la structure clathrate par rapport à leur abondance gazeuse au moment du piégeage des espèces  $X$  ( $H_2S$ , Xe et  $CH_4$ ). L'abondance du volatil  $i$  dans les clathrates est définie comme le rapport molaire de  $i$  sur  $X$  dans le clathrate  $X-5,75H_2O$ . Les calculs sont effectués aux conditions de température et de pression données par l'intersection de la courbe de refroidissement du disque à 10 UA et des courbes de stabilité des clathrates considérés (voir Fig. 1.9). Dans les calculs, tout volatil déjà piégé ou

1.4 APPLICATION DU MODÈLE DE FORMATION DES GLACES AUX OBJETS FORMÉS DANS LES SYSTÈMES SOLAIRES EXTERNES



**Fig. 1.9** - Courbes de stabilité de l'hydrate ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ), des clathrates ( $\text{X-5.75H}_2\text{O}$  (lignes pleines) et des condensats purs (lignes pointillées) et de la courbe de refroidissement de la nébuleuse solaire à la distance héliocentrique de 10 UA. La zone grisée caractérise les différentes glaces chauffées jusqu'à 50K durant leur migration et accréation dans la subnébuleuse de Saturne pour former Titan.



condensé à température plus élevée que celle du clathrate considéré est exclu de la composition de la phase gazeuse coexistante. Les résultats montrent que CO, N<sub>2</sub> et Ar sont peu piégés par les clathrates hydrates composés majoritairement de CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>S et Xe.

**Tab. 1.5** - *Abondance du volatil  $i$  dans les clathrates par rapport à l'abondance initiale de ce même volatil  $i$  dans la nébuleuse.*

Espèces	clathrate H <sub>2</sub> S	clathrate Xe	clathrate CH <sub>4</sub>
CO <sub>2</sub>	$1,6 \times 10^{-6}$	–	–
Xe	0,1424	–	–
CH <sub>4</sub>	$2,9 \times 10^{-5}$	$1,1 \times 10^{-5}$	–
CO	$1,5 \times 10^{-8}$	$1,2 \times 10^{-10}$	$2,3 \times 10^{-5}$
Kr	$1,3 \times 10^{-5}$	$8,5 \times 10^{-7}$	1,17
Ar	$1,6 \times 10^{-8}$	$6,4 \times 10^{-11}$	$2,3 \times 10^{-5}$
N <sub>2</sub>	$1,6. \times 10^{-7}$	$8,3 \times 10^{-9}$	$3,0 \times 10^{-4}$

Une fois intégrés dans la subnébuleuse, les grains réfractaires et glacés, originaires de la zone de formation de Saturne, pourraient avoir été altérés par des conditions de température et de pression de gaz suffisamment élevées pour générer une perte de volatils durant leur migration (Canup et al., 2006; Alibert et al., 2007).

Si les planétésimaux ont été finalement accrétés par Titan (dont la température interne est d'environ 50 K) durant leur migration dans la subnébuleuse, ils ont alors certainement perdu la plupart du CO, Ar, et N<sub>2</sub> primordial qu'ils contenaient <sup>1</sup> (voir Fig. 1.9). Dans ce scénario, une température de sublimation des planétésimaux plus élevée est à exclure puisque celle-ci provoquerait la dissociation du clathrate de CH<sub>4</sub> dans les grains de glaces accrétés par Titan, un résultat qui serait en conflit avec sa très grande abondance dans l'atmosphère du Satellite. D'un autre côté, puisque Kr et Xe sont incorporés à plus haute température que 50 K dans les clathrates produits dans la nébuleuse, ils ne peuvent pas être éliminés via le mécanisme d'appauvrissement partiel uniquement. Le déficit en Kr et Xe observé dans l'atmosphère de Titan pourrait alors résulter de divers processus de séquestration qui peuvent avoir eu lieu avant ou après la formation du satellite. La présence de H<sub>3</sub><sup>+</sup> dans la zone de formation de Saturne pourrait induire le piégeage du Xe et du Kr sous la forme stable des complexes KrH<sub>3</sub><sup>+</sup> ou XeH<sub>3</sub><sup>+</sup> (Pauzat et al., 2007; Mousis et al., 2008). Une fois formés, ces complexes resteraient stables, même à basse température, et leur présence dans la phase gazeuse appauvrirait le matériel délivré à Titan en Kr et

---

<sup>1</sup>L'azote atmosphérique de Titan est présumé être le produit de la photolyse de l'ammoniac ou de la chimie de choc (Altreya et al., 1978; McKay et al., 1988)

Xe (Mousis et al., 2008). Il a été montré également que si une grande quantité de Kr et de Xe était initialement présente dans l’atmosphère de Titan, elle aurait dû être piégée efficacement, soit comme clathrate par la glace d’H<sub>2</sub>O cristalline située sur la surface du satellite (Thomas et al., 2007 et 2008), soit éliminée par la brume atmosphérique (Jacovi et al., 2008).

Parce que la température et la pression augmentent à l’intérieur de la subnébuleuse à mesure qu’on se rapproche de Saturne (Alibert et al., 2007), les planétésimaux accrétés par les satellites réguliers situés à l’intérieur de l’orbite de Titan ont certainement subi le même processus d’appauvrissement durant leur migration. Tout comme Titan, ils doivent être appauvris en CO et N<sub>2</sub> primordiaux.

Finalement, quels que soient les rapports molaires CO:CO<sub>2</sub>:CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>4</sub> et N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> adoptés initialement dans la phase gazeuse de la nébuleuse solaire, les courbes de stabilité des glaces de CO, de N<sub>2</sub> et de Ar produites dans cet environnement restent toujours à des températures inférieures à celle du clathrate de CH<sub>4</sub>. Indépendamment de la composition de la phase gazeuse, les planétésimaux qui migrent à l’intérieur de la subnébuleuse de Saturne sont donc toujours appauvris en CO, N<sub>2</sub> et Ar puisqu’ils se réchauffent progressivement. De plus, ce processus de formation de Titan n’est pas influencé par la possible migration de Saturne (Alibert et al., 2005) durant sa formation dans la nébuleuse puisque la composition des planétésimaux reste identique quelle que soit sa distance de formation dans le disque, à condition qu’il y ait eu une phase gazeuse homogène dans la nébuleuse solaire (voir section 1.4.1).

## 1.5 Conclusions

Nous avons montré que l’origine géographique distincte des noyaux cométaires pouvait donner lieu à une origine physico-chimique différente de ces objets. Les planétésimaux formés dans la région transneptunienne pourraient être composés de glaces amorphes formées dans le milieu interstellaire et d’autres glaces correspondant aux différents volatils présents dans la phase gazeuse de la nébuleuse interstellaire. La glace d’H<sub>2</sub>O amorphe que contiendraient ces planétésimaux pourrait également renfermer des volatils piégés au moment de sa formation. Suivant l’abondance des molécules, les planétésimaux formés dans le disque protoplanétaire pourraient être constitués de glaces cristallines qui peuvent prendre la forme de condensats purs, d’hydrates et de clathrates hydrates (dépendent aussi de l’efficacité du processus de clathration).

Les objets (planètes extrasolaires de faible masse et glacées, planètes géantes, satellites, comètes) formés dans la région externe des disques protoplanétaires, à partir de planétésimaux constitués de glaces cristallines, sont d’une grande diversité physico-chimique, entrevue à partir du modèle de formation des glaces. Cette

diversité dépend essentiellement de la composition chimique initiale de la phase gazeuse. Ainsi, le modèle de formation des glaces a mis en évidence la possibilité de former des “planètes océan” froides, chaudes ou bien des “planètes carbonées” à partir de planétésimaux composés quasi exclusivement de volatils carbonés ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}$  et  $\text{CO}_2$ ). La composition physico-chimique des planétésimaux pourrait ainsi avoir une incidence non négligeable sur la structure interne et l'évolution thermique des planètes extrasolaires formées. L'application du modèle de formation des glaces à l'étude spécifique de l'enrichissement en volatils des atmosphères des planètes Jupiter et Saturne, a montré que le processus de clathration des volatils était un processus physico-chimique satisfaisant mais pas nécessaire pour expliquer ces enrichissements et satisfaire la masse critique en éléments lourds de ces planètes. Ainsi, quelle que soit l'efficacité du processus de clathration des volatils par la glace d' $\text{H}_2\text{O}$  et les abondances molaires dans la phase gazeuse du disque protoplanétaire, moins de 15 et 10  $M_\oplus$  sont nécessaires pour reproduire les enrichissements calculés dans Jupiter et Saturne respectivement. Enfin, la composition atmosphérique de Titan peut être expliquée par un réchauffement des glaces produites dans le disque protoplanétaire de la subnébuleuse de Saturne et incorporées dans le satellite lors de sa formation, et divers processus de séquestration du Kr et du Xe, et cela quelle que soit la composition physico-chimique de la phase gazeuse initiale du disque.

Les processus de formation des glaces étudiés dans ce chapitre en fonction de la composition physico-chimique initiale de la phase gazeuse de la nébuleuse interstellaire et du disque protoplanétaire, apportent une contrainte sur la composition des glaces contenues dans les planétésimaux et permettent d'élaborer une structure physico-chimique d'un modèle de planétésimal ou de noyau cométaire que je développe au chapitre suivant.

# Chapitre 2

## Le Modèle Physique de Noyau Cométaire

### Contents

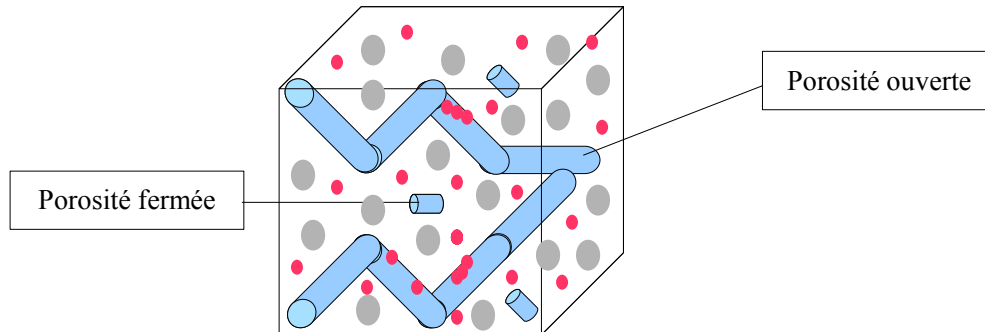
---

<b>2.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>33</b>
<b>2.2</b>	<b>Conservation de l'énergie</b>	<b>36</b>
2.2.1	La Capacité Calorifique volumique du noyau $\rho.c$	37
2.2.2	Terme de divergence du flux thermique $K.\frac{\partial T}{\partial r}$	38
2.2.3	Termes de Transfert de Chaleur $Y$	45
2.2.4	Bilan énergétique en Surface	49
<b>2.3</b>	<b>Conservation de la Masse</b>	<b>52</b>
2.3.1	Variation temporelle de la quantité de gaz dans les pores $\frac{\partial \rho_g^o}{\partial t}$	52
2.3.2	Terme de divergence du flux de gaz $G_x.\frac{\partial P_x}{\partial r}$	53
2.3.3	Termes d'apport ou de perte de matière $Q_g$	55
<b>2.4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>56</b>

---

### 2.1 Introduction

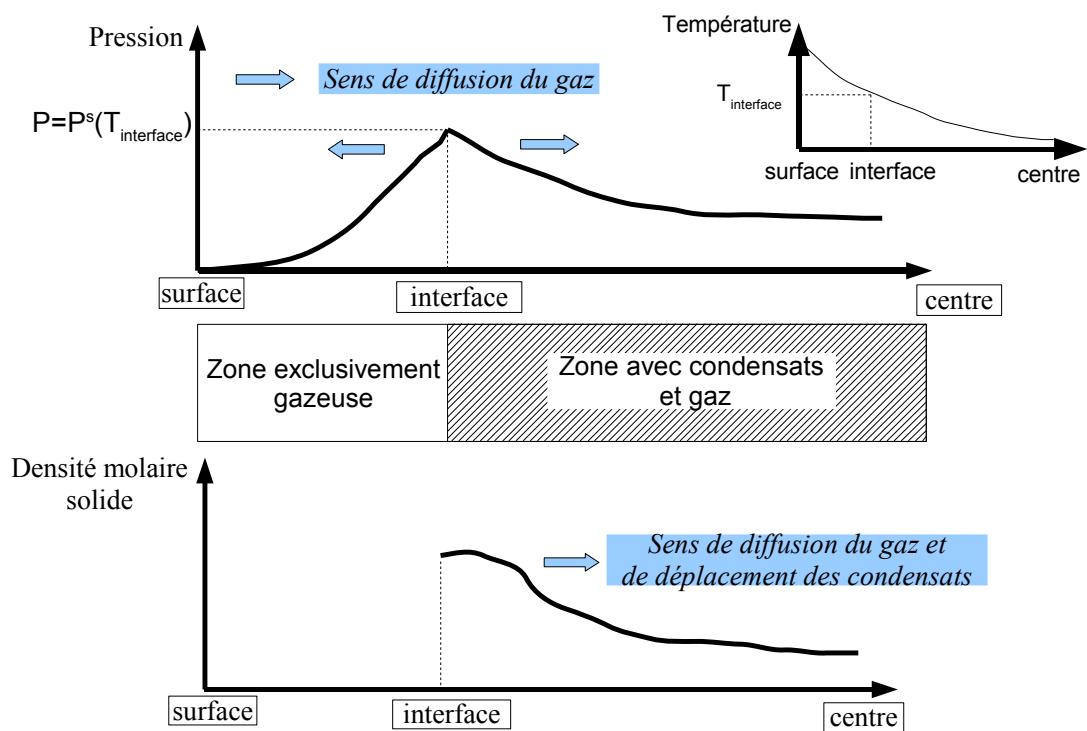
Les noyaux cométaires, qui, en première approximation, peuvent être considérés comme des planétésimaux, sont des objets poreux composés d'éléments réfractaires et d'un mélange de différentes glaces (Voir Chapitre 1). La porosité de ces objets est avérée par les observations et survols des sondes spatiales et peut être comprise entre 30 et 80% (Coradini et al., 2008). Ce mélange poreux de composants réfractaires et volatils peut être modélisé par une matrice de glace et de poussière parcourue par un réseau de pores interconnectés de manière à former un système ouvert sur l'extérieur (voir Fig. 2.1). Ce mélange de matériaux réfractaires et de glaces peut produire,



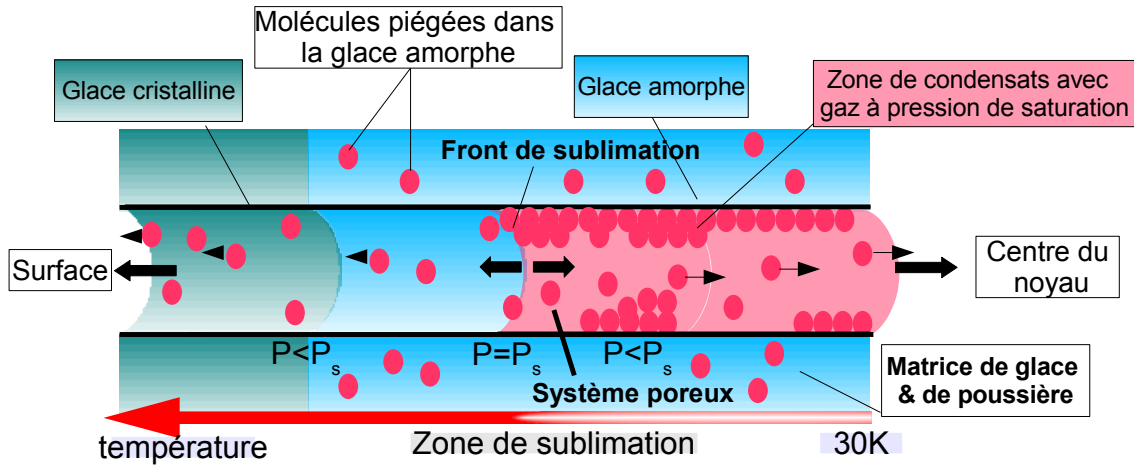
**Fig. 2.1** - Schéma représentant la matrice poreuse composée de glace d' $H_2O$  et de grains de poussière incrustés à l'intérieur; l'ensemble est parcouru par un réseau de pores ouvert avec des condensats de glace de différents volatils sur les parois.

lorsqu'il est exposé à une source de chaleur, de multiples changements de phase (suivant la température de sublimation des différents composants), et engendrer la diffusion de la phase gazeuse à travers le réseau de pores vers la surface du noyau. Nous présentons ici un modèle simplifié de noyau cométaire qui ne prend en compte que les structures amorphe et cristalline (sous forme de condensat pur) de la glace d' $H_2O$  et les éléments volatils. Les seuls changements de phase et sources de chaleur considérés dans ce modèle sont ceux de sublimation/condensation des volatils et de cristallisation de la glace d' $H_2O$  ainsi que l'énergie solaire.

La principale source de chaleur qu'est le rayonnement solaire diffuse de la surface vers l'intérieur du noyau et crée alors un profil thermique qui décroît en direction du centre. Puisque chaque espèce chimique  $x$  sublime suivant sa pression d'équilibre, une différenciation physico-chimique du noyau va s'opérer à partir de la surface. Contrairement au processus de formation des glaces dans le système solaire (voir Chapitre 1), les éléments les plus volatils vont sublimer en premier. Enfin, lorsque la température de la matrice devient suffisamment élevée, la glace d' $H_2O$  sublime et laisse sur place les composants les plus réfractaires tels que les grains de poussières qui peuvent former une croûte en surface si le flux de gaz le permet. Pour chaque espèce volatile, la sublimation de la phase condensée dans le réseau poreux de la matrice de glace d' $H_2O$  crée une interface dite de "sublimation". De part et d'autre de cette interface, la phase gazeuse de l'espèce chimique correspondante va diffuser, vers la surface pour alimenter la Coma, ou vers le centre du noyau où le gaz, en rencontrant des températures plus basses, va condenser sur les parois des pores et créer de cette manière un bourrelet de masse derrière l'interface de sublimation (voir Fig. 2.2). Suivant sa structure initiale dans le noyau cométaire, la glace peut changer de phase en fonction de la température et libérer les molécules qui y sont piégées.



**Fig. 2.2** - Schéma simplifié de la différenciation physico-chimique du noyau cométaire liée à la sublimation des volatils présents dans les pores.



**Fig. 2.3** - Représentation des différenciations structurelle de la glace d' $H_2O$  et physico-chimique liée à la sublimation des volatils dans le noyau cométaire.

Lorsque la température du milieu est de 110-130 K, la structure de glace, si elle est amorphe à l'origine, devient cristalline et relâche alors les volatils piégés à l'intérieur (voir Fig. 2.3). On obtient alors, en plus de la différenciation physico-chimique liée à la sublimation des différentes espèces chimiques  $x$ , une différenciation liée à la structure de la glace elle-même.

L'ensemble des processus physico-chimiques discutés est décrit par les équations de conservation de l'énergie et de masse qui sont détaillées dans les sections 2.2 et 2.3 ci-après et qui permettent de fournir les variables de température  $T$  et de pression  $P$  du système.

## 2.2 Conservation de l'énergie

Le transfert de chaleur dans les milieux poreux s'effectue selon divers processus:

- la conduction thermique à travers l'ensemble du milieu poreux sous l'effet d'un gradient de température
- l'advection des fluides qui permet le transfert de l'énergie thermique qu'ils

contiennent au milieu environnant

- le rayonnement thermique des différents composants
- les changements de phases des différents éléments chimiques

L'équation de conservation de l'énergie permet de décrire la capacité qu'a la matrice poreuse à emmagasiner ou à restituer de la chaleur au milieu environnant à travers les différents processus de transfert thermique décrits ci-dessus. Pour une couche située à l'intérieur du noyau, l'équation de conservation de l'énergie s'écrit comme suit:

$$\rho \cdot c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (K \cdot \frac{\partial T}{\partial r}) + Y \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}) \quad (2.1)$$

avec  $\rho$  la masse volumique globale de la matrice,  $c$  sa capacité calorifique massique,  $K$  sa conductivité thermique,  $T$  sa température,  $t$  le temps et  $r$  la variable spatiale.  $K \frac{\partial T}{\partial r}$  et  $Y$  représentent respectivement le flux thermique à travers la matrice poreuse et l'énergie échangée par unité de temps et par unité de volume durant les processus de changement de phase des différents composants du milieu.

Pour aider à la lecture du présent chapitre, une liste des différents symboles utilisés est donnée en Annexe J.

Chaque terme de l'équation 2.1 est explicité de gauche à droite dans les sections 2.2.1, 2.2.2 et 2.2.3 respectivement.

### 2.2.1 La Capacité Calorifique volumique du noyau $\rho \cdot c$

La capacité calorifique d'un mélange de glaces (H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>...) et de grains de poussières peut être déterminée à partir de celle de chacun des composants de la matrice. Ainsi,  $\rho c$ , la capacité thermique volumique globale de la matrice poreuse, est égale à la somme des masses par unité de volume  $\rho$  des différents composants du noyau multipliés par leur capacité calorifique respective:

$$\rho \cdot c = \rho_s \cdot c_s + \rho_g \cdot c_g \quad (2.2)$$

avec  $\rho$  la masse volumique et  $c$  la chaleur spécifique de l'ensemble des composants solides (indice  $s$ ) ou de l'ensemble des espèces à l'état gazeux (indice  $g$ ).

La capacité thermique des espèces chimiques en phase gazeuse étant négligeable devant celle de la phase solide, on peut approximer la capacité calorifique globale de la matrice à celle de cette dernière phase:



$$\rho.c = \rho_s.c_s \quad (2.3)$$

Les données expérimentales sur la capacité calorifique des espèces pures, lorsqu'elles existent, sont limitées quant au domaine de validité en température. Lorsque ces données existent à très basse température, la capacité calorifique de chaque espèce pure  $x$  sera utilisée pour déterminer la capacité calorifique globale de la matrice. Dans le cas contraire, nous utiliserons la capacité calorifique de  $H_2O$ , le constituant majoritaire de la matrice solide, en lieu et place de celle du volatil  $x$ . La capacité calorifique globale de la matrice solide devient alors:

$$\rho.c = \sum_l \rho_l.c_l \quad (J.m^{-3}.K^{-1}) \quad (2.4)$$

avec  $\rho_l$  et  $c_l$  respectivement la masse volumique et la capacité thermique du composant solide  $l$ .

### 2.2.2 Terme de divergence du flux thermique $K.\frac{\partial T}{\partial r}$

Le terme  $K.\frac{\partial T}{\partial r}$  représente la quantité de chaleur qui traverse la matrice poreuse solide uniquement par conduction thermique, celle-ci étant le mécanisme de transport principal de la chaleur dans les milieux solides. Elle correspond, à l'échelle atomique, à la propagation de l'agitation thermique des particules des zones plus chaudes aux zones plus froides.

Si on considère que la chaleur se transmet essentiellement par conduction thermique à l'intérieur de la matière (on néglige alors le rayonnement thermique de la matière à l'intérieur des pores et les variations de chaleur liées aux changements de phase des différents éléments chimiques), la porosité du milieu traversé par le flux de chaleur a alors une incidence sur la quantité d'énergie qui est transférée à l'intérieur du noyau. Les points de contact entre les différents composants de la matrice diminuant avec l'augmentation de la porosité, la chaleur a d'autant plus de mal à diffuser dans le matériau. Les effets de la porosité sur la conductivité thermique dépendent donc du nombre et de la nature de ces points de contact. Ainsi, pour un même matériau, cette conductivité thermique décroît avec l'augmentation de la porosité.

Ne pouvant faire abstraction de la porosité du milieu et donc de sa "géométrie", nous avons choisi de prendre une expression de la conductivité thermique  $K$  de la matrice poreuse qui est déterminée à partir de considérations géométriques (Russel, 1935):

$$K = \frac{K_s \cdot [\psi^{2/3} \cdot K_p + (1 - \psi^{2/3}) \cdot K_s]}{K_s \cdot [\psi - \psi^{2/3} + 1] - K_p \cdot \psi^{2/3} \cdot [\psi^{1/3} - 1]} \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}) \quad (2.5)$$

où  $K_s$  est la conductivité thermique de la matrice solide,  $K_p$  le coefficient de conduction de chaleur à travers les pores et  $\psi$  la porosité du milieu.

Cette expression a l'avantage de donner une bonne estimation de la conductivité thermique d'un milieu poreux pour une porosité moyenne (Priolnik et al., 2004; Huebner et al., 2006) mais elle ne prend pas en compte les effets très importants de la géométrie de surface de contact entre les grains.

Pour pallier ce problème, il est possible de considérer que la matrice solide est constituée d'un assemblage d'éléments conducteurs disposés en parallèle avec une surface de contact restreinte entre les différents composants (Priolnik et al., 2004; Huebner et al., 2006). On introduit alors un paramètre adimensionnel dit "facteur de Hertz" qui corrige la surface effective de la matrice avec le flux de chaleur; il représente la surface de contact effective entre deux grains dans un milieu poreux et réduit donc la conductivité thermique; si on représente 2 sphères accolées, de rayon  $R$  avec un rayon de surface de contact  $r_c$ , le facteur de Hertz s'écrit  $h \propto r_c^2/R^2$ , l'intervalle de valeur à l'intérieur duquel  $h$  peut varier étant de  $[10^{-4}-10^{-1}]$ . On obtient alors l'expression de la conductivité thermique suivante:

$$K = h \left( \sum_l \frac{\rho_l}{\rho_l^c} k_l \right) + K_p \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}) \quad (2.6)$$

où  $k_l$  est la conductivité thermique du composant solide  $l$ .

Cependant, devant le manque d'informations au sujet de la structure du matériau cométaire, l'équation de Russel (1935, Eq. 2.5) semble être un bon compromis afin d'éviter l'introduction d'un paramètre libre supplémentaire et de surcroît, de valeur inconnue, dont l'adoption serait difficilement justifiable. Nous considérerons par la suite que l'expression de Russel constitue une valeur limite supérieure de la conductivité thermique effective d'un solide poreux.

Comme indiqué en Introduction de cette section, la porosité  $\psi$  considérée dans l'expression de Russel (1935) est une porosité de type ouverte. Cette porosité est égale au rapport du volume total  $V_{vide}$  occupé par les pores interconnectés sur le volume total  $V_{total}$  de la couche:

$$\psi = \frac{V_{vide}}{V_{total}} = 1 - \frac{V_{solide}}{V_{total}} \quad (2.7)$$

où  $V_{solide}$  est le volume occupé par l'ensemble des composants solides et  $V_{total}$  est

donc exprimé comme suit:

$$V_{total} = V_{dust} + V_{ice} + V_{vide}$$

avec  $V_{dust}$  le volume occupé par la poussière dans le noyau et  $V_{ice}$  celui occupé par la glace.

La porosité peut être exprimée également en fonction des masses volumiques des différents composants:

$$\psi = 1 - \frac{\rho_{dust}}{\rho_{dust}^c} - \frac{\rho_{ice}}{\rho_{ice}^c} \quad (2.8)$$

où  $\rho_{dust}$  est la masse de poussière par unité de volume dans le noyau,  $\rho_{dust}^c$  la masse volumique compacte des grains de poussière.  $\rho_{ice}$  est la masse de glace par unité de volume dans le noyau et  $\rho_{ice}^c$  est la masse volumique compacte de la glace. Leur rapport est exprimé comme suit:

$$\frac{\rho_{ice}}{\rho_{ice}^c} = \sum_{x=1} \frac{\rho_x}{\rho_x^c} \quad (2.9)$$

avec  $\rho_x$  la masse de glace de l'élément chimique  $x$  par unité de volume dans le noyau et  $\rho_x^c$  la masse volumique compacte de la glace de cet élément.

### A - Conductivité Thermique de la Matrice Solide $K_s$

La matrice solide est modélisée comme un mélange de conducteurs de différentes glaces et de grains de poussière disposés en parallèle. La conductivité thermique de la matrice solide s'exprime alors comme la somme des conductivités  $k_l$  des différents composants  $l$  du noyau, pondérée par la fraction volumique  $f_l$  occupée par chaque composant correspondant:

$$K_s = \frac{\sum_l f_l \cdot k_l}{\sum_l f_l} \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}) \quad (2.10)$$

Les fractions volumiques des différents composants  $l$  sont exprimées comme le rapport des volumes  $V_l$  qu'ils occupent sur le volume  $V_{solide}$  occupé par l'ensemble de ces composants solides:

$$f_l = \frac{V_l}{V_{solide}} = \frac{\rho_l}{(1 - \psi)\rho_l^c} \quad (2.11)$$

avec  $\rho_l = \frac{m_l}{V_{total}}$  la masse volumique du composant  $l$  dans la matrice et  $\rho_l^c = \frac{m_l}{V_l}$  sa masse volumique compacte.

L'expression de chaque terme  $f_l.k_l$  correspondant au composant  $l$  est explicitée ci-dessous.

**a - Expression du terme  $f_{H_2O}.k_{H_2O}$ :** La glace d'H<sub>2</sub>O peut avoir une structure amorphe ou cristalline. La transition de phase "glace amorphe – glace cristalline" étant une réaction qui prend du temps, la matrice peut temporairement contenir les deux types de structure de glace dans une même couche. A ces deux structures correspondent deux expressions de la conductivité thermique  $k_{H_2O}$  de la glace d'H<sub>2</sub>O: la première pour la glace amorphe  $k_{H_2O}^a$ , la seconde pour la glace cristalline  $k_{H_2O}^c$ .

En l'absence de données expérimentales et théoriques dans le domaine de la conductivité thermique des mélanges de glaces, comme pour le calcul de la conductivité de la matrice solide  $K_s$  (Eq. 2.10) pour le mélange des différents composants, le milieu est assimilé à un assemblage en parallèle d'éléments conducteurs amorphes et cristallins. L'expression de la conductivité thermique du mélange de glaces s'exprime alors comme la somme des conductivités thermiques des différentes structures existant dans une même couche pondérée par la fraction volumique occupée par chacune d'entre elles:

$$f_{H_2O}.k_{H_2O} = \frac{f_{H_2O}^a.k_{H_2O}^a + f_{H_2O}^c.k_{H_2O}^c}{f_{H_2O}^a + f_{H_2O}^c} \quad (J.s^{-1}.m^{-1}.K^{-1}) \quad (2.12)$$

avec  $f_{H_2O}^a$  et  $f_{H_2O}^c$  les fractions volumiques de la glace amorphe et cristalline respectivement et  $k_{ice}^a$  et  $k_{H_2O}^c$  les conductivités thermiques de la glace amorphe et cristalline respectivement.

L'expression de la **conductivité** de la **glace** lorsqu'elle a une structure **amorphe** a été déterminée à partir du modèle classique de phonon dans un solide par Klinger (1980). Elle dépend de sa masse volumique et de la température du milieu:

$$k_{H_2O}^a(i) = \frac{1}{4}.c_{H_2O}(T).\gamma.\lambda_p.\rho_{H_2O}^c \quad (J.s^{-1}.m^{-1}.K^{-1}) \quad (2.13)$$

avec  $c_{H_2O}(T)$  la capacité calorifique de la glace d'eau par unité de masse,  $\lambda_p$  et  $\gamma$  le libre parcours moyen des phonons et la vitesse du son dans la glace d'eau respectivement et  $\rho_{H_2O}^c$  la masse volumique de la glace d'eau amorphe compacte. Les valeurs des différents paramètres sont données dans le tableau ci-dessous.

$$\gamma = 2,5 \cdot 10^3 \text{ m.s}^{-1}$$

$$\lambda_p = 5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$\rho_c = 920 \text{ kg.m}^{-3}$$

En remplaçant les paramètres par leurs valeurs respectives dans l'équation (2.13), on obtient l'expression de la conductivité de la glace d'H<sub>2</sub>O amorphe:

$$k_{H_2O}^a(i) = 1,15 \cdot 10^{-3} \cdot c(T) = 8,6135 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1,035 \cdot 10^{-1} \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}) \quad (2.14)$$

L'expression déterminée par Klinger (1980) est discutée par Kouchi et al. (1992). Ceux-ci ont déterminé expérimentalement une conductivité thermique de la glace amorphe plus petite de quatre ordres de grandeurs à des températures plus basses que 125-135 K:

$$k_{H_2O}^a = 7,1 \cdot 10^{-7} \cdot T \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1})$$

Cette différence pourrait être due à une surface de contact entre les grains de glace beaucoup plus petite que leur surface réelle, même avec une faible porosité de la glace amorphe. Tancredi et al. (1994) ont adopté une valeur intermédiaire ( $7,1 \cdot 10^{-5} \cdot T \text{ J.s}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ) alléguant que la glace amorphe pourrait avoir été partiellement cristallisée par le chauffage radiogénique (Haruyama et al., 1993). Cependant, Andersson & Suga (1994) ont déterminé expérimentalement une conductivité de la glace amorphe, non poreuse et de faible densité, similaire à celle de Klinger ( $\approx 0,6 \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ) dans l'intervalle de température 70–135 K.

On adopte par la suite l'expression déterminée par Klinger, qui constitue une limite supérieure de la contribution de la glace compacte et amorphe à la conductivité globale de la matrice.

L'expression de la **conductivité** thermique de la **glace cristalline** a été déterminée expérimentalement par Klinger (1980). Celle-ci correspond à une glace entièrement cristalline de réseau cubique et ne dépend que de la température:

$$k_{H_2O}^c(i) = \frac{567}{T} \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1})$$

Il existe différentes structures de glace cristalline. Etant donné que la conductivité de la glace cubique est assez proche de celle de la glace hexagonale et afin de simplifier le modèle, on considère que ces deux conductivités sont similaires.

**b - Expression  $f_x.k_x$  des autres espèces chimiques condensées:** L'absence de données sur la conductivité thermique des différents éléments chimiques  $x$  sous forme amorphe comme cristalline, nous oblige à prendre la conductivité thermique de la glace d' $H_2O$  comme référence pour les différents volatils. L'expression de la conductivité de la phase solide de la matrice poreuse se réduit alors à:

$$K_s = \frac{\sum_x f_x \cdot k_{H_2O} + f_{dust} \cdot k_{dust}}{\sum_l f_l} \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}) \quad (2.15)$$

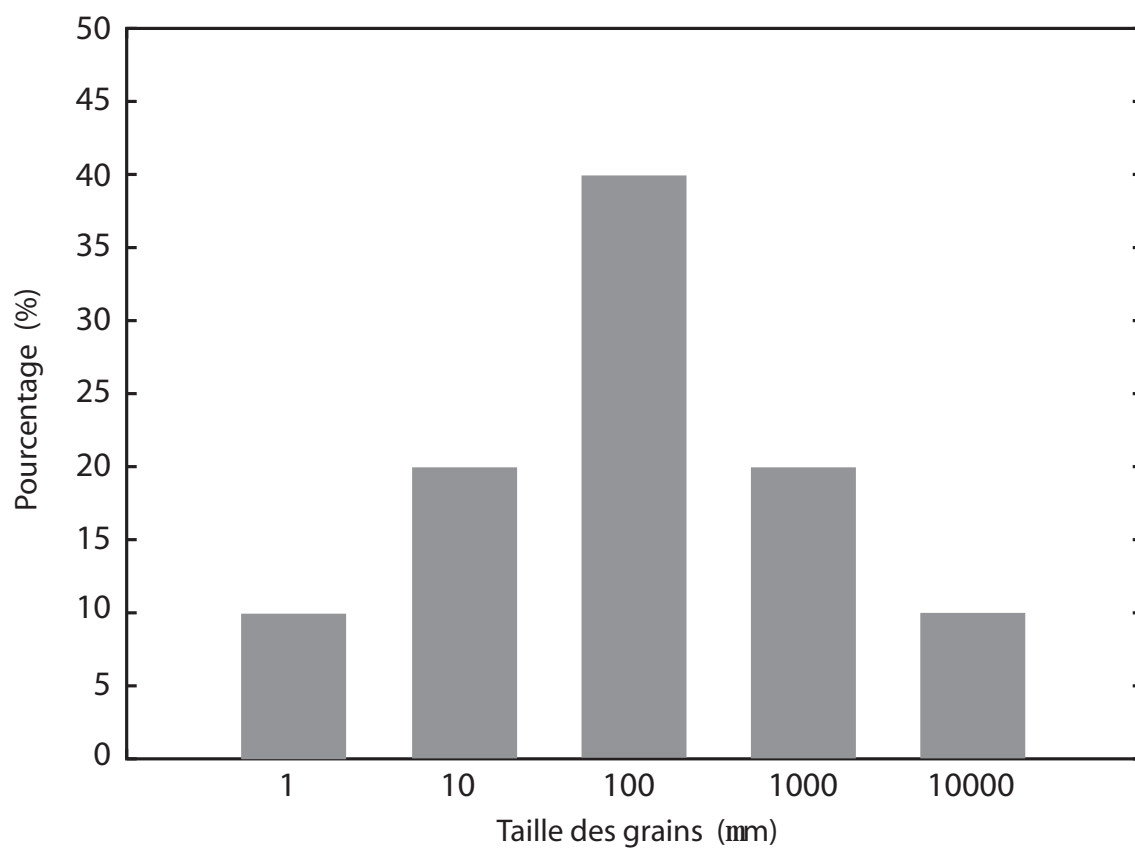
avec  $f_x$  et  $f_{dust}$  les fractions volumiques occupées respectivement par les différentes glaces  $x$  et par les grains de poussière, et  $K_{dust}$  la conductivité thermique des grains de poussière.

**c - Expression  $f_{dust} \cdot k_{dust}$  des grains de poussière:** La fraction volumique des grains de poussière est donnée par l'expression:

$$\begin{aligned} f_{dust} &= \frac{\rho_{dust}}{(1 - \psi) \cdot \rho_{dust}^c} \\ &= \frac{\sum_j N_j \cdot m_j}{(1 - \psi) \cdot \rho_{dust}^c} \end{aligned} \quad (2.16)$$

avec  $\rho_{dust}$  et  $\rho_{dust}^c$  respectivement la masse volumique de l'ensemble des grains de poussière dans la matrice et celle des grains compacts,  $N_j$  le nombre de grains de poussière de taille  $j$  par unité de volume et  $m_j$  leur masse.

La loi de distribution en taille des grains de poussière que nous avons choisie est celle donnée par Espinasse et al. (1993) et utilisée par Orosei et al. (1995), (1999) et (2001). L'origine de la distribution des grains de poussière dans les noyaux cométaires est le résultat des processus de fragmentation et de coagulation œuvrant dans la nébuleuse protosolaire. Selon Coradini et al. (1977), la taille moyenne des grains est de l'ordre de 100  $\mu m$ . Espinasse et al. (1993) ont choisi la distribution initiale de grains indiquée sur la figure 2.4. La distribution de taille des grains observée dans la queue des comètes est différente (Brin & Mendis, 1979; Fanale & Salvail, 1984; Prialnik & Bar-Nun, 1988) mais cette contradiction ne pourrait qu'être apparente car cette distribution ne concerne que les plus petits grains, les particules les plus grosses formant le manteau de poussière en surface des noyaux cométaires (Prialnik et al., 2004). Selon la taille des grains et la force exercée par le flux de gaz, la sublimation de la glace permet l'éjection des grains de poussière de la comète ou leur accumulation sur la surface du noyau. La formation d'une croûte de poussière représente alors le dernier processus de différenciation physico-chimique du noyau cométaire.



**Fig. 2.4** - *Distribution en taille des grains de poussière adoptée dans le modèle (Espinasse et al., 1993).*

Les données expérimentales sur la conductivité thermique et la densité des grains de poussières provenant de noyaux cométaires sont très diverses. Ces grains ont une densité comprise entre 1000 et 3000 kg.m<sup>-3</sup> et semblent donc très poreux. Ils sont principalement composés de matériaux réfractaires et en l'occurrence, de minéraux silicatés (Joswiak et al., 2007). La densité moyenne de ces grains de silicates doit toutefois être inférieure à celle de ceux que l'on peut trouver sur Terre quelle que soit leur taille puisque les conditions en température et en pression au moment de leur formation sont très différentes (Coradini et al., 2008). La conductivité thermique de ces grains nous est inconnue. Dans la littérature, les valeurs que peut prendre la conductivité thermique des grains de poussière peuvent varier de 10<sup>-4</sup> (Tancredi et al., 1994) à 10 W.m<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup> (Huebner et al., 2006).

### B - Echange de chaleur par rayonnement de la matière dans les pores $K_p$

L'échange de chaleur par radiation entre deux parois séparées par un milieu transparent est démontrée par Huebner et al. (2006):

$$k_p(i) = 4r_p\varepsilon\sigma T^3 \quad (J.s^{-1}.m^{-1}.K^{-1}) \quad (2.17)$$

### 2.2.3 Termes de Transfert de Chaleur $Y$

Soit  $Y$ , la quantité de chaleur apportée ou emportée à la matrice poreuse telle que :

$$Y = Y_g + Y_{cr} + Y_{chs} \quad (J.s^{-1}.m^{-3}) \quad (2.18)$$

avec  $Y_g$  l'énergie globale de changement de phase de l'ensemble des volatils,  $Y_{cr}$  l'énergie apportée par la cristallisation de la glace et  $Y_{chs}$  la chaleur sensible.

### A - Energie de Changement de Phase de la Matière $Y_g$

L'énergie de changement de phase de la matière est l'énergie de condensation/adsorption ou de sublimation qui correspond, physiquement et respectivement, à l'énergie apportée lors de la condensation/adsorption des molécules gazeuses sur les parois des pores, ou à celle emportée par les molécules en phase condensée lors de leur sublimation. En réalité, on ne sait pas si les molécules de gaz sont adsorbées ou condensées sur les parois des pores. On choisit toutefois de prendre l'énergie de



condensation/sublimation comme énergie de fixation/libération des molécules d'une espèce chimique  $x$ . L'énergie de changement de phase est alors égale à la quantité de moles  $Q_x$  qu'il est nécessaire de sublimer ou condenser par  $m^3$  et par seconde, multipliée par la chaleur latente de condensation/sublimation  $H_x$  de l'élément chimique  $x$  correspondant:

$$Y_g = - \sum_x H_x \cdot Q_x \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}) \quad (2.19)$$

Le terme  $Q_x$  est déterminé par l'inversion de l'équation de conservation de la masse (2.27) et explicité dans la section 2.3. L'expression de la chaleur latente de sublimation/condensation de l'espèce chimique  $x$  est déterminée par la relation de Clausius-Clapeyron donnée en Annexe E:

$$\Delta H_x = \frac{R \cdot T^2}{P_x^s(T)} \cdot \frac{dP_x^s(T)}{dT} \quad (J \cdot mol^{-1}) \quad (2.20)$$

avec  $R$  la constante des gaz parfaits,  $T$  la température du milieu et  $P_x^s(T)$  la pression d'équilibre de la phase gazeuse de l'espèce chimique  $x$  avec la phase condensée à la température  $T$ . Cette relation n'est valable que pour de faibles évolutions de la température et de la pression d'équilibre.

### **B - Chaleur Sensible ou transfert de chaleur par advection $Y_{chs}$**

La chaleur sensible est la quantité de chaleur échangée entre la phase gazeuse des éléments chimiques  $x$  qui diffusent à l'intérieur du réseau de pores, et la matrice de glace poreuse, sans qu'il y ait pour autant de changement de phase des éléments chimiques impliqués. La seule interaction considérée, au cours de ce transfert de chaleur, est celle des collisions élastiques des molécules en phase gazeuse avec les parois des pores de la matrice poreuse. Lors du transfert de chaleur par advection, on suppose qu'il y a équilibre thermique entre la phase gazeuse des différents éléments chimiques  $x$  qui diffuse et les parois de la matrice avec lesquelles le fluide est en contact. En diffusant, le gaz acquiert la température du milieu qu'il traverse. Selon sa température initiale, il perd ou prend donc de l'énergie. Le transfert de chaleur dépend alors de la température du milieu traversé et de la capacité du fluide à restituer ou à accumuler cette chaleur:

$$Y_{chs} = \sum_x \frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} \cdot C_{v,x}^g \cdot \Delta T \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}) \quad (2.21)$$

où  $\frac{\partial \rho_x^g}{\partial t}$  est la variation de moles du gaz  $x$  par  $m^3$  et par seconde dans les pores de la couche,  $C_{v,x}^g$  la capacité calorifique du gaz  $x$  à volume constant et  $\Delta T$  la variation de température du nombre de moles de gaz  $x$  considéré au cours du transfert de masse.

### C - Energie de Cristallisation de la glace amorphe $Y_{cr}$

La transition de phase de la glace  $H_2O$  pure amorphe en glace cristalline pure est un processus physique exothermique et considéré comme irréversible. La chaleur relâchée  $H_{cr}$  par cette transformation pour une transition de phase amorphe – cristalline (réseau cubique) est égale à  $1620 \text{ J.mol}^{-1}$  (Ghormley, 1968). La transition de phase “glace cubique” – “glace hexagonale” a été négligée puisque la chaleur dégagée ne représente que quelques % de celle de la transition amorphe-cubique.

Le réagencement des molécules d' $H_2O$ , fonction de la température du milieu, n'est pas un phénomène physique instantané. Le temps nécessaire à la restructuration des molécules d' $H_2O$  a été déterminé par Schmitt et al. (1989):

$$\tau_{cr}(T) = 9,54.10^{-14} . e^{\frac{5370}{T}} \quad (s) \quad (2.22)$$

La figure 2.5 donne le temps de cristallisation d'une structure de glace amorphe en fonction de la température. La transition de phase ne devient vraiment effective qu'à partir de 110 K. A cette température, la cristallisation des couches concernées nécessite une dizaine d'année.

La chaleur relâchée durant le processus de cristallisation de la glace est alors égale à:

$$Y_{cr} = \frac{H_{cr} . n_{H_2O}^a}{\tau_{cr}(T)} \quad (J . s^{-1} . m^{-3}) \quad (2.23)$$

avec  $n_{H_2O}^a$ , le nombre de moles de glace  $H_2O$  amorphe par  $m^3$ .

Kouchi & Sirono (2001) ont montré cependant que la cristallisation d'une glace impure qui contient des molécules  $CO$ ,  $CO_2$  et  $CH_4$  peut être endothermique si leur concentration est supérieure à 2% en moles d' $H_2O$ . La cristallisation de la glace amorphe est supposée être la principale cause des outburts dans les comètes (Hughes, 1991; Prialnik & Bar-Nun, 1992; Prialnik, 1997) mais une cristallisation endothermique supprimerait les outburst observés lors d'une cristallisation exothermique (Kouchi & Sirono, 2001). Nous supposerons toutefois, par la suite, que le changement de phase “glace amorphe” – “glace cristalline” est un processus physique exothermique.

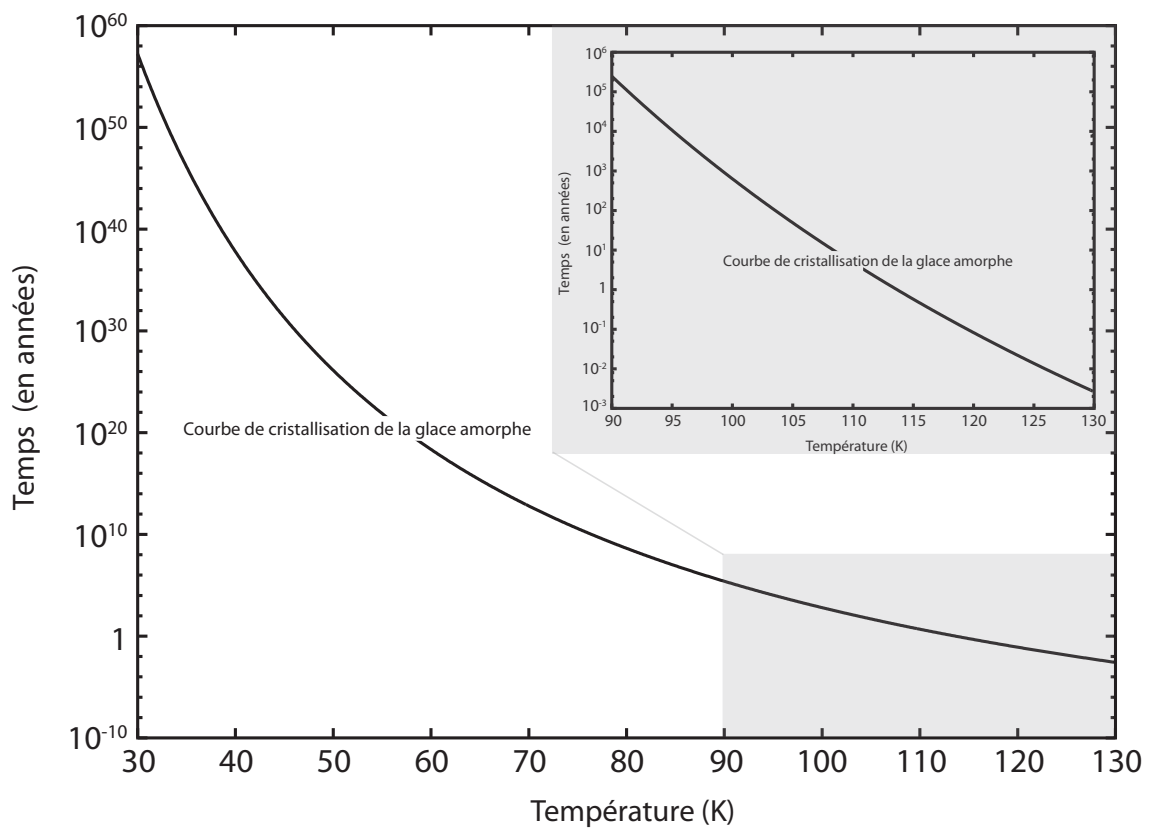


Fig. 2.5 - Temps de cristallisation de la glace amorphe en fonction de la température

### 2.2.4 Bilan énergétique en Surface

La température en surface est déterminée à partir d'un bilan énergétique effectué sur la couche de surface. Le rayonnement solaire est le principal apport énergétique de l'objet. Cette énergie emmagasinée en surface est ensuite redistribuée selon différents processus physiques de transport comme le rayonnement thermique du noyau dans l'infrarouge ou la conduction de la chaleur à l'intérieur du noyau. Une partie de l'énergie apportée par l'étoile participe également au réchauffement de la matière et donc au changement de phase des différents éléments chimiques suivant la pression de vapeur saturante de chacun d'entre eux.

La figure 2.6 présente une vue schématique des principaux phénomènes physiques qui interviennent dans le bilan d'énergie à la surface de l'objet.

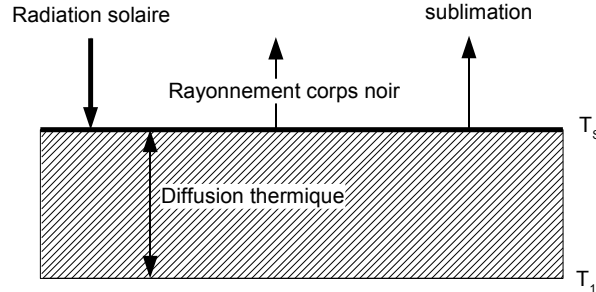
La température de surface d'un corps constitué de glace et de poussière est déterminée à partir du bilan d'énergie pour une surface de noyau n'étant pas recouverte entièrement par une couche de poussière:

$$\frac{C_s \cdot (1 - A_l)}{4 \cdot R_h^2} = \epsilon \cdot \sigma \cdot T_s^4 + K(T_s) \cdot \frac{dT}{dr} + \sum_x f_x^s \cdot H_x(T_s) \cdot \dot{\epsilon}_x(T_s) \quad (2.24)$$

avec  $C_s$  la constante solaire,  $A_l$  l'albédo Bolométrique de Bond de la surface du noyau,  $R_h$  la distance Héliocentrique,  $\epsilon$  l'émissivité infrarouge de la surface,  $\sigma$  la constante de Stefan-Boltzmann,  $T_s$  la température de la surface,  $K$  le coefficient de conduction thermique,  $\dot{\epsilon}_x$  le taux de sublimation,  $f_x^s$  la fraction volumique en surface et  $H_x$  la chaleur latente de sublimation de la phase condensée de l'élément chimique  $x$ .

**Terme d'ensoleillement:**  $\frac{C_s \cdot (1 - A_l)}{4 R_h^2}$ . La valeur du membre de gauche de l'Eq.(2.24) est valide uniquement dans l'approximation du rotateur rapide (Espinasse et al., 1991; Prialnik et al., 2004) qui est adoptée ici. Avec cette approximation, on postule que le noyau tourne suffisamment rapidement pour que la température soit identique sur l'ensemble de sa surface. D'après des mesures récentes de l'inertie thermique et de la température à la surface de la comète 9P/Tempel 1 (Groussin et al., 2007), cette approximation pourrait ne pas être appropriée pour représenter la surface de cette comète. Pourtant, Prialnik et al. (2004) affirment que c'est une bonne approximation pour l'intérieur du noyau sous la couche de surface et qu'elle reste valide pour cette surface lorsque l'objet se trouve suffisamment loin du Soleil pour que les variations journalières de l'ensoleillement soient faibles.

Espinasse et al. (1991) ont utilisé la même formulation en moyennant le flux solaire sur la surface. Orosei et al. (1999) ont essayé de représenter les effets d'une



**Fig. 2.6** - Schéma représentant le bilan énergétique de la couche de surface

variation journalière et latitudinale de l'ensoleillement solaire bien que leur modèle soit unidimensionnel. Dans ce dernier cas, bien que l'énergie reçue en un point donné de la surface puisse être une meilleure représentation, ce genre de modèle suppose qu'il n'y a pas de diffusion latérale de la chaleur à la surface mais uniquement vers le centre du noyau. Il n'est donc pas certain que les améliorations effectuées, sur le bilan énergétique en surface, résultent en une meilleure représentation de la physique réelle des noyaux cométaires.

**Terme de sublimation des éléments chimiques  $x$ :**  $f_x^s \cdot H_x(T_s) \cdot \dot{\epsilon}_x(T_s)$ . L'énergie dissipée par sublimation de tous les éléments chimiques  $x$  présents en surface est fonction de la fraction volumique de l'élément chimique  $x$ , de sa chaleur latente de sublimation correspondante et de son taux de sublimation  $\dot{\epsilon}_x(T_s)$ . Ce taux de sublimation a été déterminé par Delsemme & Miller (1971) et décrit sous vide la quantité de matière sublimée sur une surface homogène:

$$\dot{\epsilon}_x(T_s) = P_x^s \sqrt{\frac{M_x}{2 \cdot \pi \cdot R \cdot T_s}} \quad (\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (2.25)$$

avec  $M_x$  la masse molaire et  $P_x^s$  la pression d'équilibre entre la phase gazeuse et la phase solide de l'espèce chimique  $x$ , et  $R$  la constante des gaz parfaits. Une démonstration de ce terme peut être trouvée en Annexe G.

Cette expression n'est valable que pour un composé pur et homogène, mais en l'absence de données sur les mélanges de glaces, on adopte ce terme pour la sublimation de la phase condensée des différentes espèces chimiques présentes en surface.

Un facteur de correction  $f_x^s$  est inséré devant le taux de sublimation. Il correspond à la fraction volumique de l'espèce condensée en surface exposée au Soleil. Ce facteur, explicité ci-dessous, est donné par Crifo et al. (1997):

$$f_x^s = \left(1 + \frac{\rho_x^c}{\rho_x} \cdot \frac{\rho_{dust}}{\rho_{dust}^c}\right)^{-1} \quad (2.26)$$

avec  $\rho_x$  la quantité de matière à l'état solide présente à la surface du noyau par unité de volume,  $\rho_x^c$  la masse volumique de la quantité de matière présente en surface lorsque celle-ci est compacte et  $\psi$  la porosité de la couche de surface.

## 2.3 Conservation de la Masse

Le gaz contenu dans le volume total des pores peut être issu de deux processus physiques différents. D'une part, la sublimation partielle ou totale de la forme solide de l'élément chimique  $x$  peut alimenter la phase gazeuse. D'autre part, la cristallisation de la glace lorsque celle-ci est initialement amorphe peut libérer des volatils piégés à l'intérieur de sa structure. La phase gazeuse de l'espèce chimique  $x$  diffuse à l'intérieur du réseau de pores qui est considéré ouvert sur l'extérieur. L'origine de cette diffusion est le gradient de pression issu lui-même du gradient thermique créé par la diffusion de la chaleur à travers la matrice poreuse.

L'équation générale de diffusion du gaz s'écrit:

$$\frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} = \nabla \cdot (G_x \cdot \frac{\partial P_x}{\partial r}) + Q_g \quad (\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (2.27)$$

avec  $\rho_x^g$  la quantité molaire volumique du gaz dans le volume des pores,  $P_x$  la pression partielle de la phase gazeuse de l'espèce  $x$ ,  $G_x$  son coefficient de diffusion dans le réseau de pores et  $Q_g$  la quantité de moles par unité de volume et par seconde apportée ou prise à la quantité de gaz dans les pores. Ces quantités sont déterminées par unité de volume de la matrice totale.

En faisant l'hypothèse que les flux des différents éléments chimiques sous forme gazeuse n'interagissent pas ensemble, on peut résoudre cette équation pour chaque espèce chimique  $x$  indépendamment des autres espèces présentes dans le système.

Chaque terme de l'équation 2.27 est explicité de gauche à droite dans les sections 2.3.1, 2.3.2 et 2.3.3 respectivement.

### 2.3.1 Variation temporelle de la quantité de gaz dans les pores $\frac{\partial \rho_x^g}{\partial t}$

Le nombre de moles de gaz par  $\text{m}^3$  est relié à sa pression par la relation des gaz parfaits:

$$\rho_x^g = \frac{\psi \cdot P_x}{R \cdot T} \quad (\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}) \quad (2.28)$$

La porosité  $\psi$  est un facteur de correction. La quantité de gaz est déterminée à partir de la pression calculée dans le volume libre constitué par l'ensemble des pores.

L'ajout de ce terme permet de connaître la quantité de moles de gaz par unité de volume de l'ensemble de la matrice.

La variation temporelle de la quantité de moles d'une espèce chimique  $x$  en phase gazeuse est égale à:

$$\frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} = \frac{\psi}{R.T} \cdot \frac{\partial P}{\partial t} \quad (2.29)$$

si on suppose que la température ne change pas durant la variation de pression du gaz.  $R$  est la constante des gaz parfaits,  $\delta t$  la variation temporelle et  $T$  la température de la matrice solide.

On impose à la phase gazeuse une température égale à celle de la matrice solide: la capacité calorifique de la phase gazeuse d'une espèce étant généralement plus petite que celle de la phase condensée, le temps de mise à l'équilibre thermique de la phase gazeuse avec l'environnement qui l'entoure est plus court que celui de la matrice solide. De plus, la fréquence des chocs des molécules gazeuses avec les parois des pores est supposée être suffisamment importante pour considérer que le gaz acquiert rapidement la même température que la matrice solide à l'intérieur de laquelle il se déplace.

### 2.3.2 Terme de divergence du flux de gaz $G_x \cdot \frac{\partial P_x}{\partial r}$

Le mécanisme régissant la diffusion est déterminé par le nombre de Knudsen  $K_x^n$  de chaque volatil  $x$  défini comme étant égal au rapport du libre parcours moyen  $\lambda_x$  des molécules  $x$  et du diamètre moyen des pores  $D_p$ :

$$K_x^n = \frac{\lambda_x}{D_p} \quad (2.30)$$

avec

$$\lambda_x = \frac{k_B}{\sqrt{2\pi} \cdot d_x^2} \cdot \frac{T}{P_x} \quad (m) \quad (2.31)$$

On suppose que les molécules gazeuses  $x$  sont sphériques de diamètre  $d_x$ , rigides et élastiques. Le paramètre  $K_x^n$ , adimensionnel, caractérise le type d'écoulement. Suivant sa valeur, l'écoulement peut être libre, visqueux ou dans un régime de diffusion intermédiaire.



## 2. LE MODÈLE PHYSIQUE DE NOYAU COMÉTAIRE

---

La diffusion est de type “**Knudsen**” si  $K_x^n > 1$ . Le libre parcours moyen des molécules est alors supérieur au diamètre  $D_p$  des pores. Les collisions des molécules contre les parois prédominent sur les chocs des molécules entre elles. Les molécules diffusent indépendamment les unes des autres. Ce régime est prédominant dans les situations où l’espace est réduit ou lorsque la densité du gaz est faible, conditions qui sont généralement réunies dans les noyaux cométaires. Chaque espèce sublime et diffuse suivant un domaine de température qui lui est propre. Le coefficient de diffusion du gaz déterminé pour un pore cylindrique est alors égal à:

$$G_x^{K_n} = r_p \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2M_x \cdot R \cdot T}} \quad (\text{mol} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (2.32)$$

La diffusion est en revanche de type “**visqueux**” si  $K_x^n < 0,01$ . Le libre parcours moyen des molécules est alors très inférieur au diamètre des pores et les chocs entre ces molécules prédominent. Le coefficient de diffusion du gaz dans un pore cylindrique est alors fonction de la viscosité  $\eta$  et de la pression totale  $P_T$  régnant dans les pores:

$$G_x^v = \frac{r_p^2}{8\eta \cdot N_a} \frac{P_T}{k_B \cdot T} \quad (\text{mol} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (2.33)$$

avec  $\eta = \frac{1}{3}\rho \cdot \lambda \cdot \sqrt{\frac{8RT}{\pi \cdot M_x}}$

Le volume d’un pore étant assez restreint, ce régime de diffusion intervient essentiellement lors d’un dégazage ou d’un relâchement conséquent de molécules de gaz.

Enfin, si  $0,01 < K_x^n < 1$ , on est en régime de **transition** entre le domaine “Knudsen” et celui “visqueux” (Fanale & Salvail, 1987). Le coefficient de diffusion du gaz dans un pore cylindrique apparaît comme une combinaison des équations précédentes. Son expression a été déterminée empiriquement par Scheidegger (1963):

$$G_x^* = 0,9 \cdot G_x^{K_n} + 0,5 \cdot G_x^v \quad (\text{mol} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (2.34)$$

Le milieu poreux est constitué d’un réseau de pores ouvert représentant une fraction volumique de la matrice ( $\psi$ ) à l’intérieur de laquelle le gaz peut diffuser. Afin de déterminer le coefficient de diffusion du gaz dans la matrice poreuse, on multiplie le coefficient de diffusion du gaz, exprimé pour un pore cylindrique, par la fraction volumique  $\psi$  occupée par l’ensemble des pores:

$$G_x = \psi \cdot G_x^* \quad (\text{mol} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (2.35)$$

Comme dans l’Eq. (2.28) où le paramètre  $\psi$  a été inséré afin de déterminer la

quantité de moles en phase gazeuse, il permet ici de déterminer la quantité de moles de gaz qui diffuse à travers la matrice poreuse.

**Influence de la tortuosité:** Une distribution aléatoire des pores constitue un obstacle physique à la diffusion du gaz en empêchant ce dernier de suivre le chemin le plus direct et en le retenant au moins partiellement. L'écoulement du fluide emprunte donc un passage plus compliqué et tortueux. Dans les travaux qui suivent, les effets de tortuosité sont négligés.

### 2.3.3 Termes d'apport ou de perte de matière $Q_g$

Soit  $Q_g$  la quantité de moles des volatils apportée par cristallisation de la glace d' $H_2O$  et/ou subissant un changement de phase dans la matrice poreuse:

$$Q_g = Q_x + Q_x^{cr} \quad (mol . m^{-3} . s^{-1}) \quad (2.36)$$

avec  $Q_x$  la quantité de moles de l'espèce chimique  $x$  par  $m^3$  et par seconde subissant un changement de phase et  $Q_x^{cr}$  la quantité de moles de l'espèce chimique  $x$  par  $m^3$  et par seconde libérées par la transition de phase de la glace d' $H_2O$  lorsque celle-ci est amorphe à l'origine. Chacun des deux termes est explicité ci-dessous.

#### A - Terme de changement de phase $Q_x$

Ce terme correspond à la quantité de moles par  $m^3$  et par seconde de l'élément  $x$  qu'il est nécessaire de sublimer ou condenser à la surface des pores pour conserver l'équilibre thermodynamique solide-gaz local.

Lorsque l'élément chimique  $x$  est présent sous forme de condensat dans le réseau de pores, la pression du gaz correspondant est celle d'une pression d'équilibre thermodynamique dite pression de saturation à la température  $T$  du milieu. Les processus de sublimation et de condensation à l'intérieur du réseau sont alors considérés comme instantanés de manière à conserver en permanence l'équilibre thermodynamique.

Le terme  $Q_x$  est directement calculé à partir de la variation de la pression de saturation et correspond à la quantité de moles par  $m^3$  et par seconde qu'il faut sublimer ou condenser pour conserver l'équilibre thermodynamique:

$$Q_x = \frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} - \nabla \cdot (G_x \cdot \frac{\partial P_x}{\partial r}) \quad (mol . m^{-3} . s^{-1}) \quad (2.37)$$

## B - Terme d'apport de matière lié à la cristallisation de la glace amorphe

$Q_x^{cr}$

Ce terme correspond à la quantité de moles de gaz par  $m^3$  et par seconde relâchée lors de la cristallisation de la glace amorphe. Il est donc proportionnel au nombre de moles d'eau par  $m^3$  qui cristallisent:

$$Q_x^{cr} = \mu_x \cdot \frac{n_{H_2O}^a}{\tau_{cr}(T)} \quad (mol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}) \quad (2.38)$$

avec  $\mu_x$  la fraction de l'élément chimique  $x$  piégée dans la glace amorphe, en moles de glace d' $H_2O$  amorphe.

Pour plus de détails au sujet des processus physiques qui ont lieu à l'intérieur des noyaux cométaires, le lecteur est invité à lire Espinasse et al. (1991), Prialnik et al. (2004) et Huebner et al. (2006).

## 2.4 Conclusion

Pour conclure ce chapitre de présentation du modèle physico-chimique de noyau cométaire, on rappelle les principaux processus physico-chimiques et approximations considérés dans le modèle:

- la principale source de chaleur est le Soleil
- la diffusion de la chaleur à travers le noyau se fait par conduction thermique à l'intérieur de la matrice poreuse
- les changements de phase considérés sont ceux de sublimation/condensation de l'ensemble des volatils suivant leur température de sublimation respectives
- un deuxième changement de phase exothermique pris en compte concerne la cristallisation de la glace si elle est initialement amorphe; celle-ci peut également être accompagnée d'un relâchement de volatils.
- la phase gazeuse des différents éléments chimiques diffuse à travers le réseau de pores ouvert; cette diffusion trouve son origine dans l'existence d'un gradient de pression
- l'advection de la phase gazeuse permet le transfert de l'énergie thermique qu'elle contient au milieu environnant

# Chapitre 3

## Le Modèle Numérique

### Contents

---

<b>3.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>57</b>
<b>3.2</b>	<b>Méthode Numérique</b>	<b>58</b>
3.2.1	Intégration Spatiale	59
3.2.2	Intégration Temporelle	65
<b>3.3</b>	<b>Comparaison du bilan de masse avec d'autres modèles</b>	<b>71</b>
3.3.1	Paramètres d'entrée	72
3.3.2	Résultats	73
<b>3.4</b>	<b>Conclusions</b>	<b>81</b>

---

### 3.1 Introduction

La modélisation d'un planétésimal composé de glaces fait intervenir de nombreux changements de phases lorsque celui-ci se réchauffe (voir Chapitre 2). La principale difficulté des modèles simulant plusieurs changements de phase est de réussir à maintenir une stabilité numérique et mathématique du calcul et d'assurer la conservation à l'intérieur du modèle numérique des quantités physiques que sont l'énergie et la matière. En effet, les changements de phase, qui sont régis par un certain nombre de paramètres qui interagissent non linéairement entre eux, peuvent se produire simultanément et être la source d'instabilités numérique et mathématique. Ainsi, un changement brutal de l'état physico-chimique mettant en jeu une discontinuité mathématique et physique peut entraîner des oscillations de température et de pression à l'intérieur du système étudié. De même, le choix d'une méthode numérique de discrétisation mal adaptée aux phénomènes physico-chimiques (cristallisation, sublimation/condensation des volatils) étudiés peut engendrer la propagation importante

d'erreurs numériques de discrétisation et d'arrondi. La stabilité numérique de ces modèles et la conservation des quantités physiques (masse et énergie) deviennent d'autant plus importantes qu'on s'intéresse à l'étude à long terme de l'évolution physico-chimique de ces objets.

Je présente dans une première partie la méthode numérique et le développement mathématique utilisés pour modéliser les processus physiques qui ont lieu à l'intérieur du noyau cométaire. Dans une seconde partie, je compare les améliorations apportées au bilan de masse de notre modèle avec des modèles déjà publiés.

