



HAL
open science

Formation de molécules interstellaires : observations millimétriques et modélisations de sources moléculaires

Eric Necessian

► To cite this version:

Eric Necessian. Formation de molécules interstellaires : observations millimétriques et modélisations de sources moléculaires. Astrophysique stellaire et solaire [astro-ph.SR]. Université Scientifique et Médicale de Grenoble, 1987. Français. NNT: . tel-00686726

HAL Id: tel-00686726

<https://theses.hal.science/tel-00686726>

Submitted on 11 Apr 2012

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

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

Thèse de Doctorat
de
l'Université Scientifique Technologique et Médicale de Grenoble

spécialité : Physique de la Matière et du Rayonnement
mention : Astrophysique

Formation de molécules interstellaires

Observations millimétriques et modélisations de sources moléculaires

Eric NERCESSIAN

Soutenue le 30 Septembre 1987 devant la commission d'examen

Alain OMONT

Président

Jean-Jacques BENAYOUN

Michel GUELIN

Examineurs

Evelyne ROUEFF

Robert SUBRA

Remerciements

Je tiens à remercier ici le Professeur Alain OMONT de m'avoir accueilli dans son laboratoire de recherche, Jean-Jacques BENAYOUN qui a dirigé cette thèse, Alain CASTETS et José CERNICCHARO qui m'ont fait découvrir les observations millimétriques, et enfin tous les membres du groupe d'astrophysique de Grenoble dont j'ai pu apprécier les divers conseils au jour le jour.

Je remercie tout spécialement Yves VIALA de l'Observatoire de Meudon qui a été à l'origine de cette thèse et qui m'a appris à me frayer un chemin à travers les méandres de la chimie interstellaire.

Enfin je tiens à préciser que tous les calculs présentés dans cette thèse ont été effectués sur le VAX 780 de l'Institut de Radio Astronomie Millimétrique (IRAM).

A Patricia

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION

CHAPITRE I

Le milieu interstellaire : présentation générale

I.I	Le milieu interstellaire et ses constituants.....	3
I.II	La chimie du milieu interstellaire.....	10
I.III	Réactions en phase gazeuse.....	17
I.IV	Les poussières interstellaires.....	31

CHAPITRE II

Le programme informatique

Première Partie : dans les nuages interstellaires.....		3
II.I	Position du problème.....	3
II.II	Le programme informatique.....	9
Deuxième Partie : dans les enveloppes circumstellaires.....		17
II.III	Introduction.....	17
II.IV	Les paramètres physiques.....	18
II.V	Les équations.....	20
II.VI	Résolution.....	22

CHAPITRE III

Observations millimétriques de nuages moléculaires proches

III.I	Introduction.....	3
III.II	Formation des raies moléculaires. Interprétation des spectres...	4
III.III	Observation de 2 nuages sombres dans le complexe du Taureau...	11

CHAPITRE IV

Les effets de taux de réaction ion-molécule polaire
élevés sur les modèles de chimie des nuages interstellaires denses

IV.I	Introduction.....	3
IV.II	Les molécules polaires.....	3
IV.III	Le modèle.....	6
IV.IV	Structure chimique d'un nuage sombre.....	7
IV.V	Comparaison avec les observations.....	14
IV.VI	Conclusion.....	21

CHAPITRE V

La chimie du nuage sur la ligne de visée de l'étoile HD 29647

V.I	Introduction.....	3
V.II	L'étoile HD 29647.....	3
V.III	Le nuage moléculaire.....	7
V.IV	Steady state chemical model of the molecular cloud HD 29647....	11

CHAPITRE VI

Photo-chimie des enveloppes circumstellaires oxygénées

VI.I	Introduction.....	3
VI.II	Perte de masse des géantes rouges.....	5
VI.III	Observations d'une enveloppe circumstellaire.....	7
VI.IV	Description des spectres moléculaires.....	8
VI.V	La chimie dans les enveloppes circumstellaires oxygénées.....	14

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

ANNEXES

Annexe A : Dissociation dans les raies d'absorption. Profil de raie

Annexe B : Transfert de rayonnement

Annexe C : Transition hydrogène atomique - hydrogène moléculaire

Annexe D : Atténuation du rayonnement à travers une enveloppe en expansion

Annexe E : Réactions en phase gazeuse

Annexe F : Méthode de résolution de l'équilibre chimique

INTRODUCTION

Si, au début des années 1950, l'existence, entre les étoiles, d'une phase gazeuse et d'une phase solide sous forme de grains était bien établie, leur composition, leur origine et même leur distribution à grande échelle dans la galaxie étaient ignorées, sauf en ce qui concerne les nébuleuses gazeuses ionisées par les étoiles chaudes. La découverte en 1951 de la raie radio de l'hydrogène atomique à 21 cm de longueur d'onde devait permettre de déterminer la quantité de gaz, ses propriétés physiques et surtout d'effectuer une cartographie de la galaxie et de tracer sa structure spirale.

L'observation optique n'avait permis jusque là que la détection de quelques atomes, ions et molécules (CN, CH, CH⁺) en absorption dans le spectre de certaines étoiles. Aujourd'hui plus de 60 molécules interstellaires sont identifiées avec certitude. Si quelques unes parmi les plus simples comme H₂, CO, OH, etc., sont répandues un peu partout dans le gaz interstellaire, la plupart, et notamment les molécules complexes, ne se trouvent que dans des nuages denses, opaques au rayonnement ultra-violet ambiant : la phase gazeuse y est principalement moléculaire.

Compte tenu des conditions physiques extrêmes du milieu interstellaire (densité, température, etc.), les processus chimiques par lesquels se forment de nombreuses molécules sont totalement différents de ceux de nos laboratoires. Elles se forment pour la plupart en phase gazeuse par des réactions chimiques faisant souvent intervenir des ions atomiques ou moléculaires (on observe d'ailleurs quelques uns de ces ions : CH⁺, HCO⁺, HCO₂⁺, N₂H⁺, HCS⁺). Grâce aux efforts conjugués de physiciens "moléculaires" et d'astronomes, on commence à comprendre cette chimie, au moins dans ses grandes lignes. C'est aussi grâce à de telles collaborations qu'ont pu être identifiées dans le milieu interstellaire des molécules si instables dans les conditions du laboratoire qu'elles ne peuvent y être observées.

L'évaluation théorique des abondances moléculaires et leur comparaison avec les observations peut se révéler être une méthode puissante pour appréhender les propriétés physiques du milieu

interstellaire. Les abondances moléculaires sont en effet extrêmement sensibles aux conditions physiques et à l'environnement (photons ultraviolets, rayons cosmiques) d'un nuage interstellaire donné. Le premier chapitre de cette thèse présente la très grande variété de conditions physiques qui règne dans l'espace interstellaire. Il présente également les principaux constituants du milieu interstellaire, les processus photo-chimiques qui se déroulent en son sein et insiste sur la somme de données qu'il faut connaître pour modéliser la chimie interstellaire (sections efficaces d'absorption UV, coefficients de vitesse des réactions chimiques à basse température notamment). Il a été effectué beaucoup de travail dans ce sens ces dernières années et les sections efficaces de photodissociation de molécules aussi importantes que CO, OH, C₂, CN, NO ou HCN sont à présent mieux connues, beaucoup de constantes de réaction et de rapports de branchement ont été calculés ou mesurés.

Le calcul proprement dit des abondances moléculaires devrait idéalement s'effectuer dans le cadre d'un milieu interstellaire en évolution dynamique (effondrements gravitationnels, expansions, chocs, etc.). Au moins pour des raisons de temps de calcul, il est hors de question d'aborder le problème dans sa globalité et il est nécessaire de faire des hypothèses simplificatrices. A partir du travail d'Yves Viala de l'observatoire de Meudon, un code informatique entièrement automatisé a alors été écrit. Ce qui précède est l'objet du deuxième chapitre.

La souplesse d'utilisation du code a permis son application à quatre situations qui sont illustrées dans les chapitres suivants.

Les isotopes du monoxyde de carbone CO sont souvent utilisés comme traceurs de la matière sombre moléculaire, en particulier dans les grands complexes moléculaires. Le troisième chapitre présente des observations dans la raie de rotation $J = 1-0$ de ¹³CO dans deux nuages sombres du complexe du Taureau, collectées avec le télescope de 2.5 m (POM1) de Bordeaux. Après avoir rappelé comment interpréter un spectre moléculaire, il est discuté de la structure et de la distribution de la matière dans les différents fragments identifiés. Les variations de la corrélation entre extinction visuelle et colonne densité de ¹³CO à travers les

différentes régions du complexe sont étudiées en termes de difficultés observationnelles et de processus photochimiques propres aux isotopes de CO : quelle confiance peut-on leur accorder pour tracer l'hydrogène moléculaire ?

Ces dernières années, les théories de cinétique de réaction entre ions et molécules polaires qui prévoyaient une augmentation sensible des vitesses de réaction à basse température, ont été confirmées par des mesures au laboratoire à de très basses températures. Bien qu'il ne soit pas encore vraiment établi que les théories sont correctes dans leurs prédictions pour toutes les réactions impliquant des ions et des molécules polaires, le chapitre IV détermine quels sont les effets de telles augmentations sur les modèles de chimie de nuages denses, sombres et froids ; il est décrit à cette occasion la structure chimique d'un nuage moléculaire.

Des études détaillées de quelques nuages particuliers ont connu des succès dans les années précédentes. Jusqu'à présent ces études se sont attachées à modéliser soit des nuages diffus comme ζ Oph ou ζ Per, soit des nuages sombres comme L134, L183 ou TMCl. Le chapitre V traite du cas intermédiaire : un modèle reproduit les abondances observées dans un nuage qui se trouve sur la ligne de visée de l'étoile HD 29647 dans le Taureau, fait quelques prévisions pour d'autres molécules non observées et décrit la structure chimique d'un tel nuage.

Enfin, le sixième et dernier chapitre traite de la chimie des enveloppes circumstellaires oxygénées : après avoir présenté les étoiles responsables de perte de masse et leur importance à l'échelle galactique, il est rappelé quelles formes particulières présente un spectre moléculaire émis par une enveloppe en expansion et comment on peut l'interpréter en terme d'abondance moléculaire ; puis est abordée la chimie de l'azote dans un environnement oxygéné sur la base d'observations de la transition $J = 1-0$ de HCN dans plusieurs étoiles oxygénées, avec l'antenne de 30 m de l'IRAM (Institut de Radio Astronomie Millimétrique).

CHAPITRE I

Le milieu interstellaire : présentation générale

I.1 LE MILIEU INTERSTELLAIRE ET SES CONSTITUANTS

I.1 *La matière galactique*

Dans notre galaxie, la Voie Lactée, la matière est loin d'être répartie de façon uniforme, la majeure partie de la masse étant concentrée dans les étoiles. Les observations montrent que le principal composant de l'espace interstellaire est l'hydrogène sous forme atomique ou moléculaire ; l'hélium représente 10% du nombre d'atomes et les éléments plus lourds environ 0.1%. Le gaz est mélangé à de fines poussières formées de graphite et de silicates recouverts de particules métalliques et de glace. Leur dimension classique est comprise entre 0.005 et 0.1 μm (Mathis *et al.* 1977) avec une densité spatiale moyenne de l'ordre de $1.3 \times 10^{-26} \text{ g cm}^{-3}$. Un rapport masse de poussière/masse de gaz typique des régions où il a été mesuré est d'environ 10^{-3} - 10^{-2} (Bohlin *et al.* 1978, Kerr et Knapp 1974). Une composante intermédiaire formée d'agrégats de 20 à 100 atomes, probablement des molécules aromatiques polycycliques, a été suggérée par des spectres dans l'infrarouge proche à 10 μm (Puget et Léger 1984).

La masse volumique du gaz dans le milieu interstellaire varie de quelques $10^{-24} \text{ g cm}^{-3}$ dans les bras spiraux à environ $10^{-25} \text{ g cm}^{-3}$ dans les régions interbras, avec une valeur moyenne voisine de $5 \times 10^{-25} \text{ g cm}^{-3}$ dans le plan du disque galactique (Burton et Gordon 1978). En effet, le milieu interstellaire se présente à l'observation sous de multiples aspects. Ne serait-ce qu'à l'oeil nu, il se révèle très nettement par les empreintes qu'il laisse dans la Voie Lactée : il s'agit là de vastes amas de gaz et de poussières qui obscurcissent le tissu stellaire très serré dans ces régions du ciel. On connaît également depuis longtemps les nébuleuses gazeuses qui sont une autre manifestation de la présence de gaz interstellaire : des étoiles chaudes ionisent le gaz et excitent sa fluorescence (régions HII) ou illuminent les poussières qui lui sont associées (nébuleuses par réflexion). Au confluent du milieu interstellaire et des atmosphères stellaires, on observe l'éjection de matière par de vieilles étoiles froides, et ainsi la formation de nébuleuses de gaz et de poussières autour de ces étoiles. L'étude des propriétés physico-chimiques des ces enveloppes circumstellaires est très importante pour comprendre les nombreux aspects des stades ultimes de

l'évolution stellaire (Zuckerman 1980).

I.2 *Milieu diffus et milieu internuage*

La cartographie de régions à l'échelle de la galaxie à 21 cm de longueur d'onde (transition hyperfine de H) a révélé l'existence de multiples nuages diffus d'hydrogène neutre atomique HI, de masse variant entre 0.1 et 1000 M_{\odot} , de densité très faible, de l'ordre de 50 cm^{-3} , et de température assez basse avoisinant les 80K (Dickey, Salpeter et Terzian 1978). La conversion de H en H_2 est faible dans ces régions, et on n'y observe que quelques molécules simples en faible quantité comme OH, CH et CO. On décèle également une composante de température supérieure à 1000K, appelée milieu internuage bien que l'on ignore son extension réelle dans la galaxie. Aucune molécule n'y est détectée.

I.3 *Milieu moléculaire*

Il existe une population de nuages plus massifs, plus denses et plus froids que les nuages HI, produits de la coalescence de nuages plus petits : les nuages moléculaires. Ce sont des rassemblements de gaz et de poussières, suffisamment denses et opaques pour se protéger du rayonnement ultraviolet ambiant et permettre ainsi l'accumulation de molécules, depuis H_2 jusqu'à des formes carbonées complexes : plus de 60 molécules et radicaux ont en effet été détectés dans ces régions (voir Table I.1). Les molécules symétriques comme O_2 , N_2 , etc. non mentionnées dans cette table, peuvent être abondantes mais n'ont que des raies extrêmement faibles dans l'infra-rouge et le domaine radio.

C'est principalement l'émission associée aux transitions dans les bandes de rotations du monoxyde de carbone CO qui a révélé l'existence des nuages moléculaires et permis leur étude à grande échelle (la molécule H_2 ne possède pas de moment dipolaire et, de ce fait, n'est pas observable en radio). Certains objets absorbent même dans ces transitions le rayonnement continu de sources situées à l'arrière plan. La masse de certains complexes dépasse $5 \times 10^5 M_{\odot}$ et leur densité dans les régions centrales peut atteindre 10^4 - 10^5 particules par centimètre cube; ce milieu est en général très froid et

la température peut descendre vers 10-15K (Young *et al.*1982).

On peut schématiquement distinguer deux classes de nuages moléculaires. La première regroupe des objets isolés, de taille modeste et de masse variable entre 1 et $10^4 M_{\odot}$. Ces nuages (globules de Bok, nuages de Lynds...) contiennent une grande quantité de poussières et sont donc très opaques au rayonnement stellaire. Ils apparaissent comme des taches sombres sur le fond du ciel, leur extinction dans le domaine visible pouvant être supérieure à 10 magnitudes (Frerking *et al.*1982, Elias 1978). A cause du froid intense qui règne dans ces globules (entre 5 et 10K), les poussières émettent peu et surtout dans l'infra-rouge lointain et le sub-millimétrique. Il est donc difficile de les appréhender car elles sont inobservables depuis le sol.

Dans la seconde classe, on trouve des nuages beaucoup plus massifs qui se caractérisent par le fait qu'ils sont le siège d'une formation très active d'étoiles, mise en évidence notamment par l'observation infra-rouge. Par exemple on détecte dans certains complexes des régions HII, régions ionisées par le rayonnement des étoiles OB jeunes et massives.

On ne sait pas à l'heure actuelle s'il existe un lien entre les nuages sombres isolés et les grands complexes moléculaires. Hyland (1981) passe en revue les diverses techniques utilisées pour étudier les globules de Bok (radio, infra-rouge et optique pour le comptage d'étoiles et la détermination du rougissement de ces étoiles à travers les globules les moins opaques). Ces études suggèrent que la majorité des globules est en effondrement gravitationnel et formerait éventuellement des étoiles (Bok 1977), une autre partie pourrait être des coeurs de nuages moléculaires résiduels après le soufflage par des étoiles T Tauri ou des flots bipolaires (seul le coeur assez dense pouvant résister).

Ainsi, on ne peut pas, à proprement parler, définir un nuage moléculaire typique qui rassemblerait les propriétés physiques moyennes de la matière moléculaire présente dans le milieu interstellaire. Nous avons vu que cette matière se trouve rassemblée en régions de tailles très variables, mais dont les contours peuvent être assez bien définis et qui méritent de ce fait le nom de nuage. Ces nuages peuvent être isolés ou faire partie de vastes

Table I.1 Molécules interstellaires observées. La colonne (5) donne des indications sur la raie détectée; E=transition électronique (visible/UV) V = transition vibrationnelle (IR); R = transition rotationnelle (radio) Λ = dédoublement- Λ ; H = structure hyperfine; I = transition d'inversion. La colonne (6) précise si la raie est observée en absorption (a), en émission (e), ou en émission maser (m). (Duley et Williams 1984).

Molécule	Formule	Abondance		Région	(5)	(6)
			Typique			
Hydrogène	H ₂		0.1	diffus	E	a
	H ₂		1.0	sombre	V	e
Ion Méthylidyne	CH ⁺		10 ⁻⁸	diffus	E	a
Méthylidyne	CH		10 ⁻⁸	diffus	E	a
	CH		10 ⁻⁸	sombre	Λ , H	e
Hydroxyle	OH **		10 ⁻⁷	diffus	E	a
	OH		10 ⁻⁸	sombre	H	a, e, m
Carbone diatomique	C ₂		10 ⁻⁸	diffus	E	a
Cyanogène	CN **		10 ⁻⁸	diffus	E	a
	CN		10 ⁻⁹	sombre	R, H	e
Monoxyde de carbone	CO *		10 ⁻⁶	diffus	E	a
	CO **		10 ⁻⁵	sombre	R	e
Monoxyde d'azote	NO		10 ⁻⁸	sombre	R, Λ	e
Monosulfide de carbone	CS * **		10 ⁻⁹	sombre	R	e
Ion monosulfide de carbone	CS ⁺		10 ⁻¹⁰	diffus	E, V	a
Monoxyde de silicium	SiO * **		-	enveloppe	R, V	e, m, a
Sulfide de silicium	SiS *		10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Monoxyde de soufre	SO **		10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Sulfide d'azote	NS		10 ⁻¹⁰	sombre	R, Λ , H	e
Vapeur d'eau	H ₂ O **		-	sombre	R	e, m
Ethynyle	C ₂ H *		10 ⁻⁹	sombre	R, H	e
-	SiC ₂ *		-	enveloppe	R	e
Acide Cyanhydrique	HCN * **		10 ⁻⁹	sombre	R, H	e
Isocyanide d'hydrogène	HNC * **		10 ⁻⁹	sombre	R	e
Ion formyl	HCO ⁺ **		10 ⁻⁹	sombre	R	e
Formyle	HCO		10 ⁻¹⁰	sombre	R, H	e
-	N ₂ H ⁺		10 ⁻¹⁰	sombre	R, H	e
Hydrogène sulfuré	H ₂ S **		10 ⁻¹¹	sombre	R	e
Ion Thioformyl	HCS ⁺		10 ⁻¹¹	sombre	R	e
Nitroxyl	HNO		10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Sulfide carbonyl	OCS **		10 ⁻⁹	sombre	R	e
Dioxyde de soufre	SO ₂ **		10 ⁻⁹	sombre	R	e
Carbone triatomique	C ₃		10 ⁻⁹	diffus	E	a

* : molécule détectée dans l'enveloppe circumstellaire carbonée IRC+10216

** : molécule détectée dans le flot circumstellaire oxygéné OH231.8+4.2

Molécule	Formule	Abondance	Région	(5)	(6)
Ammoniac	NH ₃ * **	10 ⁻⁸	sombre	I	e
Acétylène	C ₂ H ₂ *	-	enveloppe	R, V	e, a
Formaldéhyde	H ₂ CO	10 ⁻⁸	sombre	R	a
Acide isocyanique	HNCO	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Thioformaldéhyde	H ₂ CS	10 ⁻¹¹	sombre	R	e
Cyanoéthynyl	C ₃ N *	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Acide isothiocyanique	HNCS	10 ⁻¹¹	sombre	R	e
Propynylidyne	C ₃ H *	10 ⁻⁹	sombre	R	e
-	H ₂ CN ⁺	10 ⁻¹⁰	diffus	R	e
-	C ₃ O	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Méthane	CH ₄ *	-	sombre	R	e
Ketene	CH ₂ CO	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Cyanamide	NH ₂ CN	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Acide formique	HCOOH	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Butadiynyl	C ₄ H *	10 ⁻⁸	sombre	R	e
Cyanoacétylène	HC ₃ N *	10 ⁻⁹	sombre	R	e
Cyclopropénylidène	C ₃ H ₂	10 ⁻⁹	sombre	R	e
-	SiH ₄ *	-	enveloppe	V	a
Méthanol	CH ₃ OH	10 ⁻⁹	sombre	R	e
Méthyl cyanide	CH ₃ CN	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Formamide	NH ₂ CHO	10 ⁻⁹	sombre	R, H	e
Méthyl mercaptan	CH ₃ SH	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
-	C ₂ H ₄ *	-	enveloppe		
-	C ₅ H *	-	enveloppe	R	e
Méthylamine	CH ₃ NH ₂	10 ⁻⁹	sombre	R	e
Méthylacétylène	CH ₃ C ₂ H	10 ⁻⁹	sombre	R	e
Acétaldéhyde	CH ₃ CHO	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Vinyl Cyanide	CH ₂ CHCN	10 ⁻¹¹	sombre	R, H	e, m
Cyanodiacétylène	HC ₅ N *	10 ⁻⁹	sombre	R	e
-	C ₃ H ₄	10 ⁻⁹	sombre		e
Radical hexatriynil	C ₆ H *	-	enveloppe	R	e
Méthylcyanoacétylène	CH ₃ C ₃ N	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Ethanol	C ₂ H ₅ OH	10 ⁻⁹	sombre	R	e
Cyanotriacétylène	HC ₇ N *	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Ethyl cyanide	C ₂ H ₅ CN	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
Méthylodiacétylène	CH ₃ C ₄ H	10 ⁻⁹	sombre	R	e
-	HC ₉ N *	10 ⁻¹⁰	sombre	R	e
-	HC ₁₁ N *	-	enveloppe	R	e

complexes de plusieurs dizaines de parsecs d'extension : on estime que la moitié du milieu interstellaire est condensée sous cette forme et une des clefs de la compréhension de la formation des étoiles se trouve dans l'étude des processus physiques et chimiques de ces régions.

I.4 Milieu coronal

Au total, les nuages moléculaires et les nuages diffus d'hydrogène neutre sont loin de remplir tout le volume interstellaire. Des observations dans les domaines UV et X (émission de l'oxygène cinq, six et sept fois ionisé) ont comblé le vide et révélé l'existence d'un milieu coronal très chaud (5×10^5 à 10^6 K) mais très dilué, puisqu'un mètre cube ne contient en moyenne que 3000 particules. Cette phase chaude tire son nom du fait que l'ionisation du gaz est due principalement aux collisions entre atomes. Selon toute vraisemblance, ce gaz est constitué de restes d'explosions de supernovae. Il convient cependant de remarquer que l'extension des observations UV et X du gaz coronal est limitée à quelques centaines de parsecs au voisinage solaire où quatre restes de supernovae qui s'interpénètrent ont été détectés (Iwan 1980).

En résumé, les quatre phases principales du milieu interstellaire, nuages HI diffus, milieu internuage, nuages moléculaires et milieu coronal, sont toutes en interaction mutuelle, et en premier lieu en équilibre de pression. Les nuages HI ne sont pas gravitationnellement liés mais sont confinés par la pression du milieu ambiant. La pression de la phase coronale, du milieu internuage et des nuages HI est pratiquement uniforme et voisine de 3000 Kcm^{-3} ; elle est plus élevée à l'intérieur des nuages moléculaires gravitationnellement liés où elle peut dépasser 10^5 Kcm^{-3} . Les propriétés physico-chimiques essentielles sont rappelées dans la table I.2 empruntée à Duley et Williams (1984).

Table I.2 *Résumé des propriétés des nuages ou autres régions du milieu interstellaire (Duley et Williams 1984).*

Gaz Coronal

$T = 10^5 - 10^6$ K. $n \approx 10^{-2}$ cm^{-3} . Atomes très ionisés (O VI observé). Peut occuper 20% du milieu interstellaire.

Milieu internuage HI

$T \approx 10000$ K. $n \approx 0.1$ cm^{-3} . Atome dominant H. Ion dominant C^+ . Tous les atomes d'énergie d'ionisation < 13.6 eV sont ionisés. Pas de molécule.

Nuages HI diffus

$T \approx 100$ K. $n \approx 100$ cm^{-3} . Conversion partielle de H en H_2 . Ion dominant C^+ , autres atomes partiellement neutres. Molécules H_2 , CO et quelques autres sont observées.

Complexes moléculaires

$T \approx 10$ K. Densité moyenne relativement basse $n \approx 600$ cm^{-3} . Masse importante $M \approx 5 \cdot 10^5 M_{\odot}$. Diamètre 40-100 parsecs.

Nuages moléculaires

$T \approx 50$ K. $n \approx 10^4 - 10^5$ cm^{-3} . $M \approx$ quelques $10^2 M_{\odot}$, $r \approx$ quelques parsecs. Associés à des régions d'excitation. Profondeur optique importante. Emission thermique en infra-rouge. Beaucoup de molécules mais les mouvements turbulents élargissent les raies.

Nuages sombres

$T \approx 10 - 20$ K. $n \approx 10^4$ cm^{-3} . $M = 10^2 - 10^4 M_{\odot}$. $r \approx 5$ parsec. H est converti en H_2 . Profondeur optique importante dans le visible et l'UV. Mouvements internes faibles. Beaucoup de molécules observées.

Régions HII

$T \approx 10000$ K. $n \approx 10^2 - 10^3$ cm^{-3} . $r = 1 - 10$ parsecs. Ion dominant H^+ , mais présence de C^+ , N^+ et O^+ . Emission continue et discrète.

Voisinage de régions HII compactes

$T = 100 - 1000$ K. $n \approx 10^3 - 10^4$ cm^{-3} . Étoiles chaudes dans nuages denses de gaz et de poussières. Emission IR et radio du gaz et des poussières. Maser SiO, H_2O , OH.

Enveloppes circumstellaires

$T = 10 - 1000$ K. Associées à des étoiles vieilles de faible température de surface. Poussières et nombreuses molécules observées.

I. II LA CHIMIE DU MILIEU INTERSTELLAIRE

II.1 Formation des molécules interstellaires

Il est admis que la grande majorité des molécules interstellaires se forme à partir de constituants simples par des processus de synthèses plutôt que par la dégradation de systèmes compliqués comme les grains de poussières : par exemple, la contribution maximale à l'abondance des molécules diatomiques observées dans les nuages diffus, apportée par la dégradation de grains interstellaires, est de l'ordre de 1%.

A priori, on peut aussi imaginer que les molécules se forment dans l'atmosphère dense des étoiles géantes, puis se répandent dans le milieu interstellaire, entraînées par la masse importante de matière éjectée au cours de la vie d'une étoile : Knapp et Morris (1985) estiment un taux galactique total de masse rendue au milieu interstellaire par ces étoiles à $0.3M_{\odot}$ par an. Mais ces molécules ne supportent pas le voyage : exposées au champ de rayonnement interstellaire dès que la densité descend en dessous de $\approx 100\text{cm}^{-3}$, leur durée de vie est seulement de quelques centaines d'années, la distance parcourue étant alors négligeable devant les dimensions caractéristiques des nuages interstellaires.

Les molécules se forment donc *in situ*, les atomes et les ions abondants sont convertis en molécules par réactions chimiques, molécules qui prennent part à leur tour à d'autres réactions. L'étude du milieu interstellaire nous renseigne sur les processus chimiques fondamentaux. Elle permet, par exemple, l'observation d'espèces comme les radicaux libres difficilement observables en laboratoire car trop réactifs (CH , CN , C_2H , ...) ou comme certains ions (HCO^+ , N_2H^+ , ...).

Pourtant les conditions dans lesquelles se forment les molécules interstellaires semblent peu favorables a priori :

- la densité très faible rend peu probable la rencontre entre deux espèces chimiques qui, pour se rapprocher, doivent vaincre une force répulsive, c'est à dire franchir une barrière énergétique dite d'activation;

- la température très basse ne permet pas aux ions et atomes d'acquérir une énergie cinétique suffisamment grande pour franchir cette barrière. De même, toute réaction endothermique est irréalisable, sauf au passage d'une onde de choc ;

- certaines réactions exothermiques peuvent ne pas se déclencher faute de pouvoir évacuer l'énergie produite, ce qui serait possible en laboratoire où des molécules voisines ou la paroi du récipient pourraient l'emmagasiner.

C'est en fait une chimie essentiellement ionique ne présentant pas de barrière d'activation et en remplaçant les échelles de temps du laboratoire par des durées de 10 à 10⁵ ans, on envisage plus facilement la formation des molécules interstellaires.

II.2 Ordres de grandeur

Les informations du §I.I peuvent maintenant nous guider dans l'appréhension de l'efficacité des réactions chimiques interstellaires (Duley et Williams 1984) :

(i) Considérons un nuage diffus de densité $n = 100\text{cm}^{-3}$. Supposons que la molécule M se forme comme suit



où A, B et N peuvent être neutres, ioniques, atomiques ou moléculaires ; N peut être également un photon. Nous avons déjà mentionné pour ce genre de nuage que le mode de destruction des molécules est la photodestruction par le rayonnement UV ambiant avec un taux β d'environ 10^{-10} s^{-1} (durée de vie de quelques centaines d'années). L'équation qui décrit l'évolution de l'abondance de M est

$$\frac{d(n(M))}{dt} = kn(A)n(B) - \beta n(M) \quad (2)$$

qui fournit une valeur à l'équilibre chimique :

$$n(M) = kn(A)n(B)/\beta \quad (3)$$

Si A et B ne sont ni l'hélium ni l'hydrogène, $n(A), n(B) \leq 10^{-4}n$ d'où

$$n(M)/n \approx 10^2kn \quad (4)$$

Si de plus, l'espèce observée a une abondance relative de 10^{-8} , on obtient

$$k \approx 10^{-12} \text{ cm}^3\text{s}^{-1} \quad (5)$$

comme taux de la réaction (1). Par contre, si A ou B est l'hydrogène, on trouve

$$k \approx 10^{-16} \text{ cm}^3\text{s}^{-1} \quad (6)$$

Comme nous le verrons par la suite (§I.IIIa), les réactions entre espèces neutres peuvent se produire à un taux proche de $10^{-11}\text{cm}^3\text{s}^{-1}$, celles entre ions et neutres pouvant dépasser $10^{-9}\text{cm}^3\text{s}^{-1}$. Ainsi il suffit que l'efficacité des réactions neutre-neutre soit d'au moins 10% et celle des réactions ion-neutre d'au moins 0.1% pour expliquer la présence de molécules comme CO ou CN dans les nuages diffus. De plus l'équation (6) nous indique que certains hydrides peuvent être formés par association radiative d'ions avec la molécule d'hydrogène (voir §III.b).

(ii) Nous pouvons également essayer d'estimer le rôle possible des grains dans la catalyse de formation moléculaire (voir §I.IV) en supposant qu'un atome X est transformé en XH à chaque collision avec un grain qui joue le rôle des parois du laboratoire. Le taux de production de XH sur des grains sphériques de rayons a , de densité n_g , dans un gaz d'atomes X animés de la vitesse v_X , est

$$\pi a^2 v_X n(X) n_g \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$$

En tenant compte de la photodissociation, nous obtenons une abondance d'équilibre de $n(XH)/n \approx 10^{-10}n$ avec $\pi a^2 n_g = 10^{-21}n \text{ cm}^{-1}$ (ce qui correspond à un rapport poussière/gaz de 0.8% pour des grains de rayon 0.1 μm), $v_X = 3 \times 10^4 \text{ cm s}^{-1}$ (vitesse thermique d'atomes de carbone à 50K), et $n(X) = 3 \times 10^{-4}n$.

Pour $n = 100 \text{ cm}^{-3}$, on obtient une abondance comparable aux valeurs observées. En fait, à l'exception de H_2 , l'efficacité de formation d'une molécule par catalyse sur les grains est de l'ordre de quelques pourcents (voir §IV.3).

II.3 Aspect thermodynamique

Pour qu'une réaction chimique se produise, il faut que la variation d'énergie libre ΔG soit négative :

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (7)$$

où T, H et S sont respectivement la température, l'enthalpie et l'entropie de la réaction. Pour des réactions à température constante,

$$\Delta H = \Delta U + RT\Delta N$$

où ΔN est la variation du nombre de moles.

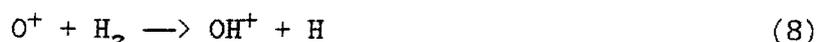
H ₂	4.48	Si ₂	3.21	O ₂ ⁺	6.66	MgO	3.50
CH	3.47	Mg ₂	0.05	S ₂ ⁺	5.37	SiS	6.40
NH	3.47	H ₂ ⁺	2.65	CN	7.80	MgS	2.40
OH	4.39	CH ⁺	4.09	CO	11.09	CN ⁺	4.85
SH	3.60	NH ⁺	3.39	CS	7.36	CO ⁺	8.34
SiH	3.06	OH ⁺	5.10	SiC	4.60	CS ⁺	6.38
MgH	1.34	SH ⁺	3.50	NO	6.50	NO ⁺	10.85
C ₂	6.21	SiH ⁺	3.17	NS	4.80	NS ⁺	6.30
N ₂	9.76	MgH ⁺	2.08	SO	5.36	SO ⁺	5.43
O ₂	5.12	C ₂ ⁺	5.32	SiO	8.26	SiO ⁺	5.00
S ₂	4.37	N ₂ ⁺	8.71				

Table I.3 Energies de dissociation (eV) de quelques molécules diatomiques (Duley et Williams 1984).

A $T = 0$ K, $\Delta G = \Delta U$ la variation d'énergie interne du système. Cette variation est en général grande devant les énergies thermiques interstellaires de sorte que la connaissance des énergies de dissociation (Table I.3), et le fait que tous les réactants sont dans leur état d'énergie le plus bas, permettent de sélectionner les réactions exothermiques rapides. C'est ce principe qui indique comment est initiée la chimie des différents éléments dans le milieu interstellaire.

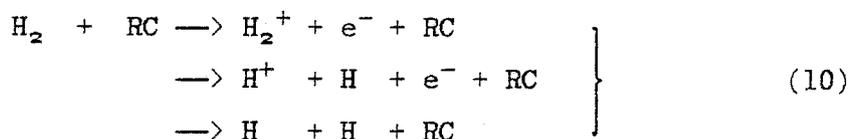
II.4 L'oxygène

L'énergie de dissociation de OH^+ (5.1 eV) supérieure à celle de H_2 (4.48 eV), nous indique que la réaction



sera exothermique et rapide si aucune barrière d'activation ne l'en empêche.

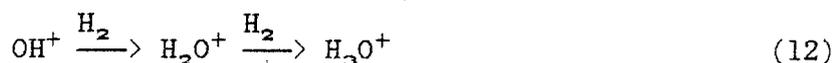
Si l'ion O^+ peut être formé, la réaction (8) devient le point de départ de la chimie de l'oxygène. Cette formation de O^+ débute par l'ionisation de l'hydrogène par les rayons cosmiques (voir SI.IIIId)



La coïncidence accidentelle des potentiels d'ionisation de H et O permet à la réaction d'échange de charge (voir SI.IIIa)



d'être une source efficace d'ions O^+ dans des nuages chauds et diffus, bien que (11) soit faiblement endothermique ($E/k \approx 227\text{K}$). Si H_2 est un tant soit peu abondant, la réaction (8) se produit rapidement, suivie de la chaîne de collisions avec H_2



Ces ions peuvent alors se recombiner avec des électrons et ainsi produire le radical hydroxyl OH et la molécule d'eau H_2O dans le milieu interstellaire.

Une autre façon de déclencher la chaîne (12) commence avec la réaction (10) suivie de la formation de l'ion moléculaire H_3^+ par



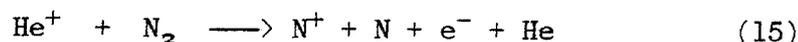
H_3^+ est très réactif et très stable, et son mode de destruction favori est



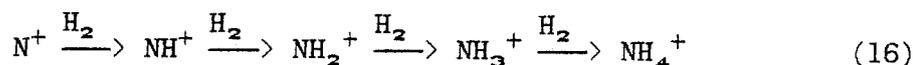
qui remplace alors (11) dans les nuages denses et froids, et nous ramène effectivement en (12).

II.5 L'azote

L'énergie d'ionisation de N (14.5 eV) étant très différente de celle de H, l'équivalent du transfert de charge (11) n'existe pas pour l'azote. Les ions N^+ peuvent être créés, soit par ionisation de N et N_2 par les rayons cosmiques, soit par collision de N_2 avec He^+ (lui même issu de l'ionisation de l'hélium par les rayons cosmiques)



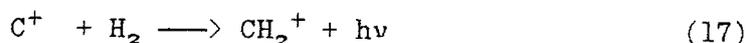
Quand ils sont thermalisés, les ions N^+ amorcent une série de collisions avec H_2



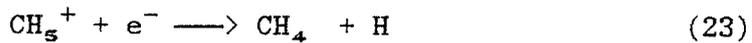
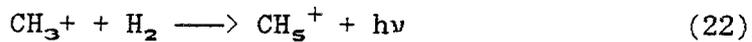
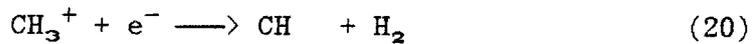
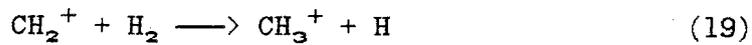
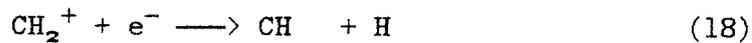
et ces différents ions se recombinent et forment les hydrides d'azotes NH et NH_2 , ainsi que la molécule d'ammoniac NH_3 . Toutefois, la chaîne (16) peut être ralentie dans les nuages denses et froids car de récentes mesures en laboratoire (Marquette *et al.* 1985) montrent une lente décroissance du taux de réaction de $N^+ + H_2$ avec la température. Il faut alors à nouveau faire appel à H_3^+ pour réamorcer la chaîne par $H_3^+ + N \longrightarrow NH_2^+ + H$. Cette dernière réaction n'a jamais été étudiée au laboratoire et si elle s'avérait inefficace, la formation de l'ammoniac serait difficile.

II.6 Le carbone

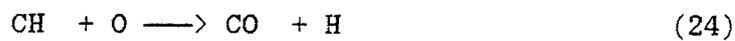
La Table I.3 nous indique que les réactions susceptibles de former CH^+ (ou CH) à partir de C^+ (ou C) avec H_2 , sont endothermiques à basse température. Il apparait alors que le mécanisme initial le plus probable de la chaîne carbonée est l'association radiative



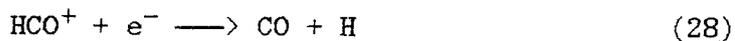
qui entraîne derrière elle une grande variété de processus :



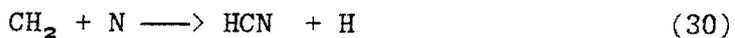
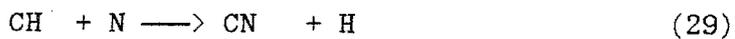
Une fois que les hydrides de carbone et leurs ions sont présents, beaucoup de possibilités sont ouvertes. Le monoxyde de carbone CO, qui est l'une des molécules les plus importantes pour l'observation millimétrique (voir chapitre V) peut se former par



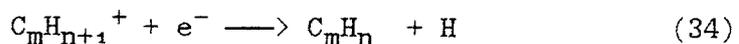
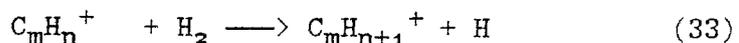
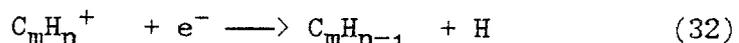
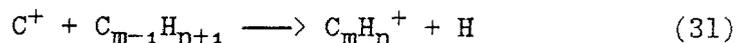
ou par l'intermédiaire de l'ion formyl (HCO^+)



Les molécules CN (cyanogène) et HCN (acide cyanhydrique) se voient également offrir une chance par



Les molécules composées de plusieurs atomes de carbones sont certainement importantes et peuvent être formées par les séquences suivantes :



II.7 Structure chimique d'un nuage moléculaire

Nous reviendrons dans les chapitres ultérieurs sur cette chimie en phase gazeuse, chimie qui s'appuie sur une grande variété de processus détaillés dans le paragraphe suivant. Mais d'ores et déjà se précise l'idée que l'on se fait de la composition chimique d'un nuage moléculaire, générateur

prolifère de molécules interstellaires. Il est principalement composé d'hydrogène moléculaire, entouré d'une couche d'hydrogène atomique. Les éléments dont le potentiel d'ionisation est inférieur à 13.6eV (S, Si, C, ...) sont ionisés au bord du nuage et se retrouvent sous forme atomique ou moléculaire neutre au fur et à mesure que le rayonnement UV s'atténue vers le centre du nuage. Les rayons cosmiques maintiennent un certain degré d'ionisation à travers le nuage et produisent directement ou indirectement, les ions moléculaires qui alimentent la chimie ion-molécule en phase gazeuse. Les grains de poussières peuvent également contribuer à la formation ou à la destruction de certaines espèces, voir à l'épuisement partiel de certains éléments. Ils jouent également un rôle important dans la thermodynamique du nuage, dans l'absorption UV et X, et dans la redistribution en infra-rouge. Bien que très minoritaire en masse (1% environ de la masse totale), ils tiennent donc un rôle crucial dans la circulation de l'énergie à l'intérieur d'un nuage interstellaire (voir §I.IV).

I.III REACTIONS EN PHASE GAZEUSE

III.a Généralités sur les taux de réactions: ion-neutre, neutre-neutre

Un calcul complet des abondances chimiques demande la résolution d'un système d'équations différentielles mettant en jeu toutes les réactions importantes (voir Chapitre II). Pour traiter de façon réaliste les espèces observées, un tel système peut comprendre plusieurs centaines de réactions, dont plusieurs dizaines au moins ont une importance essentielle pour l'une ou l'autre molécule. La connaissance des réactions, ainsi que leur comportement avec la température, s'est considérablement accrue ces dernières années : d'une part des mesures à basse température, d'autre part des calculs théoriques, permettent de mieux cerner les comportements caractéristiques dans les conditions qui nous intéressent ($T = 10-100K$).

a1. Ion-neutre

Dans la plupart des cas, les réactions ion-neutre d'intérêt astrophysique se produisent à des taux proches de la collision classique, pour laquelle le paramètre d'impact est suffisamment petit (à énergie incidente

donnée) pour surmonter la barrière de moment angulaire. Dans le traitement classique, la particule chargée induit un dipôle sur la molécule neutre. Ce dipôle et la charge interagissent en un potentiel d'interaction en r^{-4} . Le taux de collision qui en découle, dit taux de Langevin-Giromousis-Stevenson, s'écrit alors

$$k_i = 2\pi \sqrt{\frac{\alpha e^2}{\mu}} \quad \left\{ \begin{array}{l} \alpha = \text{polarisabilité du neutre} \\ e = \text{charge de l'électron} \\ \mu = \text{masse réduite du système} \end{array} \right.$$

et il est proche de la réalité quand les molécules sont symétriques et ne possèdent pas de moment dipolaire permanent. L'ordre de grandeur caractéristique est $10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$. Lorsque les molécules possèdent un moment dipolaire permanent non négligeable (NH_3 , HCN , H_2O , $\text{CS}\dots$), une augmentation d'un ou deux ordres de grandeurs de la vitesse de réaction vers les basses températures est prédite par plusieurs auteurs comme Sakimoto et Takayanagi (1980), Chesnavich, Su et Bowers (1980), Celli, Weddle et Ridge (1980), Bates (1982) ou plus récemment Clary (1985). Les calculs théoriques de ce dernier sont les plus spectaculaires puisqu'ils annoncent des taux de réactions de l'ordre de $10^{-7} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ à 10K. Des mesures en laboratoire sont venues confirmer qualitativement ces théories (voir la discussion de Herbst 1986), notamment celles développées à l'Université de Birmingham à l'aide d'un montage expérimental perfectionné, l'appareillage SIFT ("Selective Ion Flow Drift Tube"), qui permet l'étude des réactions en fonction de l'énergie dans le centre de masse dans une gamme de température de 80 à 600K (voir par exemple Smith et Adams 1981, Adams, Smith et Millar 1985). Par ailleurs, le laboratoire d'Aérodynamique du CNRS à Meudon, a développé la méthode CRESU d'Écoulements Supersoniques Uniformes pour étudier les Cinétiques de Réactions ion-molécule dans une gamme de température (jusqu'à 8K) inaccessible aux techniques plus classiques (Rowe *et al.* 1985). Certains résultats importants pour la chimie interstellaire sont présentés en table I.4. Une étude quantitative des répercussions que peuvent induire ces comportements nouveaux à basse température, sera présentée dans le Chapitre IV.

Molécule	μ_D (Debye)	$\alpha(\text{\AA}^3)$
NH ₃	1.47	2.26
H ₂ O	1.85	1.40
CS	1.96	4.66
CN	3.10	2.59
HCN	2.98	2.56
HC ₃ N	3.60	6.24

(a)

Molécule	Température (K)				
	5	10	15	50	300
CS	6.6	4.3	3.3	1.4	0.6
HCN	11.0	7.0	5.4	2.4	0.8
HC ₃ N	13.0	8.3	6.4	2.9	1.3

(b)

* : Huntress (1977) ; # : Anicich et al.(1976) ; ^z : Smith et al.(1978)

Réaction	Température (K)									
	Rowe et al. (1985)				Su et Chesnavich (1982)					
	10	27	68	300	10	27	68	300	300	
He ⁺ + NH ₃	0.7	0.5	0.3	0.2	1.8	1.2	0.8	0.4	0.4 [*]	
+ H ₂ O	1.1	0.4	0.2	0.04	1.7	0.9	0.3	0.04	0.04 [*]	
C ⁺ + NH ₃	0.7	0.5	0.3	0.2	1.2	0.8	0.5	0.2	0.2 [#]	
+ H ₂ O	3.0	1.2	0.5	0.3	1.5	0.9	0.6	0.3	0.3 [#]	
N ⁺ + NH ₃	0.9	0.5	0.3	0.2	1.2	0.8	0.5	0.2	0.2 ^z	
+ H ₂ O	1.7	1.0	0.6	0.3	1.5	0.9	0.6	0.3	0.3 ^z	

Table I.4 (a): moments dipolaires μ_D et polarisabilités α de quelques molécules interstellaires. (b): taux de réaction ($10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$) théoriques entre H₃⁺ et quelques molécules polaires (Adams et al.1985). (c): comparaison entre les taux paramétrisés par Su et Chesnavich (1982) et ceux mesurés par Rowe et al.(1985). En dernière colonne ce sont des valeurs antérieures mesurées à 300 K. Les taux sont en $10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

Il existe des exceptions notables aux comportements rapportés ci-dessus, par exemple lorsque peu d'électrons sont impliqués dans le système, ou pour des réactions avec de grosses molécules qui demandent un réarrangement significatif. Ainsi la première exception de taille est



qui est heureuse car elle permet à l'ion He^+ de réagir avec des atomes lourds. La réaction $\text{N}^+ + \text{H}_2 \longrightarrow \text{NH}^+ + \text{H}$, supposée jusqu'à peu initier la chaîne de réaction qui conduit à l'ammoniac (voir §I.II), en est une autre puisque son taux diminue lentement vers les plus basses températures pour atteindre $2.4 \times 10^{-12} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ à 8K (Marquette et al.1985).

Un recensement des réactions ion-neutre susceptibles de se déclencher dans le milieu interstellaire, peut s'établir de la façon suivante :

- le transfert de proton : $\text{AH}^+ + \text{B} \longrightarrow \text{BH}^+ + \text{A}$ se produit généralement quand la réaction est exothermique. Les valeurs des affinités de proton (AP : énergie de liaison avec H^+ , voir Table I.5) indiquent les transferts possibles, c'est à dire ceux qui remplissent la condition

$$\text{AP}(\text{B}) > \text{AP}(\text{A})$$

H	2.69eV	H ₂	4.34eV	O ₂	4.34eV	SH	7.16 eV	C ₂ H ₂	5.55
He	1.82	CH	7.59	OH	6.25	H ₂ S	7.37	C ₂ H ₄	6.69
O	5.03	CH ₂	8.68	H ₂ O	7.16	CS	7.57	C ₂ H ₆	6.25
C	6.46	CH ₃	5.55	CO	6.20	OCS	6.69	C ₃	7.99
N	4.21	CH ₄	5.68	NO	4.99	CN	4.99	CO ₂	5.63
Si	8.68	NH	6.12	C ₂	7.20	HCN	7.37	H ₂ CO	7.38
Mg	8.03	NH ₂	7.98	N ₂	5.03	HNC	8.18	HCO	6.72
S	6.81	NH ₃	8.98			C ₂ H	6.98		

Table I.5 Affinités de proton de certains atomes et molécules. (Lias et al.1984)

Par exemple, H_3^+ peut transférer un proton à presque tous les atomes sauf H, He et N.

A l'opposé, la grande affinité de proton attribuée à CS rend l'ion moléculaire HCS^+ peu réactif : il n'y a pas, en particulier, de réaction avec H_2 , et seuls NH_3 et HNC réussissent à détruire HCS^+ . CS va également accepter des protons de la part de beaucoup d'ions (H_3^+ , HCO^+ , ...) et ainsi le transfert de proton de CS vers HCS^+ va être rapide. Tout ceci explique en partie le rapport d'abondance élevé HCS^+/CS ($\approx 10^{-2}$) comparé à HCO^+/CO ($\approx 10^{-4}$) mis en évidence par Thaddeus et al. (1981) dans 10 nuages sombres. D'autres éléments, comme la polarité de CS et la très lente recombinaison électronique de HCS^+ , favorisent également ce résultat (pour un aperçu plus complet de ce problème voir Millar et al. 1985).

- le transfert de l'atome H : $A^+ + H_2 \longrightarrow AH^+ + H$ est plus difficile à prévoir même dans un processus exothermique : certains transferts ont, en effet, des taux inférieurs au taux de Langevin, ce qui laisse entrevoir l'existence de barrières d'activation.

- les réactions de condensation sont celles au cours desquelles se forment de nouvelles liaisons entre atomes lourds (C, N, O, ...). Elles procèdent généralement par l'élimination d'un H ou d'un H_2 . Les hydrocarbures et les ions hydrides sulfurés sont friands de ce genre de processus (par exemple $C^+ + C_2H \longrightarrow C_3^+ + H$).

- le transfert de charge : $A^+ + B \longrightarrow B^+ + A$ a trouvé la consécration dans le chimie interstellaire grâce à la réaction initiale de la chimie de l'oxygène dans les nuages diffus (voir SI.II)



La probabilité de transférer une charge augmente rapidement avec l'énergie de la collision et lorsque la différence entre les potentiels d'ionisation de A et de B est minimale. Dans les conditions interstellaires où les vitesses sont toujours lentes, c'est la coïncidence accidentelle de leurs potentiels d'ionisation (13.6eV) qui permet à H et O d'échanger une charge.

a2. Neutre-neutre

Des réactions d'échange entre espèces neutres du type $A + BC \longrightarrow AB + C$ jouent un grand rôle dans la chimie du milieu interstellaire. Des mesures de certains taux de réactions mettent parfois en évidence une forte dépendance en température. Dans, un modèle simple où A et BC sont considérées comme des sphères dures qui interagissent par contact, la section efficace de collision est de l'ordre de 10^{-15}cm^2 . La vitesse relative, aux températures interstellaires, est d'environ $10^4 - 10^5 \text{cm s}^{-1}$ de sorte qu'une fourchette typique des taux de collision est de $10^{-11} - 10^{-10} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$. La dépendance en température de la vitesse peut être prise en compte en écrivant

$$k \approx 10^{-11} \times (T/\mu)^{1/2} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$$

où μ est la masse réduite du système.

Si une barrière d'activation q existe, on peut légitimement espérer qu'elle sera franchie avec une probabilité $\exp(-q/T)$. Cette barrière ne peut être nulle que si BC est un radical. D'une façon générale nous écrirons

$$k = A T^{1/2} \exp(-q/T)$$

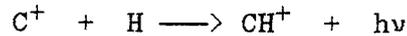
Lorsque la valeur de la barrière d'activation n'est pas connue, l'application de mesures à 300 K au milieu interstellaire est délicate. Par exemple on ne sait toujours pas si la réaction $N + OH \longrightarrow NO + H$ source principale de NO, possède ou non une faible barrière d'activation. Quelques familles de réactions sont rapides à 300 K et n'ont probablement pas d'énergie d'activation, comme les réactions avec les atomes de carbone.

III.b Association radiative

La collision de deux atomes provoque rarement la formation d'une molécule. L'énergie de la collision doit être évacuée sinon les atomes vont se séparer à nouveau. Dans les conditions interstellaires c'est seul un photon émis pendant la collision qui peut emporter cette énergie. Pour atteindre une efficacité maximum, la probabilité de transition radiative doit être aussi élevée que possible : cela nécessite une transition dipolaire électrique permise entre deux états électroniques de la future molécule. De plus, il est indispensable que l'état excité soit attractif pour que la distance minimale

d'approche soit la plus courte possible (la probabilité de transition est une fonction rapidement décroissante de la distance internucléaire).

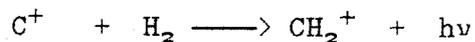
Un ion interstellaire qui satisfait à ces exigences est CH^+ qui peut se former par l'association radiative



car un état électronique excité attractif $^1\Pi$ est connecté à l'état fondamental $^1\Sigma^+$ par une transition autorisée. Le taux de cette association est de l'ordre de quelques $10^{-17} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$.

Le contre-exemple le plus remarquable est l'hydrogène moléculaire, pour lequel il n'existe pas de transition radiative probable entre les états $^3\Sigma_u$ et $^1\Sigma_g$: la formation de H_2 par association radiative de deux atomes H ne se produit qu'à un taux inférieur à $10^{-23} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$.

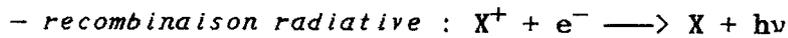
La situation est plus favorable si on a affaire à des molécules ou des radicaux ; les taux de réactions sont typiquement supérieurs d'un ordre de grandeur aux cas impliquant 2 atomes. Ainsi pour un système triatomique comme la réaction



introduite pour la première fois par Black et Dalgarno (1973) dans le but d'expliquer la formation de CH, et qui initie la synthèse des hydrocarbures et la formation de CO, Herbst (1982) calcule théoriquement un taux qui varie de $2 \times 10^{-16} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ à 100K jusqu'à $8 \times 10^{-16} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ à 10K. Dans les cas impliquant de grosses molécules, les taux peuvent se rapprocher du taux de Langevin (voir Annexe E, Table D).

L'association radiative de CH_3^+ avec H_2 est une réaction clef pour la formation du formaldéhyde H_2CO (via CH_3). Elle a été étudiée par Barlow et al. (1984) qui trouvent un taux de $1.8 \times 10^{-13} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ à 13K, c'est à dire deux ordres de grandeur plus faible que l'estimation de Adams et Smith (1978) d'après des mesures à température du laboratoire extrapolées à basse température. Mais récemment, Bates (1987) a donné une nouvelle interprétation des mesures et il trouve $3.2 \times 10^{-12} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ à 13K. H_2CO devrait être mieux reproduit par les modèles de chimie.

III.c Recombinaison électronique



On a longtemps cru que c'était le processus dominant de neutralisation. Dans beaucoup de cas, il est maintenant clair que les réactions moléculaires peuvent convertir des ions atomiques en ions moléculaires bien avant que la recombinaison n'ait lieu. Malgré tout, elle reste intéressante dans les nuages sombres où elle contrôle le degré d'ionisation en neutralisant les atomes d'énergie d'ionisation faible et peu réactifs (Si^+ , S^+ et les métaux Fe^+ , Mg^+ , ...).

Les sections efficaces d'ionisation permettent d'estimer le taux de recombinaison radiative par équilibre avec le processus inverse (Watson 1974)

$$\alpha(T) \approx 10^{-11} T^{1/2} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$$

La recombinaison peut se produire dans tous les niveaux d'énergie des atomes.



Un électron se recombine dans un état électronique excité répulsif qui peut dissocier la molécule. La synthèse de la plupart des molécules interstellaires observées se produit à partir de séquences de réactions entre ions positifs et atomes ou molécules neutres, suivies de la neutralisation des ions ainsi formés par recombinaison dissociative avec les électrons.

Un certain nombre de recombinaisons ont été étudiées en laboratoire dans une gamme de température variant de 95 à 300K : O_2^+ , NO^+ et NH_4^+ (Alge, Adams et Smith 1983), H_3^+ , HCO^+ , N_2H^+ et CH_5^+ (Adams, Smith et Alge 1984) et récemment HCS^+ (Millar, Adams, Smith et Clary 1985). Les variations des taux avec la température sont en $aT^{-0.5-0.7}$ avec a de l'ordre de $10^{-6}-10^{-7} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ nettement supérieur aux recombinaisons radiatives. Les rapports de branchement entre les différentes voies de dissociation sont mal connus.

III.d Ionisation par les rayons cosmiques

L'espace interstellaire est parcouru à grande vitesse par diverses particules (principalement des protons) provenant probablement des explosions de supernovae : c'est le rayonnement cosmique. On rappelle que l'ionisation de H et H₂ provoquée par le bombardement incessant des rayons cosmiques initie pour une bonne part la chimie interstellaire.

Le taux d'ionisation par les rayons cosmiques ζ n'est pas très bien déterminé. Une limite supérieure peut être néanmoins déduite de l'équilibre thermique au centre des nuages sombres. En effet, le chauffage de ces régions est assuré principalement par les rayons cosmiques, tandis que le refroidissement s'effectue par émission dans les transitions rotationnelles de CO. Il faut tenir compte dans ce calcul de l'effet des électrons secondaires éjectés par la première ionisation. Leur contribution au taux d'ionisation dépend de la composition chimique du gaz à travers la manière dont les générations successives d'électrons perdent leur énergie dans des collisions élastiques et inélastiques avec les atomes et molécules du gaz. Spitzer et Tomasko (1968) trouvent ainsi que l'ionisation de l'atome d'hydrogène par un flux de rayons cosmiques se produit à un taux $\zeta_{\text{H}} \approx 6.8 \times 10^{-19} \text{ s}^{-1}$. A partir des données de Cravens et Dalgarno (1978) - sections efficaces d'ionisation par un proton, probabilité d'ionisation par un électron secondaire, rapport de branchement entre ionisation et dissociation - extrapolées jusqu'à des énergies de $\approx 1 \text{ GeV}$, et du flux de rayons cosmiques d'énergie 10MeV-1GeV de Comstock et al. (1972), le taux d'ionisation et de dissociation de l'hydrogène moléculaire est (Viala 1986)

$$\zeta_{\text{H}_2}^{\text{i}} = \zeta_{\text{H}_2}^{\text{d}} \approx 1.1 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$$

Le flux de rayons cosmiques peut varier d'une région à l'autre dans la galaxie. ζ peut devenir alors un paramètre à déterminer ou ajuster dans les modèles. En bonne première approximation, il reste uniforme à travers les nuages moléculaires car les champs magnétiques n'empêchent pas les rayons cosmiques de pénétrer (Cesarsky et Völk 1978).

L'ionisation directe des autres atomes peut être également mentionnée,

bien que pour la majorité des constituants les effets des rayons cosmiques se traduisent de façon indirecte à travers H_3^+ et He^+ . Weisheit (1973) écrit les taux d'ionisation des éléments autres que l'hydrogène de la façon suivante :

$$\zeta_X = \zeta_H \sum_j q_j \times \frac{13.6}{u_j}$$

où q_j est le nombre d'électrons d'une couche d'énergie de liaison u_j (en eV). Ainsi, on estime les taux d'ionisation de He, C, N et O respectivement à 6.8×10^{-16} , 2.7×10^{-17} , 2.7×10^{-17} et $3.4 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ pour $\zeta_H = 6.8 \times 10^{-16} \text{ s}^{-1}$.

III.e Photodestruction

Les nuages interstellaires étant constamment exposés au rayonnement UV, les molécules peuvent être photo-dissociées ou photo-ionisées. Il est crucial de bien tenir compte de ces processus si l'on veut reproduire les abondances observées dans diverses régions du ciel.

Les figures I.1a-d ci-dessous illustrent les différents modes de dissociation d'une molécule diatomique dont le seul degré de liberté est la distance internucléaire. Le plus simple est l'absorption directe d'un photon de l'état électronique fondamental vers un état excité répulsif (Fig 1a). La désexcitation radiative étant comparativement lente, toute absorption se traduit par une dissociation. La section efficace de dissociation est continue en fonction de la longueur d'onde. La dissociation peut se produire de façon indirecte à travers des absorptions discrètes dans des états électroniques liés. Si l'état excité est traversé par un troisième état électronique répulsif dans une région où la fonction d'onde nucléaire est appréciable, la molécule peut se transférer à cet état et se dissocier (Fig 1b). Ce processus de prédissociation semble dominer la dissociation de CO; le spectre est alors une série de pics discrets élargis par la prédissociation. L'état excité peut également interagir avec le continuum d'un état répulsif comme le montre la figure I.1c. Ce processus à travers des états couplés joue un rôle important dans la dissociation de CH et OH. Les détails du spectre dépendent des propriétés de chaque molécule : il peut être formé d'un continuum sur lequel se superpose une série de résonances avec des formes asymétriques. Enfin,

comme le suggère la figure I.1d, l'absorption d'un photon dans un état électronique lié peut être suivie d'une désexcitation spontanée vers le continuum d'un état inférieur. Dans ce cas, le spectre présente une série de pics discrets ; c'est le cas de H_2 .

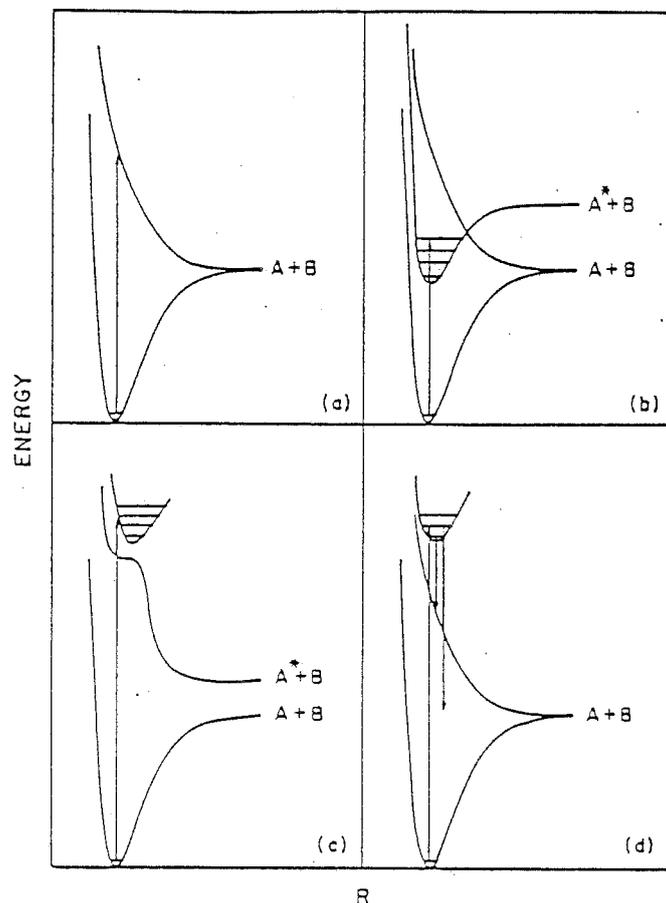


Figure I.1 Ces courbes d'énergie potentielle en fonction de la distance internucléaire R illustrent les processus de photodissociation directe (a), de prédissociation (b), de photodissociation par des états couplés (c), et de dissociation par désexcitation radiative spontanée (d) pour une molécule diatomique AB .

Les produits de dissociation de molécules atomiques peuvent être des atomes excités dont on peut observer l'émission. Quant aux molécules polyatomiques, elles peuvent se dissocier en divers fragments selon la longueur d'onde, et chacun de ces fragments peut être excité électroniquement, vibrationnellement ou rotationnellement.

Le taux de photodestruction d'une molécule par absorption continuum peut s'écrire

$$k_i^{\text{cont}}(r) = \int_{912}^{\lambda_s} J(\lambda, r) \sigma(\lambda) y_i(\lambda) d\lambda \quad (1)$$

où $\sigma(\lambda)$ représente la section efficace d'absorption, i un canal de destruction, $y_i(\lambda)$ la probabilité du canal i , et $J(\lambda, r)$ l'intensité radiative moyenne (en photons $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}\text{\AA}^{-1}$) au point r à l'intérieur du nuage.

Pour une molécule dissociée par un processus à deux photons, le taux de dissociation se calcule dans chaque raie d'absorption d'un niveau inférieur i vers un niveau supérieur s :

$$k_{is}(r) = p_i \frac{\pi e^2}{m_e c^2} f_{is} \int_{\text{Raie}} J(\lambda, r) \Phi(\lambda) \lambda d\lambda \quad (2)$$

où f_{is} est la force d'oscillateur de la raie et p_i la probabilité de désexcitation radiative qui dépend des propriétés moléculaires de façon mal établie. $\Phi(\lambda)$ représente le profil de la raie (voir Annexe A). Le taux de dissociation total est la somme sur toutes les raies d'absorption.

Des informations sur les sections efficaces de dissociation des molécules de base, en fonction de la longueur d'onde doivent être obtenues en laboratoire. L'absorption d'un photon peut provoquer une réémission, une dissociation ou une ionisation de la molécule, et la plupart des mesures d'absorption ne font pas la distinction entre ces phénomènes de sorte que des informations supplémentaires sont nécessaires pour déduire les sections efficaces de dissociation. Il existe un problème expérimental dans le fait que la plupart des molécules sont dissociées efficacement dans une région du spectre ($\lambda < 1100 \text{\AA}$) où il n'existe pas encore de source lumineuse suffisamment intense pour faire de la spectroscopie à haute résolution. On peut se référer à Lee (1984) et à Van Dishoeck (1986) pour une revue exhaustive des résultats les plus récents.

L'intensité du champ de rayonnement qui baigne le milieu interstellaire est un paramètre important de la chimie interstellaire. Ce champ est la superposition de trois composantes : 1) la lumière directe des étoiles, 2) la lumière diffusée par les poussières, 3) une composante diffuse de provenance extragalactique (Gondhalekar 1980). Habing (1968) et Draine (1978) en ont obtenu une estimation dans l'UV, Witt et Johnson (1973), Jura (1979) et Mathis et al. (1983) à des longueurs d'onde plus élevées. L'intensité décroît aux courtes longueurs d'onde et s'éteint à 912\AA (13.6eV) à cause de l'absorption de l'hydrogène atomique (voir Figure I.2).

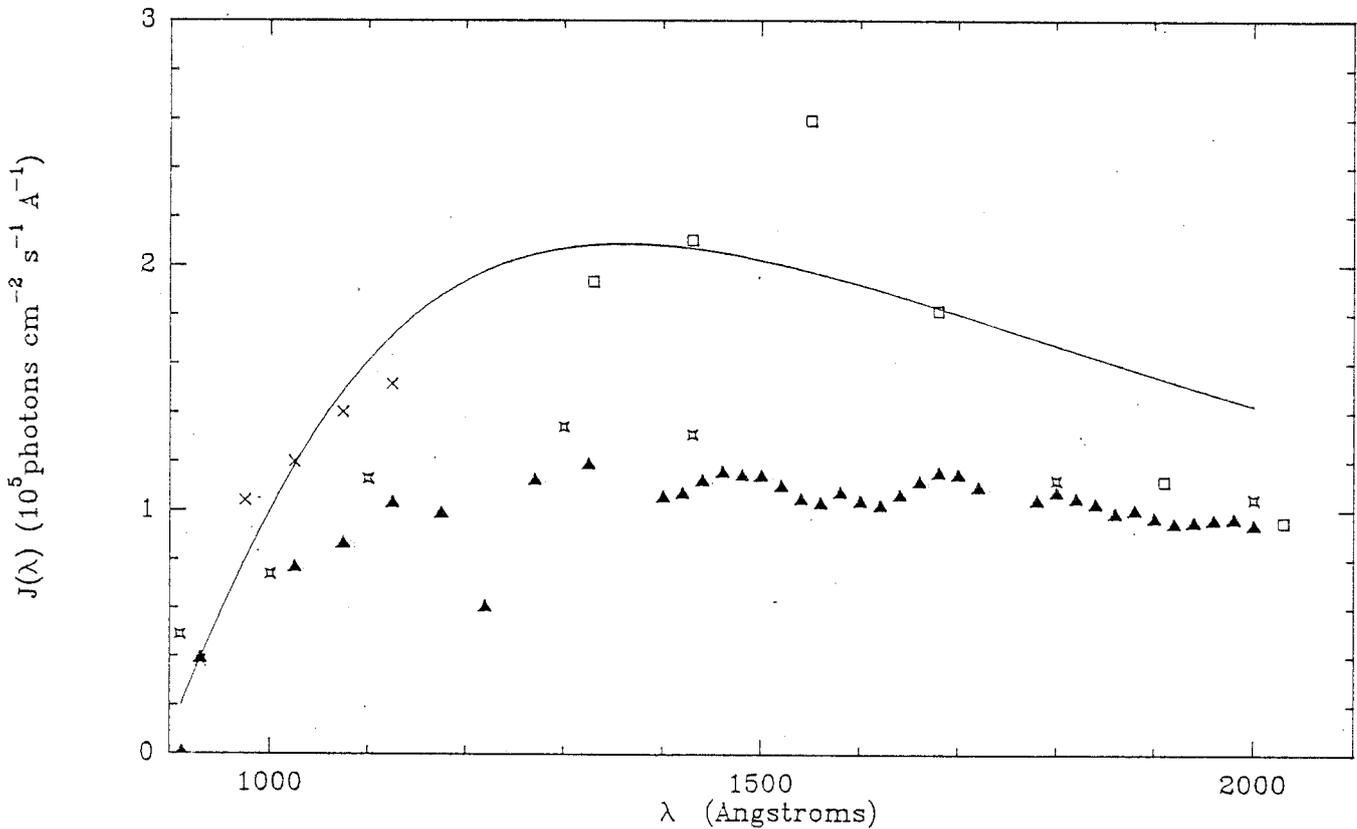


Figure I.9 Le champ de rayonnement interstellaire au voisinage solaire entre 912 et 2000 Å. La courbe pleine représente une expression analytique basée sur les observations de Witt et Johnson (1973) (x) et de Jura (1979) (□). D'autres déterminations plus récentes sont également présentées: Gondhalekar et al. (1980) (▲) et Mathis et al. (1983) (⊞).

Le problème de la détermination du champ de rayonnement interstellaire, qui nécessite une bonne connaissance de la distribution des étoiles chaudes et de la poussière dans la galaxie ainsi que les propriétés d'absorption et de diffusion des poussières dans le domaine UV, est loin d'être résolu et les diverses déterminations diffèrent par un facteur 2-3 (figure I.2). Toutefois le travail de Gondhalekhar *et al.* (1980) est le premier à compiler des observations dans quatre bandes UV sur tout le ciel rapportées par le télescope embarqué sur le satellite TD-1. Mathis *et al.* (1983) trouvent des résultats comparables et ce sont ces deux déterminations qui seront introduites dans les modèles.

Il faut garder en mémoire que l'intensité du rayonnement dû aux étoiles n'est pas uniforme dans le ciel. Il y a de fortes variations non seulement en latitude galactique mais également en longitude. Mathis *et al.* (1983) ont montré que la densité d'énergie totale du champ de rayonnement interstellaire est diminué d'un facteur 7 en passant d'une distance galactocentrique de 10 à 50 kpc.

A l'intérieur des nuages moléculaires, le champ de rayonnement est atténué par de nombreux facteurs (voir Annexe B). D'une part, les grains de poussière vont diffuser et absorber les photons, particulièrement à courte longueur d'onde. D'autre part, les espèces du gaz vont absorber le rayonnement : cette contribution est particulièrement importante lorsqu'une molécule se dissocie dans ses raies d'absorption (H_2 , CO), l'auto-protection est alors si efficace que les raies deviennent rapidement opaques et que la dissociation se produit pour l'essentiel très loin dans les ailes de la raie. Ceci explique la transition brutale entre régions d'hydrogène neutre atomique et d'hydrogène neutre moléculaire qui s'effectue aux alentours d'une colonne densité totale $N_H = N(H) + 2N(H_2) \approx 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$, la fraction $2N(H_2)/N(H)$ passant alors de 10^{-4} - 10^{-5} à 10^{-2} - 10^{-1} (Savage *et al.* 1977, voir Annexe C).

La table A de l'annexe E présente des taux de photodissociation. Ceux marqués "C" et "M" ont été calculés à l'aide des équations (1) et (2) qui supposent implicitement que les molécules sont initialement dans leur état d'énergie le plus bas, et du champ non atténué de Mathis *et al.* (1983). Les autres, marqués "U", sont pris chez différents auteurs qui utilisent le plus

souvent le champ de Habing (1968) et Draine (1978).

I.IV LES POUSSIÈRES INTERSTELLAIRES

Plusieurs faits observationnels ont permis de mettre en évidence de façon directe ou indirecte l'existence de petites particules solides dans le milieu interstellaire, et d'abord l'absorption généralisée de la lumière émise par les étoiles lointaines. Cette absorption est sélective : la matière obscure absorbe essentiellement les radiations aux courtes longueurs d'onde; par exemple la région centrale de la galaxie, obscurcie par la poussière interstellaire présente entre elle et l'observateur, montrera très peu d'étoiles sur une photographie prise avec un filtre bleu, alors qu'en infra-rouge elle fourmillera de milliers d'étoiles : c'est le phénomène de rougissement interstellaire. L'allure de la loi d'extinction (voir Figure I.3), pratiquement identique pour tous les nuages absorbants, peut s'expliquer par la présence des poussières interstellaires. Par ailleurs, l'épuisement partiel de certains éléments chimiques du gaz, la conversion de H en H₂ dans les nuages moléculaires, l'existence d'une composante diffuse du rayonnement interstellaire à toutes longueurs d'onde, visible et ultra-violet, etc. sont autant de présomptions favorables à l'existence de grains de poussières interstellaires. Notons que certaines étoiles sont entourées d'une enveloppe gazeuse renfermant de nombreuses poussières : étoiles jeunes (O ou B) environnées encore de résidus protostellaires, ou bien étoiles vieilles et instables, ayant éjecté du gaz condensé en poussières. Ces enveloppes de poussières circumstellaires rougissent les étoiles centrales et émettent un rayonnement thermique infra-rouge (les poussières refroidissent l'enveloppe en absorbant les rayons UV; c'est l'échauffement des poussières qui entraîne une émission IR).

Les grains interstellaires présentent un certain nombre de signatures typiques (en particulier entre 3 et 15 μ) qui ont été rapprochées de matériaux connus : silicates, grains de glace, hydrocarbures polycycliques... La spectroscopie infra-rouge à bord de ISO (Infrared Space Observatory) constituera l'outil idéal pour déterminer la composition et la quantité de poussières associées à chaque type d'objet.

IV.1 Courbes d'extinction et propriétés des poussières

Une estimation de la taille et du nombre de grains par unité de volume sur certaines lignes de visée peut se déduire de l'amplitude et de la variation en longueur d'onde de l'extinction interstellaire qu'on y observe. Cette extinction $A(\lambda)$ est estimée en mesurant le rapport de flux $F(\lambda)$ entre deux étoiles de type spectral et de classe de luminosité identiques (Nandy et al. 1975) et en calculant la différence de magnitude observée

$$\Delta m(\lambda) = -2.5 \log_{10} F(\lambda)/F'(\lambda) = \text{const.} + (A(\lambda) - A'(\lambda))$$

En choisissant une étoile de comparaison telle que $A'(\lambda) \ll A(\lambda)$ (parce qu'elle est très proche par exemple), et en effectuant le calcul à deux longueurs d'onde différentes pour éliminer la constante (qui varie comme le logarithme du rapport des distances), on obtient l'excès de couleur

$$E(\lambda_1, \lambda_2) \equiv \Delta m(\lambda_1) - \Delta m(\lambda_2) = A(\lambda_1) - A(\lambda_2)$$

Si $\lambda_1 = 4350\text{\AA}$ et $\lambda_2 = 5550\text{\AA}$ (bandes photométriques bleue B et visible V), alors $E(\lambda_1, \lambda_2) \equiv E(B-V)$. Si $E(B-V) > 0$, cela veut dire que l'éclairement dans le bleu est, relativement à l'éclairement dans le visible, moins fort que pour le spectre de référence : on parlera alors d'un rougissement excessif du spectre correspondant. Afin de faciliter la comparaison des courbes d'extinction pour différentes paires d'étoiles, on normalise les courbes à $E(B-V)$ et on trace (voir Figure I.3)

$$\frac{E(\lambda-V)}{E(B-V)} = \frac{A(\lambda)}{E(B-V)} - \frac{A_V}{E(B-V)}$$

La comparaison entre extinction observée et extinction prédite se fait à travers la théorie de diffusion de Mie (Mie 1908, Debye 1909, Born et Wolf 1970). Cette théorie relie l'efficacité de la diffusion de la lumière par une particule isolée aux constantes optiques et au rayon a de cette particule supposée sphérique.

L'extinction interstellaire entre le continuum Lyman et $1\mu\text{m}$ de longueur d'onde est reproduite par un mélange de grains de silicate et de graphite

obéissant à la distribution de taille suivante (Lillie et Witt 1976, Mathis et al.1977) :

$$f(a) \propto a^{-3.5} \quad 0.01 \mu\text{m} \leq a \leq 0.25 \mu\text{m}$$

$$= 0 \quad \text{ailleurs}$$

à la fois pour le silicate et le graphite. Les propriétés de diffusion de ces grains sont un albédo $\omega_\lambda \approx 0.4-0.6$ et un coefficient d'anisotropie $g_\lambda \approx 0.5-0.6$.

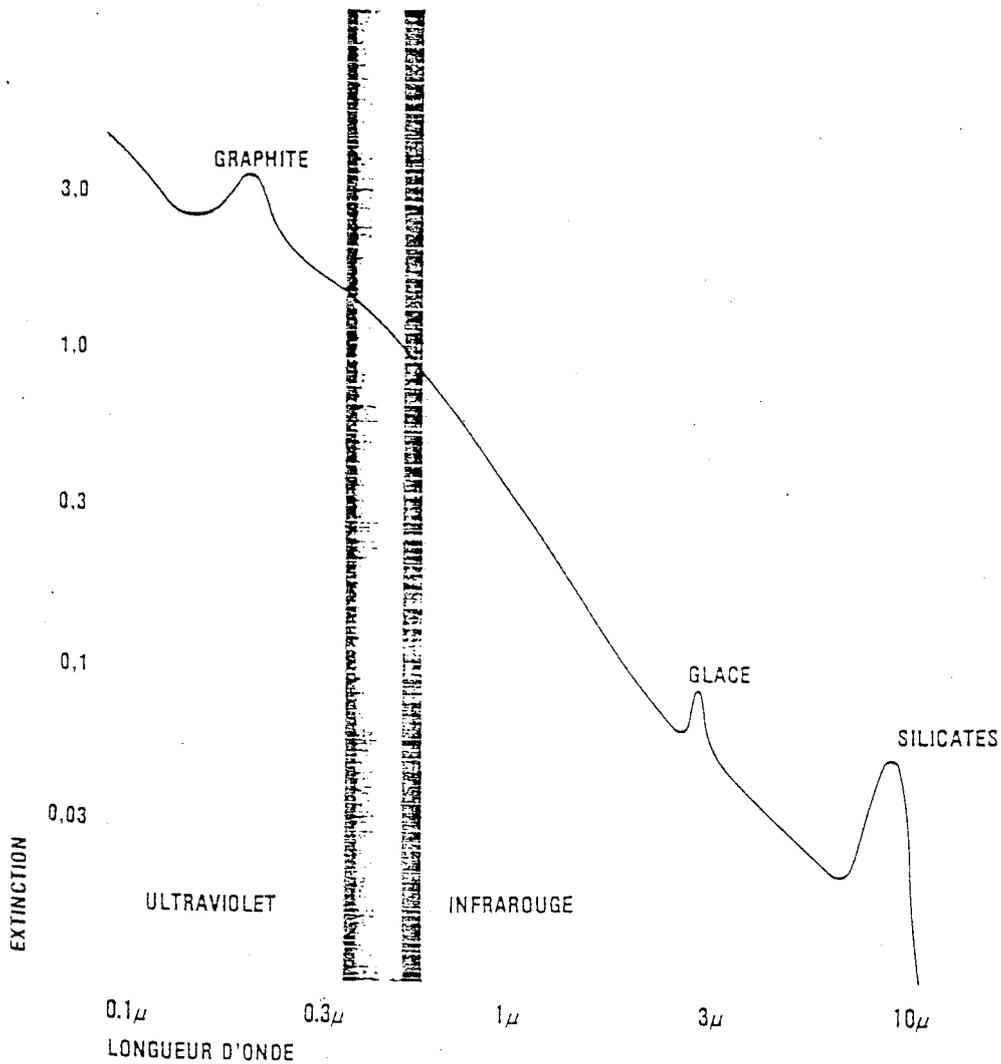


Figure I.3 Courbes d'extinction $E(\lambda-V)/E(B-V)$ en fonction de la longueur d'onde.

Les observations montrent que le rapport de l'extinction totale à l'extinction sélective $R_V \equiv A_V / E(B-V)$ a une valeur canonique de 3.1 dans les nuages diffus. Pour les nuages sombres ce rapport peut être plus grand ; ainsi sur la ligne de visée de HD 147889, une étoile située derrière le nuage ρ Ophiuchi avec une extinction visuelle d'environ 5 magnitude, $R_V \approx 4.2$. Dans certains cas comme HD 29647 (voir chapitre V), la courbe d'extinction ne présente pas de bosse à λ 2200 Å (Snow et Seab 1980). Tous ces faits peuvent être interprétés théoriquement par des modèles de grains coeur-manteau dans les nuages sombres, dans lequel le coeur, identique à la poussière du milieu diffus, a accreté des particules du gaz.

Il faut noter également qu'en 1984 (Léger et Puget 1984), une nouvelle composante de la matière interstellaire, formée par des molécules d'Hydrocarbures Polycycliques Aromatiques, a été suggérée par la similitude entre les bandes infra-rouges en émission du milieu interstellaire dites "non-identifiées" et le spectre IR d'une seule de ces molécules (le coronène : $C_{24}H_{12}$). L'existence d'une telle composante pourrait avoir des conséquences sur la courbe d'extinction (bandes diffuses, 2200 Å, ...) ou sur le chauffage du milieu interstellaire (voir plus bas).

En conclusion, on peut dire que l'extinction affectant la lumière des étoiles situées derrière les nuages absorbant, est le résultat de l'absorption et de la diffusion par des particules solides de composition et de taille variées. Le rougissement est, en général, proportionnel à l'absorption totale causée par ces nuages; si l'éclat intrinsèque de l'étoile est connu (grâce à son spectre par exemple), la mesure du rougissement permet d'évaluer sa distance. Enfin, cette diffusion de la lumière a des conséquences sur le champ de rayonnement interstellaire dans toutes les longueurs d'onde UV et visible, et sur l'observation de nébuleuses par réflexion brillantes à proximité ou à l'intérieur de nuages.