## 3.2 Méthode Numérique

Le choix d'une méthode de discrétisation est important tant il conditionne la stabilité d'un système et sa convergence vers un résultat physique acceptable. Le schéma de discrétisation majoritairement utilisé jusqu'ici pour résoudre les équations de conservation dans les modèles de noyaux cométaires (e.g. Espinasse et al., 1991; Coradini et al., 1997; Enzian et al., 1997; De Sanctis et al., 1999; Orosei et al., 1999; Capria et al., 2003; Mousis et al., 2005; Huebner et al., 2006) est la méthode des différences finies. Cette méthode assez facile à mettre en place n'assure pas nécessairement le principe de conservation des lois physiques et peut être sujette à des sources d'instabilités numériques. Elle consiste à approximer les dérivées des équations de la physique au moyen des développements de Taylor et se déduit directement de la définition de la dérivée. L'ordre de précision des résultats dépend essentiellement de celui de la troncature des équations de Taylor ainsi que de la taille des cellules et augmente avec la complexité de mise en oeuvre de la discrétisation. Cependant, il est possible de contourner ce problème en écrivant les équations de conservation d'énergie (2.1) et de masse (2.27) comme un système plan-parallèle et en remplaçant la variable de position  $r$  par le volume  $V$  dans ces équations (Priyalnik & Bar-Nun, 1987; Priyalnik, 1992; Priyalnik et al., 2004). Cette adaptation de la méthode des différences finies permet alors de déterminer de manière classique les termes de diffusion aux interfaces des cellules, en supprimant le terme de divergence, et d'assurer ainsi la conservation des quantités physiques (énergie et masse).

Une autre méthode de discrétisation, la méthode des volumes finis, consiste à intégrer analytiquement, sur des volumes élémentaires, les équations de conservation (2.1) et (2.27). Le principal avantage de cette méthode réside dans l'intégration analytique du terme de divergence présent dans les deux équations de conservation, qui mène à une simple différence algébrique de termes exprimés aux interfaces du volume de contrôle, et qui peut être résolue aisément numériquement. Cette méthode relativement simple à mettre en oeuvre fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives des équations de conservation et est particulièrement bien adaptée aux équations de la mécanique des fluides.

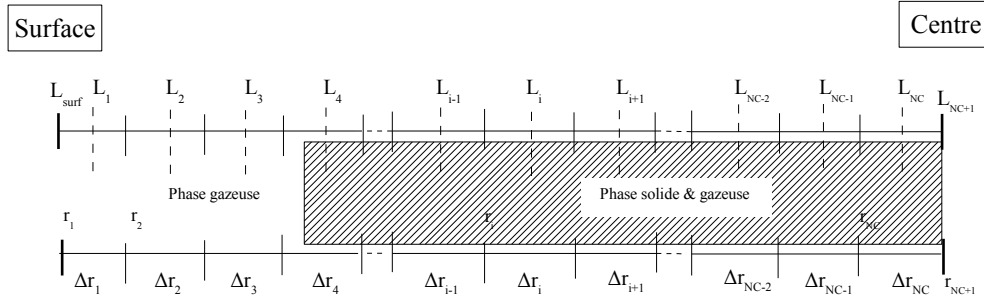
Ces deux méthodes de discrétisation sont toutes deux des méthodes d'approximation des équations. Elles permettent de déterminer de manière exacte une solution approximative à partir d'équations approchées. La notion d'approximation est inhérente aux méthodes numériques tout comme l'erreur sur la conservation des quantités physiques (énergie et masse) à la discrétisation. Toutefois, une méthode numérique doit assurer la meilleure conservation possible de ces quantités. Dans ce domaine, la méthode des volumes finis a un avantage par rapport à celle des différences finies, puisqu'elle préserve le caractère conservatif des équations d'évolution sur chaque volume de contrôle grâce à la continuité des flux aux interfaces. De plus, elle reste valable pour n'importe quelle finesse du maillage. Cette méthode semble donc désignée pour assurer l'exacte conservation des quantités physiques entre deux cellules adjacentes et pour l'étude à long terme de l'évolution physico-chimique des noyaux cométaires ou planétésimaux. Le lecteur trouvera une description plus détaillée de cette méthode dans Patankar (1980).

Cependant, les bénéfices d'une bonne méthode numérique de discrétisation des équations peuvent être anihilés si le cadre mathématique n'est pas bien posé. Dans cette optique, Orosei et al. (1999) ont proposé un nouveau schéma mathématique de résolution des équations de conservation. Ainsi, le changement brutal de la position des discontinuités physiques liées aux fronts de sublimations des différentes espèces chimiques  $x$ , ainsi que le couplage entre des processus physiques (diffusion de la chaleur et la diffusion de masse dans la matrice poreuse) qui ont des échelles de temps caractéristiques différentes, tendent à créer des oscillations de température et de pression à l'intérieur du noyau.

Afin d'augmenter la stabilité numérique du système étudié, Orosei et al. (1999) ont proposé dans une première phase de déplacer progressivement et continuellement le front de sublimation de chaque espèce chimique  $x$  de manière à conserver les propriétés physico-chimiques de l'interface. Enfin, ils ont résolu implicitement le terme de sublimation/condensation  $Q_x$  (explicité dans la section 2.3) lors de la résolution de l'équation de conservation de l'énergie en l'exprimant en fonction de la température  $T$  du milieu recherchée. Cette dernière méthode permet alors de déterminer de manière exacte la quantité de matière  $Q_x$  sublimée/condensée correspondant à l'énergie supprimée/apportée dans la cellule.

### 3.2.1 Intégration Spatiale

Le modèle de noyau cométaire décrit ci-dessous est un modèle unidimensionnel segmenté en  $NC$  couches d'épaisseur  $\Delta r_i$  croissante avec la profondeur. Cette croissance suit une loi géométrique  $\Delta r_i = a \cdot \Delta r_{i-1}$  où  $a$  est un facteur constant plus grand que 1.  $r_i$  est défini comme la position du sommet de la couche  $i$  par rapport au centre du noyau tel que:



**Fig. 3.1** - Vue schématique du noyau numérique. La pression  $P_i$ , la température  $T_i$  et les coefficients de conduction de la chaleur  $K_i$  et de diffusion du gaz  $G_i$  sont définis au centre de chaque cellule  $i$  et sont représentés par le coefficient  $L_i$ . Les paramètres  $r_i$  et  $\Delta r_i$  sont la distance au centre du noyau et l'épaisseur de chaque cellule  $i$ .

$$\Delta r_i = r_i - r_{i+1} \quad (3.1)$$

La figure 3.1 présente le maillage du noyau numérique utilisé pour discrétiser les équations de conservation. La variable  $L$  définie en plusieurs points du maillage représente les pression  $P_i$  et température  $T_i$  de chaque couche  $i$ , ainsi que les coefficients de conduction  $K_i$  et de diffusion  $G_i$ , qui dépendent de ces variables et correspondent aux conditions physiques retrouvées au milieu du volume de contrôle  $V_i$  de la couche  $i$ . Ce volume de contrôle se limite dans notre modèle unidimensionnel à une cellule radiale de volume égal à  $V_i = \frac{4}{3}\pi[r_i^3 - r_{i+1}^3]$ .

Quand une espèce chimique  $x$  commence à sublimer, son front de sublimation divise le noyau en deux zones (voir Fig. 3.1). Dans la première, de l'interface à la surface, l'espèce  $x$  est présente uniquement en phase gazeuse et obéit simplement à l'Eq. (2.27) sans le terme source/puits de matière  $Q_x$  correspondant à l'espèce  $x$ . Dans la seconde zone, de l'interface au centre du noyau, la phase condensée de l'espèce  $x$  est en équilibre avec sa phase vapeur à la pression d'équilibre de vapeur saturante.

Les équations de conservation de l'énergie (Eq. 2.1) et de la masse (Eq. 2.27) sont discrétisées suivant la méthode des volumes finis dans la structure décrite ci-avant et dans le cadre mathématique décrit par Orosei et al. (1999). J'illustre ci-après l'intégration de l'équation de conservation de l'énergie dans sa forme générale avec le terme source/puits de matière  $Q_x$  correspondant à une espèce  $x$  présente sous forme condensée. Je développe successivement l'intégration spatiale et temporelle

des différents termes de l'équation de conservation de l'énergie (Eq.2.1) rappelée ici:

$$\rho.c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (K \cdot \frac{\partial T}{\partial r}) + Y \quad (J .s^{-1} .m^{-3})$$

L'intégration spatiale et temporelle de l'équation de conservation de la masse (Eq. 2.27) est développée en Annexe A.

**Integration Spatiale du membre de gauche de l'Eq. (2.1).** L'intégration spatiale de ce terme sur le volume de contrôle donne:

$$\iiint_v \rho.c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \cdot dv = \rho.c \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} \cdot V_i \quad (3.2)$$

avec  $V_i = \frac{4}{3}\pi \cdot [r_i^3 - r_{i+1}^3]$  et  $i$  l'indice de la couche considérée. La température  $T$  est une moyenne des températures pouvant régner dans la cellule  $i$  au même instant  $t$ .

**Premier Terme du membre de droite de l'Eq. (2.1).** Afin que deux cellules puissent voir le même flux de part et d'autre de l'interface des volumes de contrôle, on exprime les coefficients de conduction  $K_i$  à la surface de chaque cellule radiale. Les coefficients  $k_i$  sont leurs valeurs à la limite entre les cellules  $i - 1$  et  $i$ .

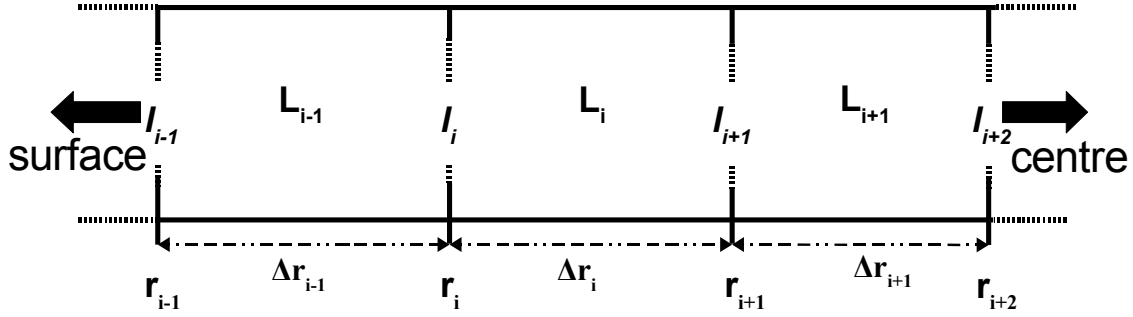
La figure 3.2 montre la variable  $L_i$ , qui représente les coefficients de diffusion  $G_i$  (Cf. Annexe A) et de conduction  $K_i$  définis au centre de la cellule  $i$ , et sa variable correspondante  $l_i$ , exprimée sur chaque interface pour les coefficients de diffusion  $g_i$  et de conduction  $k_i$ . Chaque couche possède alors un jeu de coefficients de diffusions ( $G, K$ ) définis dans le centre de la cellule et un autre jeu de coefficients ( $g, k$ ) définis à sa surface. Les coefficients  $l_i$  peuvent être écrits comme des fonctions des coefficients  $L_{i-1}$  et  $L_i$  situés au dessus et en dessous de l'interface séparant les couches  $i - 1$  et  $i$ . On considère que ces coefficients forment un réseau parallèle défini par l'équation:

$$l_i = \frac{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i}{\frac{\Delta r_{i-1}}{L_{i-1}} + \frac{\Delta r_i}{L_i}} \quad (3.3)$$

dont l'explication se trouve en Annexe B. Le résultat, en remplaçant les coefficients  $L_i$  par  $l_i$  dans les termes de divergence des équations de conservation d'énergie (2.1) et de masse (2.27), est l'exacte conservation des flux d'énergie et de matière à travers l'interface. L'interpolation concerne tous les termes compris dans la divergence, excepté les termes de gradient.

La nature unidimensionnelle de notre modèle nous oblige à considérer une symétrie sphérique; seule la composante radiale subsiste. L'intégration spatiale de la





**Fig. 3.2** - Vue schématique de la structure du noyau numérique. La pression  $P_i$  et la température  $T_i$  sont déterminées au centre de chaque cellule  $i$  et sont représentées par le coefficient  $L_i$ . Les coefficients de conduction de la chaleur  $K_i$  et de diffusion du gaz  $G_i$  sont définis au centre et au sommet de chaque cellule  $i$ . Ils sont ici représentés par les coefficients  $L_i$  au centre et  $l_i$  au sommet de chaque cellule  $i$ . Les paramètres  $r_i$  et  $\Delta r_i$  correspondent à la distance au centre du noyau et l'épaisseur de chaque cellule  $i$ .

divergence devient alors:

$$\begin{aligned} \iiint_v \nabla \cdot \left( k \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) \cdot dv &= \iiint_v \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \cdot k \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) \cdot dv \\ &= 4\pi \cdot \left[ r_i^2 \cdot k_i \cdot \frac{\partial T_i}{\partial r} - r_{i+1}^2 \cdot k_{i+1} \cdot \frac{\partial T_{i+1}}{\partial r} \right] \end{aligned} \quad (3.4)$$

où le gradient de température  $\frac{\partial T_i}{\partial r}$  s'écrit comme suit:

$$\frac{\partial T_i}{\partial r} = 2 \cdot \frac{T_{i-1} - T_i}{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i} \quad (3.5)$$

**Deuxième terme du membre de droite de l'Eq. (2.1):  $Y$**  Le terme  $Y$  réunit les termes d'énergie de changement de phase des volatils  $Y_g$ , d'énergie de cristallisation  $Y_{cr}$  et de chaleur sensible  $Y_{chs}$ .

L'expression de  $Y_g$  est fonction de  $Q_x$  (Eq. 2.18) qui a une valeur non nulle dans les équations (2.1) et (2.27) uniquement si l'espèce chimique  $x$  correspondante est présente sous forme solide dans les pores. L'intégration spatiale de  $Y_g$  revient alors à intégrer spatialement le terme  $Q_x$  (Eq. 2.37):

$$\begin{aligned}
 \iiint_v Y_g \cdot dv &= \iiint_v \sum_x H_x \cdot Q_x \cdot dv \\
 &= \sum_x \iiint_v H_x \cdot \left( \frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} - \nabla \cdot \left( G_x \cdot \frac{\partial P_x^s(T)}{\partial r} \right) - Q_x^{cr} \right) \cdot dv \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

avec  $\rho_x^g = \frac{\psi \cdot P_x^s(T)}{R \cdot T}$ . Ici, on utilise la pression de vapeur saturante  $P_x^s$  de l'espèce chimique  $x$  en lieu et place de la pression partielle  $P_x$  de cette même espèce, car l'élément  $x$  existe sous la phase solide en équilibre thermodynamique avec la phase gazeuse à la pression d'équilibre  $P_x^s(T)$ , qui est uniquement fonction de  $T$ . On considère de cette manière que les temps de sublimation/recondensation des molécules d'un volatil  $x$  sont plus courts que le temps de variation de température: la phase gazeuse est toujours en équilibre avec la phase solide tant que cette dernière existe.

### Intégration Spatiale de l'Eq. (3.6) (terme source/puits de matière $Q_x$ ).

En considérant que la phase vapeur est toujours en équilibre thermodynamique avec la phase solide, on peut exprimer les différents processus physiques de l'Eq.(3.6) en fonction de la température. En déterminant la température de la matrice solide, on calcule alors implicitement le terme source/puits de matière  $Q_x$  et on stabilise le calcul numérique (Orosei et al., 1999). Je développe ci-dessous les différents termes de l'intégration spatiale de l'Eq. (3.6).

*Premier terme du membre de droite de l'Eq. (3.6):*

$$\begin{aligned}
 \sum_x \iiint_v H_x \cdot \frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} \cdot dv &= \sum_x H_{i,x} \cdot \frac{\partial \rho_{i,x}^g}{\partial t} \cdot V_i \\
 &= \sum_x H_{i,x} \cdot \frac{\psi_i}{R} \cdot \frac{\partial \left( \frac{P_x^s(T_i)}{T_i} \right)}{\partial t} \cdot V_i \\
 &= \sum_x H_{i,x} \cdot \frac{\psi_i}{R} \cdot \frac{\partial \left( \frac{P_x^s(T_i)}{T_i} \right)}{\partial T} \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} \cdot V_i \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

En exprimant la pression de vapeur saturante sous la forme  $P_x^s(T) = A e^{B_x(T)}$  (voir Annexe D), on obtient:

$$\begin{aligned}
 \sum_x \iiint_v H_x \cdot \frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} \cdot dv &= \sum_x H_{i,x} \cdot \frac{\psi_i P_x^s(T_i)}{R T} \cdot V_i \cdot \left( \frac{\partial B_x(T_i)}{\partial T} - \frac{1}{T_i} \right) \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} \\
 &= \sum_x H_{i,x} \cdot \rho_{i,x}^g \cdot V_i \cdot \left( \frac{\partial B_x(T_i)}{\partial T} - \frac{1}{T_i} \right) \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} \quad (3.8)
 \end{aligned}$$

### 3. LE MODÈLE NUMÉRIQUE

---

*Deuxième Terme du membre de droite de l'Eq.(3.6):*  $\frac{\partial P_x^s(T_i)}{\partial r}$  est le terme de gradient de la pression de vapeur saturante de l'espèce  $x$ . Puisqu'on connaît  $P_x^s(T)$  analytiquement, on exprime le gradient en fonction de celui de la température:  $\frac{\partial P_x^s(T_i)}{\partial r} = \frac{\partial P_x^s(T_i)}{\partial T} \cdot \frac{\partial T_i}{\partial r}$ .

Comme cela a été fait pour les coefficients de diffusion de la chaleur en utilisant l'Eq. (3.3), on interpole les quantités  $\Theta_{i,x} = G_{i,x} \cdot \frac{\partial P_x^s(T_i)}{\partial T}$  (qui apparaissent dans le terme de divergence et qui sont uniquement connues au centre de la cellule) en leurs valeurs  $\theta_{i,x}$  exprimées au sommet de la cellule, afin d'assurer la conservation du flux de matière.

La composante radiale de l'intégration donne alors pour chaque volatil:

$$\sum_x \iiint_v H_x \cdot \nabla \cdot \left( \Theta_{i,x} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) dv = \sum_x H_{i,x} \cdot 4\pi \left[ r_i^2 \cdot \theta_{i,x} \cdot \frac{\partial T_i}{\partial r} - r_{i+1}^2 \cdot \theta_{i+1,x} \cdot \frac{\partial T_{i+1}}{\partial r} \right] \quad (3.9)$$

L'intégration spatiale sur le volume de contrôle  $i$  du terme  $Q_x^{cr}$  donne  $Q_x^{cr} \cdot V_i$ .

**Intégration spatiale du terme de chaleur sensible  $Y_{chs}$ :** En utilisant une méthode identique à l'intégration du terme  $\rho_x^g$  dans l'Eq. (3.6), on obtient:

$$\sum_x \iiint_v \frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} \cdot C_{v,x}^g \cdot \Delta T \cdot dv = \sum_x \rho_{i,x}^g \cdot V_i \cdot \left( \frac{\partial B_x(T_i)}{\partial T} - \frac{1}{T_i} \right) \cdot C_{v,x}^g \cdot \Delta T \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} \quad (3.10)$$

L'intégration spatiale du terme  $Y_{cr}$  donne  $Y_{cr} \cdot V_i$ .

**Expression Finale de l'intégration spatiale de l'équation de conservation de l'énergie (Eq.2.1).** Finalement, comme résultat de l'intégration spatiale de l'Eq. (2.1), on obtient l'équation de conservation de l'énergie à un pas de temps donné:

$$\begin{aligned} \rho_i \cdot c_i \frac{\partial T_i}{\partial t} &= \frac{4\pi}{V_i} \left[ r_i^2 \cdot \Phi_i \cdot \frac{\partial T_i}{\partial r} - r_{i+1}^2 \cdot \Omega_{i+1} \cdot \frac{\partial T_{i+1}}{\partial r} \right] \\ &- \sum_x \rho_{i,x}^g \cdot \left( \frac{\partial B_x(T_i)}{\partial T} - \frac{1}{T_i} \right) \cdot \left( H_{i,x} - C_{v,x}^g \cdot \Delta T \right) \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} \\ &+ \sum_x H_{i,x} \cdot Q_{i,x}^{cr} + Y_{cr,i} \end{aligned} \quad (3.11)$$

avec

$$\Phi_i = k_i + \sum_x H_{i,x} \cdot \theta_{i,x} \quad (3.12)$$

et

$$\Omega_{i+1} = k_{i+1} + \sum_x H_{i,x} \cdot \theta_{i+1,x} \quad (3.13)$$

où  $\theta_{i,x}$  et  $k_i$  sont définis à l'interface des couches  $i$  et  $i - 1$ , comme expliqué ci-avant.

### 3.2.2 Intégration Temporelle

Les équations (2.1) et (2.27) sont non linéaires et la meilleure technique pour les résoudre serait d'utiliser une méthode implicite qui détermine itérativement les valeurs de  $T$  et  $P$  pour chaque pas temporel. Cependant, cette méthode nécessite d'effectuer plusieurs itérations sur un même pas de temps, ce qui augmente considérablement le temps de résolution d'un tel système. On choisit donc d'utiliser la méthode prédictor-correcteur utilisée initialement par Espinasse et al. (1991). Ce schéma d'intégration convient parfaitement dans le cadre d'évolutions thermodynamiques monotones du noyau au cours du temps. Une discussion des différentes méthodes d'intégration temporelle des équations de conservation peut être trouvée dans Patankar (1980), Huebner et al. (2006) et Prialnik et al. (2004). Ici, je rappelle simplement le schéma d'intégration et donne quelques détails. L'idée du schéma prédictor-correcteur est de déterminer en deux phases successives la température de la matrice solide et la pression de chaque espèce chimique  $x$  à l'instant  $t$  pour chaque pas de temps  $\Delta t$ . On estime dans une première étape les valeurs de  $T$  et  $P$  au pas de temps  $\frac{\Delta t}{2}$  pour chaque cellule (prédictor). La connaissance de  $P^{\Delta t/2}$  et  $T^{\Delta t/2}$  nous permet de déterminer les valeurs des coefficients non linéaires ( $G, g$ ), ( $K, k$ ) et ( $\Theta_{i,x}, \theta_{i,x}$ ) au pas de temps courant  $\frac{\Delta t}{2}$ . Ces valeurs sont alors utilisées pour résoudre les équations (2.1) et (2.27) avec le pas de temps courant  $\Delta t$  (correcteur).

Je donne ci-après l'intégration temporelle de l'Eq. (3.11) sur un pas de temps  $n \cdot \Delta t$ , avec  $n = \frac{1}{2}$  pour le prédictor et 1 pour le correcteur:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+n\Delta t} \rho_i \cdot c_i \frac{\partial T_i}{\partial t} \cdot dt &= \frac{4\pi}{V_i} \cdot \int_t^{t+n\Delta t} \left[ r_i^2 \cdot \Phi_i \cdot \frac{\partial T_i}{\partial r} - r_{i+1}^2 \cdot \Omega_{i+1} \cdot \frac{\partial T_{i+1}}{\partial r} \right] \cdot dt \\ &- \int_t^{t+n\Delta t} \sum_x H_{i,x} \cdot \rho_{i,x}^g \cdot \left( \frac{\partial B_x(T_i)}{\partial T} - \frac{1}{T_i} \right) \cdot \left( 1 - \frac{C_{v,x}^g \cdot \Delta T}{H_{i,x}} \right) \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} \cdot dt \\ &+ \int_t^{t+n\Delta t} \left( \sum_x H_{i,x} \cdot Q_{i,x}^{cr} + Y_{cr,i} \right) \cdot dt \end{aligned} \quad (3.14)$$

Pour résoudre cette équation, on a besoin de connaître l'évolution temporelle du gradient de température durant le laps de temps  $n \cdot \Delta t$ . A cette fin, on remplace

ce gradient par une combinaison linéaire des gradients de température connus et recherchés pondérés par un paramètre  $f$  qui prend une valeur comprise entre 0 et 1 suivant le type de schéma de résolution choisi:

$$\Gamma_i = \left[ f \cdot \left( \frac{\partial T_i}{\partial r} \right)^{t+n\Delta t} + (1-f) \cdot \left( \frac{\partial T_i}{\partial r} \right)^t \right]. \quad (3.15)$$

Comme résultat de l'intégration temporelle, on obtient l'équation finale:

$$\begin{aligned} \rho_i \cdot c_i^{t+m\Delta t} \cdot [T_i^{t+n\Delta t} - T_i^t] &= \frac{4\pi}{V_i} \left[ r_i^2 \cdot \Phi_i^{t+m\Delta t} \cdot \Gamma_i - r_{i+1}^2 \cdot \Omega_{i+1}^{t+m\Delta t} \cdot \Gamma_{i+1} \right] \cdot n \cdot \Delta t \\ &- \left( \sum_x H_{i,x} \cdot \rho_{i,x}^g \cdot \left( \frac{\partial B_x(T_i)}{\partial T} - \frac{1}{T_i} \right) \cdot \left( 1 - \frac{C_{v,x}^g \cdot \Delta T}{H_{i,x}} \right) \right)^{t+m\Delta t} \cdot [T_i^{t+n\Delta t} - T_i^t] \\ &+ \left( \sum_x H_{i,x} \cdot Q_{i,x}^{cr} + Y_{cr,i} \right)^{t+m\Delta t} \cdot n \cdot \Delta t \end{aligned} \quad (3.16)$$

avec  $m = 0$  pour le prédicteur et  $\frac{1}{2}$  pour le correcteur.

Pour le prédicteur, nous choisissons de prendre un schéma totalement implicite ( $f = 1$ ), tandis que pour le correcteur, nous utilisons le schéma de Cranck-Nicolson qui est une méthode semi-implicite ( $f = 1/2$ ). Les deux schémas numériques sont totalement stables mathématiquement. Le schéma prédicteur est précis au premier ordre en temps et prédit une bonne valeur des variables tant que le pas de temps  $\Delta t$  est petit <sup>1</sup> (Patankar, 1980; Huebner et al., 2006; Prialnik et al., 2004). Le correcteur est précis au second ordre en temps mais la convergence vers une solution physique acceptable n'est assurée que par le respect d'une condition qui stabilise le schéma numérique (Patankar, 1980):  $\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \leq 1$ . Le mélange des schémas totalement implicite et semi-implicite améliorent la stabilité et la précision du schéma global.

En développant chaque terme de l'Eq. (3.16), on obtient une matrice tridiagonale qui prend la forme:

$$a_i \cdot T_{i-1}^{t+n\Delta t} + b_i \cdot T_i^{t+n\Delta t} + c_i \cdot T_{i+1}^{t+n\Delta t} = d_i. \quad (3.17)$$

Pour chaque couche  $i$  comprise entre 1 et  $NC - 1$ , on peut résoudre l'Eq. (3.17) à l'aide d'un Algorithme qui inverse les matrices tridiagonales (TDMA; Patankar, 1980) décrit en Annexe C.

Suivant le même schéma de résolution, l'équation de conservation (2.27) pour chaque espèce  $x$  rappelée ci-dessous est transformée en système tridiagonal, avec la pression  $P_x$  en lieu et place de  $T$  dans l'Eq. (3.17):

---

<sup>1</sup>Sa valeur dépend de l'utilisation. La méthode est stable pour tous les pas de temps mais l'erreur sur chaque pas de temps est d'ordre  $(\Delta t)^2$ .

$$\frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} = \nabla \cdot (G_x \cdot \frac{\partial P_x}{\partial r}) + Q_g \quad (\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$$

On rappelle que l'interface de sublimation d'une espèce  $x$  sépare le noyau en deux zones différentes. Sous l'interface, l'Eq. (2.1) dans son intégralité est résolue avec tous les termes sources et puits de matière tandis que la pression de l'espèce  $x$  dans l'Eq. (2.27) est celle de la pression de vapeur saturante  $P_x^s$ , une fonction de  $T$ . Le terme source/puits de matière  $Q_x$  dans l'Eq. (2.27) est alors explicitement calculé à partir de  $T$ ,  $P_x^s$  et son gradient (voir Eq. 3.6). Au dessus de l'interface, le terme  $Q_x$  correspondant à l'espèce  $x$  dans l'Eq. (2.27) disparaît et le terme entier de l'Eq. (3.6) disparaît de l'Eq. (3.16) pour l'espèce  $x$  considérée uniquement. L'Eq. (2.27) est alors résolue entre la surface et l'interface de sublimation de l'espèce  $x$ , tandis que l'Eq. (2.1) est résolue de la surface au centre du noyau, avec les changements des termes mentionnés ci-dessus.

L'échelle de temps de la diffusion des différentes espèces  $x$  en phase gazeuse à travers la matrice poreuse est beaucoup plus petite que celle de la diffusion thermique (Orosei et al., 1999; Prialnik et al., 2004; Huebner et al., 2006). Il est difficile de déterminer un pas de temps de diffusion commun à l'ensemble des transferts thermique et de masse sans augmenter considérablement le temps de résolution du système. Pour pallier ce problème, Orosei et al. (1999) ont proposé de résoudre l'équation de conservation de masse avec un pas de temps  $\Delta t_g$  différent de celui utilisé pour la résolution de l'équation de conservation de l'énergie ( $\Delta t$ ). Le pas de temps  $\Delta t_g$  est déterminé à partir du plus petit temps de diffusion du gaz  $t_{i,x}^g$  à travers une couche donnée. Le temps de diffusion de la phase gazeuse d'une espèce  $x$  à travers une couche  $i$  est donné par le rapport de l'épaisseur  $\Delta r_i$  de cette couche et de la vitesse  $V_{i,x}^g$  du gaz dans celle-ci:

$$t_{i,x}^g = \frac{\Delta r_i}{V_{i,x}^g} \quad (3.18)$$

où la vitesse  $V_{i,x}^g$  du flux de la phase gazeuse de l'espèce  $x$  à travers une couche  $i$  est égale à:

$$V_{i,x}^g = \frac{\left| G_{i,x} \cdot \frac{\partial P_{i,x}}{\partial r} \right|}{\rho_{i,x}^g} \quad (3.19)$$

où  $\left| G_{i,x} \cdot \frac{\partial P_{i,x}}{\partial r} \right|$  est le flux de gaz  $x$  à travers la couche  $i$  et  $\rho_x^g$  la densité molaire du gaz  $x$  dans cette couche.

Le temps total  $t_x^{tot}$  nécessaire pour que toute la phase gazeuse d'une espèce  $x$

### 3. LE MODÈLE NUMÉRIQUE

---

diffuse de l'interface vers la surface est égal à la somme des  $t_{i,x}^g$  de chaque couche  $i$  située entre la surface et l'interface:

$$t_x^{tot} = \sum_{i=1}^{interface-1} t_{i,x}^g \quad (3.20)$$

On distinguera deux états de diffusion du gaz en fonction du temps  $t_x^{tot}$  que met le gaz  $x$  pour diffuser à travers la matrice poreuse (Orosei et al., 1999):

1. si  $t_x^{tot} < f_{tg} \cdot \Delta t$ , ( $f_{tg}$  est un paramètre qu'on impose et qui est plus petit que 1) alors on considère que la phase gazeuse d'une espèce  $x$  atteint l'état d'équilibre avant que la température ne change au cours du temps d'intégration  $\Delta t$ . La diffusion du volatil est comme étant dans un état stationnaire et le membre de droite de l'équation de conservation de la masse (Eq.2.27) est égal à 0.
2. si  $t_x^{tot} \geq f_{tg} \cdot \Delta t$ , alors on résout un nombre entier  $Ndtg$  fois l'équation de conservation de la masse avec le pas de temps  $\Delta t_g$  tel que  $Ndtg = \frac{\Delta t}{\Delta t_g}$  (et  $\Delta t_g < \min(t_{i,x}^g)$ ).

Pour les détails au sujet de la discrétisation de l'équation de conservation de la masse, le lecteur est invité à lire l'Annexe A.

Pour appliquer l'algorithme TDMA aux équations de conservation (2.1) et (2.27), on impose des conditions aux limites spatiales du noyau. A la surface, la température est donnée par l'Eq. (2.24) (condition limite de Dirichlet). Au centre du noyau, on impose un flux de chaleur égal à zéro (condition de Neumann):

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (3.21)$$

Si une espèce  $x$  est présente sous la forme solide dans l'ensemble du noyau, alors on ne résout pas l'équation de conservation de la masse (2.27), on impose la pression d'équilibre  $P_x = P_x^s(T)$  (même en surface si l'espèce  $y$  est présente) et seule l'équation (3.6) est résolue. Si au contraire, il existe une interface de sublimation pour les espèces  $x$ , alors l'Eq. (2.27) est résolue entre la surface du noyau et l'interface de sublimation. Ici, on impose une condition limite de Dirichlet aux deux extrémités du domaine spatial de résolution de l'équation de conservation de la masse. A la surface, on impose:

$$P_x = 0 \quad (Pa) \quad (3.22)$$

et à l'interface de sublimation, on impose la pression d'équilibre de la phase gazeuse avec la phase solide, soit:

$$P_x = P_x^s(T) \quad (Pa) \quad (3.23)$$

A la fin de chaque pas de temps  $\Delta t$ , on calcule la variation de masse par unité de volume de chaque espèce  $x$  dans toutes les couches en utilisant  $Q_x$ :

$$\Delta \cdot \rho_{i,x} = M_x \cdot Q_{i,x} \cdot \Delta t \quad (kg \cdot m^{-3}) \quad (3.24)$$

Pour une représentation physique plus réaliste du noyau, la porosité et le rayon des pores sont également recalculés pour chaque couche  $i$ :

$$\psi_i = 1 - \sum_l \frac{\rho_{i,l}}{\rho_l^c} \quad (3.25)$$

$$r_{p,i} = r_p^i \sqrt{\frac{\psi_i}{\psi^i}} \quad (m) \quad (3.26)$$

où  $\rho_{i,l}$  et  $\rho_l^c$  sont la masse par unité de volume de la phase solide dans la cellule  $i$  et la masse compacte par unité de volume du composant  $l$ , et  $\psi^i$  et  $r_p^i$  sont la porosité et le rayon des pores initiaux de la cellule  $i$ .

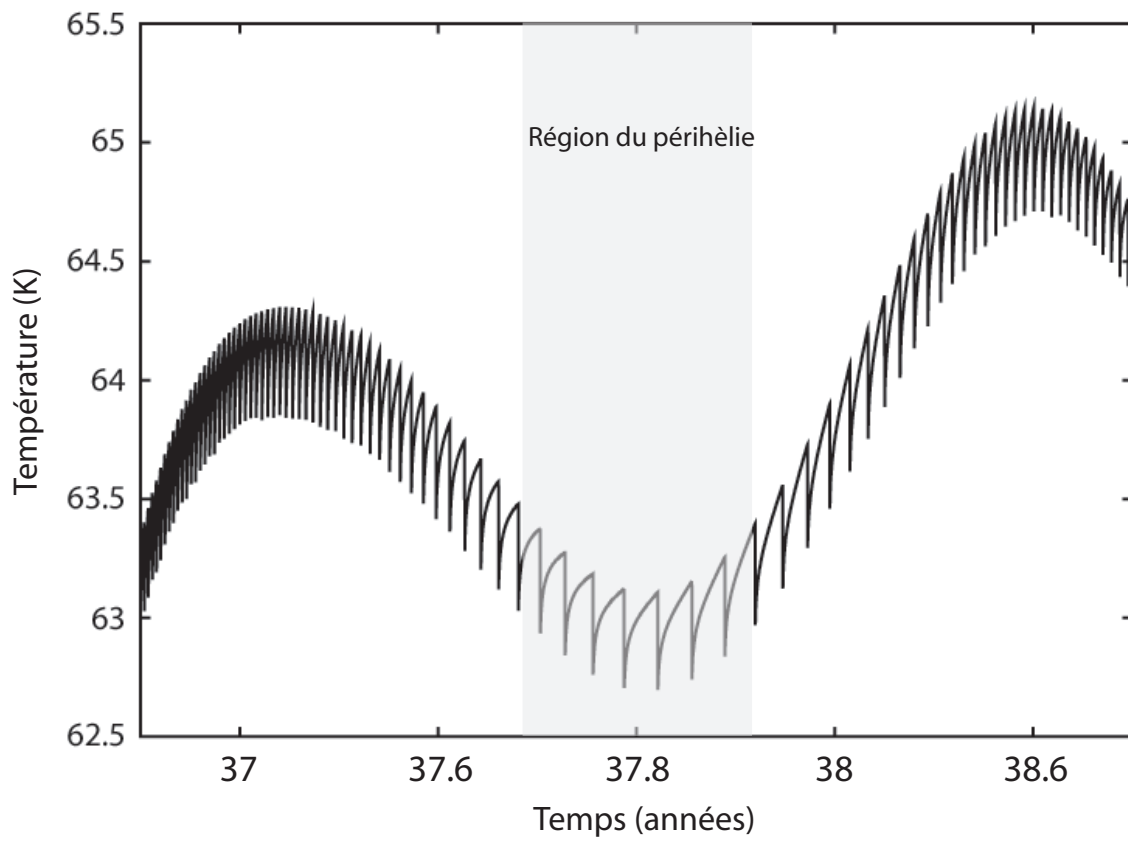
A la fin du correcteur, quand toutes les variables sont recalculées, l'interface du front de sublimation d'une espèce  $x$  considérée se déplace vers le centre du noyau continuellement suivant les prescriptions d'Orosei et al. (1999):

$$\Delta R_i = \frac{G_{i,x} \cdot \frac{\partial P_{i,x}}{\partial r}}{\rho_{i,x}} \cdot \Delta t \quad (m) \quad (3.27)$$

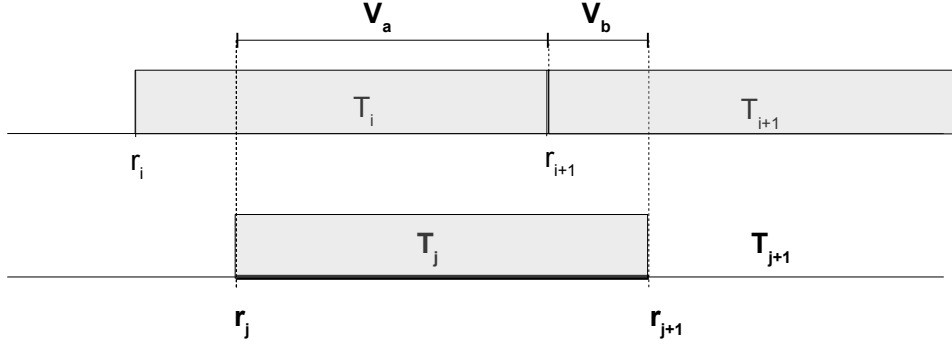
où  $\Delta R_i$  est la variation positionnelle de l'interface. La taille et le nombre de cellules sont alors recalculés à chaque fin de pas de temps. L'objectif est d'éviter que la taille des cellules ne change trop brutalement avec le temps à une position donnée. On évite ainsi le changement abrupt des gradients de pression  $P_x$  et de température  $T$ , et on assure la stabilité du calcul. La figure 3.3 qui montre la température du front de sublimation du CO dans le modèle d'Espinasse et al. (1991) illustre parfaitement les oscillations créées lors du changement abrupt de la couche d'interface. Ce changement de couche entraîne une modification brutale des conditions physico-chimiques ( $T$ ,  $P$ ,  $\rho$ ...) régnant dans la nouvelle couche d'interface, ainsi qu'un changement des gradients de température et de pression (les deux étant liés) qui influent sur le flux de masse en sortie pour l'espèce chimique correspondante, et crée les conditions d'une instabilité numérique.

Afin d'assurer l'exacte conservation de l'énergie et de la masse dans le noyau, les nouvelles températures de chaque cellule  $i$  sont calculées à partir des valeurs précédentes par interpolation. Soit  $j$  la nouvelle cellule qui recouvre les cellules précédentes  $i$  et  $i + 1$  (voir Fig. 3.4). L'énergie interne de la nouvelle couche  $j$  est





**Fig. 3.3** - Evolution temporelle de la température de la couche d'interface du modèle d'Espinasse et al. (1991).



**Fig. 3.4** - Reconstruction de la grille après déplacement de l'interface.

déterminée à partir des capacités calorifiques volumiques des fractions volumiques  $V_a$  et  $V_b$  des couches  $i$  et  $i + 1$  respectivement. La nouvelle température  $T_j$  de l'ensemble  $V_a + V_b$  est calculée de manière à ce que le changement de l'énergie interne de la fraction volumique  $V_a$  de la couche  $i$  soit exactement l'opposé de celui de la fraction volumique  $V_b$  de la cellule  $i + 1$ , tout en conservant les masses volumiques des phases solides et gazeuses:

$$\int_{T_i}^{T_j} \left( \rho_i \cdot c(T) - \sum_x H_x \cdot \frac{\partial \rho_{i,x}^g}{\partial T} \right) \cdot V_a \cdot dT = - \int_{T_{i+1}}^{T_j} \left( \rho_{i+1} \cdot c(T) - \sum_x H_x \cdot \frac{\partial \rho_{i+1,x}^g}{\partial T} \right) \cdot V_b \cdot dT \quad (3.28)$$

Lorsqu'une phase gazeuse devient trop abondante ou insuffisante, on force la condensation ou la sublimation de manière à respecter la valeur de la pression de saturation qui ne dépend que de  $T$ . Cette méthode est en accord avec la première méthode d'interpolation proposée par Orosei et al. (1999) qui déterminait la nouvelle température de la cellule par interpolation linéaire. Ils avaient également proposé de conserver l'ancienne température plutôt que de la recalculer. Cependant, cette méthode a montré une divergence de comportement thermique due à l'augmentation de l'énergie interne.

### 3.3 Comparaison du bilan de masse avec d'autres modèles

Il est difficile de comparer des méthodes numériques différentes tant les discrétisations spatiales et le schéma mathématique sont différents. Néanmoins, si l'erreur

sur la conservation de masse obtenue avec notre modèle est plus petite que celle obtenue avec les modèles d’Espinasse et al. (1991) et d’Orosei et al. (1999) qui utilisent la méthode des différences finies, alors on peut dire que les modifications apportées à notre modèle améliorent la conservation de la masse. Ces modèles d’Espinasse et al. (1991) et d’Orosei et al. (1999) ne sont pas très récents et ne sont pas mis à jour sur la modélisation physique (absence d’incorporation de grains de poussières dans le modèle d’Espinasse et al., 1991). Toutefois, on pense que le schéma numérique et le traitement mathématique des processus physiques utilisés pour résoudre les équations de conservation importent tout autant que la prise en compte de certains aspects physiques. Comme cela a été mentionné au début de ce chapitre, la méthode numérique et le traitement mathématique utilisés par les deux modèles testés sont encore utilisés par certains modèles de noyau cométaire et nous pensons que notre comparaison avec ces deux modèles peut alors être rapportée aux autres modèles existants.

#### 3.3.1 Paramètres d’entrée

Les deux modèles publiés en 1991 et 1999 utilisent des compositions physico-chimiques différentes (présence de poussière, abondance des volatils, piégeage de ceux-ci dans la matrice, glace d’eau initialement cristalline ou amorphe...), qui aboutissent à une évolution physico-chimique différente des noyaux. Afin de pouvoir comparer exactement nos modèles, nous adaptons le notre aux conditions physico-chimiques initiales des modèles d’Espinasse et al. (1991) et d’Orosei et al. (1999). Parallèlement, nous modifions les coefficients de conductivité et de diffusion de manière à ce que tous ces modèles aient les mêmes paramètres d’entrée. L’évolution dynamique du noyau a elle aussi une influence non négligeable sur l’évolution thermique et physico-chimique interne de l’objet tant elle conditionne l’énergie solaire qu’il reçoit. Nous avons décidé de n’inclure que le CO dans les modèles, parce qu’il est le volatil le plus observé dans les noyaux cométaires (Bockelée-Morvan et al., 2004). Comme il sublime à très basse température et que H<sub>2</sub>O est le dernier des volatils à sublimer, nous étudions l’évolution physico-chimique du noyau avec une excentricité qui permette des variations de température à l’intérieur du noyau qui chevauchent les domaines de température de sublimation de ces deux volatils. A cette fin, nous avons décidé d’effectuer notre comparaison avec une orbite de type “Halley”. Le tableau 3.1 donne les paramètres orbitaux que nous avons utilisé pour effectuer cette comparaison. Ils permettent une large variation de température de surface (de  $\sim 40$  K à l’aphélie à  $\sim 200$  K au périhélie) et donc l’étude de la conservation de masse dans des conditions thermodynamiques qui évoluent.

Le tableau 3.2 donne les paramètres physiques et la composition initiale de tous les modèles. Notre premier modèle de noyau cométaire (modèle 1) s’adapte aux paramètres physico-chimiques du modèle d’Espinasse et al. (1991): le noyau a une structure matricielle composée exclusivement de glace initialement amorphe (sans

poussière), avec du CO condensé sur les parois des pores et piégé dans la matrice de glace. Bien qu'un modèle ne contenant pas de poussière soit peu réaliste, cette condition physique n'est pas l'objet de notre étude puisque nous nous intéressons uniquement à la conservation de la masse: quelles que soient les conditions physico-chimiques initiales, les lois de conservations doivent être assurées pour notre modèle comme pour celui d'Espinasse et al. (1991).

Notre second modèle de noyau cométaire (modèle 2), quant à lui, s'adapte aux paramètres de celui d'Orosei et al. (1999): le noyau a une structure matricielle comprenant de la poussière et de la glace initialement cristalline avec du CO condensé sur les parois des pores.

Les valeurs de nos paramètres pourraient correspondre à celles de la comète Halley mais elles correspondent surtout à des valeurs plausibles applicables à un large choix de comètes. Notre objectif ici est de comparer l'erreur à la conservation de masse de tous les modèles dans des simulations ayant des paramètres physiques réalistes.

Le tableau 3.3 donne les paramètres de capacité calorifique, de conductivité thermique, de chaleur latente de sublimation et de cristallisation pour les différentes phases présentes dans le noyau. La chaleur spécifique et la conductivité thermique du CO ne sont pas connues dans les conditions de température et de pression qui nous intéressent et nous utilisons donc les mêmes valeurs que celles de la glace d'H<sub>2</sub>O.

Le tableau 3.4 donne l'expression de la pression de vapeur saturante utilisée pour H<sub>2</sub>O et CO. Il est à noter que l'expression pour le CO est uniquement valide pour des températures en dessous de 62 K (Clayton & Giauque, 1932). Au dessus de cette température, le CO est toujours en phase gazeuse et il est donc inutile de reporter les autres expressions données par Clayton & Giauque (1932).

Les conditions de formation d'une croûte dépendent entre autre du taux de production des différents gaz qui s'échappent du noyau et de la manière dont ils sont éjectés. La croûte tend à isoler l'intérieur du noyau et diminue potentiellement les effets des radiations solaires. Afin d'éviter qu'elle n'influe sur l'évolution thermodynamique du noyau, nous avons désactivé la formation d'une croûte de poussière pour le modèle 2 et celui d'Orosei et al.(1999) (le modèle 1 et celui d'Espinasse et al.(1991) ne contiennent pas de poussière). Cela signifie que les grains de poussière libérés de l'emprise de la matrice de glace seront considérés comme éjectés du noyau.

#### 3.3.2 Résultats

Nous examinons premièrement la dépendance temporelle de la conservation totale de la masse au cours de l'intégration. Pour cela, nous calculons l'erreur sur la

### 3. LE MODÈLE NUMÉRIQUE

---

**Tab. 3.1** - *Paramètres orbitaux des modèles de noyau cométaire.*

Paramètre	Valeur
Demi-grand axe	17,93 AU
Excentricité	0,967
Distance au Périhélie	0,59 AU
Distance à l'Aphélie	35,27 AU

**Tab. 3.2** - *Composition initiale et caractéristiques physiques des noyaux.*

Paramètre	Modèle 1	Modèle 2
Rayon (km)		1
Température initiale (K)		30
$\epsilon$		1
$Al$		0,05
Structure initiale de la glace	Amorphe	Cristalline
Rapport Dust/ice $J_{dust}$ (mass)	0	1
$J_{CO}$ (mol) in pores	5%	10%
$J_{CO}$ (mol) in water ice	10%	0%
$\psi^i$		50%
$r_p^i$ (m)		$10^{-6}$
$\rho_{H_2O}$ (kg.m <sup>-3</sup> )		920
$\rho_{dust}$ (kg.m <sup>-3</sup> )		1000

masse totale de CO dans le noyau. On définit ainsi un paramètre sans dimension  $Z$  qui compare l'erreur totale de la conservation de la masse à la masse totale de CO éjectée depuis le début de la simulation:

$$Z = \frac{M^0 - M^t - M_{ejectas}^{total}}{M_{ejectas}^{total}} \quad (3.29)$$

où  $M^0$  est la masse totale initiale de CO,  $M^t$  la masse totale courante de CO au temps  $t$  et  $M_{ejectas}^{total}$  la masse totale de CO éjectée depuis le début de l'intégration numérique.

Les figures 3.5 et 3.6 montrent l'erreur  $Z$  sur la conservation de masse en valeur absolue depuis le début de la simulation pour les trois modèles de noyaux cométaires.

### 3.3 COMPARAISON DU BILAN DE MASSE AVEC D'AUTRES MODÈLES

**Tab. 3.3** - Paramètres Physiques des composants dans les noyaux.

Paramètre	Valeur
Capacité Thermique (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	
$C_{\text{H}_2\text{O}}$	7,49 $T+90$ <sup>(a)</sup>
$C_{\text{dust}}$	1200 <sup>(c)</sup>
Conductivité Thermique (W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	
$K_{\text{H}_2\text{O}} \text{ glace amorphe}$	$2,34 \cdot 10^{-3} \cdot T + 2,8 \cdot 10^{-2}$ <sup>(b)</sup>
$K_{\text{H}_2\text{O}} \text{ glace cristalline}$	$567 / T$ <sup>(b)</sup>
$K_{\text{dust}}$	4,2 <sup>(c)</sup>
Chaleur Latente (J.mol <sup>-1</sup> )	
$H_{\text{H}_2\text{O}}$	$51983,9 - 20,0904 \cdot T$ <sup>(d)</sup>
$H_{\text{CO}}$	8215,2 <sup>(e)</sup>
$H_{cr}$	1620 <sup>(f)</sup>

<sup>(a)</sup>Giauque & Stout (1936), <sup>(b)</sup>Klinger (1980), <sup>(c)</sup>Ellsworth & Schubert (1983),  
<sup>(d)</sup>Delsemme & Miller (1971), <sup>(e)</sup>Clayton & Giauque (1932), <sup>(f)</sup>Ghormley (1968).

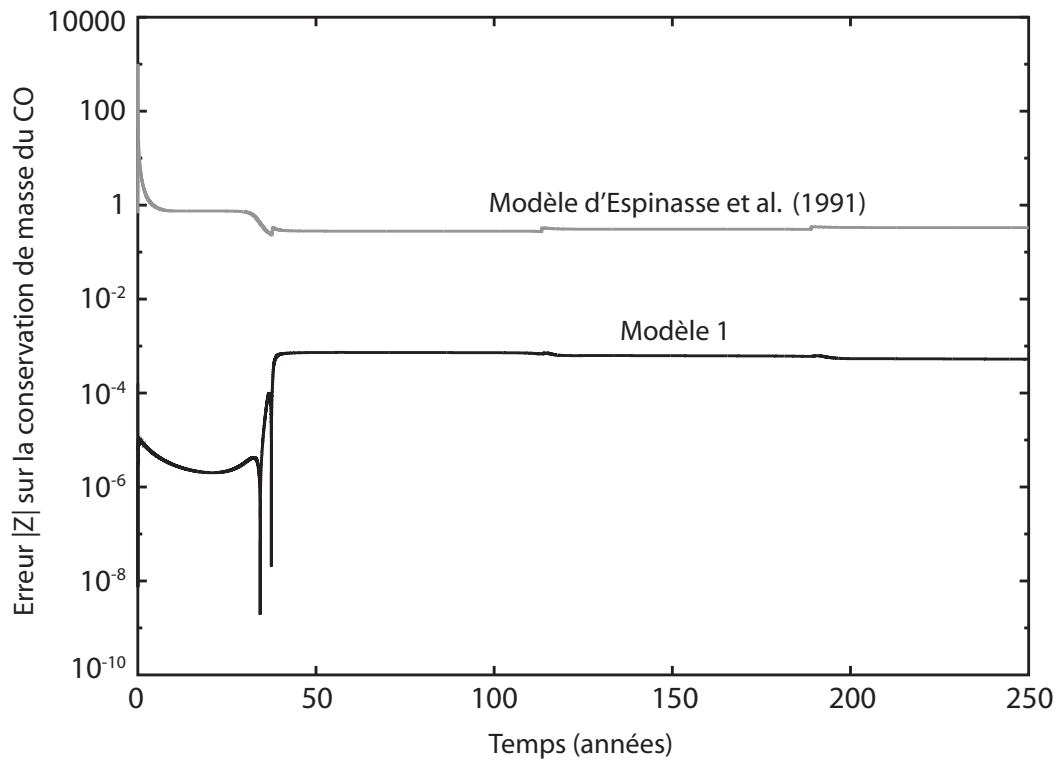
**Tab. 3.4** - Pression de Vapeur saturante des volatils.

Pression de sublimation(Pa)	Expression
H <sub>2</sub> O	$133,32 \exp\left(\frac{-5631,1205}{T} + 18,953 \log_{10}(T) - 3,86144910 \cdot 10^{-2} T + 2,7749410 \cdot 10^{-5} T^2 - 15,558956\right)$ <sup>(a)</sup>
CO ( $T \leq 61,55K$ )	$1333,2 \exp\left(\frac{-962,9}{T} + 9,503 \log_{10}(T) + 3,3932 - 0,0604T\right)$ <sup>(b)</sup>

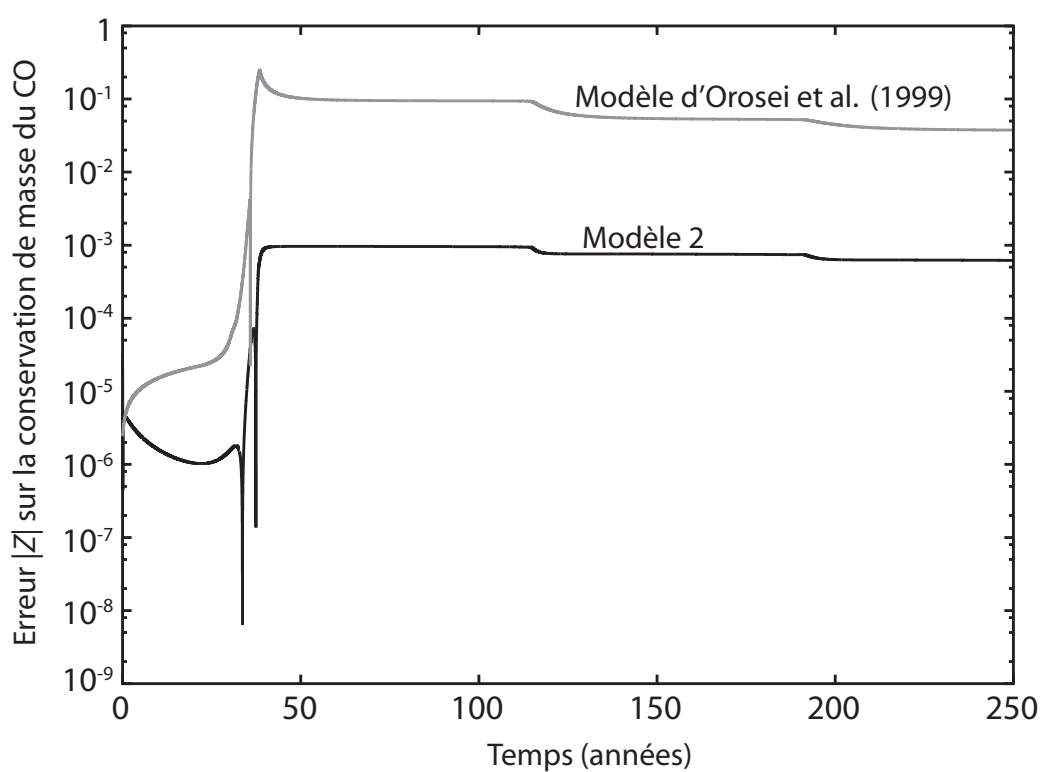
<sup>(a)</sup>Washburn (1928), <sup>(b)</sup>Clayton & Giauque (1932).

L'altération verticale de la courbe correspond au premier passage du noyau près du périhélie. Après ce premier passage, l'erreur globale  $|Z|$  est stabilisée avec une lente décroissance de la courbe. Comparé aux autres, l'erreur globale  $|Z|$  de notre modèle est meilleure de plusieurs ordres de grandeur, excepté avant le premier passage au périhélie dans le cas du modèle d'Orosei et al. (1999) où l'amélioration n'est que d'un ordre de grandeur. En particulier, l'erreur sur la production de CO de notre modèle reste en dessous de  $10^{-3}$  tandis que les erreurs respectives des modèles d'Espinasse et al. (1991) et d'Orosei et al. (1999) sont de l'ordre de 0.3-0.4 et 0.05-0.1.

Nous définissons maintenant un deuxième paramètre  $Z'$  sans dimension qui compare l'erreur locale (temporelle) de la conservation de masse (à l'instant  $t$ ) à la masse



**Fig. 3.5** - Evolution temporelle de l'erreur relative  $|Z|$  sur la conservation de masse du CO depuis le début de la simulation pour le modèle 1 (tracé noir) et celui d'Espinasse et al. (1991) (tracé gris).



**Fig. 3.6** - Evolution temporelle de l'erreur relative  $|Z|$  sur la conservation de masse du CO depuis le début de la simulation pour le modèle 2 (tracé noir) et celui d'Orosei et al. (1999) (tracé gris).



### 3. LE MODÈLE NUMÉRIQUE

---

de CO éjectée du noyau au même instant  $t$ :

$$Z' = \frac{M^{t-\Delta t} - M^t - M_{ejectas}^t}{M_{ejectas}^t} \quad (3.30)$$

où  $M^{t-\Delta t}$  est la masse totale de CO au pas de temps précédent  $t - \Delta t$ ,  $M^t$  sa valeur courante au temps  $t$  et  $M_{ejectas}^t$  la masse de CO éjectée durant l'intervalle de temps  $t - \Delta t$  à  $t$ .

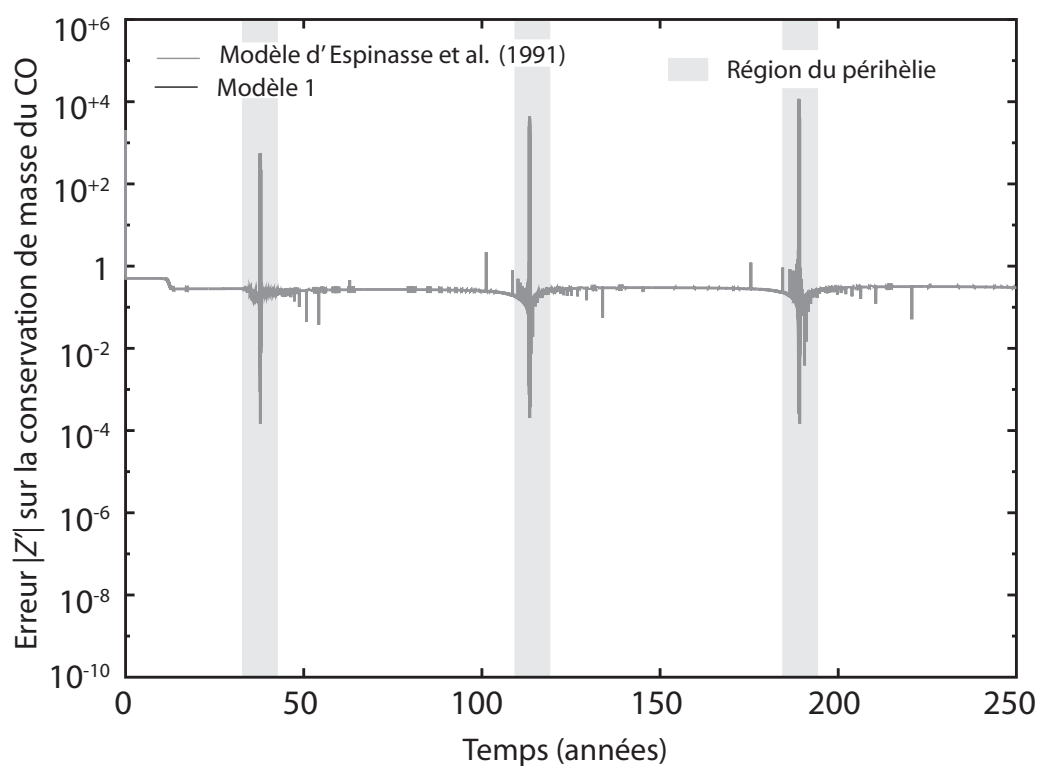
avec  $\sum_{t=0}^t M_{ejectas}^t = M_{ejectas}^{total}$

Ce paramètre donne le niveau de confiance sur le taux courant d'éjection de gaz à la surface du noyau et sur la différenciation chimique courante du noyau à chaque pas de temps  $\Delta t$ . L'évolution temporelle de l'erreur locale  $Z'$  sur la conservation de masse du CO pour les différents modèles est donnée en valeur absolue dans les figures (3.7) et (3.8). La figure (3.7) montre que l'erreur locale  $|Z'|$  du modèle d'Espinasse est toujours comprise entre 0.1 et 1, excepté pour quelques points près du périhélie où l'erreur fluctue entre  $10^{-3}$  et 1000. D'un autre côté, notre erreur locale  $|Z'|$  est globalement plus faible de plusieurs ordres de grandeur que celle d'Espinasse et al. (1991) et n'excède ainsi jamais 0.6%.

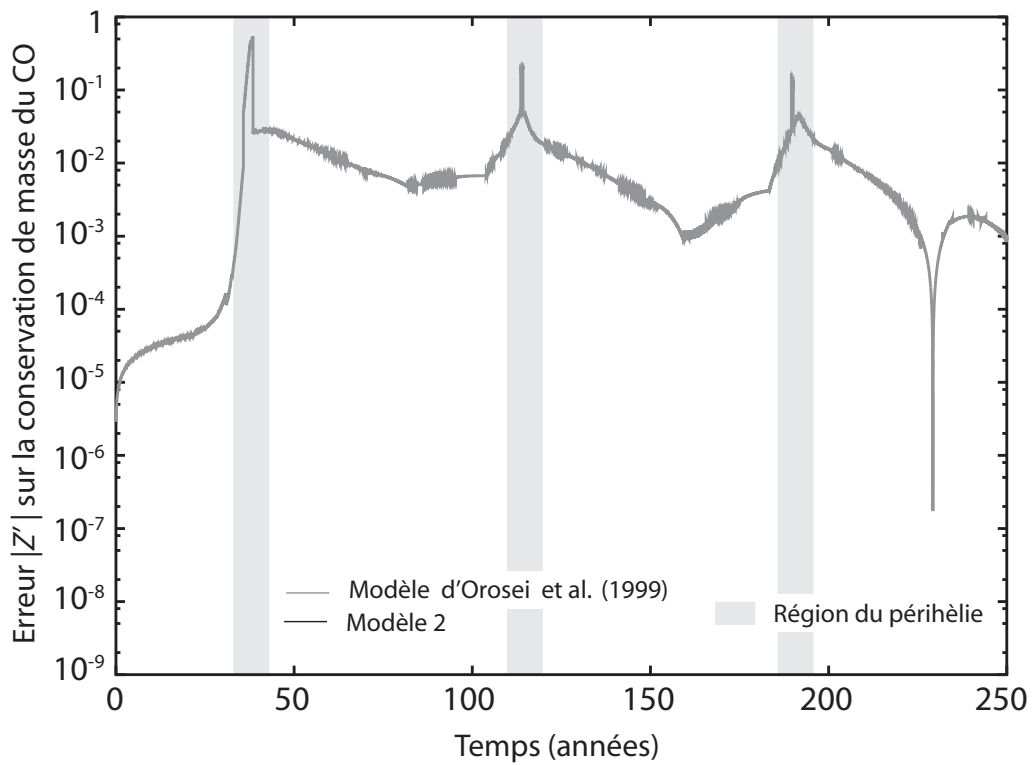
La figure 3.8 montre que erreur locale  $|Z'|$  du modèle d'Orosei et al. (1999) est majoritairement comprise entre  $10^{-3}$  et  $10^{-1}$ . Cependant, quand le noyau cométaire s'approche du périhélie,  $|Z'|$  atteint 0.1-0.5 continuellement. Dans notre modèle,  $|Z'|$  est globalement inférieure d'un ordre de grandeur à celle du modèle d'Orosei et al. (1999), excepté près du périhélie où elle devient inférieure de deux ordres de grandeur. Ainsi, dans notre modèle, elle n'excède jamais 0.5% du flux s'échappant du noyau bien qu'elle augmente de manière similaire au modèle d'Orosei et al. (1999) près du périhélie. Finalement, les larges erreurs globales  $|Z|$  des modèles d'Orosei et d'Espinasse résultent de l'accumulation de leurs erreurs locales respectives  $|Z'|$ .

Pour compléter l'étude, nous fournissons également le flux de CO éjecté du noyau pour tous les modèles à l'instant  $t$ . La Fig. 3.9 compare la production de CO de notre modèle 1 à celui d'Espinasse et al. (1991), tandis que la Fig. 3.10 compare notre modèle 2 à celui d'Orosei et al. (1999). Dans les deux cas, nous observons une forte différence en début de simulation lorsque le noyau passe de l'état thermodynamique initial à l'état d'équilibre thermodynamique avec l'environnement extérieur. Après cette première phase, nous constatons que les taux de production de chaque paire de modèles (modèle 1 et Espinasse et al., 1991; modèle 2 et Orosei et al., 1999) sont similaires, avec des différences de 20 à 30% pour les maxima, et des différences plus étalées temporellement pour les minima (sans considérer les pics vers le bas juste avant le périhélie).

Quand on compare les flux de CO prédits à un instant donné pour chaque paire



**Fig. 3.7** - Evolution temporelle de l'erreur relative  $|Z'|$  sur la conservation de masse du CO à chaque pas de temps  $\Delta t$  pour le modèle 1 (tracé noir) et celui d'Espinasse et al. (1991) (tracé gris).



**Fig. 3.8** - Evolution temporelle de l'erreur relative  $|Z'|$  sur la conservation de masse du CO à chaque pas de temps  $\Delta t$  pour le modèle 2 (tracé noir) et celui d'Orosei et al. (1999) (tracé gris).

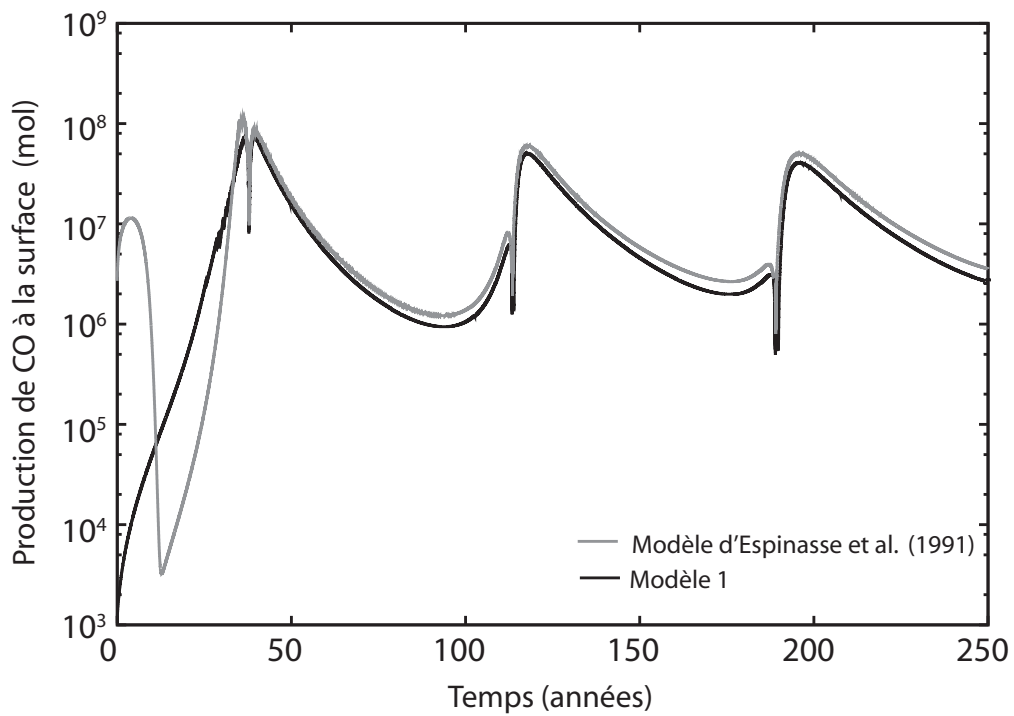
de modèles, on constate un décalage temporel qui s'accroît avec le temps entre les maxima et les minima des taux de production, augmentant ainsi artificiellement la différence entre les extrema des différents noyaux. Cette différence entre les flux peut être de plusieurs facteurs parce que la production de CO augmente très rapidement juste avant le passage au périhélie. Quand on compare les Fig. 3.7 à Fig. 3.9 et Fig. 3.8 à Fig. 3.10, nous pouvons voir que les taux de production prédits pour les modèles d'Espinasse et al. (1991) et d'Orosei et al. (1999) sont plus lisses que leurs erreurs locales. Il semble que cela implique que l'erreur est la plupart du temps due à la conservation de la phase solide du CO plutôt qu'aux flux de gaz de CO en sortie du noyau mais cela ne peut pas être prouvé puisque les deux sont liés. En plus du décalage temporel entre les productions des modèles 1 et 2 et ceux d'Espinasse et al. (1991) et d'Orosei et al. (1999), nous avons également une différence dans la stratigraphie du noyau avec une interface (qui sépare la zone exclusivement gazeuse de celle qui comprend les deux phases, condensée et gazeuse, en équilibre) qui migre plus rapidement vers le centre pour les modèles plus anciens. Les deux phénomènes sont reliés à une conservation de l'énergie au bilan incertain qui diminue celui de la masse, et ils créent de cette manière un retour d'énergie positif. Bien que pour les trois périodes orbitales modélisées, nous ne voyions pas de différence très importante entre les taux de production prédits, il est clair que les taux d'Espinasse et al. (1991) et d'Orosei et al. (1999) sont entachés d'erreur. Il est cependant difficile de quantifier cette erreur puisque les modèles évoluent thermodynamiquement de manière différente avec un décalage dans le temps des maxima et des minima des taux de production entre les modèles. Cela montre combien il est important de conserver la masse (et l'énergie) dans un schéma numérique.

Enfin, puisque les modèles décrits ici possèdent quelques faiblesses dans la représentation physique de noyau cométaire (essentiellement l'absence de poussière dans le modèle d'Espinasse et al., 1991 et notre modèle 1, et l'absence de formation d'une croûte de poussière dans tous les modèles), il n'est pas possible de comparer les taux de production obtenus aux observations actuelles.

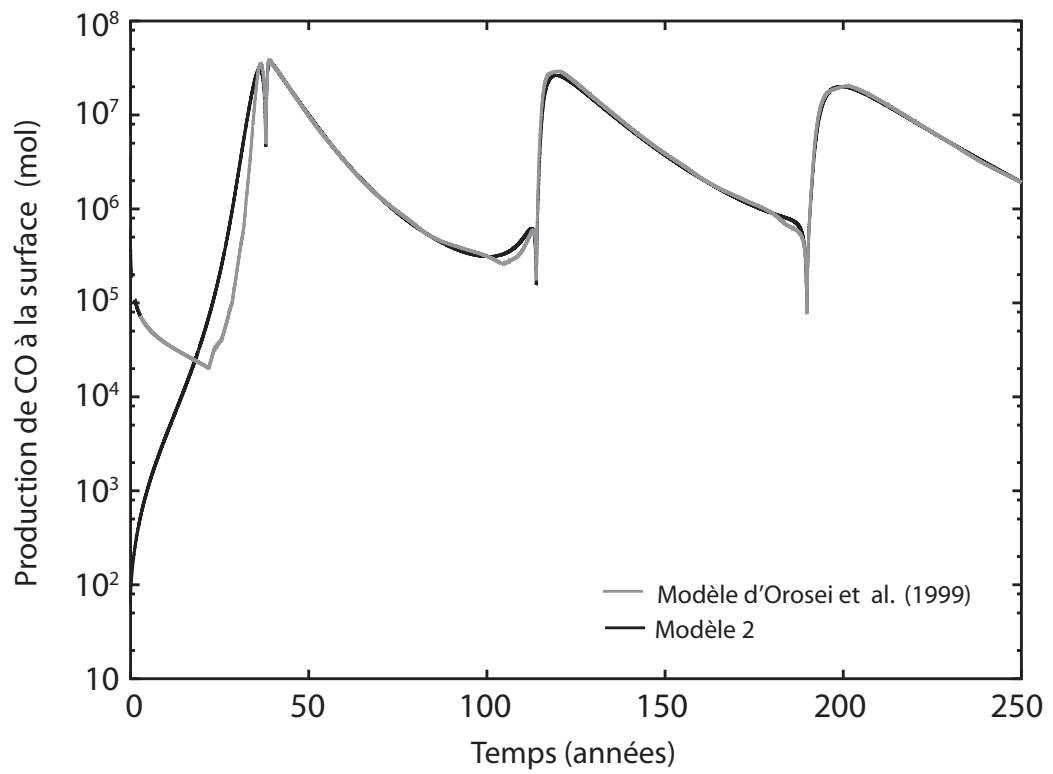
## 3.4 Conclusions

Afin de bien modéliser l'évolution thermo-chimique des noyaux cométaires, il est important de minimiser les erreurs sur la conservation de masse rencontrées à l'intérieur du noyau sur l'ensemble des orbites. En effet, elles affectent la précision des taux de production et l'évolution de la différenciation physico-chimique du noyau.

Nous avons montré que notre modèle, qui utilise la méthode des volumes finis, minimise plus l'erreur globale  $Z$  et l'erreur locale  $Z'$  sur la conservation de masse, que les autres modèles de noyaux cométaires, qui utilisent la méthode des différences finies. Avec une erreur globale  $|Z|$  d'environ 0,1%, nous pensons que la conservation



**Fig. 3.9** - Evolution temporelle de la production de CO en mole pour le modèle 1 (tracé noir) et celui d'Espinasse et al. (1991) (tracé gris).



**Fig. 3.10** - Evolution temporelle de la production de CO en mole pour le modèle 2 (tracé noir) et celui d'Orosei et al. (1999) (tracé gris).

de masse de notre modèle est assez précise pour permettre l'étude à long terme des noyaux cométaires. De plus, la faible valeur de  $|Z'|$  (l'erreur locale), qui n'excède jamais 1% durant nos calculs, nous permet de déduire précisément les taux de production de gaz s'échappant du noyau à un pas de temps donné. Finalement, il devrait être possible maintenant d'obtenir une représentation numérique plus précise de la formation et de l'évolution d'une croûte de poussière en surface du noyau, puisque son évolution est contrôlée par le nombre de grains délivrés à chaque pas de temps par le flux de gaz s'échappant du noyau. De la même manière, la minimisation de  $|Z'|$  peut nous permettre de distinguer les outbursts des artefacts numériques qui peuvent se produire avec l'utilisation des différences finies.

La méthode numérique que nous avons décrit permet la conservation de masse et d'énergie dans les modèles de noyau cométaire. Pourtant, nous n'avons pas présenté explicitement la conservation de l'énergie, car cette quantité dépend implicitement de la conservation de masse. En effet, puisque le terme source/puits de matière  $Q_x$  est pris en compte dans la résolution de l'équation de l'énergie, une erreur dans la détermination de la conservation de la masse affecterait la conservation de l'énergie dans le même sens. D'un autre côté, une erreur sur la conservation de l'énergie ne mènerait pas à une mauvaise détermination de la conservation de la masse dans ces modèles, puisque le changement de phase des volatils est assujéti à la température du milieu. Cela signifierait cependant que la production de gaz et la stratigraphie du noyau seraient incorrectes d'un point de vue énergétique. Malgré tout, puisque les principales données sur les noyaux cométaires sont les flux de matière, la focalisation de ce travail sur la conservation de la matière nous semble justifiée. De plus, puisque la méthode des volumes finis utilisée dans le présent travail pour la résolution des transferts d'énergie et de masse assure la conservation de masse comme nous l'avons montré, alors il est logique de supposer que l'énergie est également conservée.

Il est important de noter que certaines améliorations numériques issues des travaux d'Orosei et al. (1999) ont été incorporées à notre modèle. En particulier, nous avons adopté la représentation continue de la progression de l'interface de sublimation d'une espèce chimique  $x$ , qui permet la stabilisation numérique du calcul. L'utilisation de cette méthode est vitale pour quiconque souhaite conserver une évolution thermodynamique monotone et éviter des fluctuations de température et de pression à l'intérieur du modèle. Finalement, nous pensons que les améliorations que nous avons apportées dans la conservation de la masse bénéficieront à la détermination de l'évolution physico-chimique des noyaux cométaires sur le long terme.

Comme indiqué dans le chapitre 2 et dans cette section, les modèles présentés ici souffrent d'une absence de mise à jour des processus physiques ayant lieu sur le noyau cométaire. En particulier, ces modèles utilisent l'approximation du rotateur rapide dans l'équation bilan de l'énergie en surface (Eq. 2.24), ce qui empêche de modéliser correctement la température de surface et les variations de température journalières dues à la variation d'ensoleillement. Cependant, ce n'est pas un problème lorsque le noyau se situe loin du Soleil ou pour l'intérieur du noyau cométaire sous la couche

de surface. D'autre part, l'utilisation d'un modèle unidimensionnel ne permet pas la simulation des variations d'ensoleillement qui nécessite la prise en compte des transferts thermiques horizontaux. Dans le cas présent, où nous ne formons pas de croûte de poussière, cela a très peu d'effets sur la température maximale de la surface qui ne peut dépasser  $\sim 200$  K car elle est limitée par la sublimation de  $\text{H}_2\text{O}$ .

Finalement, l'approximation du rotateur rapide et l'amélioration de la conservation des quantités physiques (énergie et masse), associée à une meilleure stabilisation numérique du calcul, nous autorisent à utiliser ce modèle pour l'étude à long terme de la différenciation physico-chimique des planétésimaux situés dans la région trans-neptunienne présentée au chapitre suivant.



### 3. LE MODÈLE NUMÉRIQUE

---

# Chapitre 4

## Etude Collisionnelle des Planétésimaux dans la Région Transneptunienne

### Contents

---

<b>4.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>87</b>
<b>4.2</b>	<b>Apport Energétique dans le Noyau Cible</b>	<b>89</b>
4.2.1	Considérations physiques et modélisation de l'apport énergétique	89
4.2.2	Adaptation du Schéma Numérique & Mathématique.	95
<b>4.3</b>	<b>Paramètres</b>	<b>98</b>
<b>4.4</b>	<b>Résultats.</b>	<b>108</b>
4.4.1	Etude de l'influence des différents paramètres pour une seule collision	108
4.4.2	Etude d'une série de collisions	131
<b>4.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>141</b>

---

### 4.1 Introduction

La région transneptunienne pourrait contenir les derniers objets du système solaire dont la composition physico-chimique a été préservée depuis leur formation. En effet, ces objets, éloignés de leur principale source de chaleur (le Soleil), devraient avoir conservé une composition physico-chimique similaire aux planétésimaux créés dans la région externe du disque protosolaire. Cependant, certains de ces objets pourraient avoir souffert de divers processus physiques qui auraient modifié leur nature

physico-chimique (cristallisation de la glace, concentration des différentes espèces volatiles) depuis leur formation. En effet, le “space weathering” (le rayonnement cosmique, les impacts de grains interstellaires, le rayonnement UV, le vent solaire) ainsi que les collisions entre objets (Stern, 2003; Orosei et al., 2001) pourraient avoir engendré leur différenciation physico-chimique.

Actuellement, notre méconnaissance de l’influence des collisions sur l’évolution physico-chimique des objets de Kuiper se caractérise d’une part, par l’ignorance de l’histoire dynamique des différentes populations à l’intérieur de la région transneptunienne et, d’autre part, par l’absence de données sur la composition physico-chimique et les propriétés physiques des objets de Kuiper. L’histoire dynamique et les propriétés physiques des composants d’une population d’objets déterminent en effet les principaux paramètres et résultats physiques (cassure, chauffage...) d’un impact ainsi que l’évolution thermodynamique du noyau cible.

Bien qu’un travail expérimental conséquent ait été réalisé sur les collisions entre corps poreux et glacés (Arakawa et al., 1999, 2000 et 2002; Ryan et al., 1999; Giblin et al., 2004), notre méconnaissance reste toujours entière quant au devenir structural et physico-chimique d’objets glacés impactés. Les taux de collisions entre objets de la ceinture de Kuiper, estimés de manière statistique par Stern (1995), Davis & Farinella (1997) et Durda & Stern (2000), montrent que les objets de Kuiper avec une taille supérieure ou égale à 100 km n’ont pas été significativement altérés par les collisions depuis leur formation même s’ils ont toutefois dû subir des modifications structurales. Dans l’environnement collisionnel actuel de la ceinture de Kuiper, seuls les objets dont la taille est inférieure à 5 km ont une durée de vie collisionnelle inférieure à  $3,5 \cdot 10^9$  ans. La plupart des petits corps de taille cométaire qui ont survécu à cet environnement collisionnel ont certainement été endommagés physiquement par de multiples collisions. Stern et al. (1996) indiquent que la population d’objets dont le rayon est compris entre 1 et quelques dizaines de km a été fortement érodée. Les collisions détruisent davantage les petits corps parce qu’ils sont plus fragiles (d’un point de vue collisionnel) et plus nombreux (plus grande probabilité de destruction) comparé aux corps plus gros (Leinhardt et al., 2008). L’effritement de cette population crée alors une rupture de pente dans la distribution en taille de ces objets. La plupart des comètes provenant du disque de Kuiper pourraient donc ne pas être structurellement et physico-chimiquement primordiales et être plutôt les fragments de corps parents plus gros (Davis & Farinella, 1996; Coradini et al., 2008). Farinella et al. (2000) estiment en effet que les collisions dans la ceinture de Kuiper produisent actuellement environ 10 fragments de 1 à 10 km de diamètre chaque année à 40 UA. Quelques pour cents de ces fragments tombent sur une orbite dite “d’échappement” de la ceinture de Kuiper (Duncan et al., 1995; Morbidelli et al., 1995), ce qui leur permet d’évoluer ensuite vers le système solaire interne. Ces estimations appuient l’hypothèse selon laquelle les comètes à courte période sont issues de la ceinture de Kuiper (Morbidelli et al., 1998 et 2004). D’autre part, Durda & Stern (2000) ont déterminé que l’échelle de temps entre deux collisions d’un objet de 100 km de rayon avec un impacteur de 1 km de rayon, est de  $7 \cdot 10^7$  à  $4 \cdot 10^8$  ans dans une région com-

prise entre 30 et 50 UA. Pour un objet de taille “cométaire”, le temps entre deux collisions avec des impacteurs plus grands que 4 mètres pourrait être en revanche de  $2,5 \cdot 10^7$  à  $4,7 \cdot 10^7$  ans.

L’objet de l’étude proposée ici est de définir les conditions physico-chimiques et temporelles nécessaires pour engendrer une différenciation physico-chimique des planétésimaux durant la phase collisionnelle de la ceinture de Kuiper. Cette étude est statistique: on détermine un intervalle de temps entre chaque collision considérée comme “non destructive” et “non érosive” qui soit susceptible d’engendrer une modification structurelle de la glace et de la composition physico-chimique initiale du planétésimal cible. Dans une première section, je présente la méthode utilisée pour modéliser d’un point de vue énergétique les collisions successives, puis j’étudie dans une seconde section l’influence des paramètres physico-chimiques d’un planétésimal cible sur son évolution physico-chimique à partir d’une seule collision. En simulant une série de collisions sur un temps infini, je détermine l’intervalle de temps nécessaire entre deux collisions pour permettre la progression d’une transformation physico-chimique de la cible.

## 4.2 Apport Énergétique dans le Noyau Cible

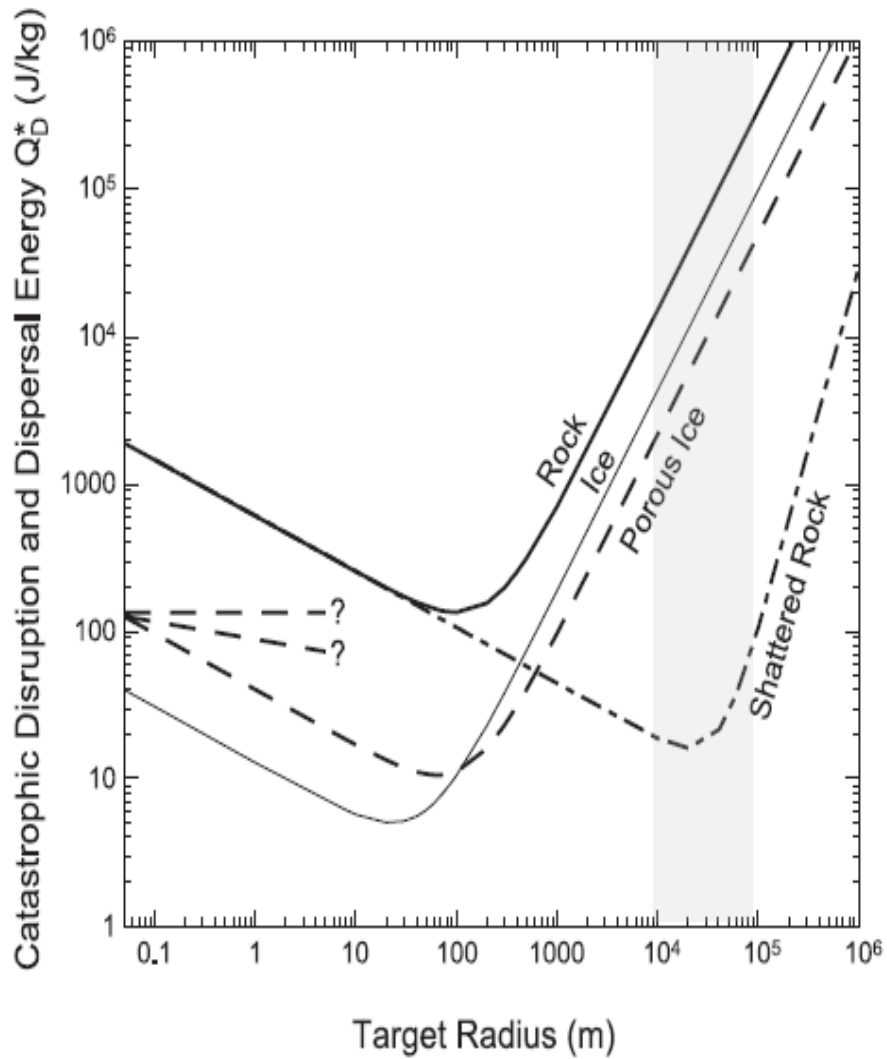
### 4.2.1 Considérations physiques et modélisation de l’apport énergétique

Quatre observations justifient l’hypothèse d’une histoire collisionnelle significative dans la ceinture de Kuiper (Leinhardt et al., 2008) et l’étude de l’influence de ces collisions sur la thermodynamique des objets de Kuiper. Premièrement, la ceinture de Kuiper pourrait être l’une des sources de grains de poussières interplanétaires (Liou et al., 1996; Flynn, 1996; Yamamoto & Mukai, 1998; Farinella, 2000 pour un résumé). La quantité de poussière observée dans le milieu interplanétaire dans la région du système solaire externe ne peut-être expliquée que par la combinaison de trois réservoirs distincts que sont les comètes, le nuage d’Oort et les collisions entre objets de Kuiper. Deuxièmement, une cassure dans la loi de distribution en taille des objets de Kuiper indique une perte significative d’objets de taille kilométrique (1–10 km) qui peut être expliquée par une fragilité collisionnelle de ces derniers (Leinhardt et al., 2008). Troisièmement, la présence d’une famille d’objets dynamique dans la région transneptunienne indique la possibilité d’une destruction catastrophique d’un corps volumineux par le passé (2003 EL 61; voir Brown et al., 2007). Enfin, les modèles d’accrétion des objets les plus gros de la ceinture de Kuiper démontrent que, si les objets qui la composent ont été formés sur place, sa masse devait être beaucoup plus importante dans le passé. Ainsi, plus de 90% de la masse initiale dans la zone 30-50 UA pourrait avoir disparu sous l’effet conjoint de perturbations dynamiques et

de collisions entre objets de Kuiper (Stern, 1996; Stern & Colwell, 1997; Leinhardt et al., 2008).

Les conditions d’impact (vitesse, inclinaison ...) et les propriétés physiques affectent l’efficacité avec laquelle l’énergie collisionnelle est injectée dans la cible (Leinhardt et al., 2008). Dans cette étude, nous ne considérons pas de déformation du noyau cible en surface ni d’ablation de couches, formation de cratère, ..., d’une part parce que le modèle 1D de planétésimal dont nous disposons ne s’y prête pas, et d’autre part car la suppression d’une fraction de la cible avant l’insertion de l’énergie apportée par une collision sur notre modèle 1D supprimerait l’apport énergétique des collisions précédentes. Les collisions simulées ici sont donc “non érosives” et n’affectent pas la structure globale ni surfacique de la cible: la cible reste physiquement intacte quel que soit le nombre de collisions. Cette approximation “grossière” optimise néanmoins l’énergie apportée par les collisions successives et permet d’obtenir une valeur limite supérieure des changements physico-chimiques obtenus à l’intérieur de la cible.

Le résultat physique d’une collision sur le noyau cible dépend du rapport entre les forces cohésive et gravitaire, qui maintiennent l’intégrité physique de l’objet. Pour chaque régime cohésif et gravitaire, les densités d’énergie de destruction de la cible  $Q_d^*$  (définies au paragraphe suivant) ont été déterminées mais une large transition existe entre ces deux régimes suivant la composition physico-chimique de l’objet cible. La figure 4.1, issue de Leinhardt et al. (2008), donne l’énergie de destruction de la cible en fonction de sa taille et de sa composition. Le régime cohésif correspond à une taille de cible suffisamment petite pour que les forces de cohésion l’emportent sur celles gravitaires. Le noyau cible se maintient alors physiquement principalement par la cohésion structurale des différents composants. Tant que les forces de cohésion sont supérieures aux forces gravitaires, l’énergie nécessaire pour détruire la cible diminue avec sa taille. En effet, en grossissant, le nombre de défauts de cohésion internes à l’objet augmente et fragilise la cohésion globale de l’objet (Leinhardt et al., 2008), le rendant ainsi plus vulnérable (voir Fig. 4.1). Pour le régime cohésif, la pente de l’énergie de destruction d’une cible compacte composée uniquement de glace est supposée être la même que celle des roches. Pour les glaces poreuses, la pente est particulièrement incertaine. Elle pourrait être plus plate que pour les matériaux non poreux parce que la dépendance en taille pourrait ne pas s’appliquer (Housen & Holsapple, 1999). Cette incertitude se traduit sur la figure 4.1 par plusieurs traits discontinus de différentes pentes. Ryan et al. (1999) ont montré que, bien que les cibles qu’ils ont étudiés aient été poreuses, celles-ci n’étaient pas nécessairement collisionnellement fragiles, la compaction des pores pouvant absorber une partie de l’énergie collisionnelle. A partir d’une certaine taille (100 m – 1 km), les effets de gravité consolident le noyau cible en augmentant sa cohésion interne et le rendent plus résistant aux collisions, augmentant ainsi l’énergie nécessaire pour le détruire (voir Fig. 4.1). Parce que les objets de Kuiper ont probablement une faible gravité et peut-être une faible cohésion interne, nombre de collisions entre objets de Kuiper pourraient tomber dans un régime de transition (Leinhardt et al., 2008).



**Fig. 4.1** - *Energie de destruction d'une cible en fonction de sa taille et de sa composition (Leinhardt et al., 2008). La zone grisée correspond aux tailles des cibles testées.*

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---

L'énergie  $Q_d^*$  par unité de volume est la quantité d'énergie nécessaire pour détruire physiquement la cible et disperser les fragments. Pour conserver l'intégrité physique du noyau cible et n'étudier que les cas où il n'y a pas destruction, nous choisissons de ne pas dépasser cette quantité d'énergie. Cette dernière dépend des tailles du projectile et de la cible et de la composition de l'impacteur. Elle est exprimée comme le rapport de l'énergie cinétique de l'impacteur sur le volume de la cible:

$$Q_d^* = \frac{1}{2} \cdot \rho_p \cdot v_p^2 \cdot \left(\frac{R_p}{R_c}\right)^3 \quad (J \cdot m^{-3}) \quad (4.1)$$

avec  $R_p$  et  $R_c$  les rayons du projectile et de la cible respectivement,  $v_p$  la vitesse relative d'impact et  $\rho_p$  la masse volumique du projectile.

On obtient alors facilement l'expression du rapport du rayon maximal que doit avoir l'impacteur pour ne pas détruire la cible, sur le rayon de la cible:

$$\frac{R_p^{max}}{R_c} = \left(\frac{2Q_d^*}{\rho_p v_p^2}\right)^{1/3} \quad (4.2)$$

La taille maximale que peut avoir un impacteur sans détruire la cible dépend donc de sa vitesse relative mais également de sa masse volumique et donc de sa composition physico-chimique qui influe également sur l'énergie de destruction  $Q_d^*$  (voir Fig. 4.1).

D'après des études menées par Ryan et al. (1999) sur des collisions entre des grains de glace poreux, l'énergie de destruction  $Q_d^*$  est du même ordre de grandeur que celle de cibles composées uniquement d'éléments réfractaires (e.g. silicates). Pour des grains de glace, ils obtiennent une valeur minimale égale à:

$$Q_d^* = 5 \cdot 10^4 \quad (J \cdot m^{-3}) \quad (4.3)$$

Cette valeur n'est valable que pour des objets cibles poreux de masse volumique égale à  $500 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  (soit une quantité d'énergie par kg égale à  $Q_d^* = 100 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) et de taille relativement petite où la gravité reste faible. Un mélange de glace et de poussière pourrait fragiliser la matrice de glace d'un point de vue collisionnel ou bien la renforcer. Nous choisissons toutefois d'adopter cette valeur comme densité d'énergie de collision à ne pas dépasser lors de la rencontre de deux planétésimaux qui se trouvent dans le régime cohésif. La densité d'énergie choisie reste alors en dessous des limites imposées par la figure 4.1 pour des tailles de cible supérieures ou égales à 1 km.

Afin d'avoir la certitude de ne pas détruire la cible, on impose une densité d'éner-

gie  $Q_d$  égale à  $\frac{Q_d^*}{2}$ . L'expression donnant le rayon maximal que peut avoir le projectile s'écrit alors:

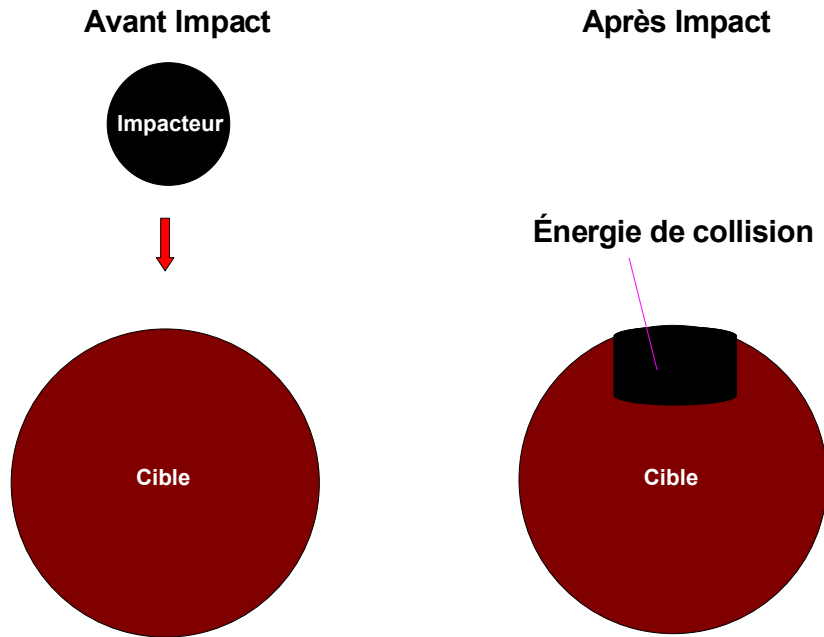
$$\frac{R_p}{R_c} = \left( \frac{Q_d}{\rho_p \cdot v_p^2} \right)^{1/3} \quad (4.4)$$

L'énergie provenant du choc contrôle la déformation physique (fragmentation de la cible, fermeture des pores), le chauffage et les changements de phase des différents éléments qui la composent. La structure interne et la composition physico-chimique (présence de volatils, proportion et compaction des constituants entre eux, structure de glace...) des corps impactés pourraient alors affecter de manière significative les résultats des collisions. La densité de la matrice principale et la cohésion des différents composants jouent également sur la taille maximale que peut avoir l'impacteur sans détruire la cible. Une grande porosité de ces corps pourrait altérer le chauffage par des déformations de la structure et l'absorption d'énergie. Il nous est impossible de prévoir la déformation structurelle provenant d'une collision sur une cible pour le moment, et c'est pourquoi nous ne considérons, dans l'étude qui suit, que le chauffage de la matrice solide et les changements de phase des éléments volatils que contient cette cible. L'ablation de couche qui résulterait d'un impact est également ignorée et les collisions restent non "érosives" de manière à optimiser leur influence sur le chauffage interne du noyau cible.

Une onde de choc puissante est produite lorsque la vitesse d'impact excède la vitesse du son dans la cible comme dans l'impacteur (Leinhardt et al., 2008), or les vitesses de collision mutuelles entre objets de Kuiper sont probablement comprises entre des vitesses "subsonique" et "supersonique". Quand la vitesse des collisions est du même ordre de grandeur que celle du son, les déformations plastiques de la cible dominent plus que les déformations liées à des chocs puissants. Dans le régime "subsonique", les collisions sont simplement élastiques. Actuellement, la vitesse relative des objets de Kuiper est de l'ordre de 1 à 1,4 km.s<sup>-1</sup> (Stern, 1996; Davis & Farinella, 1997; Durda & Stern, 2000). Cette vitesse est plus faible que la vitesse du son dans les matériaux compacts tels que les silicates ou les glaces. En effet, la vitesse du son dans la glace d'H<sub>2</sub>O non poreuse est de l'ordre de 3 km.s<sup>-1</sup> à 100 K (Petrenko & Whitworth, 1999; Stewart & Ahrens, 2005), et elle est de l'ordre de 5 km.s<sup>-1</sup> (Poirier, 2000) dans les éléments réfractaires comme les silicates. Dans les grains d'analogues non poreux constitués d'un mélange silicate-glace, elle est similaire à celle obtenue dans la glace d'H<sub>2</sub>O avec une augmentation de 30% (Lange & Ahrens, 1983). La glace d'H<sub>2</sub>O pure peut avoir en revanche des vitesses du son plus faibles comprises entre 0,1 et 1 km.s<sup>-1</sup> pour des densités de 0,2 à 0,5 g.cm<sup>-3</sup> (Mellor, 1975; Furnish & Remo, 1997). Si les objets de Kuiper sont poreux, riches en éléments volatils et réfractaires, la vitesse de collision entre ces objets pourrait alors être supersonique (Leinhardt et al., 2008).

La simulation de collisions "non destructives" et "non érosives" entre impacteurs





**Fig. 4.2** - Schématisation d'une collision entre un impacteur et une cible plus grosse.

et cibles est caractérisée par un apport énergétique provenant d'une fraction  $f^c$  de l'énergie cinétique de l'impacteur délivrée sous forme de chaleur dans la cible. On suppose qu'instantanément après l'impact, la fraction d'énergie apportée par le projectile est distribuée au noyau cible de manière uniforme suivant une méthode de propagation décrite dans Orosei et al. (2001) et Mousis et al. (2005). Orosei et al. (2001) considèrent que l'énergie collisionnelle est insérée dans une sphère approximativement de la taille de l'impacteur et centrée à la profondeur correspondant au rayon du projectile. Ils supposent alors que la profondeur d'insertion adoptée constitue une limite supérieure de l'altération thermique de la cible. Cependant, la densité d'énergie insérée dans le noyau diminue d'autant plus que le volume d'insertion est grand et c'est pourquoi, afin d'optimiser l'apport énergétique des collisions, on considère que l'énergie collisionnelle est insérée dans une demi sphère centrée sur le point d'impact en surface du noyau. On suppose alors que la fraction  $f^c$  d'énergie cinétique délivrée par l'impacteur se propage dans la cible jusqu'à une profondeur correspondant au rayon du projectile. Au delà de cette profondeur, on considère que l'énergie collisionnelle n'altère pas le noyau cible. Parce que le modèle utilisé est unidimensionnel, la diffusion latérale de l'énergie est négligée. Nous choisissons alors de prendre le volume d'un cylindre plutôt que celui d'une demi sphère dont les dimensions correspondent au rayon de l'impacteur (voir Fig. 4.2).

La fraction d'énergie cinétique insérée dans la cible est égale à :

$$E_{insertion} = f^c \cdot E_c = f^c \cdot \frac{1}{2} \cdot m_p \cdot v_p^2 = f^c \cdot \frac{2}{3} \pi \cdot \rho_p \cdot R_p^3 \cdot v_p^2 \quad (J) \quad (4.5)$$

avec  $R_p$  le rayon du projectile,  $v_p$  sa vitesse relative à la cible,  $\rho_p$  sa masse volumique et  $f^c$  la fraction d'énergie cinétique du projectile délivrée au noyau cible sous forme de chaleur. L'énergie insérée dans le noyau cible étant distribuée sur un volume correspondant approximativement à celui du projectile, la densité d'énergie insérée par unité de temps dans chaque couche du noyau sur une profondeur égale au rayon de l'impacteur donne:

$$Q_i^c = \frac{E_{insertion}}{\pi R_p^3 \cdot \Delta t} = f^c \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{\rho_p}{\Delta t} \cdot v_p^2 \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}) \quad (4.6)$$

où  $\Delta t$  est le laps de temps que dure l'impact qui correspond au temps d'insertion de la densité d'énergie dans le noyau cible. La puissance par  $m^3$  insérée dans le noyau est donc indépendante de la taille du projectile et dépend uniquement de la vitesse d'impact et de la masse volumique de l'impacteur. Nous considérerons par la suite que impacteurs et cibles sont identiques et ont les mêmes caractéristiques physico-chimiques initiales.

L'utilisation d'un modèle unidimensionnel équivaut en réalité à reproduire chaque collision sur une zone spécifique du planétésimal. On considère de cette manière que notre modèle numérique correspond à la zone d'impact bien que ce soit le noyau cible "numérique" dans son intégralité qui reçoive l'impact. D'un point de vue énergétique global, bien que l'intégralité du noyau cible numérique soit touché par l'impact, on considère que l'énergie insérée n'est insérée physiquement qu'à l'endroit de la zone d'impact: seule une fraction physique du noyau est impactée.

### 4.2.2 Adaptation du Schéma Numérique & Mathématique.

La modélisation de l'apport énergétique reçue par les couches supérieures du noyau cible, et dû aux collisions, se caractérise par l'ajout d'un terme dans l'équation de conservation de l'énergie:

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \left( K \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Y + Q^c \quad (J \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}) \quad (4.7)$$

où  $Q^c$  est la densité d'énergie apportée dans les couches au moment de la collision. Les autres symboles sont décrits au Chapitre 2 et dans l'Annexe J.

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---

Au moment de l'impact, le schéma de Crank-Nicolson, utilisé dans le cadre d'évolutions thermodynamiques monotones du noyau au cours du temps, n'est plus valable. L'insertion d'une grande quantité d'énergie dans le noyau entraîne une forte augmentation de la température (dans la zone collisionnellement atteinte) et rompt sa variation linéaire et monotone. Ces nouvelles conditions thermodynamiques n'étant pas liées à une évolution monotone "classique" de l'objet cible, il est préférable d'utiliser un schéma d'intégration temporel totalement implicite pour résoudre le système d'équations de conservation d'énergie et de masse, et cela uniquement durant le laps de temps que dure la collision. Comme nous l'avons déjà vu, ce schéma a l'avantage d'être inconditionnellement stable mathématiquement et de toujours donner des résultats physiques acceptables (voir Chapitre 3). Les coefficients de diffusion de la chaleur et de la matière étant dépendants de la température, les solutions sont itérativement calculées. Ce schéma correspond bien à la situation: le pas de temps de l'impact reste très petit et assure une très bonne estimation de la température dans le noyau cible. D'autre part, il y a peu de liens de cause à effet entre la température du pas précédent et la nouvelle température du noyau.

L'augmentation instantanée de la température en un seul pas de temps nous oblige à revoir la discrétisation et les améliorations apportées au modèle quant à la prise en compte de la quantité de matière à sublimer/condenser exprimée à travers le terme  $Q_x$  (Voir Eq. 4.7 et Eq. 2.27). Comme nous l'avons déjà vu (voir Chapitre 3), la discrétisation de certains termes, liés à la quantité de matière d'une espèce chimique  $x$  qui sublime/condense, est sujette à caution. Tant que les variations temporelle et spatiale de la température sont faibles, il est possible de développer les gradients temporel  $\frac{\partial u(T)}{\partial t}$  et spatial  $\frac{\partial u(T)}{\partial r}$  des termes  $u$  dépendant de  $T$  en fonction de  $\frac{\partial T}{\partial t}$  et  $\frac{\partial T}{\partial r}$  respectivement.

Cette méthode de linéarisation a l'avantage de déterminer de manière exacte la température résultant de la condensation ou de la sublimation d'éléments chimiques  $x$  en déterminant implicitement l'énergie emportée ou apportée par le changement de phase des différents éléments chimiques. Lorsque les variations temporelle et spatiale de la température sont trop brutales, cette linéarisation n'est plus possible. Ainsi, le terme  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  (quantité de matière qui sublime/condense) ne peut pas être linéarisé en fonction du gradient temporel de température dans l'équation de conservation de l'énergie. Il n'est donc pas permis d'écrire  $\frac{\partial \rho}{\partial t} \propto \frac{\partial P^s(T)}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}$ . La variation de la température  $T$  durant le laps de temps  $\Delta t$  que dure l'impact est trop importante pour justifier une dérivation. On choisit alors de résoudre le terme  $\frac{\partial \rho}{\partial t} \propto \left( \frac{P^{t+\Delta t}}{T^{t+\Delta t}} - \frac{P^t}{T^t} \right)$  qui semble mieux approprié dans la situation d'un changement brutal des conditions thermodynamiques. De même, il n'est pas correct d'écrire  $g_x \frac{\partial P_x^s(T)}{\partial r} = g_x \frac{\partial P_x^s(T)}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial r}$  (quantité de matière qui diffuse) lorsque la température chute brusquement entre deux couches voisines, comme c'est le cas à l'intérieur du noyau cible, à la limite "zone ayant reçu l'énergie d'impact" - "zone n'ayant pas reçu l'énergie d'impact". Pour cette raison, on préfère résoudre le terme  $g_x \frac{\partial P_x^s(T)}{\partial r} = g_x \frac{P_x^s(T_{i-1}) - P_x^s(T_i)}{\Delta r}$ . D'autre part, l'itération sur la température nous permet d'obtenir les pressions et températures des couches au bon instant  $t$  et d'éviter ainsi de créer des oscillations de température

et de pression au cours du temps.

De la même façon, la chaleur latente de changement de phase d'une espèce chimique  $x$ , exprimée à partir de la relation de Clausius-Clapeyron (voir Annexe H), n'est valable que dans le cadre de faibles incréments de la température et de la pression:

$$\Delta H_x = \frac{R.T^2}{P_x^s(T)} \cdot \frac{dP_x^s(T)}{dT} \quad (J.mol^{-1}.K^{-1}) \quad (4.8)$$

Lors d'une collision, cette équation, qui est fonction de la dérivée totale de la courbe de pression d'équilibre entre deux phases, n'est plus valable puisqu'on a une augmentation brutale de la température et de la pression. On choisit alors d'intégrer l'équation (4.8) sur le domaine de variation de température et de pression correspondant au changement d'état du système. Dans l'hypothèse où une espèce chimique  $x$  est à la pression d'équilibre entre la phase condensée et la phase vapeur à l'état initial comme à l'état final, on a:

$$\int_i^f \Delta H_x \frac{\partial T}{R.T^2} = \int_i^f \frac{\partial P_x^s(T)}{P_x^s(T)} \quad (4.9)$$

En faisant l'hypothèse que l'enthalpie de changement de phase  $\Delta H$  varie peu entre l'état final et l'état initial, on obtient la relation suivante:

$$\frac{\Delta H_x}{R} \int_i^f \frac{\partial T}{T^2} = \int_i^f \frac{\partial P_x^s(T)}{P_x^s(T)} \quad (4.10)$$

L'intégration de l'enthalpie de changement de phase lors d'un changement de condition thermodynamique brutal donne:

$$\Delta H_x = R \cdot \frac{1}{\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_f}} \left( \ln(P_x^s(T_f)) - \ln(P_x^s(T_i)) \right) \quad (J.mol^{-1}.K^{-1}) \quad (4.11)$$

Si en revanche, le système n'est pas à la pression d'équilibre à l'état final parce que la phase solide a disparu entre temps, l'enthalpie de transition de phase de l'état  $i$  à l'état  $f$  ne peut pas être exprimée en fonction de la pression de vapeur saturante de l'espèce chimique  $x$ , puisque le changement d'état ne s'effectue que jusqu'à ce que la phase solide ou liquide ait totalement disparu. On prend alors comme référence, la pression du gaz à l'état final. On suppose que c'est la sublimation ou la vaporisation

du condensat qui est à l'origine de cette pression. L'expression de l'enthalpie de changement de phase devient alors:

$$\begin{aligned}\Delta H_x &= R \int_i^f \frac{1}{\frac{\partial T}{T^2}} \int_i^f \frac{\partial P}{P} \\ &= R \cdot \frac{1}{\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_f}} \cdot \left( \ln(P_x^f) - \ln(P_x^s(T_i)) \right) \quad (J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}) \quad (4.12)\end{aligned}$$

où  $P_x^f$  est la pression de la phase gazeuse de l'espèce chimique  $x$  à la température  $T_f$  et  $P_x^s(T_i)$  la pression d'équilibre de la phase gazeuse à l'état initial.

### 4.3 Paramètres

Au début de chaque simulation, les objets ont tous une composition physico-chimique homogène. Le chauffage originel lié à l'accrétion et à la présence d'éléments radioactifs est alors négligé, la seule source de chaleur permanente considérée étant celle du Soleil. Les principaux paramètres physiques ainsi que la composition initiale des planétésimaux sont donnés dans les tables 4.1 et 4.2. Ces valeurs sont standards pour les noyaux cométaires dont on pense qu'ils sont issus de la région transneptunienne (Morbidelli et al., 1998). Les éléments orbitaux ne correspondent à aucun objet réel mais pourraient être ceux de n'importe quel corps situé dans la ceinture de Kuiper primitive. La température initiale égale à 30 K sur tout le noyau correspond à une température plausible de la nébuleuse solaire dans la région transneptunienne au moment de la formation des objets de Kuiper (Yamamoto, 1985; Yamamoto & Kozasa, 1988). Dans cette étude, nous imposons une structure de glace amorphe comme matrice principale des planétésimaux (Kouchi et al., 1994; Mousis et al., 2000). La région externe du disque protosolaire (correspondant à la ceinture de Kuiper actuelle) était plus froide que la région interne à l'époque de formation de la nébuleuse solaire; les planétésimaux glacés de la ceinture externe du disque protosolaire ont alors certainement été formés à partir de glaces primitives amorphes originaires du nuage présolaire (Taylor, 1992; Kouchi et al., 1994; Mousis et al., 2000). L'étude collisionnelle s'intéresse à des corps de 10 et 100 km de rayon. Les objets de 10 km peuvent correspondre à de possibles corps "fils" issus de collisions destructives de corps parents plus gros ou être les résidus de planétésimaux formés sur place. Les objets de 100 km de rayon correspondent aux corps parent qui peuvent survivre à l'environnement collisionnel de la ceinture de Kuiper (Davis & Farinella, 1997).

La taille des corps et la masse volumique de la matrice solide influent sur la porosité moyenne du noyau par pression hydrostatique. Cette porosité peut varier

**Tab. 4.1** - *Composition Initiale et Caractéristiques Physiques et dynamiques du Noyau*

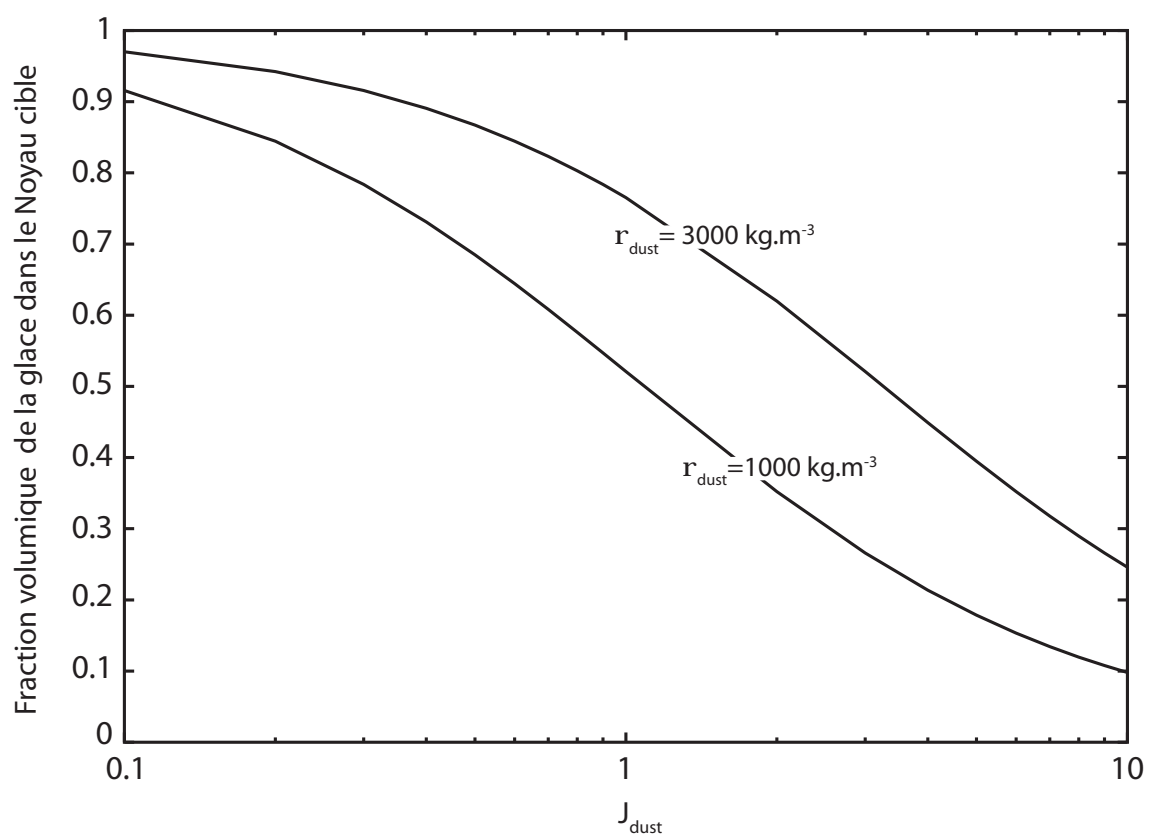
Paramètre	Valeurs Nominales
Demi grand axe	35 AU
Excentricité	0
Température Initiale	30 K
$\epsilon$	1
$Al$	0,05
Structure Initiale de la Glace	amorphe
$\psi^i$	50%
$r_p^i$	$10^{-06}$ m
$\rho_{H_2O}$ (kg.m <sup>-3</sup> )	920
$\rho_{dust}$ (kg.m <sup>-3</sup> )	3000

entre 30 et 80% (Coradini et al., 2008) suivant la taille de l'objet et sa composition. La densité des grains de poussière a une influence sur la masse volumique du noyau et donc sur la capacité du noyau à accumuler, restituer ou diffuser de l'énergie. Pour un même rapport massique grain de poussière sur glace  $J_{dust}$ , le volume occupé par la poussière dans la matrice solide décroît avec l'augmentation de la densité des grains de poussière (voir Fig. 4.3). La masse par unité de volume des grains de poussière peut varier dans la littérature de 100 à 3000 kg.m<sup>-3</sup> (Kelley et al., 2008). Les agrégats de poussière ont initialement une structure légère et floconneuse mais ils deviennent denses au cours de collisions mutuelles dans le milieu interplanétaire (Suyama et al., 2008). Joswiak et al. (2007) indiquent que les particules de poussière interplanétaires (IDPs) issues de noyaux cométaires ont une densité moyenne de 1000 kg.m<sup>-3</sup>. Ils sont dominés par de grandes porosités internes et une minéralogie composée principalement de minéraux silicatés. D'autres études (Lisse et al., 1998; Harker et al., 2002; Kimura et al., 2006) adoptent une densité des grains de poussière de 2000–3000 kg.m<sup>-3</sup> pour leur modèle dynamique d'observation des grains dans la Coma. Fulle et al. (2000) ont utilisé les observations in situ de la Coma de la comète 1P/Halley et des modèles dynamiques pour déterminer une densité des grains de poussière comprise entre 50 et 500 kg.m<sup>-3</sup> avec une préférence pour 100 kg.m<sup>-3</sup>. Enfin, la sonde spatiale de la mission Stardust qui a rapporté plus de 10000 grains de poussière collectés dans la Coma de la comète 81P/Wild (Brownlee et al., 2006) a permis de montrer que la densité des grains pouvait être comprise entre 300 et 3000 kg.m<sup>-3</sup> (Hörz et al., 2006). D'autre part, les chondrites carbonées CI, composées d'un mélange de silicates et d'organiques et qui peuvent correspondre à des grains parents, ont une densité de 2270 kg.m<sup>-3</sup> (Coradini et al., 2008).

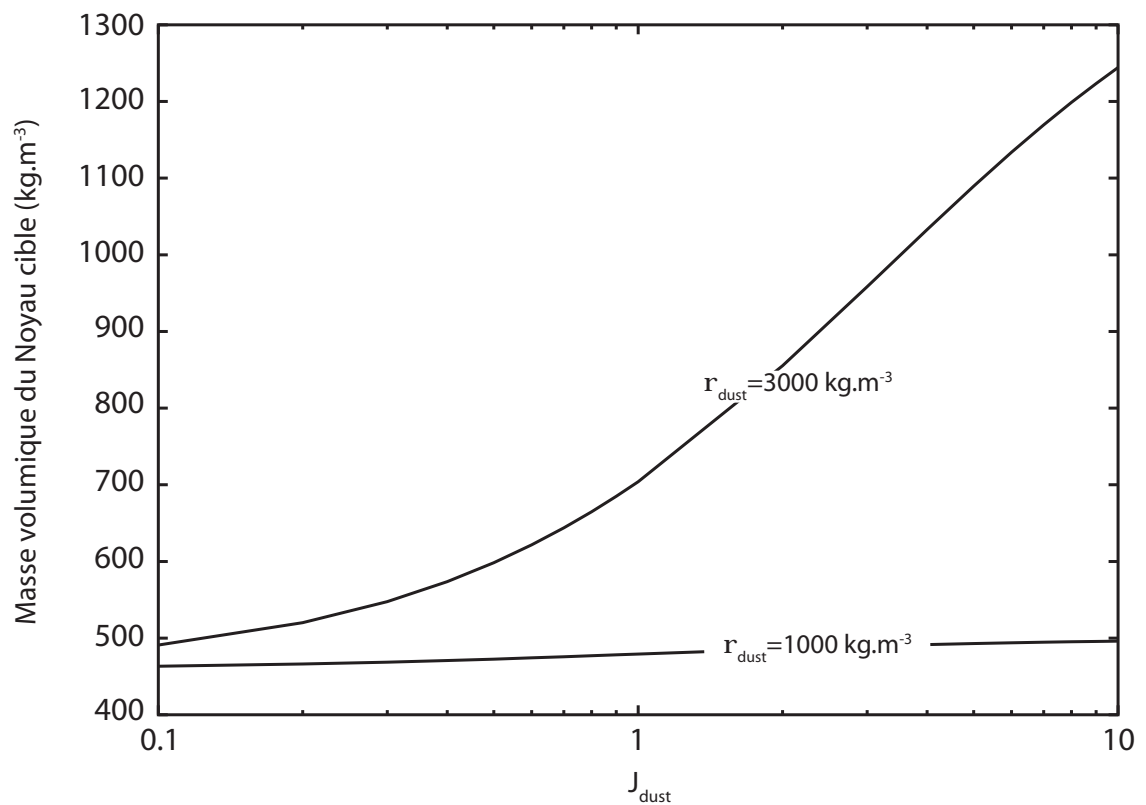
La figure 4.4 décrit la relation entre la masse volumique du planétésimal et le

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---



**Fig. 4.3** - Fraction volumique de la glace dans le noyau cible pour une masse volumique des grains de poussière égale à 1000 et 3000  $\text{kg.m}^{-3}$  en fonction du rapport massique  $J_{dust}$ .



**Fig. 4.4** - Masse volumique du noyau cible pour une masse volumique des grains de poussière égale à 1000 et 3000  $\text{kg.m}^{-3}$ , en fonction du rapport massique  $J_{dust}$  et pour une porosité  $\psi$  égale à 50%.



4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION  
TRANSNEPTUNIENNE

**Tab. 4.2** - *Paramètres Physiques des Composants dans les Planétésimaux*

Paramètre	Modèle A	Modèle B
Capacité thermique (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )		
$C_{\text{H}_2\text{O}}$	7,49.T+90 <sup>(a)</sup>	
$C_{\text{dust}}$	3.T <sup>(d)</sup>	1200 <sup>(c)</sup>
Conductivité thermique (W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )		
$K_{\text{H}_2\text{O}}$ <i>Glace amorphe</i>	$\frac{1}{4}c(T)\gamma\lambda\rho_c$ <sup>(b)</sup>	
$K_{\text{H}_2\text{O}}$ <i>Glace cristalline</i>	567/ T <sup>(b)</sup>	
Chaleur latente de changement de phase (J.mol <sup>-1</sup> )		
$H_{cr}$	1620 <sup>(e)</sup>	

<sup>(a)</sup>: Giaouque & Stout (1936), <sup>(b)</sup>: Klinger (1980), <sup>(c)</sup>: Ellsworth & Schubert (1983),  
<sup>(d)</sup>: Enzian et al. (1997), <sup>(e)</sup>: Ghormley (1968)

rapport massique  $J_{\text{dust}}$  pour une masse volumique des grains de poussière égale à 1000 et 3000 kg.m<sup>-3</sup>, et pour une porosité ouverte  $\psi$  du noyau égale à 50%. Les valeurs extrêmes du rapport  $J_{\text{dust}}$  permettent de couvrir l'ensemble des rapports massiques possibles. Suivant la fraction massique de la glace, celle-ci peut servir de matrice principale ( $J_{\text{dust}}$  très faible) ou bien de lien entre les grains de poussière ( $J_{\text{dust}}$  très élevé). Pour une masse volumique de ces grains égale à 1000 kg.m<sup>-3</sup>, la densité de l'objet change peu avec le rapport massique  $J_{\text{dust}}$ . En revanche, avec une masse volumique compacte égale à 3000 kg.m<sup>-3</sup>, cette densité varie de plus d'un facteur 2. Dans ce dernier cas, la composition de l'objet peut faire passer celui-ci d'un régime de destruction cohésif (rapport massique  $J_{\text{dust}}$  faible) à un régime de destruction gravitationnel (rapport massique  $J_{\text{dust}}$  élevé) lorsque sa taille reste relativement faible (1-10km). Quels que soient le rapport  $J_{\text{dust}}$  et la densité des grains de poussière adoptés, la masse volumique du noyau reste comprise dans l'intervalle des densités possibles des objets de Kuiper (<1000 à 2600 kg.m<sup>-3</sup>, Stansberry et al., 2008) avec une porosité imposée de 50%. L'inertie thermique étant proportionnelle à la masse volumique du noyau, le temps de diffusion de la chaleur sera d'autant plus long que la masse volumique du noyau sera grande pour une même porosité  $\psi$  de la matrice solide et un même rapport massique  $J_{\text{dust}}$ . En choisissant une masse volumique des grains de poussière égale à 3000 kg.m<sup>-3</sup> (valeur adoptée dans le modèle par la suite), on favorise alors la possibilité d'une transformation physico-chimique du noyau cible. Le rapport limite des rayons de l'impacteur et de la cible  $\frac{R_p}{R_c}$  est sensible à l'énergie de destruction de la cible  $Q_d^*$  mais également à la masse volumique des objets. Cependant, suivant la valeur du rapport massique  $J_{\text{dust}}$ , les objets peuvent être composés essentiellement de glace ou bien de poussière (voir Fig. 4.3). Suivant ce même rapport, l'énergie de destruction de la cible  $Q_d^*$ , fonction de sa composition physico-chimique, peut alors changer d'au moins un ordre de grandeur. De plus, suivant la

composition physico-chimique (paramètre  $J_{dust}$ , volatil condensé dans les pores...) et la taille du noyau cible, la porosité de la matrice peut différer (compaction différente de l'objet liée à la gravité) et changer le comportement thermique de l'objet.

Durham et al. (2005) ont étudié l'influence de la pression hydrostatique sur l'évolution de la porosité initiale de la glace et ont montré que cette porosité décroissait avec l'augmentation de la pression hydrostatique, dont l'expression est rappelée ci-dessous:

$$P^h(r) = 1,4 \cdot 10^{-4} \cdot (\rho R)^2 \cdot \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) \quad (Pa) \quad (4.13)$$

avec  $r$  (en km) la distance radiale par rapport au centre du noyau de masse volumique  $\rho$  ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ) et  $R$  (en km) le rayon du noyau.

En supposant une porosité initiale de 50% du noyau cible et en utilisant le profil de compaction de la glace (donné dans Durham et al., 2005) en fonction de la pression hydrostatique, on peut reproduire approximativement le profil de porosité du noyau cible suivant une loi qui prend la forme:

$$\psi(r) = \frac{a}{P^h(r) + b} \cdot e^{c \cdot P^h(r)} \quad (4.14)$$

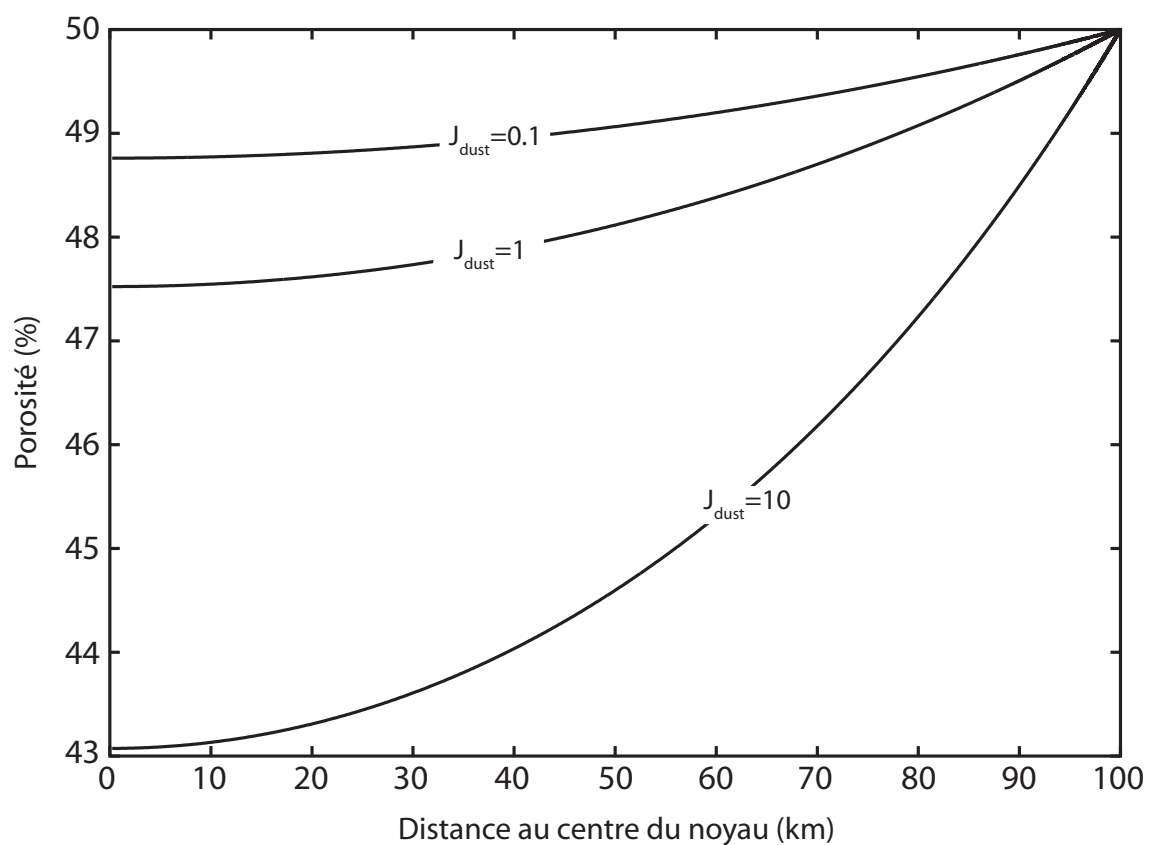
En faisant varier  $J_{dust}$  (et donc  $\rho$ ), on montre que, pour un objet de 100 km de rayon, la pression hydrostatique atteinte au coeur du noyau peut être approximativement de 3,5, 7 et 22 bars pour des rapports massiques  $J_{dust}$  égaux à 0,1, 1 et 10 respectivement et une masse volumique des grains de poussière égale à  $3000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ . Cette pression hydrostatique engendre approximativement, pour les mêmes rapports massiques  $J_{dust}$ , une porosité de 49, 48 et 43% respectivement, au centre du noyau (Voir Fig. 4.5). Pour une cible de 10 km, la porosité au coeur du noyau change peu de la porosité imposée initialement (50%).

La variation de porosité reste relativement faible pour les modèles avec des rapports massiques  $J_{dust}$  égaux à 0,1 et 1, et nous adoptons une porosité moyenne de 50% quelle que soit la composition physico-chimique initiale. En revanche, cette variation de porosité reste assez grande pour le rapport massique  $J_{dust}$  égal à 10. Le profil de compaction de la glace en fonction de la pression hydrostatique, donné par Durham et al. (2005), a été déterminé pour une structure composée uniquement de grains de glace. Par conséquent, la faible proportion volumique de glace pour notre modèle très poussiéreux ( $J_{dust} = 10$ ) nous oblige à ne pas considérer ce profil et à adopter une porosité moyenne du noyau cible de 50%, comme pour les autres rapports massiques.

La figure 4.6 donne le rapport maximal entre le rayon de l'impacteur et celui

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---



**Fig. 4.5** - Porosité du noyau cible en fonction de la distance au centre du noyau, pour une masse volumique des grains de poussière égale à  $3000 \text{ kg.m}^{-3}$  et pour différents rapports massiques  $J_{dust}$ .

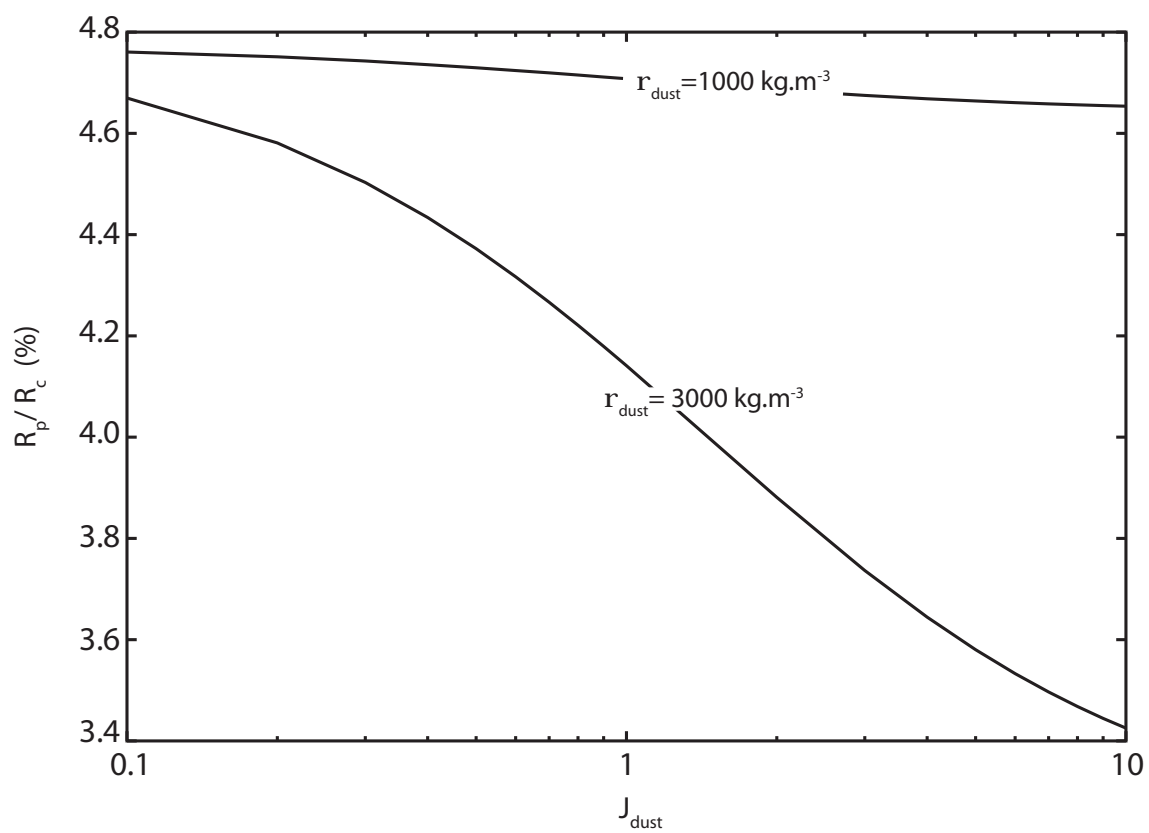
de la cible en fonction du rapport massique  $J_{dust}$  pour une énergie de destruction  $Q_d^*$  par unité de volume égale à  $5.10^4 \text{ J.m}^{-3}$ . Pour une densité des grains de  $3000 \text{ kg.m}^{-3}$  et une porosité de la matrice solide égale à 50%, le rayon de l'impacteur ne doit pas excéder plus de 3 à 5% du rayon de la cible suivant le rapport massique  $J_{dust}$  dans le cas d'une cible soumise au régime de destruction cohésif. Pour une cible de 10 km, la taille maximale que peut avoir un impacteur sans la détruire est de 300 à 500 m (voir Fig.4.6). En réalité, avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 10, la glace représente moins de 30% du volume de la matrice solide (voir Fig. 4.3). On peut donc augmenter l'énergie de destruction  $Q_d^*$  par unité de volume de manière à obtenir un rayon maximal de l'impacteur égal à 500 m. Pour une cible de 100 km,  $Q_d^*$  augmente considérablement avec l'accroissement de la cible (voir Fig. 4.1). On peut se permettre d'augmenter  $Q_d^*$  d'un facteur 10 tout en restant en dessous de la limite autorisée. Avec cette nouvelle énergie de destruction, on obtient, en majorant, un rayon de projectile de l'ordre de 10% du rayon de la cible.

On discute à présent des paramètres physiques de conduction thermique et de capacité calorifique des différents composants que l'on doit choisir. En effet, les paramètres physiques des composants à l'intérieur des planétésimaux sont parfois méconnus. Il existe ainsi dans la littérature de nombreuses valeurs de la capacité et de la conductivité thermique des grains de poussière qui peuvent parfois varier de plusieurs ordres de grandeur. Nous avons vu ainsi que la conductivité thermique de la glace amorphe pouvait différer de quatre ordres de grandeur entre les valeurs déterminées par Kouchi et al. (1992) et celles calculées par Klinger (1980) (voir section 2.2.2). Cependant, cette variation pourrait être due à une porosité de la glace amorphe lors des expérimentations de Kouchi et al. (1992) et nous choisissons alors de conserver l'expression déterminée par Klinger pour une glace non poreuse (la porosité de la matrice de glace étant prise en compte par l'expression de Russel; voir Section 2.2.2).

En l'absence de données exactes sur la composition et les propriétés physiques des éléments constituant les planétésimaux ou noyaux cométaires, on propose d'étudier l'influence des paramètres physiques sur l'évolution physico-chimique des planétésimaux durant la phase collisionnelle. Suivant la valeur de ces paramètres, le noyau va pouvoir accumuler de l'énergie ou bien la diffuser plus rapidement. La capacité calorifique et la conductivité thermique des différents éléments chimiques ont en effet une incidence sur l'évolution physico-chimique du planétésimal. Plus exactement, la capacité calorifique des différents matériaux va influencer sur la température du milieu lors de la collision: cette température sera d'autant plus élevée que la capacité thermique globale sera faible, pour une même densité d'énergie insérée. La conductivité thermique influe quant à elle sur la capacité de l'objet à diffuser son énergie ou à la conserver, créant ou supprimant ainsi les conditions possibles d'une cristallisation partielle ou totale du noyau cible. Aussi, le rapport massique  $J_{dust}$  a un double effet sur le comportement thermique du noyau: en croissant, il augmente l'influence des grains de poussière sur la capacité calorifique et la conductivité thermique globale du noyau, et inversement. On testera donc également l'influence de ce paramètre sur

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---



**Fig. 4.6** - Rapport maximal du rayon de l'impacteur sur celui de la cible en fonction du rapport massique  $J_{dust}$ .

le comportement thermique du noyau. Enfin, la présence d'un volatil sous forme de condensat (dans les pores) peut également influencer sur le comportement thermique du noyau cible. Ainsi, suivant sa température de sublimation, celui-ci peut absorber une fraction non négligeable de l'énergie collisionnelle lors de son changement de phase (solide-gaz).