IV.2 Déplétion des éléments de la phase gazeuse

De nombreuses observations de nuages sombres (Wooten et al. 1980 : L134, Ungerechts et al. 1980 : L183, Snell 1979 : TMC1, Walmsley et al. 1980 : TMC2) indiquent qu'environ 10% du carbone seulement reste dans la phase gazeuse. Tarafdar et al. (1983) suggèrent à partir d'une collection

d'observation, que la plupart des éléments sont déplétés dans les nuages interstellaires et que cette déplétion croît avec la colonne densité d'hydrogène.

Ces déplétions pourraient être dues aux grains de poussières qui accrètent des particules du gaz dès que la densité devient assez importante. Boland et de Jong (1982) tentent d'expliquer les taux de déplétion dans les coeurs de nuages moléculaires par un modèle dans lequel les globules de gaz et de poussières se déplacent à la vitesse turbulente observée : chaque fois qu'un globule atteint les couches superficielles du nuage, les manteaux des grains accrétés dans le coeur du nuage, s'évaporent à cause de l'échauffement du à la lumière visible, ou sont photo-éjectés par les photons UV du champ interstellaire. Boland et de Jong (1984) montrent que les éléments accrétés sur les manteaux des grains dans les parties denses du nuage le sont sous forme atomique principalement ou de CO. Ils présentent également quelle pourrait être la composition chimique de ces manteaux si des réactions de surface se produisent : les molécules dominantes seraient alors les molécules saturées H_2 , CH_4 , H_2CO et NH_3 , car tout atome ou radical réagit avec l'hydrogène atomique ou moléculaire.

IV.3 Chimie

Si les molécules ci-dessus étaient rendues au gaz, les grains de poussières joueraient alors un rôle de catalyseur dont l'efficacité est à comparer aux réactions chimiques purement gazeuses (voir SI). La formation de molécules sur les grains est souvent absente des modèles de chimie, à l'exception de celle de H_2 (Hollenbach, Werner et Salpeter 1971, Barlow et Silk 1976). Des approches antérieures ont concerné CH (McCrea et McNally 1960) et la formation d'eau, d'ammoniac et de divers hydrocarbures bien avant l'observation de la moindre molécule dans le milieu interstellaire (Williams 1968).

En 1977, Pickles et Williams présentent un modèle simple de formation de molécules interstellaires à la surface des grains, formation qui procède par plusieurs étapes : (i) les particules du gaz heurtent la surface des grains, certaines y restent collées ; (ii) elles se déplacent

sur la surface avec une facilité déterminée par la nature de la surface et la température du grain. (iii) les atomes adsorbés restent liés et interagissent pour former des radicaux ou des molécules. (iv) les molécules sont éjectées de la surface, soit par le résultat d'une stabilisation, soit par photo-éjection ou évaporation thermique (chauffage par les rayons cosmiques ou les photons UV).

Plus récemment d'Hendecourt *et al.* (1985) développent un modèle dépendant du temps qui en plus tient compte de façon précise de l'interaction entre les processus à la surface des grains et en phase gazeuse.

Il est toutefois surprenant qu'il n'y ait aucun résultat observationnel réel en faveur de la participation des grains à la chimie (excepté H_2). En fait, les abondances relatives de beaucoup de petites espèces polyatomiques sont raisonnablement reproduites par des modèles de chimie en phase gazeuse (Herbst 1984, Millar et Freeman 1984a,b, Leung et al. 1984).

Aussi dans nos modèles, nous n'avons pris en compte que la formation de H_2 à la surface des grains avec un taux qui peut s'écrire (Hollenbach, Werner et Salpeter 1971) :

$$\frac{dn(H_2)}{dt} = Rn(H) = 0.5 \gamma \langle v_H \rangle \sigma_g n_g n(H) \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$$

où n_g , $n(H)$ sont les densités de grains et d'atomes H respectivement, σ_g la section géométrique moyenne d'un grain et

$$\langle v_H \rangle = (8kT/\pi m_H)^{1/2}$$

est la vitesse thermique moyenne des atomes H. γ est un facteur sans dimension qui représente la fraction d'atomes H qui forment une molécule H_2 après collision avec un grain. Dans des conditions normales, après Hollenbach, Werner et Salpeter (1971) nous adoptons $\gamma = 1$. Si l'on suppose que les grains sur lesquels se forme H_2 sont également responsables de l'extinction de la lumière dans le milieu interstellaire, alors la section moyenne d'un grain par unité de volume $n_g \sigma_g$, est reliée à la profondeur optique τ_v et à la colonne densité totale d'hydrogène N_H sur la ligne de

visée par la relation

$$\frac{n_g \sigma_g}{n_H} = \frac{k_V}{n_H} = \frac{\tau_V}{N_H} = \frac{A_V}{1.086 N_H}$$

où k_V est le coefficient d'extinction dans le visible, défini par $k_V/n_H = A_V/1.086 N_H$ et déduit de la relation entre la colonne densité d'hydrogène et l'excès de couleur établie par Bohlin *et al.* (1978) qui constatent ainsi un rapport poussière/gaz pratiquement constant dans le milieu interstellaire diffus $N_H/E(B-V) = 5.8 \cdot 10^{21} \text{cm}^{-2} \text{mag}^{-1}$, et du rapport $R_V = A_V/E(B-V) \approx 3.1$. Ainsi, on obtient un taux de formation de H_2 sur les grains

$$R = 3.6 \times 10^{-18} n_H T^{1/2} \text{ s}^{-1}$$

IV.4 Thermostat

Le processus le plus efficace de chauffage en milieu diffus ou en bordure de nuage sombre, est probablement l'effet photo-électrique sur les grains de poussières (de Jong 1977, 1980) : les électrons ainsi émis chauffent le gaz par collision. Le taux d'éjection d'électrons dépend de la charge du grain qui, à son tour, est déterminée par l'abondance électronique, la température et le champ UV. Il faut remarquer que si les grains sont très chargés, la barrière que devra vaincre l'électron pour s'échapper sera très élevée : plus les grains sont chargés positivement, moins le chauffage est efficace.

Les mécanismes de refroidissement les plus importants sont l'émission de C^+ à $150 \mu\text{m}$ (transition $^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$) pour les nuages relativement chauds ($T > 100\text{K}$, Flower *et al.* 1977) et celle de CO par ses raies de rotations dans un gaz moléculaire à $T < 100\text{K}$ (Goldsmith *et al.* 1978).

D'autres mécanismes (chauffage par les rayons cosmiques, par l'ionisation du carbone, photodissociation de H_2 , émission de OI à $63 \mu\text{m}$) sont moins significatifs. Pour des densités $> 10^5 \text{cm}^{-3}$, le chauffage du gaz par des collisions grains-molécules peut devenir important si la poussière est plus chaude que le gaz (Falgarone *et al.* 1985).

Suivant de Jong (1977), Goldsmith et Langer (1978) et de Jong *et al.* (1980), Bachiller (1985) fait un calcul simple du profil de température en bord de nuage moléculaire où CO reste optiquement mince, et il constate que

- la température augmente considérablement vers l'extérieur à partir de la zone de transition C⁺/CO
- pour des flux UV très intenses, la température présente un maximum puis une décroissance au bord du nuage. Ceci est provoqué par la saturation de charge sur les grains : quand les grains ont une charge proche de la charge maximale, le chauffage par effet photoélectrique est peu important alors que le refroidissement par C⁺ continue à être efficace.

IV.5 *Les grains circumstellaires*

Les propriétés et la distribution de la poussière dans les enveloppes circumstellaires et leurs relations avec l'émission infra-rouge sont présentées par Zuckerman (1980). Les couches profondes des ces enveloppes, juste au dessus de la photosphère de l'étoile ($r \approx 10^{14}$ cm), pourraient être le berceau des grains interstellaires, et une des questions centrales, fondamentale pour la structure des enveloppes, est de comprendre et situer les conditions de condensation de ces grains. C'est un problème difficile car la physique de base exige une modélisation claire des conditions dans les enveloppes qui prendrait en compte la composition chimique exacte du gaz, les effets hors équilibres (voir Salpeter 1974, par exemple) et l'interaction avec le rayonnement (McCabe et al. 1979). La formation des poussières est ainsi très étroitement associée au transfert de rayonnement en IR, et également à la dynamique des enveloppes : la pression de radiation sur les grains est très probablement le processus essentiel d'accélération du vent stellaire, des instabilités dynamiques peuvent favoriser des inhomogénéités de température et de densité favorables localement à la formation de grains.

La quantité totale de poussière est connue dans un certain nombre

d'objets avec une assez bonne précision (Werner 1985) et elle est comparable à celle du milieu interstellaire (1% de la masse totale). Elle est importante pour évaluer l'extinction du rayonnement UV à l'intérieur des enveloppes; toutefois on dispose de peu d'information sur la distribution de taille et les propriétés de diffusion de ces grains.

Références

- Adams, N.G., Smith, D. : 1978, *Chem. Phys. Letters* 54, 530
- Adams, N.G., Smith, D., Millar, T.J. : 1985, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 211, 857
- Adams, N.G., Smith, D., Clary, D.C. : 1985, *Astrophys. J.* 296, L31
- Alge, E., Adams, N.G., Smith, D. : 1983, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* 16, 1433
- Anicich, V.G., Huntress, W.T., Futrell, J.H. : 1976, *Chem. Phys. Letters* 40, 233
- Bachiller, R. : 1985, Thèse d'Etat, Université Médicale et Scientifique de Grenoble
- Barlow, M.J., Silk, J. : 1976, *Astrophys. J.* 207, 131
- Barlow, S.E., Dunn, G.H., Schauer, M. : 1984, *Phys. Rev. Letters* 52, 902
- Bates, D.R. : 1982, *Proc. Roy. Soc. London A* 384, 289
- Bates, D.R. : 1987, *Astrophys. J.* 312, 363
- Black, J.H., Dalgarno, A. : 1973, *Astrophys. J.* 15, L79
- Bohlin, R.C., Savage, B.D., Drake, J.K. : 1978, *Astrophys. J.* 224, 132
- Bok, B.J. : 1977, *Publ. Astron. Soc. Pacific* 89, 597
- Boland, N., de Jong, T. : 1982, *Astrophys. J.* 261, 110
- Boland, N., de Jong, T. : 1984, *Astron. Astrophys.* 134, 87
- Born, M., Wolf, E. : 1970, *Principles of Optics*, New York: Pergamon Press
- Burton, W.B., Gordon, M.A. : 1978, *Astron. Astrophys.* 63, 7
- Celli, F., Weddle, G., Ridge, D.P. : 1980, *J. Chem. Phys.* 73, 801
- Cesarsky, C.J., Völk, H.J. : 1978, *Astron. Astrophys.* 70, 367
- Chesnavich, W.T., Su, T., Bowers, M.T. : 1980, *J. Chem. Phys.* 72, 2641
- Clary, D.C. : 1985, *Molec. Phys.* 54, 605
- Comstock, G.M., Hsich, K.C., Simpson, J.A. : 1972, *Astrophys. J.* 173, 691
- Cravens, T.E., Dalgarno, A. : 1978, *Astrophys. J.* 219, 750
- Debye, P.V. : 1909, *Ann. Physik* 30, 57
- De Jong, T. : 1977, *Astron. Astrophys.* 55, 137
- De Jong, T. : 1980, *Highlights of Astronomy*, 5, 301
- D'Hendecourt, L.B., Allamandola, L.J., Grim, R.J.A., Greenberg, J.M. : 1985, *Astron. Astrophys.* 158, 119
- Dickey, J.M., Salpeter, E.E., Terzian, Y. : 1978, *Astrophys. J. Supp. Series* 36, 77
- Draine, B.T. : 1978, *Astrophys. J. Supp. Series* 36, 595
- Duley, W.W., Williams, D.A. : 1984, *Interstellar Chemistry*, Academic Press, London
- Elias, J.H. : 1978, *Astrophys. J.* 224, 857
- Falgarone, E., Puget, J.L. : 1985, *Astron. Astrophys.* 142, 157
- Flower, D.P., Launay, J.M. : 1977, *J. Phys. B* 10, L229

- Frerking, M.A., Langer, W.D., Wilson, R.W. : 1982, *Astrophys.J.* 262, 590
- Goldsmith, P.F., Langer, W.D. : 1978, *Astrophys.J.* 222, 881
- Gondhalekar, P.M., Phillips, A.P., Wilson, R. : 1980, *Astron.Astrophys.* 85, 272
- Habing, H.J. : 1968, *Bull.Astr.Inst.Neth.* 19, 421
- Herbst, E. : 1978, *Astrophys.J.* 222, 508
- Herbst, E. : 1982, *Astrophys.J.* 252, 810
- Herbst, E. : 1984, *Astrophys.J. Supp Series* 53, 41
- Herbst, E. : 1986, *Astrophys.J.* 306, 667
- Hollenbach, D., Werner, M.W., Salpeter, E.E. : 1971, *Astrophys.J.* 163, 165
- Huntress, W.T. : 1977, *Astrophys.J. Supp. Series* 33, 435
- Hyland, A.R. : 1981, *IAU Symposium* 96, 125, Reidel, Dordrecht
- Iwan, P. : 1980, *Astrophys.J.* 239, 316
- Jura, M. : 1979, *Astrophys.J.* 220, L89
- Kerr, F.J., Knapp, G.R. : 1974, *Astron.Astrophys.* 35, 361
- Knapp, G.R., Morris, M. : 1985, *Astrophys.J.* 292, 640
- Lee, L.C. : 1984, *Astrophys.J.* 282, 172
- Léger, A., Puget, J.L : 1984, *Astron.Astrophys.* 137, L5
- Leung, C.M., Herbst, E., Huebner, W.F. : 1984, *Astrophys.J. Supp. Series* 56, 231
- Lias, S.G., Liebman, J.F., Lewin, R.D. : 1984, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 13, 695
- Lillie, C.F., Witt, A.N. : 1976, *Astrophys.J.* 208, 64
- Mac Cabe, E.M., Smith, R.C., Clegg, R.E.S. : 1979, *Nature* 281, 263
- Mac Crea, W.H., Mac Nally, D. : 1960, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 121, 238
- Marquette, J.B., Rowe, B.R., Dupeyrat, G., Roueff, E. : 1985, *Astron.Astrophys.* 147, 115
- Mathis, J.S., Rimpl, W., Nordsick, K.H : 1977, *Astrophys.J.* 217, 425
- Mathis, J.S., Metzger, P.G., Panagia, N. : 1983, *Astron.Astrophys.* 128, 212
- Mie, G.V. : 1908, *Ann. Physik* 25, 377
- Millar, T.J., Freeman, A. : 1984, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 207, 405
- Millar, T.J., Freeman, A. : 1984, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 207, 425
- Millar, T.J., Adams, N.G., Smith, D., Clary, D.C. : 1985, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 216, 1025
- Nandy, K., Thompson, G. I., Jamar, C., Monfils, A., Wilson, R. : 1975,
Astron. Astrophys. 44, 195
- Pickles, J.B., Williams, D.A. : 1977, *Astrophys. Space Sci.* 52, 443
- Rowe, B.R., Marquette, J.B., Dupeyrat, G., Fergusson, E.E. : 1985,
Chem. Phys. Letters 113, 403
- Sakimoto, K., Takayanagi, K. : 1980, *J. Phys. Soc. Japan* 48, 2076
- Salpeter, E.E. : 1974, *Astrophys.J.* 193, 579

- Savage, B.D., Bohlin, R.C., Drake, J.F., Budich, W. : 1977, *Astrophys. J.* 216, 291
- Smith, D., Adams, N.G., Millar, T.M. : 1978, *J. Chem. Phys.* 69, 308
- Smith, D., Adams, N.G. : 1981, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 197, 377
- Snell, R.L. : 1979, Thèse Université de Columbia
- Snow, T.P., Seab, C.G. : 1980, *Astrophys. J.* 242, L83
- Spitzer, L. Jr., Tomasko, M.G. : 1968, *Astrophys. J.* 152, 971
- Su, T., Chesnavich, W.J. : 1982, *J. Chem. Phys.* 76, 5183
- Tarafdar, S.P., Prasad, S.S., Huntress, W.T. Jr. : 1983, *Astrophys. J.* 267, 156
- Thaddeus, P., Guélin, M., Linke, R.A. : 1981, *Astrophys. J.* 246, L41
- Ungerrechts, H., Walmsley, C.M., Winnewisser, G. : 1980, *Astron. Astrophys.* 88, 259
- Van Dishoeck, E.F. : 1986, dans *Astrochemistry* p51
- Viala, Y.P. : 1986, *Astron. Astrophys. Supp. Series* 64, 391
- Walmsley, C.M., Winnewisser, G., Tölle, F. : 1980, *Astron. Astrophys.* 81, 245
- Watson, W.D. : 1974, *Atomic and Molecular Physics and the Interstellar Matter*,
R. Ballian, P. Encrenaz et J. Lequeux (eds), p177
- Weisheit, J.C. : 1973, *Astrophys. J.* 185, 877
- Werner, G. : 1985, dans *Mass Loss of Red Giants*, M. Morris et B. Zuckerman (eds)
(Dordrecht : Reidel)
- Williams, D.A. : 1968, *Astrophys. J.* 151, 935
- Witt, A.N., Johnson, M.W. : 1973, *Astrophys. J.* 181, 363
- Wooten, A.W., Boyzan, E.P., Garrett, D.B., Loren, R.B., Snell, R.L. : 1980,
Astrophys. J. 239, 844
- Young, J.S., Goldsmith, P.F., Langer, W.D., Wilson, R.W., Carlson, E.R. : 1982,
Astrophys. J. 261, 513
- Zuckerman, B. : 1980, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 18, 263

CHAPITRE II

Modélisation de sources moléculaires

Le programme informatique

PREMIERE PARTIE : DANS LES NUAGES INTERSTELLAIRES

II. I POSITION DU PROBLEME

Les régions du ciel où l'on détecte de l'émission moléculaire présentent souvent l'intérêt d'être des régions de formation d'étoiles : sur la base d'une dispersion interne de vitesse de l'ordre de 0.5-1 km/s, Larson (1973) a suggéré que beaucoup de nuages sombres autour de la Voie Lactée sont en effondrement gravitationnel. Dans de nombreux cas, la largeur des raies des isotopes de CO ne peut être interprété seulement en termes de température ou de microturbulence : Lequeux (1977) argumente en faveur de mouvements d'ensemble à grande échelle, compatibles avec des effondrements (ou des expansions). Plus récemment, Villere et Black (1980, 1982) confirment qu'un certain nombre de propriétés observationnelles de nuages sombres sont en bon accord avec un modèle de nuage en effondrement.

La croissance d'instabilités à l'intérieur des grands complexes moléculaires ($M \approx 2 \times 10^5 M_{\odot}$, $R \approx 50 \text{ pc}$) peut conduire à la fragmentation en nuages de dimensions inférieures (qqes $10^2 M_{\odot}$, $\approx 2 \text{ pc}$), plus finement en condensations ($1-20 M_{\odot}$, $\approx 0.2 \text{ pc}$), et peut-être à l'effondrement gravitationnel en proto-étoiles. Cet effondrement est contrarié par la compression thermique (à partir d'une certaine opacité), la rotation ou la pression magnétique. Certaines instabilités thermo-chimiques liées à la formation-destruction de H_2 , de CO ou de H_2O peuvent également jouer un rôle important à diverses étapes de l'évolution d'un nuage (Oppenheimer et Dalgarno 1975, Hutchins 1976, Glassgold et Langer 1976).

L'évaluation théorique des abondances moléculaires devrait ainsi s'effectuer idéalement dans un cadre de nuage en pleine évolution dynamique, c'est-à-dire qui se soumet aux équations de conservations fondamentales.

I.1 L'hydrodynamique

Par exemple, un nuage sphérique homogène, en effondrement gravitationnel, dans lequel on ne tient pas compte des processus de transport microscopiques associés aux forces de viscosité et de la conduction thermique, de même que des effets de la rotation et du champ magnétique (Gerola et Glassgold 1978), devrait obéir aux équations hydrodynamiques suivantes :

$$\text{Conservation de la masse :} \quad \frac{d\rho}{dt} + \rho \vec{v} \cdot \vec{v} = 0 \quad (1)$$

$$\text{Conservation de la quantité de mouvement :} \quad \rho \frac{d\vec{v}}{dt} = - \vec{v} p - \rho \vec{v} \Phi \quad (2)$$

où ρ est la densité locale en g/cm^3 , \vec{v} est la vitesse du fluide dans le repère du centre de masse, p la pression et Φ le potentiel gravitationnel défini par la loi de Poisson

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho \quad (3)$$

où $G = 6.67 \times 10^{-8} \text{cgs}$ est la constante universelle de la gravitation et l'opérateur $d/dt = \partial/\partial t + \vec{v} \cdot \vec{v}$. La description Eulerienne ci-dessus regarde l'évolution du fluide en une collection de points fixes ; dans un formalisme Lagrangien dans lequel on suit les particules du fluide, ces équations font apparaître les variables indépendantes m , la masse à l'intérieur d'une interface sphérique, et le temps t :

$$1 - 4\pi r^2 \rho \frac{\partial r}{\partial m} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{Gm}{r^2} + \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = 0 \quad (5)$$

Le rayon r , la densité ρ et la pression p sont des variables dépendantes.

I.2 La chimie

L'hydrodynamique et la chimie sont fortement couplées car la pression du gaz est reliée à la masse moléculaire moyenne μ et à la température T par l'équation d'état du gaz

$$p = \frac{R}{\mu} \rho T \quad (6)$$

où R est la constante des gaz parfaits, et

$$\frac{1}{\mu} = \sum_i \frac{x_i}{m_i} \quad (7)$$

x_i et m_i sont l'abondance et la masse de la i -ème espèce du gaz. Le profil de température s'obtient en conservant l'énergie interne du nuage (bilan thermique) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{p}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \Gamma_i - \sum_j \Lambda_j \quad (8)$$

où Γ_i est le taux de chauffage dû au processus i (effet photoélectrique, rayonnement cosmique, formation de H_2, \dots) et Λ_j le taux de refroidissement du réfrigérant j (C^+ , C , CO, \dots). Les espèces C^+ , C et CO étant fortement impliquées dans le refroidissement du nuage, et des processus chimiques pouvant intervenir dans le chauffage, cette équation (8) doit être résolue simultanément avec les équations d'évolution chimique (conservation du nombre de particules) qui contrôlent les abondances :

$$n \frac{dx_i}{dt} = P_i - L_i \quad (9)$$

où $n = (\rho/\mu m_H)$ est la densité totale en nombre de particules par cm^3 , P_i et L_i représentent tous les termes de production et de destruction en $cm^{-3}s^{-1}$. Selon la position dans le nuage, les photoprocessus contribuent plus ou moins à la destruction. l'atténuation du rayonnement UV incident à

l'intérieur du nuage est donnée par l'équation de transfert :

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = S_\nu - I_\nu \quad (10)$$

où I_ν est l'intensité spécifique du rayonnement à la fréquence ν , τ_ν l'opacité à cette fréquence et S_ν la fonction source du milieu.

Il faut insister sur le fait que les trois équations de bilan thermique (8), d'évolution chimique (9) et de transfert de rayonnement (10) sont très fortement couplées :

- la température $T(r)$ du gaz en un point r dépend de l'intensité du rayonnement en ce point (chauffage photoélectrique), de même que des abondances de C^+ , C et CO (refroidissement à travers les raies de ces trois espèces);
- les abondances moléculaires $x_i(r)$ en un point r du nuage dépendent du rayonnement en ce point (photodestruction) et de la température par les réactions chimiques;
- le rayonnement est atténué en grande partie par le gaz moléculaire (H_2 , CO , C , ...)

I.3 Diverses approches

La résolution complète du problème (résolution simultanée des équations (4)-(5)-(8)-(9)-(10)) est un travail difficile qui demande un gros investissement informatique (voir Taradfar *et al.* 1985). D'ailleurs la plupart des études se sont focalisées sur un aspect spécifique du problème. Un certain nombre de travaux se sont préoccupés des aspects purement dynamiques en résolvant les équations (1) et (2), et en introduisant éventuellement des effets magnétiques, de rotation ou de la turbulence (voir Woolfson 1979, Villere et Black 1980, Elmegreen 1981, Henriksen 1986). Parallèlement le calcul des abondances moléculaires peut se faire en négligeant la dynamique et en résolvant tout ou partie des équations

(8)-(9)-(10). Beaucoup ont essayé de prédire les abondances moléculaires par l'intermédiaire d'un entrelacement compliqué de réactions (voir Solomon et Klemperer 1972, Herbst et Klemperer 1973, Iglesias 1977, Mitchell *et al.* 1978, Prasad et Huntress 1980, Hennig 1983, Graedel *et al.* 1982, Watt 1983, Millar et Freeman 1984). Ces études ignorent les effets des photons UV destructeurs, c'est à dire la dépendance des abondances avec la position dans le nuage. Des modèles détaillés d'équilibre chimique qui introduisent un traitement spatial du transfert de rayonnement, ont été élaboré par Black et Dalgarno (1973, 1977) et Black *et al.* (1978) pour des nuages diffus, par Viala et Walmsley (1976) pour des nuages denses. D'autres (Glassgold et Langer 1974, 1976, Clavel, Viala et Bel 1978, Federman *et al.* 1980) ont étudié en détail l'équilibre thermique dans des modèles isobariques ou de densité uniforme, sur la base d'une description limitée de la chimie et d'un traitement approximatif du transfert de rayonnement. Récemment, Mann et Williams (1985) ont étudié la chimie couplée à l'équilibre thermique. Federman, Glassgold et Kwan (1979) ont traité précisément le transfert de rayonnement, alors que de Jong (1980), de Jong, Dalgarno et Boland (1980) et Boland et de Jong (1984) ont présenté des modèles hydrostatiques en équilibre thermique et supportés par la pression turbulente, détaillés dans les processus chimiques mais approximatifs dans le transfert radiatif.

I.4 L'équilibre chimique

Parmi les travaux précédents, un certain nombre laisse évoluer leur système de réactions chimiques alors que d'autres se placent dans l'hypothèse de l'équilibre chimique. Dans les conditions du milieu interstellaires, cette dernière hypothèse est-elle justifiée?

Une échelle de temps dynamique à l'intérieur d'un nuage interstellaire peut s'exprimer en termes de longueur caractéristique L et de vitesse caractéristique V par

$$t_{\text{dyn}} = \frac{L}{V} \approx 10^5 \text{ an} \frac{L/\text{lpc}}{V/10\text{kms}^{-1}} \quad (11)$$

Si une région est en effondrement gravitationnel, une échelle de temps

caractéristique est le temps de chute libre qui, pour une sphère de densité n s'exprime par (Spitzer 1968) :

$$t_{\text{chut}} = \sqrt{\frac{3\pi}{32Gn}} \approx 4.44 \times 10^7 n^{-1/2} \text{ ans} \quad (12)$$

Les nuages ont en fait une énergie interne thermique, turbulente et certainement une pression magnétique pour les soutenir, de sorte que leur durée de vie est bien supérieure à t_{chut} .

L'hypothèse d'équilibre chimique va ainsi être raisonnable pour des nuages diffus où les photoprocessus contrôlent la chimie avec des échelles de temps de l'ordre de 10^3 - 10^4 ans inférieures à t_{chut} qui est de l'ordre de 10^6 ans à $n=100 \text{ cm}^{-3}$. Pour les nuages denses, des calculs hors-équilibre (Graedel *et al.* 1982, Boland 1982, Watt 1983) ont montré que le temps mis pour atteindre l'équilibre est également contrôlé par les processus de destruction et est de l'ordre de 10^5 - 10^7 ans suivant les espèces et les paramètres utilisés (densité, température...): la durée de vie des nuages est de cet ordre de grandeur, ce qui rend l'hypothèse d'équilibre moins justifiée que dans les cas extrêmes de faible densité.

S'ils négligent la dynamique, les modèles à l'équilibre supposent également implicitement que la condensation de molécules sur les grains (voir Chapitre I §IV) n'est pas importante, ou du moins qu'un fort processus d'éjection maintient une large fraction des molécules dans la phase gazeuse. Néanmoins, des manteaux moléculaires sur les grains sont observés dans les coeurs de nuages denses (voir Whittet *et al.* 1983) ce qui témoigne d'une certaine condensation: cet effet est pris en compte dans les modèles à l'équilibre en réduisant les abondances des éléments de la phase gazeuse.

Finalement, le sentiment qui résume cette analyse est que modèles hors équilibre et modèles à l'équilibre sont deux approches complémentaires de la chimie interstellaire; les modèles hors équilibre peuvent prévenir de certains comportements moléculaires particuliers dans la vie des nuages, l'avantage des modèles à l'équilibre est qu'ils peuvent fournir de meilleures estimations de colonnes densités directement comparable aux observations.

C'est cette dernière option qui a été retenue dans cette thèse dont une partie importante a été consacrée à l'écriture et à la mise au point d'un programme informatique entièrement automatique qui calcule le profil chimique des nuages interstellaires en résolvant simultanément l'équilibre chimique d'un ensemble de réactions et l'équation de transfert, en tenant compte de l'atténuation du rayonnement UV à la fois par les poussières et par le gaz. Un prolongement naturel de ce programme sera d'y introduire la résolution de l'équilibre thermique.

II.II LE PROGRAMME INFORMATIQUE

A l'Observatoire de Meudon, Yves Viala travaille depuis plusieurs années sur la chimie interstellaire. Il a écrit à cet effet un programme Fortran qui résoud les équations d'équilibre chimique et de transfert de rayonnement pour un jeu de réactions et d'espèces chimiques donné, sans pouvoir en changer facilement. Il était alors intéressant, tout en conservant globalement l'algorithme et la structure déjà existants, d'automatiser ce programme et de pouvoir ainsi s'adapter au maximum de situations possibles (introduire des réactions supplémentaires, des espèces nouvelles, etc.). La figure II.1 présente l'organigramme du calcul. On peut remarquer plusieurs tâches distinctes : le tri des réactions et des espèces, la résolution de l'équilibre chimique et le calcul des taux de photodestruction. Elles sont développées dans les trois paragraphes suivants, puis on montrera comment tenir compte du couplage entre chimie et rayonnement.

II.1 *Le tri*

A partir d'un ensemble de réactions, un programme préliminaire de tri fait le bilan des processus de formation et de destruction pour chaque espèce qu'il identifie. Il écrit sous une forme directement utilisable par le programme de résolution les équations cinétiques à l'équilibre chimique.

Il est à noter que le système de réactions doit être fermé, c'est à dire que chaque espèce possédant au moins un processus qui la crée doit en posséder au moins un autre qui la détruit. En plus des équations cinétiques pour chacune des N_e espèces, il écrit les équations de conservation pour

chaque élément de la phase gazeuse (le nombre d'atome d'un élément particulier par unité de volume reste constant) ainsi que l'équation de conservation de la charge. Le calcul proprement dit peut débuter.

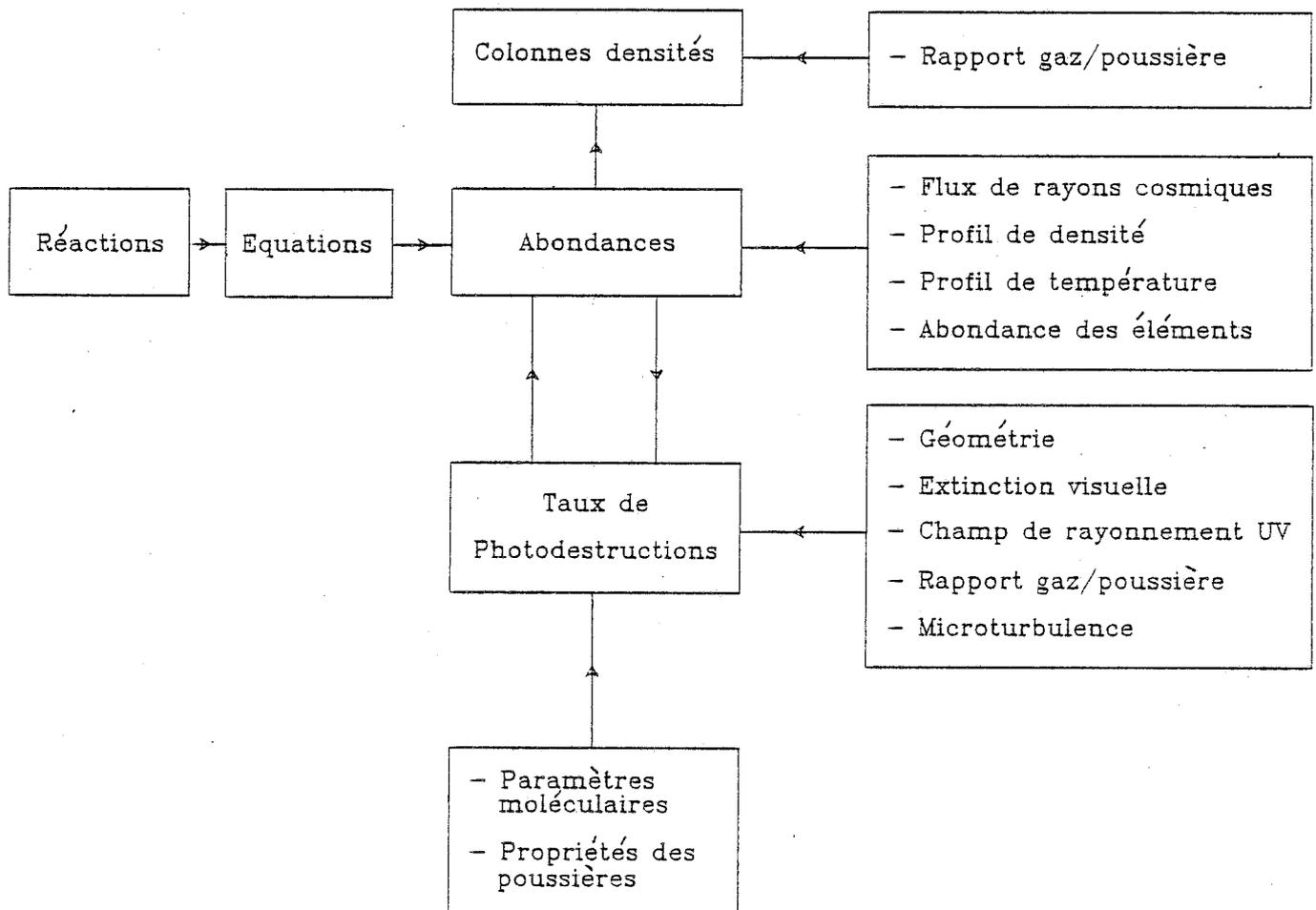


Figure II.1 Organigramme du programme informatique : résolution simultanée de l'équilibre chimique et du transfert de rayonnement. Sont indiqués les paramètres et les données à introduire à chaque étape du calcul.

II.2 Résolution de l'équilibre chimique

Plusieurs paramètres astrophysiques interviennent directement dans l'évaluation des taux de réactions et donc dans la résolution du système : (i) l'extinction visuelle totale A_V qui représente l'épaisseur du nuage et permet de définir une grille en profondeur optique ($\lambda_V = 5470 \text{ \AA}$), (ii) le profil de température $T(r)$, (iii) le profil de densité $n_H(r)$ et (iv) les flux UV et de rayonnement cosmique. Il faut également préciser les abondances des éléments dans la phase gazeuse pour fermer complètement le système.

Le problème est alors de résoudre en chaque position en profondeur optique, un système de N_e équations algébriques non linéaires, en même temps que les équations de conservation. Pour éviter les redondances, il est nécessaire de remplacer certaines équations cinétiques par les équations de conservation afin de réduire le problème à un système de N_e inconnues et N_e équations. On remplace en général les équations cinétiques des atomes H, C, N, ... par les équations de conservation des éléments correspondants. On procède de même pour la neutralité électrique et les électrons. D'autres choix peuvent s'avérer plus judicieux, notamment dans les nuages très denses où CO prend tout le carbone : il est alors plus stable numériquement de calculer CO comme étant la somme de toutes les espèces carbonées et de maintenir l'équation cinétique de l'atome C. La méthode de résolution se trouve en Annexe F.

II.3 Calcul des taux de photodestruction

II.3.1 Equation de transfert

Nous avons vu dans un paragraphe précédent (Chapitre I, §IIIe) que l'estimation de l'intensité spécifique moyenne $J(r, \lambda)$ en chaque longueur d'onde et en chaque position d'un nuage interstellaire est nécessaire au calcul des taux de photodestructions et s'obtient en résolvant une équation de transfert. Dans l'intervalle de longueur d'ondes 912-4000 \AA et aux basses températures du milieu interstellaire, l'émission thermique du gaz et des poussières est négligeable. D'autre part, les atomes et les molécules sont soit ionisés ou dissociés, soit excités vers des états électroniques

supérieurs par les photons qu'ils absorbent. Dans ce dernier cas, le retour au niveau fondamental se produit généralement par une cascade radiative à travers des niveaux intermédiaires, les photons réémis l'étant dans l'infrarouge ou le visible, de sorte que la réémission UV peut être négligée.

Dans les nuages interstellaires le rayonnement est atténué par l'absorption du gaz (coefficient $k_g(\lambda)$) et par l'absorption et la diffusion des poussières (coefficients respectifs $k_a(\lambda)$ et $k_d(\lambda)$). On introduit le coefficient d'extinction total des poussières

$$k_e(\lambda) = k_a(\lambda) + k_d(\lambda) \quad (13)$$

et leur albédo

$$\omega(\lambda) = \frac{k_d(\lambda)}{k_e(\lambda)} \quad (14)$$

et on écrit l'équation de transfert sous la forme générale (Chandrasekhar 1960) suivante (la dépendance en longueur d'onde n'est pas indiquée) :

$$\mu \frac{dI(r, \mu)}{dr} + \frac{m}{2} \frac{1-\mu^2}{r} \frac{dI(r, \mu)}{d\mu} = -[k_g(r) + k_e(r)] I(r, \mu) + \frac{\omega k_e(r)}{2} \int_{-1}^{+1} I(r, \mu') p(\mu, \mu') d\mu' \quad (15)$$

où $m = 0$ ou $m = 2$ selon la géométrie choisie (plane ou sphérique), $I(r, \mu)$ est l'intensité spécifique en un point r dans la direction μ , $p(\mu, \mu')$ est la fonction de phase pour la redistribution de la lumière diffusée par les grains, et μ et μ' sont les cosinus des angles entre rayons incident et diffusé. La fonction de phase est normalisée de telle sorte que

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} p(\mu, \mu') d\mu' = 1 \quad (16)$$

La résolution proprement dite de l'équation de transfert se trouve en Annexe B. Pour gagner du temps de calcul, une solution analytique est souhaitable mais n'est souvent accessible qu'avec des hypothèses simplificatrices (diffusion vers l'avant, profils d'abondances moléculaires

constants...). On utilise une méthode simple qui suppose que la géométrie est plan-parallèle et que la diffusion par les grains se fait uniquement vers l'avant, c'est-à-dire que

$$p(\mu, \mu') = 2 \delta(\mu, \mu') \quad (16)$$

Cela correspond à un facteur d'anisotropie $g = 1$, ce qui est assez cohérent avec les observations de la lumière galactique diffuse qui rapportent $g > 0.75$ aux longueurs d'ondes UV (Lillie et Witt 1976). Dans ces conditions, l'équation de transfert a une solution analytique (voir Annexe B)

$$J(r, \lambda) = \frac{1}{2} J_0(\lambda) \left[E_2[2\tau^{\text{tot}}(\lambda) - \tau(\lambda)] + E_2[\tau(\lambda)] \right] \quad (17)$$

où E_2 est l'exponentielle intégrale d'ordre 2, $J_0(\lambda)$ est l'intensité moyenne du champ de rayonnement extérieur et $\tau(\lambda)$ est l'opacité (gaz + poussières) comptée à partir de la surface vers l'intérieur du nuage :

$$\tau(\lambda) = \int_0^r \left[(1 - \omega(\lambda))k_e(\lambda, r) + k_g(\lambda, r') \right] dr' \quad (18)$$

(r est la distance du point courant à la surface du nuage).

II.3.2 Coefficient d'extinction

Pour estimer le coefficient d'extinction $k_e(\lambda, r)$, nous avons besoin de connaître (i) la quantité de poussières dans le modèle, c'est à dire le rapport gaz/poussière ou le rapport de la colonne densité totale d'hydrogène à l'indice de couleur $E(B-V)$ (Bohlin *et al.* 1978 donnent $N_H/E(B-V) = 5.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$), (ii) la courbe d'extinction $E(\lambda-V)/E(B-V)$ (iii) le rapport de l'extinction totale à l'extinction sélective $R_V = A_V/E(B-V)$ (≈ 3.1 dans les conditions standards). Le coefficient

d'extinction se calcule alors par

$$k_e(\lambda, r) = k_v(r) \left[1 + \frac{1}{R_v} \frac{E(\lambda-V)}{E(B-V)} \right] \quad (19)$$

où k_v est défini par

$$\frac{k_v(r)}{n_H(r)} = \frac{A_v}{1.086N_H} = \frac{R_v}{1.086 (N_H/E(B-V))} \quad (20)$$

II.3.3 Absorption par le gaz

Le transfert de rayonnement est couplé à la chimie par le calcul du coefficient d'absorption du gaz

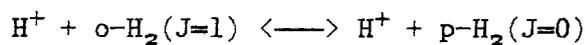
$$k_g(\lambda, r) = \sum_i n_i(r) \sigma_i(\lambda) \quad (21)$$

où la somme porte sur toutes les espèces absorbantes. Les sections efficaces d'absorption $\sigma_i(\lambda)$ sont, d'une façon générale, composées d'une contribution continuum et d'une contribution discrète

$$\sigma_i(\lambda) = \sum_{l,u} P_l \sigma_i^{l \rightarrow u}(\lambda) + \sigma_i^{(c)}(\lambda) \quad (22)$$

où $l \rightarrow u$ désigne une transition absorbante et P_l est la population relative du niveau inférieur de cette transition.