Pour commencer cette étude, on choisit de conserver les valeurs de la conductivité thermique de la glace amorphe données par Klinger et al. (1980) (voir Table 4.2). On prend ensuite la valeur terrestre donnée par Enzian et al. (1997) pour la capacité calorifique des grains de poussière ( $3.T \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ). Cette dernière correspond à la moyenne des valeurs des minéraux terrestres donnés par Drury et al. (1984). Cependant, la capacité calorifique des minéraux terrestres a été calculée aux températures terrestres et sa valeur nous est inconnue à très basse température. C'est pourquoi on étudiera également les effets d'une valeur constante de la capacité calorifique ( $1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ) des grains de poussière donnée par Ellsworth & Schubert (1983). On testera trois valeurs de la conductivité thermique des grains de poussière ( $10^{-4}$ , 2 et  $10 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ) de manière à comprendre le fonctionnement thermique du modèle lors des collisions. La valeur intermédiaire ( $2 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ) correspond à la valeur moyenne des minéraux terrestres (Drury et al., 1984).  $10^{-4}$  et  $10 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  sont des valeurs extrêmes trouvées dans la littérature (Tancredi et al., 1994 et Huebner et al., 2006 respectivement). Nous analyserons enfin l'influence de la composition physico-chimique sur le comportement thermique de l'objet cible en faisant varier le rapport massique poussière sur glace  $J_{dust}$  (valeurs testées: 0,1, 1 et 10) et la présence de CO (10% en moles d'H<sub>2</sub>O; Bockelée-Morvan et al., 2004) dans le planétésimal cible. Le choix du CO n'est pas anodin puisque c'est le volatil le plus abondant dans les noyaux cométaires. De plus, il change de phase à très basse température et influe de cette manière très tôt sur le comportement thermique du noyau au cours de son évolution. Parce que le noyau cible endure de grandes variations de température et de pression au cours de l'impact, nous avons déterminé une expression de la vapeur saturante du CO à partir de données expérimentales et théoriques (Clayton & Giauque, 1932; Lide, 2002) qui est valable entre 50 K et 130 K (voir Fig. D.1). De cette manière, nous couvrons l'ensemble des valeurs physiques qui peuvent exister et leurs possibles influences sur le comportement thermique du planétésimal.

Etant donné l'importance de la valeur de la capacité calorifique sur la température du noyau au moment de la collision, on choisit de distinguer par la suite deux modèles A et B avec une capacité thermique des grains de poussière égale à  $3.T$  et  $1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$  respectivement. Un apport donné d'énergie sous forme de chaleur provoquera une plus forte élévation de température pour une capacité calorifique moindre et inversement. Excepté la valeur de la capacité calorifique, on étudie, pour les deux modèles A et B, l'influence de la conductivité thermique des grains de poussière, du rapport massique  $J_{dust}$  et les effets de la présence en grande quantité d'un volatil (CO) sous forme de condensat dans les pores de la matrice solide. Les tableaux 4.1 et 4.2 donnent l'ensemble des paramètres communs aux deux modèles A

et B. La table 4.3 donne l'ensemble des valeurs des paramètres testés sur les modèles A et B.

**Tab. 4.3** - *Autres Paramètres Physiques Testés pour les Modèles A et B*

Paramètre	Valeurs
Conductivité thermique ( $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )	
$K_{dust}$	$10^{-4}^{(I)}$ ; $2^{(J)}$ ; $10^{(K)}$
$J_{dust}$ (masse)	0,1; 1; 10
$J_{CO}$ (mol) dans les pores	0–10%

<sup>(I)</sup>: Mendis & Brin (1977), Tancredi et al. (1994), <sup>(J)</sup>: Drury et al. (1984), <sup>(K)</sup>: Huebner et al. (2006)

Les paramètres d'impact sont donnés dans le tableau 4.4. La fraction d'énergie cinétique  $f^c$  de l'impacteur insérée sous forme de chaleur dans la cible est limitée à 10% (Coradini et al., 1983; Orosei et al., 2001) et la vitesse collisionnelle adoptée est la vitesse relative actuelle entre deux objets transneptuniens dans la ceinture de Kuiper, soit  $1 \text{ km.s}^{-1}$  (Stern, 1996; Davis & Farinella, 1997; Durda & Stern, 2000). Les paramètres d'impacts reliés aux caractéristiques physiques que nous imposons au planétésimal, donnent un rapport  $\frac{R_p}{R_c}$  maximum qui peut varier entre 3 et 10% suivant la taille de la cible et sa masse volumique.

**Tab. 4.4** - *Paramètres d'impact*

Paramètre	Valeurs	
Rayon cible	10 km	100 km
$Q_d^*$ ( $\text{J.m}^{-3}$ )	$5.10^4$	$5.10^5$
$v_p$ ( $\text{km.s}^{-1}$ )	1	

## 4.4 Résultats.

### 4.4.1 Etude de l'influence des différents paramètres pour une seule collision

Dans cette section, on simule une seule collision a  $t = 1000$  ans entre un projectile de 300 m et une cible de 10 km afin d'illustrer le comportement thermique du noyau. L'intervalle de temps précédent l'impact est arbitraire et permet au couches situées près de la surface du planétésimal cible de se mettre en équilibre thermique avec

l'environnement extérieur. On discute dans cette section de l'influence des valeurs des différents paramètres testés sur l'évolution thermodynamique du planétésimal cible. Chaque sous-section qui suit est dédiée à l'étude de l'influence d'un seul paramètre: conductivité thermique, rapport massique  $J_{dust}$ , présence de CO dans les pores. A l'intérieur de chaque sous-section, nous distinguons un groupe A avec une capacité calorifique des grains de poussière égale à  $3.TJ.kg^{-1}.K^{-1}$ , et un groupe B avec une capacité calorifique de ces mêmes grains égale à  $1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ . Avant l'étude des différents paramètres sur l'évolution thermodynamique des noyaux cibles, on effectue une première étude du comportement thermique du planétésimal.

### $\alpha$ - Etude préalable du comportement thermique

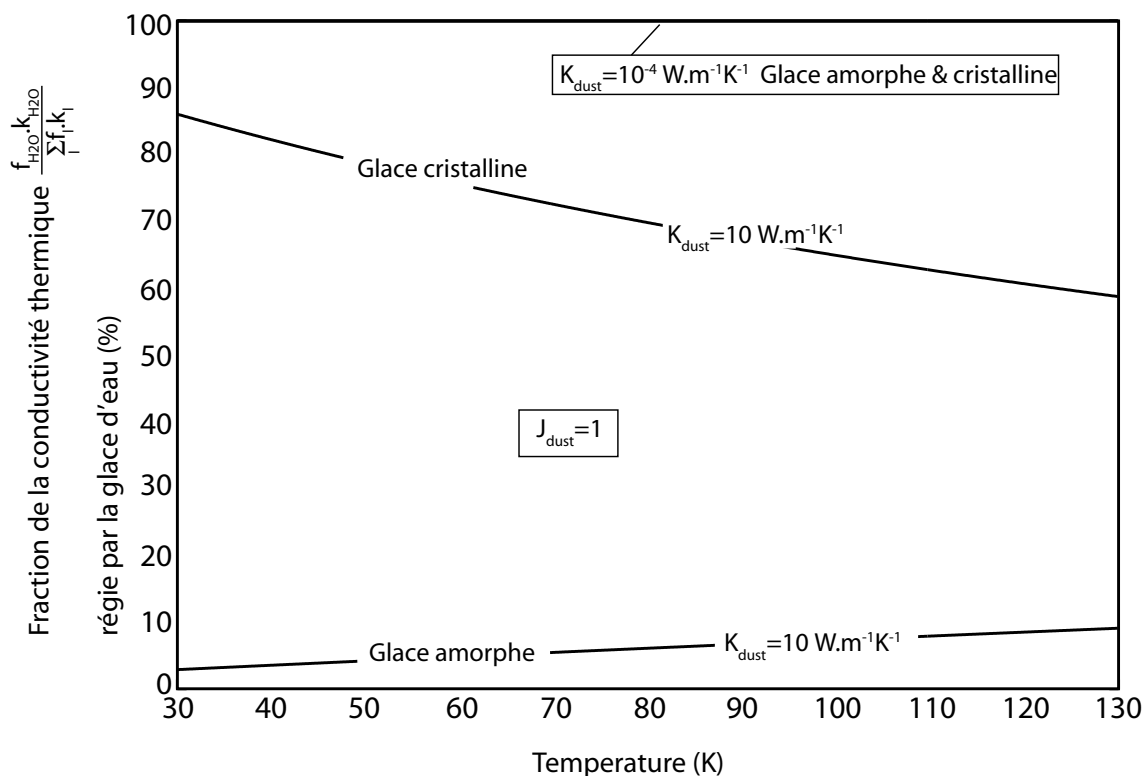
Avant toute étude et interprétation des résultats, on propose ici d'analyser ce qui régit le comportement thermique des planétésimaux. On analyse pour cela l'influence de la glace et de la poussière sur la conductivité thermique de la matrice solide du planétésimal cible. On décrit également l'influence de la capacité calorifique sur le comportement thermique du noyau. On rappelle que la masse volumique des grains de poussière qui est adoptée pour l'étude qui suit est égale à  $3000 kg.m^{-3}$ .

Avant de discuter de l'influence des différents composants sur le comportement thermique du noyau, on signale que la glace cristalline (avec une conductivité thermique égale à  $\frac{567}{T} W.m^{-1}.K^{-1}$ ) conduit mieux la chaleur que la glace amorphe (conductivité thermique égale à environ  $8,61.10^{-3} T + 10^{-1} W.m^{-1}.K^{-1}$ , voir table 4.2 et section 2.2.2), pour une température inférieure à 130 K (au delà de cette température, la glace amorphe cristallise très rapidement). Quelle que soit la structure de la glace (amorphe ou cristalline), la conductivité de la matrice solide est d'autant plus élevée que la conductivité thermique des grains de poussière est grande. Lorsque cette dernière est égale à  $10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ , elle est inférieure à celle de la glace (quelles que soient sa structure et sa température). A  $2 W.m^{-1}.K^{-1}$ , la conductivité des grains est uniquement supérieure à celle de la glace amorphe. Seule la conductivité thermique égale à  $10 W.m^{-1}.K^{-1}$  est supérieure à celle des deux types de glace (pour la glace cristalline, uniquement au delà de 60 K).

La figure 4.7 donne le rapport  $\frac{f_{ice}.k_{ice}}{\sum_i f_i.k_i}$  (voir Eq. 2.10) en fonction de la température pour les valeurs extrêmes de conductivité thermique des grains de poussière ( $10^{-4}$  et  $10 W.m^{-1}.K^{-1}$ ) et pour un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1. Ce rapport donne la proportion de la matrice solide régie par la conductivité thermique de la glace d'eau. Lorsque la conductivité thermique des grains de poussière est égale à  $10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ , la matrice solide est dominée thermiquement par  $H_2O$ , à plus de 99% (Quelle que soit la structure, et donc la conductivité thermique de la glace d' $H_2O$ ). La matrice solide reste encore largement régie par la glace d'eau cristalline (entre 85 et 60% suivant la température), lorsque la conductivité thermique des grains de poussière est  $10^5$  fois plus grande. En revanche, pour cette nouvelle conductivité,



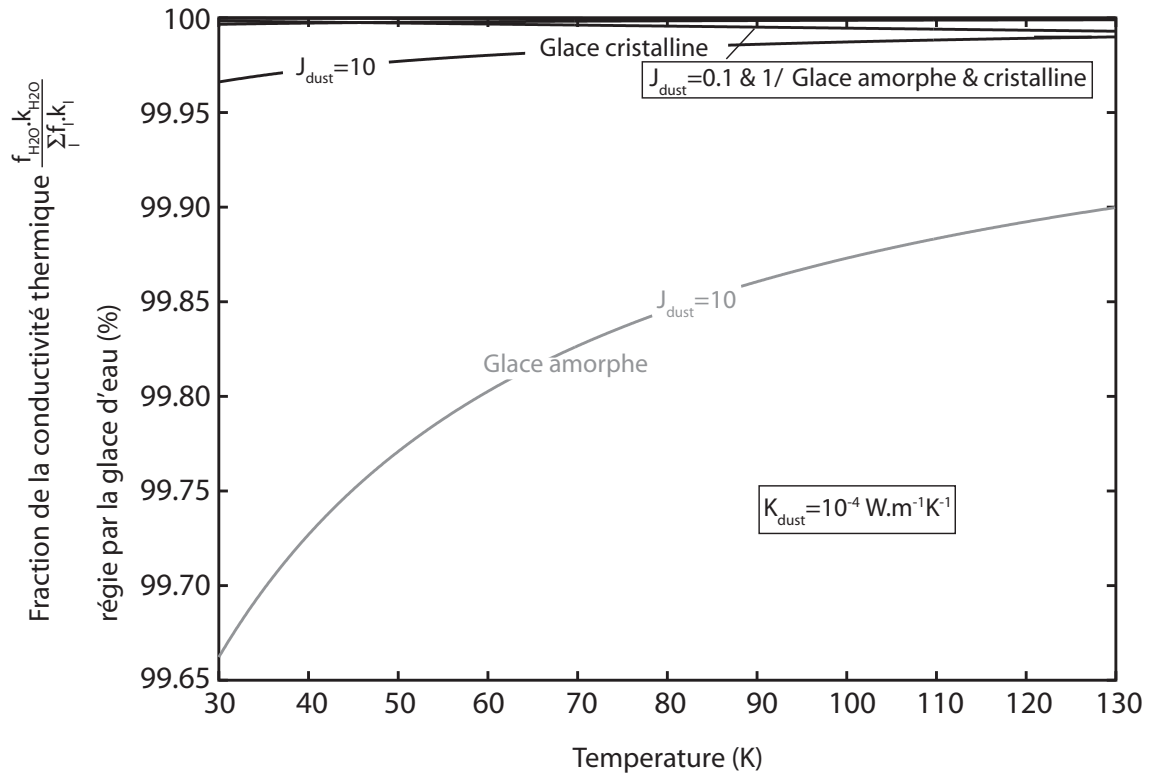
#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE



**Fig. 4.7** - Fraction de la conductivité thermique  $\frac{f_{ice} \cdot k_{ice}}{\sum_l f_l \cdot k_l}$  régie par la glace d'eau en fonction de la température du milieu.  $K_{dust} = 10^{-4}$  et  $10 \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$

lorsque la glace a une structure amorphe, c'est la poussière qui régit principalement le comportement thermique du noyau à plus de 90%.

Les figures 4.8 et 4.9 donnent également le rapport  $\frac{f_{ice} \cdot k_{ice}}{\sum_l f_l \cdot k_l}$  en fonction de la température pour différents rapports massiques  $J_{dust}$  et une conductivité thermique des grains de poussière égale à  $10^{-4}$  et  $10 \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  respectivement. Avec une très faible conductivité thermique des grains, la conductivité globale de la matrice solide est essentiellement dominée par celle de la glace  $\text{H}_2\text{O}$  à plus de 99%, quelle que soit sa structure et la composition du noyau ( $J_{dust} = 0, 1; 1; 10$ ). L'influence de la glace d'eau sur la conduction thermique  $K_s$  augmente avec la diminution du rapport



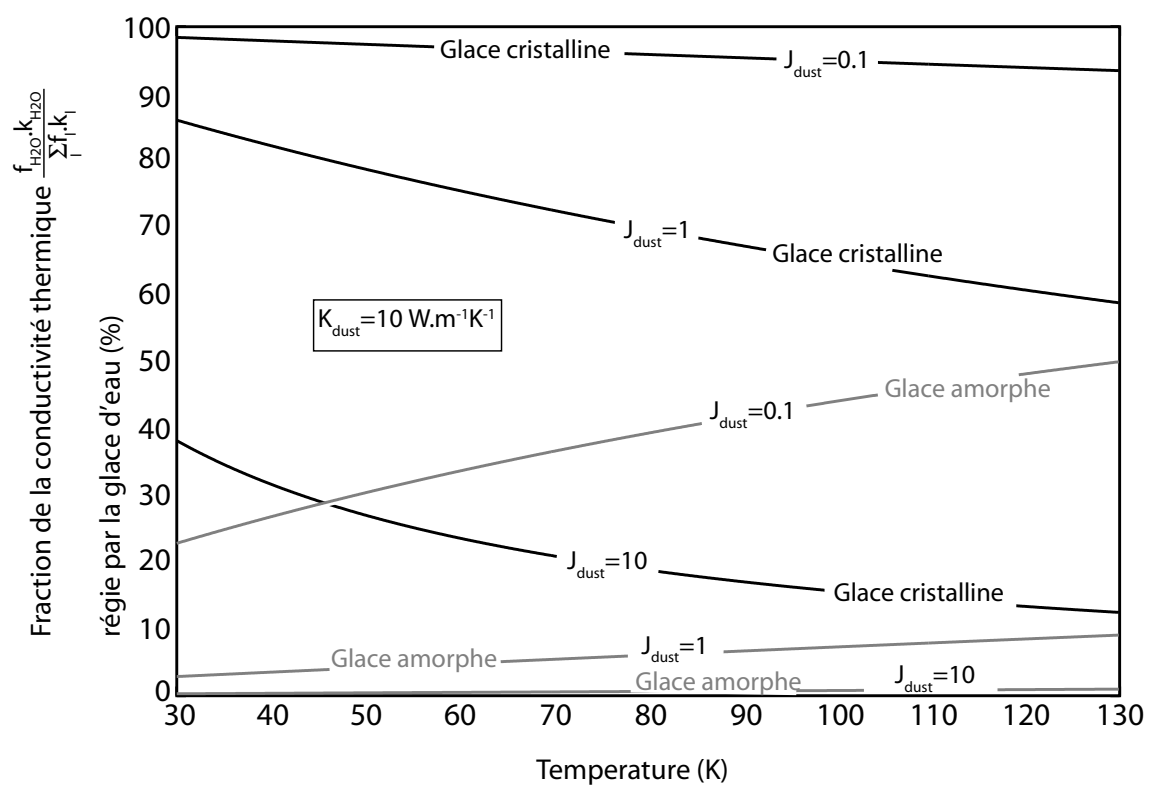
**Fig. 4.8** - Fraction de la conductivité thermique  $\frac{f_{ice} \cdot k_{ice}}{\sum_i f_i \cdot k_i}$  régie par la glace d'eau en fonction de la température du milieu.  $K_{dust} = 10^{-4} \text{W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  et  $J_{dust} = 0, 1$  et  $10$ .

massique  $J_{dust}$  (voir Fig. 4.8).

Pour une conductivité thermique des grains plus élevée, la matrice solide est essentiellement régie par la poussière lorsque la structure de la glace est amorphe. Lorsque cette dernière devient cristalline, c'est l'inverse qui se produit, excepté lorsque la poussière domine le noyau en masse ( $J_{dust} = 10$ ).

La figure 4.10 donne la capacité calorifique volumique  $\rho \cdot c(T)$  du planétésimal en fonction de la température pour les modèles A et B et pour différents rapports massiques  $J_{dust}$ . Pour un même rapport  $J_{dust}$ , plus la capacité calorifique est élevée, moins le gradient temporel de température (membre de gauche de l'équation 2.1) est grand et inversement. Cela signifie que, lors d'une collision, la température sera

4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE



**Fig. 4.9** - Fraction de la conductivité thermique  $\frac{f_{\text{ice}} \cdot k_{\text{ice}}}{\sum_l f_l \cdot k_l}$  régie par la glace d'eau en fonction de la température du milieu.  $K_{\text{dust}} = 10 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  et  $J_{\text{dust}} = 0,1, 1$  et  $10$

d'autant plus élevée que la capacité calorifique sera faible. En revanche, pour cette même capacité, la température de la matrice diminuera plus vite que pour une capacité calorifique plus élevée, pour un même intervalle de temps donné. Enfin, la capacité calorifique est d'autant plus élevée que le rapport massique  $J_{dust}$  est grand. Le modèle B, en particulier, a une capacité calorifique différente d'au moins un facteur deux entre chaque rapport  $J_{dust}$  adopté. La température de la matrice diminuera alors d'autant moins vite que le rapport massique  $J_{dust}$  sera grand.

Dans les sections qui suivent, on étudie l'influence des différents paramètres pour les modèles A et B avec une unique collision à  $t = 1000$  ans et un impacteur de 300 m sur une cible de 10 km.

### $\beta$ - Influence de la conductivité thermique des grains de poussière

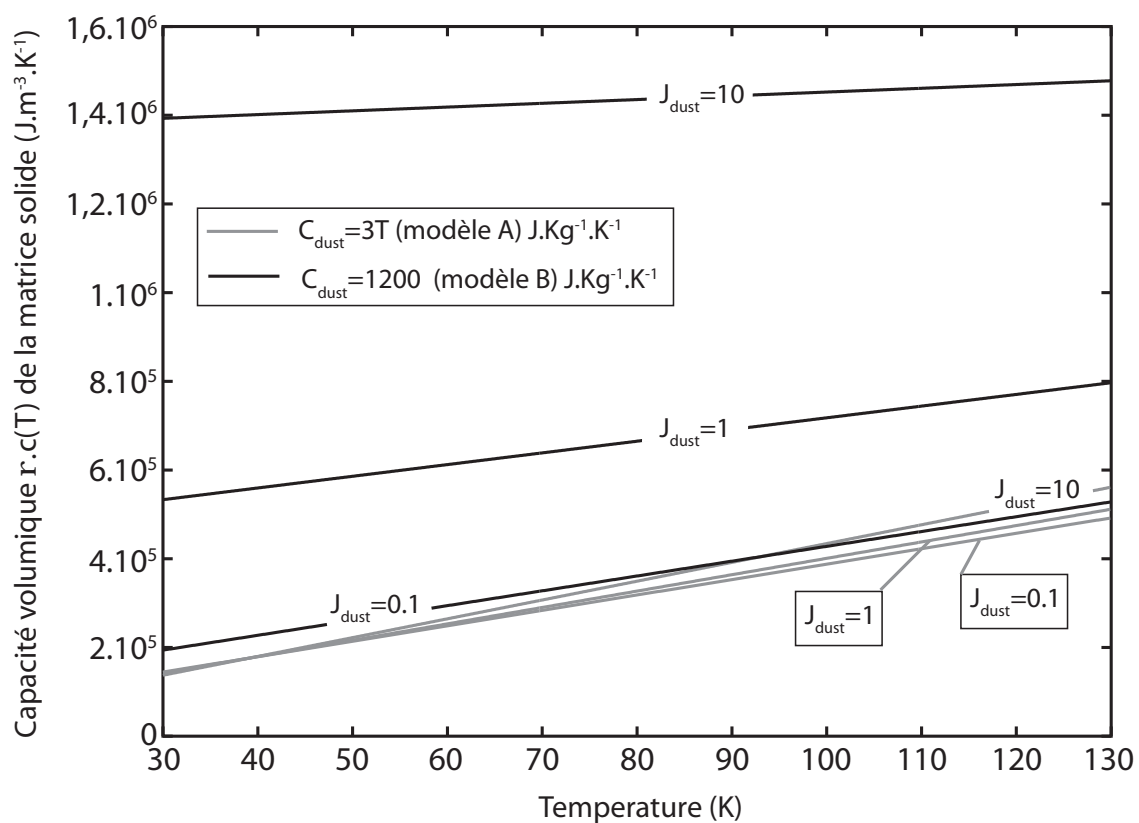
Dans cette section, on étudie l'influence de la conductivité thermique des grains de poussière sur le comportement thermique global du noyau, après une seule collision, pour les modèles A et B, avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1 et aucun volatil condensé dans les pores de la matrice de glace d'H<sub>2</sub>O.

**Modèle A:** Nous avons adopté, pour les noyaux cibles, une capacité calorifique des grains de poussière égale à  $3.T J.kg^{-1}.K^{-1}$ . La figure 4.11 donne l'évolution de la température à l'intérieur du planétésimal pour une conductivité thermique des grains de poussière égale à  $10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$  et un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1. Les figures 4.12 et 4.15 donnent respectivement la température maximale atteinte et la profondeur de cristallisation à l'intérieur du planétésimal cible au cours du temps, pour différentes valeurs de conductivité thermique des grains de poussière.

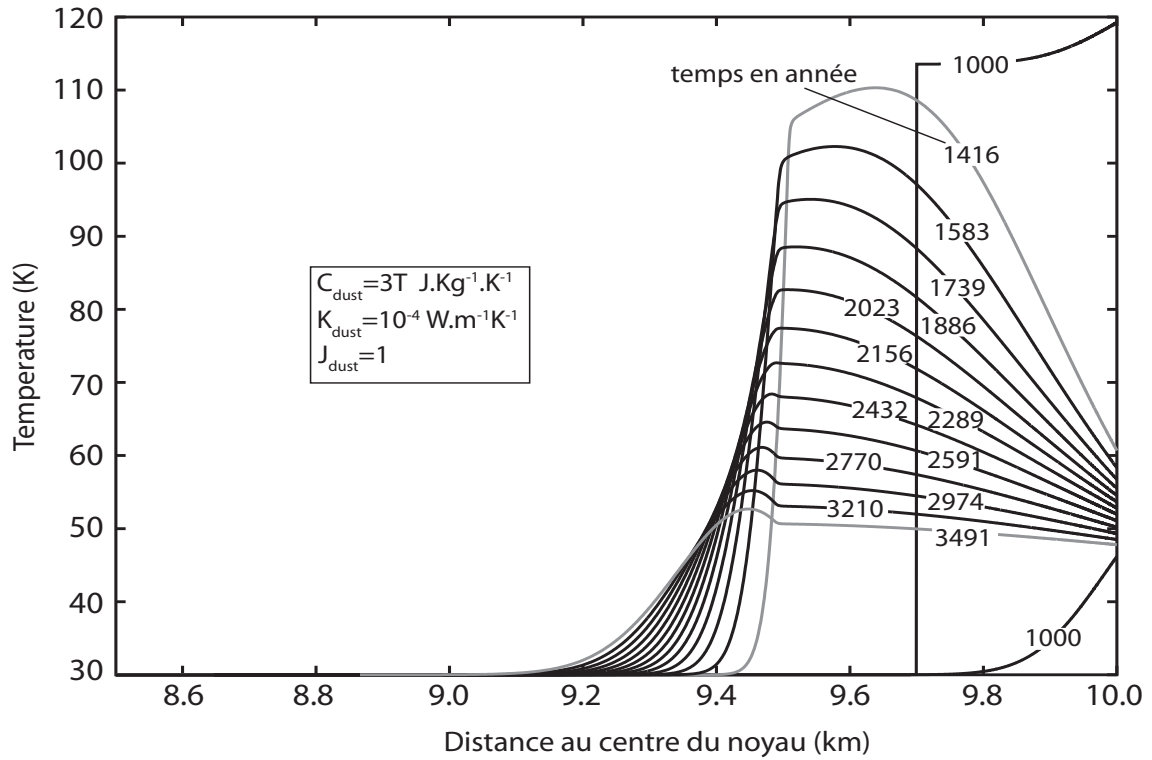
Le profil thermique du planétésimal décroît d'autant plus vite que la conductivité thermique des grains de poussière est élevée. Ainsi, 3000 ans sont nécessaires pour atteindre un équilibre thermique entre l'intérieur du noyau et la surface pour la plus faible des conductivités thermiques. En revanche, il ne faut que 2000 ans pour un modèle avec une conductivité thermique des grains de poussière  $10^5$  fois plus élevée. De plus, la chaleur diffuse davantage à l'intérieur du noyau lorsque la conduction thermique adoptée pour les grains de poussière est la plus élevée.

Au moment de la collision, la température des couches excède 115 K quelle que soit la conductivité thermique. Cette température entraîne la cristallisation des couches superficielles du noyau (voir Fig. 4.15), ce qui entretient l'apport énergétique de la collision et la diffusion de l'énergie vers le centre et la surface du noyau. Cette diffusion est d'autant plus rapide que la conductivité thermique de la glace cristalline est supérieure d'au moins un ordre de grandeur à celle de la glace amorphe. La figure 4.15 montre que la profondeur de cristallisation est d'autant plus importante

4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION  
TRANSNEPTUNIENNE



**Fig. 4.10** - Capacité volumique  $\rho.c(T)$  ( $J.m^{-3}.K^{-1}$ ) de la matrice solide en fonction de la température du milieu, pour les modèles A ( $C_{dust} = 3.T J.kg^{-1}.K^{-1}$ ) et B ( $C_{dust} = 3.T J.kg^{-1}.K^{-1}$ ).  $J_{dust} = 0, 1, 1$  et  $10$

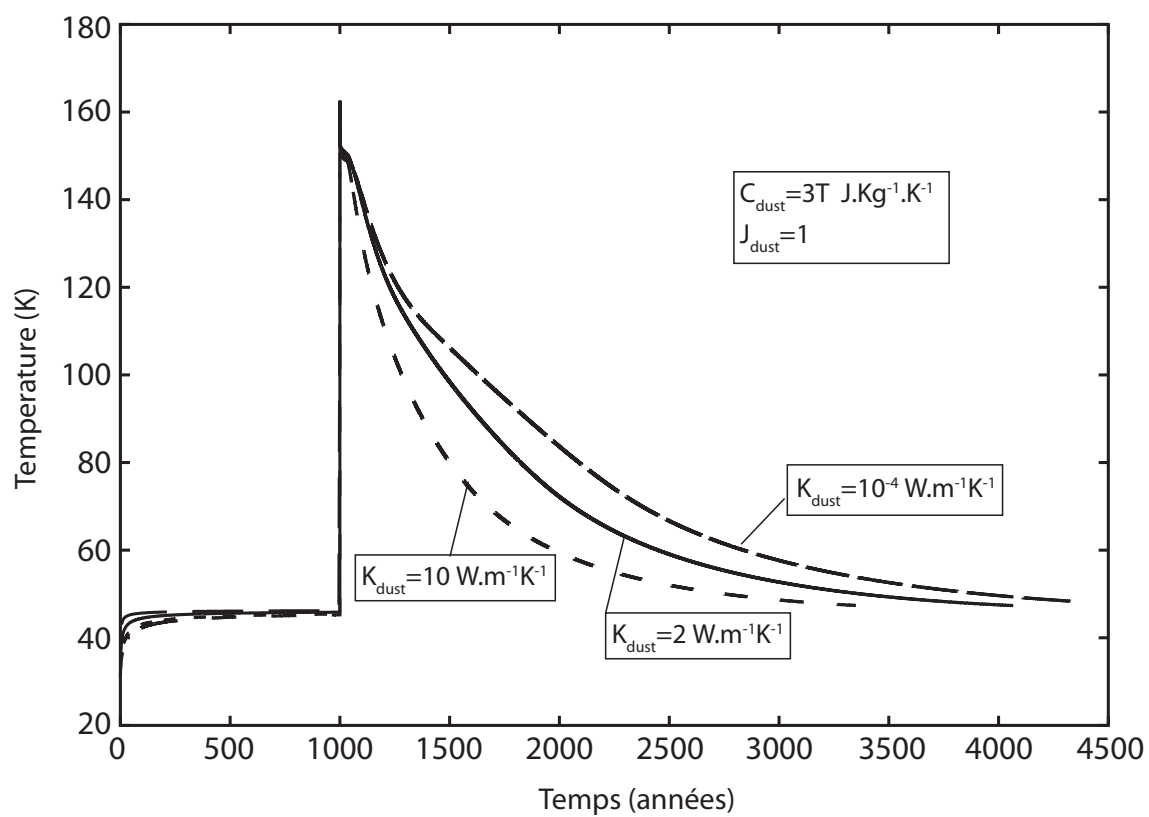


**Fig. 4.11 - Modèle A** – Evolution de la température à l'intérieur du planétésimal de 10 km après un impact avec un projectile de 300m.  $C_{dust} = 3.T \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ .

que la conductivité thermique des grains de poussière est faible. On obtient ainsi pour des conductivités thermiques égales à  $10^{-4}$ , 2 et  $10 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$ , des profondeurs de cristallisation de 490, 435 et 375 m respectivement. En effet, plus le noyau refroidit rapidement à partir de la surface, moins il dispose d'énergie pour cristalliser la glace. D'autre part, au niveau de la zone qui a reçu l'énergie collisionnelle, le processus de cristallisation qui a lieu quasi instantanément après l'impact, n'évolue pas au cours du temps. Une fois que la cristallisation a eu lieu, l'énergie diffuse très rapidement vers la surface puisque la conductivité de la glace, devenue cristalline, est plus importante.

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---



**Fig. 4.12 - Modèle A** – Temperature maximale atteinte dans le noyau cible au cours du temps.  $C_{dust} = 3.T \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}, 2 \text{ \& } 10 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ .

**Modèle B:** Nous avons adopté une capacité calorifique égale à  $1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$  pour les grains de poussière des noyaux cibles. La figure 4.13 donne l'évolution de la température à l'intérieur du planétésimal pour une conductivité thermique des grains de poussière égale à  $10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ . La figure 4.14 donne la décroissance temporelle de la température maximale atteinte à l'intérieur du noyau pour différentes valeurs de conductivité thermique des grains de poussière. Le temps de retour à l'équilibre thermodynamique est beaucoup plus long comparé au modèle A. Ceci s'explique par une capacité calorifique globale plus élevée (la température augmente moins au moment de la collision et décroît moins vite que le modèle A pour un même intervalle de temps) et par l'absence de cristallisation à l'intérieur du noyau, sa température ne dépassant pas 105 K. A cette température, le temps de diffusion de la chaleur est plus court que celui de la cristallisation. La conduction thermique globale du noyau reste alors celle de la matrice amorphe et des grains de poussière. Les figures 4.12 et 4.14, avec respectivement une capacité calorifique de  $3.T$  et  $1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$  montrent que, pour atteindre une température d'environ 50 K (pour une conductivité thermique des grains de poussière égale à  $10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ), il est nécessaire d'attendre près de 3000 ans pour le modèle A, tandis qu'il faut près de 20000 ans pour le modèle B. Ce résultat s'explique par les faibles conductivités thermiques de la glace amorphe et des grains de poussière et par la grande capacité calorifique globale du noyau, qui permettent de conserver l'énergie collisionnelle aussi longtemps dans le modèle B. Dans le modèle A, la grande conductivité thermique de la glace cristalline associée à une capacité calorifique globale plus faible permettent une décroissance de la température beaucoup plus rapide.

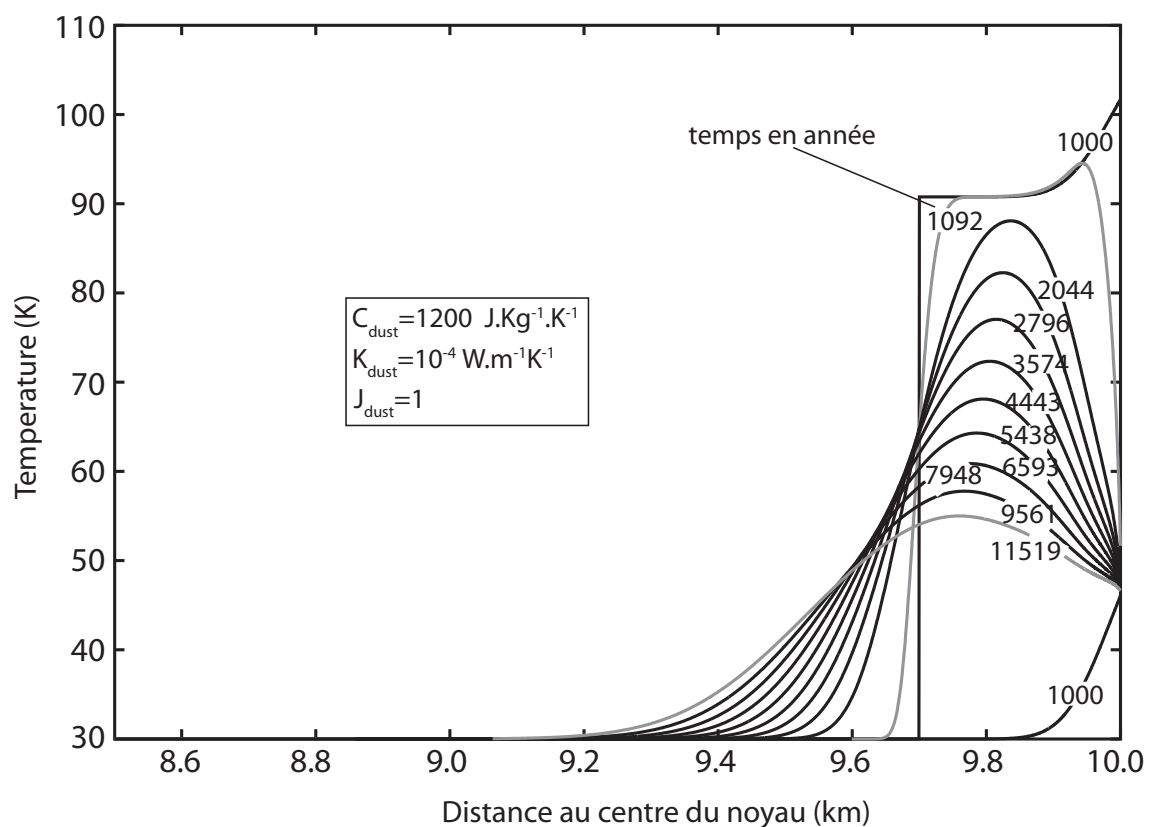
En revanche, lorsque la conductivité thermique des grains de poussière augmente, les temps de retour à l'équilibre des deux modèles A et B deviennent similaires. La grande conductivité thermique de ces grains diminue l'influence de la glace et de la capacité calorifique sur le comportement thermique global du planétésimal (voir figure 4.7).

**Conclusion:** pour un même rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1, seul le modèle A cristallise sur une profondeur de l'ordre de grandeur de la taille de l'impacteur. Le modèle B ne cristallise pas. Les résultats sont valables quelle que soit la conductivité thermique des grains de poussière, bien qu'elle ait une incidence sur l'amplitude de cristallisation et sur le temps de retour à l'équilibre thermique du noyau cible. Ainsi, le retour à l'équilibre thermique des noyaux cibles après collision est d'autant plus lent que la conductivité des grains est faible et que la capacité calorifique volumique du noyau est grande. Finalement, 3000 ans et 20000 ans tout au plus sont nécessaires aux noyaux pour retrouver un équilibre thermique avec l'environnement extérieur pour les modèles A et B respectivement. Lors de collisions multiples, une faible conductivité thermique des grains et une faible capacité calorifique favoriseraient alors la cristallisation du noyau cible. Toutefois, lorsque la cristallisation a lieu, la chaleur diffuse plus rapidement que dans une glace amorphe et la température décroît d'autant plus vite que la capacité calorifique est faible.

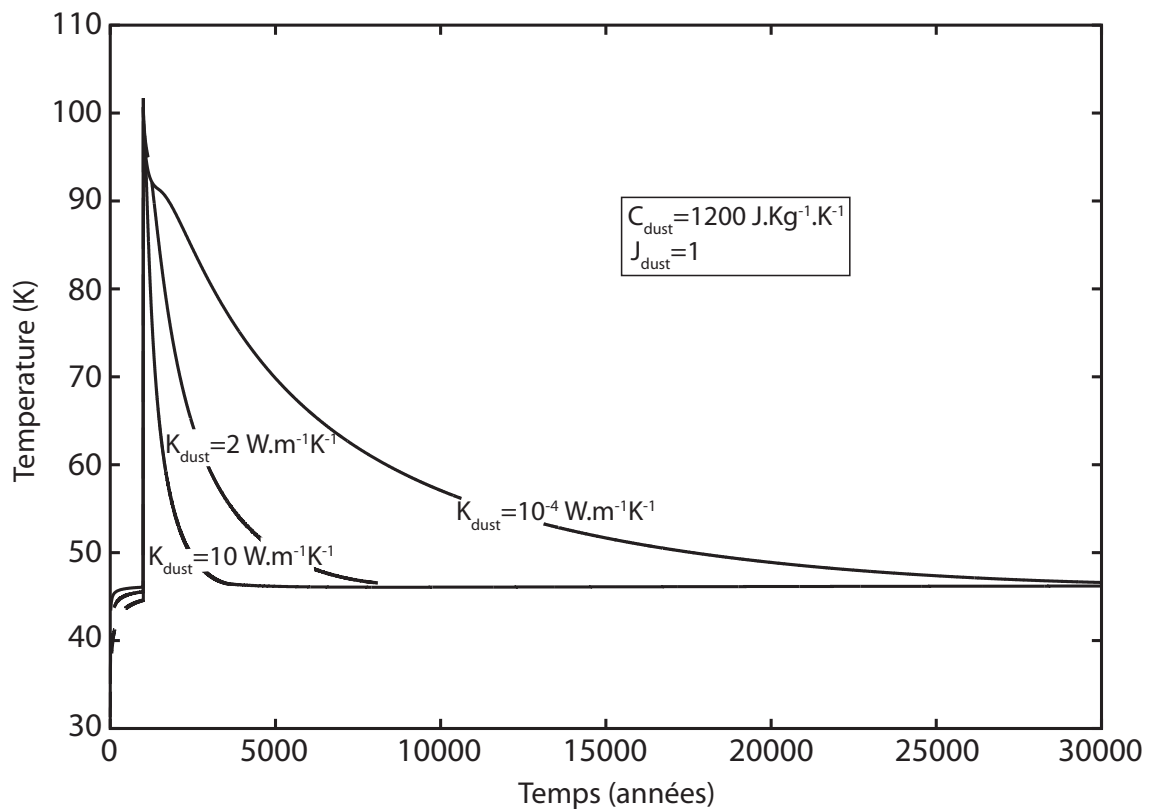


4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION  
TRANSNEPTUNIENNE

---



**Fig. 4.13 - Modèle B** – Evolution de la température à l'intérieur du planétésimal de 10 km après un impact avec un projectile de 300m.  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ .



**Fig. 4.14 - Modèle B** – *Temperature maximale atteinte dans le noyau cible au cours du temps.  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}, 2 \text{ \& } 10 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ .*

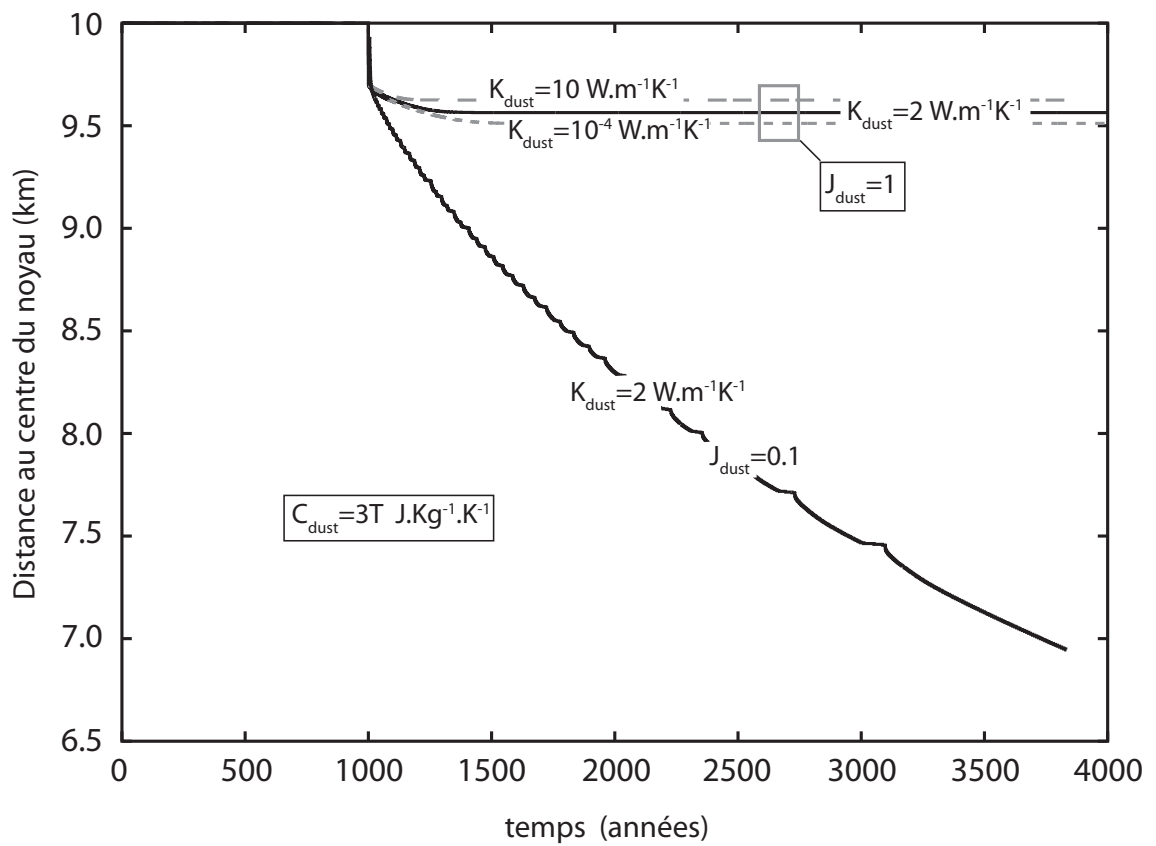
$\chi$  - Influence du rapport massique  $J_{dust}$

Ce rapport a une double influence sur le comportement thermique du noyau. Lorsqu'il augmente, la capacité calorifique et la conductivité thermique des grains de poussière ont une influence plus importante sur celles de la matrice solide du planétésimal cible. En revanche, lorsque  $J_{dust}$  diminue, c'est l'inverse qui se produit: l'influence de la glace d'H<sub>2</sub>O sur la capacité calorifique et la conductivité thermique globale du noyau augmente. Le volume occupé par la glace d'H<sub>2</sub>O dans la matrice solide, donné en figure 4.3, est d'environ 97 et 25% pour des rapports massiques  $J_{dust}$  égaux à 0,1 et 10 respectivement. Dans chacune des sections correspondant aux modèles A et B ci-après, comme pour l'étude de l'influence de la conductivité thermique, on étudie l'influence des rapports massiques  $J_{dust}$  sur le comportement thermique du noyau cible avec  $J_{dust} = 0,1$  & 10 et une conductivité thermique de  $10^{-4}$ , 2 et 10  $W.m^{-1}.K^{-1}$ .

**Modèle A:** Pour un noyau composé essentiellement de glace ( $J_{dust} = 0,1$ ), la cristallisation du noyau s'effectue très rapidement après l'impact, quelle que soit la conductivité thermique des grains de poussière. La température moyenne au moment de l'impact, d'environ 115 K, est sensiblement plus élevée que celle obtenue lorsque le rapport massique  $J_{dust}$  était égal à 1 (section précédente). Cette augmentation de température est liée au volume de glace (97% au lieu de 76% pour  $J_{dust} = 1$ ) qui abaisse la capacité calorifique globale du noyau (voir Fig. 4.10), et fournit davantage de chaleur au moment de la cristallisation. A 115 K, le temps de cristallisation est de l'ordre de 1 an, alors que le temps de diffusion de la chaleur est de plusieurs centaines d'années. La cristallisation engendrée par la collision produit une chaleur suffisante pour qu'une fraction puisse progresser à l'intérieur de la cible (voir Fig. 4.15) et cristalliser les couches sous jacentes (le restant diffusant vers la surface). Les cristallisations successives des couches entretiennent alors la cristallisation globale du noyau qui progresse avec une vitesse moyenne de 1 m par an.

Pour un noyau poussiéreux ( $J_{dust} = 10$ ), la résolution directe de l'équation (4.7) donnerait une température supérieure à 400 K sur toute la zone d'impact, quelle que soit la conductivité thermique des grains de poussière. Cette température élevée découle de la faible capacité calorifique de la poussière qui est le composant dominant dans ce modèle. A cette température, la glace d'eau se liquéfie. Avec ce rapport massique et cette capacité thermique, on atteint les limites du modèle qui n'est pas conçu pour prendre en compte une fusion de la matrice de glace.

**Modèle B:** Avec un modèle riche en glace ( $J_{dust} = 0,1$ ), le noyau atteint une température moyenne de 100 K au moment de la collision, et cela, quelle que soit la conductivité thermique des grains. A cette température, la cristallisation a lieu en un peu moins de 50 ans, ce qui reste inférieur au temps de diffusion de la chaleur vers



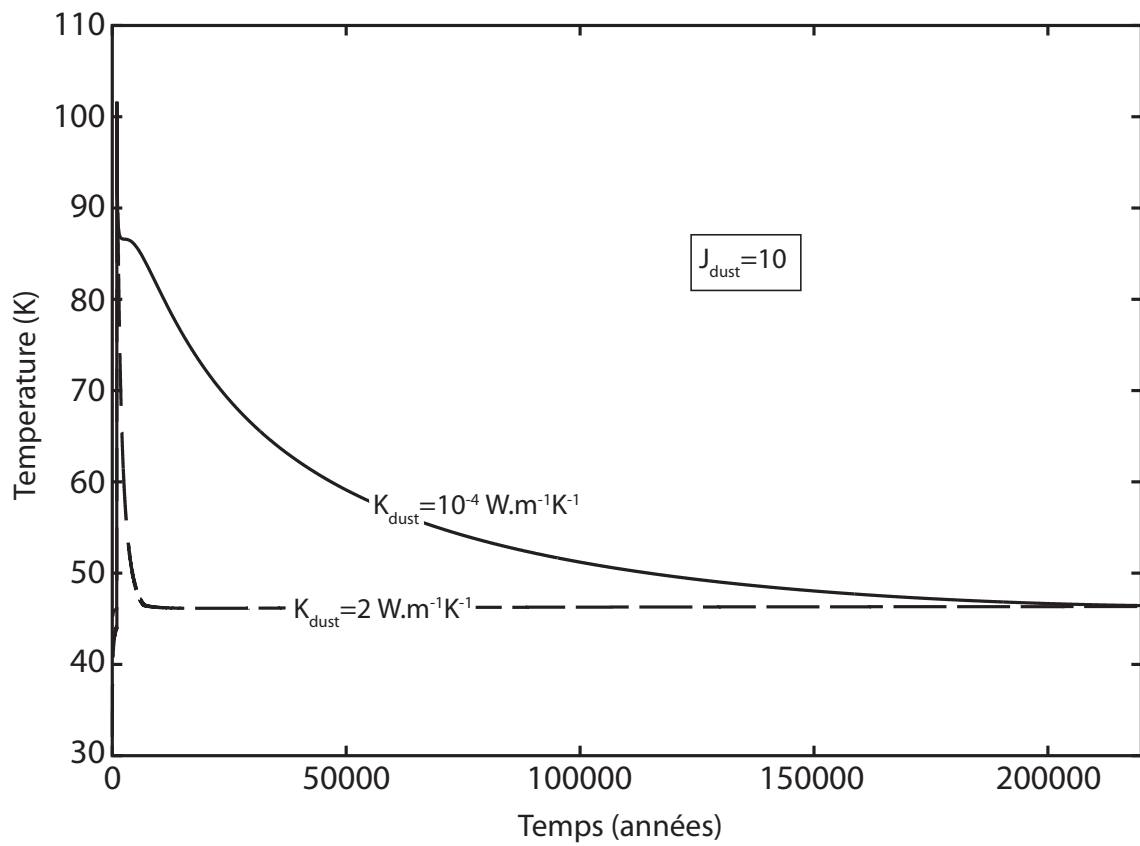
**Fig. 4.15 - Modèle A** – Evolution de la cristallisation à l'intérieur du planétésimal de 10 km après un impact avec un projectile de 300m.  $C_{dust} = 3T \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}, 2 \text{ \& } 10 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 0.1 \text{ \& } 1$ .

la surface. Comme pour le modèle A, la cristallisation du volume de glace d'H<sub>2</sub>O engendre une quantité de chaleur suffisante pour que cette cristallisation progresse plus vite que la diffusion de la chaleur vers la surface. Les cristallisations successives des couches entretiennent alors énergétiquement la cristallisation globale du noyau avec une vitesse moyenne de 87 cm par an.

La figure 4.16 donne la température maximale atteinte à l'intérieur du noyau cible au cours du temps pour un modèle riche en poussière ( $J_{dust} = 10$ ) et une conductivité thermique des grains égale à  $10^{-4}$  et  $2 W.m^{-1}.K^{-1}$  respectivement. Avec ce rapport massique, la glace ne cristallise pas, quelle que soit la conductivité thermique adoptée. Pour ce modèle poussiéreux (la poussière occupe 75% du volume de la matrice solide du noyau cible, voir Fig. 4.3), ce sont les grains de poussière qui régissent le comportement thermique du noyau. La grande capacité calorifique de la poussière ( $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ) engendre une capacité calorifique volumique  $\rho.c(T)$  du noyau supérieure d'au moins un facteur deux par rapport aux modèles avec des rapports massiques  $J_{dust}$  égaux à 0,1 et 1 (voir Fig. 4.10). C'est cette forte capacité calorifique qui diminue l'augmentation de la température au moment de l'impact et empêche la cristallisation du noyau. Comparée à la figure 4.14 qui montre le profil thermique d'un noyau avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1, la figure 4.16 montre qu'il faut jusqu'à 10 fois plus de temps, soit près de 150000 ans, pour que le profil thermique du planétésimal cible, avec une conductivité de la poussière très faible ( $K_{dust} = 10^{-4}W.m^{-1}.K^{-1}$ ), retourne à l'équilibre thermique. Bien que la glace d'eau soit minoritaire, elle contribue pourtant à plus de 99% à la conduction thermique de la chaleur dans le noyau (voir Fig. 4.8) et devrait permettre au noyau de se refroidir aussi vite que dans le modèle avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1. Cependant, la grande capacité calorifique globale du noyau dans le modèle poussiéreux ( $J_{dust} = 10$ ) freine la décroissance de la température du milieu et explique le temps nécessaire pour retourner à l'équilibre thermique. En revanche, en augmentant la conductivité des grains à 10, c'est la poussière qui apporte la plus grande contribution à la conduction de la chaleur dans la matrice solide, et le noyau essentiellement constitué de poussière, retourne plus rapidement à l'équilibre thermodynamique. Ainsi, 146000, 5500 et 2000 ans sont nécessaires pour que le noyau retourne à l'équilibre thermique avec des conductivités thermiques égales à  $10^{-4}$ , 2 et  $10 W.m^{-1}.K^{-1}$  respectivement.

**Conclusion:** Quelles que soient la capacité calorifique et la conductivité thermique des grains de poussière, une seule collision suffit pour engendrer une cristallisation totale du noyau cible pour un noyau composé à 97% de glace ( $J_{dust} = 0.1$ ). Un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 10 pour le modèle A engendrerait une fusion des couches de surface du noyau cible mais notre modèle ne permet pas de modéliser ce processus physique. Pour un rapport massique  $J_{dust}$  identique, on n'observe pas de cristallisation pour le modèle B.

On peut d'ores et déjà faire un bilan de cette première étude collisionnelle d'un



**Fig. 4.16 - Modèle B** – Température maximale atteinte dans le noyau cible au cours du temps.  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} \text{ \& } 2 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $J_{dust} = 10$ .

planétésimal constitué uniquement de glace d'eau et de grains de poussière. Le modèle A (capacité calorifique de  $3.T \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ ) montre que dans les cas extrêmes de rapport massique  $J_{dust}$ , le noyau cible cristallise totalement (modèle pauvre en poussière) ou se liquéfie (modèle riche en poussière). Seul le rapport massique  $J_{dust}$  nominal indique une cristallisation qui ne se propage pas au delà d'un certain temps et d'une certaine profondeur.

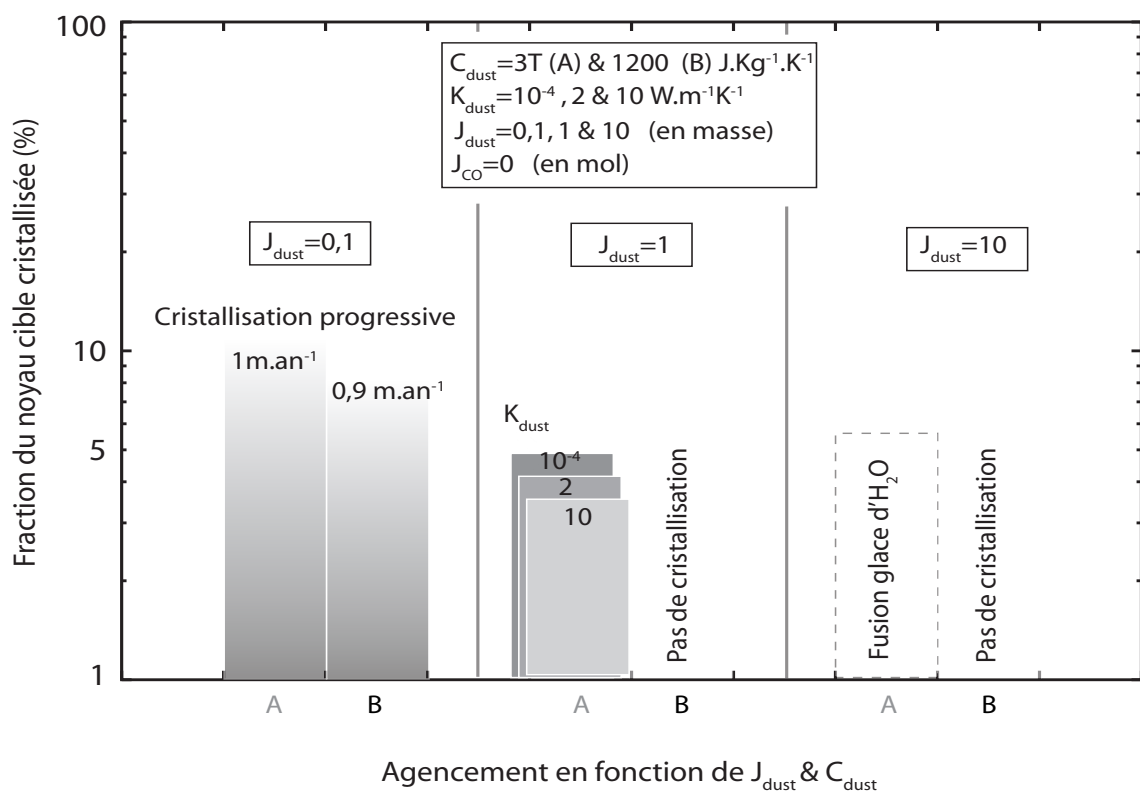
Le modèle B a quant à lui montré que pour un modèle appauvri en poussière ( $J_{dust} = 0,1$ ), la cristallisation du noyau cible croît avec le temps. En revanche, pour un rapport massique  $J_{dust}$  plus élevé (1 et 10), le noyau cible ne cristallise pas, même partiellement.

La figure 4.17 résume l'état physico-chimique de la structure du noyau pour chaque modèle.

#### $\delta$ - Influence de la présence d'un volatil condensé dans les pores

La présence d'un volatil dont le condensat n'est stable qu'à très basse température peut affecter le profil thermique du noyau lors de la collision, et diminuer les effets d'une possible cristallisation, surtout s'il est présent en grande quantité. On examine dans cette section l'influence de la présence de 10% de condensat de CO dans les pores du noyau cible.

**Modèle A:** Quel que soit le rapport massique  $J_{dust}$ , la température au moment de la collision est si élevée (environ 115 K) pour le volatil CO que la totalité du condensat sublime à l'intérieur du réseau de pores sur la profondeur de l'insertion de l'énergie. Cette sublimation totale du condensat engendre une pression partielle moyenne du CO égale à 14 bars. Il est impossible de savoir si cette pression, très élevée, ne pourrait pas "souffler" les couches de surface du noyau, tant la porosité (et peut-être la fragilité structurelle du noyau cible) est importante. Néanmoins, on considère par la suite que le planétésimal reste physiquement intact, puisqu'il a déjà été supposé que l'objet, extrêmement poreux, pouvait résister à une collision physique avec un autre objet de même densité. La sublimation du condensat de CO sur la totalité de la profondeur d'insertion d'énergie absorbe une fraction de l'énergie collisionnelle et engendre une diminution de la température des couches d'une dizaine de Kelvin. L'énergie disponible pour cristalliser le noyau diminue alors, mais les résultats montrent que, quel que soit le rapport massique  $J_{dust}$  (excepté le rapport égal à 10), l'objet cible cristallise sur la profondeur d'insertion de l'énergie collisionnelle. Cependant, la présence de CO condensé en grande quantité dans les pores, au delà des 300 m, freine la cristallisation du noyau cible. Les moles de CO condensées dans les pores absorbent le flux de chaleur provenant de la cristallisation des couches situées au dessus du front de sublimation du CO, et évacuent la chaleur en s'échap-



**Fig. 4.17 - Récapitulatif** – Etat de cristallisation de la glace après une seule collision avec un projectile de 300 m pour les modèles A et B.  $C_{dust} = 3.T$  (A) &  $1200$  (B)  $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}, 2$  &  $10$   $W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 0, 1, 1$  &  $10$ .



pant du noyau. Ainsi, pour un modèle riche en glace ( $J_{dust} = 0, 1$ ), la cristallisation atteint une profondeur maximale de 400 m sous la surface, alors qu'elle avait une progression plus importante vers le centre du noyau en l'absence de ce volatil. Pour un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1, à conductivité thermique globale équivalente, on cristallise moins en présence de CO: la cristallisation n'atteint plus que 340m (avec  $J_{CO} = 0, 1$ ) alors qu'elle était de 435 m ( $J_{CO} = 0$ ) pour une conductivité thermique des grains de poussière égale à  $2 W.m^{-1}.K^{-1}$ .

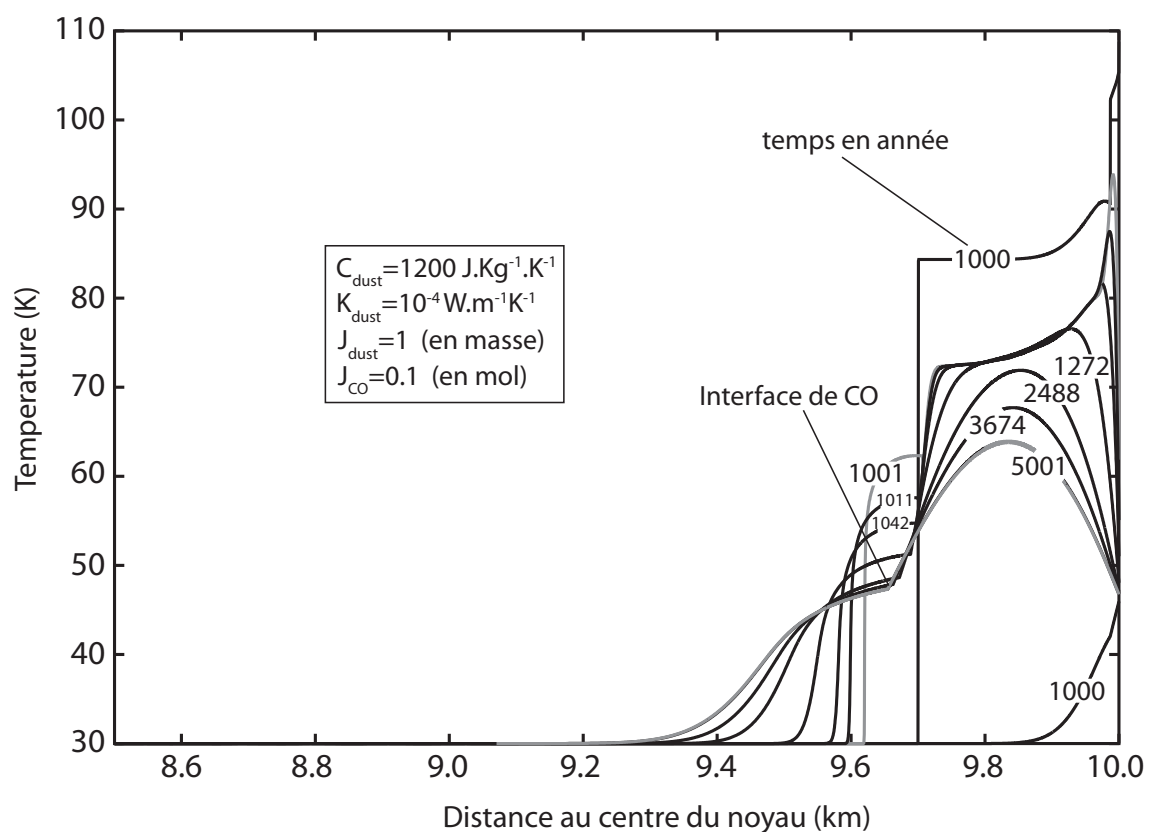
**Modèle B:** Avec une capacité calorifique globale plus élevée que le modèle A (et donc une température plus faible au moment de la collision), seule une fraction du CO condensé sublime à l'intérieur du réseau de pores au moment de la collision. On rappelle que, pour le modèle A, tout le CO condensé sublimait sur une profondeur de l'ordre de la taille de l'impacteur. Au moment de l'impact, la température atteint environ 90 K sur la profondeur d'insertion de l'énergie. A cette température, le CO condensé, en équilibre avec la phase gazeuse, devient liquide. Le modèle n'est pas conçu pour prendre en compte l'écoulement de la phase liquide du CO. En revanche, la pression de vapeur saturante, ainsi que la capacité calorifique du volatil restent valides dans ce domaine de température (voir Fig. D.1). De plus, la pression atteinte à l'intérieur des pores au moment de l'impact est en moyenne égale à 2,7 bars, pression très élevée, même si elle reste inférieure à celle créée dans le modèle A au moment de la collision. On néglige par la suite, tout comme dans le modèle A, les effets d'une telle pression ainsi que les écoulements que pourrait induire la fusion/liquéfaction du CO dans le noyau cible.

Finalement, comme le modèle A, quel que soit le rapport massique  $J_{dust}$ , la présence de CO condensé dans les pores empêche davantage la cristallisation du noyau cible en absorbant l'énergie collisionnelle. On illustre graphiquement ci-après les effets d'une collision sur un noyau composé de CO. La figure 4.18 donne le profil thermique du noyau cible au cours du temps pour une capacité calorifique égale à  $1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ , un rapport molaire  $J_{CO}$  égal à 10% et une conductivité des grains de poussière  $K_{dust}$  égale à  $10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ . Avant la collision, la couche de CO se trouve à 20 m sous la surface du noyau cible. Au moment de la collision, il se crée une dichotomie thermique à l'intérieur de ce noyau. Les couches qui ne contiennent pas de condensat, soient les 20 premiers mètres, ont une température avoisinant les 100 K. En revanche, les couches qui contiennent du CO condensé ont une température inférieure d'environ 10 K à celle des couches sans condensat. Cette dichotomie thermique au moment de la collision est liée à l'absorption d'une grande quantité d'énergie par la sublimation partielle du CO dans le réseau de pores. Après la collision, en l'espace d'un mois à un mois et demi, compte tenu de la température à l'intérieur du noyau et de la volatilité du CO, le noyau cible a été appauvri en CO sur près de 280 m, soit la quasi totalité de la profondeur ayant reçu l'énergie de collision. Durant ce laps de temps, le noyau est passé de 90 K à environ 70–80 K pour les couches ayant reçu cette énergie. La figure 4.19 donne la densité molaire des condensats de CO dans le noyau en fonction de la distance au centre

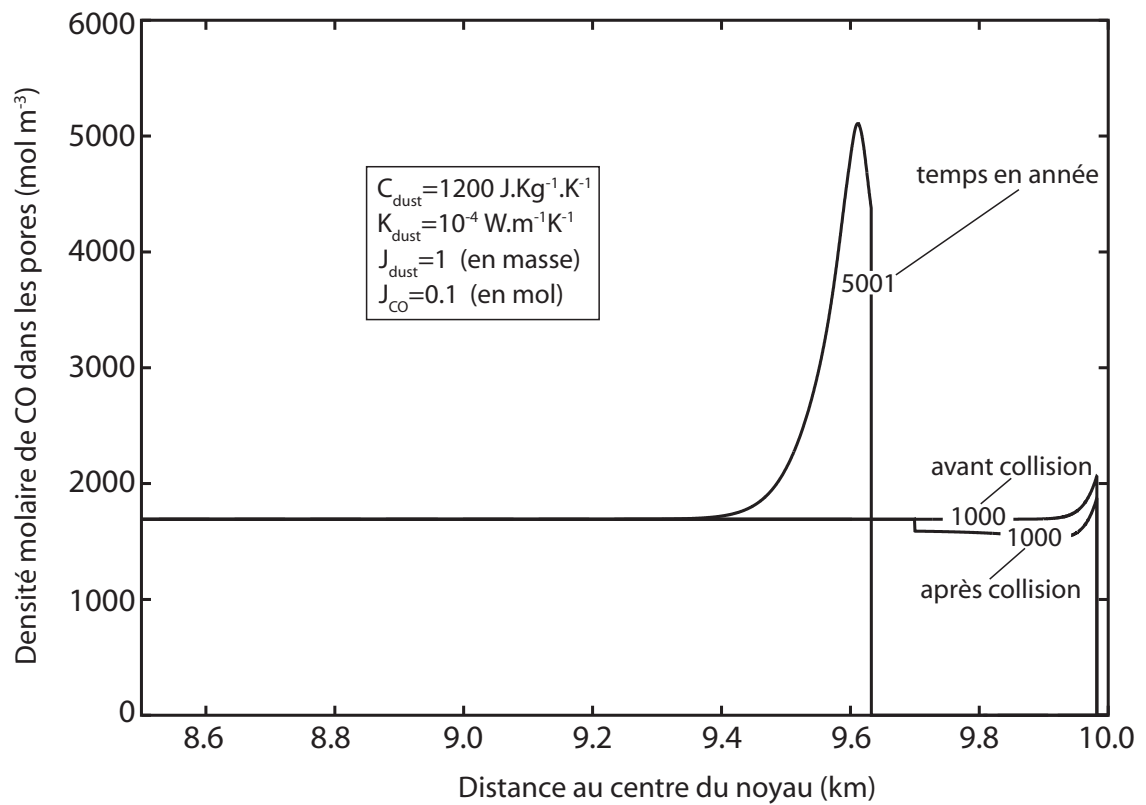
du noyau. Une grande quantité de ce CO sublimé s'est échappée du noyau cible, mais une fraction non négligeable s'est condensée plus en profondeur, diminuant alors la porosité jusqu'à 40% sous l'interface de sublimation du CO (voir fig. 4.19) et formant un bourrelet de masse et d'énergie très important. La figure 4.20 donne la température maximale atteinte à l'intérieur du noyau cible pour un modèle avec du CO et un modèle sans CO pour une capacité calorifique des grains égale à  $1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ , une conductivité thermique des grains égale à  $10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$  et un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1. La présence du CO dans les pores de la matrice de glace et de poussière accélère le retour à l'équilibre thermique du noyau cible en absorbant une grande quantité d'énergie lors de la sublimation du volatil.

**Conclusion:** La présence de condensat de CO en quantité non négligeable (10% en mol d' $H_2O$ ) dans le réseau de pores réduit l'amplitude de cristallisation et empêche sa progression dans le noyau cible en absorbant l'énergie collisionnelle lors de sa sublimation. La recondensation en profondeur d'une partie des volatils forme une barrière énergétique très importante difficilement franchissable énergétiquement par le flux de chaleur provenant de la collision et de la cristallisation des couches supérieures. En dessous de cette barrière énergétique, le noyau cible reste physico-chimiquement intact. Les résultats obtenus avec un modèle composé uniquement de glace d'eau et de poussière constituent alors une valeur limite supérieure de l'état de transformation physico-chimique du noyau cible.

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE



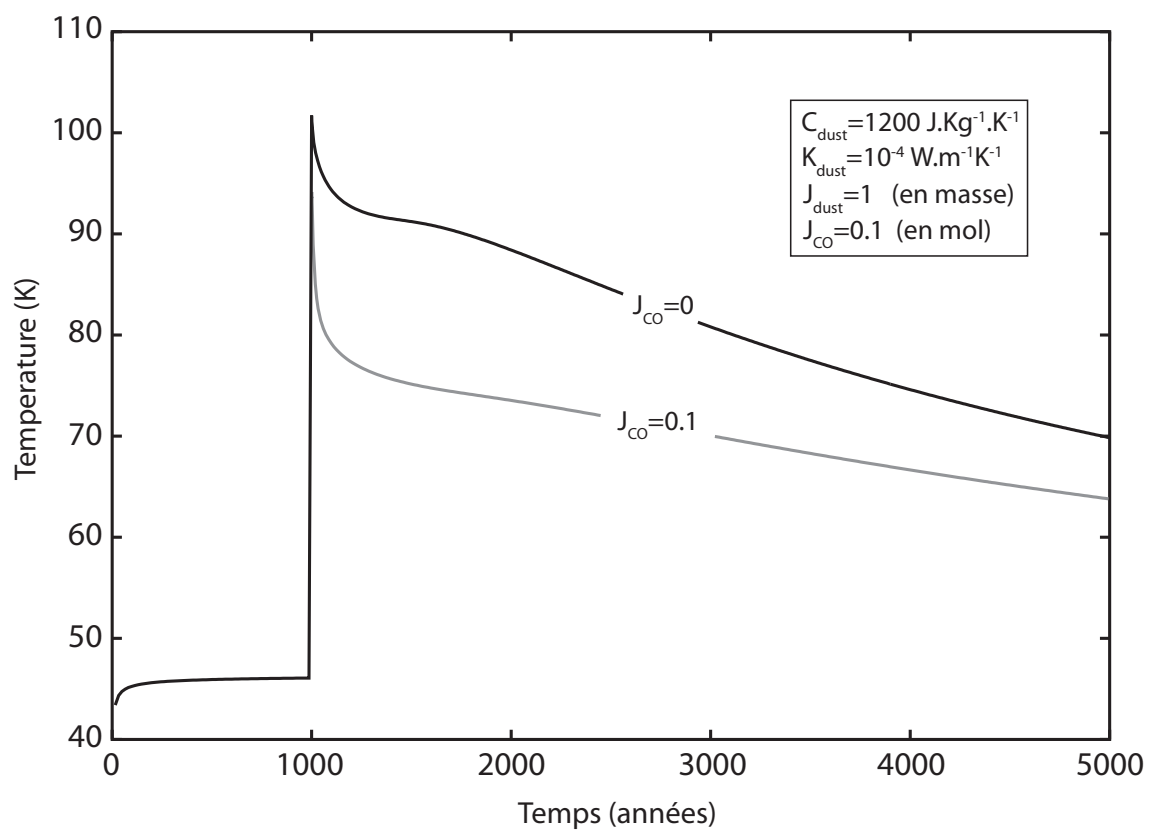
**Fig. 4.18 - Modèle B** – Evolution de la température à l'intérieur du planétésimal de 10km après un impact avec un projectile de 300m.  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ ;  $J_{CO} = 0.1$ .



**Fig. 4.19 - Modèle B** – Profil de densité du CO solide dans le réseau de pores du noyau cible en fonction de la distance au centre du noyau.  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ ;  $J_{CO} = 0.1$ .

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---



**Fig. 4.20 - Modèle B** – *Temperature maximale atteinte dans le noyau cible au cours du temps.*  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ ;  $J_{CO} = 0.1$ .

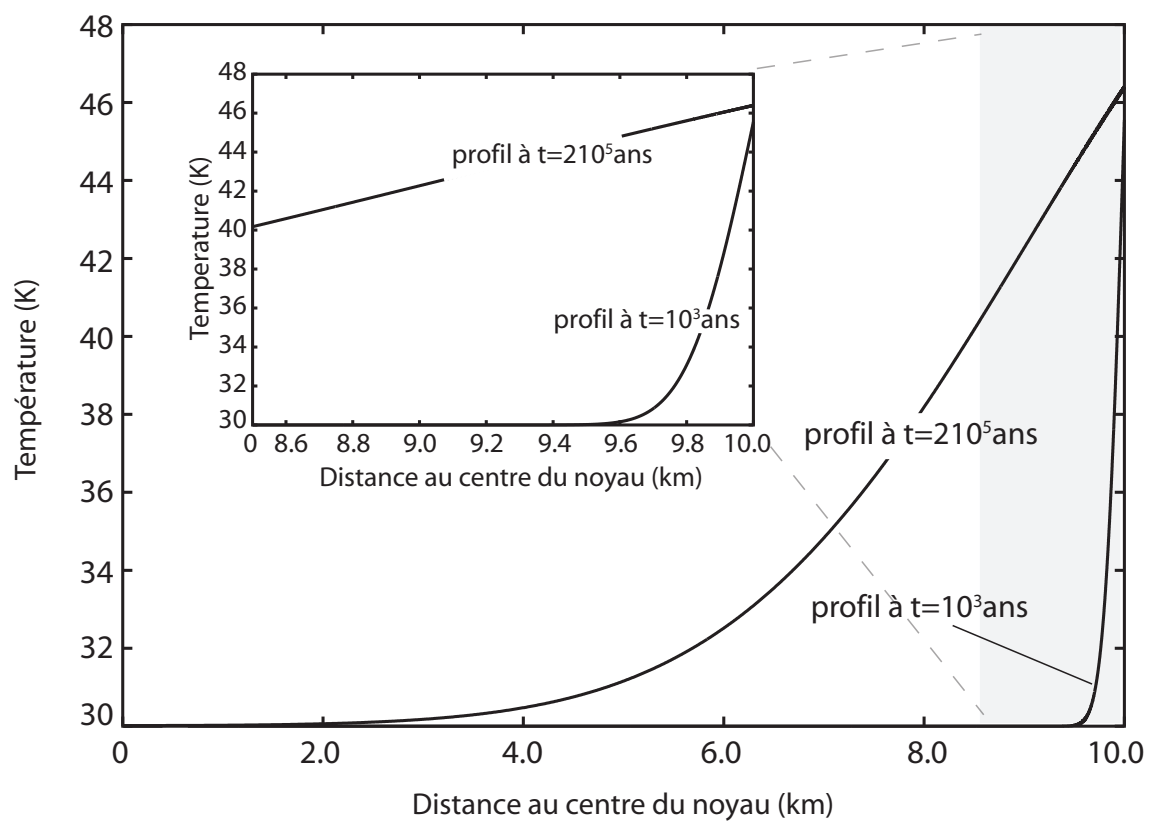
### 4.4.2 Etude d'une série de collisions

L'étude préliminaire nous a permis de comprendre de quelle manière les différents paramètres physiques pouvaient influencer sur le comportement thermique du noyau cible, et de déterminer quels pouvaient être ceux qui avaient la capacité d'engendrer une transformation physico-chimique du noyau cible. La taille de l'impacteur, ainsi que le moment de la première collision ( $t = 1000$  ans) que nous avons choisis étaient arbitraires. Cependant, la température du planétésimal est un paramètre important lorsque l'on se trouve à la limite d'une possible transformation physico-chimique. Le temps écoulé avant le premier impact, nécessaire pour que l'intérieur du planétésimal soit à l'équilibre thermique avec l'environnement extérieur, est sans doute insuffisant au regard du temps que pourrait passer un tel objet dans cette région sans subir une seule collision ( $10^7$  à  $10^8$  ans suivant sa taille d'après Stern et al., 1995; Davis & Farinella, 1997; Durda & Stern, 2000). On peut supposer alors que le profil thermique du noyau avant la collision pourrait être beaucoup plus plat si les collisions n'avaient lieu que plusieurs dizaines de milliers d'années après la formation du planétésimal. La figure 4.21 montre ainsi que le profil obtenu pour un modèle pauvre en CO ( $J_{CO} = 0$ ) au bout de  $2.10^5$  ans est plus plat et plus élevé en température ( $T > 40$  K) que ne l'était celui obtenu au bout de 1000 ans avec les mêmes paramètres physiques, pour les 1000 premiers mètres sous la surface du noyau cible. Nous avons également reproduit la même expérience avec un planétésimal qui contient cette fois-ci du CO condensé en grande quantité ( $J_{CO} = 0,1$ ) dans les pores. Les résultats montrent que la profondeur de l'interface de CO progresse de 300 m sous la surface de la cible en approximativement 300000 ans pour un modèle B ayant un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1 et une conductivité des grains de poussière égale à  $10^{-4}$  et  $2 W.m^{-1}.K^{-1}$ . La collision avec un impacteur de 300 m au delà de ce laps de temps n'engendrerait donc pas d'interaction immédiate entre l'énergie collisionnelle et la phase condensée du CO à l'intérieur du noyau cible. De plus, nous avons vu que le profil thermique après la collision décroissait davantage en présence de CO condensé dans les pores de la matrice solide. On peut donc affirmer que les collisions qui vont être simulées sur un modèle de planétésimal sans CO peuvent donner des résultats physiques qui constituent des valeurs limites supérieures.

Afin de donner une valeur limite supérieure à une possible transformation physico-chimique du noyau cible, nous avons décidé d'imposer sur l'ensemble du noyau une température initiale identique de valeur égale à celle de la surface à l'équilibre thermique, soit 46 K à 35 UA. Ce profil de température pourrait être celui d'un noyau dont la température de formation serait égale à 46 K, ou bien un profil thermique acquis par un noyau ayant passé un temps infini à cette position dans la ceinture de Kuiper. Avec ce profil thermique, nous avons réitéré les tests effectués dans la section précédente avec une seule collision et un impacteur de 300 m. La transformation physico-chimique de la cible a lieu dès le premier impact pour les rapports massiques  $J_{dust}$  du modèle B qui ne donnaient pas de cristallisation avec le profil thermique âgé de 1000 ans. C'est l'augmentation de la température initiale de 16 K sur l'en-

4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---



**Fig. 4.21** - Profil de température à l'intérieur du noyau cible à environ  $t = 2.10^5$  ans.  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 2 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ .

semble du noyau qui accroît la température de la zone collisionnelle au moment de l'impact et permet la cristallisation partielle du noyau. Les résultats montrent, tout comme avec le modèle A, que la cristallisation du noyau a lieu sur une profondeur de l'ordre de la taille de l'impacteur, avec une légère augmentation de la profondeur de cristallisation de quelques pourcents.

On propose dans cette section d'effectuer une série de collisions sur une longue durée avec ce profil thermique plat, et de déterminer un intervalle de temps entre chaque collision qui permette une évolution physico-chimique du noyau cible. Les cibles étudiées ont un rayon de 10 et 100 km et correspondent chacune à une section ci-dessous. A chaque taille de cible, on étudie une série de rayons d'impacteurs possibles jusqu'à la taille limite maximale à ne pas dépasser, pour voir l'influence du volume du projectile sur l'évolution thermique de la cible. Bien qu'il ait déjà été déterminé que le rayon maximal de l'impacteur était limité à 3-5% de celui de la cible lorsque celle-ci a un rayon de 10km, on étudie l'effet d'un impacteur dont le rayon pourrait atteindre 10% de celui de la cible, exactement comme pour la cible de 100 km.

Compte tenu des résultats obtenus au cours de l'étude préliminaire, nous avons recherché un intervalle de temps entre chaque collision qui permette la propagation de la cristallisation à l'intérieur du noyau pour les modèles A et B avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1, et pour un modèle B avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 10. Les modèles A et B avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 0,1 cristallisent complètement avec une unique collision en l'absence de CO condensé dans la matrice solide. En présence de CO, tous les modèles ont montré que la transformation physico-chimique du noyau cible étaient stoppée prématurément, quelle que soit la taille de l'impacteur et la température initiale choisie (30 ou 46 K). Les noyaux cibles de 10 et 100 km sont donc composés uniquement de glace d'H<sub>2</sub>O et de poussière pour les modèles A et B. On rappelle que le modèle A avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 10 n'est pas étudié compte tenu de la température très élevée de la matrice solide après une collision (fusion de la glace d'H<sub>2</sub>O).

La faible conductivité thermique des grains de poussière favorise la cristallisation parce qu'elle augmente le temps de retour à l'équilibre thermodynamique du noyau cible. Pour cette raison, nous avons effectué les tests avec la plus faible des conductivités thermiques ( $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ) et les rapports massiques  $J_{dust}$  appropriés comme indiqué ci-dessus. Pour chaque taille d'impacteur, nous recherchons un intervalle de temps qui permette la propagation au noyau cible de la transformation physico-chimique engendrée par les collisions successives.

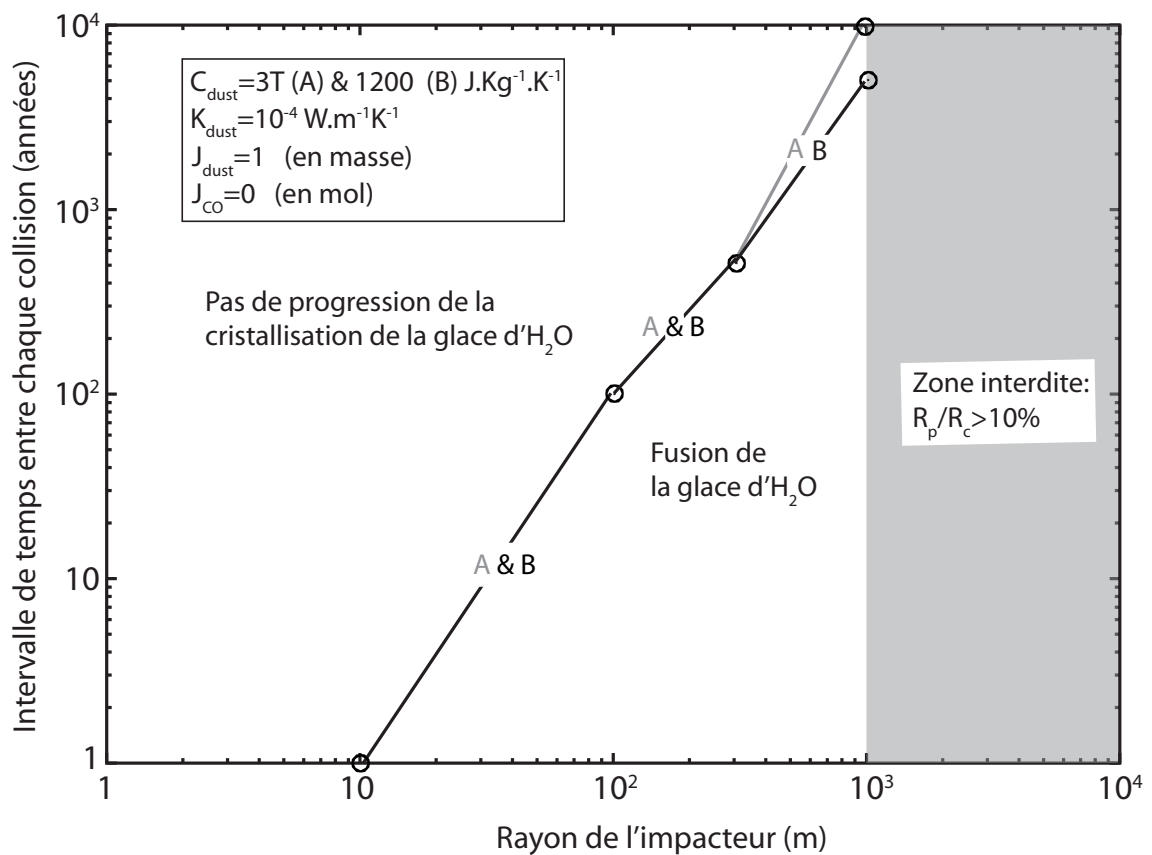


### Cible de 10km

Les rayons d'impacteur testés pour cette cible sont 10, 100, 300 et 1000m. Les figures 4.22 et 4.23 donnent l'intervalle de temps entre chaque collision qui permet la progression de la cristallisation en fonction de la taille de l'impacteur, respectivement pour les modèles A et B avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1, et pour le modèle B avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 10. La zone grisée de chacune des figures indique la région où le rayon du projectile dépasse les 10% de celui de la cible, limite que nous nous sommes imposés pour ne pas la détruire. Pour un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1 (voir Fig. 4.22), quel que soit le modèle (A ou B), la cristallisation ne progresse que si l'intervalle de temps entre les impacts devient excessivement court. Ainsi, 5000 et 10000 ans entre les collisions sont nécessaires pour les plus gros impacteurs des modèles B et A respectivement ( $J_{dust} = 1$ ). La différence d'intervalle de temps entre deux collisions pour les modèles A et B trouve son origine dans la différence de valeur de la capacité calorifique des grains de poussière: plus la capacité calorifique est faible, plus l'élévation de température est importante et plus le laps de temps entre deux collisions peut être important. Pour les projectiles de petite taille, le temps de diffusion de la chaleur vers la surface, en compétition avec le temps de cristallisation du noyau cible, décroît d'autant plus vite que l'épaisseur du noyau cible recevant l'énergie collisionnelle est petite. La faible différence observée entre les deux modèles pour les intervalles de temps entre les collisions devient alors négligeable à mesure que la taille de l'impacteur diminue.

Quelle que soit la taille de l'impacteur, le front de cristallisation du noyau cible ne progresse pas sans flux de chaleur quasi continu provenant des collisions. En espaçant ou en arrêtant les collisions successives qui ont lieu à intervalle de temps régulier, la progression de la cristallisation du noyau s'arrête progressivement (zone située au dessus de la courbe). L'augmentation de l'intervalle de temps entre deux collisions ne fait que réchauffer le noyau cible sans créer nécessairement les conditions thermiques d'une progression du changement de phase de la glace. Inversement, la réduction de cet intervalle de temps pour les plus gros des impacteurs ( $R_p > 100$  m) crée en revanche les conditions thermiques d'une fusion de la matrice solide (zone située en dessous de la courbe). Finalement, les conditions d'une progression de la transformation physico-chimique du noyau cible résultent d'un équilibre entre la température engendrée lors d'une collision (qui ne dépend que de la capacité calorifique des différents composants), la diffusion de l'énergie collisionnelle vers la surface et au reste du noyau, et l'intervalle de temps entre deux apports énergétiques. Un déséquilibre dans cette combinaison de paramètres peut engendrer l'absence de progression de transformation physico-chimique ou bien la fusion de la matrice de glace.

Pour une cible poussiéreuse ( $J_{dust} = 10$ , modèle B uniquement, voir Fig. 4.23), les intervalles de temps entre les collisions, pour les différentes tailles d'impacteur, sont semblables aux modèles A et B, avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1. Ainsi, 500 et



**Fig. 4.22 - Cible de 10 km** - Intervalle de temps entre chaque collision pour permettre la progression de la cristallisation en fonction du rayon de l'impacteur pour une cible de 10 km de rayon. La zone grisée correspond à un rayon d'impacteur supérieur à 10% capable de détruire la cible.  $C_{dust} = 3.T$  (A) &  $1200$  (B)  $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ .

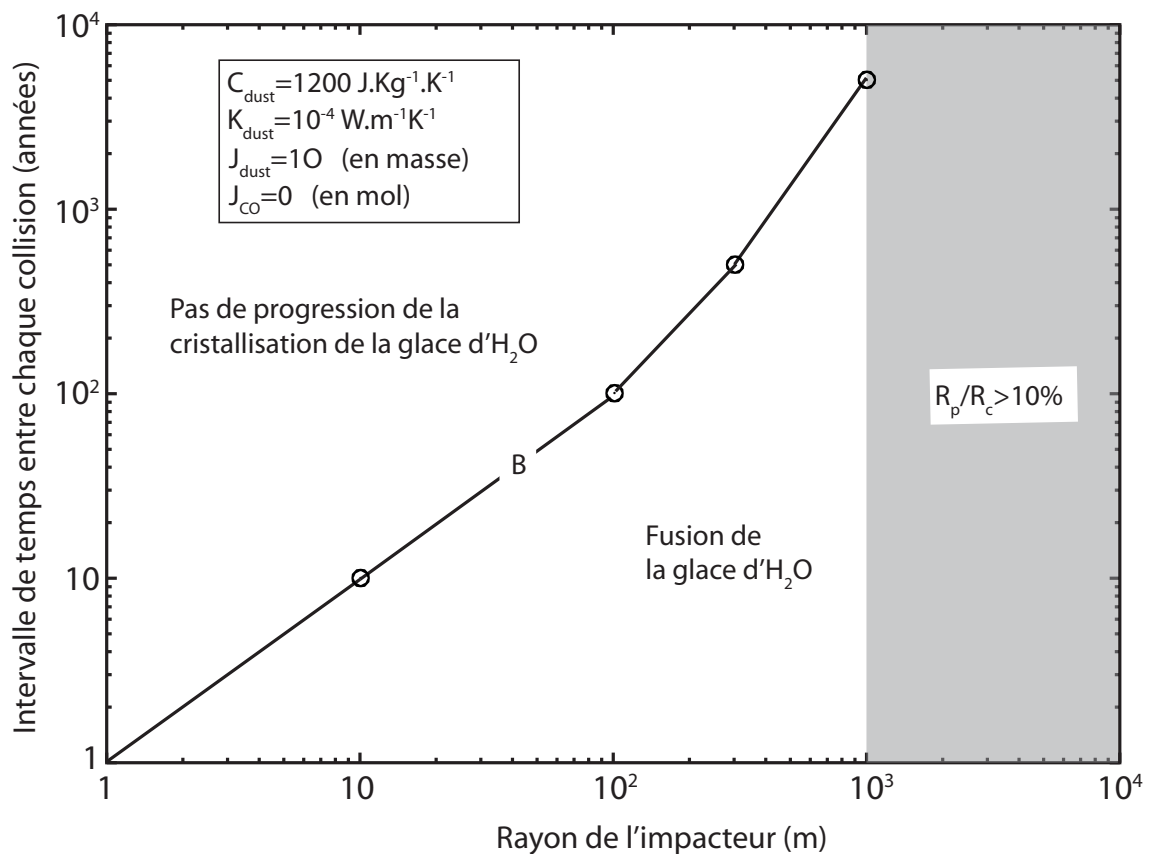
5000 ans sont indispensables pour des projectiles de 300 et 1000 m respectivement. Ici aussi, un laps de temps plus grand entre les collisions ne permet pas la progression de la cristallisation alors qu'un laps de temps plus court engendre une fusion des 25% de glace (en volume) de la matrice solide. Pour les petits impacteurs, il semble plus facile de cristalliser avec ce modèle plutôt qu'avec le modèle  $J_{dust} = 1$ . La proximité de la zone d'impact avec la surface engendre le refroidissement rapide de la cible. Ce refroidissement est d'autant plus rapide que la capacité calorifique volumique du noyau est faible. La grande capacité calorifique volumique du noyau (modèle B avec  $J_{dust} = 10$ ) favorise alors davantage la cristallisation pour les petits impacteurs que les modèles précédents (modèles A & B avec  $J_{dust} = 1$ ).

Pour un même intervalle de temps entre les collisions, la présence de 10% de CO réduit davantage temporellement et graduellement la progression de la cristallisation. Il est cependant impossible de réduire l'intervalle de collision sans engendrer de fusion des couches déjà appauvries en CO.

### Cible de 100km

Les tailles d'impacteur testées pour cette cible sont 10, 100, 300, 1000 et 10000 m. Les modèles A et B avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 0,1 cristallisent progressivement avec une unique collision en l'absence de CO condensé dans la matrice solide. En revanche, en présence de CO, la transformation physico-chimique du noyau cible est ralentie, quelle que soit la taille de l'impacteur. Tout comme la cible de 10 km, les modèles A et B avec des rapports massiques  $J_{dust}$  supérieurs à 0,1 ne cristallisent pas progressivement mais uniquement sur une profondeur équivalente à la taille de l'impacteur pour une collision unique.

Les figures 4.24 et 4.25 donnent l'intervalle de temps entre chaque collision qui permet la progression de la cristallisation en fonction de la taille de l'impacteur pour, respectivement, les modèles A et B, avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1, et pour le modèle B avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 10. La zone grisée de chacune des figures indique la région où le rayon du projectile dépasse les 10% de celui de la cible, limite que nous nous sommes imposés pour ne pas la détruire. Les intervalles de collisions pour les impacteurs ayant une taille inférieure ou égale à 1000 m sont rigoureusement identiques à ceux déterminés pour une cible de 10 km quel que soit le modèle (A ou B) et le rapport massique  $J_{dust}$ : les mêmes causes provoquent des effets similaires. Les divergences sur le laps de temps entre deux collisions qui étaient apparues entre les modèles A et B avec un rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1 pour les projectiles de 300 et 1000 m disparaissent pour ceux de 10 km (voir Fig. 4.24). Entre 300 et 1000 m, seule la capacité calorifique, qui influe sur la température au moment de la collision, influe sur le laps de temps entre deux collisions nécessaire pour engendrer une cristallisation progressive du noyau cible. L'élévation de température au moment de l'impact qui est supérieure pour le modèle



**Fig. 4.23 - Cible de 10 km** - Intervalle de temps entre chaque collision pour permettre la progression de la cristallisation en fonction du rayon de l'impacteur pour une cible de 10 km de rayon. La zone grisée correspond à un rayon d'impacteur supérieur à 10% capable de détruire la cible.  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 10$ .

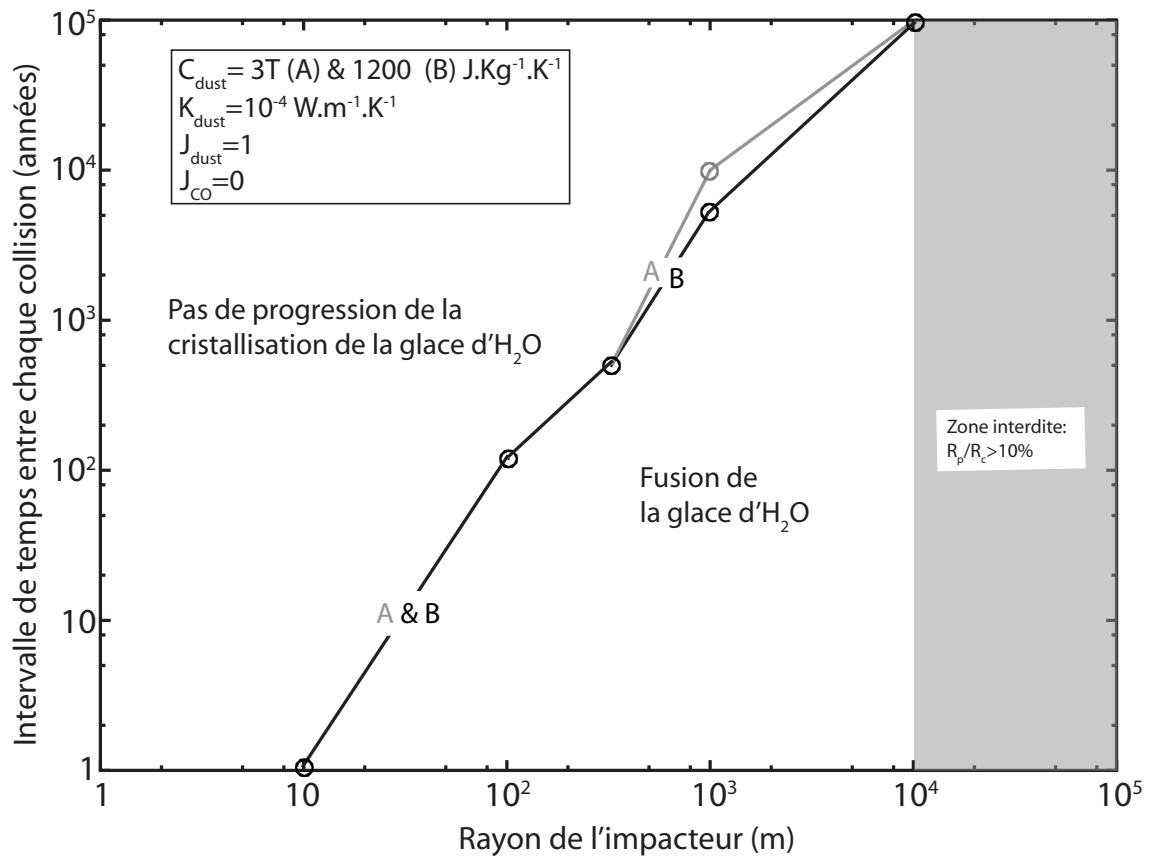
A, augmente alors légèrement ce laps de temps. Au delà de 1000 m, le temps de diffusion de la chaleur à travers le noyau augmente et diminue alors l'influence de la capacité calorifique sur le temps de retour à l'équilibre thermique de la cible et donc sur le laps de temps entre deux collisions. Pour les modèles A et B ( $J_{dust} = 1$ ), 100000 ans entre chaque collision de projectiles de 10 km sont nécessaires pour engendrer une progression de la cristallisation. Pour la même taille de projectile, pour le modèle B ( $J_{dust} = 10$ ), un million d'années sont indispensables entre chaque collision pour engendrer une progression de la transformation physico-chimique du noyau.

Finalement, même avec une taille de projectile égale à 10 km, le front de cristallisation du noyau cible ne progresse pas sans apport continu de chaleur provenant des collisions. Là aussi, en espaçant les collisions successives qui ont lieu à intervalle de temps régulier, la progression de la cristallisation du noyau s'arrête progressivement (zone située au dessus de la courbe). Inversement, l'augmentation de l'intervalle de temps entre deux collisions crée les conditions thermiques d'une fusion de la matrice solide (zone située en dessous de la courbe).

## Discussion

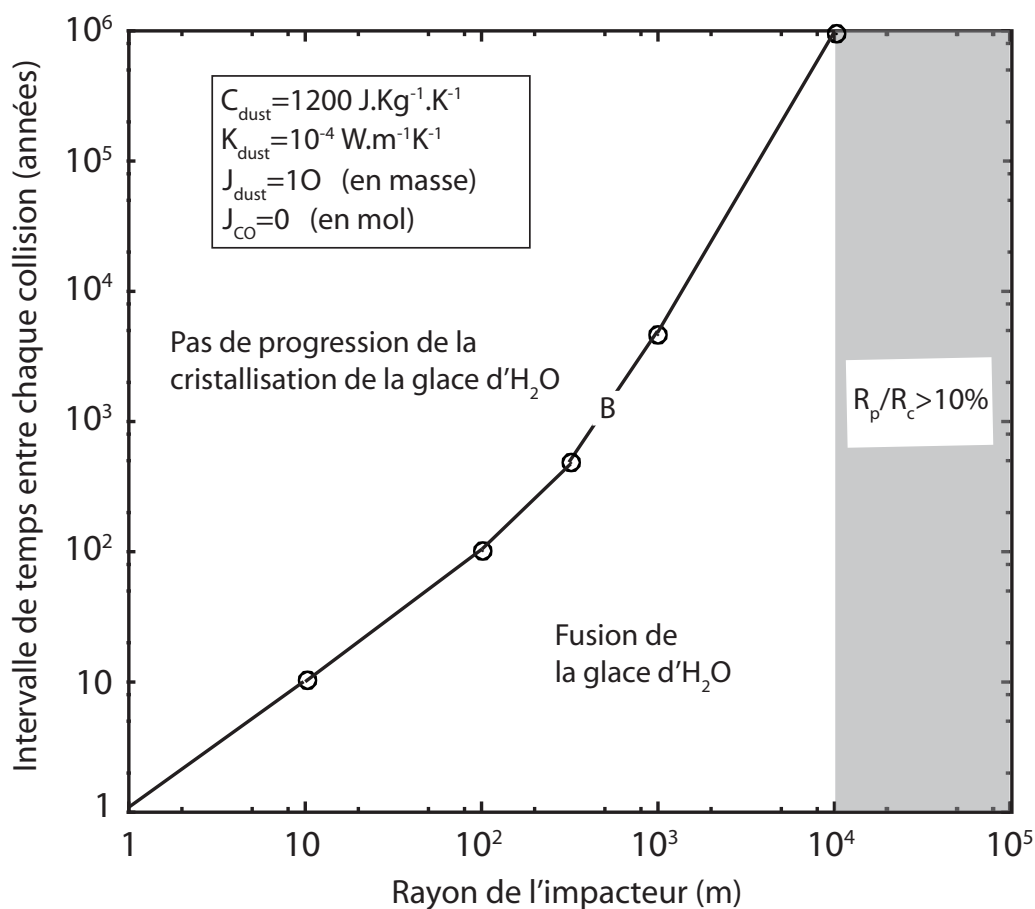
Les laps de temps obtenus sont excessivement courts si on les compare aux prédictions de Durda & Stern (2000). Ces derniers prédisent qu'un objet cible de 100 km de rayon, situé à 35 UA, essuierait 1 collision tous les  $3,5 \cdot 10^9$  ans avec un impacteur de 10km; 1 collision tous les  $6,5 \cdot 10^7$  à  $1,5 \cdot 10^8$  ans avec un impacteur de 1 km; et 1 collision tous les 1000 à 6000 ans avec un impacteur de 4 m. Pour les mêmes tailles d'impacteur, on obtient un laps de temps entre deux collisions d'environ  $10^4$  à  $10^6$  ans ( $R_p = 10$ km),  $10^4$  ans ( $R_p = 1$  km) et 1 à 10 ans ( $R_p = 10$  m). Pour une cible plus petite, leurs prédictions collisionnelles sont davantage espacées dans le temps, alors que les nôtres ne changent pas d'ordre de grandeur.

Les résultats ont été obtenus en majorant les effets susceptibles de produire une modification physico-chimique du noyau. Parallèlement, on a diminué les effets de conduction thermique de manière à accroître le temps de résidence de l'énergie collisionnelle pour favoriser la transition de phase de la glace amorphe et faciliter la progression de cette modification physico-chimique. Les résultats montrent qu'un laps de temps entre deux collisions plus grand que ceux déterminés dans les figures 4.22, 4.23, 4.24 et 4.25 ne crée pas de progression de la modification physico-chimique engendrée par la première collision alors qu'un laps de temps plus court engendre en revanche une fusion de la glace d' $H_2O$ . Les laps de temps déterminés apportent donc une contrainte très forte sur l'environnement collisionnel nécessaire pour engendrer une progression de la modification physico-chimique du noyau cible, puisqu'ils ne peuvent bénéficier d'un écart aux valeurs calculées. Nous sommes forcés de constater que les laps de temps que nous avons déterminés, et ceux prédits par Durda & Stern (2000), sont complètement disjoints. Si les prédictions de ces derniers sont justes,



**Fig. 4.24 - Cible de 100 km** - Intervalle de temps entre chaque collision pour permettre la progression de la cristallisation en fonction du rayon de l'impacteur pour une cible de 100 km de rayon. La zone grisée correspond à un rayon d'impacteur supérieur à 10% capable de détruire la cible.  $C_{dust} = 3.T$  (A) &  $1200$  (B)  $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ .

4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE



**Fig. 4.25 - Cible de 100 km** - Intervalle de temps entre chaque collision pour permettre la progression de la cristallisation en fonction du rayon de l'impacteur pour une cible de 100 km de rayon. La zone grisée correspond à un rayon d'impacteur supérieur à 10% capable de détruire la cible.  $C_{dust} = 1200 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ;  $J_{dust} = 10$ .

alors les figures 4.22, 4.23, 4.24 et 4.25 indiquent clairement qu'il n'est pas possible d'engendrer une modification physico-chimique qui progresse à l'intérieur du noyau cible lors de collisions successives dans l'environnement collisionnel actuel.

## 4.5 Conclusion

La méconnaissance de la composition et des propriétés physico-chimiques des objets composés de glaces a conduit, dans une première phase, à étudier l'influence des paramètres physico-chimiques (capacité calorifique, conductivité thermique des grains de poussière, rapport massique  $J_{dust}$  et rapport molaire  $J_{CO}$ ) sur l'évolution thermique des noyaux cibles après une seule collision, et à déterminer ceux qui favorisent une évolution physico-chimique du noyau cible. En considérant initialement une matrice de glace amorphe, les résultats ont montré que seul le rapport massique poussière/glace  $J_{dust}$  influait fortement sur l'évolution physico-chimique du noyau cible après une seule collision et en l'absence de condensat de CO. Avec un modèle constitué à 97 % de glace en volume ( $J_{dust} = 0,1$ ), la transformation physico-chimique du noyau cible évolue spontanément vers le centre de la cible grâce à la réaction exothermique de la cristallisation de la glace d' $H_2O$  ( $J_{dust} = 0,1$ ). En revanche, avec une masse poussiéreuse plus importante, la transformation physico-chimique, lorsqu'elle a lieu, ne progresse pas à l'intérieur du noyau. La présence de condensat de CO, à hauteur de 10% de moles d' $H_2O$ , arrête prématurément la progression de la transformation physico-chimique du noyau cible, quels que soient les paramètres adoptés.

Compte tenu des résultats obtenus dans cette première phase d'étude collisionnelle, nous avons recherché dans une seconde partie, à effectuer une série de collisions pendant un temps infini sur un même noyau cible, et à déterminer un laps de temps entre chaque collision qui permette la propagation de la transformation physico-chimique des couches impactées au noyau cible. Pour l'ensemble des collisions simulées, nous avons systématiquement favorisé la création d'une transformation physico-chimique de l'objet cible, en négligeant les cassures et les ablations de couches successives qu'entraînerait naturellement toute collision entre deux corps. Ainsi, les simulations de collisions effectuées sont "non destructives" et "non érosives". La cible est toujours restée physiquement intacte quel qu'ait pu être le nombre de collisions, et cette intégrité physique a favorisé l'accumulation de chaleur apportée par les collisions successives, à l'intérieur du noyau cible. De plus, puisque le modèle de noyau cométaire est unidimensionnel, les collisions successives ont eu lieu sur une même zone géographique de la cible et ont favorisé encore une fois l'accumulation de chaleur dans le noyau. Malgré ces effets d'accumulation d'énergie qui auraient pu favoriser une transformation physico-chimique de la cible à long terme, on constate que les intervalles de temps entre chaque collision, qui permettent cette évolution physico-chimique, sont excessivement courts comparés aux prédictions effectuées par



Durda & Stern (2000). Ainsi, nos modèles raisonnablement poussiéreux ( $J_{dust} = 1$ ) et très poussiéreux ( $J_{dust} = 10$ ) n'engendrent de progression de la cristallisation que si les intervalles de temps entre les collisions sont de l'ordre de 5000 à 10000 ans pour l'ensemble des modèles (cible de 10 et 100 km confondus), avec un impacteur de 1 km. En revanche Durda & Stern (2000) indiquent que l'échelle de temps entre deux collisions sur une même cible de 100 km de rayon avec un impacteur de 1 km de rayon est de l'ordre de  $6,5 \cdot 10^7$  à  $1,5 \cdot 10^8$  ans. Ces auteurs déclarent aussi qu'une cible de 100 km de rayon serait touchée par un impacteur de 4 m tous les 1000 à 6000 ans. Pour engendrer une progression de la transformation physico-chimique du noyau cible, nous avons déterminé qu'il devrait essayer une collision tous les 1 à 10 ans sur la même zone géographique. Seuls les modèles extrêmement peu poussiéreux ( $J_{dust} = 0,1$ ) et sans condensats de CO ( $J_{CO} = 0$ ) à l'intérieur de la matrice solide ont montré une progression de la transformation physico-chimique avec une seule collision dès que l'impacteur atteint un rayon de 100 m.

Indépendamment de la taille de la cible et de la composition physico-chimique du modèle (excepté le modèle avec  $J_{dust}$  égal à 0,1 et sans CO), les intervalles de temps entre les collisions sont excessivement courts comparés aux prédictions de Durda & Stern (2000). Des laps de temps aussi courts, et de surcroît sur une même zone géographique du noyau cible (modèle unidimensionnel), semblent impossibles sur une longue période. Or, il est nécessaire que la période collisionnelle soit suffisamment longue pour qu'un flux de chaleur suffisant puisse progresser à l'intérieur du noyau cible et entretenir sa cristallisation. En effet, une variation du laps de temps déterminé (augmentation ou diminution) empêche toute forme de progression de transformation physico-chimique du noyau cible. Ainsi, un laps de temps plus court engendre la fusion de la glace d' $H_2O$  de la matrice solide, tandis qu'un laps de temps plus long n'engendre aucune progression de changement de phase des différentes glaces. Les conditions d'une progression de la transformation physico-chimique du noyau cible résultent d'un équilibre entre la chaleur apportée lors d'une collision (qui ne dépend que de la capacité calorifique des différents composants), de la diffusion de cette chaleur vers la surface et au reste du noyau (qui dépend de la conduction thermique des différents composants, de la profondeur d'insertion de l'énergie collisionnelle et de la capacité calorifique volumique du noyau), et de l'intervalle de temps entre deux apports énergétiques. Un déséquilibre dans cette combinaison de paramètres peut engendrer l'absence de progression de transformation physico-chimique ou bien la fusion de la matrice de glace.

De plus, les tests ont été effectués avec la conductivité la plus faible de manière à favoriser ces transformations physico-chimiques. L'intervalle de temps entre les collisions pourrait alors décroître davantage avec une conductivité thermique des grains de poussière beaucoup plus importante. On rappelle également que la présence de condensats de volatils à l'intérieur de la matrice poreuse stopperait prématurément toute transformation physico-chimique du noyau cible avec un même intervalle de temps entre collisions. Enfin, la possible évolution physico-chimique du noyau cible est basée sur l'hypothèse que la glace d' $H_2O$  composant la matrice solide est amorphe

à l'origine (Kouchi et al., 1994) et que la transition de phase “glace amorphe” – “glace cristalline”, liée à l'augmentation de sa température, est une réaction exothermique. Dans le cas où cette réaction serait endothermique <sup>1</sup>, l'apport énergétique des collisions n'engendrerait pas de progression de l'évolution physico-chimique du noyau cible.

Compte tenu des limites imposées par le modèle et des approximations qui ont été faites (et qui ont permis d'amplifier le processus d'évolution physico-chimique), on peut affirmer que, dans le cas d'un modèle de noyau raisonnablement poussiéreux avec différentes glaces, la transformation physico-chimique n'a lieu qu'à l'endroit de la collision sur une profondeur de l'ordre de la taille de l'impacteur et ne progresse pas à l'intérieur de la cible. Si l'on ne peut pas affirmer avec certitude que les objets de Kuiper ou les noyaux cométaires sont primitifs, on peut toutefois affirmer que le processus collisionnel ne leur a pas fait subir d'altérations physico-chimiques internes significatives.

---

<sup>1</sup>Kouchi & Sirono (2001) ont montré que la cristallisation d'une glace d'eau amorphe contenant des impuretés était endothermique (voir section 2.2.3).

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---

# Conclusion Générale

La modélisation de planétésimaux composés de glaces a nécessité dans un premier temps un éclaircissement sur les processus de formation des glaces dans le milieu interstellaire et le disque protoplanétaire. Les scénarios de formation des planétésimaux créés au delà de la “ligne des glaces”, montrent qu’ils sont constitués de grains de poussière et de glaces amorphes formées dans la nébuleuse interstellaire (s’ils ont été fabriqués dans la région transneptunienne), ou bien de glaces cristallines formées dans le disque protoplanétaire. Ces glaces peuvent prendre la forme de condensats purs, d’hydrates ou de clathrates hydrates, suivant l’efficacité du processus de clathration et l’abondance des molécules.

L’application du modèle de formation des glaces à l’étude spécifique de l’enrichissement en volatils des atmosphères des planètes Jupiter et Saturne, a montré que le processus de clathration des volatils était un processus physico-chimique satisfaisant, mais pas nécessaire, pour expliquer ces enrichissements et satisfaire la masse critique d’éléments lourds de ces planètes estimée par Fortney & Hubbard (2003) et Guillot (2005). La diversité structurelle des glaces formées dans les disques protoplanétaires associée à une diversité de composition physico-chimique initiale de la phase gazeuse des nébuleuses primitives, ont une grande incidence sur la structure interne et l’évolution thermique des planètes formées. A partir du modèle de formation des glaces, nous avons montré que cette diversité pouvait aboutir à la formation de planètes “océan”, froides ou chaudes composées majoritairement d’eau, ou de planètes “carbonées” déshydratées.

Les processus de formation des glaces étudiés en fonction de la composition initiale de la phase gazeuse de la nébuleuse interstellaire et du disque protoplanétaire permettent d’élaborer une structure et une composition physico-chimique d’un modèle de planétésimal. Les structures de glace formées dans le milieu interstellaire et le disque protoplanétaire sont très diverses. Cependant, bien que prenant en compte les différents processus et approximations physico-chimiques décrits ci-après, le modèle de planétésimal que nous avons développé dans un second temps, ne considère qu’un nombre limité de structures de glace (amorphe – cristalline pure):

- le planétésimal est modélisé comme un mélange de grains de poussière (éléments réfractaires) et de glaces ( $H_2O$  étant majoritaire)

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---

- la principale source de chaleur est le Soleil
- la diffusion de la chaleur à travers le noyau s’effectue par conduction thermique dans la matrice poreuse
- les changements de phase considérés sont ceux de sublimation/condensation de l’ensemble des volatils (suivant leurs températures de sublimation respectives) et celui de cristallisation de la glace (lorsqu’elle est amorphe à l’origine)
- la cristallisation est un changement de phase exothermique
- lorsque la glace est amorphe, une fraction de volatils représentant jusqu’à 10% en mole d’H<sub>2</sub>O peut être piégée dans la matrice de glace d’H<sub>2</sub>O et être relâchée lors de sa cristallisation
- la phase gazeuse des différents éléments chimiques diffuse à travers un réseau de pores ouvert. Cette diffusion trouve son origine dans l’existence d’un gradient de pression
- l’advection de la phase gazeuse permet l’échange de l’énergie thermique qu’elle contient avec le milieu environnant
- l’ensemble des processus physico-chimiques est toujours considéré en équilibre thermodynamique

Dans ce modèle, les différents changements de phase considérés ne prennent pas en compte la totalité des différentes structures cristallines de glace qui peuvent exister. Cependant, cette représentation simplifiée permet quand même de donner une idée de l’évolution physico-chimique d’un objet dit “primitif”.

La modélisation numérique d’un planétésimal qui peut être sujet à de nombreux changements de phase (qui peuvent apparaître simultanément) a nécessité la stabilisation numérique et mathématique du système afin d’assurer la conservation des quantités physiques (énergie et masse) à l’intérieur du modèle. L’amélioration du modèle de noyau cométaire par rapport aux modèles existants (d’un point de vue numérique) a permis de gagner au moins un ordre de grandeur sur l’erreur au bilan de masse. L’utilisation des volumes finis comme méthode de discrétisation et l’application de la représentation mathématique proposée par Orosei et al. (2001) a permis la réduction des erreurs locale et globale sur la conservation de masse du modèle, et la stabilisation du système. Dans le cadre d’études à long terme d’objets de type “cométaire”, ces améliorations permettent d’obtenir une représentation physico-chimique plus fiable, et elles garantissent, quelle que soit la durée de l’étude, l’exactitude des flux de gaz produits en sortie du noyau et celle de la progression de la transformation physico-chimique du modèle, ces deux phénomènes étant associés.

Malgré les améliorations apportées au modèle de planétésimal, ce dernier contient quelques limitations physico-chimiques et structurelles. En effet, la nature unidimensionnelle du modèle développé ne prend en compte que les transferts radiaux de chaleur et de masse. Les processus physico-chimiques qui s’y produisent constituent alors une valeur limite supérieure puisque les transferts de chaleur et de masse sont négligés sur les côtés. D’autre part, l’absence de données sur les propriétés thermiques et physiques de certains constituants (éléments réfractaires et glaces, et leurs

capacités calorifiques, conductivités thermiques...) à basse température (30-200 K) impose davantage de simplification dans le traitement de la conductivité et de la capacité calorifique globale de la matrice solide. Enfin, l'équilibre thermodynamique, imposé lors des changements de phase des éléments chimiques, permet de stabiliser davantage le système numérique, mais empêche toute étude d'un système hors équilibre.

L'étude, à partir du modèle de planétésimal que nous avons développé, d'une série de collisions "non destructives" et "non érosives" sur deux cibles de 10 et 100 km de rayon, a permis de montrer qu'elle ne pouvait pas engendrer de progression de la transformation physico-chimique d'objets cibles avec une composition physico-chimique initiale raisonnable (rapport massique  $J_{dust}$  égal à 1 & rapport molaire  $J_{CO}$  égal à 0 ou 0,1). Les laps de temps entre collisions à partir desquels une modification physico-chimique profonde des objets cibles a été constatée sont extrêmement courts si on les compare aux prévisions de Durda & Stern (2000), bien que certaines approximations et paramètres physiques adoptés, comme la nature unidimensionnelle du modèle, l'absence d'ablation de matière lors des collisions, ou la prescription de paramètres physiques favorables (conductivité thermique et capacité calorifique des grains de poussière faibles), aient permis l'accumulation de chaleur à l'intérieur de l'objet cible. On peut donc supposer que la transformation physico-chimique, lorsqu'elle s'est produite, n'a eu lieu qu'à l'endroit de la collision sur une profondeur de l'ordre de la taille de l'impacteur. Si l'on ne peut pas affirmer avec certitude que le cœur des objets de Kuiper, ou des noyaux cométaires, a conservé une composition physico-chimique primitive, l'utilisation de ce modèle, malgré ses limitations, nous permet d'affirmer que le centre de ces objets n'a pas été altéré thermiquement de manière significative par le processus collisionnel.

La physico-chimie à l'intérieur des noyaux cométaires pourrait être beaucoup plus complexe que celle décrite et modélisée dans cette thèse. Ainsi, même avec une structure amorphe à l'origine, la formation de structures clathrates durant la transition de phase de la glace n'est pas à exclure. Schmitt et al. (1992) ont montré en effet que la cristallisation d'un mélange de glaces d' $H_2O$  amorphe, de CO et de  $CO_2$  pouvait former temporairement une structure clathrate. La non prise en compte dans ce modèle de la formation de différentes structures de glaces cristallines (au moment de la formation du planétésimal ou lors des transitions de phase), ainsi que sa nature unidimensionnelle, limitent l'étude de l'évolution physico-chimique d'objets composés de glaces. Cependant, ces restrictions physiques et numériques fournissent des résultats majorés de transformation physico-chimique de l'objet. Il serait bon dans l'avenir de développer un modèle de planétésimal qui puisse modéliser la possible formation de l'ensemble de ces structures de glace (afin d'obtenir une meilleure représentation physico-chimique de l'intérieur de ces objets) couplée à une représentation tridimensionnelle qui prendrait en compte les flux de chaleur et de matière transversaux et la variation d'ensoleillement en surface. L'amélioration de la modélisation des différents processus physico-chimiques à l'intérieur de l'objet pourrait peut-être permettre de comprendre davantage certains phénomènes

#### 4. ETUDE COLLISIONNELLE DES PLANÉTÉSIMAUX DANS LA RÉGION TRANSNEPTUNIENNE

---

thermodynamiques des comètes, comme les outbursts (exemple du dégazage massif de la comète Holmes en 2007). Le peu d'informations dont on dispose ne permet pas actuellement de certifier la présence de telles structures de glaces à l'intérieur de ces objets, mais leur exploration par la mission Rosetta en 2014 pourra peut-être procurer davantage de renseignements sur leur composition physico-chimique.

# Annexe A

## Intégration de l'équation de conservation de la masse

### Contents

---

<b>A.1</b>	<b>Integration Spatiale . . . . .</b>	<b>149</b>
<b>A.2</b>	<b>Intégration Temporelle . . . . .</b>	<b>151</b>

---

Nous effectuons dans cette section l'intégration spatiale et temporelle de l'équation de conservation de la masse (2.27). L'équation que l'on discrétise ne contient pas le terme source/puits de matière  $Q_x$  déterminé uniquement en présence des deux phases solide et gazeuse d'une espèce  $x$ . Contrairement au terme  $Q_x$  exprimé à partir de la pression de vapeur saturante, l'équation de diffusion du gaz  $x$  sans le terme  $Q_x$  n'est exprimée qu'à partir de la pression partielle de l'espèce  $x$  recherchée. Nous développons successivement ci-dessous l'intégration spatiale et temporelle des différents termes de l'équation de conservation de la masse (2.27) que l'on rappelle ici:

$$\frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} = \nabla \cdot (G_x \cdot \frac{\partial P_x}{\partial r}) + Q_g \quad (\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$$

### A.1 Integration Spatiale

**Integration Spatiale du membre de gauche de l'Eq. (2.27).** L'intégration spatiale de ce terme sur le volume de contrôle donne:

$$\iiint_v \frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} \cdot dv = \frac{\partial \rho_{i,x}^g}{\partial t} \cdot V_i \tag{A.1}$$



avec  $\rho_x^g = \frac{\psi P_x}{R.T}$ ,  $V_i = \frac{4}{3}\pi \cdot [r_i^3 - r_{i+1}^3]$  et  $i$  l'indice de la couche considérée.

**Premier Terme du membre de droite de l'Eq. (2.27).** La nature unidimensionnelle de notre modèle nous oblige à considérer une symétrie sphérique; seule la composante radiale subsiste.

Afin que deux cellules puissent voir le même flux de matière de part et d'autre de l'interface des volumes de contrôle, le coefficient de diffusion  $G_{i,x}$  est exprimé à la surface de chaque volume de contrôle  $i$  et notés  $g_{i,x}$ .

La figure 3.2 montre la variable  $L_i$  qui représente le coefficient de diffusion  $G_{i,x}$  définis au centre de la cellule  $i$  et sa variable correspondante  $l_i$  exprimée sur chaque interface pour le coefficient de diffusion  $g_{i,x}$ . L'équation A.2 dont l'explication se trouve en annexe B nous permet d'exprimer le coefficient  $g_{i,x}$  à l'interface en fonction des coefficients  $G_{i-1,x}$  et  $G_{i+1,x}$ :

$$g_{i,x} = \frac{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i}{\frac{\Delta r_{i-1}}{G_{i-1,x}} + \frac{\Delta r_i}{G_{i,x}}} \quad (\text{A.2})$$

Le résultat en remplaçant le coefficients  $G_{i,x}$  par  $g_{i,x}$  dans le terme de divergence de l'Eq.(2.27) est l'exacte conservation des flux de matière à travers l'interface. Notez que l'interpolation concerne tous les termes compris dans la divergence, excepté le terme de gradient de pression. L'intégration spatiale de la divergence devient alors:

$$\begin{aligned} \iiint_v \nabla \cdot (g_x \cdot \frac{\partial P_x}{\partial r}) \cdot dv &= \iiint_v \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \cdot g_x \cdot \frac{\partial P_x}{\partial r}) \cdot dv \\ &= 4\pi \left[ r_i^2 \cdot g_{i,x} \cdot \frac{\partial P_{i,x}}{\partial r} - r_{i+1}^2 \cdot g_{i+1,x} \cdot \frac{\partial P_{i+1,x}}{\partial r} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

où le gradient de pression  $\frac{\partial P_{i,x}}{\partial r}$  s'écrit comme suit:

$$\frac{\partial P_{i,x}}{\partial r} = 2 \frac{P_{i-1,x} - P_{i,x}}{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i}. \quad (\text{A.4})$$

**Deuxième terme du membre de droite de l'Eq. (2.27).** Le terme  $Q_g$  réunit deux termes différents que sont le terme source/puits de matière  $Q_x$  lié aux changements de phase des différentes espèces chimiques  $x$  et  $Q_x^{cr}$  la quantité de matière relâchée lors de la cristallisation. Le premier terme est annulé car la diffusion du gaz n'a lieu qu'en l'absence de phase condensée de l'espèce chimique  $x$ .

L'intégration du second terme donne simplement  $Q_x^{cr} \cdot V_i$ .

**Expression Finale de l'intégration spatiale de l'équation de conservation de masse (2.27).** Finalement, comme résultat de l'intégration spatiale de l'Eq. (2.27), nous obtenons l'équation de conservation de la masse à un pas de temps et pour une espèce chimique  $x$  donnés:

$$\frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} \cdot V_i = 4\pi \cdot \left[ r_i^2 \cdot g_{x,i} \cdot \frac{\partial P_{x,i}}{\partial r} - r_{i+1}^2 \cdot g_{x,i+1} \cdot \frac{\partial P_{x,i+1}}{\partial r} \right] + Q_x^{cr} \cdot V_i \quad (\text{A.5})$$

## A.2 Intégration Temporelle

- Si le temps de diffusion du gaz entre l'interface de sublimation de l'espèce  $x$  et la surface est supérieur à  $f_{tg}$  fois le pas de temps de diffusion de la chaleur ( $t_x^{tot} \geq f_{tg} \cdot \Delta t$ ,  $f_{tg}$  est un paramètre que nous imposons et plus petit que 1), alors nous résolvons un nombre entier  $Ndtg$  fois l'équation de conservation de la masse avec le pas de temps  $\Delta t_g$  tel que  $Ndtg = \frac{\Delta t}{\Delta t_g}$  (et  $\Delta t_g < \min(t_{i,x}^g)$ ). L'équation (2.27) est non linéaire tout comme l'équation (2.1). Aussi, nous choisissons d'utiliser la méthode prédicteur-correcteur utilisée pour l'équation de conservation de l'énergie. L'intégration temporelle de l'Eq. (A.5) sur un pas de temps  $n\Delta t_g$  qui correspond au plus petit pas de temps de diffusion du gaz  $x$  à travers une couche, avec  $n = \frac{1}{2}$  pour le prédicteur et 1 pour le correcteur est égale à:

$$\int_{t+(n-1)\Delta t_g}^{t+n\Delta t_g} \frac{\partial \rho_x^g}{\partial t} \cdot dt = \frac{4\pi}{V_i} \int_{t+(n-1)\Delta t_g}^{t+n\Delta t_g} \left[ r_i^2 \cdot g_{i,x} \cdot \frac{\partial P_{x,i}}{\partial r} - r_{i+1}^2 \cdot g_{i+1,x} \cdot \frac{\partial P_{x,i+1}}{\partial r} \right] dt + \int_{t+(n-1)\Delta t_g}^{t+n\Delta t_g} Q_x^{cr} \cdot dt \quad (\text{A.6})$$

Pour résoudre cette équation, nous avons besoin de connaître l'évolution temporelle du gradient de pression durant le laps de temps  $n\Delta t_g$ . A cette fin, nous remplaçons ce gradient par une combinaison linéaire des gradients de température connus et recherchés pondérée par un paramètre  $f$  qui prend une valeur comprise entre 0 et 1 suivant le type de schéma de résolution choisi:

$$\Gamma_i^p = \left[ f \left( \frac{\partial P_{i,x}}{\partial r} \right)^{t+n\Delta t_g} + (1-f) \left( \frac{\partial P_{i,x}}{\partial r} \right)^{t+(n-1)\Delta t_g} \right] \quad (\text{A.7})$$

Comme résultat de l'intégration temporelle, nous obtenons l'équation finale:

$$\frac{\psi}{RT^{t+m\Delta t}} (P_{i,x}^{g,t+n\Delta t_g} - P_{i,x}^{g,t+(n-1)\Delta t_g}) = \frac{4\pi}{V_i} \cdot \left[ r_i^2 \cdot g_{i,x}^{t+m\Delta t} \cdot \Gamma_i^p - r_{i+1}^2 \cdot g_{i+1,x}^{t+m\Delta t} \cdot \Gamma_i^p \right] \cdot \Delta t_g + Q_x^{cr,t+m\Delta t} \cdot \Delta t_g \quad (\text{A.8})$$

avec  $m = 0$  pour le prédicteur et  $\frac{1}{2}$  pour le correcteur.

Pour le prédicteur, nous choisissons de prendre un schéma totalement implicite ( $f = 1$ ), tandis que pour le correcteur, nous utilisons le schéma de Cranck-Nicolson qui est une méthode semi-implicite ( $f = 1/2$ ). Les deux schémas numériques sont totalement stables mathématiquement mais la convergence du correcteur vers une solution physique acceptable n'est assurée que par le respect d'une condition qui stabilise le schéma numérique (Patankar 1980):  $\frac{\alpha \Delta t_g}{\Delta x^2} \leq 1$ .

- Si en revanche, le temps de diffusion du gaz entre l'interface et la surface est très inférieur au pas de temps de diffusion de la chaleur ( $t_x^{tot} < f_{tg} \cdot \Delta t$ ), alors la phase gazeuse d'une espèce  $x$  atteint l'état d'équilibre avant que la température ne change; la diffusion du volatil est dans un état stationnaire et le membre de droite de l'équation de conservation de la masse (Eq. A.8) est égal à 0:

$$4\pi[r_i^2 \cdot g_{i,x}^{t+m\Delta t} \cdot \Gamma_i^p - r_{i+1}^2 \cdot g_{i+1,x}^{t+m\Delta t} \cdot \Gamma_i^p] = -Q_x^{cr,t+m\Delta t} \cdot V_i \quad (\text{A.9})$$

avec  $m = 0$  pour le prédicteur et  $\frac{1}{2}$  pour le correcteur; Pour le prédicteur comme pour le correcteur, nous choisissons de prendre un schéma totalement implicite ( $f = 1$ ).

En développant chaque terme de l'Eq. (A.8) ou de l'Eq. (A.9), nous obtenons une matrice triangonale qui prend la forme:

$$a_i \cdot P_{x,i-1}^{t+n\Delta t'} + b_i \cdot P_{x,i}^{t+n\Delta t'} + c_i \cdot T_{x,i+1}^{t+n\Delta t'} = d_i \quad (\text{A.10})$$

avec  $\Delta t' = n\Delta t_g$  lorsque la diffusion est non stationnaire et  $\Delta t' = n\Delta t$  lorsque la diffusion est stationnaire. Pour chaque couche  $i$ , nous pouvons résoudre l'Eq. (A.10) à l'aide d'un Algorithme qui résolve les matrices tridiagonales (TDMA; Patankar, 1980) décrit en Annexe C.

## Annexe B

### Estimation des variables aux interfaces des volumes de contrôle

Soit  $L$  représentant le coefficient de diffusion du gaz  $G$  ou celui de la chaleur  $K$  au centre du volume de contrôle (voir Fig. B.1). On note  $l$  le coefficient de diffusion du gaz  $g$  ou de la chaleur  $k$  aux interfaces du volume de contrôle tel que le flux  $q_l$  aux interfaces soit conservé:

$$\begin{aligned} q_l = 2l_i \frac{T_{i-1} - T_i}{\Delta r_i + \Delta r_{i-1}} &= 2L_{i-1} \frac{T_{i-1} - T_{int}}{\Delta r_{i-1}} \\ &= 2L_i \frac{T_{int} - T_i}{\Delta r_i} \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

où les coefficients  $L_i$  sont fonction des conditions thermodynamiques au centre de la cellule  $i$  et déterminés à partir de  $T_i$  et  $P_i$ . L'égalité précédente devient:

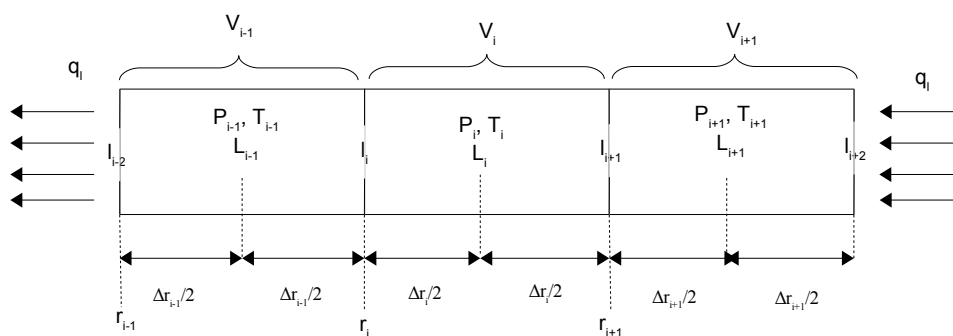
$$\begin{aligned} 2 \frac{T_{i-1} - T_i}{\frac{\Delta r_i + \Delta r_{i-1}}{l_i}} &= 2 \frac{T_{i-1} - T_{int}}{\frac{\Delta r_{i-1}}{L_{i-1}}} = 2 \frac{T_{int} - T_i}{\frac{\Delta r_i}{L_i}} \\ &= \frac{2[T_{i-1} - T_{int}] + 2[T_{int} - T_i]}{\frac{\Delta r_{i-1}}{L_{i-1}} + \frac{\Delta r_i}{L_i}} \\ &= \frac{2[T_{i-1} - T_i]}{\frac{\Delta r_{i-1}}{L_{i-1}} + \frac{\Delta r_i}{L_i}} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

On obtient alors :

$$l_i = \frac{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i}{\frac{\Delta r_{i-1}}{L_{i-1}} + \frac{\Delta r_i}{L_i}} \quad (\text{B.3})$$

B. ESTIMATION DES VARIABLES AUX INTERFACES DES VOLUMES DE CONTRÔLE

---



**Fig. B.1** - Estimation des variables  $l$  aux interfaces du volume de contrôle à partir des variables  $L$  définies au centre des cellules de manière à assurer la continuité des flux. Le volume de contrôle  $V_i$  de la couche  $i$  est défini autour de la variable  $L_i$ .

# Annexe C

## TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm; Patankar, 1980)

### Contents

---

C.1	Traitement des conditions aux limites : conditions de type Dirichlet et Neumann . . . . .	155
C.2	Algorithme de Thomas ou TDMA . . . . .	156

---

### C.1 Traitement des conditions aux limites : conditions de type Dirichlet et Neumann

Le système numérique nécessite des conditions aux limites pour pouvoir être résolu. Les conditions limites qui sont choisies ici sont de deux types: celle de type Dirichlet où l'on impose une valeur connue à la variable (T, P) et celle de type Neumann où on impose un gradient nul de la variable. Les conditions limites choisies pour la température sont de type Dirichlet et Neumann : la température de surface  $T_{surface}$  est connue car elle est calculée avant la résolution du système par l'équation bilan de surface (2.24) et la température  $T_{NC+1}$  du centre du noyau est imposée et égale à la température  $T_{NC}$  de la couche  $NC$  de manière à satisfaire la condition de Neumann : on a alors  $NC - 2$  équations à résoudre. Les conditions limites pour la pression sont de type Dirichlet: on impose une pression en surface et une pression égale à la pression de saturation à la couche possédant l'interface de sublimation de l'espèce chimique  $x$ .

A partir de ces conditions aux limites, on peut calculer la température et la pression de chaque couche en résolvant le système linéaire par l'algorithme de Thomas

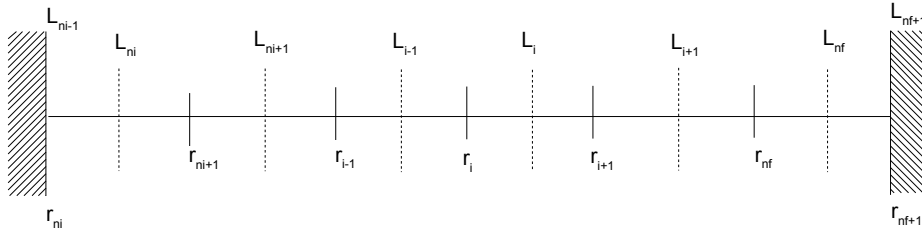


Fig. C.1 - Schéma simplifié du noyau.

(ou TDMA) décrit ci-dessous.

## C.2 Algorithme de Thomas ou TDMA

Cet algorithme permet de calculer la solution d'un système linéaire lorsque la matrice est tridiagonale. C'est notre cas si les équations discrétisées dans le système linéaire s'écrivent sous la forme :

$$a_i L_{i-1} + b_i L_i + c_i L_{i+1} = d_i \text{ avec } n_i \leq i \leq n_f$$

avec  $L = P$  pour la pression ou  $T$  pour la température (voir maillage présenté en fig. C.1)

La variable  $L_{n_i-1}$  étant connue et la variable  $L_{n_{f+1}}$  étant imposée ou égale à  $L_{n_f}$  (choix des conditions aux limites en fonction du type de variable), le système d'équations n'est résolu que pour les couches  $n_i$  à  $n_f$  par élimination en avant et substitution en arrière.