Ainsi, le transfert se trouve lui-même couplé à l'équilibre statistique des espèces dissociées dans leurs raies ($\text{CO}, \text{H}_2, \dots$). Une distribution de Boltzman est supposée régir les populations des niveaux de rotation de l'état fondamental avec une température d'excitation à fixer par l'utilisateur. Quant à H_2 , ortho et para hydrogène sont considérés comme deux espèces chimiques distinctes. Dans l'état actuel du modèle leur population est déterminée par une production sur les grains en rapport avec leur poids statistique 3:1, et par l'échange



Le calcul complet de l'équilibre statistique des niveaux de

vibration-rotation de l'état électronique fondamental $X^1\Sigma_g^+$ de H_2 devrait s'insérer prochainement dans le programme (ce traitement existe dans le programme initial de Viala). Dans les nuages interstellaires, trois processus contrôlent les populations de ces niveaux (Viala *et al.* 1987) : (i) les réactions chimiques exothermiques qui produisent et détruisent H_2 , peuvent laisser la molécule dans un état excité, (ii) les collisions avec des espèces neutres et des électrons, (iii) le pompage UV, c'est à dire l'absorption de photons vers un état électronique excité, suivie d'une désexcitation radiative vers le fondamental et des cascades radiatives entre les niveaux de vibration-rotation de cet état.

Le calcul des taux de photodestruction demande la connaissance d'un grand nombre de paramètres moléculaires : sections efficaces, fréquences et forces d'oscillateur des raies d'absorption, probabilités de désexcitation radiative, largeurs naturelles. Il faut également choisir le paramètre Doppler d'élargissement microturbulent des raies d'absorption (voir Annexe A) et choisir un champ de rayonnement extérieur, son intensité et sa dépendance en longueur d'onde.

II.3.4 Temps de calcul

Pour une grille en profondeur optique de 20 points, une trentaine d'espèces absorbantes, dont H_2 et CO qui absorbent dans environ une centaine de raies au total, avec un transfert plan parallèle et une diffusion vers l'avant, il faut environ 20 à 30 minutes sur un VAX 780 pour calculer les taux de photodestructions. Le calcul en chaque longueur d'onde des sections efficaces d'absorption de toutes les espèces prend le plus de temps. Dans le continuum, la grille en longueur d'onde contient environ 1000 points. Dans chaque raie d'absorption il est nécessaire de choisir une grille très étendue (jusqu'à 10^3 largeurs Doppler) car l'auto-absorption peut devenir si importante, notamment pour H_2 , que les raies sont rapidement opaques et saturées et que la dissociation a lieu principalement dans les ailes. Chaque raie d'absorption peut ainsi contenir jusqu'à 1000 points en longueur d'ondes et le problème du recouvrement des raies est traité en calculant en chaque point l'absorption due aux raies adjacentes.

II.4 Couplage chimie-rayonnement

On utilise la procédure itérative suivante : à chaque pas les abondances moléculaires calculées au pas précédent servent au calcul du coefficient d'absorption du gaz ; l'équation de transfert fournit alors l'intensité moyenne du rayonnement UV ; après intégration sur la longueur d'onde, les taux de photodestruction de toutes les espèces sont obtenues en fonction de la profondeur optique. Ces taux sont réinjectés dans les équations de l'équilibre chimique qui sont à nouveau résolues et conduisent à de nouvelles valeurs des abondances moléculaires. La procédure continue jusqu'à convergence, c'est à dire que l'erreur relative sur toutes les abondances en tout point entre deux itérations successives est inférieure à une valeur fixée, choisie en général à 5%. Une moyenne de 5 à 10 itérations est nécessaire suivant les modèles, ce qui représente pour un modèle type de 20 points en profondeur optique, de 80 espèces dont 30 absorbantes, reliées par 1200 réactions avec un transfert plan parallèle et une diffusion vers l'avant, entre 5 et 6 heures de temps de calcul sur VAX 780.

En sortie, le programme affiche les taux de photodestructions (ionisations et dissociations) et les abondances relatives à l'hydrogène en fonction de la profondeur optique τ_v dans le nuage, ou de façon équivalente de la colonne densité d'hydrogène totale $N_H = 1.086(N_H/E(B-V))/R_v \approx 2 \times 10^{21} \tau_v$ (équation (3)). Il est alors possible de calculer les colonnes densités absolues de chaque espèce X en tout point du nuage

$$N(X, r) = \int_0^r n(X, r') dr' \quad (23)$$

$$N(X, \tau_v) = \int_0^{\tau_v} x(X, \tau') \frac{n_H}{k_v} d\tau' \quad (24)$$

$$N(X, \tau_v) = \frac{1.086 N_H}{A_v} \int_0^{\tau_v} x(X, \tau') d\tau' \quad (25)$$

DEUXIEME PARTIE : DANS LES ENVELOPPES CIRCUMSTELLAIRES

II.III INTRODUCTION

Depuis que Deutsch (1956) a démontré que α Herculis est entourée d'une couche de matière en expansion, il y a un intérêt croissant pour l'étude théorique et observationnelle des enveloppes d'étoiles évoluées. Zuckerman (1980) a passé en revue l'ensemble des propriétés observationnelles, indispensables pour comprendre l'évolution et les processus fondamentaux de ces enveloppes de gaz et de poussières (dynamique, formation des grains,...). De même des études détaillées de la composition chimique sont nécessaires pour trouver les abondances élémentaires et les rapports isotopiques témoins de la nucléosynthèse et des mécanismes d'expansion.

Le premier modèle de chimie à l'intérieur d'une enveloppe est à mettre au crédit de Goldreich et Scoville (1976) qui calculèrent les abondances radiales de H, H₂, OH, O et H₂O. Leur travail a clairement démontré l'importance du champ de rayonnement interstellaire UV dans les profils de OH et H₂O. Depuis, de nombreux auteurs se sont attaqués à ce problème. Entre autres, Huggins et Glassgold (1982) étudient les effets photochimiques, Clegg *et al.* (1983) modélisent l'équilibre chimique des couches profondes, Lafont *et al.* (1982), Nejad *et al.* (1984) et Glassgold *et al.* (1986) étudient la structure moléculaire et ionique de l'enveloppe carbonée massive IRC+10216, l'une des plus observées du ciel car l'une des plus proches (Omont 1985). Scalo et Slavsky (1980) puis Slavsky et Scalo (1986) ont étudié plus particulièrement les enveloppes oxygénées, dont on pensait généralement la chimie moins riche, le carbone étant entièrement dans CO. Cette étude a révélé la richesse potentielle de telles enveloppes et la découverte récente de molécules comme SO, SO₂ et HCN accentue cette impression (Guilloteau *et al.* 1986).

A partir de l'expérience acquise dans la modélisation de la chimie des

nuages interstellaires, il devenait plus facile de programmer le calcul des abondances moléculaires à l'intérieur des enveloppes circumstellaires. L'organigramme de ce nouveau programme est en fait identique au précédent (figure II.1), même si l'environnement dynamique et les conditions physiques sont différents, ce qui implique d'autres paramètres physiques et d'autres équations à résoudre.

II.IV LES PARAMÈTRES PHYSIQUES

On présente ici les paramètres spécifiques aux problèmes des enveloppes ainsi que les valeurs qu'ils peuvent prendre dans des cas réalistes.

IV.1 *Rayon interne*

D'une façon générale, les régions externes des étoiles évoluées peuvent se diviser en 3 zones : (i) la photosphère, gravitationnellement liée, (ii) une couche chromosphérique turbulente assez confuse, dans laquelle peuvent prendre naissance des ondes de chocs, se former les poussières..., et qui aboutit à l'accélération du vent, (iii) l'enveloppe de gaz et de poussières en expansion proprement dite, non gravitationnellement liée et dans laquelle les échelles de temps laissent se développer une chimie très intéressante. La plupart des enveloppes présentent une bonne symétrie sphérique dans leurs couches externes. Ceci a été vérifié par différentes techniques pour plus de 25 objets (voir Wannier 1984). Toutefois, il existe une classe d'objets bipolaires avec des enveloppes aplaties (CRL 2688, NGC 7027, VY CMa, μ Cep, OH 231.8+4.2, ...), une bonne fraction d'entre eux étant, semble-t-il, dans un état proche de leur état final de nébuleuse planétaire. L'origine de ces asymétries est mal comprise (voir Morris 1981 et Bowers *et al.* 1983 qui examinent l'influence d'un éventuel compagnon), surtout lorsqu'elles se développent dans des parties internes, l'extérieur restant sphérique (par exemple IRC+10216).

Pour simplifier, la symétrie sphérique a été adoptée et l'enveloppe débute à une distance R_0 de l'étoile. Cette position initiale se trouve suffisamment éloignée de l'étoile centrale pour que l'échelle de temps dynamique liée à l'expansion soit inférieure à l'échelle de temps liée aux

mouvements turbulents du gaz; mais elle est assez proche pour que toute réaction en phase gazeuse potentiellement importante soit prise en compte. Beaucoup d'auteurs ont tenté de déterminer le rayon intérieur des enveloppes : selon le critère de référence (émission infrarouge, observations d'espèces du gaz, degré d'ionisation), R_0 peut varier entre 10 et 100 rayons stellaires R^* (voir les estimations de Bernat et Lambert 1975 et Castor 1981 dans α Ori). Sutton *et al.* (1977, 1979) rapportent des mesures directes du rayon intérieur de la couche de poussière, par interférométrie hétérodyne : ils ne détectent aucune émission à l'intérieur de $12 R^*$ pour α Ori et α Sco. D'autres (par exemple Hagen 1978) estiment R_0 en supposant que c'est la base de l'enveloppe de poussière, c'est à dire là où la température atteint la température de condensation des grains. R_0 est donc un paramètre libre qui varie typiquement entre 10^{14} et 10^{15} cm.

IV.2 Perte de masse et expansion

Le mécanisme responsable de l'éjection de matière par les étoiles évoluées est incertain. Néanmoins, il paraît probable que la pression de radiation sur les grains soit essentielle même si d'autres phénomènes peuvent intervenir (éjection sporadique à cause de la rotation et de la turbulence, pulsation, ondes MHD, etc. La structure en vitesse des couches internes peut être très compliquée, mais quel que soit le processus d'éjection, une vitesse d'expansion v_e constante à travers l'enveloppe est une bonne approximation reflétée par les observations qui donnent $v_e \approx 10-20$ km/s.

En symétrie sphérique, pour un gaz en expansion à vitesse constante, l'équation de continuité fournit une relation entre le taux de perte de masse dM/dt , la vitesse v_e et la densité $n(r)$:

$$\frac{dM}{dt} = \dot{M}(r) = 4\pi r^2 v_e(r) n(r) \mu \quad (26)$$

où μ est la masse moyenne des particules. De façon équivalente

$$n_{\text{H}}(r) = \frac{C}{r^2} = \frac{3 \times 10^{37}}{r^2} \frac{\dot{M}_{\text{H}}}{10^{-5} M_{\odot} / \text{an}} \frac{10 \text{ km/s}}{v_e} \quad (27)$$

où n_{H} est le nombre total de noyaux d'hydrogène par cm^3 , et \dot{M}_{H} est le taux de perte de masse d'hydrogène. La plupart des études de l'émission de CO et SiO sont en accord avec une structure en r^{-2} (Zuckerman 1980). Le paramètre pertinent qui définit, avec v_e , le profil de densité est donc un taux de perte de masse constant qui varie typiquement entre 10^{-6} et $10^{-4} M_{\odot} / \text{an}$.

IV.3 Température cinétique du gaz

Il existe peu d'évidences observationnelles concernant la température du gaz dans les enveloppes. Cela vient du fait que l'information issue d'une seule transition moléculaire est une moyenne sur toute une région émettrice : dans le cas de CO ($J=1-0$) cela inclut toute l'enveloppe. Il est donc difficile de trouver un bon thermomètre à cause de la très forte émission infrarouge qui maintient la plupart des niveaux rotationnels des molécules hors ETL. Goldreich et Scoville (1976), Kwan et Hill (1977), Kwok (1980), Kwan et Linke (1982) et Tielens (1983) ont successivement modélisé la température du gaz dans les régions en expansion, où les collisions gaz-grains sont le mécanisme principal de chauffage, alors que le refroidissement est assuré par l'expansion adiabatique et l'émission moléculaire (CO dans les enveloppes carbonées, CO, H_2O et OH dans les oxygénées). Un profil de température de la forme $T = T_0 (r/R_0)^{-\alpha}$ a été adopté, une décroissance en $\alpha \approx 0.7$ étant en général une bonne représentation des résultats théoriques cités au dessus, T_0 prenant des valeurs entre 500 et 2000K suivant R_0 .

II.V LES EQUATIONS

V.1 Hydrodynamique

Les calculs suivent le mouvement d'un élément de volume au cours de sa progression vers les couches externes de l'enveloppe. Pour chaque espèce

chimique de densité n_i , l'équation de conservation du nombre de particules i s'écrit

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \text{div}(n_i \vec{v}_e) = P_i - L_i \quad (28)$$

où l'on néglige les processus de transport microscopique (diffusion turbulente) susceptibles d'homogénéiser partiellement les abondances. Comme dans le milieu interstellaire, P_i et L_i représentent les termes de production et de destruction (en $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) de l'espèce i qui peuvent être liés à des réactions chimiques en phase gazeuse, à des réactions de catalyse à la surface des grains, des photodestructions, ... En un point r , leur efficacité s'estime en comparant l'inverse de leur taux de réaction à l'échelle de temps dynamique $t_{\text{dyn}} = r/v_e$. En régime stationnaire et en coordonnées sphériques, l'équation ci-dessus se ramène à (avec ici $\partial/\partial r = d/dr$)

$$\frac{2}{r} n_i v_e + v_e \frac{dn_i}{dr} + n_i \frac{dv_e}{dr} = P_i - L_i \quad (29)$$

En terme d'abondance $x_i = n_i/n_H$ et en introduisant l'équation de conservation de la masse qui implique que $\text{div}(n\vec{v}_e) = 0$ c'est à dire que $n(r) \propto r^{-2}$, il faut résoudre le système d'équations différentielles non linéaire suivant :

$$v_e \frac{dx_i}{dr} = \frac{P_i - L_i}{n_H} \quad (30)$$

V.2 Les processus radiatifs

Comme dans le cas des nuages interstellaires, le calcul des taux de photodestruction est important et doit s'effectuer de manière cohérente avec la chimie. Le rayonnement galactique UV est primordial dans le sens où il limite l'extension radiale des molécules, et où il est sans doute le principal fournisseur de radicaux et d'ions moléculaires dans les enveloppes denses (voir Goldreich et Scoville 1976, Scalo et Slavsky 1980, Huggins et Glassgold 1982, Glassgold *et al.* 1986). Ce rayonnement UV est atténué par les poussières (on sait malheureusement peu de choses des propriétés UV des grains circumstellaires) et par les espèces du gaz.

II.VI RESOLUTION

Dans le programme, le système d'équations (30) est intégré à l'aide du sous-programme D02EBF de la bibliothèque NAG qui utilise une méthode de Gear (Hall et Watt 1979) et qui, à partir de conditions initiales, fournit la solution en des points stipulés par l'utilisateur dans un intervalle $[R_0, R_{\max}]$. L'abondance électronique est calculée en chaque point comme étant la somme algébrique de tous les ions. Pour un système de 80 espèces, reliées par 1200 réactions et un intervalle d'intégration $[R_0 = 10^{15} \text{ cm} , R_{\max} = 10^{18} \text{ cm}]$, il faut environ 30 à 40 minutes de temps de calcul sur VAX780.

VI.1 Les conditions initiales

Il est indispensable d'affecter une abondance à chaque espèce au point R_0 . Dans les couches internes très denses et chaudes (photosphère et au dessus), le temps caractéristique d'expansion est grand devant les constantes de temps des réactions chimiques. Il est probable qu'à cet endroit la composition moléculaire de l'enveloppe correspond à l'équilibre chimique (voir Tsuji 1964, McCabe *et al.* 1979, Lafont *et al.* 1982). Dans les couches intermédiaires moins denses et moins chaudes, certaines réactions chimiques se produisent encore (réactions radicalaires, collisions dissociatives, etc.) alors que d'autres se gèlent et tout d'abord celles qui ont une forte énergie d'activation ou qui s'effectuent avec des molécules peu abondantes, ce qui entraîne déjà un écart à l'équilibre chimique avant d'arriver dans l'enveloppe externe à $r = R_0$. En ce point chaque espèce est le reflet de processus qui se sont produits à des étapes différentes de la progression, et seules quelques unes restent figées à leur valeur de l'équilibre interne. Ce sont des molécules très stables et abondantes, et qui contiennent toutes une part importante d'un élément donné (CO, C_2H_2 , HCN dans les enveloppes carbonées, CO, H_2O , N_2 dans les enveloppes oxygénées). Le choix des abondances initiales sera précisé au chapitre VI.

VI.2 Les processus radiatifs

L'atténuation du rayonnement UV galactique par les poussières est donné par une fonction exponentielle, et le taux de photodestruction d'une espèce X en r s'écrit (Black et Dalgarno 1977, Prasad et Huntress 1980) :

$$k_X(r) = f a_X \exp(-b_X A_V(r)) \quad (31)$$

où f est le rapport entre l'intensité galactique UV locale à une intensité standard, $A_V(r)$ est l'opacité dans le visible le long d'un rayon r jusqu'à la limite extérieure de l'enveloppe, les a_X et b_X sont des paramètres tabulés. Une source importante d'incertitude réside dans l'évaluation de l'extinction visible radiale A_V entre l'extérieur de l'enveloppe et la zone des observations millimétriques (disons $r = 5 \cdot 10^{16}$ cm pour fixer les idées). Dans IRC+10216, la valeur $A_V = 0.5$ à un facteur 2 près semble raisonnable (Sutton *et al.* 1979) et permet à Lafont *et al.* (1982) d'estimer $A_V(r) \approx 2.5 \cdot 10^{16}/r$. Cette enveloppe qui a une perte de masse estimée à $4 \cdot 10^{-5} M_\odot/\text{an}$ pour une distance de 200 pc (Knapp et Morris 1985), nous sert à calibrer approximativement $A_V(r)$. Nous utilisons

$$A_V(r) = \frac{2.5 \cdot 10^{16}}{r \text{ (cm)}} \frac{\dot{M} (M_\odot/\text{an})}{4 \cdot 10^{-5}} \quad (32)$$

La formule (31) ne rend bien sûr pas compte d'effets importants tels que l'absorption moléculaire continue (par C_2H_2 ou H_2O), ou le self-shielding dans les raies de CO (Morris et Jura 1983) dont le traitement est exposé en Annexe D.

Il est nécessaire d'utiliser une procédure itérative puisque, par exemple pour les enveloppes oxygénées, la profondeur optique de H_2O en chaque point dépend des abondances moléculaires en tous les points extérieurs au point courant, abondances inconnues car l'intégration de la chimie procède de l'intérieur vers l'extérieur. La convergence est atteinte à 5% près en quelques itérations.

Finalement, ce second programme est assez proche dans sa structure de celui des nuages interstellaires. Il donne en sortie les abondances

moléculaires en fonction de r dans un intervalle $[R_0, R_{\max}]$ ainsi que les taux de photodestruction. Les colonnes densités radiales sont alors estimées en fin de calcul.

Références

- Bernat, A.P., Lambert, D.L. : 1975, *Astrophys.J.* 201, L153
- Black, J.H., Dalgarno, A. : 1973, *Astrophys.J.* 15, L79
- Black, J.H., Dalgarno, A. : 1977, *Astrophys.J. Supp. Series* 34, 405
- Bohlin, R.C., Savage, B.D., Drake, J.F. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 132
- Boland, W., De Jong, T. : 1984, *Astron. Astrophys.* 134, 87
- Bowers, P.F., Johnston, K.J., Spencer, J.H. : 1983, *Astrophys.J.* 274, 733
- Castor, J.I. : 1981, dans *Physical Process in Red Giants* Dordrecht, Reidel p285
- Chandrasekhar, S. : 1960, *Radiative Transfer* Dover Publications, New York
- Clavel, J., Viala, Y.P., Bel, N. : 1978, *Astron. Astrophys.* 67, 139
- Clegg, R.E.S., Huickle, K.H., Lambert, D.L. : 1983, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 203, 125
- De Jong, T. : 1980, *Highlights of Astronomy* ed. E.A. Muller
- De Jong, T., Dalgarno, A., Boland, W. : 1980, *Astron. Astrophys.* 91, 68
- Deutsch, A.J. : 1956, *Astrophys.J.* 123, 210
- Elmegreen, B.G. : 1981, *Astrophys.J.* 243, 512
- Federman, S.R., Glassgold, A.E., Kwan, J. : 1979, *Astrophys.J.* 27, 466
- Federman, S.R., Glassgold, A.E., Jenkins, E.B., Shaya, E.J. : 1980, *Astrophys.J.* 242, 545
- Gerola, H., Glassgold, A.E. : 1978, *Astrophys.J. Supp. Series* 37, 1
- Glassgold, A.E., Langer, W.D. : 1974, *Astrophys.J.* 193, 71
- Glassgold, A.E., Langer, W.D. : 1976, *Astrophys.J.* 206, 85
- Glassgold, A.E., Lucas, R., Omont, A. : 1986, *Astron. Astrophys.* 157, 35
- Goldreich, P., Scoville, N. : 1976, *Astrophys.J.* 205, 144

- Graedel, T.E., Langer, W.D., Frerking, M.A. : 1982, *Astrophys.J.Supp.Series* 48, 321
- Guilloteau, S., Lucas, R., Nguyen-Q-Rieu, Omont, A. : 1986, *Astron.Astrophys.* 165, L1
- Hagen, W. : 1978, *Astrophys.J.Supp.Series* 38, 1
- Hall, G., Watt, J.M. : 1976, *Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations* Clarendon press, Oxford
- Hennig, K. : 1981, *Astron.Astrophys.Supp.Series* 44, 405
- Herbst, E., Klemperer, W. : 1973, *Astrophys.J.* 185, 505
- Henriksen, R.N. : 1986, *Astrophys.J.* 310, 189
- Huggins, P.J., Glassgold, A.E. : 1982, *Astrophys.J.* 252, 201
- Hutchins, J.B. : 1976, *Astrophys.J.* 205, 103
- Iglesias, E. : 1977, *Astrophys.J.* 218, 697
- Knapp, G.R., Morris, M. : 1985, *Astrophys.J.* 292, 640
- Kwan, J., Hill, F. : 1977, *Astrophys.J.* 215, 781
- Kwan, J., Linke, R.A. : 1982, *Astrophys.J.* 254, 587
- Kwok, S. : 1980, *Astrophys.J.* 236, 592
- Lafont, S., Lucas, R., Omont, A. : 1982, *Astron.Astrophys.* 106, 201
- Larson, R.B. : 1973, *Ann.Rev.Astron.Astrophys.* 11, 219
- Lequeux, J. : 1977, dans *IAU Symposium 75, Star formation* ed T.de Jong et A.Maeder (Dordrecht : Reidel), p69
- Lillie, C.F., Witt, A.N. : 1976, *Astrophys.J.* 208, 64
- Mann, A.P.C., Williams, D.A. : 1984, *Mon.Not.R.Astron.Soc.* 209, 33
- McCabe, E.M., Smith, R.C., Clegg, R.E.S. : 1979, *Nature* 281, 263
- Millar, T.J., Freeman, A. : 1984, *Mon.Not.R.Astron.Soc.* 207, 405
- Mitchell, G.F., Ginsburg, J.L., Kuntz, P.J. : 1978, *Astrophys.J.Supp.Series* 38, 39
- Morris, M. : 1981, *Astrophys.J.* 249, 572
- Morris, M., Jura, M. : 1983, *Astrophys.J.* 264, 546
- Nejad, L.A.M., Millar, T.J., Freeman, A. : 1984, *Astron.Astrophys.* 134, 129
- Omont, A. : 1985, dans *Mass Loss from Red Giants*, eds M.Jura, M.Morris, B.Zuckerman, Reidel, Dordrecht

- Oppenheimer, M., Dalgarno, A. : 1975, *Astrophys. J.* 200, 419
- Prasad, S.S., Huntress, W.T. Jr. : 1980, *Astrophys. J. Supp. Series* 43, 1
- Scalo, J.M., Slavsky, D.B. : 1980, *Astrophys. J.* 239, L73
- Slavsky, D.B., Scalo, J.M. : 1986, preprint
- Solomon, P.M., Klemperer, W. : 1972, *Astrophys. J.* 178, 389
- Spitzer, L. Jr. : 1968, *Diffuse Matter in Space* Wiley, New York
- Sutton, E.C., Storey, J.W., Betz, A.L., Townes, C.H., Spears, D.L. : 1977, *Astrophys. J.* 217, L97
- Sutton, E.C., Betz, A.L., Storey, J.W., : 1979, *Astrophys. J.* 230, L105
- Tarafdar, S.P., Prasad, S.S., Huntress, W.T. Jr. : 1985, *Astrophys. J.* 289, 220
- Tielens, A.G. : 1983, *Astrophys. J.* 271, 702
- Tsuji, T. : 1964, *Ann. Tokyo. Astron. Observ.* 2nd Ser. 9, 1
- Viala, Y.P., Walmsley, C.M. : 1976, *Astron. Astrophys.* 50, 1
- Viala, Y.P., Roueff, E., Abgrall, H. : 1987, soumis à *Astron. Astrophys.*
- Villere, K.R., Black, D.C. : 1980, *Astrophys. J.* 236, 192
- Villere, K.R., Black, D.C. : 1982, *Astrophys. J.* 252, 524
- Wannier, P.G. : 1984, dans *Cool stars, Stellar Systems, and the Sun* Springer-Verlag, New York p296
- Watt, G.D. : 1983, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 205, 321
- Whittet, D.C.B., Bode, M.F., Evans, A., Butchart, I. : 1981, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 196, 81
- Woolfson, M.M. : 1979, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* 291, 219
- Zuckerman, B. : 1980, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 18, 263

CHAPITRE III

Observations millimétriques de nuages moléculaires proches

III.1 INTRODUCTION

A l'heure actuelle, le domaine de longueurs d'onde le plus intéressant pour l'étude du milieu interstellaire neutre moléculaire est le domaine millimétrique, les raies millimétriques d'émission étant induites par les transitions rotationnelles des molécules. Il faut se rappeler que ces transitions rotationnelles n'existent que pour des molécules relativement lourdes possédant un moment dipolaire électrique permanent. Ainsi des espèces potentiellement abondantes comme beaucoup d'hydrides simples, de molécules homonucléaires ou des hydrocarbures symétriques, ne peuvent pas encore être observées directement. Ces contraintes pourront être levées pour les molécules les plus émettrices lorsque la spectroscopie à haute résolution atteindra le domaine submillimétrique et se situera dans l'espace afin d'échapper à l'absorption atmosphérique, importante à ces fréquences plus élevées. En attendant il est possible d'estimer l'abondance de certaines molécules dépourvues de transition dipolaire électrique de rotation, à partir de l'observation d'espèces qui leur sont très liées chimiquement : des formes protonées de molécules (voir Linke *et al.* 1983) ou des isotopes asymétriques avec un petit moment dipolaire.

Qu'il s'agisse de déterminer des abondances moléculaires ou de dégager quelques idées sur la structure et la dynamique d'un nuage moléculaire, le premier problème à résoudre est l'interprétation des données observationnelles, en l'occurrence l'analyse de l'information fournie par un spectre de raies millimétriques, analyse qui consiste à relier le profil de raie obtenu (intensité émise en fonction de la fréquence ou température de brillance en fonction de la vitesse radiale de la source) aux paramètres physiques de la région émettrice : densité, température, colonne densité, abondance, etc. Dans le paragraphe suivant, sont présentées les méthodes générales d'interprétation des spectres moléculaires, méthodes basées sur une succession d'hypothèses simplificatrices inévitables.

Les isotopes du monoxyde de carbone CO sont souvent utilisés comme traceurs de la matière moléculaire, en particulier dans les grands

complexes moléculaires ; nous présentons au paragraphe III, sous forme d'une publication, des observations ^{13}CO ($J = 1-0$) dans deux nuages sombres du complexe du Taureau. Nous y discutons la confiance que l'on doit accorder aux isotopes de CO comme indicateurs du contenu en hydrogène moléculaire des régions sombres du ciel.

III.II FORMATION DES RAIES MOLECULAIRES. INTERPRETATION DES SPECTRES.

II.1 *Température d'antenne*

La première étape est d'estimer la température d'antenne (force du signal) de la raie spectrale à partir du spectre brut non calibré. Ce travail préliminaire, délicat et essentiel suppose résolus les problèmes complexes de détermination du lobe de l'antenne et de calibration du récepteur (voir Perrault 1981) et que l'on sache s'affranchir de l'absorption atmosphérique ainsi que de certaines pertes du télescope. La calibration absolue des données millimétriques n'est sans doute pas meilleure que 10% et la procédure utilisée doit apparaître clairement dans les publications.

II.2 *Température de brillance*

Si la source observée était uniforme et étendue comparée à la résolution angulaire de l'antenne, et si de plus l'antenne utilisée était parfaitement efficace, alors la température d'antenne mesurée serait tout simplement la température de brillance du nuage, c'est à dire la température du corps noir qui produit le flux monochromatique détecté. C'est la température de brillance qui est reliée directement aux propriétés du nuage lui-même.

Malheureusement, les températures d'antenne sont souvent éloignées de la vraie température de brillance. Une des plus grandes difficultés à laquelle ont à faire face les radioastronomes est que les antennes sont telles qu'une partie non négligeable de la puissance émise par la source est reçue en dehors du lobe principal : pour les télescopes actuellement

en activité, le rapport de la puissance reçue dans le lobe principal à la puissance totale reçue, ou rendement du lobe principal ("main beam efficiency" en anglais), varie typiquement entre 20 et 90% pour les observations de raies moléculaires. La puissance collectée en dehors du lobe principal peut arriver de n'importe quelle région du ciel, et lorsqu'elle provient d'ailleurs que de la source, il devient difficile de relier la température d'antenne à la température de brillance.

Finalement, on peut aussi faire remarquer qu'il est peu approprié, en général, de caractériser l'émission observée par une seule température de brillance car il existe souvent dans la source des structures inhomogènes sur une échelle inférieure à la résolution angulaire.

II.3 Equation de transfert

L'étape suivante est de relier la température de brillance à la population des niveaux responsables de la transition $m \rightarrow n$ observée. La formation d'une raie moléculaire est décrite par l'équation de transfert radiatif (ou de conservation de l'énergie radiative en un point r d'un milieu en état stationnaire) :

$$\frac{dI_{\nu}(r, \vec{n})}{d\tau_{\nu}(r, \vec{n})} = \frac{j_{\nu}(r, \vec{n})}{K_{\nu}(r, \vec{n})} - I_{\nu}(r, \vec{n}) \quad (1)$$

où $I_{\nu}(r, \vec{n})$ est l'intensité spécifique du rayonnement dans la direction \vec{n} , à la fréquence ν de la transition, et au point r . $\tau_{\nu}(r, \vec{n})$ est la profondeur optique du milieu définie par

$$d\tau_{\nu}(r, \vec{n}) = -K_{\nu}(r, \vec{n}) ds \quad (2)$$

où ds est compté dans la direction \vec{n} , $K_{\nu}(r, \vec{n})$ et $j_{\nu}(r, \vec{n})$ sont respectivement le coefficient d'extinction et l'émissivité du milieu. La solution générale de l'équation de transfert s'écrit

$$I_{\nu} = I_{\nu}^{\circ} \exp(-\tau_{\nu}) + \int_0^{\tau_{\nu}} \frac{j_{\nu}}{K_{\nu}} \exp(-(\tau_{\nu} - \tau_{\nu}')) d\tau_{\nu}' \quad (3)$$

En pointant le télescope successivement sur la source et en dehors de

celle-ci, en utilisant de plus la loi de Kirchhoff et la définition de Rayleigh-Jeans de la température de brillance, on peut écrire, pour un nuage homogène et une transition entre deux niveaux d'énergie E_m et E_n :

$$T_{Bmn} = \frac{h\nu_{mn}}{k} \left[1 - \exp(-\tau_{mn}) \right] \times \left[\frac{1}{\exp(h\nu_{mn}/kT_{ex}) - 1} - \frac{1}{\exp(h\nu_{mn}/kT_{fc}) - 1} \right] \quad (4)$$

où T_{fc} est la température du fond continu et T_{ex} la température d'excitation, expression des populations relatives des deux niveaux d'énergie de la transition (elle est en général différente d'une transition à l'autre).

La formation de la raie est décrite par les deux paramètres τ_{mn} et T_{ex} que nous explicitons maintenant.

II.4 Equilibre statistique

L'épaisseur optique τ_{mn} est déterminée par

$$\tau_{mn} = (n_n - n_m) \frac{C^3}{8\pi^{3/2}} \frac{N}{\nu_{mn}^3} g_m A_{mn} \Delta\nu^{-1} \quad (5)$$

où N est la densité projetée de la molécule observée, A_{mn} est le coefficient d'Einstein d'émission spontanée du niveau supérieur de la transition, $\Delta\nu$ est la largeur de la raie à $1/e$ (la largeur de la raie supposée Gaussienne est due aux mouvements turbulents dans le nuage), n_m et n_n sont les populations normalisées des niveaux d'énergie E_m et E_n qui forment la transition ($\sum_i n_i g_i = 1$, g_i est la dégénérescence du niveau i).

La température d'excitation T_{ex} est définie par l'équation de Boltzmann

$$\frac{n_m}{n_n} = \frac{g_n}{g_m} \exp(-h\nu/kT_{ex}) \quad (6)$$

et elle est déterminée par les équations d'équilibre statistique qui expriment l'égalité des taux de peuplement et de dépeuplement des niveaux

d'énergie de la molécule. Les différents mécanismes de transition d'un niveau à un autre sont les processus radiatifs (émission spontanée, émission et absorption induites par le rayonnement local) et les processus de collision, essentiellement avec les molécules d'hydrogène. Pour chaque niveau d'énergie E_m :

$$\begin{aligned} \frac{d(g_m n_m)}{dt} = 0 = & - \sum_{n < m} g_m n_m (A_{mn} + B_{mn} J_{mn} + C_{mn}) \\ & + \sum_{n < m} g_n n_n (B_{nm} J_{mn} + C_{nm}) \\ & - \sum_{n > m} g_m n_m (B_{mn} J_{mn} + C_{mn}) \\ & + \sum_{n > m} g_n n_n (A_{nm} + B_{nm} J_{mn} + C_{nm}) \end{aligned} \quad (7)$$

Les coefficients A_{mn} , B_{mn} et B_{nm} sont les coefficients d'Einstein-Milne d'émission spontanée, d'émission induite et d'absorption entre deux niveaux E_m et E_n ; le coefficient C_{mn} est le taux de collision de la transition $m \rightarrow n$ et C_{nm} de la transition inverse.

Ces taux de collisions C_{mn} satisfont aux égalités du "bilan détaillé"

$$g_m C_{mn} = g_n C_{nm} \exp (E_m - E_n)/kT_k \quad (8)$$

où T_k est la température cinétique du milieu ; ils ont de plus proportionnels à la densité d'hydrogène moléculaire.

II.5 Approximation de Sobolev

La grandeur J_{mn} liée au rayonnement qui intervient dans l'équilibre statistique (7), est l'intensité spécifique moyennée sur le profil de la raie et sur toutes les directions. L'équilibre statistique est donc fortement couplé à l'équation de transfert et il faut résoudre simultanément ces deux équations, et donc s'appuyer sur un modèle géométrique et de transfert qui puisse simplifier le problème.

L'approximation la plus utilisée est l'approximation de Sobolev qui suppose qu'il existe un fort gradient de vitesse ("Large Velocity Gradient", en anglais), de sorte qu'un photon émis en un point du nuage ne pourra être réabsorbé qu'au voisinage de ce point à cause de l'effet Doppler. Le problème du transfert devient alors purement local et J_{mn} peut s'exprimer simplement en fonction de la probabilité d'échappement β_{mn} d'un photon, qui s'exprime elle-même en fonction de la profondeur optique dans une expression qui dépend de la géométrie. Finalement,

$$J_{mn} = \beta_{mn} R_{mn} + S_{mn} (1 - \beta_{mn}) \quad (9)$$

où R_{mn} est l'intensité du rayonnement extérieur incident, $S_{mn} = j_{mn}/K_{mn}$ est la fonction source du milieu et

$$\beta_{mn} = \frac{1 - \exp(-\tau_{mn})}{\tau_{mn}} \quad (10)$$

dans un nuage sphérique et isotrope où τ ne dépend que de r et pas de \vec{n} .

Ainsi il apparait que pour un nuage homogène, la densité d'hydrogène $n(\text{H}_2)$, la température cinétique T_k et la densité projetée N déterminent entièrement τ_{mn} et T_{ex} qui, à leur tour, déterminent la raie moléculaire.

A partir de la température de brillance T_B (équation 4), et de la largeur $\Delta\nu$ de la raie (équation 5), on peut alors obtenir, si l'on connaît la température cinétique T_k (équation 8), une relation entre T_B , $n(\text{H}_2)$ et N . Si on connaît la densité d'hydrogène ou si plusieurs transitions d'une même molécule sont observées, il est possible d'en déduire la colonne densité projetée de la molécule.

II.6 Approximation ETL

La procédure ci-dessus implique une mesure indépendante de la température cinétique du milieu. Il existe des molécules qui permettent de mesurer cette température, notamment le monoxyde de carbone ^{12}CO qui est si abondant que sa raie $J = 1-0$ est optiquement épaisse sur des régions moléculaires étendues. La température de brillance devient alors indépendante de l'épaisseur optique et dépend uniquement de la

température d'excitation (équation 4 avec τ_{mn} grand). Pour CO, dont le moment dipolaire est faible (≈ 0.1 Debye), la densité critique requise pour que l'excitation collisionnelle équilibre l'émission radiative spontanée, est de l'ordre de 10^3 cm^{-3} ; lorsque cette densité critique est dépassée, la température d'excitation est proche de la température cinétique (thermalisation) qui est alors déterminée, à partir de la mesure de la raie $J = 1-0$ par

$$T_{B_{10}} = \frac{h\nu_{10}}{k} \left[\frac{1}{e^{h\nu_{10}/kT_k} - 1} - \frac{1}{e^{h\nu_{10}/kT_{fc}} - 1} \right] \quad (11)$$

Cette approximation d'Equilibre Thermodynamique Local (ETL) où $T_{ex} \approx T_k$ présente les avantages d'éviter le calcul explicite de l'équilibre statistique et de permettre l'analyse d'observations d'une seule transition; cette analyse est cependant très hasardeuse lorsque la densité est proche de la densité critique.

II.7 Abondances moléculaires

On peut définir une abondance relative $f(X)$ comme étant le rapport de la colonne densité d'une espèce moléculaire X à la colonne densité d'hydrogène, ce qui sous-entend qu'il n'y a pas de gradients d'abondance dans le lobe de l'antenne. Il faut comparer en fait la colonne densité moléculaire avec celle d'un traceur de l'hydrogène moléculaire car ce dernier est inobservable directement par défaut de moment dipolaire permanent. Ce traceur est en général CO, ou plus exactement l'un de ses isotopes rares moins opaques comme ^{13}CO ou C^{18}O qui sont facilement excités et permettent la cartographie dans des régions même périphériques des nuages. Ainsi,

$$f(X) = \frac{N(X)}{N(\text{H}_2)} = \frac{N(X)}{N(\text{CO})} \frac{N(\text{CO})}{A_V} \frac{A_V}{N(\text{H}_2)} \quad (12)$$

où A_V est l'extinction visuelle due aux poussières interstellaires mélangées au gaz moléculaire. L'abondance relative CO/H_2 n'est pas obtenue directement dans les nuages moléculaires froids, mais indirectement grâce, d'une part, à la très forte corrélation entre la

colonne densité de CO et l'extinction visuelle (voir Dickman 1978, Cernicharo et Guélin 1987), et d'autre part, aux hypothèses standards d'un rapport gaz/poussière constant dans le milieu interstellaire (voir Bohlin *et al.* 1978 qui donnent $N_{\text{H}}/E(B-V) = 5.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$). Les propriétés optiques des poussières sont supposées être les mêmes à l'intérieur et en bordure des nuages, c'est à dire là où elles sont observées ($R_v \equiv A_v/E(B-V) = \text{cste} \approx 3$).

La détermination de l'abondance d'une espèce est donc basée sur l'abondance de CO ou de ses isotopes ^{13}CO et C^{18}O ; la chimie de ces molécules posent des problèmes délicats de fractionnement ou de photodissociation qui peuvent faire peser des incertitudes notamment sur la valeur de l'abondance de ^{13}CO qui est pourtant également essentielle pour estimer la masse des nuages moléculaires. De plus comme CO demande peu de densité pour être excitée, on peut prévoir une surestimation des abondances en comparant à CO d'autres espèces plus difficilement excitables.

II.8 Résumé

Se trouvent résumées ici les principales hypothèses à poser, ainsi que les précautions à prendre lors du dépouillement et de l'interprétation d'une observation moléculaire :

- la source est uniforme en densité : les gradients à l'intérieur du lobe de l'antenne sont ignorés;
- l'analyse de plusieurs transitions d'une même molécule dans le but de déterminer sa colonne densité et la densité d'hydrogène moléculaire se heurte à plusieurs problèmes :
 - + les sections efficaces de collision ne sont connues que pour quelques espèces;
 - + les raies observées ne doivent pas être thermalisées afin que leur température de brillance dépende effectivement de la densité;
 - + la résolution des équations statistiques demandent l'élaboration d'un modèle géométrique et de transfert (par exemple LVG);

- + la température cinétique doit être estimée indépendamment;
 - + les observations doivent être réalisées avec la même calibration et avec la même résolution spatiale, ce qui rend difficile l'exploitation de données collectées à différentes fréquences avec le même télescope;
 - + les raies doivent se former dans la même région;
- l'approximation ETL permet de calculer une température cinétique avec CO qui possède un faible moment dipolaire. Cette hypothèse évite le calcul statistique et permet de déduire une colonne densité avec une seule transition observée; cependant les résultats doivent être ici interprétés avec précautions;
 - l'estimation des abondances moléculaires par comparaison des colonnes densités, ignore l'existence probable de gradients d'abondance à l'intérieur du lobe du télescope. De plus, cela suppose que CO et ses isotopes sont de bons traceurs de la matière moléculaire.

III.III OBSERVATION DE DEUX NUAGES SOMBRES DANS LE COMPLEXE DU TAUREAU

Ce paragraphe présente, sous forme d'une publication, des observations en ^{13}CO ($J = 1-0$) effectuées avec le radio télescope de 2.5m de l'Observatoire de Bordeaux. Il s'agit de poursuivre le projet démarré par José Cernicharo et Michel Guélin en 1980, d'exploration systématique des nuages sombres entre $l^{\text{II}} = 140^\circ$ et $l^{\text{II}} = 180^\circ$, et plus particulièrement du complexe moléculaire Taureau-Cocher-Persée (Figure III.1). Dans cet esprit, le télescope de Bordeaux avec ses $\approx 5'$ de résolution angulaire à 115 Ghz, est très bien adapté à la cartographie de grandes régions du ciel (le complexe Taureau-Cocher-Persée couvre quelques 400 degrés carrés environ). Le récepteur millimétrique de l'antenne de Bordeaux a été mis en service dans les premiers mois de l'année 1980. Une présentation détaillée en est faite par Baudry *et al.* (1981). Ses caractéristiques à la fréquence $\nu = 110.201$ Ghz ($\lambda \approx 2.7\text{mm}$) de la transition $J = 1-0$ de ^{13}CO , sont un diamètre de lobe à mi-puissance de $4.4'$, une résolution en vitesse de 0.27 km/s pour chaque

canal de 100 kHz, et une température système d'environ 800 -1200 K suivant les conditions climatiques.

Le choix du complexe du Taureau (Figure III.2) est justifié dans l'introduction de la publication qui suit et peut se résumer en trois points :

- la proximité (≈ 140 parsecs, Elias 1978) qui permet de détecter des petites condensations avec une résolution angulaire de 5' qui représente environ 0.2 pc à 140 pc;
- l'aspect fragmenté (Baudry *et al.* 1981, Myers 1982) et la présence de signes manifestes de formation d'étoiles de faibles masses (T-Tauri, objets de Herbig-Haro);
- la profusion d'espèces moléculaires rares et des conditions chimiques inhabituelles (Tölle *et al.* 1981, Cernicharo *et al.* 1984).

Ces différents aspects font du complexe du Taureau un candidat intéressant dans l'étude des conditions physico-chimiques des nuages moléculaires et des mécanismes de formation d'étoiles.

Il faut souligner de plus l'appartenance du complexe Taureau-Cocher-Persée à une structure en couronne à l'échelle de la galaxie appelée "ceinture de Gould" : les étoiles jeunes O et B les plus brillantes du voisinage solaire ne sont distribuées le long du plan galactique mais au contraire être distribuées dans un plan incliné d'environ 20°. Elles sont disposées en une couronne, le soleil se trouvant à l'intérieur de celle-ci. Cette couronne est connue sous le nom de ceinture de Gould. Elle atteint sa latitude galactique minimale en direction d'Orion, et maximale en direction de Ophiucus-Scorpion. Une analyse cinématique de ces étoiles a montré que la majorité d'entre elles appartenaient à un groupe en expansion. Cette expansion se retrouve également dans le mouvement du gaz neutre au voisinage de la ceinture de Gould. D'après le diamètre de 750 à 1000 parsecs et la vitesse d'expansion d'environ 3.6 km/s, l'âge cinématique du gaz est d'environ

65 millions d'années, en accord raisonnable avec l'âge nucléaire des étoiles (Lindblad 1974). L'origine de la ceinture est sans doute due à une perturbation du mouvement des étoiles au passage d'un onde de densité correspondant à un bras spiral, ou à l'explosion d'une ou plusieurs supernovae. Les complexes moléculaires les plus proches du soleil sont situés dans la direction des nuages HI ou des groupes stellaires de la ceinture de Gould (Hercule-Lyre, Ophiucus-Scorpion, Orion, Taureau-Cocher-Persée, etc.). Plusieurs de ces complexes ont été étudiés en détails, mais aucune étude globale n'a encore été réalisée. Les observations moléculaires peuvent apporter de nombreux renseignements sur la structure de cette ceinture.

J.Cernicharo et M.Guélin ont démarré le projet par l'étude de "Heiles Cloud 2" (HCL2), nuage sombre très opaque qui contient la source moléculaire intense "Taurus Molecular Cloud 1" (TMCl). G.Duvert a pris la suite en étudiant le long nuage filamentaire L1495 (Lynds 1962). Parallèlement, R.Bachiller a entrepris depuis 1981 l'étude du complexe de Persée qui apparait différent des autres régions par la présence de nébulosités brillantes, l'existence de pics de CO intenses (gaz chaud à 25-50 K) et la présence d'étoiles massives. Il est souvent fait référence à ces auteurs dans la publication qui suit, présentation d'une étude moléculaire de deux autres nuages du Taureau, L1529 et L1506 dont l'aspect est également très fragmenté et filamentaire. Les objectifs de ce travail sont doubles :

- l'étude de la corrélation de l'extinction visuelle A_V avec l'isotope ^{13}CO du monoxyde de carbone, ses variations à travers les différentes régions du complexe et les conséquences sur l'utilisation des isotopes de CO comme traceur de la matière moléculaire;
- l'étude de la structure des nuages et de la distribution des masses des nombreux fragments identifiés.

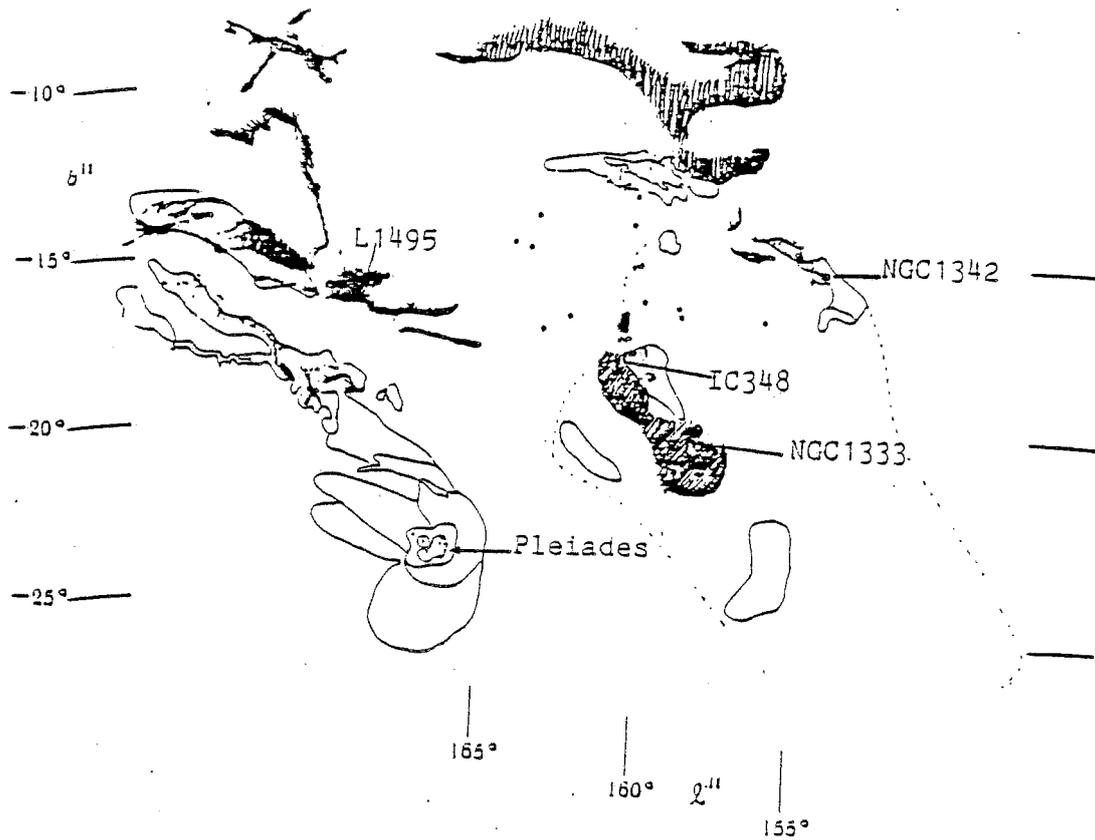
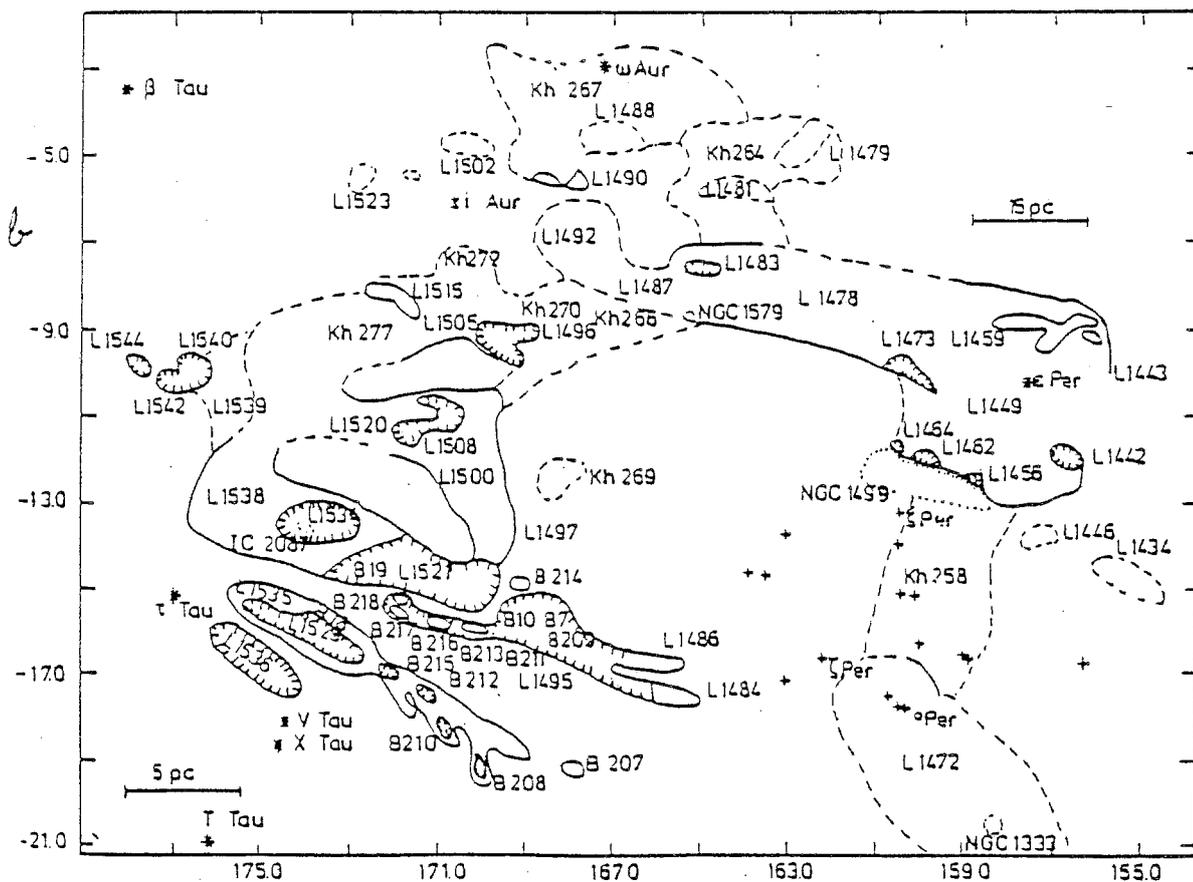


Figure III.1.a Représentation schématique du complexe Taureau-Cocher-Persée (Lynds 1969).

Figure III.1.b Les nuages sombres du même complexe. Les hachures délimitent les régions de forte extinction visuelle. Les étoiles les plus brillantes de l'association Per OB2 sont indiquées par des croix (Wouterloot et Habing 1985)



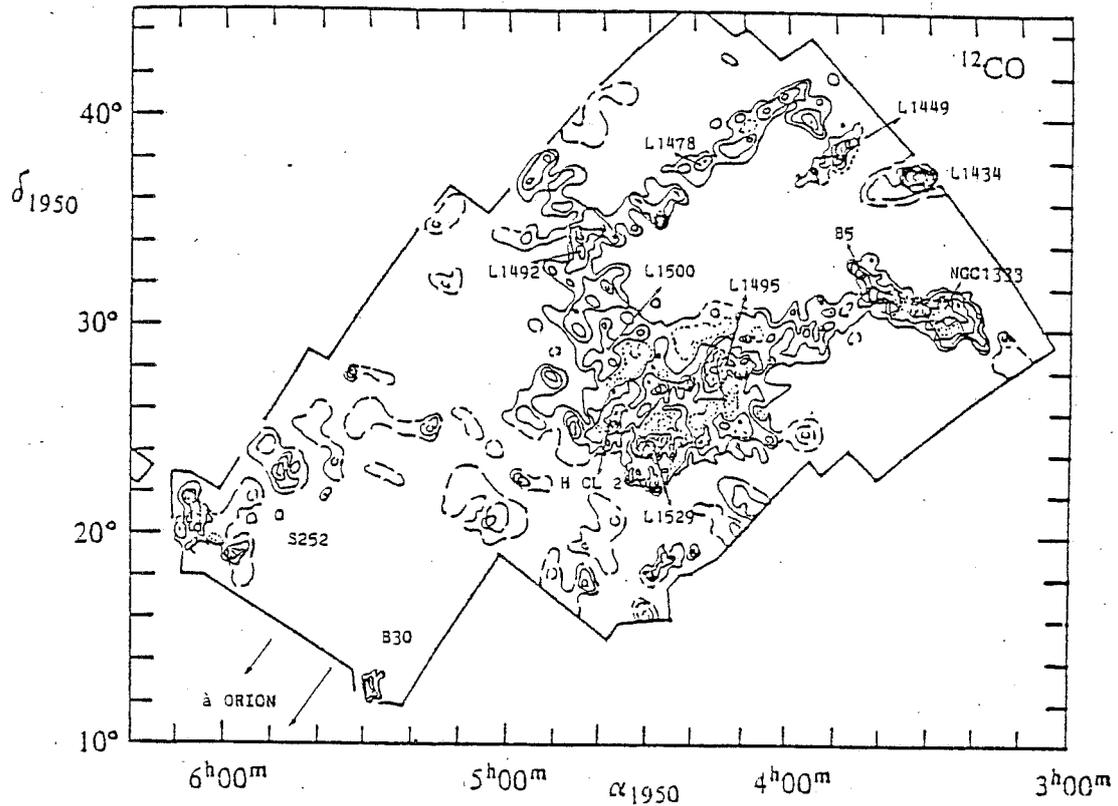
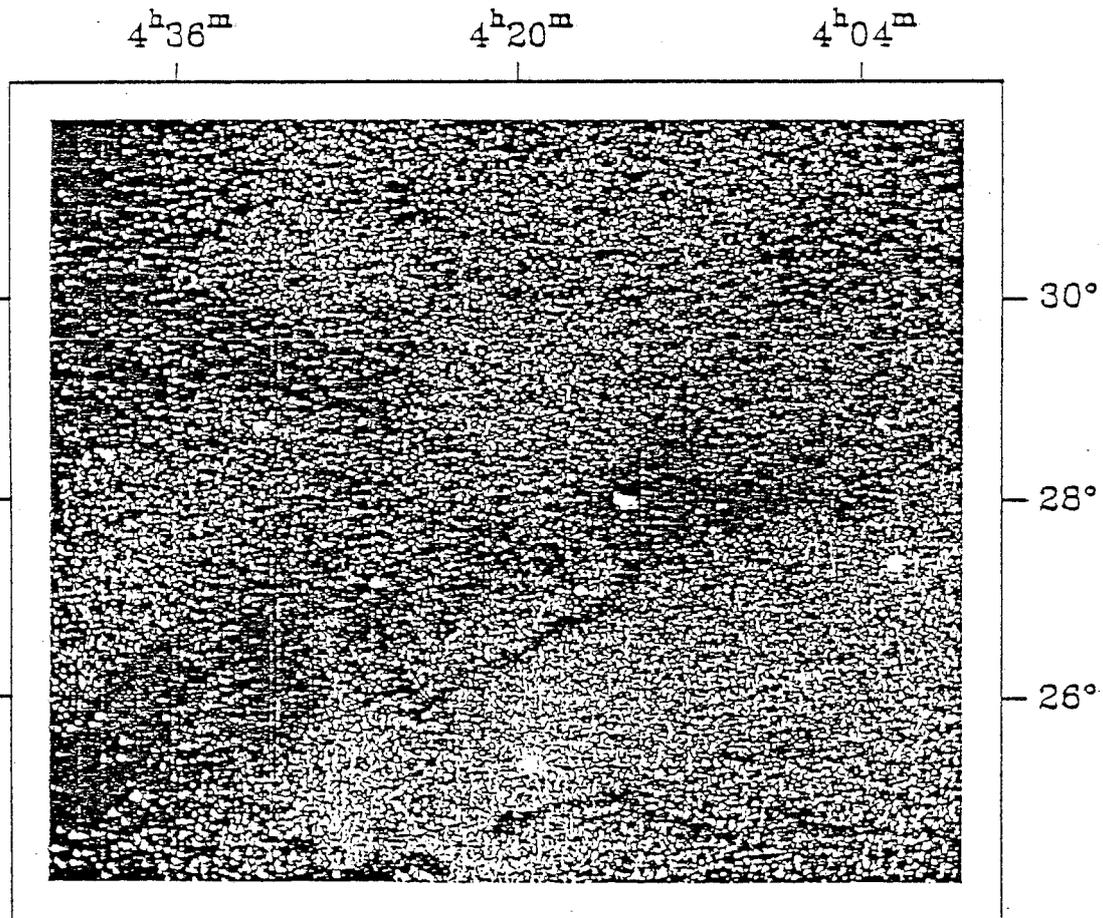


Figure III.1.c Intensité intégrée de CO dans le complexe Taureau-Cocher-Persée (Baran 1982). Résolution spatiale : $8'$, contours : 2, 4, 6...Kkm/s.

Figure III.II Photographie d'après Barnard (1927) du complexe du Taureau. On reconnaît L1495 au centre, L1506 et L1529 plus au sud, HCL2 en plein sud-est.



- Baran,G.P. : 1982, *Thesis* Columbia University
- Barnard,E.E. : 1927, *Carnegie institution of Washington Publications*,
n° 247, I.
- Baudry,A.,Cernicharo,J.,Perrault,M.,Despois,D.,De la Noë,J. : 1981,
Astron.Astrophys. 104, 101
- Bohlin,R.C., Savage,B.D., Drake,J.F. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 132
- Cernicharo,J.,Guélin,M.,Askne,J. : 1984, *Astron. Astrophys.* 138, 371
- Cernicharo,J.,Guélin,M. : 1987, *Astron.Astrophys.* 176, 299
- Dickman,R.L. : 1978, *Astrophys.J. Supp. Series* 37, 407
- Elias,J.H. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 857
- Lindblad,P.O. : 1974, *Highlights of Astronomy*, ed E.A.Muller, p381
- Linke,R.A., Guélin,M., Langer,W.D. : 1983, *Astrophys.J.* 271, L85
- Lynds,B.T. : 1962, *Astrophys.J. Supp. Series* 7, 1
- Myers,P.C. : 1982, *Astrophys.J.* 257, 620
- Perrault,M. : 1981, *Thèse de troisième cycle*, Université de Bordeaux
- Tölle,F.,Ungerrechts,H.,Walmsley,C.M.,Winnewisser,G.,Churchwell,E. :
1981, *Astron.Astrophys.* 95, 143
- Wouterloot,J.G.A.,Habing,H.J. : 1985, *Astron.Astrophys.* 151, 297

A Molecular study of L1506 and L1529 dark clouds in Taurus

E.NERCESSIAN⁽¹⁾, A.CASTETS⁽¹⁾, J.CERNICHARO⁽²⁾, J.J.BENAYOUN⁽¹⁾

(1) Groupe d'Astrophysique de l'Observatoire de Grenoble
Université Scientifique et Médicale de Grenoble
CERMO B.P.68
38402 Saint Martin d'Hères Cedex. FRANCE. UA 708 du CNRS

(2) also at I.R.A.M. Domaine Universitaire de Grenoble
Voie 10. 38406 Saint Martin d'Hères. FRANCE

Submitted to Astronomy and Astrophysic Main Journal

Subdivision : Diffuse Matter in Space

Running Title : ¹³CO in L1506 and L1529

Send proofs to : E.NERCESSIAN

Thesaurus Code : 09.09.1

09.19.1

09.07.1

ABSTRACT

We have surveyed at moderate resolution (5') the ^{13}CO ($J=1-0$) emission of the Taurus dark clouds L1529 and L1506. Our data together with the visual extinction A_v derived from star counts, give two values of the ^{13}CO abundance

$$N(^{13}\text{CO}) = 1.4 \pm 0.1 (A_v - 0.6 \pm 0.2) 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ in L1529}$$

$$N(^{13}\text{CO}) = 0.9 \pm 0.1 (A_v - 0.9 \pm 0.2) 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ in L1506}$$

The masses of L1529 and L1506 are found to be 700 and 460 M_\odot respectively. The mean density is 400 cm^{-3} for both clouds. The ^{13}CO abundance show variations from place to place accross the whole Taurus-Auriga-Perseus complex. Local physical conditions like hydrogen density, kinetic temperature and the UV radiation field could be responsible for such variations through the photo-chemical processes.

The velocity structure of the region is found to be very confused and could not be explained by rigid-body rotation ; the only clear feature is a strong radial velocity gradient along L1506. The gravitationnal stability of the clouds is examined.

Key words : - interstellar clouds
 - interstellar molecules
 - molecular abundances

1. INTRODUCTION

The central part of the Taurus complex is characterised by the presence of several dark clouds with filamentary appearance (see Fig.1 of Duvert, Cernicharo and Baudry 1986 hereafter referred as DCB). This complex shows many sign posts of recent low mass star formation, such as T-Tauri stars and Herbig-Haro objects. Elias (1978) and Cohen and Kuhl (1979) have made extensive optical, near-infrared and infrared studies of the embedded and pre-main-sequence H α emission stars from which estimates of the visual extinction in the stars' line of sight and stellar age have been derived. The presence of high visual extinction clumps throughout the whole Taurus complex (Cernicharo and Bachiller, 1984 ; Cernicharo, Bachiller and Duvert, 1985, hereafter referred as CB and CBD respectively), the fragmentary appearance of the clouds and the confused kinematic structure of the Taurus dark clouds, suggest that star formation is still active in this region (Baudry et al. 1981 ; Myers 1982 ; Murphy and Myers 1985 ; Cernicharo and Guélin 1986, hereafter referred as CG ; DCG ; this paper)

The Taurus dark clouds show, in addition to the star formation activity, a rather complex chemical behaviour. Several small size cloudlets of the complex are the strongest cyanopolyynes emitters in the sky. They show chemical abundance variations over scales of a few tenths of pc (Tölle et al. 1981 ; Cernicharo, Guélin and Askne, 1984). The reasons for such behaviour are not well understood, and it is clear that a systematic study of the large clouds in which the cloudlets are embedded is necessary in order to derive their physical and chemical properties.

The chain of filamentary globules going from L1535 to L1506 (Lynds 1962) (see Fig 1) have been the subject of several molecular studies. The H $_2$ CO observations of Kutner (1973), and the OH study of Crutcher (1973) have shown that the B18 cloud may be rotating like a rigid-body. However, the systematic ^{13}CO and HCO $^+$ observations of Baudry et al. (1981), and the H $_2$ CO observations of Heiles and Katz (1976) show that the velocity structure of B18 is too complex to be explained by a single rotating cloud. Actually, several clouds must be present on the line of sight in order to explain the double velocity ^{13}CO components and the complex velocity pattern found in many positions. Murphy and Myers (1985) have modelised the B18 cloud from ^{12}CO observations to be a shell fragment of diameter ~ 3 pc expanding at 2 kms $^{-1}$. However, as shown by CG, ^{12}CO

is too optically thick in the Taurus clouds and it is unlikely to be a good tracer of the structure and physical properties of the inner parts of the cloud.

The proximity of the Taurus complex (≈ 140 pc, Elias 1978), permit us to resolve both large and small size regions with telescopes of moderate size. Consequently, we can obtain morphological and kinematic information of the condensed regions where stellar birth takes place. In order to obtain a detailed picture of the region and to derive its physical properties, we have made a systematic ^{13}CO survey of the L1529 and L1506 clouds with the Bordeaux 2.5-millimeter radiotelescope (HPBW=4.4' at 2.6 mm). The data reported here cover an area of ≈ 5.5 deg². The spectra together with the visual extinction values of CB permit us to derive the ^{13}CO abundance across the cloud together with its mass and density structure. The ^{13}CO abundance is found, as in other Taurus clouds (CG ; DCB ; Bachiller and Cernicharo, 1986, hereafter referred as BC), to vary across the region studied. In order to understand these ^{13}CO abundance variations, we have performed calculations of the CO isotope abundances with a steady state chemical model, under various physical conditions.

In section 2 and 3 we describe the observations and salient results. Section 6 is devoted to the kinematical structure of the cloud. In section 5 we describe the chemical model whose results are discussed in section 6. The gravitationnal stability of the region is also discussed in this latter section.

2. OBSERVATIONS

The data consist of 816 ^{13}CO J=1-0 spectra obtained from 1983 to early 1985 with the 2.5 m diameter millimeter-wave telescope of the Bordeaux Observatory. The half power beam-width at this frequency is 4.4 arcminutes and the beam-efficiency close to 0.9. The receiver includes a Schottky diode mixer and an IF system cooled to 20 K. The whole system has been described in detail by Baudry et al (1981). During the observing run typical system temperature were 800-1200 K.

All the observations were made in the frequency switching mode (± 5 Mhz) and with a 5' spacing. The spectral system consists of 256x100 kHz channels giving at the ^{13}CO frequency a velocity resolution of 0.27 km/s. The data were calibrated every 5 minutes by switching between a load at ambient temperature and the sky. The zenith sky opacity was determined every two hours from sky

dips.

The standard reference positions used during the Bordeaux survey of the Taurus-Auriga-Perseus complex (see CB ; CBD ; CG ; BC ; DCB) were observed several time every day to insure a good relative calibration across this complex. The data toward these reference positions were then compared to the data obtained with other radio-telescopes in order to insure a good absolute calibration (see CG).

3. RESULTS

3.1 ^{13}CO column density and clouds structure

Polynomial baselines of degree two were removed from the raw data before a Gaussian analysis of each spectrum was made. In each observed position, the line center, width, intensity and integrated intensity have been derived from a gaussian fit to the data. Typical linewidth of single line spectra were 0.6 to 1.1 km/s. The peak temperatures lie between 0.5 and 4.3 K, depending on the position in the cloud. Some spectra, most of them situated in the L1524 west side (see Fig.1), were obviously double-peaked. The remaining ones showed a confused shoulder aspect, with a linewidth of about 2.5 km/s. For all these multiple-lined spectra, a multi-Gaussian analysis has been applied ; the resulting integrated intensity is the sum of all the components.

The ^{13}CO column density has been derived in the LTE approximation assuming an identical excitation temperature for the ^{13}CO and ^{12}CO lines (see Dickman 1978). This familiar procedure has been used by CG, BC and DCB to derive the ^{13}CO and C^{18}O column densities in several clouds of the Taurus-Auriga-Perseus complex. From Myers'(1982) ^{12}CO map of B18, which corresponds to our L1529 map minus the west part of the L1524 region, we assumed an excitation temperature of 10 K across the whole region. Goldsmith and Sernyak (1984) adopted 13.4 K in one condensation L1535 but it is certainly too high for the entire cloud.

Fig.1 shows the derived ^{13}CO LTE column density in the L1529 and L1506 clouds. This figure also shows the positions of the T-Tauri and Herbig-Haro objects. The infrared point sources from IRAS catalog and the dark clouds from the Lynds catalog are also indicated. From this map, we define the L1529 cloud

to be the area intercepted in the range of offsets $\Delta\alpha = 200'$ to $20'$ and $\Delta\delta = -10'$ to $-70'$, and the L1506 one the west side beyond $\Delta\alpha = 20'$.

The L1529 and L1506 clouds show together an elongated structure extending from south-east to north-west ; in this map, we can distinguish a chain of five condensations corresponding to a column density higher than $5.10^{15} \text{ cm}^{-2}$, with a mean size of 20 arcminutes (0.8 pc at a distance of 140 pc). The L1529 cloud contains three of them which for simplicity will be referred in the following to as, from east to west, L1535, TMC2, and L1524E. A fourth one is situated in the L1506 cloud and will be hereafter referred as L1506E. Due to the presence of double-peaked lines, leading to a possible superposition of two clouds on the line of sight, the situation in the last condensation, referred hereafter as L1524W, is more confused. However in the following, in order to be consistent with the star counts maps of CB, all the calculations will be made considering that L1524W pertains to the L1529 cloud.

According to Fig.2 showing a collection of observations made in the Taurus region with the same telescope, (CG ; DCB) the northern part of L1529 up to L1521 corresponds to a bridge of low density material between two parts of the complex. This is in agreement with the separation in "HCL2" and "DL2" made by Murphy and Myers (1985) in the same region.

3.2 Correlation $^{13}\text{CO}/A_v$

To derive the visual extinction A_v , CB and CBD have performed star counts in Taurus and Perseus. The procedure used is described in great detail in their papers. Fig.3 displays their derived A_v values against our integrated intensity data and shows clearly the close correlation between visual extinction and ^{13}CO emission. The unmatched resolution between radio observations ($5'$) and star counts ($2.5'$) requires an A_v averaging over the radio beam. The correlation has been obtained by minimizing the usual quantity (mean least square method) :

$$\sum_i (N_i - a A_v^i - b)^2$$

in which N_i and A_v^i are individual values of column densities (in cm^{-2}) and visual extinction (in mag.), a and b are the slope and the intercept of the fitted line.

In order to detect a possible peculiar behaviour, this minimization has

been performed on one hand in each condensation, and on the other hand over the entire clouds L1506 and L1529. The results for both situations are illustrated in Figs 4 and 5 and summarized in Table 1. The salient features are :

i) the two correlations obtained in both clouds

$$N_{1te}({}^{13}\text{CO}) = 1.4 \pm 0.1 (A_V - 0.6 \pm 0.2) 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ in L1529}$$

$$N_{1te}({}^{13}\text{CO}) = 0.9 \pm 0.1 (A_V - 0.9 \pm 0.2) 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ in L1506}$$

We note that the value of the slope in L1506 is the lowest one found in the Taurus-Perseus complex.

ii) the changes in ${}^{13}\text{CO}/A_V$ ratios from one region to another. Indeed, the slope of the correlation goes from $0.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ in L1506 up to $1.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ in L1524W, the densest part of the surveyed area (see below).

In section 4, using a chemical model for molecular clouds, we examine the influence of the local conditions on the ${}^{13}\text{CO}/A_V$ correlation .

3.3 Masses, densities and sizes

To calculate the masses, we assume the column density of H_2 molecules to be related to A_V by $N(\text{H}_2) = 0.94 10^{21} A_V \text{ cm}^{-2}$ (Bolhin, Savage and Drake 1978). Then a crude estimate to the cloud mass is obtained by :

$$M_{\text{max}} = (1+4/9) m(\text{H}_2) \sum_i N_i(\text{H}_2) S_i$$

where $m(\text{H}_2)$ is the mass of the H_2 molecule with the factor 4/9 allowing for 10% helium, $N_i(\text{H}_2)$ is the column density of hydrogen deduced from ${}^{13}\text{CO}$ column density combined with the Bolhin's et al. relation, and S_i is the area intercepted by a 5 arcminutes lobe at a distance of 140 pc. The summation is performed over the observed positions of the region under interest.

The L1529 and L1506 cloud masses are found to be respectively 700 and 460 solar masses ; a value of the column density corresponding to an A_V equal to 1 mag was chosen as the external limit of the cloud.

The evaluation of the corresponding mean density was made with the assumption that the volume of each cloud is well modelled by a cylinder. This was suggested, in agreement with Myer's model of B18 (Myers 1982), by the elongated appearance of the ^{13}CO map and the visible obscuration of the cloud. The cylinder axis was supposed to lie in the plane of the sky. Its length and radius were evaluated as respectively 7.0 and 1.1 pc for L1529, 5.0 and 0.9 pc for L1506. That this axis is skewed in front of the sky will not affect the conclusions reached here.

Both mean densities are satisfactorily found to be very close to each other, that is to say 370 and 400 cm^{-3} for L1529 and L1506 respectively.

Since each condensation, described in section 3.1, exhibits a roughly spherical symmetry (contrarily to the clouds shape), we decided to use this geometry for the evaluation of their density. In a condensation, a value of the column density arbitrarily chosen as $3/4$ of the column density in the center, defines the limit of the 'core'. In the same way, we used a value of $1/2$ for the outer limit of the condensation.

The radii, masses and density obtained are shown in Table 2. These results confirm the conclusions reached by many authors concerning the radial dependance of the density into globules and cores : indeed we deduce a $n(r) = c r^{-1.3}$ law in good agreement with previous works (see the discussion in CBD).

A comparison of these mass estimates with others based on different methods, shows great variations. In the B18 cloud, our value of $670 M_{\odot}$ (B18 corresponds to L1529 minus 1524W) has to be compared to the $900 M_{\odot}$ found by Myers (1982) by modeling the visual extinction in the region, or to the $300 M_{\odot}$ obtained through integrated ^{12}CO intensity (Murphy and Myers 1985). However, in the latter case, because of the opacity of the ^{12}CO lines, this molecule is not very appropriate for the evaluation of cloud masses (see CG).

Conversely, ^{13}CO has been used as a mass tracer by Goldsmith and Serniak (1984) in L1535 to find $20 M_{\odot}$, and by Heyer (1985) in L1535, TMC2, L1524E and L1524W to get 13, 62, 54 and $29 M_{\odot}$ respectively, all these results being in good agreement with the values listed in Table 2.

The mean densities obtained by Myers (1982) for his B18 model are systematically higher (610 cm^{-3} versus 370 cm^{-3} for us), a discrepancy also seen in the Goldsmith and Serniak (1984) results for the L1535 condensation (4500 cm^{-3} versus 2500 cm^{-3}).

On the other hand, the largest part of the cloud mass is contained in a region of faint nebulosity ($500 M_{\odot}$ for the regions where A_V is lower than 4 mag versus 200 for the darkest parts of the cloud). In fact, the contribution to the total mass of the cloud by the opaque region is at most 40 percent, depending on which contour of the ^{13}CO column density we use to separate the opaque and the faint regions. A more realistic value is certainly close to 30 percent. In that case, if, according to our geometrical analysis for the whole cloud, the opaque region lies within a cylindrical region, the radius would be 0.37 pc, a result in good agreement with Myers' (1982) estimate.

4. Velocity structure

As in many Taurus clouds, some parts of the region observed here present double ^{13}CO components. This is for example the case in HCL2 (CG) and in L1495 (DCB).

Figure 6b shows a 10×10 spectra map of L1524W, which is close to the overlap region between B18 and L1506. Two velocity components can be clearly seen. In some directions, up to three velocity components were observed (see figure 6b, offset $\Delta\alpha = 60'$ to $70'$ and $\Delta\delta = -10'$ to $-20'$). The same behaviour is found towards other directions. For example, Figure 6a shows another 10×10 spectra map of the region around L1535. In the south of this map, the low velocity component is weak and makes a bridge of gas between L1535 and TMC2 (see below). Elsewhere, towards the north, the low velocity component shows a strong radial velocity gradient. However, the more conspicuous velocity structure in the region is a well defined radial velocity gradient from southeast to northwest of DL2, first suggested by Crutcher (1973) and analysed in detail by Baudry et al. (1981).

The rather complex velocity structure of DL2 can be seen in Fig 7 which shows the line intensity integrated over different velocity ranges. Two clouds, labelled in Fig.7 as A and B, appear at the lowest velocity range. Cloud A is composed of two filaments with very narrow lines. The first, cloud A_1 , is nearly perpendicular to DL2 and crosses it in L1524W (see Fig.6b and Figs.7a,b,c). Its extension is $\approx 10' \times 40'$ and its mass $30 M_{\odot}$. The ^{13}CO linewidths and the line velocity are $\approx 0.6 \text{ km s}^{-1}$ and 5 km s^{-1} respectively. A similar cloud is also observed towards L1495 (DCB), where a filament is found nearly perpendicular to the bulk of the ^{13}CO emission in the region (see our Fig.2 position $\alpha \approx 4^{\text{h}}18^{\text{m}}$,

$s \approx 27^{\circ}30'$).

The position of the ^{13}CO emission maxima of cloud A_1 was observed by Baudry et al. (1981) in the $J=1-0$ line of HCO^+ and C^{18}O (see their Fig.9). The C^{18}O emission was found to be weak, and HCO^+ was not detected. This suggests that the ^{13}CO emission is optically thin and that the hydrogen density is not too high. From our data, we derive an average hydrogen density over cloud A_1 of 500 cm^{-3} . In the direction of the emission peak, we derive $N(^{13}\text{CO}) \approx 3.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ corresponding to a visual extinction of 3 mag. Only the region showing strong double velocity components in Fig.6b has an obvious counterpart in the optical extinction map of Fig.3a.

Cloud A_2 is parallel to DL2 and perpendicular to cloud A_1 . In Fig.7 we can see that cloud A_2 appears after a minimum of emission northeast of cloud A_1 and extends towards the southeast (see Fig.7c). Its ^{13}CO emission is weak and it can be seen in the spectra as a blue shoulder. The mass of cloud A_2 is $20 M_{\odot}$. There is not a clear counterpart for this cloud in the visual extinction map (see Fig.3a); however, it is clearly seen in the ^{12}CO map of Murphy and Myers (1985) at radial velocity of 5 kms^{-1} .

At $\Delta\alpha = +120'$ and $\Delta s = -40'$, a new low velocity component can be seen in Fig.7b. This cloud, labelled B, crosses a bridge of gas in the south at radial velocity of 6.0 kms^{-1} , which goes from L1535 (cloud D) to TMC2 (cloud F_1); in the L1535 region, the spectra are clearly doubled peaked (see Fig.6a). For $\Delta s > -20'$, cloud B shows single narrow lines, and extends to the northeast: Fig.7c shows that it intercepts the 5.3 kms^{-1} filament of HCL2 (see CG) at $\Delta\alpha = +140'$ and $\Delta s = +40'$. Across cloud B, there is a strong radial velocity gradient of $0.40 \pm 0.07 \text{ kms}^{-1} \text{ pc}^{-1}$. The mass of this cloud is about $270 M_{\odot}$.

In Fig.7c and 7d, an isolated cloud, apparently unrelated to the bulk of the ^{13}CO emission, appears (cloud labelled C). It is roughly spherical with a radius of $\approx 10' = 0.4 \text{ pc}$. Its mass is $25 M_{\odot}$ and its average density $\approx 700 \text{ cm}^{-3}$.

At velocities $\geq 5.5 \text{ kms}^{-1}$ several clouds are located along DL2 (clouds labelled D to H) and coincide with optical patches of visual extinction (Figs.3a and 3b). Cloud D is the eastern fragment of DL2 and roughly corresponds to L1535. It appears fragmented in two cloudlets: the first one D_1 can be seen in Fig.3a as a low visual extinction region of $10 M_{\odot}$ and $10'$ extension northeast of L1535; the second one D_2 is L1535 and can be seen in Figs.7c to 7e; the mass of L1535 is $20 M_{\odot}$.

Cloud F is B18 (see Figs.7d to 7g) and it is fragmented in several clumps

coinciding in position with the more conspicuous features of the visual extinction map (see Fig.3a). For example, clump F_1 is TMC2 and shows ^{13}CO emission from 5.0 to 7.5 kms^{-1} , clump F_2 is L1524E and clump F_5 is L1524W. The masses of F_1 , F_2 , F_3 , F_4 and F_5 are estimated to be 60, 60, 25, 25 and 30 M_\odot respectively, while the mean density is everywhere roughly constant at 1500-2000 cm^{-3} . Across cloud F there is some radial velocity variation of the ^{13}CO lines; however, there is no clear evidence for a radial velocity gradient: the velocity structure in this region, which represents the bulk of the ^{13}CO emission in B18, is chaotic and probably reflects the fragmentary appearance of the cloud.

The more obvious velocity gradient is of $0.13 \pm 0.01 \text{kms}^{-1} \text{pc}^{-1}$ along cloud E_1 to cloud H. Cloud E_1 appears in the 5.5-6.0 kms^{-1} velocity range (Fig.7d) and is evidently disconnected from cloud F. It seems to form a bridge of $10M_\odot$ of low density gas ($\approx 400 \text{cm}^{-3}$) between clump F_5 and the cloud L1506 (clump $E_2 \approx$ L1506E to H). This bridge of gas corresponds to a low visual extinction hole between L1529 and L1506 in Figs. 3a and 3b. Gravitational stability and cloud binding in the whole region will be discussed in section 6.2.

5. Chemical model

Several authors have approached the problem of a quantitative comparison of carbon monoxide column densities with visual extinctions. Some have studied single clouds (Tucker et al. 1976, Elmegreen and Elmegreen 1979; CG; BC) while others like Dickman (1978) used a statistical approach, surveying many locations in a large number of clouds. The values related for the $^{13}\text{CO}/A_V$ and $\text{C}^{18}\text{O}/A_V$ ratios are widespread (see Table 1 of BC plus our results in L1506 and L1529).

In order to study the correlations between different clouds, we have constructed a steady-state model of interstellar clouds from the recent one of Viala (1986). The influence of the various local physical conditions is studied through the variation of four main parameters: i) the visual extinction A_V throughout the cloud, ii) the hydrogen density distribution $n_H(r)$, iii) the kinetic temperature distribution $T_K(r)$ and iv) the intensity of the UV interstellar radiation field.

The chemical reaction scheme affects 86 species formed from H, He, C, O, ^{13}C and ^{18}O , and connected by 1216 reactions. Some processes involving Mg, Fe, S and Si are included because of the strong dependence of the ionization equilibrium on the presence of these heavy elements.

Species are H, H_2 , H^+ , H_2^+ , H_3^+ , Fe, Fe^+ , Si, Si^+ , Mg, Mg^+ , e, C, C^+ , O, O^+ , O_2 , O_2^+ , CH, CH^+ , CH_2 , CH_2^+ , CH_3 , CH_3^+ , CH_4 , CH_4^+ , CH_5^+ , C_2 , C_2^+ , C_2H , C_2H^+ , C_2H_2 , C_2H_2^+ , C_2H_3^+ , CO, CO^+ , HCO, HCO^+ , CO_2 , OH, OH^+ , H_2O , H_2O^+ , H_3O^+ and the isotopic substitutions including ^{13}C or/and ^{18}O . The reactions are those used by Viala (1986) for the species mentioned above ; updated rates from laboratory measurements at low temperature are listed in Table 3. To study isotopic chemistry, the reactions involving carbon and oxygen in the set of basic reactions are replicated in the sense of Langer et al. (1984). Isotopic fractionation, first introduced by Watson et al. (1976) is included : rates of these reactions are taken from Langer et al. (1984).