Dans le processus de substitution en avant, pour  $i = n_i$ , dans l'équation (C.1) ci-dessous, on a une relation entre  $L_{n_i-1}$ ,  $L_{n_i}$  et  $L_{n_i+1}$ , mais parce que  $L_{n_i-1}$  est connue, la relation entre  $L_{n_i-1}$ ,  $L_{n_i}$  et  $L_{n_i+1}$ , est réduite à un rapport entre deux inconnues :  $L_{n_i}$  et  $L_{n_i+1}$ . On peut alors exprimer  $L_{n_i}$  en fonction de  $L_{n_i+1}$ . Le processus d'élimination en avant commence par la substitution de  $L_{n_i}$  dans l'équation (C.2) ci-dessous pour obtenir  $L_{n_i+1}$  en fonction de l'inconnue  $L_{n_i+2}$  seulement. On poursuit l'opération jusqu'à ce que  $L_{n_f}$  soit exprimée en fonction de l'inconnue  $L_{n_{f+1}}$ .

On obtient alors, dans cette étape, la valeur de  $L_{nf}$ .

Dans la substitution en avant, on cherche ainsi les relations de type  $L_i = f(L_{i+1})$  sous la forme :

$$L_i = \beta_i \cdot L_{i+1} + \gamma_i \tag{C.1}$$

En insérant l'expression de  $L_i$  ci-dessus à la place de  $L_{i-1}$  dans l'équation linéaire  $a_i L_{i-1} + b_i L_i + c_i L_{i+1} = d_i$  exprimée plus haut, on obtient :

$$a_i(\beta_{i-1} \cdot L_i + \gamma_{i-1}) + b_i \cdot L_i + c_i \cdot L_{i+1} = d_i \tag{C.2}$$

En regroupant les termes dans l'équation ci-dessus sous la forme générale  $L_i = \beta_i \cdot L_{i+1} + \gamma_i$ , on obtient les coefficients  $\beta_i$  et  $\gamma_i$  en fonction des coefficients  $\beta_{i-1}$  et  $\gamma_{i-1}$ :

$$\beta_i = \frac{-c_i}{b_i + a_i \beta_{i-1}} \tag{C.3}$$

et

$$\gamma_i = \frac{d_i - a_i \gamma_{i-1}}{b_i + a_i \beta_{i-1}} \tag{C.4}$$

Le processus de substitution en avant se réduit à calculer les coefficients  $\beta$  et  $\gamma$  de chaque couche  $i$  pour  $i = n_i + 1$  à  $n_f$ .

Les coefficients  $\beta$  et  $\gamma$  de la couche 1 sont résolues séparément :

Supposons que  $L_{n_i-1}$  soit connue

$$a_{n_i} \cdot L_{n_i-1} + b_{n_i} \cdot L_{n_i} + c_{n_i} \cdot L_{n_i+1} = d_{n_i}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} L_{n_i} &= f(L_{n_i+1}) = \frac{d_{n_i} - a_{n_i} \cdot L_{n_i-1}}{b_{n_i}} - \frac{c_{n_i}}{b_{n_i}} \cdot L_{n_i+1} \\ &= \beta_{n_i} \cdot L_{n_i+1} + \gamma_{n_i} \end{aligned} \tag{C.5}$$



Pour satisfaire les conditions initiales à la couche  $n_i - 1$  pour la température et la pression, on impose donc une valeur particulière à  $\beta$  et  $\gamma$  pour  $i = n_i$ :

$$\beta_{n_i} = \frac{-c_{n_i}}{b_{n_i}} \quad (\text{C.6})$$

$$\gamma_{n_i} = \frac{d_{n_i} - a_{n_i} \cdot L_{n_i-1}}{b_{n_i}} \quad (\text{C.7})$$

équations dans le processus de substitution « en avant » pour  $i = n_i + 1$  à  $n_f$ :

***réécriture des équations***

$$a_{n_i+1} \cdot L_{n_i} + b_{n_i+1} \cdot L_{n_i+1} + c_{n_i+1} \cdot L_{n_i+2} = d_{n_i+1}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} L_{n_i+1} &= f(L_{n_i+2}) = \frac{d_{n_i+1} - a_{n_i+1} \cdot L_{n_i}}{b_{n_i+1}} - \frac{c_{n_i+1}}{b_{n_i+1}} \cdot L_{n_i+2} \\ &= \frac{-c_{n_i+1}}{b_{n_i+1} - a_{n_i+1} \cdot \frac{c_{n_i}}{b_{n_i}}} \cdot L_{n_i+2} + \frac{d_{n_i+1} - a_{n_i+1} \cdot \left[ \frac{d_{n_i} - a_{n_i} \cdot L_{n_i-1}}{b_{n_i}} \right]}{b_{n_i+1} - a_{n_i+1} \cdot \frac{c_{n_i}}{b_{n_i}}} \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

---


$$a_{n_f-1} \cdot L_{n_f-2} + b_{n_f-1} \cdot L_{n_f-1} + c_{n_f-1} \cdot L_{n_f} = d_{n_f-1}$$

$$\Rightarrow L_{n_f-1} = f(L_{n_f}) = \frac{d_{n_f-1} - a_{n_f-1} \cdot L_{n_f-2}}{b_{n_f-1}} - \frac{c_{n_f-1}}{b_{n_f-1}} \cdot L_{n_f}$$

$$a_{n_f} \cdot L_{n_f-1} + b_{n_f} \cdot L_{n_f} + c_{n_f} \cdot L_{n_f+1} = d_{n_f}$$

$$\Rightarrow L_{n_f} = f(L_{n_f+1}) = \frac{d_{n_f} - a_{n_f} \cdot L_{n_f-1}}{b_{n_f}} - \frac{c_{n_f}}{b_{n_f}} \cdot L_{n_f+1}$$

**Substitution en « arrière »:**

Lorsque les  $\beta$  et  $\gamma$  de toutes les couches de 1 à NC ont été déterminées, on démarre le processus de substitution en « arrière » en utilisant la relation  $L_i = \alpha_i \cdot L_{i+1} + \beta_i$  pour déterminer  $L_{NC}, \dots, L_1$ :

La variable  $L$  de la couche  $n_f$  est déterminée indépendamment des autres couches suivant les conditions aux limites imposées:

- Pour la température,  $n_f = NC$ , on impose un gradient de température nul au centre du noyau, soit  $T_{NC} = T_{NC+1}$ .

On a alors  $L_{n_f+1} = L_{n_f} = \frac{\gamma_{n_f}}{1-\beta_{n_f}}$

- Pour la pression, on résout le système linéaire pour les couches ne possédant pas l'élément chimique x sous la forme de condensats. On impose une pression de saturation  $P_S$  à/aux (l')interface(s) du noyau ce qui fait que  $L_n$  (N étant l'indice de la couche possédant l'interface) est connue:  $L_{n_f+1} = P_S$ .

On a alors  $L_{n_f} = \beta_{n_f} \cdot L_{n_f+1} + \gamma_{n_f}$

Lorsque le centre du noyau est dépourvu de condensats de l'espèce chimique x, on impose un gradient de pression nul, soit  $P_{n_f} = P_{n_f+1}$ :

On a alors  $L_{n_f+1} = L_{n_f} = \frac{\gamma_{n_f}}{1-\beta_{n_f}}$

Commence ensuite le processus de substitution en « arrière » pour les couches  $n_f - 1$  à  $n_i$ :

$$L_{n_f-1} = \alpha_{n_f-1} \cdot L_{n_f} + \beta_{n_f-1}$$

-----

$$L_{n_i} = \alpha_{n_i} \cdot L_{n_i+1} + \beta_{n_i}$$

A la fin du processus de substitution en arrière, nous obtenons le profil de pression ou de température en fonction de la distance au centre du noyau.



# Annexe D

## Expressions de vapeur saturante

Toutes les expressions de vapeur saturante sont données sous la forme d'une loi exponentielle:

$$P_x^s(T) = A.e^{B_x(T)} \quad (Pa) \quad (D.1)$$

A partir de cette expression, il est aisé d'obtenir la dérivée totale de la pression de vapeur saturante d'une espèce chimique  $x$  qui ne dépend que de la température:

$$\frac{dP_x^s(T)}{dT} = A e^{B_x(T)} \frac{dB_x(T)}{dT} \quad (D.2)$$

Nous donnons ci-dessous les expressions de vapeur saturante pour chacune des espèces  $x$  utilisées dans le modèle.

### H<sub>2</sub>O

$$A = P_0^s$$

$$B_{H_2O}(T) = \left(\frac{\alpha_1}{T}\right) + \alpha_2 \cdot \log_{10}(T) + (\alpha_3 \cdot T) + (\alpha_4 \cdot T^2) + \alpha_5$$

$$\frac{dB_{H_2O}(T)}{dT} = \left[\left(\frac{-\alpha_1}{T^2}\right) + \frac{\alpha_2}{\ln(10)} \cdot \frac{1}{T} + \alpha_3 + (2 \cdot \alpha_4 \cdot T)\right]$$

Les paramètres  $\alpha$  sont donnés dans le tableau D.1.

**Tab. D.1** - *Table des paramètres  $\alpha$  pour  $H_2O$*

paramètre	valeur	paramètre	valeur
$\alpha_1$	-5631,1206	$\alpha_4$	$2,77494 \cdot 10^{-05}$
$\alpha_2$	18,95304	$\alpha_5$	-15,558957
$\alpha_3$	-0,0386144	$P_0^s$	133,3224

**CO** Pour l'expression de la vapeur saturante de CO, nous avons déterminé une loi unique valable de 50K à 130K à partir des données expérimentales de Clayton & Giaouque (1932) et des données expérimentales et théoriques du Handbook of chemistry and physics (Lide, 2002).

$$A = 1$$

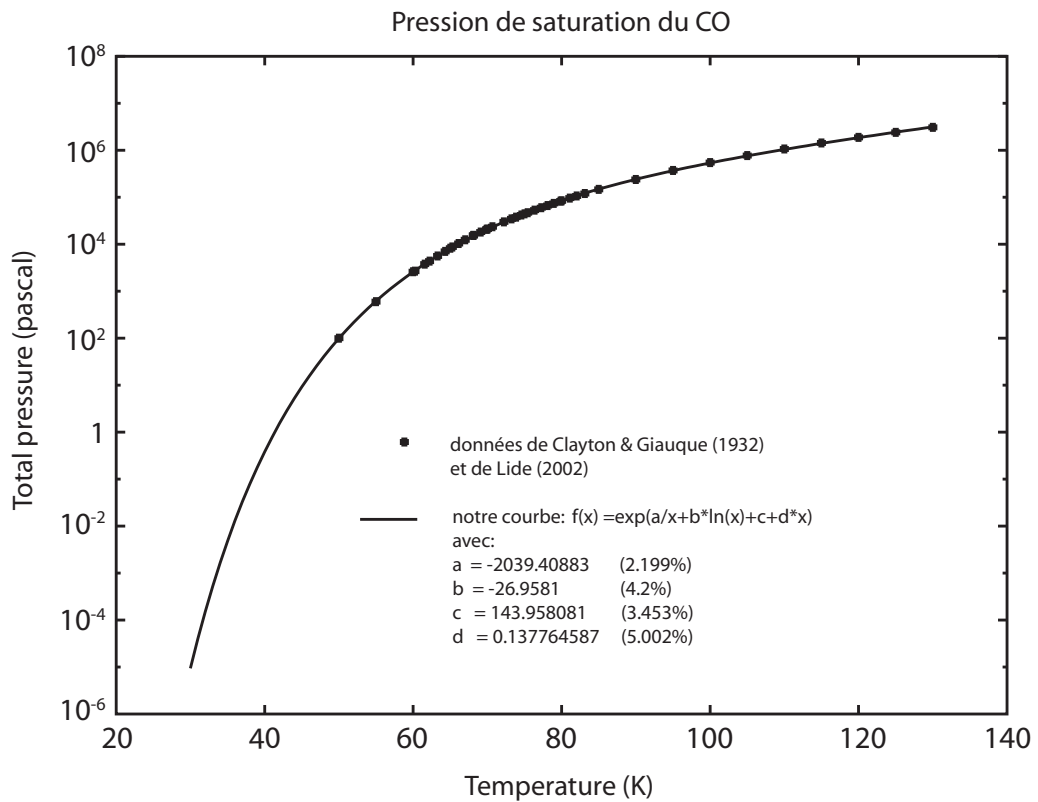
$$B_{CO}(T) = \left(\frac{\alpha_1}{T}\right) + \alpha_2 \cdot \ln(T) + \alpha_3 + \alpha_4 \cdot T$$

$$\frac{dB_{CO}(T)}{dT} = \frac{-\alpha_1}{T^2} + \frac{\alpha_2}{T} + \alpha_4$$

Les paramètres  $\alpha$  sont donnés dans le tableau D.2.

**Tab. D.2** - *Table des paramètres  $\alpha$  pour CO*

paramètre	valeur	paramètre	valeur
$\alpha_1$	-2039,40883	$\alpha_3$	143,958081
$\alpha_2$	-26,9581	$\alpha_4$	0,137764587



**Fig. D.1** - Pression de vapeur saturante du CO déterminée à partir de données expérimentales et théoriques (Clayton & Giaque, 1932; Lide, 2002) en fonction de la température.



## Annexe E

# Expressions de l'Enthalpie de Transition de Phase

Soit l'espèce chimique  $x$  en équilibre sous deux phases 1 et 2. La chaleur latente ou enthalpie de transition de phase est la chaleur nécessaire pour la transition de phase d'une unité de masse de ce corps de la phase 1 à la phase 2, à température et pression constantes. L'expression de la chaleur latente est donnée à partir de la relation de Clausius-Clapeyron à pression constante:

$$\Delta H_{12} = T(v_2 - v_1) \frac{dP_{12}}{dT} \quad (\text{E.1})$$

où  $v_1$  et  $v_2$  correspondent respectivement aux volumes des phases 1 et 2 de l'espèce chimique  $x$  et  $\frac{dP_{12}}{dT}$  la dérivée totale de la pression d'équilibre  $p_{12}$  entre les deux phases 1 et 2. Les phases considérées dans ces travaux sont celles solide, gaz et parfois, liquide. Les équilibres considérés seront alors Solide-Gaz et Liquide-Gaz. Le volume de la phase liquide ou solide étant très inférieur au volume disponible pour la phase gazeuse, nous négligerons leur volume. Enfin, la pression d'équilibre  $p_{12}$  correspond à la pression de vapeur saturante entre le solide-liquide et la phase gazeuse. L'équation de Clausius-Clapeyron devient alors:

$$\Delta H_{12} = T v_g \frac{dP^s(T)}{dT} \quad (\text{E.2})$$

où  $v_g$  est le volume occupé par la phase gazeuse. En considérant le gaz comme parfait, on obtient finalement:



$$\Delta H = \frac{RT^2}{P^s(T)} \cdot \frac{dP^s(T)}{dT} \quad (\text{E.3})$$

Cette relation n'est valable que pour un état voisin de l'état précédent, où la température  $T$  et la pression  $P$  du système ont peu évolué. Cette équation est adaptée dans le cadre d'évolutions monotones de la température et de la pression.

# Annexe F

## Constantes physiques utilisées

**Tab. F.1** - *Tableau des constantes physiques*

paramètre	valeur
Distance Terre-Soleil (dts)	$149598.10^{+6}$ (m)
Masse solaire (ms)	$1,98892.10^{+30}$ (kg)
Constante solaire (Cs)	1367 ( $W.m^{-2}$ )
Constante de Stefan-Boltzmann ( $\sigma$ )	$5,6704.10^{-08}$ ( $W.m^{-2}.K^{-4}$ )
Constante des gaz parfaits (R)	8,314472 ( $J.mol^{-1}.K^{-1}$ )
Constante de Boltzmann (k)	$1,3806503.10^{-23}$ ( $J.K^{-1}$ )
Nombre d'Avogadro (Na)	$6,02214199.10^{+23}$ ( $mol^{-1}$ )
Constante de gravitation (G)	$6,673.10^{-11}$ ( $m^3.kg^{-1}.s^{-2}$ )



## Annexe G

# Taux de sublimation d'une espèce à la surface du noyau

La théorie cinétique décrite par Delsemme and Miller (1971) décrit la quantité de molécules d'une espèce  $x$  qui sublime sur une surface constituée de glace homogène. Lorsque la phase gazeuse d'une espèce chimique  $x$  est à l'équilibre avec sa phase condensée, alors la pression de vapeur saturante  $P_x^s(T)$  de la phase gazeuse peut être donnée par la relation des gaz parfaits  $P_x^s = n_x \cdot k_B \cdot T$ , avec  $n_x$  le nombre de particules de l'espèce  $x$  par  $m^3$ ,  $T$  la température de surface et  $k_B$  la constante de Boltzmann.

Le modèle cinétique de déposition implique que toutes les molécules qui entrent en collision avec la surface sont fixées et que la quantité de molécules qui condense par unité de surface  $q_g^-$  est égale à celle qui sublime  $q_g^+$ . Si maintenant la pression du gaz est imposée égale à zéro (espace vide), la quantité de molécules qui condensent (=qui entrent en collision avec la surface) est nulle :  $q_g^- = 0$ . En revanche, la quantité de molécules qui subliment reste inchangée ce qui a été vérifié expérimentalement par Delsemme and Miller (1971). Le taux de sublimation dans le vide peut être maintenant prédit à partir de  $q_g^-$  à l'équilibre qui est connu en terme de flux de densité à partir de la théorie cinétique dans le régime de diffusion de type "Knudsen". Le nombre de molécules traversant alors une surface est égal à :

$$q_g(\text{vide}) = q_g^-(\text{eq}) = \frac{1}{4} n_x v$$

avec  $n_x = \frac{P_x^s}{k_B \cdot T}$  et  $v_x$  la vitesse moyenne des molécules  $x$ .

Pour une distribution maxwellienne de la vitesse à la température  $T$ ,  $v_x$  est égale à :

$$v_x = \sqrt{\frac{8k_B T_s}{\pi m_x}} \quad (m \cdot s^{-1})$$

avec  $m$  la masse en kg de la molécule  $x$  et  $T_s$  la température de la surface.

En appliquant la loi des gaz parfaits, on obtient :

$$q_g = \frac{P_x^s}{\sqrt{2\pi m_x k T_s}} \quad (\text{particules} \cdot s^{-1} \cdot m^{-2})$$

ou

$$\dot{\epsilon}_x = P_x^s \sqrt{\frac{M_x}{2\pi R T}} \quad (\text{mol} \cdot m^{-2} \cdot s^{-1})$$

# Annexe H

## Publications de l’auteur reliées au chapitre 1

### Contents

---

<b>H.1</b>	<b>Composition des glaces dans les planètes extrasolaires de faible masse . . . . .</b>	<b>171</b>
<b>H.2</b>	<b>Origine des volatils dans la ceinture principale . . . . .</b>	<b>180</b>

---

Dans les pages suivantes, je présente deux articles publiés et reliés aux travaux présentés au chapitre 1:

- Composition of ices in low-mass extrasolar planets, **Marboeuf, U.**, Mousis, O., Ehrenreich, D., Alibert, Y., Cassan, A., Wakelam, V., Beaulieu, J.-P., *The Astrophysical Journal*, *Astrophysical Journal* 681 (2008), 1624-1630.
- Origin of volatiles in the main belt, Mousis, O., Alibert, Y., Hestroffer, D., **Marboeuf, U.**, Dumas, C., Carry, B., Horner, J., Selsis, F., *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 383 (2008), 1269-1280

### H.1 Composition des glaces dans les planètes extrasolaires de faible masse

L’article qui suit a été publié par l’auteur en 2008 dans “The Astrophysical Journal”. Il propose d’étudier les conditions de formation des planétésimaux glacés dans les disques protoplanétaires afin de déterminer la composition des glaces dans les

planètes extrasolaires de petite taille et formées dans un environnement froid. La composition des glaces est influencée par la composition initiale de la phase gazeuse des disques protoplanétaires. Les influences des rapports d'abondance des molécules et de la variation du rapport C:O dans la phase gazeuse des disques protoplanétaires sur la composition des glaces sont étudiées. On montre que les planètes extrasolaires de faible masse formées à l'origine dans un environnement froid peuvent être du type "planètes océan" froides, chaudes ou bien des "planètes carbonées" (voir section 1.4.1).

## COMPOSITION OF ICES IN LOW-MASS EXTRASOLAR PLANETS

U. MARBOEUF,<sup>1,2</sup> O. MOUSIS,<sup>1,2</sup> D. EHRENREICH,<sup>3</sup> Y. ALIBERT,<sup>1,4</sup> A. CASSAN,<sup>2,5</sup>  
V. WAKELAM,<sup>6</sup> AND J.-P. BEAULIEU<sup>2,7</sup>

Received 2007 December 12; accepted 2008 April 2

### ABSTRACT

We study the formation conditions of icy planetesimals in protoplanetary disks in order to determine the composition of ices in small and cold extrasolar planets. Assuming that ices are formed from hydrates, clathrates, and pure condensates, we calculate their mass fractions with respect to the total quantity of ices included in planetesimals, for a grid of disk models. We find that the composition of ices weakly depends on the adopted disk thermodynamic conditions, and is rather influenced by the initial composition of the gas phase. The use of a plausible range of molecular abundance ratios and the variation of the relative elemental carbon over oxygen ratio in the gas phase of protoplanetary disks allow us to apply our model to a wide range of planetary systems. Our results can thus be used to constrain the icy/volatile phase composition of cold planets evidenced by microlensing surveys, hypothetical ocean planets, and carbon planets, which could be detected by *COROT* or *Kepler*.

*Subject headings:* planetary systems — planetary systems: formation

### 1. INTRODUCTION

Recent discoveries of low-mass extrasolar planets demonstrate the current capability to detect very low-mass planets (see, e.g., Rivera et al. 2005; Beaulieu et al. 2006; Udry et al. 2007). In particular, the microlensing technique has an unequaled potential to reveal planetary companions of a few  $M_{\oplus}$  with ground-based telescopes, down to a fraction of  $M_{\oplus}$  when operating from space (Bennett & Rhie 2002). Using the Probing Lensing Anomalies Network (PLANET) of ground-based telescopes, Beaulieu et al. (2006) reported the detection of OGLE 2005-BLG-390Lb (hereafter, OGLE 390Lb), a  $5.5 M_{\oplus}$  planet at 2.6 AU from a faint M star. Although the microlensing planet detection efficiency is  $\sim 50$  times higher for Jovian-mass than for sub-Uranus-mass planets (Cassan & Kubas 2007; Kubas et al. 2008), detections are equally distributed, which supports the core-accretion theory prediction that low-mass planets should be more common than gas giants. Models of OGLE 390Lb can thus apply to a progressively unveiled, large population of planets (Ehrenreich & Cassan 2007). Ehrenreich et al. (2006a) argued that such cold objects ( $T_{\text{surf}} \sim 40$  K) could host a subsurface ocean under an ice shell for several billion years. Besides, there is a growing interest in modeling low-mass exoplanets, as illustrated by the descriptions of the possible internal structures and atmospheres of “super-Earths” (Valencia et al. 2007; Sotin et al. 2007; Ehrenreich et al. 2006b) or “ocean planets” (Kuchner 2003; Léger et al. 2004; Sotin et al. 2007; Selsis et al. 2007).

These low-mass planets could originate from beyond the snow line of their protoplanetary disks and later migrate closer to the

star. Kuchner (2003) and Léger et al. (2004) suggested that they should consequently be composed by a large fraction of volatile species, typically  $\sim 50\%$  in mass, including not only  $\text{H}_2\text{O}$ , but also “minor” compounds, brought in by icy planetesimals during the formation of the planet. Such compounds include carbon monoxide (CO), carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ), methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ), methane ( $\text{CH}_4$ ), ammonia ( $\text{NH}_3$ ), molecular nitrogen ( $\text{N}_2$ ), or hydrogen sulfide ( $\text{H}_2\text{S}$ ).

This work aims at constraining the composition of the condensed volatile phase, or cryosphere<sup>8</sup> of small and cold planets. We examine the primordial conditions leading to the formation of the icy planetesimals that eventually build those planets. The composition of ices is a key parameter in planetary internal structure and thermal evolution models. “Minor” species determine the structure of cold planet icy mantles, the presence of liquid layers (oceans), and the atmospheric composition. For instance, the existence of subsurface oceans on Europa, Ganymede, or Titan depends on the composition of the volatiles incorporated in these moons.<sup>9</sup> More generally, the composition of ices in protoplanetary bodies is a function of the intricate properties of the protoplanetary disk: the formation distance of planetesimals to the star, its initial gas phase composition, its thermodynamic evolution, and the carbon-to-oxygen relative abundances (C:O).

In § 2, we use a generic accretion disk model (Papaloizou & Terquem 1999; Alibert et al. 2005) to represent the plausible thermodynamic conditions of the nebula from which the planetesimals were produced. We then examine the gas-phase chemistry that may occur in such a disk and derive the resulting abundances of the main volatile species in § 3. In § 4, we determine the composition of ices in the planetesimals produced in the cooling protoplanetary disk. Finally, § 5 is devoted to the discussion of the implications for exoplanets detected or to be detected with the microlensing and transit techniques. We finally discuss in § 5

<sup>1</sup> Institut UTINAM, CNRS (UMR 6213), Observatoire de Besançon, France; ulysse.marboeuf@obs-besancon.fr, olivier.mousis@obs-besancon.fr, yann.alibert@obs-besancon.fr.

<sup>2</sup> The HOLMES collaboration.

<sup>3</sup> Laboratoire d’Astrophysique de l’Observatoire de Grenoble, Université Joseph Fourier, CNRS (UMR 5571), France; david.ehrenreich@obs.ujf-grenoble.fr.

<sup>4</sup> Physikalisches Institut, University of Bern, Switzerland.

<sup>5</sup> Astronomisches Rechen-Institut, Zentrum für Astronomie der Universität Heidelberg, Germany; cassan@ari.uni-heidelberg.de.

<sup>6</sup> Laboratoire d’Astrophysique de Bordeaux (CNRS; Université Bordeaux I), B.P. 89, F-33270 Floirac, France; wakelam@obs.u-bordeaux1.fr.

<sup>7</sup> Institut d’astrophysique de Paris, CNRS (UMR 7095), Université Pierre et Marie Curie, France; beaulieu@iap.fr.

<sup>8</sup> The cryosphere includes all volatile “layers” condensed in the planet: the ice shell, the potential subsurface ocean, and the icy mantle; cryo ( $\kappa\rho\acute{\iota}\nu$ ) simply means cold.

<sup>9</sup> The presence of ammonia in the interiors of major icy satellites lowers the melting temperature of water and leads to the preservation of deep liquid layers during their thermal history (see, e.g., Spohn & Schubert 2003; Mousis & Gautier 2004).



the broader implications of our results for the composition of planets detected and to be detected by the microlensing and transit techniques.

## 2. MODELS OF PROTOPLANETARY DISKS

The composition of ices incorporated in planetesimals is determined by their condensation sequence in the cooling protoplanetary disk. The thermodynamic conditions of the formation of a condensate at a given distance to the star are determined by the intersection of its stability curve (as shown in Fig. 1; see § 4 for details) with the evolutionary track of the disk (hereafter cooling curve) calculated at the appropriate location. The cooling curve for a given radial distance results from the determination of the disk vertical structure which, in turn, derives from the turbulent model used in this work. While a full description of our turbulent model of accretion disk can be found in Papaloizou & Terquem (1999) and Alibert et al. (2005), we simply provide in this section a concise outline of the underlying assumptions.

Assuming cylindrical symmetry in the protoplanetary disk, the vertical structure along the  $z$ -axis at a given radial distance  $r$  is calculated by solving a system of three equations, namely, the equation for hydrostatic equilibrium, the energy conservation, and the diffusion equation for the radiative flux (eqs. [1], [2], and [3] in Alibert et al. 2005, respectively). The system variables are the local pressure  $P(r, z)$ , temperature  $T(r, z)$ , density  $\rho(r, z)$ , and viscosity  $\nu(r, z)$ . Following Shakura & Sunyaev (1973), the turbulent viscosity  $\nu$  is expressed in terms of Keplerian rotation frequency  $\Omega$  and sound velocity  $C_s$ , as  $\nu = \alpha C_s^2 / \Omega$ , where  $\alpha$  is a parameter characterizing the turbulence in the disk. If the disk evolution is mainly governed by viscosity and not by other processes (e.g., photoevaporation by the central star or nearby stars), the lower  $\alpha$  is, the slower the disk evolves, and the inverse is also true. In this approximation, the disk temperature, pressure, and surface density are determined once the stellar mass  $M_*$ , the radial distance  $r$ , and the viscosity parameter  $\alpha$  have been given. At a given  $r$ , the temporal evolution of  $P$  and  $T$  draws the cooling curves, shown in Figure 1 for  $\alpha = 2 \times 10^{-3}$ ,  $M_* = 0.22 M_\odot$ , and  $r = 2.6$  and 10 AU, values representative of the OGLE 390Lb system.

In fact, OGLE 390Lb (Beaulieu et al. 2006) is an example of such a frozen planetary system, whose physical parameters ( $M_* = 0.22^{+0.21}_{-0.11} M_\odot$  and semimajor axis  $a = 2.6^{+1.5}_{-0.6}$  AU) makes it relevant for our study. Taking into account the uncertainties on the OGLE 390Lb system parameters, we consider protoplanetary disks around stars of masses 0.11, 0.22, and  $0.43 M_\odot$ . Furthermore, we consider three regimes of disk turbulence, with values of  $\alpha$  equal to  $1 \times 10^{-4}$ ,  $2 \times 10^{-3}$ , and  $1 \times 10^{-2}$ , thus yielding nine disk models. For each model, two extreme planetary formation scenarios are considered: in situ formation at the present-day location of the planet (2, 2.6, and 4.1 AU, depending on the choice of  $M_*$ ), and formation with large scale migration, where we consider the composition of planetesimals at 10 AU from the star. These two extreme cases should bracket the actual formation processes.

It is important to mention that, after having performed calculations using the afore-mentioned range of values for the parameters  $\alpha$  and  $M_*$  of our disk model, we found that the volatile trapping conditions (temperature, pressure, and density of gas) remain almost constant at any distance to the star, whatever the adopted value of these parameters. These statements imply that, whatever the input parameters adopted when modeling the disk, and regardless of the formation location considered for icy planetesimals beyond the present-day position of the planet, their composition (in percent by weight, wt.%) remains almost constant (consistent

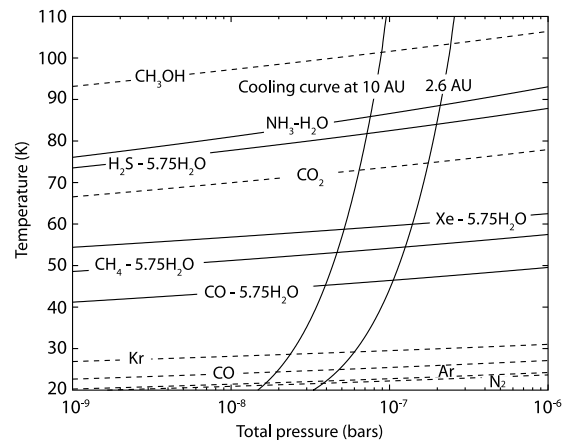


FIG. 1.—Stability curves of hydrate ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ), clathrates ( $X\text{-}5.75\text{H}_2\text{O}$ ; solid lines) and pure condensates (dotted lines), and cooling curves of the protoplanetary disk model at two given distances to the star, 2.6 and 10 AU (the evolution of the disk proceeds from high to low temperatures). Abundances of elements are solar, with  $\text{CO}:\text{CO}_2:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:10:2:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  in the gas phase (our nominal gas phase composition). Species remain in the gas phase above the stability curves. Below, they are trapped as clathrates or simply condense.

within  $\sim 0.5\%$ ), provided that the gas-phase abundances are homogeneous in the disk. In the following, we choose to fix  $M_* = 0.22 M_\odot$ ,  $\alpha = 2 \times 10^{-3}$ , and  $r = 2.6$  AU in all our calculations.

## 3. EVOLUTION OF THE GAS PHASE IN PROTOPLANETARY DISKS

### 3.1. Distribution of Oxygen, Carbon, and Nitrogen between Refractory and Volatile Components

In order to define the gas-phase composition in protoplanetary disks, we consider both refractory and volatile components. Refractory components include rocks and organics. According to Lodders (2003), rocks contain  $\sim 23\%$  of the total oxygen in the nebula. The fractional abundance of organic carbon is assumed to be 55% of total carbon (Pollack et al. 1994; Sekine et al. 2005), and the ratio of C:O:N included in organics is supposed to be 1:0.5:0.12 (Jessberger et al. 1988; Sekine et al. 2005). We then assume that the remaining O, C, and N exist only in the form of  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ , CO,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2$ , and  $\text{NH}_3$ . Hence, once the gas-phase abundances of elements are defined, the abundances of CO,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2$ , and  $\text{NH}_3$  are determined from the adopted  $\text{CO}:\text{CO}_2:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3$  gas-phase molecular ratios given in § 3.2, and from the C:O:N relative abundances set in organics. Once the abundances of these molecules are fixed, the remaining O gives the abundance of  $\text{H}_2\text{O}$ .

We follow this strategy for the determination of the composition of ices produced from a disk owning a solar elemental composition (see § 4.1). In the case of a disk where gas phase abundances of all elements but carbon remain solar (see § 4.2), we consider the variation of the C:O ratio in the gas phase. Indeed, as the C:O ratio increases, all the available O goes into organics,  $\text{CH}_3\text{OH}$ , CO, and  $\text{CO}_2$ , so that the gas phase becomes  $\text{H}_2\text{O}$  free and the remaining C is in the form of  $\text{CH}_4$ . This approach is consistent with C:O-dependent chemical models of dense interstellar clouds from which interstellar medium (ISM) ices are formed (Watt 1985). Similarly, at higher values of the C:O ratio, the abundances of  $\text{NH}_3$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$ , CO, and  $\text{CH}_3\text{OH}$  progressively decrease as the amounts of oxygen and nitrogen increase in organics, since their

TABLE 1  
NOMINAL MOLECULAR RATIOS ADOPTED IN THE GAS  
PHASE OF PROTOPLANETARY DISK

Molecular Ratio	Value
CO : CH <sub>4</sub> .....	70
CO <sub>2</sub> : CH <sub>4</sub> .....	10
CH <sub>3</sub> OH : CH <sub>4</sub> .....	2
N <sub>2</sub> : NH <sub>3</sub> .....	1

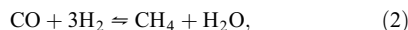
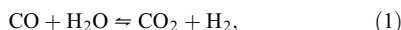
abundances relative to carbon remain fixed with C:O:N = 1:0.5:0.12 in these components.

### 3.2. Gas Phase Chemistry

Here, we investigate the plausible range of abundance ratios that may exist between main volatile species in the gas phase of protoplanetary disks. The temperature in the disk models is initially high enough to sublimate all ISM ices entering the disk and, in particular, in the formation zone of planetesimals that will eventually take part in the planet accretion. Thus, similarly to the case of the solar nebula (Mousis et al. 2002), the gas-phase molecular ratios in the protoplanetary disks are presumed to derive directly from those in ISM where the gas and solid phases coexist. However, in some cases, gas phase chemistry may affect these molecular ratios in the disks. In particular, taking the example of the equilibrium calculations of the distribution of sulfur in the Solar nebula (Pasek et al. 2005), we assume that this element is present in protoplanetary disks in the form of H<sub>2</sub>S and other refractory sulfurated components. We then set H<sub>2</sub>S:H<sub>2</sub> = 0.7(S:H<sub>2</sub>)<sub>⊙</sub> (Mousis et al. 2006 and references therein).

In addition, the value of the N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> ratio is quite uncertain in the gas phase of our disk models, although current chemical models of the ISM predict that molecular nitrogen should be much more abundant than ammonia (Irvine & Knacke 1989). Indeed, the N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> ratio may have been much lower in the disks since it has been shown that the conversion of N<sub>2</sub> into NH<sub>3</sub> can be accelerated by the catalytic effect of local Fe grains in the solar nebula (Lewis & Prinn 1980; Fegley 2000). We assume that disks considered here behave like the solar nebula. In all our following calculations, we consider three cases, namely N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> = 0.1:1, 1:1, and 10:1 in the gas phase.

On the other hand, following Prinn & Fegley (1981, 1989), the net reactions relating CO, CH<sub>4</sub>, and CO<sub>2</sub> in a gas dominated by H<sub>2</sub> are



which all proceed to the right with decreasing temperature at constant pressure. Reaction (1) has been studied by Talbi & Herbst (2002), who demonstrated that its rate coefficient is negligible, even at temperatures as high as 2000 K (of the order of  $\sim 4.2 \times 10^{-22} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ ). Such a high temperature range is only reached at quite close distances to the star and at early epochs only in our protoplanetary disks models. As a result, the amount of carbon species produced through this reaction is insignificant during the whole lifetime of the protoplanetary disks considered in this work. Reaction (2) has been studied by Lewis & Prinn (1980) and Mousis et al. (2002) in the case of the solar nebula. These authors found that the initial CO : CH<sub>4</sub> ratio was not significantly modified throughout the solar nebula, except quite close to the Sun. Since the protoplanetary disks considered here are less massive

TABLE 2  
GAS PHASE ABUNDANCES

Species X	X/H <sub>2</sub>
O.....	$7.33 \times 10^{-4}$
C.....	$2.62 \times 10^{-4}$
N.....	$1.22 \times 10^{-4}$
H <sub>2</sub> O.....	$4.43 \times 10^{-4}$
CO.....	$2.21 \times 10^{-4}$
CO <sub>2</sub> .....	$3.16 \times 10^{-5}$
CH <sub>4</sub> .....	$3.16 \times 10^{-6}$
H <sub>2</sub> S.....	$2.56 \times 10^{-5}$
N <sub>2</sub> .....	$4.05 \times 10^{-5}$
NH <sub>3</sub> .....	$4.05 \times 10^{-5}$
S.....	$3.66 \times 10^{-5}$
Ar.....	$8.43 \times 10^{-6}$
Kr.....	$4.54 \times 10^{-9}$
Xe.....	$4.44 \times 10^{-10}$
CH <sub>3</sub> OH.....	$6.31 \times 10^{-6}$

NOTE.—Gas phase abundances (molar mixing ratio with respect to H<sub>2</sub>) of major species in the solar nebula from Lodders (2003) with CO:CO<sub>2</sub>:CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>4</sub> = 70:10:2:1 and N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> = 1:1 (our nominal gas phase composition).

and colder than the solar nebula model used by Mousis et al. (2002), we estimate that the CO : CH<sub>4</sub> ratio is also poorly affected in the gas phase of our models. Finally, we assume that the CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>4</sub> gas-phase ratio present in the protoplanetary disks is similar to that in ISM. Note also that ISM ices contain a small fraction of H<sub>2</sub>CO. Unfortunately, since there exist no data on the stability curves of H<sub>2</sub>CO either in the form of clathrate or as a pure condensate, this molecule cannot be considered in the gas-phase composition of our protoplanetary disks. Hence, we assume that H<sub>2</sub>CO has been largely hydrogenated into CH<sub>3</sub>OH on interstellar grains.

From the afore-mentioned considerations, we set CO:CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>4</sub> = 70:2:1 in the gas phase of the disks, values that are consistent with the ISM measurements that consider the contributions of both gas and solid phases in the lines of sight (Frerking et al. 1982; Ohishi et al. 1992; Ehrenfreund & Schutte 2000; Gibb et al. 2000). In addition, we opted to test the influence of several CO<sub>2</sub>:CO gas-phase ratios, namely the two most abundant carbon volatile compounds, in the 0.1–1 range, whose extreme values correspond to the ones measured or expected in the gas and solid phases of ISM, respectively (Ehrenfreund & Schutte 2000; Gibb et al. 2004). Table 1 summarizes the nominal gas-phase molecular ratios adopted in our model of protoplanetary disks.

Note that the surface densities of our disk models still remain higher than 100 g cm<sup>-2</sup> in the formation zone of planetesimals as long as the carbon and nitrogen species considered here are not trapped in clathrates or condensed as pure ices. Such a high density implies that cosmic rays do not produce enough active ions, such as H<sub>3</sub><sup>+</sup> or He<sup>+</sup>, in the gas phase in order to convert significant amounts of CO and N<sub>2</sub> into CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, and HCN (see, e.g., Aikawa et al. 1999).

## 4. FORMATION OF ICY PLANETESIMALS

The process by which volatiles are trapped in icy planetesimals, illustrated in Figure 1, is calculated using the stability curves of hydrates, clathrates, and pure condensates, and the evolutionary tracks detailing the evolution of temperature and pressure at 2.6 and 10 AU (see § 2) for CO:CO<sub>2</sub>:CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>4</sub> = 70:10:2:1 and N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> = 1:1 in the gas phase. The corresponding

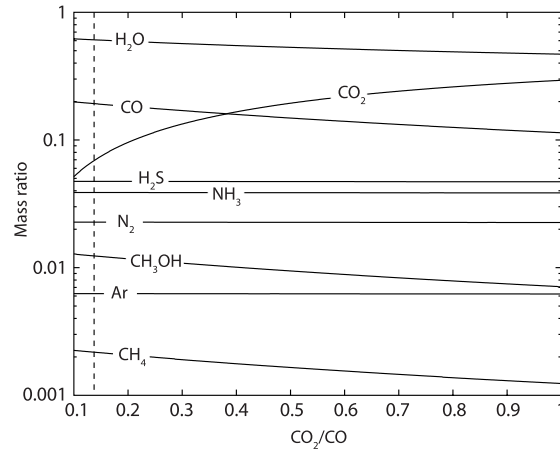


FIG. 2.—Composition of ices (wt.%) incorporated in planetesimals produced in a disk where the abundances of all elements are solar, as a function of the adopted  $\text{CO}_2:\text{CO}$  ratio in the initial gas phase. The composition is expressed in mass ratio (mass of ice  $i$  to the total mass of ices). Abundances of considered elements are solar with  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:2:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  in the gas phase. The intersection of the vertical dashed line with the other curves gives the mass fraction ratios of ices formed from  $\text{CO}:\text{CO}_2:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:10:2:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$ , namely our nominal gas phase composition.

gas phase abundances of the volatile compounds are given in Table 2. The stability curves of hydrates and clathrates derive from the Lunine & Stevenson (1985) compilation of laboratory data, from which data is available at relatively low temperature and pressure. On the other hand, the stability curves of pure condensates used in our calculations derive from the compilation of laboratory data given in the CRC Handbook of chemistry and physics (Lide 2002). The cooling curve intercepts the stability curves of the different ices at some given temperature, pressure, and surface density conditions. For each ice considered, the domain of stability is the region located below its corresponding stability curve. The clathration process stops when no more crystalline water ice is available to trap the volatile species.

#### 4.1. Ices Produced in a Gas Phase of Solar Composition

We calculate here the composition of ices produced from a gas phase of solar composition, with  $\text{CO}:\text{CO}_2:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:10:2:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  (our nominal gas-phase molecular ratios). We obtain similar results in all our disk models:  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , xenon (Xe), and  $\text{CH}_4$  are entirely trapped by  $\text{H}_2\text{O}$ , as  $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$  hydrate,  $\text{H}_2\text{S-5.75H}_2\text{O}$ ,  $\text{Xe-5.75H}_2\text{O}$  and  $\text{CH}_4\text{-5.75H}_2\text{O}$  clathrates, respectively. About 60% of CO is trapped as  $\text{CO-5.75H}_2\text{O}$  clathrate. The remaining CO, as well as  $\text{N}_2$ , krypton (Kr), and argon (Ar), whose clathration normally occurs at lower temperatures, remain in the gas phase until the disk cools enough to allow the formation of pure condensates (between 20 and 30 K). Note that during the cooling of disks,  $\text{CO}_2$  is the only species crystallizing as a pure condensate before being trapped by  $\text{H}_2\text{O}$  to form a clathrate. Hence, pure ice of  $\text{CO}_2$  is the only existing solid form containing this species. In addition, we have considered only the formation of pure ice of  $\text{CH}_3\text{OH}$  in our model since, to our best knowledge, no experimental data concerning the stability curve of its associated clathrate have been reported in the literature.

Using the trapping/formation conditions of the different ices calculated at a given heliocentric distance in the protoplanetary

TABLE 3  
RATIO OF THE MASS OF ICE TO THE GLOBAL MASS OF ICES  
IN PLANETESIMALS FORMED IN PROTOPLANETARY DISKS

Species	$\text{CO}_2:\text{CO} = 0.1:1$	$\text{CO}_2:\text{CO} = 1:1$
$\text{H}_2\text{O}$ .....	$6.19 \times 10^{-1}$	$4.70 \times 10^{-1}$
$\text{CO}_2$ .....	$5.16 \times 10^{-2}$	$2.93 \times 10^{-1}$
$\text{CO}$ .....	$1.98 \times 10^{-1}$	$1.14 \times 10^{-1}$
$\text{CH}_4$ .....	$2.25 \times 10^{-3}$	$1.24 \times 10^{-3}$
$\text{CH}_3\text{OH}$ .....	$1.28 \times 10^{-2}$	$7.06 \times 10^{-3}$
$\text{NH}_3$ .....	$3.88 \times 10^{-2}$	$3.88 \times 10^{-2}$
$\text{H}_2\text{S}$ .....	$4.74 \times 10^{-2}$	$4.74 \times 10^{-2}$
$\text{N}_2$ .....	$2.27 \times 10^{-2}$	$2.27 \times 10^{-2}$
$\text{Ar}$ .....	$6.26 \times 10^{-3}$	$6.26 \times 10^{-3}$
$\text{Kr}$ .....	$1.04 \times 10^{-5}$	$1.04 \times 10^{-5}$
$\text{Xe}$ .....	$2.65 \times 10^{-6}$	$2.65 \times 10^{-6}$

NOTES.—Ratio of the mass of ice  $i$  to the global mass of ices (wt.%) in planetesimals formed in protoplanetary disks, calculated for  $\text{CO}_2:\text{CO} = 0.1:1$  and  $1:1$  in the vapor phase. Both ratios are calculated with  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:2:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  in the gas phase.

disks, and knowing their gas phase abundances, one can estimate their mass ratios with respect to  $\text{H}_2\text{O}$  in the accreting planetesimals. Indeed, the volatile,  $i$ , to water mass ratio in these planetesimals is determined by the relation given by Mousis & Gautier (2004),

$$m_i = \frac{X_i}{X_{\text{H}_2\text{O}}} \frac{\Sigma(r; T_i, P_i)}{\Sigma(r; T_{\text{H}_2\text{O}}, P_{\text{H}_2\text{O}})}, \quad (3)$$

where  $X_i$  and  $X_{\text{H}_2\text{O}}$  are the mass mixing ratios of the volatile  $i$  and  $\text{H}_2\text{O}$  with respect to  $\text{H}_2$  in the protoplanetary disk, respectively.  $\Sigma(R; T_i, P_i)$  and  $\Sigma(R; T_{\text{H}_2\text{O}}, P_{\text{H}_2\text{O}})$  are the surface density of the disk at a distance  $r$  from the star at the epoch of hydration or clathration of the species  $i$ , and at the epoch of condensation of water, respectively. From  $m_i$ , it is possible to determine the mass fraction  $M_i$  of species  $i$  with respect to all the other volatile species taking part to the formation of an icy solid,

$$M_i = \frac{m_i}{\sum_{j=1,n} m_j}, \quad (4)$$

with  $\sum_{i=1,n} M_i = 1$ . The resulting composition of ices in the forming planetesimals does not depend on the chosen disk model (see § 2), but rather on the postulated composition of the gas phase.

Figure 2 shows the variation of the composition of icy planetesimals formed in the disks as a function of the  $\text{CO}_2:\text{CO}$  ratio (shown for values between 0.1:1 and 1:1), with  $\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{CH}_4 = 70:2:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  in the gas phase, and Table 3 gives the mass ratios of the ices for the two extreme cases  $\text{CO}_2:\text{CO} = 0.1:1$  and  $1:1$ . The composition of ices given in Figure 2 is then valid for solids formed at any distance within the protoplanetary disks calculated in § 2, provided that the gas phase is homogeneous and the disks are initially warm enough at that location to vaporize the ices falling in from the ISM. It can be seen that water remains the most abundant ice in mass, whatever the value of the  $\text{CO}_2:\text{CO}$  gas phase ratio adopted in the disks. Interestingly enough, CO is the main carbon species trapped within planetesimals for  $\text{CO}_2:\text{CO} \leq 0.4$  in the gas phase. At higher  $\text{CO}_2:\text{CO}$  ratios,  $\text{CO}_2$  becomes the main carbon species incorporated in solids. We also note that the relative amounts of  $\text{H}_2\text{O}$  and of other carbon species decrease as the  $\text{CO}_2:\text{CO}$  ratio increases. In contrast, the mass fractions of  $\text{NH}_3$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , and of

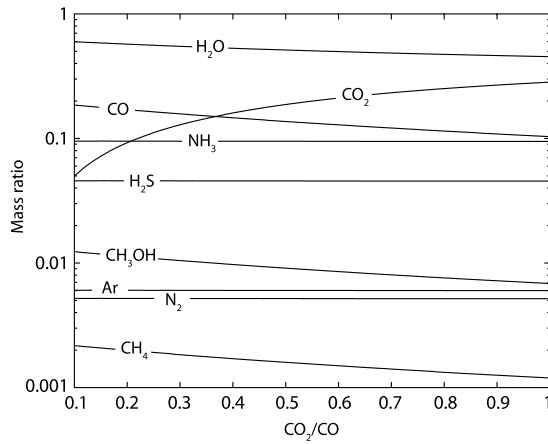


Fig. 3.—Same as Fig. 2 but for  $N_2 : NH_3 = 0.1:1$  in the gas phase.

the noble gases are weakly influenced by the variation of the  $CO_2:CO$  gas phase ratio.

Figures 3 and 4 show the variation of the composition of icy planetesimals formed in the protoplanetary disks as a function of the  $CO_2:CO$  ratio in the same gas phase conditions as in Figure 2, but with  $N_2 : NH_3 = 0.1:1$  and  $10:1$ , respectively. It can be seen that, whatever the initial  $N_2 : NH_3$  ratio adopted in the gas phase, the mass fractions of other volatile compounds is weakly influenced by this parameter. Hence, an extension of the range of variation of this ratio is not warranted.

#### 4.2. Ices Produced in a Carbon- or Oxygen-rich Gas Phase

The composition of ices forming in a disk with a given C:O ratio is obtained assuming that gas phase abundances of all elements but carbon remain solar. In order to test different values of the C:O ratio, which may differ from the “protosolar” value  $[(C:O)_\odot \sim 0.5; \text{Lodders 2003}]$ , we define a carbon-to-oxygen enrichment factor,  $f \equiv (C:O)_{\text{disk}}/(C:O)_\odot$ . Indeed, Kuchner & Seager (2005) suggested that extrasolar systems can form from carbon-rich clouds where  $f > 2$ , while observations of the debris disk around  $\beta$  Pic hint toward an extremely carbon-rich post-

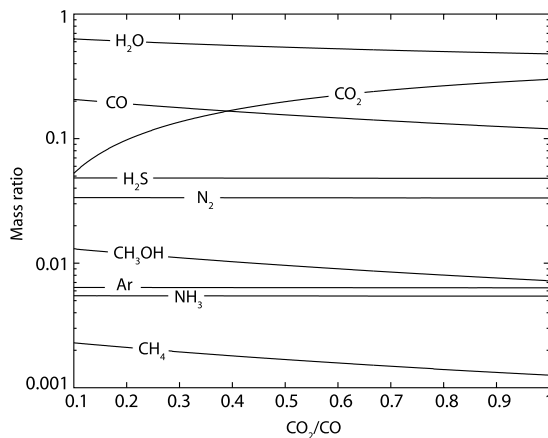


Fig. 4.—Same as Fig. 2 but for  $N_2 : NH_3 = 10:1$  in the gas phase.

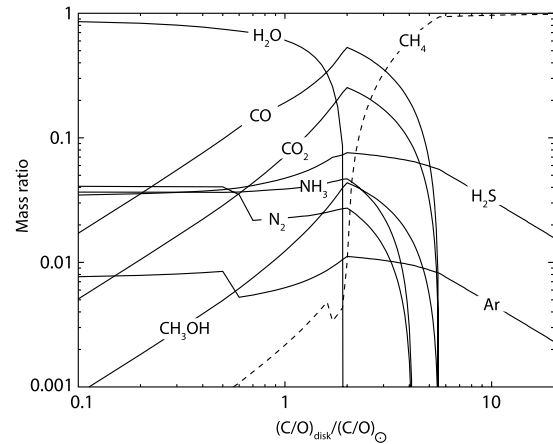


Fig. 5.—Composition of ices (wt.%) in planetesimals produced in a disk where all elements but carbon are solar, as a function of the C/O enrichment factor  $f \equiv (C/O)_{\text{disk}}/(C/O)_\odot$  in the initial gas phase.

protoplanetary environment ( $f \sim 18$ ; Roberge et al. 2006). On the other hand, ices may have crystallized in protoplanetary disks formed from oxygen-rich clouds. For instance, observations of the Orion bar yielded  $f \sim 0.5$  (Walmsley et al. 1999). In the present study, we cover the afore-mentioned range of observed values by varying  $f$  between 0.1 and 20.

Figure 5 shows the composition of ices formed in protoplanetary disks as a function of  $f$ . The condensation sequence of ices is calculated as in § 4.1 and the values shown here for  $f = 1$  match those found in § 4.1 for  $CO:CO_2:CH_3OH:CH_4 = 70:10:2:1$  and  $N_2:NH_3 = 1$  (our nominal gas phase composition). For low  $f$  (0.1–1.6),  $H_2O$  is the major constituent of ices (86%–34% in mass, respectively). For  $1.6 < f < 3.0$ , the main ice in planetesimals is  $CO$  ( $\geq 34\%$  in mass, with a peak at 53% in mass for  $f = 2$ ). For  $f \geq 3$ ,  $CH_4$  becomes the main icy compound ( $\geq 33\%$  in mass).

## 5. SUMMARY AND DISCUSSION

In this work, we have quantified the “bulk” amount of minor species included in icy planetesimals produced in protoplanetary disks. The composition of ices calculated here can be translated into the composition of planetary ices. However, it should be regarded as an *initial composition*, and the individual species mass fractions as *upper limit values*.

The main assumptions that allowed us to determine the composition of icy planetesimals are recalled below.

1. Taking into account the uncertainties on the physical parameters of the OGLE 390Lb system, and using an evolutionary turbulent model, we have calculated a range of plausible disks thermodynamic conditions from which low-mass extrasolar planets may have formed.

2. Ices are formed from hydrates, clathrates, and pure condensates produced during the cooling of the protoplanetary disks. The efficiency of clathration is ruled by the amount of available crystalline water ice in the disks.

3. A fraction of the available oxygen in disks is included in rocks. Similarly, organics include a part of the O, C, and N initial budget available in the gas phase. Finally, the remaining O, C, and N are distributed in the form of  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $CH_3OH$ ,  $CH_4$ ,  $N_2$ , and  $NH_3$ .

4. Assuming solar elemental abundances in the initial gas phase, plausible ranges of CO:CO<sub>2</sub>:CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>4</sub> and N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> gas-phase molecular ratios have been employed in disks to investigate the variation of icy solids composition.

5. In some cases, CO has been varied in order to constrain the composition of icy planetesimals forming from carbon- or oxygen-rich nebulae.

From these hypotheses, the main results derived from our calculations are the following.

1. The composition of ices weakly depends on the adopted disk thermodynamic conditions, and is rather influenced by the initial composition of the gas phase.

2. Using solar gas phase elemental abundances, H<sub>2</sub>O is dominant regardless of the adopted CO<sub>2</sub>:CO molecular ratio.

3. The variation of the adopted N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> molecular ratio weakly influences the mass fractions of other volatiles incorporated in ices.

4. Planets formed in carbon-rich environments are depleted in water and would be essentially CO- or CH<sub>4</sub>-rich.

So far, models of volatile-rich low-mass extrasolar planets have considered almost pure-H<sub>2</sub>O cryospheres. On the other hand, Léger et al. (2004) estimated that hypothetical ocean planets should contain some “minor” volatile species, with molecular abundances similar to that of cometary ice in the solar system. However, we have to bear in mind that there are some uncertainties in determining the composition of comets. In particular, it is difficult to directly detect molecules in cometary nuclei. Instead, only molecules and radicals (daughter molecules), which are formed in the comae via photolysis, are observed. From these observations, the molecular composition of the parent molecules is determined using chemical reaction models. Hence, the molecular composition of the parent molecules is somewhat model dependent. Moreover, it is unclear whether the cometary nuclei are chemically homogeneous, and how much they were reprocessed in their formation stages and during their stay in the Oort cloud or in the Kuiper belt (Aikawa et al. 1999). There are indeed several pieces of evidence that indicate the presence of macroscopic internal heterogeneity in cometary nuclei. For example, observations of comet Halley showed that the relative production rate of major volatiles varied more than tenfold, and outbursts were observed for some given species, such as CO<sub>2</sub>-rich outbursts (Mumma et al. 1993). Thus, comets cannot be considered as good indicators of planetary ice composition.

*Comparison with the Solar System.*—In the framework of giant planet formation scenarios, we point out that similar calculations reproduce the current abundances of volatile species in the atmospheres of Jupiter and Saturn (Mousis & Marboeuf 2006). Moreover, they can explain the current composition of Titan’s atmosphere measured by the *Huygens* probe (Alibert & Mousis 2007). Estimating the composition of icy bodies devoid of atmosphere is less straightforward, since the spectroscopy measurements are actually limited to their surface. Indeed, despite the detections of H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, and others at the surface of several icy satellites (Brown & Cruikshank 1997; Hibbitts et al. 2002, 2003), we do not have, to our knowledge, a real insight of their “bulk” composition. As a result, internal structure models of these bodies usually consider H<sub>2</sub>O icy mantles and set the mass fractions of minor species as free parameters (Sohl et al. 2002; Spohn & Schubert 2003).

*Implications for Cold Low-Mass Extrasolar Planets.*—Ehrenreich et al. (2006a) reported that cold low-mass extrasolar

planets could be described as frozen ocean planets, with a subsurface liquid H<sub>2</sub>O layer surviving between low- and high-pressure ice shells, in a large version of a Ganymede-like internal structure model. The heat source allowing the existence of the liquid layer is radiogenic energy from within the underlying rocky mantle. As this heat source decreases with time, the subsurface ocean eventually freezes in a few Gyr, as predicted by Ehrenreich et al. (2006a). However, the freezing might occur on a longer timescale if the cryosphere of the planet contains small amounts of NH<sub>3</sub>, since ammoniated water has a lower freezing point than pure H<sub>2</sub>O. Hence, a subsurface ocean of ammoniated water can exist in the range where H<sub>2</sub>O is the major component of ice for  $f \leq 1.6$  solar, while the mass fraction of NH<sub>3</sub> ice remains nearly constant around ~3.7%–4.3% (see Fig. 5).

*Implications for “Hot Ocean Planets.”*—Our results can also be used to constrain the icy/volatile phase composition of warmer planets that formed beyond the snow line and migrated closer to the star. This is the case of ocean planets described by Kuchner (2003), Léger et al. (2004), and Selsis et al. (2007). They noted that the presence of CO<sub>2</sub> in ocean planets could dramatically change their cooling history and structure, because CO<sub>2</sub> would maintain the atmosphere in a hot state, hence preventing the condensation of an icy mantle and ocean. A small fraction of CO<sub>2</sub> in the ices is sufficient to trigger this effect, because given the ice-to-rock mass fraction of an ocean planet (~1), it represents in absolute several hundred times the quantity of CO<sub>2</sub> in the atmosphere of Venus. Indeed, we predict that ~7% of the icy mass is initially made of CO<sub>2</sub>, assuming a solar composition in our disk models, with a peak at 25% for  $f = 2$ . This could lead to an increase in the predicted mean density of an ocean planet, making it more difficult to discriminate ocean planets from super-Earths in planetary candidates yielding from *COROT* and *Kepler* transit surveys (Selsis et al. 2007). *An ocean planet forming in a carbon-rich environment could rather be a “carbon planet” (see below).*

*Implications for “Carbon Planets.”*—Kuchner & Seager (2005) conjectured up planets forming in carbon-rich environments. “Carbon planets” could be forming for  $f > 1.6$  in the gas phase. Such environments could include carbon-rich stellar surrounds, like the debris disk around  $\beta$  Pic (Roberge et al. 2006). The main refractory material composing these hypothetical planets should be silicon carbide (SiC), rather than metals and silicates usually considered for the refractory phase of planets forming at solar C:O ratio. Our present work allows us to constrain the volatile phase of such planets. The major ice compound is CO, with mass fractions between ~34% and 53% for  $1.6 \leq f \leq 3.0$  in the gas phase conditions adopted in § 3.2. In this case and according to Figure 5, we expect CO, CO<sub>2</sub>, and CH<sub>4</sub> to be the other main compounds as  $f$  increases. It is interesting to note that these planets should be almost completely dry, as water amounts to a negligible value. For even larger values of  $f$ , CH<sub>4</sub> becomes the most abundant ice in carbon planets, by far ( $\geq 80\%$  in mass for  $f \geq 5$ ).

U. M., O. M., A. C., and J. P. B. acknowledge the financial support of the ANR HOLMES. D. E. acknowledges support of the ANR Exoplanet Horizon 2009. A. C. and O. M. acknowledge the ESO Visitor Programme for financing a one-month stay at ESO Santiago in 2007 March, where part of the discussions were carried out. We thank Franck Selsis, Jean-Marc Petit, and an anonymous referee for useful remarks and suggestions.

## REFERENCES

- Aikawa, Y., Umebayashi, T., Nakano, T., & Miyama, S. M. 1999, *ApJ*, 519, 705
- Alibert, Y., Mordasini, C., Benz, W., & Winisdoerffer, C. 2005, *A&A*, 434, 343
- Alibert, Y., & Mousis, O. 2007, *A&A*, 465, 1051
- Beaulieu, J.-P., et al. 2006, *Nature*, 439, 437
- Bennett, D. P., & Rhie, S. H. 2002, *ApJ*, 574, 985
- Brown, R. H., & Cruikshank, D. P. 1997, *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, 25, 243
- Cassan, A., & Kubas, D. 2007, in *ASP Conf. Ser. 366, Transiting Extrapolar Planets Workshop*, ed. C. Afonso, D. Weldrake, & T. Henning (San Francisco: ASP), 337
- Ehrenfreund, P., & Schutte, W. A. 2000, *Adv. Space Res.*, 25, 2177
- Ehrenreich, D., & Cassan, A. 2007, *Astron. Nachr.*, 328, 789
- Ehrenreich, D., Lecavelier des Etangs, A., Beaulieu, J.-P., & Grasset, O. 2006a, *ApJ*, 651, 535
- Ehrenreich, D., Tinetti, G., Lecavelier des Etangs, A., Vidal-Madjar, A., & Selsis, F. 2006b, *A&A*, 448, 379
- Fegley, B. J. 2000, *Space Sci. Rev.*, 92, 177
- Ferking, M. A., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1982, *ApJ*, 262, 590
- Gibb, E. L., Whittet, D. C. B., Boogert, A. C. A., & Tielens, A. G. G. M. 2004, *ApJS*, 151, 35
- Gibb, E. L., et al. 2000, *ApJ*, 536, 347
- Hibbitts, C. A., Klemaszewski, J. E., McCord, T. B., Hansen, G. B., & Greeley, R. 2002, *J. Geophys. Res. Planets*, 107, 5084
- Hibbitts, C. A., Pappalardo, R. T., Hansen, G. B., & McCord, T. B. 2003, *J. Geophys. Res. Planets*, 108, 5036
- Irvine, W. M., & Knacke, R. F. 1989, in *Origin and Evolution of Planetary and Satellite Atmospheres*, ed. S. K. Atreya, J. B. Pollack, & M. S. Matthews (Tucson: Univ. Arizona Press), 3
- Jessberger, E. K., Christoforidis, A., & Kissel, J. 1988, *Nature*, 332, 691
- Kubas, D., Cassan, A., Dominik, M. 2008, *A&A*, 483, 317
- Kuchner, M. 2003, *ApJ*, 596, L105
- Kuchner, M., & Seager, S. 2005, *ApJ*, submitted (astro-ph/0504214)
- Lide, D. R. 2002, *CRC Handbook of Chemistry and Physics: A Ready-Reference Book of Chemical and Physical Data (83rd ed.)*; Boca Raton: CRC
- Léger, A., et al. 2004, *Icarus*, 169, 499
- Lewis, J. S., & Prinn, R. G. 1980, *ApJ*, 238, 357
- Lodders, K. 2003, *ApJ*, 591, 1220
- Lunine, J. I., & Stevenson, D. J. 1985, *ApJS*, 58, 493
- Mousis, O., Alibert, Y., & Benz, W. 2006, *A&A*, 449, 411
- Mousis, O., & Gautier, D. 2004, *Planet. Space Sci.*, 52, 361
- Mousis, O., Gautier, D., Bockelée-Morvan, D. 2002, *Icarus*, 156, 162
- Mousis, O., & Marboeuf, U. 2006, in *Proc. European Planetary Science Congress 2006 (Berlin: EPS)*, 536
- Mumma, M. J., Weissman, P. R., & Stern, S. A. 1993, in *Protostars and Planets III*, ed. E. H. Levy & J. I. Lunine (Tucson: Univ. Arizona Press), 1177
- Ohishi, M., Irvine, W. M., & Kaifu, N. 1992, in *IAU Symp. 150, Astrochemistry of Cosmic Phenomena*, ed. P. D. Singh (Dordrecht: Kluwer), 171
- Papaloizou, J. C. B., & Terquem, C. 1999, *ApJ*, 521, 823
- Pasek, M. A., Milsom, J. A., Ciesla, F. J., Lauretta, D. S., Sharp, C. M., & Lunine, J. I. 2005, *Icarus*, 175, 1
- Pollack, J. B., Hollenbach, D., Beckwith, S., Simonelli, D. P., Roush, T., & Fong, W. 1994, *ApJ*, 421, 615
- Prinn, R. G., & Fegley, B., Jr. 1981, *ApJ*, 249, 308
- . 1989, in *Origin and Evolution of Planetary and Satellite Atmospheres*, ed. S. K. Atreya, J. B. Pollack, & M. S. Matthews (Tucson: Univ. Arizona Press), 78
- Rivera, E. J., Lissauer, J. J., Butler, R. P., et al. 2005, *ApJ*, 634, 625
- Roberge, A., Feldman, P. D., Weinberger, A. J., Delcuil, M., & Bouret, J.-C. 2006, *Nature*, 441, 724
- Sekine, Y., Sugita, S., Shido, T., Yamamoto, T., Iwasawa, Y., Kadono, T., & Matsui, T. 2005, *Icarus*, 178, 154
- Selsis, F., et al. 2007, *Icarus*, 191, 453
- Shakura, N. I., & Sunyaev, R. A. 1973, *A&A*, 24, 337
- Sohl, F., Spohn, T., Breuer, D., & Nagel, K. 2002, *Icarus*, 157, 104
- Sotin, C., Grasset, O., & Mocquet, A. 2007, *Icarus*, 191, 337
- Spohn, T., & Schubert, G. 2003, *Icarus*, 161, 456
- Talbi, D., & Herbst, E. 2002, *A&A*, 386, 1139
- Valencia, D., Sasselov, D., & O'Connell, R. J. 2007, *ApJ*, 656, 545
- Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R. 1999, *A&A*, 342, 542
- Watt, G. D. 1985, *MNRAS*, 212, 93
- Udry, S., et al. 2007, *A&A*, 469, L43

## H.2 Origine des volatils dans la ceinture principale

L'article qui suit a été publié par Mousis et al. (2008) dans la "Royal Astronomy society". Il propose un scénario de formation de la ceinture principale à l'intérieur de laquelle les astéroïdes incorporent les grains glacés formés dans la région externe de la nébuleuse solaire. Une fraction significative pourrait avoir migré à la position actuelle de la ceinture d'astéroïdes sans éprouver les conditions de température et de pression suffisantes pour sublimer les glaces qu'ils contiennent. L'influence de l'incorporation de la glace dans les astéroïdes sur leurs porosités et leur densité est alors étudiée.

## Origin of volatiles in the main belt

O. Mousis,<sup>1\*</sup> Y. Alibert,<sup>1,2</sup> D. Hestroffer,<sup>3</sup> U. Marboeuf,<sup>1</sup> C. Dumas,<sup>4</sup> B. Carry,<sup>4</sup>  
J. Horner<sup>5</sup> and F. Selsis<sup>6,7</sup>

<sup>1</sup>Institut UTINAM, CNRS-UMR 6213, Observatoire de Besançon, BP 1615, 25010 Besançon Cedex, France

<sup>2</sup>Physikalisches Institut, University of Bern, Sidlerstrasse 5, CH-3012 Bern, Switzerland

<sup>3</sup>IMCCE, CNRS-UMR 8028, Observatoire de Paris, 77 Av. Denfert Rochereau, 75014 Paris, France

<sup>4</sup>ESO, Alonso de Cordova 3107, Vitacura, Casilla 19001, Santiago 19 Chile

<sup>5</sup>Astronomy Group, Open University, Walton Hall, Milton Keynes MK7 6AA

<sup>6</sup>C.R.A.L., Ecole normale supérieure, 46 allée d'Italie, 69007 Lyon, France

<sup>7</sup>Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, CNRS, Université Bordeaux 1, BP 89, F-33270 Floirac, France

Accepted 2007 October 24. Received 2007 October 4; in original form 2007 May 29

### ABSTRACT

We propose a scenario for the formation of the main belt in which asteroids incorporated icy particles formed in the outer solar nebula. We calculate the composition of icy planetesimals formed beyond a heliocentric distance of 5 au in the nebula by assuming that the abundances of all elements, in particular that of oxygen, are solar. As a result, we show that ices formed in the outer solar nebula are composed of a mix of clathrate hydrates, hydrates formed above 50 K and pure condensates produced at lower temperatures. We then consider the inward migration of solids initially produced in the outer solar nebula and show that a significant fraction may have drifted to the current position of the main belt without encountering temperature and pressure conditions high enough to vaporize the ices they contain. We propose that, through the detection and identification of initially buried ices revealed by recent impacts on the surfaces of asteroids, it could be possible to infer the thermodynamic conditions that were present within the solar nebula during the accretion of these bodies, and during the inward migration of icy planetesimals. We also investigate the potential influence that the incorporation of ices in asteroids may have on their porosities and densities. In particular, we show how the presence of ices reduces the value of the bulk density of a given body, and consequently modifies its macroporosity from that which would be expected from a given taxonomic type.