Gas phase reactions alone are considered except H_2 formation on grains. Since for $A_V > 5$ mag there is no evidence for a decrease of CO abundance in the inner part of clouds (CG), the condensation of CO on dust grains suggested by Leger (1983) is not included.

Ionizations and dissociations by cosmic rays (with a primary ionization rate of 10^{-17}s^{-1}) are taken into account because of their important role in initiating the dense cloud chemistry.

Most of the molecules are photodissociated by a continuum, some by a two photon process (H_2) ; others have a continuum contribution added to predissociation (OH, CO). For CO and its isotopes we calculate, as Glassgold et al. (1985) did, the selective dissociation in three absorption bands with the data given in their Table 1. All the allowed transitions from the four lowest rotational levels are included, assuming them to be populated with a constant excitation temperature taken equal to the kinetic one. The formation and destruction of CO is described in Appendix.

The chemical equilibrium is solved together with a transfer equation in a self-consistent way : in order to get an analytic solution to the transfer problem and hence to reduce the computational time, the cloud is assumed to have a limited plane parallel geometry, while the diffusion phase function for the grains is chosen to be strictly forward (see Viala 1986). The model provides the photodestruction rates and the abundances relative to hydrogen of the chemical species as a function of position in the cloud. The column densities throughout

the whole cloud are then computed with the standard basic hypothesis for the gas to dust ratio in the interstellar medium. The calculations are performed for constant density and temperature distributions. The elemental abundances of C and O in the gas phase are chosen to be $C_t = 10^{-4}$ and $O_t = 2 \cdot 10^{-4}$; the elemental isotopics ratios are fixed at $^{12}C_t/^{13}C_t = 90$ and $^{16}O_t/^{18}O_t = 500$ (Langer et al. 1980, Penzias 1983). The Fe, Mg, Si and S abundances are respectively taken equal to $2 \cdot 10^{-7}$, 10^{-6} , $8.3 \cdot 10^{-7}$ and $8.3 \cdot 10^{-6}$.

6. DISCUSSION

6.1 Abundance of the isotopes of CO and mass determination

Because of the non observability of the homonuclear molecule H_2 in opaque clouds, the matter in the extended molecular clouds is usually studied through the emission of the rotational lines of CO isotopes, together with star counts and Bohlin's et al. (1978) relation between hydrogen column density and visual extinction. This shows the importance of using an appropriate molecule with a stable abundance accross different molecular regions. Because the ^{12}CO rotational lines are optically thick, most of the studies have used the rarer isotopes ^{13}CO and $C^{18}O$. A large sample of relationships between ^{13}CO , $C^{18}O$ and A_V have been reported in the literature. For example, different values of $N(^{13}CO)/A_V$ ratios, all obtained in the Taurus cloud with the Bordeaux radiotelescope, range from $0.9 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ in L1506 (this work) to $2.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ in L1495 (DCB), with intermediate values at $1.3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ and $1.4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ in HC12 (CG) and L1529 (this work). The correlations reported in section 3.2 in some restricted locations in L1506 and L1529 lead also to comparable values between $1.6 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ and $1.9 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$. In the same conditions, a rather high value of $2.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ has been derived by BC in Perseus. From all these data, it is possible to say that ^{13}CO becomes detectable at $A_V \approx 0.6-0.8 \text{ mag}$ both in Taurus and Perseus. It is interesting to note that Dickman (1978) early attributed a mean value of $1.9 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ to $N(^{13}CO)/A_V$ from a rather non homogeneous sample of dark clouds in Taurus, a value which is roughly representative of the Taurus-Perseus situation. Frerking, Langer and Wilson (1982) have extended the Dickman's relation by finding in Taurus a correlation between the visual

extinction and the $C^{18}O$ and ^{13}CO column densities. For ^{13}CO they found $1.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$, a value equal to the one in L1529 and intermediate between L1506 and L1495.

For $N(C^{18}O)/A_V$, CG found $2.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ in HCl2, DCB reported $2.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ in L1495 while BC derived $3.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ in one globule B1 of Perseus. In every case, a minimum of 1.1 to 1.6 magnitude of visual extinction is required for $C^{18}O$ to be detected. Frerking et al (1982) found $2.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ for extinctions larger than 2.9 mag and $0.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ for extinctions between 1.9 and 2.9 magnitude.

Thus a variation within a factor 2 in the $N(^{13}CO/A_V)$ ratio is revealed between the Taurus and Perseus regions (the higher value in Taurus is found in L1495 which is the nearest of Perseus), while only a slight variation within a factor 1.3-1.5 is observed in the $N(C^{18}O)/A_V$ ratio. All the data implicated here were calibrated in the same way and with identical reference sources, so that the errors could not be higher than 20%. The observed discrepancy in the abundances must be understood in terms of variations in the local conditions which have an influence upon the interpretation of data and upon photochemical processes. Let us now discuss these two points.

6.1.1 the interpretation of the data

To infer column densities from millimeter-wavelength emission lines is not straightforward, and assumptions must be involved in the sense that the line intensity is a complicated function of source parameters such as local density, kinetic temperature, velocity field or cloud geometry. Every reference mentioned above, as well as this paper, have accepted the assumption that the populations of the energy levels of all isotopic species of CO are in LTE, i.e. that the excitation temperature T_{ex} is the same for all levels of all species. However, the LTE assumption is certainly not correct in the low A_V regions where the density is $\approx 10^2 - 10^3 \text{ cm}^{-3}$, while at sufficiently higher densities collisions are able to bring all levels of all isotopic species into LTE. The most abundant species ^{12}CO will come into LTE with $T_{ex} \approx T_K$ at the lowest density because of the trapping of photons emitted by ^{12}CO molecules in the inner parts of the cloud. For less abundant species, the line optical depths are smaller, trapping is less important, and $T_{ex} < T_K$, so that the excitation temperature must depend on the details of radiative transfer which requires knowledge of the local

molecular abundance and velocity field. As the kinetic temperature increases, the LTE approximation overestimates the column densities compared with detailed radiative transfer calculations.

Thus, errors in the ^{13}CO column density estimates could be incriminated in both ^{13}CO abundance variations from cloud to cloud and data scatter in the $^{13}\text{CO}/A_v$ relation within a given cloud.

First, the column density derived in a particular line of sight must be interpreted as an average through regions of different physical conditions, and consequently will depend on the density profile and cloud structure.

Second, the saturation of emission lines observed in many lines of sight, particularly in Taurus, leads to an underestimate of column densities under the LTE assumption; this effect is less important in Perseus. And third, the conditions of excitation of ^{13}CO could be subthermal in the external layers of the Taurus envelope where the hydrogen density is $n_{\text{H}} \approx 3 \times 10^2 \text{ cm}^{-3}$ (CG), and could lead also to an underestimate of the column densities through non-LTE effects. Except the first point, these experimental difficulties are not so critical for C^{18}O because no saturation occurs in the range $A_v = 3-6\text{mag}$, and because C^{18}O is not detected at low visual extinction where ^{13}CO is subthermally excited.

An additional source of scatter in the $^{13}\text{CO}/A_v$ relation within one cloud is due to the cloud structure: as discussed in section 4 and in CG and BC, the Taurus and Perseus clouds often show multiple velocity components. Our analysis of the ^{13}CO data in L1529 and L1506 show that several clouds could contribute to the ^{13}CO emission in this region. Because it is not possible to derive the contribution to the total visual extinction of each individual cloud, the $^{13}\text{CO}/A_v$ relations quoted in table 1 concern the whole cloud. In that case the data scatter will be larger due to the comparison of points with different physical conditions and to the contribution of each cloud to the A_v cutoff in the ^{13}CO emission (as an example, compare the $^{13}\text{CO}/A_v$ relation of figure 4 for the whole clouds and those of figure 5 for selected area within the clouds).

6.1.2 the photochemical processes

Now let us examine through our chemical model, which processes can modify the ^{13}CO and C^{18}O abundances, that is to say the observed $N(^{13}\text{CO})/A_v$ and $N(\text{C}^{18}\text{O})/A_v$ ratios, as the physical conditions change. For simplicity in the following the physical parameters of hydrogen density, kinetic temperature and

intensity of the UV radiation field are treated as independent even if they are closely correlated by the thermal balance.

(i) Density : there is a large difference between high and low density conditions because fractionation (see Appendix) which occurs in the external layers of clouds, must compete with other reactions of C^+ in order to be important. However, in diffuse clouds, the chemical reactivity is determined by the UV radiation field whose effects are proportional to n_H^{-1} : thus, fractionation will be less important at low density and the consequences of an increasing density on the $^{13}CO/A_V$ and $C^{18}O/A_V$ correlations are an increasing slope and a decreasing intercept. The ^{13}CO abundance grows up into the cloud proportionally faster than $C^{18}O$ because no $C^{18}O/CO$ fractionation enhancement occurs, and because the ^{13}CO photodissociation rate is smaller throughout the cloud due to selective photodissociation. For the same reasons, the intercepts decrease less fast for $C^{18}O$ than for ^{13}CO (see column 1 of Table 4). As the density becomes high, a cloud is comparable to a dark place with no radiation. The chemical reaction set makes ^{13}CO and $C^{18}O$ the main sink of ^{13}C and ^{18}O respectively in the cloud. The following upper limits for $N(^{13}CO)/A_V$ and $N(C^{18}O)/A_V$ will be reached in our constant distribution model :

$$\begin{aligned} N(^{13}CO)/A_V &= N_H/A_V \times {}^{13}C_t &= 2.1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1} \\ N(C^{18}O)/A_V &= N_H/A_V \times {}^{12}C_t \times \frac{{}^{18}O_t}{{}^{16}O_t} &= 3.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1} \end{aligned}$$

Therefore, several relevant parameters like the cloud thickness, the gas to dust ratio and the elemental abundances are of critical importance. The $N(^{13}CO)/A_V$ ratio reaches its saturated value for densities lower than $N(C^{18}O)/A_V$; $C^{18}O$ seems to be a better gas tracer of dense places.

(ii) Temperature : the temperature dependance of the fractionation reaction (A15) is able to explain why ^{13}CO in a warm cloud is less enhanced than in a cold one, so that $N(^{13}CO)/A_V$ decreases when T_K increases. The corresponding reaction (A16) for $C^{18}O$ has a contrary effect : $N(C^{18}O)/A_V$ is enhanced when the kinetic temperature is increased. These variations are accentuated or moderated by the temperature dependance of the neutral reactions between hydrocarbons and oxygen (A12)-(A13)-(A14) in $T^{1/2}$ and of the electronic recombination of HCO^+ in T^{-1} (Adams et al.1984). Temperature variations in a cloud with constant density

of 300 cm^{-3} and a standard UV flux are shown in line 3 of Table 4 : the slopes of the correlations range from 1.7×10^{15} to $1.1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ for ^{13}CO , and from 0.8×10^{14} to $1.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$ for C^{18}O as the temperature increases from 10 to 50K. The intercepts are of course unchanged by these temperature variations.

(iii) The influence of an enhanced UV radiation field on the reaction set is to increase all the photodestruction rates. In the external layers, the competition between the photodestruction of OH and C_xH_y , and the formation of CO through these species (see Appendix) turns to the advantage of the first channel : shielding must occur to recover a normal situation deeper into the cloud. This effect added to direct photodissociation of CO makes the $N(^{13}\text{CO})/A_V$ and $N(\text{C}^{18}\text{O})/A_V$ ratios lower and the intercepts higher when the UV flux is increased. The effect is always stronger for C^{18}O than ^{13}CO (see line 2 of Table 4) due first to the selective photodissociation stronger for C^{18}O than for ^{13}CO , and second to the enhanced abundance of C^+ which increases the isotopic fractionation efficiency (see Figure 8) : the $^{13}\text{CO}/A_V$ fall is slowed by the fractionation while the $\text{C}^{18}\text{O}/A_V$ one is accelerated.

Thus the moderate variations of the ^{13}CO abundance through the Taurus dark clouds which are all exposed to roughly the same environment can be the consequence of rather non homogeneous conditions of density and temperature, and of fractionation effects which dominate when $A_V \approx 1-3 \text{ mag}$, combined with some non-LTE effects. Concerning C^{18}O , thermalisation is certainly achieved in most of the observed positions in Taurus, positions which correspond to the darkest places where ^{13}CO is optically thick. In these places, conditions of low temperature and high density, together with the absence of fractionation effects on the C^{18}O molecule, make the C^{18}O abundance relatively uniform accross Taurus.

Considering that the observational difficulties mentioned early cannot alone explain the observed features in the $N(^{13}\text{CO})/A_V$ and $N(\text{C}^{18}\text{O})/A_V$ correlations from Taurus to Perseus, the theoretical results must be important. In the north-east of Perseus lies the Per OB2 association of OB stars, so that the UV radiation field must be enhanced by a significant factor in this region compared with Taurus (see BC). Hence it is expected that the temperature should increase towards the edge of the cloud ; a temperature around 60-80K has been computed in cloud models which included thermal balance of the gas (Boland and de Jong 1984). In a warm cloud with enhanced UV flux, the slope of the $\text{C}^{18}\text{O}/A_V$

correlation can be roughly constant or even slightly increased with respect to a standard cold cloud, the intercept lying in a range of magnitude in agreement with the observed values. Indeed we calculated $N(\text{C}^{18}\text{O}) = 2.1 \times 10^{14} (A_V - 1.1) \text{ cm}^{-2}$ in a cloud with $n_{\text{H}} = 1000 \text{ cm}^{-3}$, $T_{\text{K}} = 10\text{K}$ and a standard UV flux and $N(\text{C}^{18}\text{O}) = 3.1 \times 10^{14} (A_V - 1.4) \text{ cm}^{-2}$ in a model with the same density but $T_{\text{K}} = 50\text{K}$ and an UV flux enhanced by a factor 10.

On the contrary, the $N(^{13}\text{CO})/A_V$ ratio drops systematically both with enhanced temperature and UV flux. In order to appreciate if some change in the carbon isotopic ratio could occur in Perseus with respect to Taurus and thus help to enhance $N(^{13}\text{CO})/A_V$ in spite of warm and illuminated conditions, we have performed a model calculation with density $n_{\text{H}} = 1000 \text{ cm}^{-3}$, temperature $T_{\text{K}} = 50\text{K}$ and an UV flux enhanced by a factor 10, together with an isotopic ratio $^{12}\text{C}_t/^{13}\text{C}_t$ reduced to a value of 60 (instead of its terrestrial value of 90). The result is in agreement with the expected behaviour since it is found that $N(^{13}\text{CO}) = 2.8 \times 10^{15} (A_V - 1.0) \text{ cm}^{-2}$ in these conditions, to be compared with $N(^{13}\text{CO}) = 2.0 \times 10^{15} (A_V - 0.6) \text{ cm}^{-2}$ in our standard cloud where $n_{\text{H}} = 1000 \text{ cm}^{-3}$, $T_{\text{K}} = 10\text{K}$ and the UV flux is normal.

Thus the variations of $N(^{13}\text{CO})/A_V$ ratios through a sample of comparable observations can be understood in term of variations in the local conditions : problems in the column densities estimate due to lines opacity or to the conditions of molecular excitation in Taurus, rather non homogeneous conditions from place to place due to the cloud structure, photochemical processes brought out by the strong UV radiation environment of Perseus, coupled with a possible reduced carbon isotopic ratio.

C^{18}O is a good column density tracer since its emission lines are optically thin up to high visual extinction. In addition C^{18}O is less sensitive to the phenomena described above for ^{13}CO , and although it requires more visual extinction to be detected, it can be used as a good tracer in the darkest regions.

In order to derive a cloud mass, we need coupled observations of ^{13}CO across the whole cloud and C^{18}O observations in the high A_V regions. The variations from place to place of the $^{13}\text{CO}/A_V$ ratio, which at most of a factor two, should affect the determination of the cloud mass, but the weakness of this factor compared to the cloud distance uncertainty makes ^{13}CO the best mass tracer for molecular clouds. The situation is different for the high A_V regions

where ^{13}CO lines are certainly saturated and where, in addition to the mass, one want also to derive some informations about the size and the structure of the condensations. For these regions the C^{18}O emission is the best gas tracer.

6.2 Gravitational stability

In a recent study performed by Murphy and Myers (1985) using the ^{12}CO ($J = 1-0$) line emission, the clouds quoted in section 4 as A_1 , A_2 , D_1 and D_2 were considered as a unique expanding cloud with a ≈ 3 pc radius and a ≈ 2 km/s expanding velocity. Our ^{13}CO data which are representative of the inner cloud structure do not suggest such a simple feature. The low mass clouds quoted above look like unrelated filaments perhaps in orbital motion around the largest cloud B18. Hence it is important to examine whether the masses obtained for the different condensations identified in sections 3 and 4 lead to gravitational equilibrium or not.

Criteria for dynamical equilibrium can be derived either from the virial theorem or from the growth of a perturbation of small amplitude in a given cloud. The first method used by Murphy and Myers (1985) in order to compare gravitational energy to macroscopic turbulent motions, has the advantage of giving an overall picture of the system without enter in the details of complicated models. In that case the equilibrium mass is found to be proportional to the square of the ^{13}CO linewidth : a cloud of mass larger than this equilibrium mass will contract with its own gravity. As in most condensations and clumps described in the previous sections the typical linewidth lies in the range 0.8 - 1.4 km/s, the equilibrium masses are larger by a factor 2-4 than the masses derived from the ^{13}CO emission. Even if our masses estimations have been found to be in agreement with other authors and ^{13}CO has been clearly shown to be a good mass tracer of the cloud contents, an error in the clouds distance could be responsible of a factor ≈ 2 in the mass determinations. Alternatively instrumental difficulties could undergo a $\approx 10\%$ error in the velocity width while line opacity effects could broaden the ^{13}CO lines by an additional 20% as soon as the optical depth is around 1. Thus error bar in the equilibrium mass could be as large as twice the mass. Therefore following this virial point of view, no clear conclusion could be given about fragmentation or clouds binding.

The second approach has been investigated by Jeans (Nakano 1981) who found that clouds more massive than the following so-called Jeans mass cannot be in equilibrium and will undergo fragmentation :

$$M_J = 570 M_\odot \left[\frac{1M_\odot}{M} \right]^{1/2} \left[\frac{R}{1pc} \right]^{3/2}$$

The mass of Jeans for the L1506 and L1529 clouds are found to be $100 M_\odot$ and $80 M_\odot$ respectively to be compared to our ^{13}CO experimental determinations of $700 M_\odot$ and $460 M_\odot$. Even taking into account an error of a factor 2 in our determination, both cloud masses are far from their masses of Jeans. Consequently if we limit our discussion to these large clouds, we could conclude to a gravitationally bound and unstable situation. Unfortunately a similar analysis applied to the condensations and clumps again show that the experimental and Jeans masses are comparable within a factor 2.

This discussion support once more the fact that ^{13}CO is still a good tracer for the large scale masses but is subject to controversy when applied to small scale structure.

7. CONCLUSION

The observation of the ^{13}CO ($J=1-0$) emission described in this paper show the following results :

- the region around the L1529 and L1506 dark clouds exhibits an elongated structure extending from south-east to north-west, in which five condensations of ^{13}CO column density higher than $5 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ have been detected;
- ^{13}CO emission is closely correlated to the visual extinction A_V through the following relations :

$$N(^{13}\text{CO}) = 1.4 \pm 0.1 (A_V - 0.6 \pm 0.2) 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ in L1529}$$

$$N(^{13}\text{CO}) = 0.9 \pm 0.1 (A_V - 0.9 \pm 0.2) 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ in L1506}$$

Significant changes in the $^{13}\text{CO}/A_V$ ratio from place to place show that higher values are found in some more restricted regions;

- the H_2 masses intercepted within an external limit of the clouds corresponding to an A_V of 1 magnitude, are found to be $700 M_\odot$ and $460 M_\odot$ for L1529 and L1506 respectively ; crude cylinder approximations lead to mean densities of $\approx 400 \text{ cm}^{-3}$ for both clouds. Comparison with others estimates shows that ^{13}CO is still a good tracer of moderately dense material, giving an acceptable error on H_2 masses compared to the uncertainties on the giant clouds distances;
- the velocity structure shows a very confused situation : intricate interactions between filamentary clouds and the presence of several components on lines of sight are found in the whole region. Nevertheless, two radial velocity gradients are observed : one of $0.40 \pm 0.07 \text{ kms}^{-1} \text{pc}^{-1}$ towards the north, and a second of $0.13 \pm 0.01 \text{ kms}^{-1} \text{pc}^{-1}$, well known, through the chain of condensations DL2.

Some theoretical reflexions have lead us to the following conclusions :

- the local physical conditions have an influence upon the CO isotope abundances through photochemical processes. The consequence of an increasing density is to increase the ^{13}CO and C^{18}O abundances up to saturation when the cloud becomes completely shielded from outside radiation. The ^{13}CO abundance decreases when the kinetic temperature increases while the C^{18}O increases; both decrease when the UV flux is enhanced. Combinations of all these effects are able to lead to a sample of $^{13}\text{CO}/A_V$ correlations. Some relevant parameters like the carbon isotopic ratio which could be reduced in Perseus compared with Taurus, the cloud geometry or the gas to dust ratio are of critical importance.

- the use of observations with the ^{13}CO isotope which seems to be the best tracer for the determination of large cloud masses, together with a Jeans like analysis, lead to the conclusion of the L1506 and L1529 clouds instability. Controversely the same observations applied to small scale structures are not conclusive showing the limits of ^{13}CO ($J = 1-0$) observations.

Note added in proof. According to high resolution absorption spectra in the far UV recently performed by Letzelter *et al.* (1987), the CO unshielded photodissociation rate should be increased by a factor 20, together with a much steeper variation with optical depth. These new molecular data lead to moderate changes in the $N(^{13}\text{CO})/A_v$ and $N(\text{C}^{18}\text{O})/A_v$ ratios : upper limits of these ratios are obtained for lower densities than previously and their decrease with an increasing UV flux are slowed down. These new data will not strongly affect our conclusions.

Appendix

Formation and destruction of CO

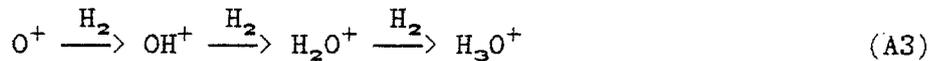
The method for the synthesis of CO in diffuse clouds is a two step process initiated by the progenitor reaction



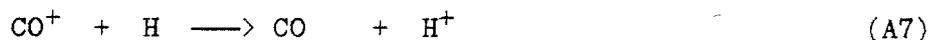
which is endothermic by 232 K. A substitute to this path in more shielded regions is



which depends directly upon the cosmic ray flux through H_3^+ . The radical OH is then produced by a fast sequence



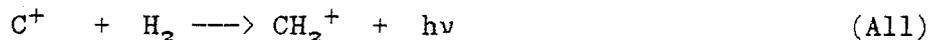
and CO is formed from C^+ by the reactions



or by neutral reaction with C



Another scheme which is important at higher densities is believed to be initiated by the radiative association



whose rate coefficient is not very well known (Litsz 1978); following Black and Dalgarno (1977) we have attributed a rate of $5 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ which, from calculations of Herbst (1982), could decrease at higher temperature.

The neutral species C_xH_y are then formed and lead to CO by neutral reactions with O



the main feature being the reaction (A12); this reaction of CH with O has been

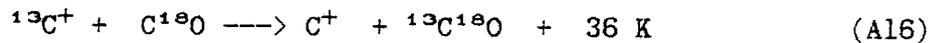
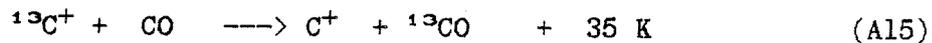
studied by Messing et al. (1981) at room temperature of 298K; we have adopted their overall rate constant of $9.5 \cdot 10^{-11} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ at this temperature and assumed a $T^{1/2}$ dependence.

It is important to note that the formation of CO depends on the efficiency of the UV photons in dissociating the intermediate species OH and C_xH_y which are involved in the (A6)-(A10) and (A11)-(A14) sequences. Accordingly the photodestruction rates of OH and C_xH_y have been calculated by using the same cross-sections as in Viala (1986). Actually they are found to be smaller by a factor 2-3 than the recent estimations of Van Dishoeck (1986).

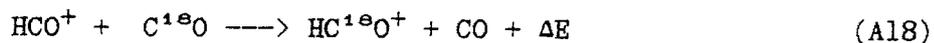
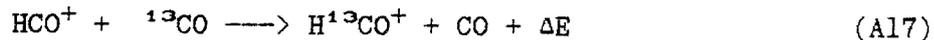
In the external layers of clouds, CO is mainly destroyed by UV photons, while in inner parts shielding occurs and gas phase chemistry dominates, He^+ and H_3^+ being the main sinks of CO.

Two processes can alter the isotopic ratios :

- first, the chemical fractionation originated by the reactions



which enhances the $^{13}\text{CO}/\text{CO}$ and $^{13}\text{C}^{18}\text{O}/\text{C}^{18}\text{O}$ ratios if the kinetic temperature is about 35 K. Other reactions have the ability to produce isotope fractionation : isotopes of both carbon and oxygen can be transferred between molecules by proton switching reactions between formyl ions and carbon monoxide



Smith and Adams (1980) have measured the rate parameters at temperature as low as 80 K; Langer et al. (1984) used a general approach for extrapolating the forward and reverse rates at temperature below 80 K.

- second, the selective dissociation of the isotopes of CO which is thought to occur through absorption lines in the C-X(1-0), E-X(0-0) and E-X(1-0) bands at respectively 1063, 1076 and 1053 Å. As investigated early by Bally and Langer (1982) and Chu and Watson (1983), line self shielding reduces the CO photodestruction rates by a larger factor than for ^{13}CO and C^{18}O due to the very different column densities for the CO isotopes. Glassgold et al. (1985)

discussed this shielding problem including H_2 line blocking absorption and dust extinction : in summary, the effects of self and mutual shielding of the different isotopes lead to a much stronger destruction of the rarer isotopes throughout the cloud.

The selective photodissociation has a minor effect on $^{13}CO/CO$ ratio compared with the fast chemical fractionation, while it can increase the $CO/C^{18}O$ ratio by a factor of 3 in region where the optical depth is $\tau_v \approx 0.5-1$ mag.

References

- Adams, N.G., Smith, D., Alge, E. : 1984, *J.Chem.Phys.* 81, 1778
- Bachiller, R. : 1985, *Thèse d'Etat* Université Grenoble I
- Bachiller, R., Cernicharo, J. : 1986, *Astron.Astrophys.* 166, 283 (BC)
- Bally, J., Langer, W.D. : 1982, *Astrophys.J.* 255, 143
- Black, J.H., Dalgarno, A. : 1977, *Astrophys.J.Suppl.* 34, 405
- Bohlin, R.C., Savage, B.D., Drake, J.F. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 132
- Boland, W., de Jong, T. : 1984, *Astron.Astrophys.* 134, 87
- Cernicharo, J., Bachiller, R. : 1984, *Astron. Astrophys. Suppl.* 58, 327 (CB)
- Cernicharo, J., Bachiller, R., Duvert, G. : 1985, *Astron.Astrophys.* 149, 273 (CDB)
- Cernicharo, J., Guélin, M., Askne, J. : 1984, *Astron. Astrophys.* 138, 371
- Cernicharo, J., Guélin, M. : 1987, *Astron.Astrophys.* 176, 299 (CG)
- Chu, Y.H., Watson, W.D. : 1983, *Astrophys.J.* 267, 151
- Cohen, M., Kuhl, L.V. : 1979, *Astrophys.J.* 227, L105
- Crutcher, R.M. : 1973, *Astrophys.J.* 185, 857
- Dickman, R.L. : 1978a, *Astron.J.* 83, 363
- Dickman, R.L. : 1978b, *Astron.J.Suppl.* 37, 407
- Duvert, G., Cernicharo, J., Baudry, A. : 1986, *Astron.Astrophys.* 164, 349 (DCB)
- Elias, J.H. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 587
- Elmegreen, D.M., Elmegreen, B.G. : 1979, *Astron.J.* 84, 615
- Federer, W., Villinger, H., Tosi, P., Bassi, D., Ferguson, E.E., Lindinger, W. :
1985, *Molecular Astrophysics*, Dierckens, Huebner and Langhoff (Eds), 649
- Frerking, M.A., Langer, W.D., Wilson, R.W. : 1982, *Astrophys.J.* 262, 590
- Glassgold, A.E., Huggins, P.J., Langer, W.D. : 1985, *Astrophys.J.* 290, 615
- Goldsmith, P.F., Serniak, M.J. : 1984, *Astrophys.J.* 283, 140
- Herbst, E. : 1982, *Astrophys.J.* : 252, 810
- Heyer, M.C. : 1985, Proc. of a meeting held at Haystack
- Heiles, K., Katz, G. : 1976, *Astron.J.* 81, 1
- Kutner, M.L. : 1973, In "*Molecules in the Galactic Environment*" edited
by M.A.Gordon and L.E.Snyder (Wiley, New York), p199
- Langer, W.D., Graedel, T.E., Frerking, M.A., Armantrout, P.B. : 1984, *Astrophys.J.* 227, 581
- Langer, W.D., Goldsmith, P.F., Carlson, E.R., Wilson, R.W. : 1980, *Astrophys.J.* 235, L39
- Léger, A. : 1983, *Astron.Astrophys.* 123, 271

- Letzleter, C.E., Eidelsberg, M., Rostas, F., Breton, J., Thieblemont, B. : 1987,
in press in *Chem. Phys.*
- Liszt, H.S. : 1978, *Astrophys. J.* 222, 484
- Lynds, B.T. : 1962, *Astrophys. J. Suppl.* 7, 1
- Messing, I., Filseth, S.V., Sadowski, C.M., Carrington, T. : 1981, *J. Chem. Phys.* 74, 3874
- Murphy, D.C., Myers, P.C. : 1985, *Astrophys. J.* 298, 818
- Myers, P.C. : 1982, *Astrophys. J.* 257, 620
- Nakano, T. : 1981, *Supp. of the Progress of Theoretical Physics* 70, 54
- Penzias, A.A. : 1983, *Astrophys. J.* 273, 195
- Rowe, B.R., Marquette, J.B., Dupeyrat, G., Poissant, G., Rebrion, C. : 1985a
Colloque d'ATP CNRS, Observatoire de Paris-Meudon.
- Rowe, B.R., Marquette, J.B., Dupeyrat, G., Ferguson, E.E. : 1985b, *Chem. Phys. Letters* 113, 403
- Smith, D., Adams, N.G. : 1980, *Astrophys. J.* 242, 424
- Töle, F., Ungerrechts, H., Walmsley, C.M., Winnewisser, G., Churwell, E. : 1981,
Astron. Astrophys., 95, 143
- Tucker, K.D., Dickman, R.L., Encrenaz, P.J., Kutner, M.L. : 1976, *Astrophys. J.* 210, 679
- Viala, Y.P. : 1986, *Astron. Astrophys. Suppl.* 64, 391
- Watson, W.D., Anicich, V.G., Huntress, W.T. : 1976, *Astrophys. J. Letters* 205, L165

Figure captions

Figure 1 : LTE column density map of the whole region surveyed. Contour levels range from 10^{15}cm^{-2} to $9 \times 10^{15}\text{cm}^{-2}$ with a step of 10^{15}cm^{-2} . The positions of the condensations are indicated. The black stars represent the positions of the T Tauri stars and the Herbig-Haro objects, while the open polygons indicate the infrared point sources from the IRAS catalog. The coordinates of the center are $(\alpha, \delta) = (4^{\text{h}}20^{\text{m}}23^{\text{s}}, 24^{\circ}58'36'')$.

Figure 2 : Map of the integrated intensity of the ^{13}CO ($J=1-0$) line in several clouds of the Taurus complex collected with the same telescope. The lowest contour level is 1Kkms^{-1} , the contour interval is 1Kkms^{-1} . HCL2 and L1495 data are respectively taken from CG and DCB.

Figure 3 : Visual extinction in the L1529 (a) and L1506 (b) regions from star counts (see CB; CBD) together with ^{13}CO ($J=1-0$) emission. Contour levels are identical to Fig 2.

Figure 4 : The ^{13}CO column density versus visual extinction A_v in both clouds L1529 and L1506. The solid lines are the regression lines of $N_{\text{LTE}}(^{13}\text{CO})$ on A_v (see Table 1).

Figure 5 : The ^{13}CO column density versus the visual extinction A_v in the condensations. The solid lines are the regression lines of the least square fits (see Table 1).

Figure 6 : 10×10 spectra maps of L1535 (a) and L1524W(b) regions. The antenna temperature range in one spectrum goes from -1K to 5K , the velocity range from 0 to 10kms^{-1} . The origin of these maps is the same as Fig 1.

Figure 7 : Maps of integrated ^{13}CO ($J=1-0$) line intensity in 9 velocity ranges. The levels are from 0.4 Kkms^{-1} to 2.0 Kkms^{-1} by 0.4 Kkms^{-1} . The corresponding velocity intervals are indicated in each sub-figure. The origin of these maps is the same as in Figure 1.

Figure 8 : Effect of changing temperature or the UV flux intensity on the $^{13}\text{CO}/\text{C}^{18}\text{O}$ enhancement ratio normalized to the terrestrial value.

Table captions

Table 1 : Correlations of ^{13}CO column density with the visual extinction in the least square sense, both in the condensations and in the whole clouds.

Table 2 : Radii, masses and densities in the spherical globules (1/2 intensity) and cores (3/4 intensity) of the condensations identified in the L1529 and L1506 clouds. The correlations used in each condensation are recalled.

Table 3 : The modified reactions from the previous model of Viala (1986) are taken in (1) Rowe et al.(1985a), (2) Rowe et al.(1985b), (3) Federer et al.(1985)

Table 4 : ^{13}CO and C^{18}O correlations with visual extinction A_v respectively in unit of 10^{15} and 10^{14} cm^{-2} , calculated for different density, temperature and UV flux conditions.

Figure 1

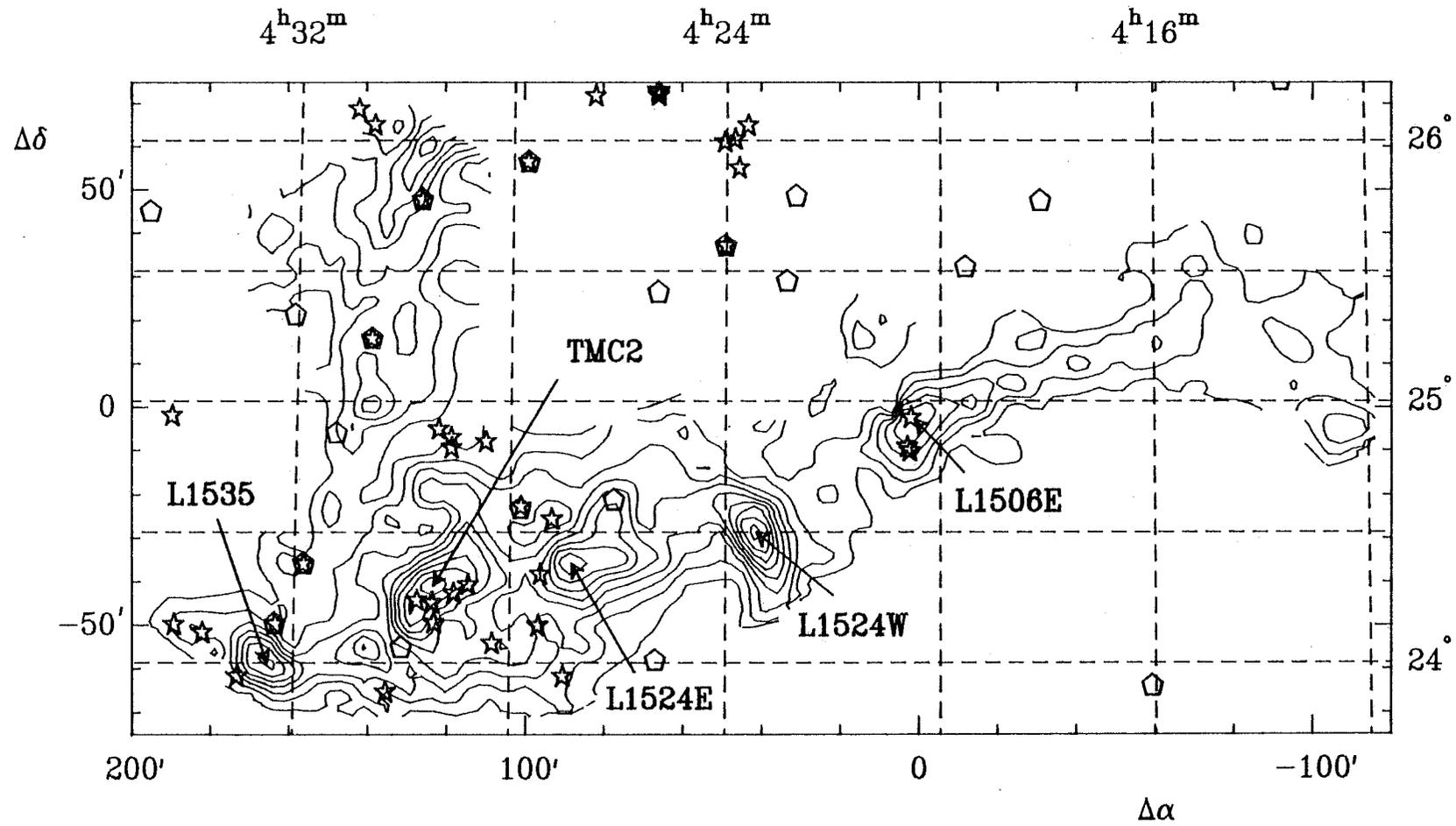
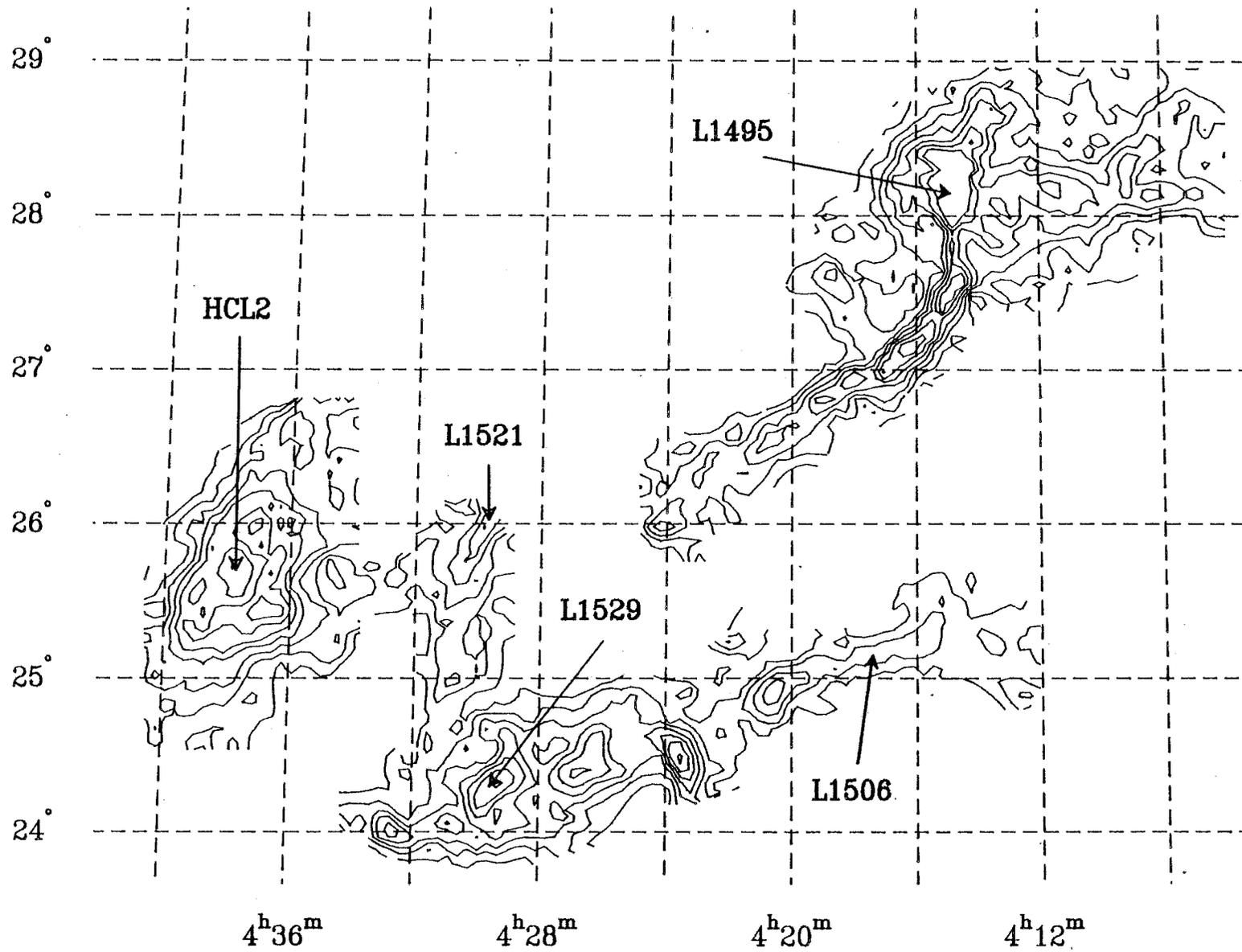


Figure 2



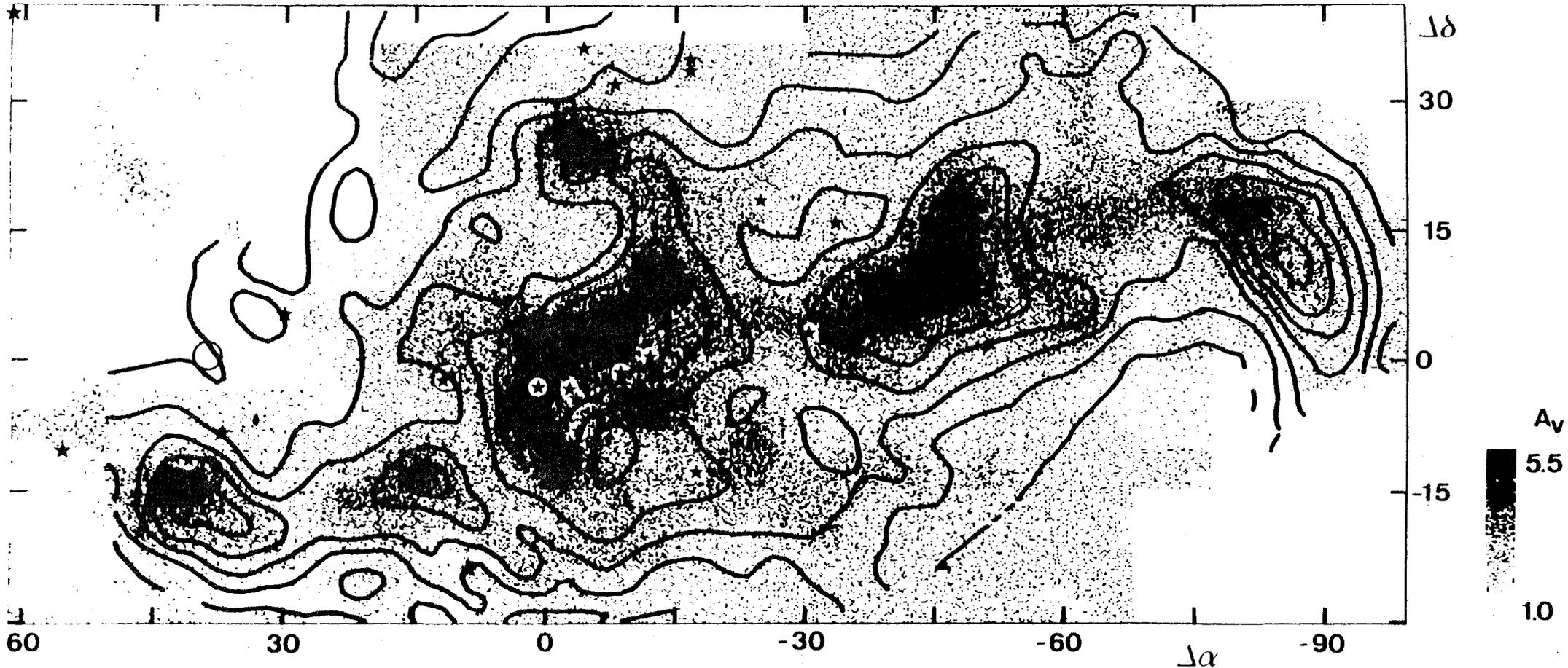


Figure 3a

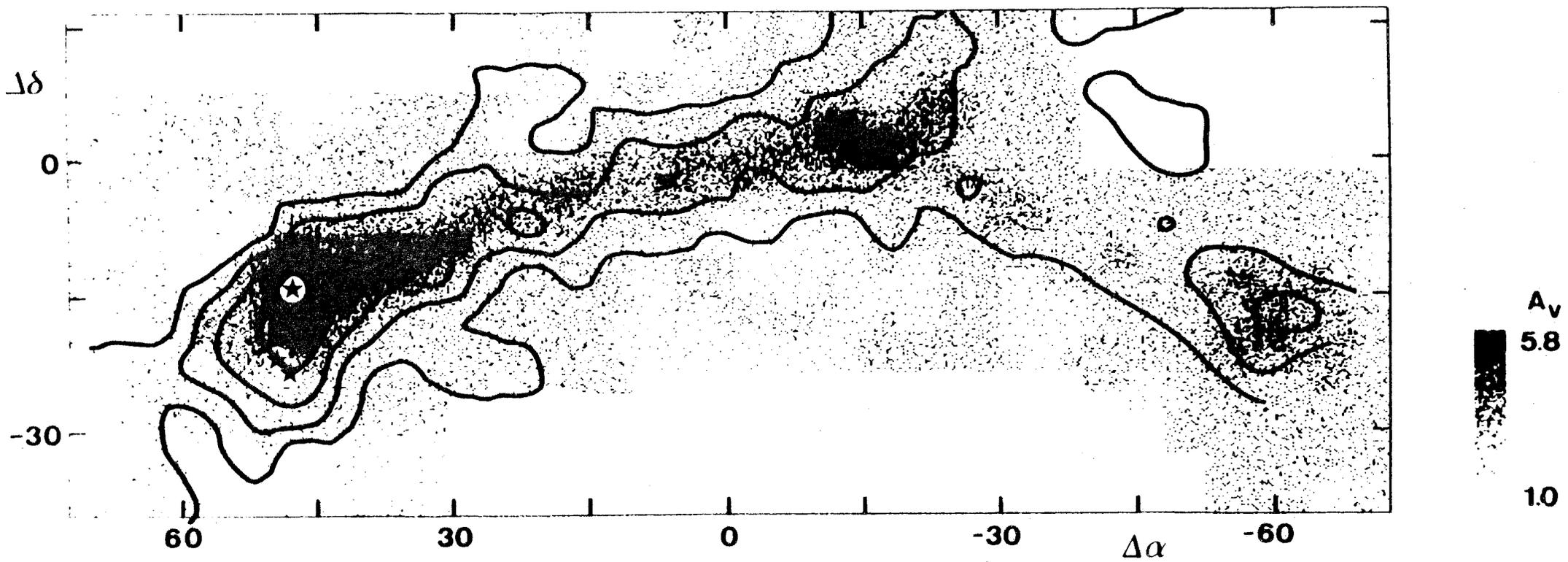


Figure 3b

Figure 4

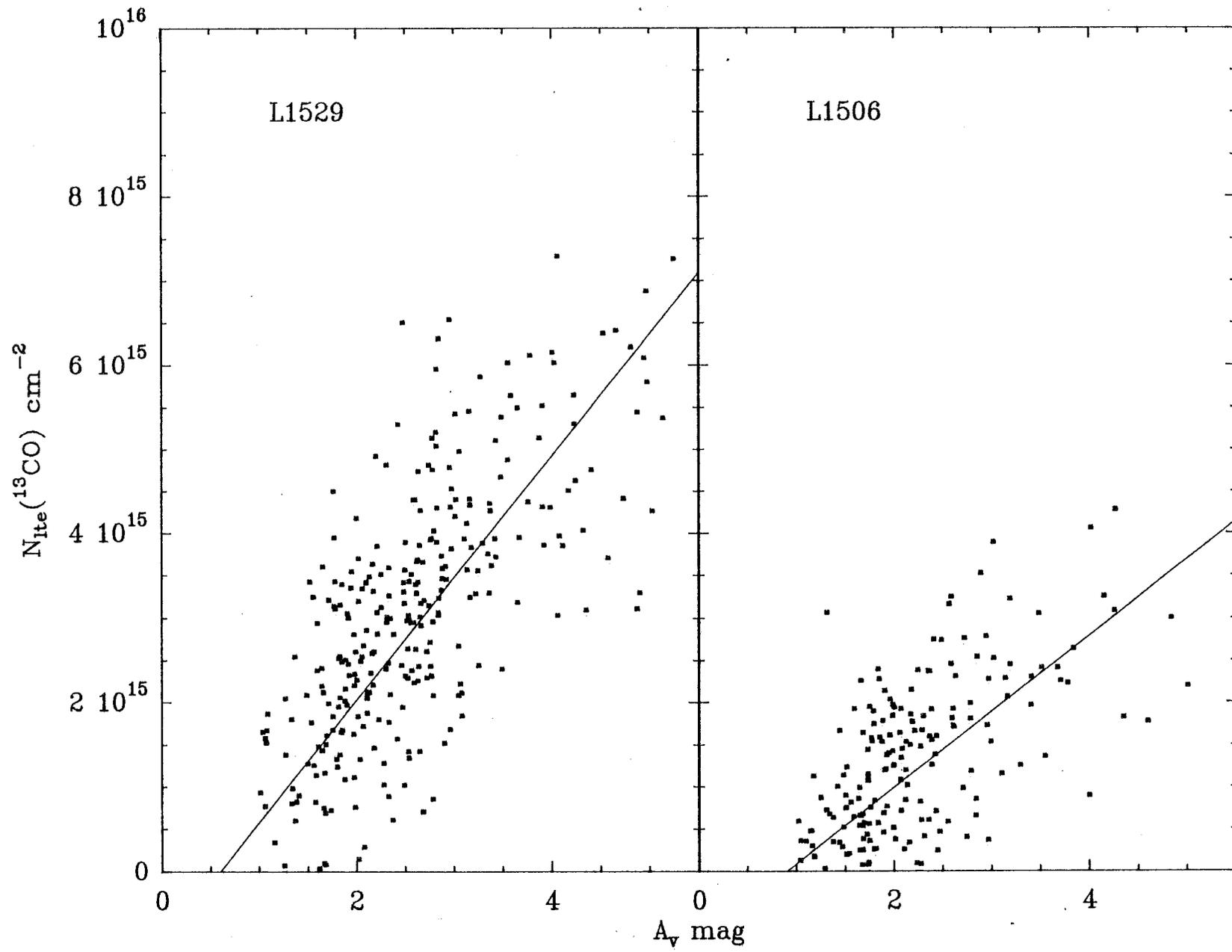


Figure 5

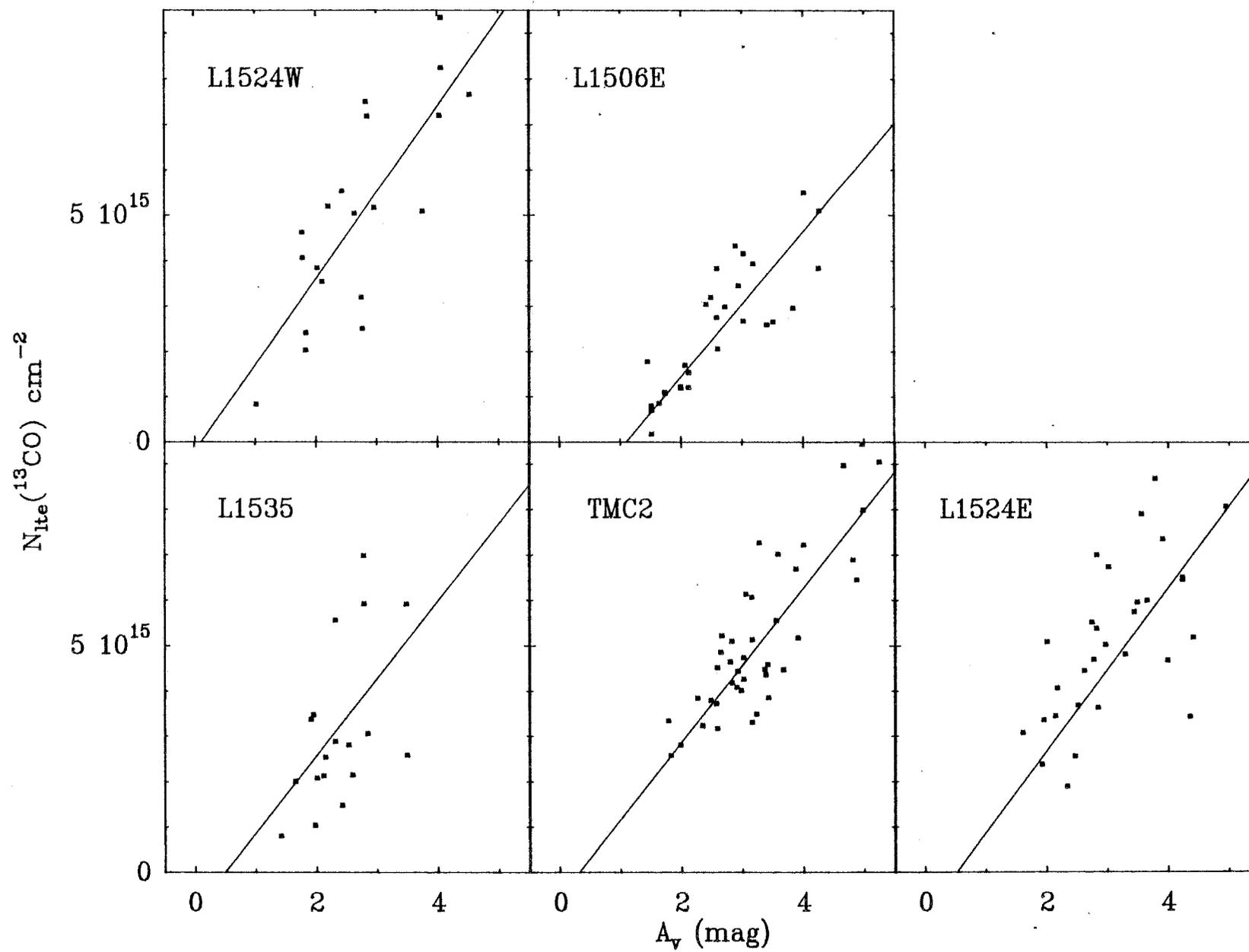
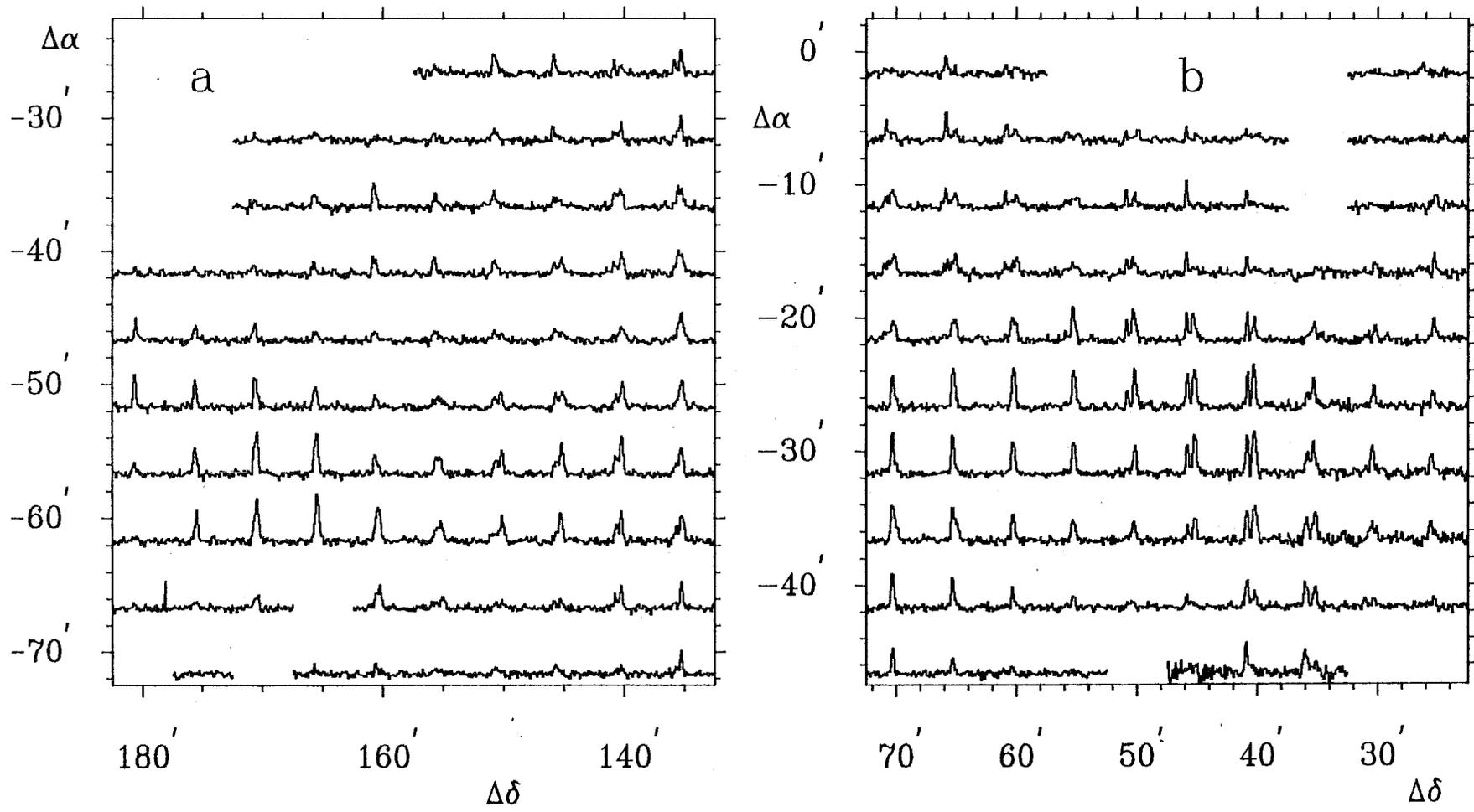


Figure 6



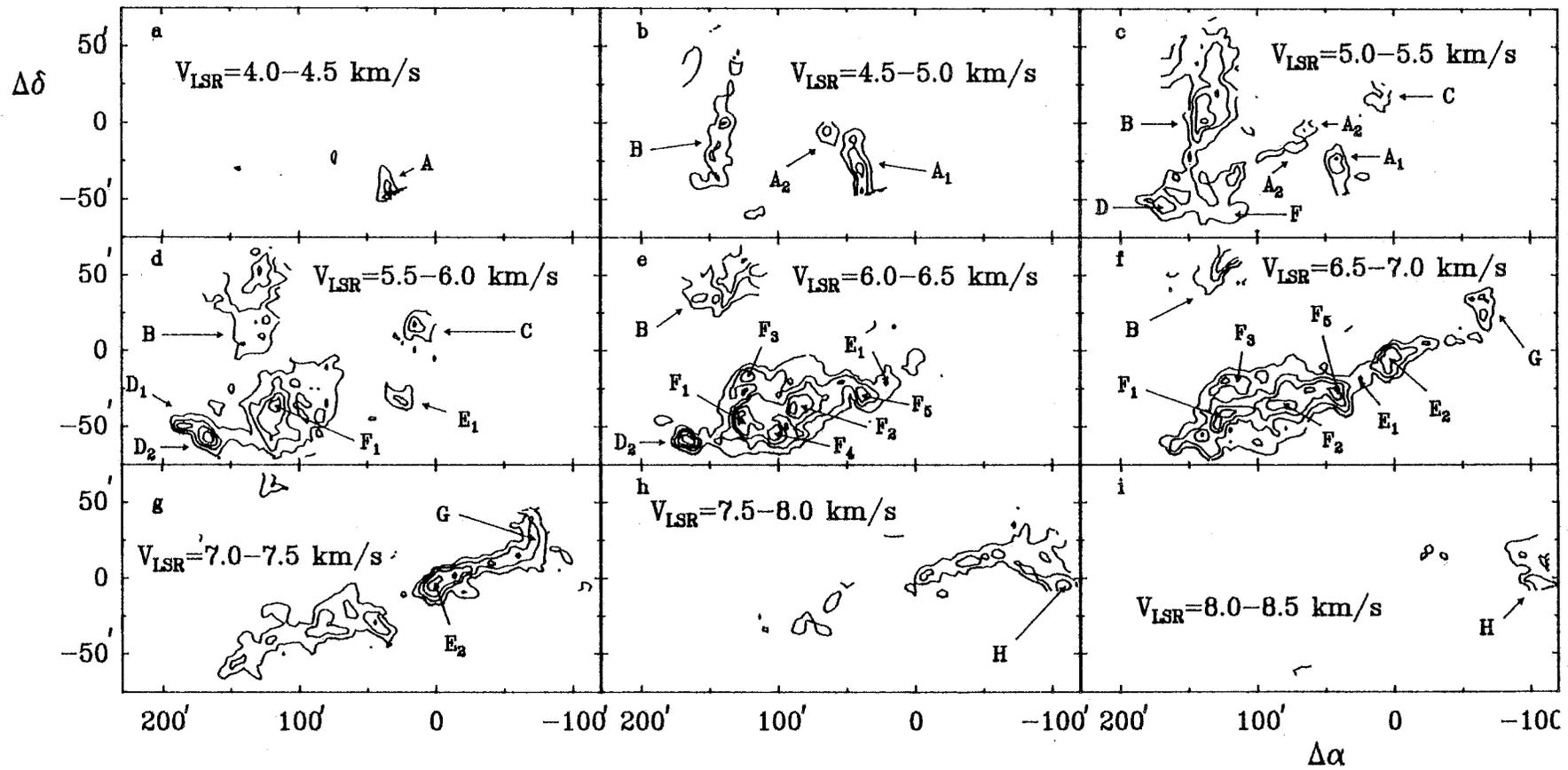
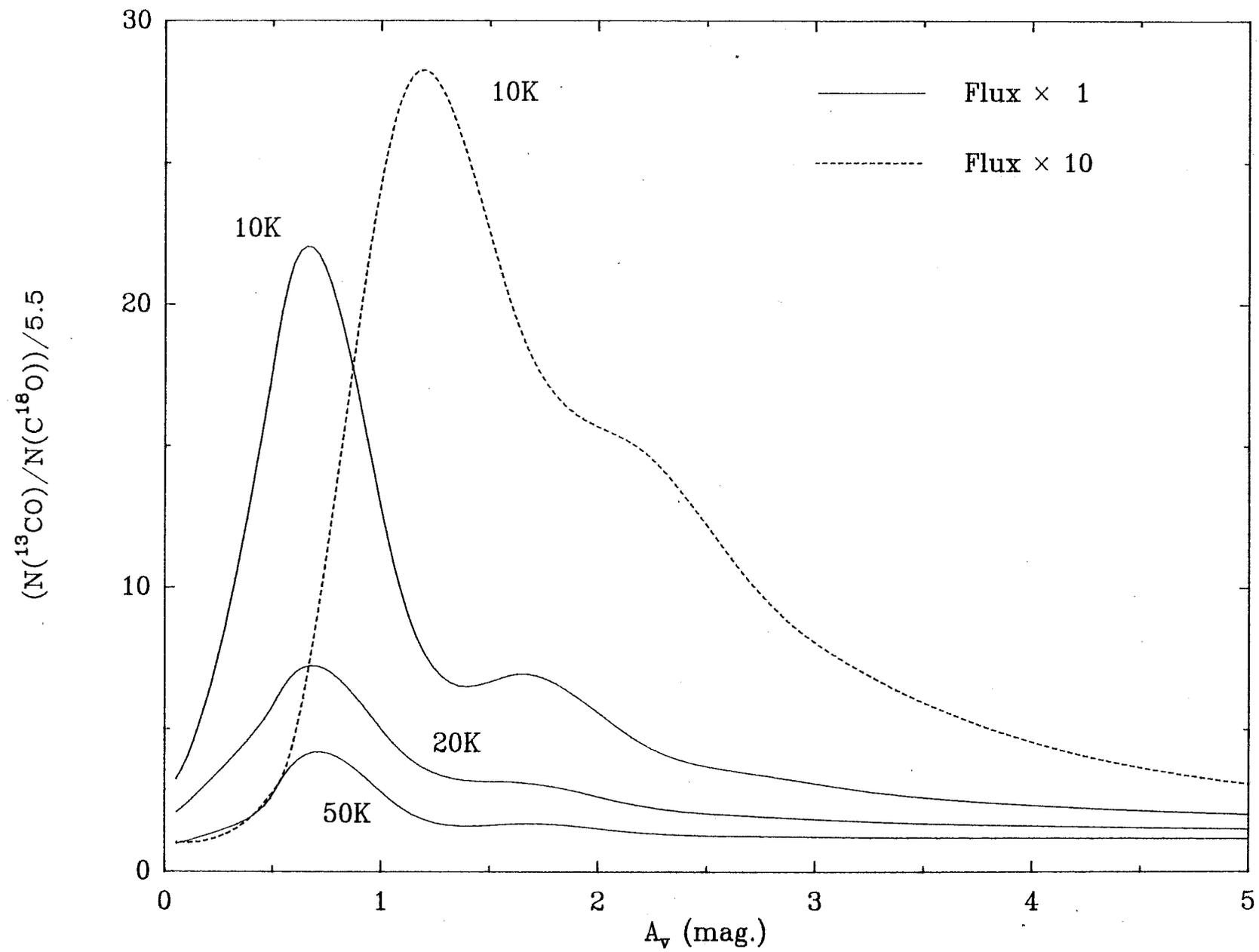


Figure 7

Figure 8



Name	Slope $10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$	N-intercept mag	Coefficient of correlation	Number of points
L1535	1.7 ± 0.7	0.5 ± 0.4	0.60	18
TMC2	1.7 ± 0.2	0.3 ± 0.2	0.87	41
L1524E	1.8 ± 0.3	0.5 ± 0.4	0.93	30
L1524W	1.9 ± 0.3	0.1 ± 0.1	0.92	20
L1506E	1.6 ± 0.1	1.1 ± 0.1	0.97	29
L1529	1.4 ± 0.1	0.6 ± 0.2	0.75	280
L1506	0.9 ± 0.2	0.9 ± 0.2	0.85	160

Table 1

Name	Correlation $^{13}\text{CO}/A_v$ 10^{15} cm^{-2}	Radius pc	Mass M_{\odot}	Density cm^{-3}
L1535 condensation core	1.70 ($A_v - 0.50$)	0.30	18	2200
		0.26	15	2900
TMC2 condensation core	1.70 ($A_v - 0.30$)	0.55	68	1400
		0.36	36	2500
L1524E condensation core	1.80 ($A_v - 0.50$)	0.59	69	1100
		0.34	29	2400
L1524W condensation core	1.90 ($A_v - 0.10$)	0.41	33	1500
		0.30	21	2500
L1506E condensation core	1.60 ($A_v - 1.10$)	0.51	50	1200
		0.38	31	1900

Table 2

Reactions	Rates ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$)	References
125 $\text{He}^+ + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{OH}^+ + \text{He} + \text{H}$	$7.9 \cdot 10^{-8} \text{ T}^{-0.94}$	(1)
126 $\text{He}^+ + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{He}$	$1.6 \cdot 10^{-8} \text{ T}^{-0.94}$	(1)
165 $\text{C}^+ + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	$2.4 \cdot 10^{-7} \text{ T}^{-0.91}$	(1)
235 $\text{O}^+ + \text{O}_2 \longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{O}$	$7.7 \cdot 10^{-10} \text{ T}^{-0.65}$	(2)
395 $\text{CH}_4^+ + \text{H}_2 \longrightarrow \text{CH}_5^+ + \text{H}$	$5.8 \cdot 10^{-6} \text{ T}^{-2.08}$	(3)
780 $\text{CO}^+ + \text{H}_2 \longrightarrow \text{H}^+ + \text{CO}$	$8.0 \cdot 10^{-10}$	(3)

Table 3

T(K) , UV flux n (cm ⁻³)		10 ×1	10 ×10	10 ×100	20 ×1	50 ×1
		3000	¹³ CO 2.1(A _v -0.3)			
	C ¹⁸ O 3.0(A _v -0.8)					
1000	¹³ CO 2.0(A _v -0.6)	1.8(A _v -1.3)	1.3(A _v -2.6)			
	C ¹⁸ O 2.1(A _v -1.1)	1.1(A _v -1.8)	0.4(A _v -2.6)			
300	¹³ CO 1.7(A _v -0.9)			1.3(A _v -1.0)	1.1(A _v -1.0)	
	C ¹⁸ O 0.8(A _v -1.2)			1.1(A _v -1.2)	1.4(A _v -1.1)	
100	¹³ CO 0.6(A _v -1.0)					
	C ¹⁸ O 0.2(A _v -1.3)					

Table 4

CHAPITRE IV

Les effets de taux de réactions ion-molécule polaire élevés

sur les modèles de nuages interstellaires denses

IV. I INTRODUCTION

Lorsque les molécules possèdent un moment dipolaire permanent μ_D non négligeable, il faut s'attendre à une augmentation d'un ou deux ordres de grandeur de la vitesse de réaction à basse température (voir Chesnavich, Su et Bowers (1980), Celli, Weddle et Ridge (1980), Bates (1982) et plus récemment Clary (1985)). Pendant longtemps, peu d'informations valables étaient parues à température inférieure à 80K, mais récemment, les travaux de Rowe et al. (1985) ont montré qu'à 28K les réactions entre les ions He^+ , C^+ et N^+ et les molécules polaires H_2O et NH_3 se déclenchent beaucoup plus rapidement qu'à température du laboratoire. Bien qu'il ne soit pas encore vraiment établi que les théories sont correctes dans leurs prédictions pour toutes les réactions impliquant des ions et des molécules polaires (des effets répulsifs à courte portée peuvent exister, voir Herbst 1986), il est important de déterminer quels sont les effets de telles augmentations sur les modèles de chimie de nuages interstellaires denses, sombres et froids (ces problèmes ont également été abordés par Herbst et Leung (1986) dans un modèle de nuage dense hors équilibre chimique, comprenant des espèces chimiques complexes) : le paragraphe II présente le traitement des réactions ion-molécule polaire, le paragraphe III est un résumé du modèle de nuage utilisé, la structure chimique d'un nuage sombre et dense est décrite et analysée dans la partie IV, enfin, des comparaisons directes avec les observations sont présentées dans le paragraphe V.

IV. II LES MOLECULES POLAIRES

La théorie quantique de Clary (1985) est trop compliquée pour être introduite facilement dans un calcul de chimie. Par contre, Su et Chesnavich (1982) ont établi, par des calculs classiques de trajectoires sur les hypersurfaces de potentiel, une paramétrisation simple des taux de réactions ion-molécule polaire en fonction de la température :

$$k_P(T) = (0.62 + 0.4767 \times(T)) k_L \quad (1)$$

où les indices "P" et "L" signifient respectivement "taux polaire" et

"taux de Langevin", et $x(T) = \mu_D / (2\alpha kT)^{1/2}$ avec $(\alpha, \mu_D) = (\text{polarisabilité, moment dipolaire})$ de la molécule neutre. Cette expression n'est valable que pour de grandes valeurs de x ($x \gg 2$; par exemple, $T = 10\text{K}$, $\alpha = 1\text{\AA}^3$ et $\mu_D = 1\text{Debye} \Rightarrow x = 19$) et quand le taux de réaction devient nettement supérieur au taux de Langevin; la variation en $T^{-1/2}$ peut aboutir à $k_p = 10^{-7}\text{cm}^3\text{s}^{-1}$ à 10K pour des molécules suffisamment polaires et des ions suffisamment légers. L'équation (1) est introduite dans toute réaction ion-neutre du système de réactions présenté par Viala (1986) (voir Annexe E) et qui concerne les espèces polaires de la Table IV.1.

Molécule	Moment dipolaire μ_D (Debye)	Polarisabilité α (\AA^3)
CH	1.46 (1)	2.4 *
CH ₂	0.80 (2)	3.1 *
C ₂ H	0.8 (3)	2.5 *
NH	1.3 (4)	1.8 *
NH ₂	1.83 (5)	2.5 *
NH ₃	1.47 (6)	2.26 (9)
OH	1.66 (6)	1.4 *
H ₂ O	1.85 (6)	1.40 (9)
CN	1.45 (1)	2.59 (9)
HCN	2.98 (6)	2.56 (6)
HCO	2.2 (7)	1.9 *
H ₂ CO	2.33 (6)	2.6 *
HNO	1.67 (6)	2.6 *

Table IV.1. *Moment dipolaire électrique et polarisabilité de quelques molécules interstellaires.*

(1) Huber et Hertzberg 1979

(2) Del Bene 1971

(3) Tücker, Kutner et Thaddeus 1974

(4) Silk et Murell 1970

(5) Brown et Williams 1973

(6) Adams, Smith et Clary 1985

(7) Mc Clellan 1963

(8) Saito et Tagaki 1972

(9) Duley et Williams 1984

* Estimation à partir de la polarisabilité des atomes

La Table IV.2 présente une comparaison entre des taux de réaction paramétrisés par l'équation (1), des valeurs expérimentales rapportées par Rowe et al.(1985) et des taux standards mesurés à 300K. Il faut remarquer que cette équation (1) peut surestimer à basse température certains taux de réactions qui sont plus lents à température du laboratoire que ne le prévoit la théorie. Malheureusement, cette possibilité ne peut être vérifiée que par la connaissance des surfaces de potentiel de chaque réaction individuellement. Comme peu sont connues, adopter l'équation (1) pour toutes les réactions ion-molécule polaire nous donnera l'effet maximum.

* : Huntress (1977) ; # : Anicich et al (1976) ; & : Smith et al (1978)

Réaction	Température (K)									
	Rowe et al. (1985)				Su et Chesnavich (1982)					
	10	27	68	300	10	27	68	300	300	
He ⁺ + NH ₃	0.7	0.5	0.3	0.2	1.8	1.2	0.8	0.4	0.4*	
+ H ₂ O	1.1	0.4	0.2	0.04	1.7	0.9	0.3	0.04	0.04*	
C ⁺ + NH ₃	0.7	0.5	0.3	0.2	1.2	0.8	0.5	0.2	0.2#	
+ H ₂ O	3.0	1.2	0.5	0.3	1.5	0.9	0.6	0.3	0.3#	
N ⁺ + NH ₃	0.9	0.5	0.3	0.2	1.2	0.8	0.5	0.2	0.2&	
+ H ₂ O	1.7	1.0	0.6	0.3	1.5	0.9	0.6	0.3	0.3&	

Table IV.2 Comparaison entre les taux paramétrisés par Su et Chesnavich (1982) et ceux mesurés par Rowe et al.(1985). En dernière colonne, ce sont des valeurs antérieures mesurées à 300K. Les taux sont exprimés en $10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. La première colonne est une extrapolation en $T^{-\alpha}$.

IV.III LE MODELE

Le modèle de nuage est celui développé par Clavel et al.(1978) et amélioré par Viala (1986) : le chapitre II de cette thèse a été consacré en partie à son explication détaillée et ne sont rappelées ici que les principales hypothèses. C'est un modèle stationnaire dans lequel l'équilibre est supposé atteint sous l'influence conjuguée des réactions chimiques et de l'environnement extérieur, c'est à dire le champ de rayonnement UV interstellaire ($\lambda > 912\text{\AA}$) et le rayonnement cosmique ambiant, tous deux supposés isotropes. Cet équilibre dépend de la température cinétique : c'est un paramètre libre du modèle qui néglige la thermodynamique. Le problème du transfert de rayonnement UV est résolu dans une géométrie plan parallèle limité de manière cohérente avec l'équilibre chimique et la neutralité électrique. Les inhomogénéités des constituants à l'intérieur du nuage ne sont dues qu'à l'atténuation du rayonnement UV : les photons sont absorbés par le gaz et par les poussières, l'opacité du gaz est calculée avec une attention particulière, les poussières sont supposées diffuser la lumière uniquement vers l'avant (voir Annexe B).

Le nuage sombre standard de référence est un nuage d'extinction visuelle $A_v = 1 \text{ mag}$ (l'épaisseur du nuage), c'est à dire de colonne densité totale d'hydrogène $N_H = 2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ (en utilisant la relation standard de Bohlin et al.(1978)), de température cinétique $T_K = 10\text{K}$ et de densité variable entre 10^3 et 10^5 cm^{-3} . Les flux de rayonnement UV et cosmiques sont standards, les sections efficaces de photodestruction et les taux de réaction sont ceux de Viala (1986) réactualisés (voir Annexe E), les abondances élémentaires sont celles mesurées dans le nuage diffus principal dans la direction de l'étoile ζ Ophiuchi (voir Table IV.3).

Elément	He	C	N	O	Mg	Fe	Si	S
Abondance	0.1	1.6(-4)	2.1(-5)	5.0(-4)	1.0(-6)	8.3(-7)	2.0(-7)	8.3(-6)

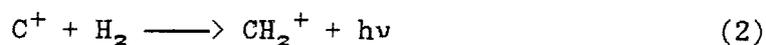
Table IV.3. Abondance des éléments de la phase gazeuse.

IV. IV STRUCTURE CHIMIQUE D'UN NUAGE SOMBRE

La Figure IV.1 représente les abondances de quelques espèces chimiques en fonction de la profondeur optique dans un nuage sombre avec $n = 10^4 \text{cm}^{-3}$. Dès le premier coup d'oeil à cette figure nous remarquons de grands écarts d'abondance dans le nuage : des variations de 2 ou 3 ordres de grandeur sont très fréquentes, elles peuvent même atteindre 6 ou 7 ordres de grandeur pour C, C⁺ et les hydrocarbures. Il faut insister sur le fait que la densité locale d'une espèce en un point particulier du nuage n'est pas représentative de la quantité totale de cette espèce à travers tout le nuage : il suffit pour le vérifier de comparer les colonnes densités relatives $N(X)/N_H$ de la Table IV.4 avec les abondances au centre du nuage où les photons ne jouent plus aucun rôle dans la chimie (en fait, à densité et température constantes, les variations de la Figure IV.1 sont dues uniquement à l'atténuation du rayonnement UV et à la façon dont est traité le transfert). Les sections efficaces de dissociation de certaines molécules comme OH, C₂, CN ou HCN permettent néanmoins aux photoprocessus d'agir jusqu'à des profondeurs optiques respectables de l'ordre de $\tau_v \approx 3-4$. Il est donc nécessaire de construire des modèles qui tiennent compte des variations des abondances dans le nuage et ce d'autant plus qu'il existe certainement des gradients de température et de densité. Les colonnes densités issues de ces modèles peuvent être comparées aux observations pour en déduire les paramètres physiques du nuage et/ou les processus de formation moléculaire.

IV.1 La transition C⁺, C, CO et les hydrocarbures

La Figure IV.1 montre comment se répartissent les différentes molécules dans le nuage. Clavel et al.(1978), de Jong et al.(1980) et Viala (1986) ont déjà montré que tous les hydrocarbures à part CH₄ sont concentrés à la surface à $\tau_v \leq 0.5$. Cette fine couche contribue pour plus de 90% à la colonne densité de C, C⁺ et des hydrocarbures. La raison est que l'association radiative



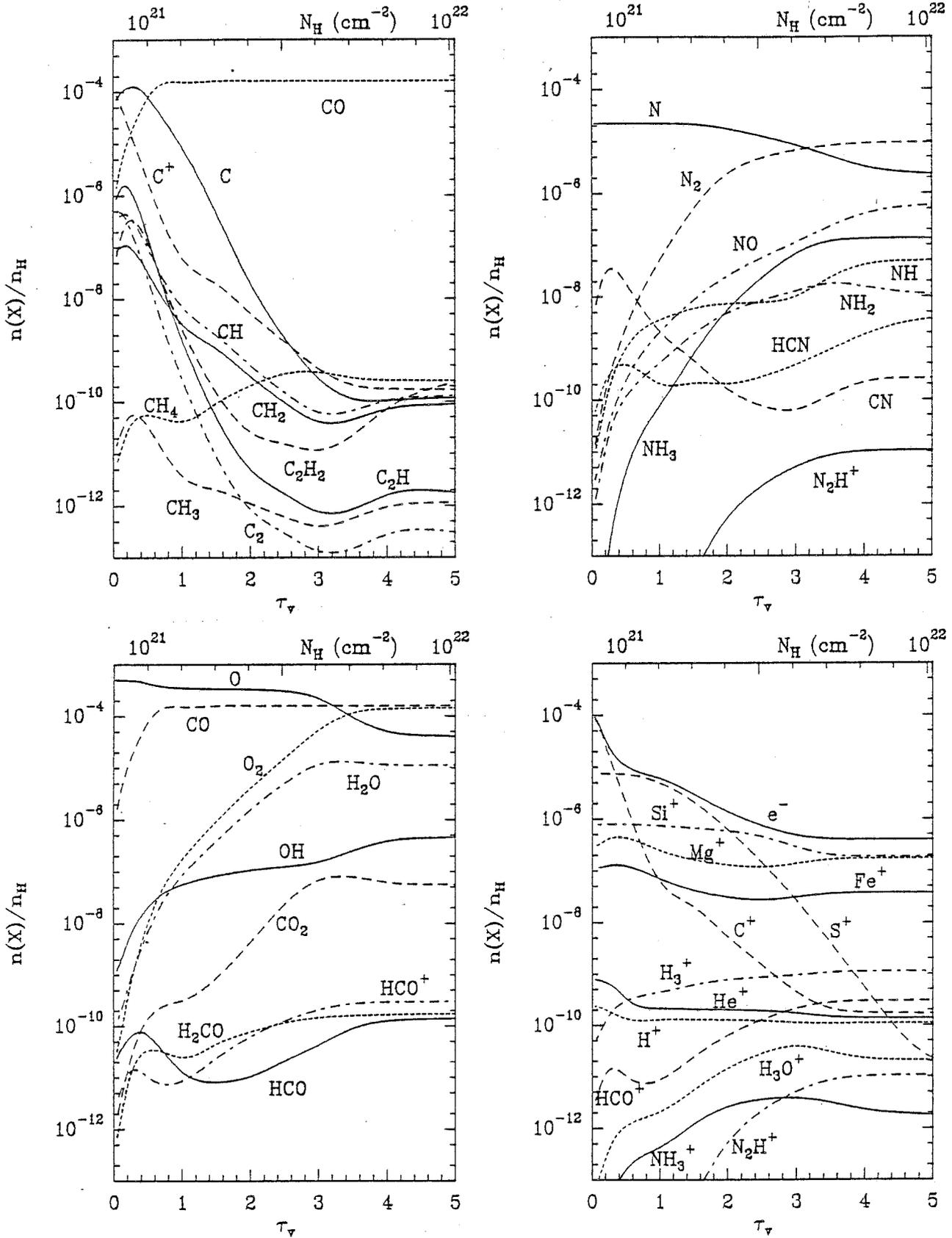


Figure IV.1. Abondances relatives dans un nuage sombre ($A_V = 11$), dense ($n = 10^4 \text{ cm}^{-3}$) et froid ($T = 10\text{K}$), en fonction de la profondeur optique et, de façon équivalente de la colonne densité totale d'hydrogène. Les taux de réactions sont les taux standards, la polarité des molécules n'est pas prise en compte.

qui initie la formation des hydrocarbures, est d'autant plus rapide que C^+ est abondant, c'est à dire en présence de photons UV.

La chute de C et C^+ dans les couches externes ($0.1 \leq \tau_v \leq 1$) illustrent parfaitement comment les réactions chimiques perturbent l'équilibre d'ionisation du carbone. Comme on pouvait s'y attendre, C^+ décroît quand le flux UV diminue, mais sa chute est plus brutale qu'un simple équilibre d'ionisation ne l'indiquerait car l'association radiative (2) est un processus important de destruction de C^+ , et aussi parce que la densité d'électrons ne décroît pas aussi vite que celle de C^+ , une importante fraction d'électrons libres provenant de l'ionisation du soufre. Contrairement à ce qui ressortirait de l'équilibre d'ionisation, C décroît lui aussi, car la réaction (2) convertit une partie importante de C^+ en d'autres composants que C : principalement CH , CH_2 , C_2 , C_2H et CO .