**Key words:** minor planets, asteroids – Solar system: formation.

### 1 INTRODUCTION

In recent years, some objects within the main belt of asteroids have been found to display cometary characteristics (Hsieh & Jewitt 2006). Objects such as 133P/Elst-Pizarro, P/2005 U1 and 118401 (1999 RE<sub>70</sub>) occupy orbits that are entirely decoupled from Jupiter within the main belt, and are probably bodies that have undergone a recent collision, revealing previously buried volatile material and leading to the observed dusty outgassing. In addition, present-day surface water ice and possible water sublimation have been reported on Ceres (Lebofsky et al. 1981; A' Hearn & Feldman 1992; Vernazza et al. 2005). This is consistent with recent *Hubble Space Telescope* (*HST*) observations which suggest that Ceres' shape is the result of the dwarf planet consisting of a rocky core surrounded by an ice-rich mantle (Thomas et al. 2005) – an idea in agreement with several thermal evolution scenarios (McCord & Sotin 2005) that suggest

that the ice content of the asteroid is between 17 and 27 per cent, by mass. These observations are supported by the evidence of hydrated minerals in meteorites which provide samples of rock from asteroids in the main belt. Most of these minerals formed as a result of water ice accreting with the chondritic meteorite parent bodies, melting and driving aqueous alteration reactions (Clayton & Mayeda 1996; Jewitt et al. 2007).

It seems likely, then, that some objects in the asteroid belt have incorporated significant amounts of water ice (and possibly other volatiles) during their formation in the early stages of the Solar system. These bodies would have incorporated icy particles<sup>1</sup> coming from the outer nebula that survived their inward drift due to gas drag through the disc (Mousis & Alibert 2005, hereafter MA05). The volatile fraction incorporated in this manner could vary depending on the inward flux of icy planetesimals from the external region and

\*E-mail: olivier.mousis@obs-besancon.fr

<sup>1</sup> By icy particles is meant planetesimals composed of a mix of ices and rocks.



the heliocentric location of the asteroid, together with the density of the protosolar nebula. Given that the current asteroid belt lies closer to the Sun than the ‘snowline’, postulated to lie at around 5 au in the solar nebula, these results are a little unexpected. In this context, understanding how volatiles were incorporated into the asteroids is therefore important, not only for the study of the asteroids themselves, but also for our understanding of the processes by which the Solar system came into being.

To this end, MA05 studied the possibility of determining the nature and composition of the ices which were incorporated into Ceres. They used a time-dependent model of the solar nebula and showed that icy particles of sizes between 0.1 and 10 m could drift from heliocentric distances greater than 5 au to the present location of Ceres without encountering temperatures or pressures high enough to vaporise the ices within. The authors then suggested that ices produced in the outer solar nebula were transported inwards to become incorporated in the solids which accreted to form Ceres.

The present work aims to improve upon the calculation detailed in MA05, along with expanding the results to involve the entire asteroid belt, rather than just its largest member. In particular, MA05 postulated that all volatiles, except CO<sub>2</sub>,<sup>2</sup> were trapped by water in the form of hydrates or clathrate hydrates in the outer solar nebula. This assumption was supported by the work of Hersant, Gautier & Huré (2001) who estimated that Jupiter was formed at temperatures higher than ~40–50 K. The accretion of ices in the form of hydrates and clathrate hydrates was thus required during the formation of the planet in order to explain the volatile enrichments observed in its atmosphere<sup>3</sup> (Gautier et al. 2001b,a). Indeed, since these ices are usually formed at temperatures higher than that reached by the nebula at the time of Jupiter’s completion, as defined by Hersant et al. (2001), they can be incorporated in the planetesimals accreted by the giant planet during its growth. However, the amount of water that would be required in the nebula to trap all these volatiles as hydrates and clathrate hydrates exceeds that derived from the solar oxygen abundance. Therefore, MA05 made the ad hoc hypothesis that oxygen was ‘oversolar’ in the gas phase in order to provide enough available water in the solar nebula.<sup>4</sup> Additionally, Hersant et al. (2001) only used an evolutionary solar nebula model to derive the disc’s temperature at the time when the mass of Jupiter’s feeding zone was equal to that of the gas in its current envelope. They thus neglected many important effects such as the influence of protoplanet formation on the structure of the disc (e.g. fig. 2 of Alibert, Mordasini & Benz 2004). However, recent giant planet core-accretion formation models that include migration, disc evolution, such as that proposed by Alibert et al. (2004), have shown that the disc’s temperature can be as low as ~10–20 K at the end of Jovian formation. This implies that Jupiter itself can accrete ices during its formation that were produced at temperatures lower than those required for clathration. As a result, no extra water is required in the

nebula to allow all the volatile species to be trapped in clathrate hydrates, and the oversolar oxygen abundance condition in the nebula can be relaxed.

In Section 2, we calculate the composition of ices produced in the outer solar nebula under the assumption that the abundances of all elements, in particular that of oxygen, are solar. In Section 3, we consider the inward migration of particles produced at various locations in the nebula, and at different times. This allows us to examine whether some planetesimals formed in the outer solar nebula may have drifted to the current position of the main belt without encountering temperature and pressure conditions high enough to vaporize the ices they contain. In Section 4, we examine the uncertainties in the determination of the physical properties of asteroids. We also investigate the potential influence that the incorporation of ices in these objects may have on their porosities and densities. Section 5 is devoted to summary and discussion.

## 2 COMPOSITION OF ICY PLANETESIMALS FORMED IN THE OUTER SOLAR NEBULA

### 2.1 Initial gas-phase conditions in the nebula

In this section, we aim to estimate the composition of icy particles produced in the region of giant planet formation, prior to the dissipation of the nebula, which then migrated into the forming main belt. The calculations have been carried out in a manner consistent with the formation of Jupiter with a realistic primordial volatile composition. This implies that the icy planetesimals that drifted inwards to the formation zone of the asteroids shared the same composition as those accreted by proto-Jupiter.

We then assume that the gas-phase abundances of elements are solar (e.g. Table 1) and that O, C and N exist only in the form of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub> and NH<sub>3</sub>. S is only present as H<sub>2</sub>S and other refractory sulphur components (Pasek et al. 2005). The gas-phase molecular ratios in the solar nebula are presumed to derive directly from that in interstellar ices (Mousis, Gautier & Bockelée-Morvan 2002) and, in some cases, from the consideration of catalytic effects that might affect these ratios in the nebula. Thus, although the CO:CH<sub>4</sub> ratio is typically around 10:1 in the interstellar medium (ISM) (Allamandola et al. 1999), this can be revised down in the solar nebula gas phase since some additional CH<sub>4</sub> may be introduced through conversions of both CO and CO<sub>2</sub>, as a result of the presence of catalytically active regions in the disc (Kress & Tielens 2001; Sekine et al. 2005). We, therefore, adopt CO:CH<sub>4</sub> = 1:1 in the vapour phase of the nebula. Moreover, CO<sub>2</sub> should initially be present in the gas phase of the nebula, with CO<sub>2</sub>:CO = 1:1–4:1, a range of values that covers the ISM measurements (Gibb et al. 2004). The value of the N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> ratio is quite uncertain, although current chemical models of the ISM predict that molecular nitrogen should be much

<sup>2</sup> CO<sub>2</sub> is the only major volatile species which does not form a clathrate hydrate in the solar nebula because it condenses as a pure ice prior to being trapped by water.

<sup>3</sup> The abundances of volatile species in Jupiter’s atmosphere have been measured using the mass spectrometer on board the *Galileo* probe. These measurements reveal that the giant planet’s atmosphere is enriched by a factor of ~3 in Ar, Kr, Xe, C, N and S compared to the solar abundances (Owen et al. 1999).

<sup>4</sup> The oxygen abundance required for to allow the trapping of all volatile species in the form of hydrates or clathrate hydrates is ~1.9 times the solar abundance, with CO<sub>2</sub>:CO:CH<sub>4</sub> = 1:1:1 and N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> = 1:1 (the nominal nebula gas phase ratios used in this work).

**Table 1.** Gas-phase abundances (molar mixing ratio with respect to H<sub>2</sub>) of major species in the solar nebula from Lodders (2003) with CO<sub>2</sub>:CO:CH<sub>4</sub> = 1:1:1 and N<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub> = 1:1.

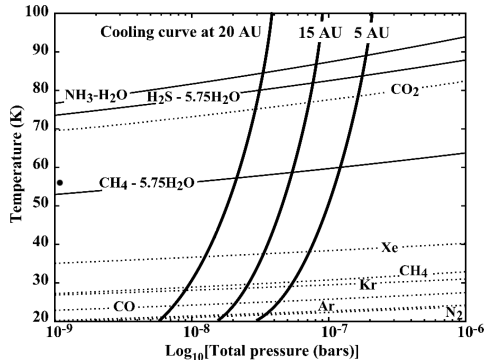
Species X	X/H <sub>2</sub>	Species X	X/H <sub>2</sub>
O	$1.16 \times 10^{-3}$	N <sub>2</sub>	$5.33 \times 10^{-5}$
C	$5.82 \times 10^{-4}$	NH <sub>3</sub>	$5.33 \times 10^{-5}$
N	$1.60 \times 10^{-4}$	S	$3.66 \times 10^{-5}$
H <sub>2</sub> O	$5.78 \times 10^{-4}$	Ar	$8.43 \times 10^{-6}$
CO <sub>2</sub>	$1.94 \times 10^{-4}$	Kr	$4.54 \times 10^{-9}$
CO	$1.94 \times 10^{-4}$	Xe	$4.44 \times 10^{-10}$
CH <sub>4</sub>	$1.94 \times 10^{-4}$		

more abundant than ammonia (Irvine & Knacke 1989). On the other hand, the  $N_2:NH_3$  ratio may have been much lower in the solar nebula since the conversion of  $N_2$  into  $NH_3$  can be accelerated by the catalytic effect of local Fe grains (Lewis & Prinn 1980; Fegley 2000). In all our following calculations, we consider  $N_2:NH_3 = 1:1$  as the nominal ratio for these two molecules in the nebula gas phase.

## 2.2 Formation sequence of the different ices in the outer nebula

As a result of the adoption of a solar gas-phase oxygen abundance, we show here that ices formed at distances greater than 5 au in the cooling solar nebula are a mix of clathrate hydrates and hydrates formed above 50 K, and pure condensates primarily produced at lower temperatures (but still greater than  $\sim 20$  K). We note that this hypothesis is supported by the recent work of Mousis & Marboeuf (2006), who showed that the abundances of volatiles observed in the envelopes of Jupiter and Saturn could be reproduced by using a solar abundance for all elements in the solar nebula, and that the calculated amount of heavy elements remains in agreement with internal structure models. The clathration and hydration processes result from the presence of available crystalline water ice at the time of volatile trapping in the solar nebula. This statement seems justified when one considers that current scenarios of the formation of the solar nebula suggest that most ices falling from the pre-solar cloud on to the disc were vaporized upon entering the early nebula. Following Chick & Cassen (1997),  $H_2O$  ice is initially vaporized at locations in the inner 30 au of the solar nebula. With time, the decrease of temperature and pressure led to conditions which allowed the water to recondense, forming microscopic crystalline ices (Kouchi et al. 1994; Mousis et al. 2000). Once formed, the different ices agglomerated and were incorporated into the growing and drifting particles.

The process by which volatiles are trapped, illustrated in Fig. 1, is calculated using the stability curves of hydrates, clathrate hydrates



**Figure 1.** Stability curves for hydrates, clathrate hydrates (solid lines) and pure condensates (dotted lines), together with evolutionary tracks for the nominal protoplanetary disc model at heliocentric distances of 5, 15 and 20 au. These evolutionary tracks correspond to the thermodynamic pathway followed by the disc during its cooling at the considered distances to the Sun (the evolution of the disc proceeds from high to low temperatures). The abundances of elements are solar, with  $CO_2:CO:CH_4 = 1:1:1$  and  $N_2:NH_3 = 1:1$  in the vapour phase. Species remain in the vapour phase as long as they stay in the domains located above the curves of stability. The label  $-5.75H_2O$  designates the clathrate hydrate of species X and  $NH_3-H_2O$  corresponds to ammonia hydrate.

**Table 2.** Parameters of the stability curves of the considered clathrate hydrates (reproduced from Hersant et al. 2004). Their equations are of the form  $\ln P = A/T + B$ , where  $P$  and  $T$  are the partial pressure (bars) and the temperature (K) of the considered species, respectively.  $A$  is in K and  $B$  is dimensionless.

Species	$A$	$B$
$CH_4$	-2161.81	11.1249
$CO$	-1685.54	10.9946
$N_2$	-1677.62	11.1919
$NH_3$	-2878.23	8.00205
$H_2S$	-3111.02	11.3801
Ar	-1481.78	9.95523
Kr	-1987.5	9.99046
Xe	-2899.18	11.0354

and pure condensates, and the tracks detailing the evolution of temperature and pressure at heliocentric distances of 5, 15 and 20 au within the solar nebula. These evolutionary tracks are derived from the  $\alpha$ -turbulent accretion disc model described in next section. The stability curves of hydrates and clathrate hydrates derive from Lunine & Stevenson (1985) compilation of laboratory data, from which data is available at relatively low temperature and pressure. Their equations, given by Hersant, Gautier & Lunine (2004), are of the form  $\ln P = A/T + B$ , where  $P$  and  $T$  are the partial pressure (bars) and the temperature (K) of the considered species, respectively. Table 2 shows the values of constants  $A$  and  $B$  determined by Hersant et al. (2004) from their fits to laboratory measurements. On the other hand, the stability curves of pure condensates used in our calculations derive from the compilation of laboratory data given in the CRC Handbook of Chemistry and Physics (Lide 2002). Their equations are of the form  $\log P = A/T + B$ , where  $P$  and  $T$  have the same units as mentioned above. Table 3 also gives the constants  $A$  and  $B$  as determined by our own fits to laboratory measurements. The cooling curve intercepts the stability curves of the different ices at some given temperature, pressure and surface density conditions (see Table 4). For each ice considered, the domain of stability is the region located below its corresponding stability curve. The clathration process stops when no more crystalline water ice is available to trap the volatile species. For example, if one assumes  $CO_2:CO:CH_4 = 1:1:1$  and  $N_2:NH_3 = 1:1$  in the gas phase, then the  $NH_3$  and  $H_2S$  are entirely trapped by the water, as hydrates of  $NH_3$  and clathrate hydrates of  $H_2S$ , while only approximately half of the  $CH_4$  is trapped

**Table 3.** Parameters of the stability curves of the considered pure condensates. Their equations are of the form  $\log P = A/T + B$ , where  $P$  and  $T$  are the partial pressure (bars) and the temperature (K) of the considered species, respectively.  $A$  is in K and  $B$  is dimensionless.

Species	$A$	$B$
$CH_4$	-475.61	4.2831
$CO$	-411.24	5.2426
$CO_2$	-1365.9	7.0248
$N_2$	-360.07	4.7459
$NH_3$	-1565.0	6.7883
$H_2S$	-1153.70	5.5007
Ar	-369.90	4.1862
Kr	-603.46	5.1060
Xe	-819.28	4.9881

**Table 4.** Temperature  $T$  (K), total gas pressure  $P$  (bars) and surface density  $\Sigma$  ( $\text{g cm}^{-2}$ ) conditions at which different ices form in the solar nebula at heliocentric distance of 5 au. The gas-phase conditions considered here are  $\text{CO}_2:\text{CO}:\text{CH}_4 = 1:1:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$ .

Ices	$T$ (K)	$P$ (bar)	$\Sigma$ ( $\text{g cm}^{-2}$ )
$\text{H}_2\text{O}$	157.5	$3.4 \times 10^{-7}$	677.4
$\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$	89.1	$1.9 \times 10^{-7}$	498.0
$\text{H}_2\text{S-5.75H}_2\text{O}$	84.0	$1.8 \times 10^{-7}$	482.6
$\text{CO}_2$	78.0	$1.6 \times 10^{-7}$	463.8
$\text{CH}_4\text{-5.75H}_2\text{O}$	60.9	$1.3 \times 10^{-7}$	404.3
Xe	38.2	$7.6 \times 10^{-8}$	301.1
$\text{CH}_4$	31.3	$6.0 \times 10^{-8}$	259.1
Kr	29.2	$5.4 \times 10^{-8}$	244.4
CO	25.3	$4.5 \times 10^{-8}$	213.9
Ar	22.2	$3.6 \times 10^{-8}$	185.6
$\text{N}_2$	21.8	$3.5 \times 10^{-8}$	181.7

as a clathrate hydrate in the solar nebula. The remaining  $\text{CH}_4$ , as well as Xe, Kr, CO, Ar and  $\text{N}_2$ , whose clathration processes normally occur at higher temperatures, remain in the vapour phase until the solar nebula cools enough to allow the formation of pure condensates (roughly between 20 and 30 K in the gas-phase conditions assumed for the solar nebula; see Fig. 1). Note that, during the cooling of the solar nebula,  $\text{CO}_2$  is the only species that crystallizes as a pure condensate prior to being trapped by water to form a clathrate hydrate. Hence, we assume here that solid  $\text{CO}_2$  is the only existing condensed form of  $\text{CO}_2$  in these environments.

### 2.3 Composition of icy planetesimals

Using the trapping/formation conditions of the different ices calculated at a given heliocentric distance in the outer nebula (e.g. Table 4), and knowing their gas-phase abundances, one can estimate their mass ratios with respect to  $\text{H}_2\text{O}$  in the accreting planetesimals. Indeed, the volatile,  $i$ , to water mass ratio in these planetesimals is determined by the relation given by Mousis & Gautier (2004):

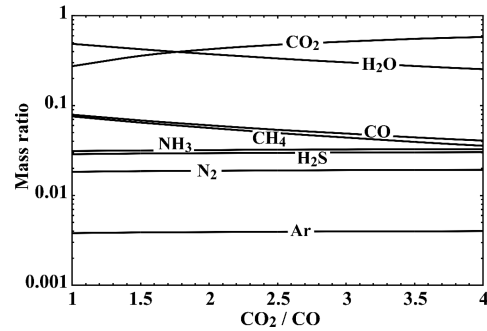
$$m_i = \frac{X_i}{X_{\text{H}_2\text{O}}} \frac{\Sigma(R; T_i, P_i)}{\Sigma(R; T_{\text{H}_2\text{O}}, P_{\text{H}_2\text{O}})}, \quad (1)$$

where  $X_i$  and  $X_{\text{H}_2\text{O}}$  are the mass mixing ratios of the volatile  $i$  and  $\text{H}_2\text{O}$  with respect to  $\text{H}_2$  in the solar nebula, respectively.  $\Sigma(R; T_i, P_i)$  and  $\Sigma(R; T_{\text{H}_2\text{O}}, P_{\text{H}_2\text{O}})$  are the surface density of the nebula at a distance  $R$  from the Sun at the epoch of hydration or clathration of the species  $i$ , and at the epoch of condensation of water, respectively. From  $m_i$ , it is possible to determine the mass fraction of species  $i$  with respect to all the other volatile species taking part to the formation of an icy solid:

$$M_i = \frac{m_i}{\sum_{j=1,n} m_j}, \quad (2)$$

$$\text{with } \sum_{i=1,n} M_i = 1.$$

It is important to mention that, after having performed calculations using a wide range of values from  $10^{-3}$  to  $10^{-1}$  for the viscosity parameter  $\alpha$  of our turbulent model, we found that the volatile trapping conditions (temperature and pressure) remain almost constant at a given heliocentric distance in the solar nebula, whatever the adopted value of this parameter. In addition, Alibert, Mousis & Benz



**Figure 2.** Plot showing the composition of the ices (wt per cent) incorporated in planetesimals produced in the solar nebula as a function of the adopted  $\text{CO}_2:\text{CO}$  ratio in the initial vapour phase. The composition is expressed as a mass ratio (mass of ice  $i$  to the global mass of ices). The abundances of the considered elements are solar with  $\text{CO}:\text{CH}_4 = 1:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  in the vapour phase. Note that the mass fractions of Kr and Xe are too low to be represented given the scale adopted in the figure.

(2005a) demonstrated that the composition of icy planetesimals remains similar whatever their formation distance within the same disc, as long as a homogeneous gas phase is postulated within the nebula. These statements imply that, whatever the input parameters adopted when modelling the disc, and regardless of the formation location considered for icy planetesimals at distances beyond 5 au, their composition (in wt per cent) remains almost constant, provided that the gas-phase abundances are homogeneous in the nebula.

Fig. 2 shows the variation of the composition of icy planetesimals formed in the outer solar nebula as a function of the  $\text{CO}_2:\text{CO}$  ratio (shown for values between 1:1 and 4:1), with  $\text{CO}:\text{CH}_4 = 1:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  in the gas phase. The composition of ices given in this figure is then valid for solids formed at any distance within the outer solar nebula, provided that the gas phase is homogeneous and the disc is initially warm enough at that location to vaporize the ices falling in from the ISM. It can be seen that water remains the most abundant ice in mass, provided that the  $\text{CO}_2:\text{CO}$  gas-phase ratio in the nebula is between 1 and  $\sim 1.7$ . Interestingly enough, whatever the assumed  $\text{CO}_2:\text{CO}$  ratio,  $\text{CO}_2$  remains the main carbon species trapped within planetesimals. We also note that the relative amounts of  $\text{H}_2\text{O}$  and of other carbon species decrease as the  $\text{CO}_2:\text{CO}$  ratio increases. In contrast, the mass fractions of  $\text{NH}_3$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  and of the noble gases are only weakly influenced by the variation of the  $\text{CO}_2:\text{CO}$  gas-phase ratio. Table 5 gives the mass ratios of the ices for the two extreme cases  $\text{CO}_2:\text{CO} = 1:1$  and 4:1.

### 3 DELIVERY OF ICY PARTICLES TO THE MAIN BELT

Particles in protoplanetary discs undergo orbital decay due to the effects of gas drag (Weidenschilling 1977). The efficiency of this process is particularly dependent on the gas density inside the disc, and on the size and density of the particles. Cyr, Sears & Lunine (1998) showed that icy particles produced in the outer Solar system may have been incorporated in bodies formed in the inner regions. Indeed, taking into account gas drag, sedimentation and sublimation, these authors calculated that particles originating from  $\sim 5$  au may migrate to heliocentric distances of the order of 3 au due to gas drag, before sublimating as a consequence of the higher temperature and pressure domains encountered in the inner regions. However, it is

**Table 5.** Ratio of the mass of ice  $i$  to the global mass of ices (wt per cent) in planetesimals formed in the outer solar nebula, calculated for  $\text{CO}_2:\text{CO} = 1:1$  and  $4:1$  in the vapour phase. Both ratios are calculated with  $\text{CO}:\text{CH}_4 = 1:1$  and  $\text{N}_2:\text{NH}_3 = 1:1$  in the gas phase of the nebula.

Species	$\text{CO}_2:\text{CO} = 1:1$	$\text{CO}_2:\text{CO} = 4:1$
$\text{H}_2\text{O}$	48.8	25.5
$\text{CO}_2$	27.5	58.4
$\text{CO}$	7.9	4.2
$\text{CH}_4$	7.6	3.7
$\text{NH}_3$		$\sim 3.3$
$\text{H}_2\text{S}$		$\sim 2.9$
$\text{N}_2$		$\sim 1.9$
$\text{Ar}$		$\ll 0.1$
$\text{Kr}$		$\ll 0.1$
$\text{Xe}$		$\ll 0.1$

important to note that Supulver & Lin (2000), Cuzzi et al. (2005) and Ciesla & Cuzzi (2006) were unable to reproduce these results. More recently, MA05 examined the effect of gas drag on the migration of icy particles using a time-dependent model of the solar nebula.<sup>5</sup> They demonstrated that, after the Solar system has experienced a few Myr of cooling, it is possible for icy particles from the outer Solar system to drift inward to the present location of Ceres ( $\sim 2.7$  au). In such an evolved system, because the snowline has already passed through the main belt, the volatiles contained in the icy particles can avoid sublimation during their migration.

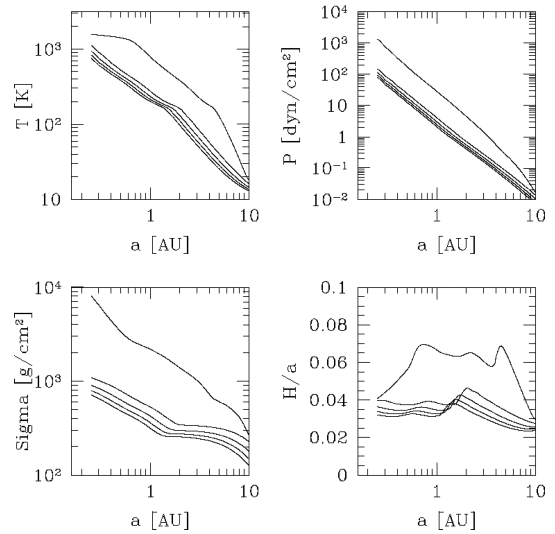
In this paper, we extend the calculations originally performed by MA05, in order to take into account the possibility of volatile capture directly in the form of pure ice, in case there is too little water to trap all volatiles as hydrates and clathrate hydrates. Moreover, for the sake of consistency, we use the disc model that allows the formation of Jupiter and Saturn, leading to planets with internal structures consistent with observations (see Alibert et al. 2005b).

The numerical procedure used to calculate the structure and evolution of the disc are entirely detailed in Alibert et al. (2005c), and in this work we only give the main points. More details can be found in the afore-mentioned paper. The surface density  $\Sigma$  in the disc is calculated by solving the diffusion equation:

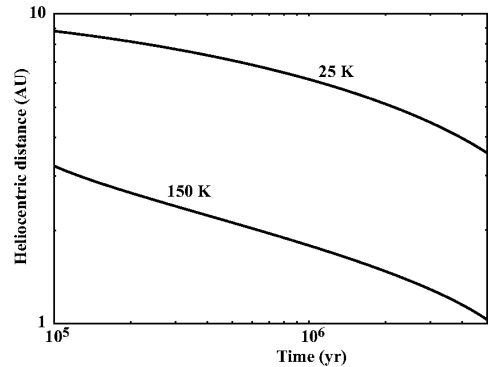
$$\frac{d\Sigma}{dt} = \frac{3}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^{1/2} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\nu} \Sigma r^{1/2}) \right] + \dot{\Sigma}_w(r), \quad (3)$$

where  $\bar{\nu}$  is the mean viscosity (integrated along the  $z$ -axis), and  $\dot{\Sigma}_w(r)$  is the photoevaporation term, taken as in Veras & Armitage (2004). The viscosity is calculated in the framework of the  $\alpha$  formalism (Shakura & Sunyaev 1973) after first solving for the vertical structure of the disc (see Alibert et al. 2005c). This calculation also gives us the evolution of the thermodynamic conditions inside the disc, as a function of time and heliocentric distance. These conditions are used, together with information on the composition of the nebula's gas, in order to derive the amount of volatile species trapped inside icy planetesimals. For the model we use here, the  $\alpha$  parameter is equal to  $2 \times 10^{-3}$ , and the total evaporation rate is of the order of  $10^{-8} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$ . At the beginning of the calculation, the

<sup>5</sup> The work of Cyr et al. (1998) is based on the static solar nebula models elaborated by Cassen (1994). In each of these models the position of the condensation front of water (the 'snowline') remains at a constant heliocentric distance. In contrast, evolutionary models cool with time and allow the snowline to migrate closer to the Sun.



**Figure 3.** Thermodynamic conditions in our disc model. Top left: mid-plane temperature profile; top right: mid-plane pressure profile; bottom left: surface density profile; bottom right: aspect ratio  $H/a$  profile ( $H$  is the semithickness and  $a$  the heliocentric distance). The epochs shown in the four panels are, from top to bottom,  $10^4$  yr, 0.5, 1, 1.5 and 2 Myr.



**Figure 4.** Locations of the 25 K- and 150 K-lines as a function of time for our model of the primitive nebula.

gas surface density is given by a power law,  $\Sigma \propto r^{-3/2}$ , normalized to have  $\Sigma = 600 \text{ g cm}^{-2}$  at the current day position of Jupiter. As stated above, this disc model was used in Alibert et al. (2005b) in order to calculate formation models of Jupiter and Saturn. The resulting thermodynamic conditions are plotted in Fig. 3 for early epochs during the evolution of the solar nebula.

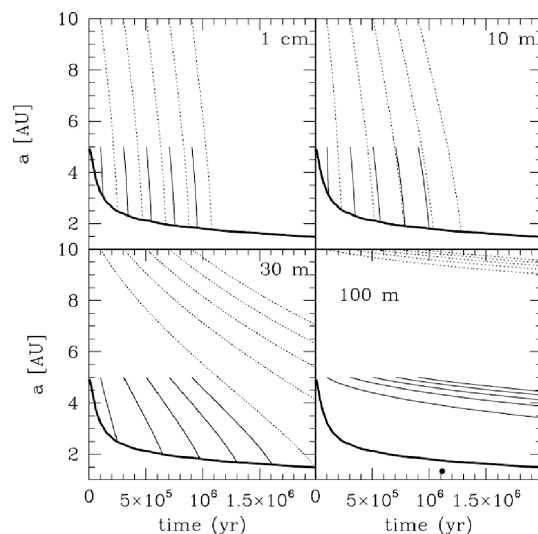
Fig. 4 shows the location of the snowline<sup>6</sup> and the 25 K-line<sup>7</sup> as a function of time. In our calculations, we assume that when a particle

<sup>6</sup> The sublimation temperature of water ice is taken as 150 K, and does not depend on pressure in our calculations.

<sup>7</sup> At temperatures lower than  $\sim 25$  K, all the main volatile species are presumed to be trapped as clathrate hydrates or in the form of pure condensates in the solar nebula (e.g. Fig. 1).

reaches the snowline (or the 25 K-line), it loses all its volatiles (or loses all the volatile species whose condensation temperatures are lower than or equal to 25 K). This is of course a simplification, and more accurate calculations should take into account the progressive heat diffusion, and the resulting sublimation, within icy particles entering the warmer regions of the early solar nebula. That such low temperatures are reached at small heliocentric distances in the solar nebula can be surprising, given that the equilibrium radiation temperatures are of  $\sim 160$  K at 3 au. However, our calculations are justified by the fact that, during the lifetime of the nebula, the Sun's radiation is significantly attenuated, even at distances of a few astronomical unit, due to Rayleigh scattering from molecular hydrogen and dust opacity, in particular if no inner gap is postulated in the disc (Mousis et al. 2007). In these conditions, light becomes extinguished close to the star as a result of the high gas density, while the outer regions play little role in the extinction. For temperatures below 1500 K, the dominant dimming effect in the nebula at wavelengths shorter than a few micrometre is Rayleigh scattering from molecular hydrogen (Mayer & Duschl 2005). This condition is fulfilled for the entire nebula after  $10^5$  yr, with the temperature beyond 0.6 au already falling below 1000 K at this early stage. Moreover, the mass absorption coefficient has been estimated to be  $\sigma_m = 5 \times 10^{-4}$  ( $\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$ ) in the solar nebula (Mousis et al. 2007). Integrating along the mid-plane radial axis of the model from 0.25 au (the inner edge of the disc), the optical depth at 3 au is initially about  $\tau = 18$ . It decreases over time to  $\tau = 5.3$  after  $\sim 5$  Myr of the disc's evolution. As a result, only  $\sim 0.5$  per cent of the star's radiation will be available at this distance within the disc at this epoch. We can therefore assume that the disc remains optically thick to solar radiation during at least the first 5 Myr of its evolution. Note also that it has been recently showed that discs with puffed up inner edge could shield part of their outer edge from star light, in agreement with the structure and the overall spectral energy distribution (SED) of protoplanetary discs around Herbig Ae/Be stars (Dullemond & Dominik 2004). This is the case for our solar nebula model which is self-shadowed at heliocentric distances higher than  $\sim 2$ –3 au (see semithickness over heliocentric distance profile in Fig. 3). Since the Rayleigh scattering, as well as the strong opacity of grains impede the light to go through the upper layers and illuminate the outer parts of the disc, the cooling of the nebula down to low temperatures should follow, even in the formation zone of asteroids.

In our calculations, we have considered particles of various sizes, ranging from 1 cm to 100 m. We assume that they are formed at different locations in the nebula, and at different epochs, in a similar way to MA05. Fig. 5 shows the trajectories of particles of size 1 cm, 10, 30 and 100 m. For particles ranging between a few centimetres and a few metres in size, gas drag is so strong that the trajectories would be represented as vertical lines. The trajectories of the particles are stopped when they cross the iceline. Fig. 5 shows that, due to gas drag, particles with the sizes considered here can drift to the present day location of the main belt. The innermost location of particles that have not suffered any sublimation of ice is therefore given by the location of the snowline at a given time. Similarly, the 25 K-line gives, as a function of time, the innermost location of particles that have not lost any of their volatiles. The situation is more complex for particles massive enough to significantly decouple from the gas, which therefore experience minimal, if any, orbital decay (see last panel n 100-m-size objects – in Fig. 5). Icy material can thus be transported by such medium size particles. If they cross the 25K-line, they would be expected to lose some fraction of their volatile content. However, particles formed even later, after a few Myr of the evolution of the solar nebula, but before it becomes op-



**Figure 5.** Trajectories of solid particles in the primitive nebula, for different starting location and starting epochs. The initial location of particles is either 5 or 10 au, and the drift starts during the first Myr of the solar nebula evolution. The trajectories are drawn until particles cross the iceline (heavy solid line), from which they are assumed to vaporize. The size of particles is given in each panel, and their density is equal to  $1 \text{ g cm}^{-3}$ .

tically thin, do not encounter temperatures higher than 25 K. They can therefore preserve all of their volatile species from vaporization until their capture by forming asteroids.

On the other hand, even if icy particles may have drifted to heliocentric distances low enough to take part to the formation of the whole main belt without losing a non-negligible fraction of their volatiles, the current distribution of ices that actually exists in asteroids has probably been significantly altered during and/or after their formation. Indeed, more heat was generated during the accretion of asteroids located at low heliocentric distances, as impacts and collision velocities were greater. As a result, vaporization has occurred, thus changing the composition of ices incorporated in inner belt asteroids. Moreover, the equilibrium radiation temperatures reached on the surfaces of main belt asteroids after the dissipation of the nebula can be too high for the long-term stability of water ice, particularly in the case of inner belt asteroids (Jewitt et al. 2007). Indeed, even if potential internal heating from the decay of  $\text{Al}^{26}$  and other isotopes is not considered, radiation equilibrium may have led to the vaporization of the ice content of the nearer asteroids (semimajor axes of  $\sim 2$  au), and melted the ice of mid-range asteroids situated at  $\sim 3$  au. However, it will probably not have affected the ice in the interiors of asteroids located further out. Inner and outer asteroids would therefore display no detectable hydration features either because the ice was vaporized and dissipated, or because the ice never melted and thus did not react with other minerals that would enable its detection (Cyr et al. 1998). On the other hand, mid-range asteroids could be expected to have undergone sufficient melting that chemical alteration of silicates would occur and be detectable (Cyr et al. 1998; Jewitt et al. 2007). Water ice could also be present temporarily on the surface of large hydrated bodies like Ceres, while migrating outwards from subsurface layers or

mantle of the asteroids, and before it sublimates into space (Fanale & Salvail 1989).

These considerations imply that the future detection and identification of the volatile phases in asteroids could give some constraints on the thermodynamic conditions that were present within the solar nebula during their accretion, as well as during the inwards migration of icy planetesimals. For example, assuming a cold accretion for asteroids located in the outer belt and that the only detected volatile species on the surfaces of some of their members are  $\text{CO}_2$ ;  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{NH}_3$  and  $\text{H}_2\text{O}$ , one may deduce that the temperature of the nebula on the migration pathway of icy planetesimals was between  $\sim 60$  and  $80$  K (e.g. Table 4). However, we note that alteration of the volatile phases in asteroids may occur after their formation, as a result of catalytic reactions in their interiors. Indeed, this mechanism has been proposed to explain the current composition of the plumes released by the Saturn's moon Enceladus (Matson et al. 2007) and could occur at early epochs following the accretion of asteroids due to internal heating caused by the decay of  $^{26}\text{Al}$ . Hence, the influence of this chemistry within the interior of asteroids may also play a role in the composition of the volatile phases that potentially exist in some members of the main belt.

#### 4 IMPLICATIONS FOR THE POROSITIES OF ASTEROIDS

This section is devoted to a discussion of the determination of the taxonomical types of the asteroids, and their densities. It appears that some of the results in this area, due to their low accuracy, provide poor constraints on the internal structures of the asteroids in question, and it is therefore difficult to infer their composition from these measurements. This is particularly true for the M-type asteroids which often show a puzzlingly high albedo, and a measured bulk density much lower than the densities of their supposed analogue metallic meteorites. This implies that our current knowledge of the physical properties of asteroids is not in contradiction with the idea that some of them may have preserved substantial amounts of the ices accreted during their formation. We then discuss the potential influence that the incorporation of ices in asteroids may have on their resulting densities and porosities.

##### 4.1 Uncertainties in the taxonomical class and densities of asteroids

The computation of porosity necessitates the knowledge of both the bulk density of an asteroid and the bulk density of its constituent material. With the exception of the few 'giant' objects or dwarf planets (Ceres, Pallas and Vesta), the bulk density of asteroids is generally smaller than that which would be expected from the densities of supposed meteorite analogues. The relationship between meteorite analogues and sample densities is, however, not straightforward and can, in some cases, be misleading. This is particularly important for the objects classified as M, P or E-type asteroids in the Tholen classification scheme.

Recently, a classification based on spectral morphology has been proposed by Bus, Vilas & Barucci (2002), where these asteroids are related to class X and subclasses therein. Asteroids within these classes generally display a linear trend in their reflectance curve, and often also have high albedo. In the case of radar observations, some M-type asteroids also showed particularly strong echo signatures, suggesting they are essentially made of metal, just like the M-type meteorites. However, this might not be always the case, and some X-type asteroids could also be closer to primordial D- or P-type objects, and hence have lower densities. In any case, their connec-

tion to meteorites is either unknown or unclear (Clark et al. 2003; Hardersen, Gaffey & Abell 2005) and has been under debate during the last decade. M-type asteroids were generally thought to be the remnants of the metallic cores of differentiated asteroids or planetesimals that would have lost their silicate mantle, possibly after a disruptive catastrophic collision. There is still debate about the composition and origin of M- or X-type asteroids (Busarev 1998; Rivkin et al. 2000). Following Lupishko & Belskaya (1990), a purely metallic composition is hard to believe, and E-type chondrites or stony-iron meteorites could be better analogues. Nowadays it appears likely that these classes comprise an assemblage of several possibly unrelated surface types with a featureless spectrum, not all of which are metallic. Indeed, some asteroids previously classified as M-type have shown spectra with the  $3\ \mu\text{m}$  signature associated with aqueous alteration which clearly makes this metallic-core hypothesis less viable. Similarly, 21 Lutetia has been classified as an M-type asteroid since its albedo is relatively high, but recent spectroscopic observations suggest it is actually a classical C-type body (Lazzarin et al. 2004).

On the other hand, the bulk density of an asteroid is derived from measurements of its mass and size. Mass determinations obtained as a result of the dynamical perturbations experienced during close encounters are less accurate, particularly when they are based on a single target perturbation (Hilton 2002). One can find large discrepancies when comparing the values obtained by this technique to the one derived from the analysis of a moonlet's orbit. For example, the masses of 22 Kalliope and of 87 Sylvia differ by a factor of 2 between Marchis et al. (2003) and Kochetova (2004), or between the results of Marchis et al. (2005) and Ivantsov (2007), where the latter values should theoretically be the less accurate ones. There are also large discrepancies between different results obtained from the same technique but involving different observations: depending on the authors, the mass of Psyche ranges from  $(0.68 \pm 0.14) \times 10^{-11}$  to  $(0.87 \pm 0.26) \times 10^{-11}$  or  $(1.49 \pm 0.31) \times 10^{-11} M_\odot$  (Lupishko 2006) or even up to  $(3.38 \pm 0.28) \times 10^{-11}$  or  $(4.0 \pm 1.4) \times 10^{-11} M_\odot$  (Kuzmanoski & Kovačević 2002; Ivantsov 2007), all values that are generally outside the usual statistical  $3\sigma$  margin. Finally, an error in the size of the body (mainly resulting from the determination of the object's albedo) will introduce a large error in the determination of the bulk density. We find that the revised density of Psyche from the polarimetric albedo of Lupishko (2006), together with the largest value for the mass of Kuzmanoski & Kovačević (2002), would then reach the unrealistic value of  $\rho = 13.2\ \text{g cm}^{-3}$ . None the less it is stressed that the matching between the IRAS-based diameters and the sizes measured from resolved asteroids in the main belt is generally good (Cellino et al. 2003; Marchis et al. 2006), in contradiction with the latter disagreement of Lupishko (2006) for this particular M-type asteroid.

It therefore seems that it is difficult to obtain meaningful statistics using the taxonomic M-type class because diversity is still present (the situation is barely improved when one considers Bus et al.'s X-class). It is therefore clear that an average value for the density of the M-type asteroids (e.g. Krasinsky et al. 2002) can be misleading. It would also be difficult to derive knowledge of the internal structure of these bodies since the bulk densities quoted in the literature can often be in error.

##### 4.2 Influence of the volatile content in asteroids on their bulk densities

Considering the delivery scenario detailed in Section 3, the asteroids would have been accreted from a mix of icy solids that formed

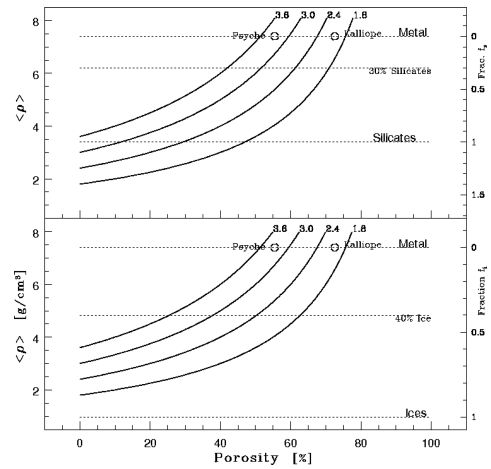
initially in the outer solar nebula, and that preserved their volatile content during their inward migration, with heavier and possibly differentiated material produced at smaller heliocentric distances. Such a scenario would not, however, be applicable to the gravitationally re-accumulated aggregates that result from a catastrophic collision (such as rubble-pile asteroids, and possibly binary objects), because their formative collisions would happen at a later stage of the evolution of the Solar system. Nevertheless, ices could still be present in rubble-pile asteroids even after exposure to solar irradiation.

The time-scale for re-accumulation scales as  $(G\rho)^{-1/2}$ , where  $G$  is the gravitational constant and  $\rho$  the density of the body, so that the dynamical time-scale for the re-accumulation of the aggregates is – depending on their actual velocity dispersion – of the order of several days (Michel et al. 2001; Durda et al. 2004; Michel, Benz & Richardson 2004; Nesvorný et al. 2006). This corresponds roughly to a few revolutions of the debris (the remaining material would be ejected). At times larger than several weeks, debris are no longer accumulated, but rather dispersed into a dynamical family. The time-scale for re-accumulation after a catastrophic disruption of an asteroid is thus of the order of weeks. On the other hand, the sublimation rate experienced by the debris depends on several conditions: temperature (heliocentric distance), and the presence and thickness of soil and regolith (Chevrier et al. 2007). The sublimation rate for a planar surface of pure ice is proportional to  $P_s(M/2\pi RT)^{-1/2}$  in a vacuum (e.g. Novikov & Vagner 1969; Patashnick & Rupprecht 1975; Farmer 1976), where  $P_s$  is the saturation vapour pressure at  $T$ ,  $M$  the molecular weight,  $R$  the universal gas constant and  $T$  the temperature.

Depending on the author, the coefficient factor used to calculate the sublimation rate from this proportionality incorporates different effects (such as the rugosity, presence of other gas, soil shell burying the ice, etc.) and can vary within two orders of magnitude. The evaporation rate is, however, of the order of  $1 \text{ m year}^{-1}$  at most (Hsieh & Jewitt 2006; Andreas 2007). At 160 K, which is a typical temperature for a moderate albedo body in the main belt, the recession rate of water ice can be as low as a few  $\text{mm yr}^{-1}$  (Hsieh, Jewitt & Fernández 2004). The sublimation lifetime for kilometre sized bodies is therefore of the order of a few thousand years.

The dynamical time for re-accumulation is therefore much shorter than that for the sublimation of all the ice in collisional debris. As a consequence, one can neglect for our purpose the evaporation of ices during the post-impact re-accumulation phase. We argue that water and other volatiles are not easily revealed, and that such hidden ices will have a significant influence on the internal structure and porosity of the asteroids. Such a scenario was suggested by Veverka et al. (1997) for the asteroid 253 Mathilde, but rejected by the authors in the absence of any alteration feature in the spectra. Similarly, Wilson et al. (1999) consider the case where all volatiles must have been completely lost, thus increasing the porosity, but again only for the altered bodies. In general, the presence of an unrevealed icy fraction will reduce the expected bulk density (the body's average mass-to-volume ratio), regardless of its mass distribution, as would do the presence of voids and cracks, or any other light material such as a regolith. Thus, a low measured density could be explained by voids or cracks in a rubble-pile structure, or a fractured body, or by the presence of light ices, or both, since these hypotheses are not mutually exclusive. In the following discussion, we address the bias introduced by the presence of ices in a simple computation of the macroporosity of an object.

The macroporosity of an asteroid is calculated by the determination of the fraction of empty space within the total volume, which translates to  $1 - \rho_b/\rho$  where  $\rho_b$  and  $\rho$  are the measured bulk density



**Figure 6.** The porosity of asteroids considering a possible volume fraction of ices ( $f_i$ ) or silicates ( $f_s$ ) of density  $\rho = 0.97$  or  $3.4$ , respectively. The ordinate is the average sample density  $\langle \rho \rangle = f_i(\rho_i - \rho) + \rho$ . The different curves correspond to various values of measured bulk densities ( $\rho_b$ ) of asteroids. Upper panel: porosity for M-type asteroids with both metal ( $\rho = 7.4$ ) and siliceous components. Bottom panel: porosity for M-type asteroids with both metal and ices.

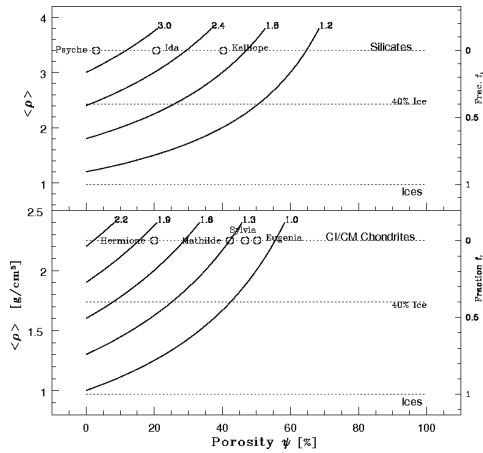
of the asteroid and the assumed sample bulk density, respectively. Following Britt et al. (2002), the (uncompressed) sample density is derived through knowledge of the asteroid's taxonomic type, using values measured in meteoritic analogues, and taking into account microporosities in the meteoritic grain. This macroporosity can now be computed by taking into account a possible volume fraction of ices  $f_i$  or silicates  $f_s = V_s/(V_s + V_i)$  (where  $V_s$  and  $V_i$  are the volume of silicates and ices, respectively), so that  $f_s + f_i = 1$ . This corresponds to an effective sample density  $\bar{\rho}_s = f_s(\rho_s - \rho_i) + \rho_i$ , and the bulk porosity is now given by

$$\psi = 1 - \frac{\rho_b}{f_i(\rho_i - \rho_s) + \rho_s}, \quad (4)$$

where one finds the limiting values of porosity for  $f_i = 0$  and  $1$ .

As can be seen in Fig. 6, the bulk porosity of an object with a significant icy component can remain relatively low, in the fragmented regime of Britt et al. (2002). The corresponding mass fraction is  $X_i = (\rho_i/\rho_s) f_i/(1 - f_i) \approx [3(1/f_i - 1)]^{-1}$  for typical values of ice and silicates. Thus the value of  $X_i = 17$ – $27$  per cent for the water content by mass determined by McCord & Sotin (2005) in the case of Ceres translates to  $f_i \approx 40$  per cent in volume. Note that the values shown in the figure are not strictly restricted to water ice. Indeed, the densities of the considered hydrates, clathrate hydrates or pure ices are very close to that of water ice ( $\sim 0.9 \text{ g cm}^{-3}$ ). Nevertheless, if a large fraction of ice must be present in a given body, it is most likely that they would consist of  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{CO}_2$ , as shown in Table 5.

Assuming a mass fraction of silicate or ices together with metallic components would lead to a reduction of the mean sample density  $\langle \rho \rangle$ , and hence the computed bulk porosity. As shown in Fig. 6, the porosity of M-type asteroids 22 Kalliope and 16 Psyche (both X type in the Bus et al. classification) with the adopted updated bulk densities of  $\rho = 2.03 \text{ g cm}^{-3}$  (Marchis et al. 2003) and  $\rho = 3.3 \text{ g cm}^{-3}$  (Lupishko 2006), respectively, could be reduced by considering a substantial volume fraction of either silicates (olivine, pyroxene) or

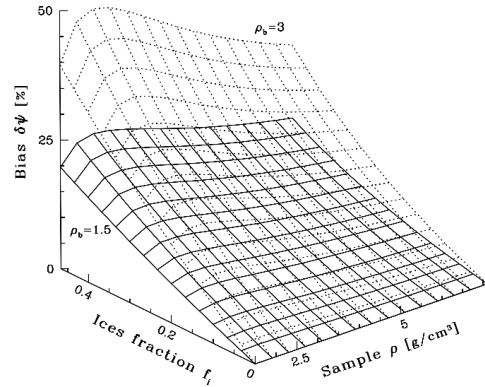


**Figure 7.** Same as Fig. 6 with the volume fraction of ices ( $f_i$ ) and silicates ( $\rho = 3.4$ ) or the lightest chondrites ( $\rho = 2.2$ ). Upper panel: porosity for S-type asteroids with some icy fraction (right-hand legend). Bottom panel: porosity of C-type asteroids with ices.

ices (water, ...). In the case of Kalliope, however, only a large mass fraction of silicates or ices could reduce the porosity to a realistic packing for a supposedly post-collisional gravitationally bound granular material (i.e. less than approximately 50 per cent). Psyche is a controversial object because its radar echo is high, which makes a metallic surface plausible. Keeping in mind that the error bars are so large that its density could be in the range (1.7–13.2), it is clear that the lowest values are feasible only if a significant fraction of lighter material is introduced. Moreover, in this latter case, there is no reason to expect a porosity larger than 20–30 per cent, i.e. larger than that assumed for fractured objects. Furthermore, considering that these bodies' main constituent is of a lower density (closer to those of silicates or stony-iron meteorites  $\sim 3.3$ –4.5), one sees that these could still contain a fraction of the order of 30 per cent ice.

Similarly, as shown in Fig. 7, one sees that for the low density objects like Eugenia, Mathilde and Sylvia and the C-type asteroids in general, introduction of a significant mass fraction of ices would change the computed porosity of these bodies. Note that a composition of 30 per cent water ice and 70 per cent CI/CM-type chondrites in the Cb-type asteroid 253 Mathilde would imply an average porosity of approximately 30 per cent for both constituents, a value which seems plausible; at least for the porosity of the ice. Pushing this exercise further, one can also derive either the density of the other constituents, by assuming a constant ice content and a constant porosity, or inversely, derive the mass- or volume fraction of ices at constant macroporosity and a given heavy element (chondrite, silicate, stony-iron, etc.) density. For instance, the C-type asteroids Mathilde, Eugenia and the X/P-type Sylvia could all have the same density within their heavy constituents, and a porosity of 40 per cent. This would then require them to contain approximately 5, 15 and 45 per cent water ice, respectively.

In conclusion, water and other volatiles could have remained buried inside the main belt asteroids since the formation of the Solar system without being easily detected by remote spectroscopic observations. The presence of such ices will reduce the value of the bulk density of the body that would be expected from its taxonomic type, and, moreover – given the small amounts of compaction inside



**Figure 8.** The bias introduced in the computation of the porosity ( $\psi$ ) by neglecting a possible presence of ices (equation 4). Its resulting value is given as a function of the actual volume fraction of ices ( $f_i$ ) and the sample density ( $\rho_b$ ) of the body. It is plotted here for two cases of  $\rho_b$  (solid and dotted grid).

asteroids – it will additionally decrease the asteroid's macroporosity (Durham, McKinnon & Stern 2005). There would be no a priori preference of this scenario for any asteroidal taxonomic type (hydrated or not), or collisional evolution (given short re-accumulation time-scales). On the other hand the size and mass of the asteroid may play an important role, which is not addressed here. Neglecting the possible presence of such ices can thus increase the error biases on the computation of the porosity, leading to it being systematically overestimated. For small amounts of ice ( $f_i \sim 0.2$ , see Fig. 8), the error in the porosity is  $\delta\psi \sim f_i \rho_b (\rho - \rho_i) / [\rho^2 (1 + f_i (\rho_i - \rho) / \rho)]$  which yields a bias in the calculated porosity of at least 5 to 15 per cent depending on the actual bulk density of the asteroid ( $\rho_b$ ), its supposed sample density ( $\rho$ ) and obviously on the actual volatile component ( $f_i$ ). In addition, the precision of asteroids bulk densities measurements is increasing with better knowledge of masses and current high-resolution angular measurements for the size (not to mention space probes). As a consequence, the importance of the error or bias discussed here should become more and more important.

## 5 SUMMARY AND DISCUSSION

In order to explain the presence of hydration and cometary features in the main belt, we have proposed that asteroids incorporated during their formation icy particles formed in the outer solar nebula. We have then calculated the composition of the ices trapped in these planetesimals formed beyond a heliocentric distance of 5 au in the nebula, in a manner consistent with the formation of Jupiter, by assuming that the gas-phase abundances of all elements, in particular that of oxygen, are solar. As a result, we have found that the ices being formed in the outer solar nebula are composed of a mix of clathrate hydrates, hydrates formed above 50 K, and pure condensates produced at temperatures between  $\sim 20$  and  $\sim 50$  K. We have noted that, whatever the input parameters adopted in the modelling of the disc, or the formation location considered for icy planetesimals at heliocentric distances beyond 5 au, their composition remains almost constant, provided that the gas-phase abundances are homogeneous in the nebula. We have argued in this work that gas drag is responsible for the inward drift of icy particles formed in the



outer nebula towards the forming main belt. To support this hypothesis, we have showed that, at some epochs of the disc's evolution, some particles produced in the outer nebula may drift to the current position of the main belt without encountering temperature and pressure conditions high enough to vaporize the ices they contain.

The current distribution of ices potentially existing in asteroids has probably been deeply altered after their formation. The effect of solar insolation may have vaporized the ice within nearer asteroids (semimajor axes of  $\sim 2$  au), melted the ice of mid-range asteroids situated at  $\sim 3$  au, but should not have affected the ice in asteroids located at greater heliocentric distances. Inner and outer asteroids would therefore display no detectable hydration features, either because the ice was vaporized and dissipated, or because the ice never melted and thus did not react with the surface minerals to a sufficient extent as to allow detection (Cyr et al. 1998). In this context, we have proposed that, from the detection and identification of initially buried ices revealed by recent impacts on the surfaces of asteroids, it could be possible to infer the thermodynamic conditions that occurred within the solar nebula during the accretion of these bodies, as well as during the inwards migration of the icy planetesimals which they incorporated. However, this statement requires that either no parent body processing or modification took place during and after the formation of asteroids. For example, we have noted that subsequent alteration of the volatile phases in asteroids may occur due to catalytic reactions in their interiors.

We have also investigated the potential influence that the incorporation of ices in asteroids may have on their porosities and densities. In particular, we have showed that the presence of ices can considerably reduce the value of the bulk density of the body, and consequently its macroporosity, that would be expected from a given taxonomic type.

That volatiles were delivered to areas within the ice line is clearly beyond doubt. In addition to the gas-drag mechanism described in this work, it is also likely that a significant amount of volatile material was dynamically driven inwards in the latter stages of planet formation. We still see the tail of this dynamical, chaotic volatile movement today – the comets we observe passing through the inner Solar system are the bearers of ices formed far beyond the snowline, and held in deep freeze since the early days. During the latter stages of planetary migration, the flux of such objects passing through the inner Solar system, and hence encountering the asteroids, was significantly higher. Of particular interest, when one considers veneers of volatile material near the surface of the asteroids, is the Late Heavy Bombardment. In the Nice model, (see e.g. Gomes et al. 2005), vast amounts of volatile-rich material is flung inwards from the outer Solar system approximately 700 Myr after its birth. This event, caused by the resonant destabilization of the outer Solar system, would have coincided with a simultaneous stirring of the asteroid belt, leading to an impact flux upon the Earth containing approximately even proportions of asteroidal and cometary material. It is clear, though, that the Earth would not be the only object to encounter volatiles injected in this way, and the possibility of a late veneer of ice arriving in the asteroid belt is surely something which must be acknowledged in future work. In addition to this aggressive and chaotic injection of material, there is also a gentler mechanism by which volatiles can be driven inwards as a result of planetary migration. As planets migrate, material can be trapped in the locations of mean-motion resonances (MMR), which sweep in front of the planet through its motion. Evidence of material being swept outwards in the resonances of Neptune is clear for all to see – the Plutino family of objects are locked in the 2:3 MMR with the planet, and have an inclination distribution which can tell us a great

deal about the distance over which the planet migrated, sweeping them along. Inward migration can have the same effect – the interior resonances of a planet can collect material as it moves inwards, and sweep it along – giving a mechanism by which volatile material can be eased inwards, with the migration of a giant such as Jupiter. Work such as Fogg & Nelson (2006) has shown that such resonant forcing can operate with a reasonable efficiency, even for significantly faster migration than expected in our Solar system, and so the effects of this behaviour should not be ignored in future work.

In spite of the growing pool of evidence pointing towards the existence of water ice in the main belt, its detection on asteroids is a challenging observational problem. Large bodies such as Ceres are suspected to have retained a large amount of water since their formation, perhaps even including an internal liquid ocean, throughout the age of the Solar system (McCord & Sotin 2005). This could particularly be the case if this internal water was originally mixed with some ammonia, in agreement with our composition calculations in Section 2.3, which would have the effect of lowering the melting point of the water (ammonium bearing minerals have been suggested by King et al. 1992 as an alternate explanation for the origin of the 2.07- $\mu\text{m}$  band seen in the spectrum of Ceres). Nevertheless, internal water can only be indirectly probed, either by measuring the hydrostatic shape of the object, as was done in the case of Ceres, or by inferring its density from its size and mass, when they are known or, more evidently, from outgassing activities. The case of Ceres is particularly interesting since, in spite of several possible pieces of evidence which support it being a highly hydrated body, the only report of water detection on the dwarf planet is the observation of OH escaping from its northern pole<sup>8</sup> is still not confirmed. Nevertheless, this detection could be explained in the context of the accumulation of ice during winter on the surface or within the subsurface layer, which would then dissipate during summer, when the surface temperature rises. Similar transient events have been suggested as possible mechanisms to trigger the geyser-like activity taking place near the south pole of Enceladus and reported by Cassini (Porco & Team 2006).

It is interesting to note that, considering the gravity and the day-side temperature of Ceres, any outgassed atmosphere would be rapidly lost. The mean thermal velocity  $v_0$  of  $\text{H}_2\text{O}$ , for instance, would be close to the escape velocity ( $v_\infty = 516 \text{ km s}^{-1}$ ). Assuming a subsolar temperature of 215 K (Dotto et al. 2000),  $v_0$  would vary between 450 and 350  $\text{km s}^{-1}$  from the subsolar point to a zenith angle of  $80^\circ$ . As a consequence, hydrodynamical escape would occur ( $v_{\text{esc}}^2/v_0^2 \leq 2$ ). The photolysis of  $\text{H}_2\text{O}$  by solar extreme ultraviolet (EUV) makes this atmospheric escape even more efficient by giving the photodissociation products OH and H some additional kinetic energy. Considering the short lifetime of  $\text{H}_2\text{O}$  at  $\sim 3$  au ( $< 9$  d), and the fact that the mean thermal velocity of H atoms exceeds  $v_\infty$ , a tenuous atmosphere of OH is expected if water is outgassed by the asteroid at a sufficient rate. Because of the transient nature of the atmosphere, the loss of water to space is limited by the flux of water from the interior to the surface. At low latitude, where ice is not stable, the continuous flux of water from the interior to space is too low to be detected. Only an accumulation of water ice at high latitude before perihelion, followed by an outgassing of  $\text{H}_2\text{O}$  associated with post-perihelion warming seems to result in an observable column

<sup>8</sup> An OH atmosphere was indeed observed around Ceres after perihelion by A'Hearn & Feldman (1992) by performing *IUE* (*International Ultraviolet Explorer*) long exposure spectra, with column densities of the order of  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

density of OH. These results were found to be consistent with an earlier work done by Fanale & Salvail (1989), who estimated the mean loss rate of H<sub>2</sub>O to be in the range 30–300 g s<sup>-1</sup>. Even if one assumes that the atmospheric loss observed by A'Hearn & Feldman (1992) occurs continuously at the same rate and at all latitudes (which is obviously wrong as this maximum loss requires high latitudes and post-perihelion conditions), the water loss remains below 4 kg s<sup>-1</sup>, which, integrated over 4.5 Gyr, corresponds to only 0.07 per cent of the mass of Ceres. If the loss rate of H<sub>2</sub>O in Ceres remained constant throughout its thermal history, the initial water reservoir is thus likely to be integrally preserved. Moreover, since the other volatile species are expected to be trapped as hydrates, clathrate hydrates and pure condensates in this reservoir, we can conclude that they have also been preserved from outgassing throughout the thermal history of the asteroid.

Ceres being the largest and, due to its size, probably the wettest main belt asteroid, it is an ideal target for carrying out observations aiming at constraining its water regime. The experiment searching for water being vaporized within the polar regions of Ceres should be repeated with the state-of-the-art instrumentation available today on large telescopes. Such detection would confirm unambiguously the presence of a large amount of water near the surface of Ceres. Direct observation of water ice, or of the effects of hydration, on the surface of Ceres can also be attempted for lower latitudes on the asteroid using a combination of high angular resolution and spectroscopic instruments permitting the full resolution of its surface to the 30–40 km level. Because of its low spectral resolution, imaging of the surface of Ceres, even when it is spatially resolved using *HST* or adaptive optics, is not sensitive to the presence of ice, while the detection of such is within the reach of low resolution spectroscopic observations (e.g. the detection of absorption features in the 1.0–3.5 μm region). A spatially resolved spectroscopic mapping of the surface of Ceres in the near-infrared (IR) can be done with today's ground-based telescopes and would permit the mapping of the strength of the 3-μm band, and allow the search for regions on the surface where interstitial water ice, or hydration features could be present, for instance at the location of cracks within the surface of Ceres, or the locations of deep impact craters. Indeed, recent *HST* (Thomas et al. 2005) and adaptive optics (Carry et al. 2007) imaging observations of Ceres revealed the presence of large impact craters across its surface which have likely disrupted the outer crust of the asteroid enough to directly expose the subsurface mantle of wetter material. Finally, a spectroscopic study of the surface of Ceres, in order to search for the spectral signature of water and maybe those of other volatiles, should not be limited to one wavelength region (although the near-IR range offers many diagnostic bands) but should, instead, encompass a wider range, from the near-UV to IR wavelengths, in order to improve the identification of the chemicals species responsible for these spectral features.

Finally, the NASA Discovery mission *Dawn*, which has been launched in 2007 September and whose arrival at Ceres is scheduled for 2015, will certainly bring new constraints on the presence of volatiles in the main belt. In particular, the *Dawn* mapping spectrometer (MS) covers the spectral range from the near-UV (0.25 μm) through the near-IR (5 μm) and has moderate to high spectral resolution and imaging capabilities (Russell et al. 2004). These characteristics make it an appropriate instrument for determining the asteroid's global surface composition. Near-IR mapping of the surface of Ceres at small spatial scales will be very sensitive to volatile concentrations and may reveal ice spots on fresh impact-crater ridges. Moreover, the gravitation investigation of Ceres will allow the determination of its gravity field up to the 12th harmonic

degree (Russell et al. 2004). Such a measurement will enable the shape and gravity models to characterize crustal and mantle density variations and, consequently, the amount of volatiles trapped therein.

## ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported in part by the Swiss National Science Foundation. JH gratefully acknowledges the financial support provided by PPARC. We thank Jean-Marc Petit and Jeffrey Cuzzi for helpful remarks. Many thanks to the anonymous referee whose useful comments invited us to strengthen our manuscript.

## REFERENCES

- A'Hearn M. F., Feldman P. D., 1992, *Icarus*, 98, 54  
 Alibert Y., Mordasini C., Benz W., 2004, *A&A*, 417, L25  
 Alibert Y., Mousis O., Benz W., 2005a, *ApJ*, 622, L145  
 Alibert Y., Mousis O., Mordasini C., Benz W., 2005b, *ApJ*, 626, L57  
 Alibert Y., Mordasini C., Benz W., Winisdoerffer C., 2005c, *A&A*, 434, 343  
 Allamandola L. J., Bernstein M. P., Sandford S. A., Walker R. L., 1999, *Space Sci. Rev.*, 90, 219  
 Andreas E. L., 2007, *Icarus*, 186, 24  
 Britt D. T., Yeomans D., Housen K., Consolmagno G., 2002, *Asteroids III*, 485  
 Bus S. J., Vilas F., Barucci M. A., 2002, *Asteroids III*, 169  
 Busarev V. V., 1998, *Icarus*, 131, 32  
 Carry B., Dumas C., Fulchignoni M., Merline W., Berthier J., Hestroffer D., Fusco T., Tamblyn P. 2007, *A&A*, submitted  
 Cassen P., 1994, *Icarus*, 112, 405  
 Cellino A., Diolaiti E., Ragazzoni R., Hestroffer D., Tanga P., Ghedina A., 2003, *Icarus*, 162, 278  
 Chevrier V., Sears D. W. G., Chittenden J. D., Roe L. A., Ulrich R., Bryson K., Billingsley L., Hanley J., 2007, *Geophys. Res. Lett.*, 34, 02223  
 Chick K. M., Cassen P., 1997, *ApJ*, 477, 398  
 Ciesla F. J., Cuzzi J. N., 2006, *Icarus*, 181, 178  
 Clark B. E., Rivkin A. S., Bus S. J., Sanders J., 2003, *Div. Planet. Sci. Meet.*, 35, 955  
 Clayton R. N., Mayeda T. K., 1996, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 60, 1999  
 Cuzzi J. N., Ciesla F. J., Petaev M. I., Krot A. N., Scott E. R. D., Weidenschilling S. J., 2005, *Chondrites and the Protoplanetary Disk*, 341, 732  
 Cyr K. E., Sears W. D., Lunine J. I., 1998, *Icarus*, 135, 537  
 Dotto E. et al., 2000, *A&A*, 358, 1133  
 Dullemond C. P., Dominik C., 2004, *A&A*, 417, 159  
 Durda D. D., Bottke W. F., Enke B. L., Merline W. J., Asphaug E., Richardson D. C., Leinhardt Z. M., 2004, *Icarus*, 167, 382  
 Durham W. B., McKinnon W. B., Stern L. A., 2005, *Geophys. Res. Lett.*, 32, 18202  
 Fanale F. P., Salvail J. R., 1989, *Icarus*, 82, 97  
 Farmer C. B., 1976, *Icarus*, 28, 279  
 Fegley B. J., 2000, *Space Sci. Rev.*, 92, 177  
 Fogg M. J., Nelson R. P., 2006, *Int. J. Astrobiol.*, 5, 199  
 Gautier D., Hersant F., Mousis O., Lunine J. I., 2001a, *ApJ*, 550, L227  
 Gautier D., Hersant F., Mousis O., Lunine J. I., 2001b, *ApJ*, 559, L183  
 Gibb E. L., Whittet D. C. B., Boogert A. C. A., Tielens A. G. G. M., 2004, *ApJS*, 151, 35  
 Gomes R., Levison H. F., Tsiganis K., Morbidelli A., 2005, *Nat*, 435, 466  
 Hardersen P. S., Gaffey M. J., Abell P. A., 2005, *Icarus*, 175, 141  
 Hersant F., Gautier D., Huré J.-M., 2001, *ApJ*, 554, 391  
 Hersant F., Gautier D., Lunine J. I., 2004, *Planet. Space Sci.*, 52, 623  
 Hilton J. L., 2002, *Asteroids III*, 103  
 Hsieh H. H., Jewitt D., 2006, *Sci*, 312, 561  
 Hsieh H. H., Jewitt D. C., Fernández Y. R., 2004, *AJ*, 127, 2997  
 Irvine W. M., Knacke R. F., 1989, *Origin Evol. Planet. Satell. Atmosphere*, 3

- Ivantsov A., 2007, *Planet. Space Sci.*, submitted
- Jewitt D., Chizmadia L., Grimm R., Prrialnik D., 2007, *Protostars and Planets V*, 863
- King T. V. V., Clark R. N., Calvin W. M., Sherman D. M., Brown R. H., 1992, *Sci.*, 255, 1551
- Kochetova O. M., 2004, *Solar Syst. Res.*, 38, 66
- Kouchi A., Yamamoto T., Kozasa T., Kuroda T., Greenberg J. M., 1994, *A&A*, 290, 1009
- Krasinsky G. A., Pitjeva E. V., Vasilyev M. V., Yagudina E. I., 2002, *Icarus*, 158, 98
- Kress M. E., Tielens A. G. G. M., 2001, *Meteorit. Planet. Sci.*, 36, 75
- Kuzmanoski M., Kovačević A., 2002, *A&A*, 395, L17
- Lazzarin M., Marchi S., Magrin S., Barbieri C., 2004, *A&A*, 425, L25
- Lebofsky L. A., Feierberg M. A., Tokunaga A. T., Larson H. P., Johnson J. R., 1981, *Icarus*, 48, 453
- Lewis J. S., Prinn R. G., 1980, *ApJ*, 238, 357
- Lide D. R., 2002, *CRC Handbook of Chemistry and Physics: a ready-reference book of chemical and physical data*. CRC Press
- Lodders K., 2003, *ApJ*, 591, 1220
- Lunine J. I., Stevenson D. J., 1985, *ApJS*, 58, 493
- Lupishko D. F., 2006, *Solar Syst. Res.*, 40, 214
- Lupishko D. F., Belskaya I. N., 1990, *Asteroids, Comets, Meteors III*, 129
- McCord T. B., Sotin C., 2005, *J. Geophys. Res.*, 110, 5009
- Marchis F., Descamps P., Hestroffer D., Berthier J., Vachier F., Boccaletti A., de Pater I., Gavel D., 2003, *Icarus*, 165, 112
- Marchis F., Descamps P., Hestroffer D., Berthier J., 2005, *Nat.*, 436, 822
- Marchis F., Kaasalainen M., Hom E. F. Y., Berthier J., Enriquez J., Hestroffer D., Le Mignant D., de Pater I., 2006, *Icarus*, 185, 39
- Matson D. L., Castillo J. C., Lunine J., Johnson T. V., 2007, *Icarus*, 187, 569
- Mayer M., Duschl W. J., 2005, *MNRAS*, 358, 614
- Michel P., Benz W., Tanga P., Richardson D. C., 2001, *Sci.*, 294, 1696
- Michel P., Benz W., Richardson D. C., 2004, *Planet. Space Sci.*, 52, 1109
- Mousis O., Alibert Y., 2005, *MNRAS*, 358, 188 (MA05)
- Mousis O., Gautier D., 2004, *Planet. Space Sci.*, 52, 361
- Mousis O., Marboeuf U., 2006, *Div. Planet. Sci. Meet.*, 38, 13.14
- Mousis O., Gautier D., Bockelée-Morvan D., Robert F., Dubrulle B., Drouart A., 2000, *Icarus*, 148, 513
- Mousis O., Gautier D., Bockelée-Morvan D., 2002, *Icarus*, 156, 162
- Mousis O., Petit J.-M., Wurm G., Krauss O., Alibert Y., Horner J., 2007, *A&A*, 466, L9
- Nesvorný D., Enke B. L., Bottke W. F., Durda D. D., Asphaug E., Richardson D. C., 2006, *Icarus*, 183, 296
- Novikov P. A., Vagner E. A., 1969, *J. Eng. Phys. Thermophys.*, 17, 1377
- Owen T., Mahaffy P., Niemann H. B., Atreya S., Donahue T., Bar-Nun A., de Pater I., 1999, *Nat.*, 402, 269
- Pasek M. A., Milsom J. A., Ciesla F. J., Lauretta D. S., Sharp C. M., Lunine J. I., 2005, *Icarus*, 175, 1
- Patashnick H., Rupprecht G., 1975, *ApJ*, 197, L79
- Porco C., Team C., 2006, *Am. Geophys. Union Fall Meet.*, 1
- Rivkin A. S., Howell E. S., Lebofsky L. A., Clark B. E., Britt D. T., 2000, *Icarus*, 145, 351
- Russell C. T. et al., 2004, *Planet. Space Sci.*, 52, 465
- Sekine Y., Sugita S., Shido T., Yamamoto T., Iwasawa Y., Kadono T., Matsui T., 2005, *Icarus*, 178, 154
- Shakura N. I., Sunyaev R. A., 1973, *A&A*, 24, 337
- Supulver K. D., Lin D. N. C., 2000, *Icarus*, 146, 525
- Thomas P. C., Parker J. W., McFadden L. A., Russell C. T., Stern S. A., Sykes M. V., Young E. F., 2005, *Nat.*, 437, 224
- Veras D., Armitage P. J., 2004, *MNRAS*, 347, 613
- Vernazza P., Mothé-Diniz T., Barucci M. A., Birlan M., Carvano J. M., Strazzulla G., Fulchignoni M., Migliorini A., 2005, *A&A*, 436, 1113
- Veverka J. et al., 1997, *Sci.*, 278, 2109
- Weidenschilling S. J., 1977, *MNRAS*, 180, 57
- Wilson L., Keil K., Browning L. B., Krot A. N., Bourcier W., 1999, *Meteorit. Planet. Sci.*, 34, 479

This paper has been typeset from a  $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$  file prepared by the author.

# Annexe I

## Publications et communications

### Contents

---

I.1	Publications dans des revues à comité de lecture . . . .	193
I.2	Proceedings de conférences . . . . .	194
I.3	Présentations lors de conférences . . . . .	195
I.4	Séminaires du laboratoire UTINAM . . . . .	196

---

### I.1 Publications dans des revues à comité de lecture

- Collision-induced thermodynamic evolution of planetesimals in the primordial Edgeworth-Kuiper Belt, **Marboeuf, U.**, Petit, J.-M., Mousis, O., *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society Letters*, en préparation
- Determination of the minimum masses of heavy elements in the envelopes of Jupiter and Saturn, Mousis, O., **Marboeuf, U.**, Lunine, J.I., *The Astrophysical Journal*, soumis
- Clathration of Volatiles in the Solar Nebula and Implications for the Origin of Titan's atmosphere, Mousis, O., Lunine, J.I., Thomas, C., Pasek, M., **Marboeuf, U.**, Alibert, Y., Ballenegger, V., Cordier, D., Ellinger, Y., Pazuat, F., Picaud, S., *The Astrophysical Journal*, sous presse
- Accurate cometary nuclei modelling using a finite volume method, **Marboeuf, U.**, Petit J.-M., Mousis, O., Orosei R., *Astronomy & Astrophysics*, soumis
- Composition of ices in low-mass extrasolar planets, **Marboeuf, U.**, Mousis,

O., Ehrenreich, D., Alibert, Y., Cassan, A., Wakelam, V., Beaulieu, J.-P., *The Astrophysical Journal*, *Astrophysical Journal* 681 (2008), 1624-1630.

- Origin of volatiles in the main belt, Mousis, O., Alibert, Y., Hestroffer, D., **Marboeuf, U.**, Dumas, C., Carry, B., Horner, J., Selsis, F., *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 383 (2008), 1269-1280
- Expectations for the Deep Impact collision from modelling of cometary nuclei, Mousis, O., **Marboeuf, U.**, Petit, J.-M., Klinger, J., *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 362 (2005), L40-L44

## I.2 Proceedings de conférences

- Composition of Ices in Low-Mass Extrasolar Planets, **Marboeuf, U.**, Mousis, O., Ehrenreich, D., Alibert, Y., Cassan, A., Wakelam, V., and Beaulieu, J.-P. *40th DPS Meeting, Ithaca, USA, October 10-15 2008*
- Collision-induced thermodynamic evolution of planetesimals in the primordial Edgeworth-Kuiper Belt, **Marboeuf, U.**, Petit, J.M., and Mousis, O. *SF2A Meeting Proceedings, Paris, France, June 30 - July 4 2008*
- A Partial Sublimation of the Planetesimals that Formed Titan. Mousis, O., Lunine, J. I., Thomas, C., Pasek, M., **Marboeuf, U.**, Alibert, Y., Ballenegger, V., Ellinger, Y., Pauzat, F., Picaud, S. 2008. *39th Lunar and Planetary Sc. Conf. Meeting, League City, USA, March 10-14 2008*
- Efficient Implementation of Finite Volume Method in Cometary Nuclei Modelling. **Marboeuf, U.**, Petit, J.-M., Mousis, O., Orosei, R. 2008. *39th Lunar and Planetary Sc. Conf. Meeting, League City, USA, March 10-14 2008*
- An improved numerical treatment of heat and mass transfers in cometary nuclei models. **Marboeuf, U.**, Petit, J.-M., Mousis, O. *SF2A Meeting Proceedings, Grenoble, France, July 2-6 2007*
- Effects of Impacts on the Crystallisation of Planetesimals in Formation in the Edgeworth-Kuiper Belt. **Marboeuf, U.**, Petit, J.-M., Mousis, O. *SF2A Meeting Proceedings, Paris, France, June 26-30 2006*
- Expectations for the deep impact collision from cometary nucleus modelling. **Marboeuf, U.**, Mousis, O., Petit, J.-M., Klinger, J., *SF2A Meeting Proceedings, Strasbourg, France, June 27-July 01 2005*

## I.3 Présentations lors de conférences

- La physico-chimie dans les noyaux cométaires. **Marboeuf, U.**, Mousis, O., Petit, J.-M. *Journées des écoles doctorales, France, Besançon, 5 Mai 2008*
- Les clathrates dans les noyaux cométaires. **Marboeuf, U.**, Mousis, O., Petit, J.-M. *Workshop sur les clathrates dans les environnements naturels, France, Rennes, 13-14 Mars 2008*
- A numerical treatment of heat and mass transfers in cometary nuclei models. **Marboeuf, U.**, Petit, J.-M., Mousis, O. *European Planetary Science Congress, Potsdam, Germany, August 20-24 2007*
- Origin of Titan and the clathration processes in the solar nebula. Mousis, O., Alibert, Y., Lunine, J.I., **Marboeuf, U.**, Thomas, C. *European Planetary Science Congress, Potsdam, Germany, August 20-24 2007*
- Constraints on the initial composition of low-mass extrasolar planets from the modeling of thermodynamic conditions in protoplanetary disks. Mousis, O., Ehrenreich, D., Alibert, Y., Cassan, A., **Marboeuf, U.**, and Beaulieu, J.-P. *European Planetary Science Congress, Potsdam, Germany, August 20-24 2007*
- Formation conditions of planetesimals in disks and implications for the composition of exoplanets. Mousis, O., Alibert, Y., Beaulieu, J.-P., Cassan, A., Ehrenreich, D., and **Marboeuf, U.** *Observing Planetary Systems, Santiago, Chile, March 5-8 2007*
- A partial efficiency of the clathration mechanism in the outer solar nebula. Mousis, O., and **Marboeuf, U.** *38th DPS Meeting, Pasadena, USA, October 8-13 2006*
- Volatile enrichments in Jupiter and Saturn : testing the theory of clathration. Mousis, O., and **Marboeuf, U.** *European Planetary Science Congress, Berlin, Germany, September 18-22 2006*
- Volatile enrichments in Jupiter and Saturn : testing the theory of clathration. Mousis, O., and **Marboeuf, U.** *Colloque PNP, Nancy, France, September 11-13 2006*
- Thermodynamic behavior of small bodies during the collisional evolution of the Edgeworth-Kuiper Belt. **Marboeuf, U.**, Petit, J.-M., Mousis, O. *International Workshop on Dynamical and Physical Properties of Trans Neptunian Objects, Catania, Italy, July 03-07 2006*
- Deep impact experiment and modelling of cometary nuclei. Petit, J.-M., **Mar-**

**boeuf, U.**, and Mousis, O. *37th DPS Meeting, Cambridge, UK, September 4-9 2005*

- Predictions for the Deep Impact collision from cometary nuclei modelling. Mousis, O., **Marboeuf, U.**, Petit, J.-M., and Klinger, J. *IAU Symposium No. 229 Asteroids Comets Meteors Meeting, Buzios, Brasil, August 7-12 2005*

## I.4 Séminaires du laboratoire UTINAM

- La modélisation des noyaux cométaires. **Marboeuf U.**, Petit, J.-M., Mousis, O. *"Institut UTINAM" UMR CNRS n° 6213, Université de Franche-Comté, France, 29 Novembre 2007*

# Annexe J

## Table des différents symboles utilisés

Dans cet appendice, nous présentons une table avec les différents symboles utilisés dans l'ensemble de la thèse.

Paramètres	Description
$A_l$	Albédo Bolométrique de Bond
$c_l$	Capacité thermique du composant solide l ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )
$C_s$	Constante Solaire ( $\text{W.m}^{-2}$ )
$C_{v,x}^g$	Capacité calorifique à volume constant de la phase gazeuse de l'espèce chimique x ( $\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )
$E_c$	Energie cinétique de l'impacteur (J)
$f$	Paramètre pour le schéma de résolution temporel des équations de conservation: 0 pour explicite, $\frac{1}{2}$ pour le semi-implicite et 1 pour totalement implicite
$f^c$	Fraction de l'énergie cinétique de l'impacteur délivrée sous forme de chaleur à la cible
$f_x^a$	Fraction volumique de la phase condensée de l'espèce chimique x en structure amorphe
$f_x^c$	Fraction volumique de la phase condensée de l'espèce chimique x en structure cristalline

Suite page suivante



J. TABLE DES DIFFÉRENTS SYMBOLES UTILISÉS

Paramètres	Description
Suite ...	
$f_x^s$	Fraction volumique de la phase condensée de l'espèce chimique $x$ en surface
$G_x$	Coefficient de diffusion du gaz $x$ (mol.m <sup>-1</sup> .Pa <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )
$\gamma$	Vitesse du son dans la glace d'eau (m.s <sup>-1</sup> )
$H_{cr}$	Chaleur Latente de cristallisation par mole (J.mol <sup>-1</sup> )
$H_x$	Chaleur Latente de sublimation de la glace $x$ par mole (J.mol <sup>-1</sup> )
$J_{dust}$	Rapport massique de la poussière sur la glace
$J_x$	Rapport molaire de l'espèce $x$ sur celle de H <sub>2</sub> O
$K_x^n$	Nombre de Knudsen pour le volatil $x$
$k_B$	Constante de Boltzmann (J.K <sup>-1</sup> )
$K$	Coefficient de conduction thermique de la matrice poreuse (W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
$K_s$	Coefficient de conduction thermique de la phase solide des composants de la matrice (grains de poussière et glaces) (W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
$k_l$	Coefficient de conduction thermique du composant $l$ (W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
$K_p$	Conductivité thermique Radiative à travers les pores (W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
$\lambda_p$	Libre parcours moyen des phonons dans la glace (m)
$\lambda_x$	Libre parcours moyen des molécules de gaz $x$ (m)
$M_x$	Masse molaire de l'espèce chimique $x$ (kg.mol <sup>-1</sup> )
$m_j$	Masse des grains de poussière de taille $j$ (kg)
$m_l$	Masse du composant $l$ (kg)
$m_p$	Masse de l'impacteur (kg)
$\mu_x$	Fraction de l'élément chimique $x$ piégé dans la glace amorphe en moles de glace d'H <sub>2</sub> O amorphe
$NC$	Nombre de couches total dans les noyau
$N_j$	Nombre de grains de poussière de taille $j$ par unité de volume (m <sup>-3</sup> )
$n_{H_2O}^a$	Nombre de moles de glace H <sub>2</sub> O amorphes par m <sup>3</sup> (mol.m <sup>-3</sup> )
Suite page suivante	

TABLE DES DIFFÉRENTS SYMBOLES UTILISÉS

Paramètres	Description
Suite ...	
$P_x$	Pression partielle du gaz $x$ (Pa)
$P_x^s(T)$	Pression de vapeur saturante de l'espèce $x$ (Pa)
$Q_d$	Densité d'énergie de destruction de la cible ( $\text{J.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ )
$Q^c$	Densité d'énergie insérée dans le noyau lors de l'impact ( $\text{J.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ )
$Q_x$	Taux de volatils $x$ qui sublime/condense ( $\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ )
$Q^g$	Terme d'apport ou de perte de matière ( $\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ )
$Q_x^{cr}$	Quantité de moles de gaz par $m^3$ et par $s$ relachée lors de la cristallisation de la glace amorphe ( $\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ )
$R$	Constante des gaz parfaits ( $\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )
$R_h$	Distance Heliocentrique (UA)
$R_p$	Rayon de l'impacteur (m)
$R_c$	Rayon de la cible (m)
$r$	Distance d'une couche au centre du noyau (m)
$r_p, r_p^i$	Rayon et rayon initial des pores (m)
$T$	Temperature (K)
$t$	Temps (s)
$V_{solide}$	Volume de la matrice solide sans porosité ( $\text{m}^3$ )
$V_{total}$	Volume de la matrice solide avec porosité ( $\text{m}^3$ )
$V_{vide}$	Volume de vide dans la matrice solide ( $\text{m}^3$ )
$v_p$	Vitesse relative d'impact entre la cible et l'impacteur ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$Y_{chs}$	Chaleur sensible ( $\text{W.m}^{-3}$ )
$Y_{cr}$	Puissance par unité de volume produite par la cristallisation de la glace d' $\text{H}_2\text{O}$ amorphe ( $\text{W.m}^{-3}$ )
$Y_g$	Puissance de changement de phase de la matière par unité de volume ( $\text{W.m}^{-3}$ )
$Z, Z'$	Erreur globale et locale (en temps) sur la conservation de masse de CO
Suite page suivante	

J. TABLE DES DIFFÉRENTS SYMBOLES UTILISÉS

Paramètres	Description
Suite ...	
$\alpha_x$	Fraction de surface du noyau recouverte par la phase condensée de l'espèce chimique $x$
$\Delta r$	Épaisseur d'une couche (m)
$\Delta t$	Intervalle de temps considéré (s)
$\epsilon$	Emissivité infrarouge de la surface
$\dot{\epsilon}_x$	Taux de sublimation d'une espèce chimique $x$ ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$\Psi, \Psi^i$	Porosité et porosité initiale de la matrice
$\rho$	Masse volumique globale de la matrice ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$\rho_l$	Masse volumique du composant solide $l$ ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$\rho_x^g$	Nombre de moles de gaz de l'espèce chimique $x$ par unité de volume ( $\text{mol.m}^{-3}$ )
$\rho_l^c$	Densité volumique compacte du composant $l$ ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$\rho_x^g$	Densité molaire de la phase gazeuse de l'espèce $x$ ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$\rho_p$	Masse volumique globale de la matrice de l'impacteur ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$\sigma$	Constante de Stefan-Boltzmann ( $\text{m}^2.\text{kg.s}^{-2}.\text{K}^{-1}$ )
$\tau_{cr}$	Temps de cristallisation de la glace d' $\text{H}_2\text{O}$ amorphe (s)

## Bibliographie

- [Alibert et al. (2005)] Alibert, Y., Mordasini, C., Benz, W., Winisdoerffer, C. 2005. Models of giant planet formation with migration and disc evolution. *Astronomy and Astrophysics* 434, 343-353.
- [Alibert et al. (2005b)] Alibert, Y., Mousis, O., Mordasini, C., Benz, W. 2005. New Jupiter and Saturn Formation Models Meet Observations. *Astrophysical Journal* 626, L57-L60.
- [Alibert & Mousis (2007)] Alibert, Y., Mousis, O. 2007. Formation of Titan in Saturn's subnebula: constraints from Huygens probe measurements. *Astronomy and Astrophysics* 465, 1051-1060.
- [Andersson & Suga (1994)] Andersson, O., Suga, H. 1994. Thermal conductivity of the Ih and XI phases of ice. *Physical Review B* 50, 6583-6588.
- [Arakawa (1999)] Arakawa, M. 1999. Collisional Disruption of Ice by High-Velocity Impact. *Icarus* 142, 34-45.
- [Arakawa et al. (2000)] Arakawa, M., Higa, M., Leliwa-Kopystyński, J., Maeno, N. 2000. Impact cratering of granular mixture targets made of H<sub>2</sub>O Ice-CO<sub>2</sub> Ice-pyrophyllite. *Planetary and Space Science* 48, 1437-1446.
- [Arakawa et al. (2002)] Arakawa, M., Leliwa-Kopystynski, J., Maeno, N. 2002. Impact Experiments on Porous Icy-Silicate Cylindrical Blocks and the Implication for Disruption and Accumulation of Small Icy Bodies. *Icarus* 158, 516-531.
- [Atreya et al. (1978)] Atreya, S. K., Donahue, T. M., Kuhn, W. R. 1978. Evolution of a nitrogen atmosphere on Titan. *Science* 201, 611-613.
- [Bar-Nun et al. (1985)] Bar-Nun, A., Herman, G., Laufer, D., Rappaport, M. L. 1985. Trapping and release of gases by water ice and implications for icy bodies. *Icarus* 63, 317-332.
- [Barucci et al. (2008)] Barucci, M. A., Brown, M. E., Emery, J. P., Merlin, F. 2008. Composition and Surface Properties of Transneptunian Objects and Centaurs. *The Solar System Beyond Neptune* 143-160.
- [Beaulieu et al. (2006)] Beaulieu, J.-P., and 72 colleagues 2006. Discovery of a cool planet of 5.5 Earth masses through gravitational microlensing. *Nature* 439, 437-440.
- [Bockelée-Morvan et al. (2004)] Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Mumma, M. J., Weaver, H. A. 2004. The composition of cometary volatiles. *Comets II* 391-423.
- [Brin & Mendis (1979)] Brin, G. D., Mendis, D. A. 1979. Dust release and mantle development in comets. *Astrophysical Journal* 229, 402-408.
- [Brown et al. (2007)] Brown, M. E., Barkume, K. M., Ragozzine, D., Schaller, E. L. 2007. A collisional family of icy objects in the Kuiper belt. *Nature* 446, 294-296.
- [Brownlee et al. (2006)] Brownlee, D., and 182 colleagues 2006. Comet 81P/Wild 2 Under a Microscope. *Science* 314, 1711.

- [Canup & Ward (2006)] Canup, R. M., Ward, W. R. 2006. A common mass scaling for satellite systems of gaseous planets. *Nature* 441, 834-839.
- [Capria et al. (2003)] Capria, M. T., Coradini, A., de Sanctis, M. C. 2003. Modeling of cometary nuclei: Planetary missions preparation. *Advances in Space Research* 31, 2543-2553.
- [Chick & Cassen (1997)] Chick, K. M., Cassen, P. 1997. Thermal Processing of Interstellar Dust Grains in the Primitive Solar Environment. *Astrophysical Journal* 477, 398.
- [Clayton & Giauque (1932)] Clayton, J. O., Giauque, W. F. 1932. The heat capacity and entropy of carbon monoxide: Heat of vaporization. Vapor pressures of solid and liquid. Free energy to 5000 K from spectroscopic data. *Journal of the American Chemical Society* 54, 2610-2626.
- [Coradini et al. (1977)] Coradini, A., Magni, G., Federico, C. 1977. Grains accretion processes in a proto-planetary nebula. II - Accretion time and mass limit. *Astrophysics and Space Science* 48, 79-87.
- [Coradini et al. (1983)] Coradini, A., Federico, C., Lanciano, P. 1983. Earth and Mars - Early thermal profiles. *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 31, 145-160.
- [Coradini et al. (1997)] Coradini, A., Capaccioni, F., Capria, M. T., de Sanctis, M. C., Espianasse, S., Orosei, R., Salomone, M., Federico, C. 1997. Transition Elements between Comets and Asteroids. *Icarus* 129, 317-336.
- [Coradini et al. (2008)] Coradini, A., Capria, M. T., de Sanctis, M. C., McKinnon, W. B. 2008. The Structure of Kuiper Belt Bodies: Link with Comets. *The Solar System Beyond Neptune* 243-256.
- [Cordier et al. (2008)] Cordier, D., Mousis, O., Lunine, J. I., Moudens, A. 2008. A Dual Origin for the Deuterium Enrichment in the Atmosphere of Titan. *Lunar and Planetary Institute Conference Abstracts* 39, 1691.
- [Crifo (1997)] Crifo, J. F. 1997. NOTE: The Correct Evaluation of the Sublimation Rate of Dusty Ices under Solar Illumination, and Its Implication on the Properties of P/Halley Nucleus. *Icarus* 130, 549-551.
- [Davis & Farinella (1996)] Davis, D. R., Farinella, P. 1996. Short Period Comets: Primordial Bodies or Collisional Fragments?. *Lunar and Planetary Institute Conference Abstracts* 27, 293.
- [Davis & Farinella (1997)] Davis, D. R., Farinella, P. 1997. Collisional Evolution of Edgeworth-Kuiper Belt Objects. *Icarus* 125, 50-60.
- [Delsemme & Miller (1971)] Delsemme, A. H., Miller, D. C. 1971. The continuum of Comet Burnham (1960 II): The differentiation of a short period comet. *Planetary and Space Science* 19, 1229-1257.
- [de Sanctis et al. (1999)] de Sanctis, M. C., Capaccioni, F., Capria, M. T., Coradini, A., Federico, C., Orosei, R., Salomone, M. 1999. Models of P/Wirtanen nucleus: active regions versus non-active regions. *Planetary and Space Science* 47, 855-872.

- [Duncan et al. (1995)] Duncan, M. J., Levison, H. F., Budd, S. M. 1995. The Dynamical Structure of the Kuiper Belt. *Astronomical Journal* 110, 3073.
- [Durda & Stern (2000)] Durda, D. D., Stern, S. A. 2000. Collision Rates in the Present-Day Kuiper Belt and Centaur Regions: Applications to Surface Activation and Modification on Comets, Kuiper Belt Objects, Centaurs, and Pluto-Charon. *Icarus* 145, 220-229.
- [Durham et al. (2005)] Durham, W. B., McKinnon, W. B., Stern, L. A. 2005. Cold compaction of water ice. *Geophysical Research Letters* 32, 18202.
- [Drury et al. (1984)] Drury, M.J., Allen, V.S., Jessop, A.M. 1984. *Tectonophysics* 103, 321.
- [Ehrenfreund & Schutte (2000)] Ehrenfreund, P., Schutte, W. A. 2000. ISO Observations of Interstellar Ices: Implications for the Pristinity of Comets. *Advances in Space Research* 25, 2177-2188.
- [Ehrenreich et al. (2006)] Ehrenreich, D., Lecavelier des Etangs, A., Beaulieu, J.-P., Grasset, O. 2006. On the Possible Properties of Small and Cold Extrasolar Planets: Is OGLE 2005-BLG-390Lb Entirely Frozen?. *Astrophysical Journal* 651, 535-543.
- [Ellsworth & Schubert (1983)] Ellsworth, K., Schubert, G. 1983. Saturn's icy satellites - Thermal and structural models. *Icarus* 54, 490-510.
- [Enzian et al. (1997)] Enzian, A., Cabot, H., Klinger, J. 1997. A 2 1/2 D thermodynamic model of cometary nuclei. I. Application to the activity of comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1.. *Astronomy and Astrophysics* 319, 995-1006.
- [Espinasse et al. (1991)] Espinasse, S., Klinger, J., Ritz, C., Schmitt, B. 1991. Modeling of the thermal behavior and of the chemical differentiation of cometary nuclei. *Icarus* 92, 350-365.
- [Espinasse et al. (1993)] Espinasse, S., Coradini, A., Capria, M. T., Capaccioni, F., Orosei, R., Salomone, M., Federico, C. 1993. Thermal evolution and differentiation of a short-period comet. *Planetary and Space Science* 41, 409-427.
- [Fanale & Salvail (1984)] Fanale, F. P., Salvail, J. R. 1984. An idealized short-period comet model - Surface insolation, H<sub>2</sub>O flux, dust flux, and mantle evolution. *Icarus* 60, 476-511.
- [Fanale & Salvail (1987)] Fanale, F. P., Salvail, J. R. 1987. The loss and depth of CO<sub>2</sub> ice in comet nuclei. *Icarus* 72, 535-554.
- [Farinella et al. (2000)] Farinella, P., Davis, D. R., Stern, S. A. 2000. Formation and Collisional Evolution of the Edgeworth-Kuiper Belt. *Protostars and Planets IV* 1255.
- [Fegley (2000)] Fegley, B. J. 2000. Kinetics of gas-Grain Reactions in the Solar Nebula. *Space Science Reviews* 92, 177-200.
- [Fernandez (1980)] Fernandez, J. A. 1980. On the existence of a comet belt beyond Neptune. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 192, 481-491.

- [Flynn (1996)] Flynn, G. J. 1996. Sources of 10 Micron Interplanetary Dust: the Contribution from the Kuiper Belt. IAU Colloq. 150: Physics, Chemistry, and Dynamics of Interplanetary Dust 104, 171.
- [Fornasier et al. (2004)] Fornasier, S., Dotto, E., Barucci, M. A., Barbieri, C. 2004. Water ice on the surface of the large TNO 2004 DW. *Astronomy and Astrophysics* 422, L43-L46.
- [Fortney & Hubbard (2003)] Fortney, J. J., Hubbard, W. B. 2003. Phase separation in giant planets: inhomogeneous evolution of Saturn. *Icarus* 164, 228-243.
- [Frerking et al. (1982)] Frerking, M. A., Langer, W. D., Wilson, R. W. 1982. The relationship between carbon monoxide abundance and visual extinction in interstellar clouds. *Astrophysical Journal* 262, 590-605.
- [Fulle et al. (2000)] Fulle, M., Lévassieur-Regourd, A. C., McBride, N., Hadamcik, E. 2000. In Situ Dust Measurements From within the Coma of 1P/Halley: First-Order Approximation with a Dust Dynamical Model. *Astronomical Journal* 119, 1968-1977.
- [Furnish & Remo (1997)] Furnish, M. D., Remo, J. L. 1997. Ice issues, porosity, and snow experiments for dynamic NEO and comet modeling.. *Near-Earth Objects* 556-582.
- [Ghormley (1968)] Ghormley, J. A. 1968. Enthalpy change and heat-capacity changes in the transformations from high-surface-area amorphous ice to stable hexagonal ice. *Journal of Chemical Physics* 48, 503-508.
- [Giauque & Stout (1936)] Giauque, W. F., Stout, J. W. 1936. The entropy of water and third law of thermodynamics. The heat capacity of ice from 15 to 273K. *Journal of the American Chemical Society* 58, 1144-1144.
- [Gibb et al. (2000)] Gibb, E. L., and 10 colleagues 2000. An Inventory of Interstellar Ices toward the Embedded Protostar W33A. *Astrophysical Journal* 536, 347-356.
- [Gibb et al. (2004)] Gibb, E. L., Whittet, D. C. B., Boogert, A. C. A., Tielens, A. G. G. M. 2004. Interstellar Ice: The Infrared Space Observatory Legacy. *Astrophysical Journal Supplement Series* 151, 35-73.
- [Giblin et al. (2004)] Giblin, I., Davis, D. R., Ryan, E. V. 2004. On the collisional disruption of porous icy targets simulating Kuiper belt objects. *Icarus* 171, 487-505.
- [Grevesse & Sauval (1998)] Grevesse, N., Sauval, A. J. 1998. Standard Solar Composition. *Space Science Reviews* 85, 161-174.
- [Groussin et al. (2007)] Groussin, O., A'Hearn, M. F., Li, J.-Y., Thomas, P. C., Sunshine, J. M., Lisse, C. M., Meech, K. J., Farnham, T. L., Feaga, L. M., Delamere, W. A. 2007. Surface temperature of the nucleus of Comet 9P/Tempel 1. *Icarus* 187, 16-25.
- [Guillot (2005)] Guillot, T. 2005. THE INTERIORS OF GIANT PLANETS: Models and Outstanding Questions. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences* 33, 493-530.

- [Harker et al. (2002)] Harker, D. E., Wooden, D. H., Woodward, C. E., Lisse, C. M. 2002. Grain Properties of Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp). *Astrophysical Journal* 580, 579-597.
- [Haruyama et al. (1993)] Haruyama, J., Yamamoto, T., Mizutani, H., Greenberg, J. M. 1993. Thermal history of comets during residence in the Oort cloud - Effect of radiogenic heating in combination with the very low thermal conductivity of amorphous ice. *Journal of Geophysical Research* 98, 15079.
- [Hörz et al. (2006)] Hörz, F., and 43 colleagues 2006. Impact Features on Stardust: Implications for Comet 81P/Wild 2 Dust. *Science* 314, 1716.
- [Housen & Holsapple (1999)] Housen, K. R., Holsapple, K. A. 1999. Scale Effects in Strength-Dominated Collisions of Rocky Asteroids. *Icarus* 142, 21-33.
- [Hudson & Donn (1991)] Hudson, R. L., Donn, B. 1991. An experimental study of the sublimation of water ice and the release of trapped gases. *Icarus* 94, 326-332.
- [Huebner et al. (2006)] Huebner, W. F., Benkhoff, J., Capria, M.-T., Coradini, A., de Sanctis, C., Orosei, R., Prialnik, D. 2006. Heat and Gas Diffusion in Comet Nuclei. *Heat and Gas Diffusion in Comet Nuclei*, by Walter F. Huebner, Johannes Benkhoff, Maria-Theresa Capria, Angioletta Coradini, Christina De Sanctis, Roberto Orosei, and Dina Prialnik. SR-004, June, 2006. ISBN 1608-280X. Published for The International Space Science Institute, Bern, Switzerland, by ESA Publications Division, Noordwijk, The Netherlands, 2006. .
- [Hughes (1991)] Hughes, D. W. 1991. Possible mechanisms for cometary outbursts. *IAU Colloq. 116: Comets in the post-Halley era* 167, 825-851.
- [Irvine & Knacke (1989)] Irvine, W. M., Knacke, R. F. 1989. The chemistry of interstellar gas and grains. *Origin and Evolution of Planetary and Satellite Atmospheres* 3-34.
- [Jacovi & Bar-Nun (2008)] Jacovi, R., Bar-Nun, A. 2008. Removal of Titan's noble gases by their trapping in its haze. *Icarus* 196, 302-304.
- [Jessberger et al. (1988)] Jessberger, E. K., Christoforidis, A., Kissel, J. 1988. Aspects of the major element composition of Halley's dust. *Nature* 332, 691-695.
- [Johnson & Lunine (2005)] Johnson, T. V., Lunine, J. I. 2005. Saturn's moon Phoebe as a captured body from the outer Solar System. *Nature* 435, 69-71.
- [Joswiak et al. (2007)] Joswiak, D. J., Brownlee, D. E., Pepin, R. O., Schlutter, D. J. 2007. Densities and Mineralogy of Cometary and Asteroidal Interplanetary Dust Particles Collected in the Stratosphere. *Dust in Planetary Systems* 643, 141-144.
- [Kelley et al. (2008)] Kelley, M. S., Reach, W. T., Lien, D. J. 2008. The dust trail of Comet 67P/Churyumov Gerasimenko. *Icarus* 193, 572-587.
- [Kimura et al. (2006)] Kimura, H., Kolokolova, L., Mann, I. 2006. Light scattering by cometary dust numerically simulated with aggregate particles consisting of identical spheres. *Astronomy and Astrophysics* 449, 1243-1254.



- [Klinger (1980)] Klinger, J. 1980. Influence of a phase transition of ice on the heat and mass balance of comets. *Science* 209, 271.
- [Kouchi et al. (1992)] Kouchi, A., Greenberg, J. M., Yamamoto, T., Mukai, T. 1992. Extremely low thermal conductivity of amorphous ice - Relevance to comet evolution. *Astrophysical Journal* 388, L73-L76.
- [Kouchi et al. (1994)] Kouchi, A., Yamamoto, T., Kozasa, T., Kuroda, T., Greenberg, J. M. 1994. Conditions for condensation and preservation of amorphous ice and crystallinity of astrophysical ices. *Astronomy and Astrophysics* 290, 1009-1018.
- [Kouchi & Sirono (2001)] Kouchi, A., Sirono, S.-i. 2001. Crystallization heat of impure amorphous H<sub>2</sub>O ice. *Geophysical Research Letters* 28, 827-830.
- [Kuchner (2003)] Kuchner, M. J. 2003. Volatile-rich Earth-Mass Planets in the Habitable Zone. *Astrophysical Journal* 596, L105-L108.
- [Kuchner & Seager (2005)] Kuchner, M. J., Seager, S. 2005. Extrasolar Carbon Planets. *ArXiv Astrophysics e-prints arXiv:astro-ph/0504214*.
- [Lange & Ahrens (1983)] Lange, M. A., Ahrens, T. J. 1983. The dynamic tensile strength of ice and ice silicate mixtures. *Journal of Geophysical Research* 88, 1197-1208.
- [Léger et al. (2004)] Léger, A., and 11 colleagues 2004. A new family of planets? "Ocean-Planets". *Icarus* 169, 499-504.
- [Leinhardt et al. (2008)] Leinhardt, Z. M., Stewart, S. T., Schultz, P. H. 2008. Physical Effects of Collisions in the Kuiper Belt. *The Solar System Beyond Neptune* 195-211.
- [Lewis & Prinn (1980)] Lewis, J. S., Prinn, R. G. 1980. Kinetic inhibition of CO and N<sub>2</sub> reduction in the solar nebula. *Astrophysical Journal* 238, 357-364.
- [Lide (2002)] Lide, D. R. 2002. *CRC Handbook of chemistry and physics : a ready-reference book of chemical and physical data*. CRC Handbook of chemistry and physics : a ready-reference book of chemical and physical data, 83rd ed., by David R. Lide. Boca Raton: CRC Press, ISBN 0849304830, 2002 .
- [Liou et al. (1996)] Liou, J.-C., Zook, H. A., Dermott, S. F. 1996. Kuiper Belt Dust Grains as a Source of Interplanetary Dust Particles. *Icarus* 124, 429-440.
- [Lisse et al. (1998)] Lisse, C. M., A'Hearn, M. F., Hauser, M. G., Kelsall, T., Lien, D. J., Moseley, S. H., Reach, W. T., Silverberg, R. F. 1998. Infrared Observations of Comets by COBE. *Astrophysical Journal* 496, 971.
- [Lodders (2003)] Lodders, K. 2003. Solar System Abundances and Condensation Temperatures of the Elements. *Astrophysical Journal* 591, 1220-1247.
- [López-Valverde et al. (2005)] López-Valverde, M. A., Lellouch, E., Coustenis, A. 2005. Carbon monoxide fluorescence from Titan's atmosphere. *Icarus* 175, 503-521.
- [Lunine & Stevenson (1985)] Lunine, J. I., Stevenson, D. J. 1985. Thermodynamics of clathrate hydrate at low and high pressures with application to the outer solar system. *Astrophysical Journal Supplement Series* 58, 493-531.

- [Lunine et al. (1999)] Lunine, J. I., Yung, Y. L., Lorenz, R. D. 1999. On the volatile inventory of Titan from isotopic abundances in nitrogen and methane. *Planetary and Space Science* 47, 1291-1303.
- [Marboeuf et al. (2008)] Marboeuf, U., Mousis, O., Ehrenreich, D., Alibert, Y., Cassan, A., Wakelam, V., Beaulieu, J.-P. 2008. Composition of Ices in Low-Mass Extrasolar Planets. *Astrophysical Journal* 681, 1624-1630.
- [McKay et al. (1988)] McKay, C. P., Scattergood, T. W., Pollack, J. B., Borucki, W. J., van Ghysseghem, H. T. 1988. High-temperature shock formation of N<sub>2</sub> and organics on primordial Titan. *Nature* 332, 520-522.
- [Mekler et al. (1990)] Mekler, Y., Prialnik, D., Podolak, M. 1990. Evaporation from a porous cometary nucleus. *Astrophysical Journal* 356, 682-686.
- [Mellor (1975)] Mellor, M. 1975. A review of basic snow mechanics. In *Snow Mechanics, Proceedings of the Grindelwald Symposium*, pp. 251–291. IAHS Publi.No. 114, Oxfordshire, UK.
- [Mendis & Brin (1977)] Mendis, D. A., Brin, G. D. 1977. Monochromatic brightness variations of comets. II - Core-mantle model. *Moon* 17, 359-372.
- [Merk & Prialnik (2003)] Merk, R., Prialnik, D. 2003. Early Thermal and Structural Evolution of Small Bodies in the Trans-Neptunian Zone. *Earth Moon and Planets* 92, 359-374.
- [Morbidelli et al. (1995)] 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.
- [Morbidelli (1998)] Morbidelli, A. 1998. The Structure of the Kuiper Belt and the Origin of Jupiter-Family Comets. *Solar System Formation and Evolution* 149, 83.
- [Morbidelli (2004)] Morbidelli, A. 2004. How Neptune Pushed the Boundaries of Our Solar System. *Science* 306, 1302-1304.
- [Mousis et al. (2000)] Mousis, O., Gautier, D., Bockelée-Morvan, D., Robert, F., Dubrulle, B., Drouart, A. 2000. Constraints on the Formation of Comets from D/H Ratios Measured in H<sub>2</sub>O and HCN. *Icarus* 148, 513-525.
- [Mousis et al. (2002)] Mousis, O., Gautier, D., Bockelée-Morvan, D. 2002. An Evolutionary Turbulent Model of Saturn's Subnebula: Implications for the Origin of the Atmosphere of Titan. *Icarus* 156, 162-175.
- [Mousis & Gautier (2004)] Mousis, O., Gautier, D. 2004. Constraints on the presence of volatiles in Ganymede and Callisto from an evolutionary turbulent model of the Jovian subnebula. *Planetary and Space Science* 52, 361-370.
- [Mousis et al. (2005)] Mousis, O., Marboeuf, U., Petit, J.-M., Klinger, J. 2005. Expectations for the Deep Impact collision from modelling of cometary nuclei. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 362, L40-L44.
- [Mousis et al. (2008)] Mousis, O., Pauzat, F., Ellinger, Y., Ceccarelli, C. 2008. Sequestration of Noble Gases by H<sub>3</sub><sup>+</sup> in Protoplanetary Disks and Outer Solar System Composition. *Astrophysical Journal* 673, 637-646.

- [Niemann et al. (2005)] Niemann, H. B., and 17 colleagues 2005. The abundances of constituents of Titan's atmosphere from the GCMS instrument on the Huygens probe. *Nature* 438, 779-784.
- [Ohishi et al. (1992)] Ohishi, M., Irvine, W. M., Kaifu, N. 1992. Molecular Abundance Variations among and Within Cold, Dark Molecular Clouds(rp). *Astrochemistry of Cosmic Phenomena* 150, 171.
- [Orosei et al. (1995)] Orosei, R., Capaccioni, F., Capria, M. T., Coradini, A., Espinasse, S., Federico, C., Salomone, M., Schwehm, G. H. 1995. Gas and dust emission from a dusty porous comet.. *Astronomy and Astrophysics* 301, 613.
- [Orosei et al. (1999)] Orosei, R., Capaccioni, F., Capria, M. T., Coradini, A., Sanctis, M. C. D., Federico, C., Salomone, M., Huot, J.-P. 1999. Numerically improved thermochemical evolution models of comet nuclei. *Planetary and Space Science* 47, 839-853.
- [Orosei et al. (2001)] Orosei, R., Coradini, A., de Sanctis, M. C., Federico, C. 2001. Collision-induced thermal evolution of a comet nucleus in the Edgeworth-Kuiper Belt. *Advances in Space Research* 28, 1563-1569.
- [Owen (1982)] Owen, T. 1982. The composition and origin of Titan's atmosphere. *Planetary and Space Science* 30, 833-838.
- [Papaloizou & Terquem (1999)] Papaloizou, J. C. B., Terquem, C. 1999. Critical Protoplanetary Core Masses in Protoplanetary Disks and the Formation of Short-Period Giant Planets. *Astrophysical Journal* 521, 823-838.
- [Pasek et al. (2005)] Pasek, M. A., Milsom, J. A., Ciesla, F. J., Lauretta, D. S., Sharp, C. M., Lunine, J. I. 2005. Sulfur chemistry with time-varying oxygen abundance during Solar System formation. *Icarus* 175, 1-14.
- [Patankar (1980)] Patankar, S. V. 1980. Numerical heat transfer and fluid flow. Washington, DC, Hemisphere Publishing Corp., 1980. 210 p. .
- [Pauzat & Ellinger (2007)] Pauzat, F., Ellinger, Y. 2007.  $H_3^+$  as a trap for noble gases - 2: structure and energetics of  $XH_3^+$  complexes from X=neon to xenon. *Journal of Chemical Physics* 127, 014308.
- [Petrenko & Whitworth (1999)] Petrenko, V.F., Whitworth, R.W. 1999. The Physics of Ice. Oxford Univ., New York.
- [Poirier (2000)] Poirier, J.-P. 2000. Introduction to the Physics of the Earth's Interior. Introduction to the Physics of the Earth's Interior, by Jean-Paul Poirier, pp. 326. ISBN 052166313X. Cambridge, UK: Cambridge University Press, March 2000. .
- [Pollack et al. (1994)] Pollack, J. B., Hollenbach, D., Beckwith, S., Simonelli, D. P., Roush, T., Fong, W. 1994. Composition and radiative properties of grains in molecular clouds and accretion disks. *Astrophysical Journal* 421, 615-639.
- [Prialdnik & Bar-Nun (1987)] Prialdnik, D., Bar-Nun, A. 1987. On the evolution and activity of cometary nuclei. *Astrophysical Journal* 313, 893-905.
- [Prialdnik & Bar-Nun (1988)] Prialdnik, D., Bar-Nun, A. 1988. The formation of a permanent dust mantle and its effect on cometary activity. *Icarus* 74, 272-283.

- [Prialnik (1992)] Prialnik, D. 1992. Crystallization, sublimation, and gas release in the interior of a porous comet nucleus. *Astrophysical Journal* 388, 196-202.
- [Prialnik & Bar-Nun (1992)] Prialnik, D., Bar-Nun, A. 1992. Crystallization of amorphous ice as the cause of Comet P/Halley's outburst at 14 AU. *Astronomy and Astrophysics* 258, L9-L12.
- [Prialnik (1997)] Prialnik, D. 1997. A Model for the Distant Activity of Comet Hale-Bopp. *Astrophysical Journal* 478, L107.
- [Prialnik et al. (2004)] Prialnik, D., Benkhoff, J., Podolak, M. 2004. Modeling the structure and activity of comet nuclei. *Comets II* 359-387.
- [Prinn & Fegley (1981)] Prinn, R. G., Fegley, B., Jr. 1981. Kinetic inhibition of CO and N<sub>2</sub> reduction in circumplanetary nebulae - Implications for satellite composition. *Astrophysical Journal* 249, 308-317.
- [Prinn & Fegley (1989)] Prinn, R. G. P., Fegley, B., Jr. 1989. Solar nebula chemistry: origins of planetary, satellite and cometary volatiles. *Origin and Evolution of Planetary and Satellite Atmospheres* 78-136.
- [Roberge et al. (2006)] Roberge, A., Feldman, P. D., Weinberger, A. J., Deleuil, M., Bouret, J.-C. 2006. Stabilization of the disk around  $\beta$ Pictoris by extremely carbon-rich gas. *Nature* 441, 724-726.
- [Ryan et al. (1999)] Ryan, E. V., Davis, D. R., Giblin, I. 1999. A Laboratory Impact Study of Simulated Edgeworth-Kuiper Belt Objects. *Icarus* 142, 56-62.
- [Russel (1935)] Russel, H. W., Principles of heat flow in porous insulators, *J. Am. Ceram. Soc.* 18, 1, 1935.
- [Sekine et al. (2005)] Sekine, Y., Sugita, S., Shido, T., Yamamoto, T., Iwasawa, Y., Kadono, T., Matsui, T. 2005. The role of Fischer Tropsch catalysis in the origin of methane-rich Titan. *Icarus* 178, 154-164.
- [Selsis et al. (2007)] Selsis, F., and 18 colleagues 2007. Could we identify hot ocean-planets with CoRoT, Kepler and Doppler velocimetry?. *Icarus* 191, 453-468.
- [Scheidegger (1963)] Scheidegger, A. E., *The Physics of Flow Through Porous Media*, University of Toronto Press, 1963.
- [Schmitt et al. (1989)] Schmitt, B., Espinasse, S., Grim, R. J. A., Greenberg, J. M., Klinger, J. 1989. Laboratory studies of cometary ice analogues. *Physics and Mechanics of Cometary Materials* 302, 65-69.
- [Schmitt et al. (1992)] Schmitt, B., Grim, S.R.J.A., Greenberg, J.M. and Klinger, J. 1992. Crystallization of water rich amorphous mixtures. *Physics and Chemistry of Ice*. Hokkaido University Press, Sapporo, 344-348.
- [Stansberry et al. (2008)] Stansberry, J., Grundy, W., Brown, M., Cruikshank, D., Spencer, J., Trilling, D., Margot, J.-L. 2008. Physical Properties of Kuiper Belt and Centaur Objects: Constraints from the Spitzer Space Telescope. *The Solar System Beyond Neptune* 161-179.
- [Stern (1995)] Stern, S. A. 1995. Collisional Time Scales in the Kuiper Disk and Their Implications. *Astronomical Journal* 110, 856.

- [Stern (1996)] Stern, S. A. 1996. On the Collisional Environment, Accretion Time Scales, and Architecture of the Massive, Primordial Kuiper Belt.. *Astronomical Journal* 112, 1203.
- [Stern & Colwell (1997)] Stern, S. A., Colwell, J. E. 1997. Collisional Erosion in the Primordial Edgeworth-Kuiper Belt and the Generation of the 30-50 AU Kuiper Gap. *Astrophysical Journal* 490, 879.
- [Stern (2003)] Stern, S. A. 2003. The evolution of comets in the Oort cloud and Kuiper belt. *Nature* 424, 639-642.
- [Stewart & Ahrens (2005)] Stewart, S. T., Ahrens, T. J. 2005. Shock properties of H<sub>2</sub>O ice. *Journal of Geophysical Research (Planets)* 110, 3005.
- [Suyama et al. (2008)] Suyama, T., Wada, K., Tanaka, H. 2008. Density Evolution of Dust Aggregates Growing in Protoplanetary Disks. *Lunar and Planetary Institute Conference Abstracts* 39, 1473.
- [Talbi & Herbst (2002)] Talbi, D., Herbst, E. 2002. The gas-phase destruction of interstellar carbon dioxide: Calculations on the reactions between CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> and between CO<sub>2</sub> and H. *Astronomy and Astrophysics* 386, 1139-1142.
- [Tancredi et al. (1994)] Tancredi, G., Rickman, H., Greenberg, J. M. 1994. Thermochemistry of cometary nuclei. 1: The Jupiter family case. *Astronomy and Astrophysics* 286, 659-682.
- [Taylor (1992)] Taylor, S. R. 1992. *Solar system evolution: a new perspective. an inquiry into the chemical composition, origin, and evolution of the solar system.* Cambridge, New York: Cambridge University Press, |c1992 .
- [Thomas et al. (2007)] Thomas, C., Mousis, O., Ballenegger, V., Picaud, S. 2007. Clathrate hydrates as a sink of noble gases in Titan's atmosphere. *Astronomy and Astrophysics* 474, L17-L20.
- [Walmsley et al. (1999)] Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., Flower, D. R. 1999. Silicon chemistry in PDRs. *Astronomy and Astrophysics* 342, 542-550.
- [Washburn (1928)] Washburn, E.W. 1928. in *International Critical Tables. Vol. III* 210.
- [Yamamoto (1985)] Yamamoto, T. 1985. Formation environment of cometary nuclei in the primordial solar nebula. *Astronomy and Astrophysics* 142, 31-36.
- [Yamamoto & Kozasa (1988)] Yamamoto, T., Kozasa, T. 1988. The cometary nucleus as an aggregate of planetesimals. *Icarus* 75, 540-551.
- [Yamamoto & Mukai (1998)] Yamamoto, S., Mukai, T. 1998. Dust production by impacts of interstellar dust on Edgeworth-Kuiper Belt objects. *Astronomy and Astrophysics* 329, 785-791.

# Liste des tableaux

1.1	Paramètres des courbes de stabilité des clathrates hydrates . . . . .	13
1.2	Paramètres des courbes de stabilité de condensats purs . . . . .	13
1.3	Enrichissements en volatils observés et calculés dans Jupiter . . . . .	23
1.4	Enrichissements en volatils observés et calculés dans Saturne . . . . .	25
1.5	Abondance du volatil $i$ dans les clathrates par rapport à l'abondance initiale de ce même volatil $i$ dans la nébuleuse. . . . .	30
3.1	Paramètres orbitaux des modèles de noyau cométaire. . . . .	74
3.2	Composition initiale et caractéristiques physiques des noyaux. . . . .	74
3.3	Paramètres Physiques des composants dans les noyaux. . . . .	75
3.4	Pression de Vapeur saturante des volatils. . . . .	75
4.1	Composition Initiale et Caractéristiques Physiques et dynamiques du Noyau . . . . .	99
4.2	Paramètres Physiques des Composants dans les Planétésimaux . . . . .	102
4.3	Autres Paramètres Physiques Testés pour les Modèles A et B . . . . .	108
4.4	Paramètres d'impact . . . . .	108
D.1	Table des paramètres $\alpha$ pour H <sub>2</sub> O . . . . .	162
D.2	Table des paramètres $\alpha$ pour CO . . . . .	162

## LISTE DES TABLEAUX

---

F.1	Tableau des constantes physiques . . . . .	167
-----	--	-----

# Table des figures

1.1	Piegeage de volatils dans la glace H <sub>2</sub> O amorphe lors de sa formation.	7
1.2	Formation des glaces dans le disque protosolaire . . . . .	8
1.3	Formation des glaces à partir des courbes de stabilité des hydrates, clathrates et condensats purs avec 100% d'efficacité du processus de clathration . . . . .	14
1.4	Composition des glaces incorporées dans les planétésimaux en fonction du rapport CO <sub>2</sub> :CO adopté dans la phase gazeuse initiale du disque . . . . .	18
1.5	Composition des glaces (en % massique) dans les planétésimaux en fonction du facteur d'enrichissement C/O $f \equiv (C/O)_{\text{disque}} / (C/O)_{\odot}$ dans la phase gazeuse initiale . . . . .	20
1.6	Courbes de stabilité des hydrates, clathrates et condensats purs avec 0% d'efficacité du processus de clathration . . . . .	24
1.7	Masses minimales des glaces et de H <sub>2</sub> O dans les enveloppes de Jupiter et Saturne en fonction du rapport CO <sub>2</sub> :CO imposé dans la phase gazeuse de la nébuleuse solaire . . . . .	26
1.8	Masses minimales de l'ensemble des glaces et de H <sub>2</sub> O uniquement dans les atmosphères de Jupiter et Saturne en fonction de l'efficacité de la clathration des volatils par la glace d'eau cristalline disponible dans la zone de formation des deux planètes géantes . . . . .	27
1.9	Courbes de stabilité de l'hydrate (NH <sub>3</sub> -H <sub>2</sub> O), des clathrates (X-5.75H <sub>2</sub> O (lignes pleines) et des condensats purs (lignes pointillées) et de la courbe de refroidissement de la nébuleuse solaire à la distance héliocentrique de 10 UA . . . . .	29



## TABLE DES FIGURES

---

2.1	Schéma représentant la matrice poreuse composée de glace d'H <sub>2</sub> O et de grains de poussière incrustés à l'intérieur . . . . .	34
2.2	Schéma représentant la différenciation physico-chimique du noyau cométaire liée à la sublimation des volatils présents dans les pores . . . . .	35
2.3	Schéma représentant les différenciations structurelle de la glace d'H <sub>2</sub> O et physico-chimique liée à la sublimation des volatils dans le noyau cométaire . . . . .	36
2.4	Distribution en taille des grains de poussière adoptée dans le modèle (Espinasse et al., 1993). . . . .	44
2.5	Temps de cristallisation de la glace amorphe en fonction de la température . . . . .	48
2.6	Schéma représentant le bilan énergétique de la couche de surface . . . . .	50
3.1	Vue schématique du noyau numérique . . . . .	60
3.2	Schémas de la structure du noyau numérique . . . . .	62
3.3	Evolution temporelle de la température de la couche d'interface du modèle d'Espinasse et al. (1991). . . . .	70
3.4	Reconstruction de la grille après déplacement de l'interface. . . . .	71
3.5	Evolution temporelle de l'erreur relative $ Z $ sur la conservation de masse du CO depuis le début de la simulation pour le modèle 1 (tracé noir) et celui d'Espinasse et al. (1991) (tracé gris). . . . .	76
3.6	Evolution temporelle de l'erreur relative $ Z $ sur la conservation de masse du CO depuis le début de la simulation pour le modèle 2 (tracé noir) et celui d'Orosei et al. (1999) (tracé gris). . . . .	77
3.7	Evolution temporelle de l'erreur relative $ Z' $ sur la conservation de masse du CO à chaque pas de temps $\Delta t$ pour le modèle 1 (tracé noir) et celui d'Espinasse et al. (1991) (tracé gris). . . . .	79
3.8	Evolution temporelle de l'erreur relative $ Z' $ sur la conservation de masse du CO à chaque pas de temps $\Delta t$ pour le modèle 2 (tracé noir) et celui d'Orosei et al. (1999) (tracé gris). . . . .	80
3.9	Evolution temporelle de la production de CO en mole pour le modèle 1 (tracé noir) et celui d'Espinasse et al. (1991) (tracé gris). . . . .	82

3.10	Evolution temporelle de la production de CO en mole pour le modèle 2 (tracé noir) et celui d'Orosei et al. (1999) (tracé gris). . . . .	83
4.1	Energie de destruction d'une cible en fonction de sa taille et de sa composition (Leinhardt et al., 2008). La zone grisée correspond aux tailles des cibles testées. . . . .	91
4.2	Schématisation d'une collision entre un impacteur et une cible plus grosse. . . . .	94
4.3	Fraction volumique de la glace dans le noyau cible pour une masse volumique des grains de poussière égale à 1000 et 3000 $\text{kg.m}^{-3}$ en fonction du rapport massique $J_{dust}$ . . . . .	100
4.4	Masse volumique du noyau cible pour une masse volumique des grains de poussière égale à 1000 et 3000 $\text{kg.m}^{-3}$ , en fonction du rapport massique $J_{dust}$ et pour une porosité $\psi$ égale à 50%. . . . .	101
4.5	Porosité du noyau cible en fonction de la distance au centre du noyau, pour une masse volumique des grains de poussière égale à 3000 $\text{kg.m}^{-3}$ et pour différents rapports massiques $J_{dust}$ . . . . .	104
4.6	Rapport maximal du rayon de l'impacteur sur celui de la cible en fonction du rapport massique $J_{dust}$ . . . . .	106
4.7	Fraction de la conductivité thermique $\frac{f_{ice} \cdot k_{ice}}{\sum_l f_l \cdot k_l}$ régie par la glace d'eau en fonction de la température du milieu. $K_{dust} = 10^{-4}$ et $10 \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ; $J_{dust} = 1$ . . . . .	110
4.8	Fraction de la conductivité thermique $\frac{f_{ice} \cdot k_{ice}}{\sum_l f_l \cdot k_l}$ régie par la glace d'eau en fonction de la température du milieu. $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ et $J_{dust} = 0,1, 1$ et $10$ . . . . .	111
4.9	Fraction de la conductivité thermique $\frac{f_{ice} \cdot k_{ice}}{\sum_l f_l \cdot k_l}$ régie par la glace d'eau en fonction de la température du milieu. $K_{dust} = 10 \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ et $J_{dust} = 0,1, 1$ et $10$ . . . . .	112
4.10	Capacité volumique $\rho \cdot c(T)$ ( $\text{J.m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$ ) de la matrice solide en fonction de la température du milieu, pour les modèles A ( $C_{dust} = 3.T \text{ J.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ) et B ( $C_{dust} = 3.T \text{ J.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ). $J_{dust} = 0,1, 1$ et $10$ . . . . .	114
4.11	<b>Modèle A</b> – Evolution de la température à l'intérieur du planétésimal de 10 km après un impact avec un projectile de 300m. $C_{dust} = 3.T \text{ J.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ; $K_{dust} = 10^{-4} \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ; $J_{dust} = 1$ . . . . .	115

TABLE DES FIGURES

---

- 4.12 **Modèle A** – Temperature maximale atteinte dans le noyau cible au cours du temps.  $C_{dust} = 3.T J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}$ , **2** & **10**  $W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ . . . . . 116
- 4.13 **Modèle B** – Evolution de la température à l'intérieur du planétésimal de 10 km après un impact avec un projectile de 300m.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ . . . . . 118
- 4.14 **Modèle B** – Temperature maximale atteinte dans le noyau cible au cours du temps.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}$ , **2** & **10**  $W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ . . . . . 119
- 4.15 **Modèle A** – Evolution de la cristallisation à l'intérieur du planétésimal de 10 km après un impact avec un projectile de 300m.  $C_{dust} = 3.T J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}$ , **2** & **10**  $W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 0.1$  & **1**. 121
- 4.16 **Modèle B** – Temperature maximale atteinte dans le noyau cible au cours du temps.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}$  & **2**  $W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 10$ . . . . . 123
- 4.17 **Récapitulatif** – Etat de cristallisation de la glace après une seule collision avec un projectile de 300 m pour les modèles A et B.  $C_{dust} = 3.T$  **(A)** & **1200 (B)**  $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4}$ , **2** & **10**  $W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 0,1, 1$  & **10**. . . . . 125
- 4.18 **Modèle B** – Evolution de la température à l'intérieur du planétésimal de 10km après un impact avec un projectile de 300m.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ ;  $J_{CO} = 0.1$ . . . . . 128
- 4.19 **Modèle B** – Profil de densité du CO solide dans le réseau de pores du noyau cible en fonction de la distance au centre du noyau.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ ;  $J_{CO} = 0.1$ . 129
- 4.20 **Modèle B** – Temperature maximale atteinte dans le noyau cible au cours du temps.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ ;  $J_{CO} = 0.1$ . . . . . 130
- 4.21 Profil de température à l'intérieur du noyau cible à environ  $t = 2.10^5$  ans.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 2 W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ . . . 132

4.22 **Cible de 10 km** - Intervalle de temps entre chaque collision pour permettre la progression de la cristallisation en fonction du rayon de l'impacteur pour une cible de 10 km de rayon. La zone grisée correspond à un rayon d'impacteur supérieur à 10% capable de détruire la cible.  $C_{dust} = 3.T$  (A) & **1200** (B)  $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ . . . . . 135

4.23 **Cible de 10 km** - Intervalle de temps entre chaque collision pour permettre la progression de la cristallisation en fonction du rayon de l'impacteur pour une cible de 10 km de rayon. La zone grisée correspond à un rayon d'impacteur supérieur à 10% capable de détruire la cible.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 10$ . . . . . 137

4.24 **Cible de 100 km** - Intervalle de temps entre chaque collision pour permettre la progression de la cristallisation en fonction du rayon de l'impacteur pour une cible de 100 km de rayon. La zone grisée correspond à un rayon d'impacteur supérieur à 10% capable de détruire la cible.  $C_{dust} = 3.T$  (A) & **1200** (B)  $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 1$ . . . . . 139

4.25 **Cible de 100 km** - Intervalle de temps entre chaque collision pour permettre la progression de la cristallisation en fonction du rayon de l'impacteur pour une cible de 100 km de rayon. La zone grisée correspond à un rayon d'impacteur supérieur à 10% capable de détruire la cible.  $C_{dust} = 1200 J.kg^{-1}.K^{-1}$ ;  $K_{dust} = 10^{-4} W.m^{-1}.K^{-1}$ ;  $J_{dust} = 10$ . . . . . 140

B.1 Estimation des variables  $l$  aux interfaces du volume de contrôle à partir des variables  $L$  définies au centre des cellules de manière à assurer la continuité des flux. Le volume de contrôle  $V_i$  de la couche  $i$  est défini autour de la variable  $L_i$ . . . . . 154

C.1 Schéma simplifié du noyau. . . . . 156

D.1 Pression de vapeur saturante du CO déterminée à partir de données expérimentales et théoriques (Clayton & Giauque, 1932; Lide, 2002) en fonction de la température. . . . . 163

## TABLE DES FIGURES

---

## RÉSUMÉ

Les Objets Transneptuniens (OTN) et les comètes à courte période sont considérés comme les vestiges directs de la nébuleuse primitive qui a donné naissance à notre système solaire. L'histoire dynamique et collisionnelle de ces objets pourrait laisser penser qu'ils ont été différenciés physico-chimiquement. L'objet du travail présenté ici est de déterminer si la matière dite "primordiale", incorporée dans les OTN, a perdu, d'une certaine manière, la mémoire de ses origines, en subissant des transformations physico-chimiques profondes lors de collisions successives.

Nous analysons dans une première étape les conditions de formation et la structure des glaces incorporées dans les planétésimaux. Nous montrons que la composition chimique initiale de la phase gazeuse du disque protoplanétaire a une incidence non négligeable sur la composition des planétésimaux formés de diverses glaces cristallines, et sur l'évolution thermique de l'ensemble des objets formés (planètes extrasolaires de faible masse et glacées, planètes géantes, satellites, comètes, ...) dans la région externe des disques protoplanétaires. Ainsi, les planètes extrasolaires de faible masse formées à l'origine dans un environnement froid peuvent être du type planètes "océan" ou "carbonées".

Nous réalisons ensuite un modèle numérique de planétésimal, à la composition physico-chimique simplifiée, qui assure la conservation des quantités physiques (masse et énergie), et permet l'étude à long terme des planétésimaux dans la région transneptunienne. Ce modèle représente une matrice poreuse composée d'éléments réfractaires et d'un mélange de différentes glaces. L'ensemble des processus physiques tels que les changements de phase (sublimation/condensation, cristallisation) et la modélisation des transferts thermiques et de masse y sont pris en compte. Le choix de la méthode d'intégration numérique et du cadre mathématique de résolution des équations de conservation (masse et énergie) est ensuite discuté. Le problème de la conservation des quantités physiques (masse et énergie) est abordé et l'erreur sur la conservation de la masse obtenue avec notre modèle est comparée à celle obtenue avec des modèles antérieurs. Nous montrons que l'erreur sur le bilan de masse obtenu par la méthode des volumes finis, utilisée dans ce modèle, permet de gagner au moins un ordre de grandeur sur celui des modèles antérieurs.

Les améliorations apportées au modèle de planétésimal permettent d'obtenir une représentation de sa différenciation physico-chimique plus fiable sur le long terme et permettent l'étude de l'influence de collisions successives. Grâce à cela, nous pouvons analyser l'influence de la composition physico-chimique et celle de l'ensemble des paramètres physiques sur l'évolution thermique et physico-chimique de planétésimaux situés dans la région transneptunienne. Enfin, nous déterminons les laps de temps nécessaires entre deux collisions pour engendrer une évolution physico-chimique des objets cibles, à partir d'une composition originelle imposée. Nos résultats infirment l'hypothèse selon laquelle les Objets Transneptuniens pourraient être significativement affectés par le processus collisionnel.

## MOTS CLÉS

glaces – planètes extra-solaires – Objets Transneptuniens – noyaux cométaires – collisions

## ABSTRACT

TransNeptunians Objects (TNOs) and short period comets are often considered as direct relics from the primordial nebula from which the Solar System originated. Their dynamical and collisional history seems to imply that these objects may have differentiated. The goal of the present work is to determine whether the "primordial" matter included in the TNOs has lost its pristine characteristics due to physico-chemical transformations induced by repeated collisions. We first analyse the formation conditions and the structure of ices included in planetesimals. We show that the initial chemical composition of the gas in the protoplanetary disk strongly influences the composition of planetesimals made of various crystalline ices, as well as the thermal evolution of the final objects (extrasolar low-mass icy planets, giant planets, satellites, comets, ...) in the outer reach of the protoplanetary disks. For instance, low-mass planets formed in a cold environment may be "cold" or "warm" ocean-planets or carbonaceous planets.

We next setup an evolutionary numerical model of planetesimals with simplified physico-chemical composition which ensure proper conservation of physical quantities (mass and energy), thus allowing long term study of transneptunians planetesimals. This model describes a porous matrix made of refractory elements and a mix of various ices. Phase transitions and energy and mass fluxes are accounted for. The choice of the mathematical framework for solving the conservation equations as well as the integration numerical scheme is discussed next. We consider the actual (non-)conservation of energy and mass in the numerical integration and compare our new model to previously published works. We show that the use of the finite volume method allows us to reduce the error by an order of magnitude compared to previous works.

Improvements on planetesimal's modelling allows for more reliable long term studies of the differentiation and thus the study of collisional evolution. Thanks to this, we can analyse the effects of initial the physical and chemical composition, as well as other physical parameters, on the thermal, physical and chemical evolution of transneptunian planetesimals. Finally, we determine the collision frequency required to generate a deep phase transition in planetesimals, starting from a given chemical composition. Our results indicate that TNOs are unlikely to be significantly thermodynamically affected by collisions.

## KEY-WORDS

Ices – Extrasolar planets – Trans-Neptunians Objects – Cometary nuclei – collisions