Lorsque la polarité des molécules CH , CH_2 et C_2H est prise en compte, les réactions entre C^+ et ces molécules vont être accélérées. En effet, les taux des réactions



passent respectivement de 4.7×10^{-10} , 6.8×10^{-10} et 6.9×10^{-10} à 6.9×10^{-9} , 4.5×10^{-9} et $6.3 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ à 10K. La réaction (3) fait chuter C^+ encore un peu plus rapidement, les réactions (3), (4) et (5) abaissent d'un facteur 2-3 les espèces CH , CH_2 et C_2H dans cette zone (voir Figure IV.2a) qui est leur contribution principale à leur abondance totale dans le nuage. En conséquences, on peut remarquer une augmentation de C_2 qui gagne un facteur 2 grâce aux effets amorcés par les réactions (4) et (5), ainsi qu'une diminution du même facteur de C_2H_2 qui se forme principalement à partir de C_2H (voir Figure IV.2a).

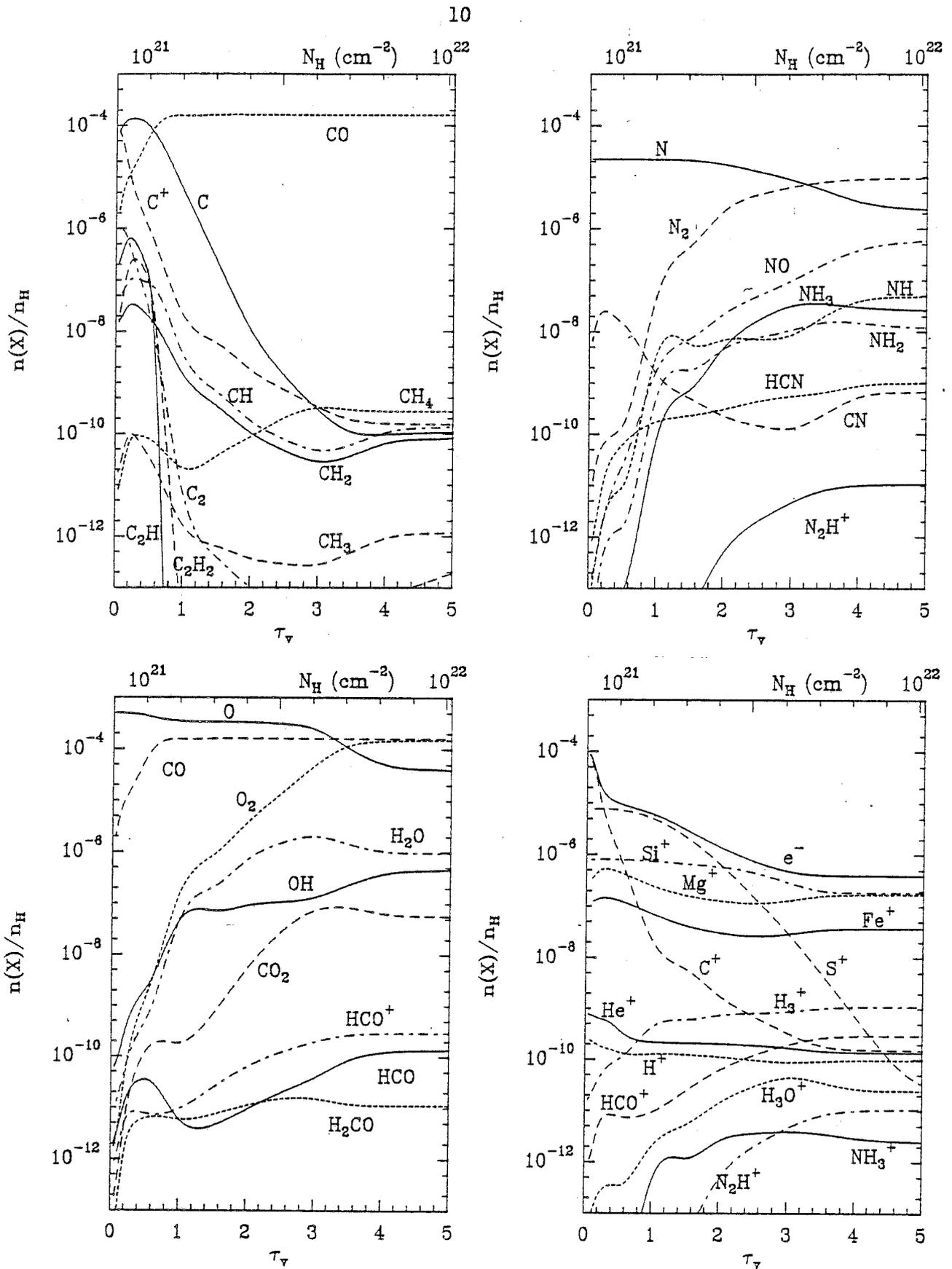


Figure IV.2. Abondances relatives dans le même nuage que dans la figure IV.1. Les taux de réactions ion-neutre prennent en compte la polarité des molécules (voir texte).

IV.2 OH et H₂O

A des profondeurs optiques plus élevées (à partir de $\tau_v \approx 1.5$), C et C⁺ continuent de décroître rapidement à cause de l'apparition des agents destructeurs OH, H₂O et O₂ (voir Figure IV.1c) qui sont encore plus efficaces lorsqu'est prise en compte leur polarité (OH et H₂O). Ces molécules payent ce surplus d'efficacité en étant à leur tour diminuées. OH est diminuée en bord de nuage à cause de C⁺, mais retrouve ensuite vers $\tau_v \approx 1$ son abondance normale (voir Figure IV.2c), son principal mode de destruction étant alors la réaction neutre-neutre avec l'oxygène atomique; H₂O est amputée d'une partie de son abondance par C⁺ en bord de nuage (perte d'un ordre de grandeur, voir Figure IV.3), amputation qui se ralentit lorsque C⁺ diminue vers $\tau_v \approx 1$; mais H₃⁺ prend le relais vers $\tau_v \approx 1-2$ et lui fait perdre à nouveau un ordre de grandeur au centre du nuage (voir Figure IV.3), le taux de la réaction H₃⁺ + H₂O passant de 1.7×10^{-9} à 2.5×10^{-8} cm³s⁻¹ à 10K lorsque la polarité de H₂O est introduite.

IV.3 CN et HCO

Deux autres espèces CN (Figure IV.1b) et HCO (Figure IV.1c) sont concentrées en bord de nuage. Les variations de l'abondance de CN sont très fortement corrélées à celles de CH et C₂, car CN est formé principalement par réaction neutre-neutre entre ces espèces et l'azote atomique. C₂ et CH étant respectivement augmenté et diminué à peu près dans les mêmes proportions en bordure de nuage lorsque les taux sont polaires (voir plus haut), la formation de CN reste identique dans les deux cas; comme de plus, malgré sa polarité, CN est peu détruit par les ions, mais principalement par O, son abondance n'est pas perturbée dans cette zone qui est sa zone de prédilection (voir Figure IV.3). Plus à l'intérieur ($\tau_v \geq 2$), CN profite partiellement de l'augmentation de H₂CN⁺ via l'accélération de la réaction H₃⁺ + NH₃ provoquée par la polarité de NH₃ (voir Figure IV.3).

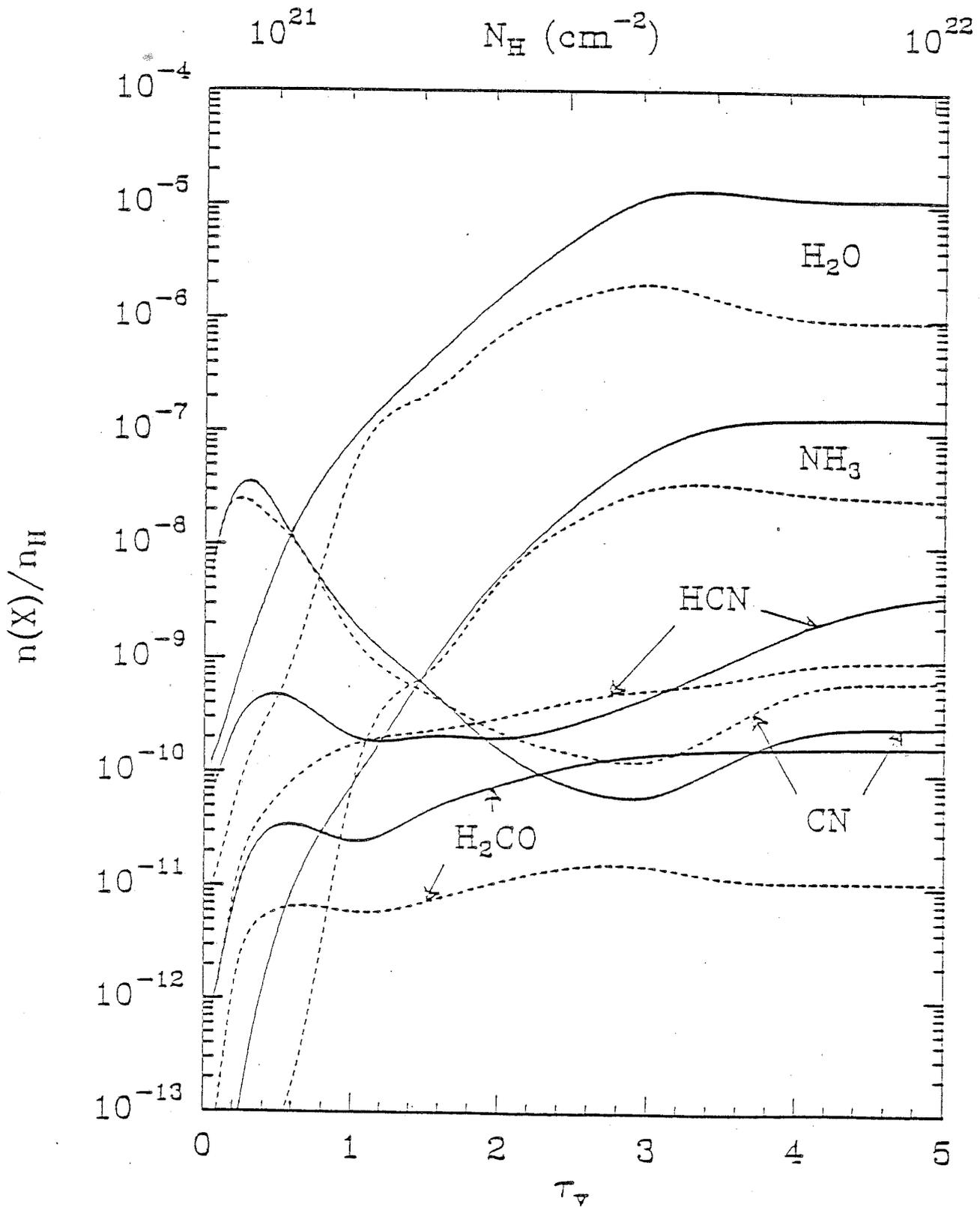


Figure IV.3. Abondances relatives de quelques molécules polaires dans un nuage sombre, lorsque (i) leur polarité n'est pas prise en compte (—), (ii) leur polarité est prise en compte (---).

Dans les parties externes, HCO est produit par réaction entre CH_2 et O. Comme CH_2 décroît lorsqu'on pénètre dans le nuage, les transferts de charge entre métaux et HCO^+ prennent le relais, et ceux-ci deviennent les principaux fournisseurs en HCO dont l'abondance est rehaussée au centre du nuage (voir Figure IV.1c). Lorsque la polarité de CH_2 intervient, HCO est diminué en bord de nuage (voir Figure IV.2c), mais retrouve sa valeur antérieure dès que $\tau_v \geq 2$.

IV.4 Autres molécules oxygénées et azotées

A l'exception de CN et HCO, toutes les molécules contenant de l'azote ou de l'oxygène sont plus abondantes dans les couches internes du nuage à cause de l'atténuation du flux UV. Comme le montrent les Figures IV.1b et IV.1c, leurs abondances augmentent plus ou moins rapidement vers le centre du nuage. Ce comportement d'ensemble est respecté lorsque les taux sont polaires, mais l'augmentation est fortement ralentie pour des espèces comme H_2O , H_2CO , HCN ou NH_3 (voir Figure IV.3) principalement à cause d'une très forte destruction par H_3^+ .

Les Figures IV.1a, IV.1b et IV.1c illustrent bien la différence entre la chimie du carbone d'une part, et celles de l'azote et de l'oxygène d'autre part, la première étant plus efficace pour transférer le carbone de la phase gazeuse sous la forme moléculaire CO. L'azote et ce qui reste d'oxygène après que CO ait pris sa part, sont convertis en N_2 et O_2 . Toutefois, cette conversion est incomplète : contrairement à C, N et O ne déclinent que lentement vers le centre du nuage et restent très abondants à travers tout le nuage. La conversion de N en N_2 est plus rapide que celle de O en O_2 . Ces conversions ne sont absolument pas modifiées par l'introduction des taux polaires qui respectent donc les grands transferts d'éléments dans la phase gazeuse d'un nuage sombre.

IV.5 Electrons et ions

Les abondances des électrons et des ions sont reportés en Figure IV.1d. Dans la partie supérieure du nuage, les électrons sont produits par l'ionisation du carbone et du soufre, le degré d'ionisation variant de 10^{-4} à 10^{-6} . Lorsque $2 < \tau_v < 4$, les électrons proviennent de l'ionisation du silicium, et à un degré moindre du magnésium, par des photons de longueurs d'onde $\approx 1500 \text{ \AA}$, qui pénètrent plus profondément le nuage que les photons de longueurs d'onde inférieures responsables de l'ionisation de C et de S. Au delà de $\tau_v = 4$, l'abondance électronique est contrôlée par les réactions de transfert de charges entre Mg, Fe et Si et les ions moléculaires les plus abondants H_3^+ et HCO^+ : les recombinaisons électroniques de ces ions moléculaires étant plus rapides que celles des ions atomiques, le principal effet de ces transferts est de maintenir une abondance électronique de quelques 10^{-7} (voir Figure IV.1d). L'introduction des taux polaires a très peu d'influence sur cette structure ionique, si ce n'est la décroissance plus rapide de C^+ déjà mentionnée, qui n'influe pas sur l'abondance électronique dans le nuage.

IV.V COMPARAISON AVEC LES OBSERVATIONS

La Table IV.4 nous indique les valeurs de colonnes densités relatives $N(X)/N_{\text{H}}$ lorsqu'on utilise les taux standards ou les taux polaires, pour des densités $n_{\text{H}} = 10^3 - 10^4 - 10^5 \text{ cm}^{-3}$. Elle nous apprend à première vue que les atomes neutres et les molécules stables neutres comme CH_4 ou C_2H_2 restent constantes, alors que les espèces neutres polaires réagissent de façon variable : les plus touchées sont H_2CO , NH_3 , H_2O et HCN qui peuvent perdre un facteur 5 à 10 suivant la densité, d'autres comme CH , CH_2 ou HCO ne diminuent que d'un facteur 2-3, alors que NH , NH_2 et OH ne bougent pas. Deux cas particuliers sont C_2 et CN qui voient leur abondance relevée, CN à basse densité seulement. Ces comportements ont été expliqués en partie dans le paragraphe au dessus, mais examinons quelles sont les conséquences observationnelles à prévoir (il faut rappeler que nous avons ici l'effet maximum des taux polaires).

	Taux standards			Taux polaires			$n = 10^4 \text{ cm}^{-3}$		
	10^3	10^4	10^5	10^3	10^4	10^5	"S"	"P"	
H	8.0(-3)	5.7(-3)	4.6(-3)	8.6(-3)	5.8(-3)	4.6(-3)	e	5.8(-6)	5.1(-6)
p-H ₂	3.9(-1)	3.7(-1)	3.8(-1)	3.6(-1)	3.7(-1)	3.8(-1)	H ⁺	4.5(-10)	5.4(-10)
o-H ₂	1.1(-1)	1.2(-1)	1.2(-1)	1.3(-1)	1.3(-1)	1.2(-1)	H ₂ ⁺	4.2(-13)	4.2(-13)
H ₂	5.0(-1)	5.0(-1)	5.0(-1)	5.0(-1)	5.0(-1)	5.0(-1)	H ₃ ⁺	7.8(-10)	7.2(-10)
He	1.0(-1)	1.0(-1)	1.0(-1)	1.0(-1)	1.0(-1)	1.0(-1)	He ⁺	2.8(-10)	2.9(-10)
Fe	9.7(-8)	1.5(-7)	1.8(-7)	9.7(-8)	1.5(-7)	1.8(-7)	Mg ⁺	2.0(-7)	2.0(-7)
Mg	5.8(-7)	8.0(-7)	9.2(-7)	5.8(-7)	8.0(-7)	9.2(-7)	Fe ⁺	5.1(-8)	5.2(-8)
Si	2.0(-7)	3.8(-7)	5.5(-7)	2.0(-7)	3.7(-7)	5.5(-7)	Si ⁺	4.5(-7)	4.6(-7)
S	5.3(-6)	6.4(-6)	7.3(-6)	5.3(-6)	6.4(-6)	7.3(-6)	S ⁺	1.9(-6)	1.9(-6)
C	1.6(-5)	1.5(-5)	1.1(-5)	1.4(-5)	1.7(-5)	1.5(-5)	C ⁺	3.2(-6)	2.5(-6)
CH	4.0(-8)	3.5(-8)	1.3(-8)	1.3(-8)	1.3(-8)	2.5(-9)	CH ⁺	3.6(-13)	5.2(-13)
CH ₂	1.1(-8)	9.9(-9)	3.9(-9)	3.9(-9)	3.6(-9)	7.2(-10)	CH ₂ ⁺	2.0(-12)	1.9(-12)
CH ₃	8.0(-12)	6.7(-12)	3.6(-12)	7.1(-12)	8.3(-12)	1.2(-12)	CH ₃ ⁺	5.3(-12)	6.1(-12)
CH ₄	1.0(-10)	2.0(-10)	6.4(-10)	9.7(-11)	1.7(-10)	5.2(-10)	CH ₄ ⁺	1.6(-20)	1.2(-20)
C ₂	3.4(-8)	2.4(-8)	3.3(-9)	8.0(-8)	4.1(-8)	5.1(-9)	CH ₅ ⁺	1.0(-14)	1.2(-14)
C ₂ H	5.5(-8)	9.8(-8)	4.5(-8)	3.0(-8)	4.3(-8)	1.9(-9)	C ₂ ⁺	3.2(-13)	6.2(-13)
C ₂ H ₂	3.5(-9)	2.8(-8)	7.3(-8)	1.8(-9)	1.8(-8)	5.7(-8)	C ₂ H ⁺	5.0(-13)	8.6(-13)
N	1.5(-5)	1.3(-5)	1.0(-5)	1.5(-5)	1.3(-5)	1.1(-5)	C ₂ H ₂ ⁺	1.6(-12)	5.8(-12)
NH	1.2(-7)	1.7(-8)	2.2(-9)	9.8(-8)	1.6(-8)	2.1(-9)	C ₂ H ₃ ⁺	8.4(-16)	4.9(-16)
NH ₂	2.2(-8)	8.0(-9)	2.0(-9)	2.4(-8)	7.5(-9)	1.9(-9)	C ₃ ⁺	2.4(-11)	8.1(-11)
NH ₃	4.5(-8)	5.5(-8)	6.2(-8)	1.8(-8)	1.6(-8)	1.5(-8)	C ₃ H ⁺	4.5(-11)	1.9(-11)
N ₂	3.1(-6)	4.6(-6)	5.8(-6)	3.1(-6)	4.5(-6)	5.7(-6)	N ⁺	6.0(-13)	5.7(-13)
O	2.6(-4)	2.4(-4)	2.3(-4)	2.6(-4)	2.5(-4)	2.4(-4)	NH ⁺	7.5(-16)	8.9(-16)
OH	1.3(-6)	1.9(-7)	2.3(-8)	1.1(-6)	1.7(-7)	2.1(-8)	NH ₂ ⁺	1.2(-13)	1.2(-13)
H ₂ O	6.6(-6)	6.0(-6)	5.3(-6)	1.1(-6)	8.4(-7)	7.3(-7)	NH ₃ ⁺	2.0(-12)	2.2(-12)
O ₂	4.8(-5)	5.4(-5)	5.8(-5)	4.9(-5)	5.5(-5)	5.9(-5)	NH ₄ ⁺	6.8(-13)	8.9(-13)
CN	5.7(-9)	3.6(-9)	1.6(-9)	9.4(-9)	2.9(-9)	5.0(-10)	N ₂ ⁺	3.1(-16)	3.2(-16)
HCN	3.1(-9)	9.4(-10)	8.7(-10)	1.8(-9)	4.7(-10)	1.3(-10)	N ₂ H ⁺	4.2(-12)	4.1(-12)
CO	1.3(-4)	1.4(-4)	1.5(-4)	1.3(-4)	1.4(-4)	1.5(-4)	O ⁺	3.0(-13)	2.9(-13)
HCO	2.5(-11)	6.1(-11)	5.6(-11)	2.0(-11)	5.2(-11)	4.6(-11)	OH ⁺	3.4(-13)	3.1(-13)
H ₂ CO	5.7(-11)	1.0(-10)	2.0(-10)	6.3(-12)	1.0(-11)	1.8(-11)	H ₂ O ⁺	3.8(-13)	3.6(-13)
CO ₂	2.6(-9)	3.2(-8)	2.2(-7)	2.9(-9)	3.4(-8)	2.2(-7)	H ₃ O ⁺	1.7(-11)	2.3(-11)
NO	5.2(-7)	1.6(-7)	3.2(-8)	4.5(-7)	1.6(-7)	3.1(-8)	O ₂ ⁺	1.7(-11)	1.5(-11)
HNO	1.8(-9)	6.3(-10)	1.6(-10)	1.9(-9)	5.9(-10)	1.5(-10)	O ₂ H ⁺	4.5(-11)	4.4(-11)
							CN ⁺	2.6(-16)	2.1(-16)
							HCN ⁺	4.3(-16)	4.6(-16)
							H ₂ CN ⁺	2.3(-14)	7.3(-14)
							C ₂ N ⁺	1.5(-14)	1.6(-14)
							CO ⁺	3.5(-14)	2.7(-14)
							HCO ⁺	1.5(-10)	1.4(-10)
							H ₂ CO ⁺	2.2(-15)	4.2(-15)
							H ₃ CO ⁺	1.9(-16)	6.3(-16)

Table IV.4. *Colonnes densités relatives à la colonne densité totale d'hydrogène dans un nuage sombre ($A_V=11$, $N_H=2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$) et froid ($T = 10\text{K}$) Les calculs ont été effectués dans des nuages de différentes densités, avec les taux de réactions standards, puis en prenant en compte la polarité des molécules dans les réactions ion-neutre.*

NH₃

Dans les nuages sombres, $N(\text{NH}_3)/N_{\text{H}}$ varie typiquement de 10^{-8} à quelques 10^{-7} (Tölle et al.1981, Ungerechts et al.1980,1982). Ces valeurs sont atteintes quelque soit la densité, ce qui indique que la phase gazeuse paraît suffisante pour reproduire l'abondance de NH_3 . Toutefois, l'introduction de la polarité de NH_3 nous ramène à la limite inférieure des valeurs observationnelles. La différence se trouve dans la destruction de NH_3 par H_3^+ dont le taux passe de 4.7×10^{-9} à $2.1 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

HCN

Churchwell et al.(1984) ont observé HCN dans 10 nuages sombres et ont obtenu des rapports $N(\text{HCN})/N_{\text{H}}$ compris entre quelques 10^{-10} et quelques 10^{-8} . Les deux modèles de la Table IV.4 sont dans cette fourchette, même si HCN peut perdre jusqu'à un facteur ≈ 10 avec les taux polaires à forte densité. La création de HCN est assurée par $\text{N} + \text{CH}_2$ en bord de nuage ($\tau_{\text{v}} \leq 2.5$) et par la recombinaison électronique de H_2CN^+ au centre. La destruction se fait par 3 processus : (i) la photodissociation, efficace loin dans le nuage ($\tau_{\text{v}} \approx 4$), (ii) la réaction $\text{C}^+ + \text{HCN}$ en bord de nuage, qui faiblit avec les taux polaires, car le taux est augmenté et parce que C^+ est diminué, (iii) la réaction $\text{H}_3^+ + \text{HCN}$ dont le taux passe de 8×10^{-9} à $4 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ à 10K, mais qui recycle partiellement HCN. Il est difficile de trancher sur la chimie de HCN, les observations étant trop imprécises (les raies sont souvent saturées) d'une part, et la prise en compte de l'isomère HNC étant indispensable d'autre part.

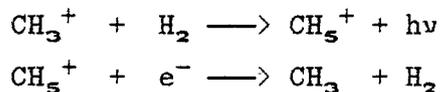
H₂O

A cause de l'opacité de l'atmosphère à ses transitions inférieures, la molécule H_2O n'est pas détectée dans les nuages sombres et froids. Seule l'émission maser à 1.35 cm de longueur d'onde est accessible dans des régions denses et chaudes de formation d'étoiles (Orion par exemple). L'abondance de H_2O prédite par les calculs est supérieure à celle de OH, mais sa polarité peut lui faire perdre jusqu'à un facteur 7 à forte densité. La répartition de l'oxygène entre les divers composants n'est cependant pas modifiée entre O, O_2 , OH et H_2O .

H_2CO

Le rapport $N(H_2CO)/N_H$ calculé dans le modèle standard varie entre 6×10^{-11} et 2×10^{-10} , ce qui est plus d'un ordre de grandeur inférieur aux observations : sur un échantillon de 381 nuages de Lynds observés en absorption dans la raie $l_{10}-l_{11}$, Dieter (1973) obtient $N(H_2CO)/N_H \approx 10^{-8 \pm 1}$. Toutefois des incertitudes pèsent sur ces observations à cause des effets de dilution dans le lobe ($10'$) et de structure des nuages ; de plus, ces nuages ne sont pas aussi épais que le nuage modèle ($A_V \approx 1-6$ mag).

La principale difficulté pour fabriquer H_2CO réside dans le fait que les réactions de HCO^+ et H_2CO^+ avec H_2 sont endothermiques, ce qui empêche une production importante de H_3CO^+ dont la recombinaison conduit à H_2CO . Comme l'ont montré depuis longtemps Herbst et Klemperer (1973), la principale création de H_2CO est assurée par la réaction neutre-neutre $CH_3 + O \rightarrow H_2CO + H$. Ainsi, l'abondance de H_2CO est contrôlée par celle de CH_3 qui n'a pratiquement pas diminué lorsqu'on a utilisé les taux polaires. En effet, CH_3 n'est pas polaire, et de plus son abondance est fortement contrainte par les réactions suivantes



dont les taux ont été mesurés il y a quelques années par Barlow et al. (1984) et par Adams et al. (1984). Tout récemment, Bates (1987) a fait une nouvelle interprétation des mesures de l'association radiative ci-dessus à 80, 30 et 13K : il trouve un taux de $3.2 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ à 13K où Barlow et al. (1984) ne donnaient que $1.8 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Cette augmentation brutale permet à CH_3 de gagner un facteur ≈ 20 et de passer de 6.7×10^{-12} à 1.2×10^{-10} à $n = 10^4 \text{ cm}^{-3}$. En conséquence, H_2CO récupère un ordre de grandeur à 10^{-9} , ce qui nous fait entrevoir une issue favorable pour cette molécule, malgré sa forte polarité : en effet, la destruction de H_2CO par H_3^+ tout au long du nuage (voir Figure IV.2c), dont le taux passe de 2.4×10^{-9} à $3 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ à 10K, lui fait perdre un ordre de grandeur, quelque soit la densité ; mais ce résultat est sans doute exagéré par la force de cette dernière réaction.

CH

CH est une des molécules (avec OH, CO et CN) observées à la fois dans le milieu interstellaire diffus et dans les nuages denses. Hjalmarson et al. (1977) ont observé les trois transitions hyperfines du doublet $^2\pi_{1/2}, J=1/2$ en direction de 100 nuages avec une résolution spatiale de 15'. Ils trouvent statistiquement que $N(\text{CH})/N_{\text{H}}$ décroît avec A_{V} (ou N_{H}) croissant; de 10^{-8} à $A_{\text{V}}=2$, jusqu'à 5×10^{-9} à $A_{\text{V}}=6$. Toutefois, les incertitudes sont grandes, et les effets de dilution dans le lobe et de structure locale des nuages n'ont pas été pris en compte. Le modèle standard prévoit $N(\text{CH})/N_{\text{H}} \approx 4 \times 10^{-8}$ pour $n_{\text{H}} \approx 10^3 - 10^4 \text{ cm}^{-3}$. C'est environ 6 fois plus élevé que les valeurs de Hjalmarson et al. dans les nuages les plus sombres, ce facteur étant ramené à 2 lorsque la polarité des molécules est impliquée. Des observations récentes de l'émission de l'état fondamental de CH (autour de 9cm) dans L134, ne montrent pas de façon claire de variations décroissantes de $N(\text{CH})/N_{\text{H}}$ avec l'extinction visuelle (Jacq et al. 1987); ce comportement n'est cependant pas non plus totalement écarté du fait du manque d'observations à faible A_{V} . Les abondances rapportées dans cette publication sont compatibles avec les modèles denses.

C₂

C₂ est une molécule homonucléaire inobservable dans les nuages très opaques. Lutz et Crutcher (1983) et Hobbs et al. (1983) ont détecté des raies d'absorption de la bande (2-0) de Phillips en direction de 3 étoiles très rouges : VI Cygni N°12, HD 29647 (voir Chapitre V) et BD+66°1675. Des raies d'absorption jusqu'à $J=12$ sont observées ce qui permet une détermination précise de la colonne densité : $N(\text{C}_2)/N_{\text{H}} \approx 2.3 \times 10^{-8}$, 2.0×10^{-8} et 3.0×10^{-8} respectivement. Ces valeurs s'accordent bien avec nos modèles à $n_{\text{H}} = 10^3$ et 10^4 cm^{-3} . Mais, lorsque les taux polaires sont utilisés, C₂ augmente (voir plus haut) et il faut augmenter la densité pour retrouver un accord avec les observations.

C_2H

C_2H a été détecté pour la première fois par Tucker et al. (1974) dans des nuages moléculaires géants associés à des régions HII. La première détection dans 13 nuages sombres sans source interne d'énergie, a été faite par Wooten et al. (1980). Ils donnent $N(C_2H)/N_H$ compris entre 2×10^{-10} et 6×10^{-9} . Notre modèle surestime fortement la concentration de C_2H : $N(C_2H)/N_H \approx 9 \times 10^{-8}$ à $n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ce qui est un ordre de grandeur plus élevé que le maximum observé : il faudrait une très forte densité pour retrouver les valeurs observationnelles. La chimie de C_2H a été ébauchée au paragraphe précédent et on a montré qu'introduire les taux polaires peut réduire d'un facteur 2-4 son abondance. Ce n'est toutefois pas suffisant au regard des observations : le désaccord peut provenir du fait qu'il a été supposé que la réaction $C_2 + H_2$ qui forme C_2H , n'a pas de barrière d'activation à basse température : cette supposition est certainement à revoir. Un calcul à 10^4 cm^{-3} sans cette réaction prévoit $N(C_2H)/N_H \approx 3.5 \times 10^{-9}$ et $\approx 5 \times 10^{-10}$ respectivement dans le cas standard et le cas polaire, ce qui s'accorde dans les deux cas avec les observations.

CN

$N(CN)/N_H$ peut varier de deux ordres de grandeur (entre 2×10^{-10} et 2×10^{-8}) dans les nuages sombres (Crutcher et al. 1984, Churchwell et Bieging 1983). Crutcher et al. (1984) remarquent la faiblesse des raies de CN et l'expliquent par un manque d'excitation plutôt que par une faible abondance : les colonnes densités observées sont de ce fait assez incertaines. Tous les modèles présentés dans la Table IV.4 sont compatibles avec les valeurs observationnelles, et le fait que $N(CN)/N_H$ est inversement corrélé à la densité (Turner et Gammon 1975) est également bien représenté. La chimie de CN est relativement bien établie, à l'exception d'une possible surestimation de sa photodissociation, mais qui ne diminue que faiblement son abondance dans les nuages sombres. Ses principaux processus de formation et de destruction ne font appel à des réactions ion-molécules polaires que de façon indirecte. En effet, CN se forme à partir de réactions de N avec CH et C_2 en bord de nuage (ce qui explique sa concentration dans cette zone); plus à l'intérieur, $HCN + h\nu$

\longrightarrow $\text{CN} + \text{H}$; $\text{C}^+ + \text{HCN} \longrightarrow \text{C}_2\text{N}^+ + \text{H}$, suivi de $\text{C}_2\text{N}^+ + \text{e} \longrightarrow \text{CN} + \text{C}$, et $\text{C}^+ + \text{NH}_3 \longrightarrow \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{H}$ suivi de $\text{H}_2\text{CN}^+ + \text{e} \longrightarrow \text{CN} + \text{H}_2$ maintiennent une abondance honorable de CN, comparée à celles de CH et C_2 . On remarque tout de même que lorsque les taux polaires sont introduits, $N(\text{CN})/N_{\text{H}}$ est multiplié par 2 à $n_{\text{H}} = 10^3 \text{ cm}^{-3}$, stable à $n_{\text{H}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, et divisé par 3 à $n_{\text{H}} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$. Ces variations s'expliquent par la décroissance de HCN avec la densité et avec les taux polaires : d'une part, lorsque la densité augmente, HCN alimente de moins en moins CN par sa dissociation; et d'autre part, dans la formation de CN par l'intermédiaire de C_2N^+ , l'accélération de la réaction de HCN avec C^+ ne compense pas la baisse de HCN à forte densité comme elle peut le faire à faible densité. Simultanément, l'augmentation de la formation de CN par l'intermédiaire de H_2CN^+ , due à l'accélération de la réaction de C^+ avec NH_3 , est beaucoup plus sensible à basse densité.

Les ions

La décroissance des abondances des molécules polaires va souvent de pair avec une augmentation des formes protonées des ions correspondants à ces molécules, ions qui sont formés à partir des réactions avec H_3^+ ou HCO^+ . Introduire des taux polaires dans la chimie des nuages sombres peut alors augmenter le rapport XH^+/X où X est une espèce neutre polaire (voir Millar et al. 1985 pour CS). Ainsi, le rapport $\text{H}_2\text{CN}^+/\text{HCN}$ passe de 5.4×10^{-5} à 8.9×10^{-4} pour une densité $n_{\text{H}} = 10^3 \text{ cm}^{-3}$, à cause à la fois de la diminution de HCN et de l'augmentation de H_2CN^+ qui passe de 1.7×10^{-13} à 1.6×10^{-12} grâce à une protonation plus efficace par H_3^+ . Comme HCN diminue lorsque la densité augmente, cet effet est un peu moins prononcé à forte densité : pour $n_{\text{H}} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$, le rapport $\text{H}_2\text{CN}^+/\text{HCN}$ gagne quand même encore un ordre de grandeur de 5.6×10^{-6} à 5.1×10^{-5} avec les taux polaires. Toutefois, et dans tous les cas, nous sommes loin des valeurs observationnelles qui prévoient $\approx 10^{-1}$ pour ce rapport : il y a certainement des problèmes au niveau des destructions de H_2CN^+ et HCN (Ziurys et Turner 1985). D'autres ions moléculaires issus de la protonation d'une molécule polaire comme H_3O^+ , H_2CO^+ , H_3CO^+ ou NH_4^+ , augmentent de façon sensible avec les taux polaires (facteur 2-5). Enfin, une autre famille d'ions formés principalement par réactions entre C^+ ou

H_3^+ et une molécule polaire, comme C_2^+ , C_2H^+ , $C_2H_2^+$ ou C_3^+ , augmente assez franchement et surtout à faible densité.

IV.VI CONCLUSION

Les quelques conclusions qui s'imposent sur l'influence de la polarité de certaines molécules neutres sont les suivantes :

- en général, les espèces diatomiques et polyatomiques voient leur abondance décroître quand les taux polaires sont utilisés, beaucoup d'un facteur inférieur à 3, quelques unes jusqu'à un ordre de grandeur (en particulier les molécules polaires : H_2CO , HCN , H_2O ,...);
- la plupart des atomes neutres, les molécules stables comme CH_4 ou C_2H_2 gardent pratiquement leur abondance constante;
- quelques ions moléculaires, formes protonées des molécules polaires, ont des abondances relevées d'un facteur 5 à 6.

Ces problèmes ont été abordés par Herbst et Leung (1986) dans un modèle de nuage dense hors équilibre chimique et leurs conclusions vont dans le même sens que ce qui a été exposé ici. Si la polarité de certaines molécules peut accélérer leur destruction par les processus ion-neutres et ainsi diminuer sensiblement leur abondance, elle ne modifie pas fondamentalement l'idée que l'on se fait de la chimie interstellaire en phase gazeuse. Néanmoins, ces phénomènes doivent être pris en compte dans les modèles de chimie de nuages froids et notamment lorsque des mesures de constantes de réaction en laboratoire sont disponibles à basse température.

Références

- Adams, N.G., Smith, D., Alge, E. : 1984, *J.Chem.Phys.* 81, 1778
- Adams, N.G., Smith, D., Clary, D.C. : 1985, *Astrophys.J.* 296, L31
- Anicich, V.G., Huntress, W.T., Futrell, J.H. : 1976, *Chem.Phys.Letters* 40, 233
- Barlow, S.E., Dunn, G.H., Schauer, M. : 1984, *Phys.Rev.Letters* 52, 902
- Bates, D.R. : 1982, *Proc.Roy.Soc.London A*, 384, 289
- Bates, D.R. : 1987, *Astrophys.J.* 312, 363
- Bohlin, R.C., Savage, B.D., Drake, J.F. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 132
- Brown, R.D., Williams, G.R. : 1973, *Molec.Phys.* 25, 673
- Celli, F., Weddle, G., Ridge, D.P. : 1980, *J.Chem.Phys.* 73, 801
- Chesnavich, W.J., Su, T., Bowers, M.T. : 1980, *J.Chem.Phys.* 72, 2641
- Churchwell, E., Bieging, J.H. : 1983, *Astrophys.J.* 265, 216
- Churchwell, E., Nash, A.G., Walmsley, C.M. : 1984, *Astron.Astrophys.* 287, 681
- Clary, D.C. : 1985, *Molec.Phys.* 54, 605
- Clavel, J., Viala, Y.P., Bel, N. : 1978, *Astron.Astrophys.* 65, 435
- Crutcher, R.M., Churchwell, E., Ziurys, L.M. : 1984, *Astrophys.J.* 283, 668
- De Jong, T., Dalgarno, A., Boland, W. : 1980, *Astron.Astrophys.* 91, 68
- Del Bene, J.E. : 1971, *Chem.Phys.Letters* 9, 68
- Dieter, N.H. : 1973, *Astrophys.J.* 183, 449
- Duley, W.W., Williams, D.A. : 1984, *Interstellar Chemistry*, Academic Press, London
- Herbst, E. : 1986, *Astrophys.J.* 306, 667
- Herbst, E., Klemperer, W. : 1973, *Astrophys.J.* 185, 205
- Herbst, E., Leung, C.M. : 1986, *Astrophys.J.* 310, 378
- Hjalmarson, A., Sume, A., Ellder, J., Rydbeck, O.E., Moore, E.L., Huguenin, G.R., Sandquist, A.A., Lindblad, P.O., Lindroas, P. : 1977, *Astrphys.J.Supp.* 35, 263
- Hobbs, L.M., Black, J.H., VanDishoeck, E.F. : 1983, *Astrophys.J.* 271, L95
- Huber, K.P., Herzberg, G. : 1979, *Molecular Spectra and Molecular Structure IV Constants of Diatomic Molecules* (New York: Van Nostrand, Reinhold)

- Huntress, W.T. : 1977, *Astrophys. J. Supp. Series* 33, 435
- Jacq, T., Baudry, A., Despois, D., Gerard, E., Johansson, L.E. : 1987,
Astron. Astrophys. 173, 352
- Lutz, B.L., Crutcher, R.M. : 1983, *Astrophys. J.* 271, L101
- Mac Clellan, E. : 1963, *Tables of Experimental Dipole Moment*, Freeman San Francisco
- Millar, T.J., Adams, N.G., Smith, D., Clary, D.C. : 1985, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 216, 1025
- Rowe, B.R., Marquette, J.B., Dupeyrat, G., Fergusson, E.E. : 1985,
Chem. Phys. Letters 113, 403
- Rowe, B.R., Marquette, J.B., Dupeyrat, G., Poissant, G., Rebrion, C. : 1985,
Colloque d'ATP-CNRS, Observatoire de Meudon
- Saito, S., Tagaki, K. : 1972, *J. Molec. Spectrosc.* 44, 81
- Silk, C.L., Murrell, J.N. : 1970, *Molec. Phys.* 18, 533
- Smith, D., Adams, N.G., Miller, T.M. : 1978, *J. Chem. Phys.* 62, 45
- Su, T., Chesnavich, W.J. : 1982, *J. Chem. Phys.* 76, 5183
- Tölle, F., Ungerechts, H., Walmsley, C.M., Winnewisser, G., Churchwell, E. : 1981,
Astron. Astrophys. 95, 143
- Tücker, K.D., Kutner, M.L., Thaddeus, P. : 1974, *Astrophys. J.* 193, L115
- Turner, B.E., Gammon, R.H. : 1975, *Astrophys. J.* 198, 71
- Ungerechts, H., Walmsley, C.M., Winnewisser, G. : 1980, *Astron. Astrophys.* 88, 259
- Ungerechts, H., Walmsley, C.M., Winnewisser, G. : 1982, *Astron. Astrophys.* 111, 339
- Viala, Y.P. : 1986, *Astron. Astrophys. Suppl. Series* 64, 391
- Wooten, A.W., Boyzan, E.P., Garrett, B.D., Loren, R.B., Snell, R.L. : 1980,
Astrophys. J. 239, 844
- Ziurys, L.M., Turner, B.E. : 1985, dans *IAU Symposium 120*, Astrochemistry,
ed. M.S. Vardya et S.P. Taradfar (Dordrecht: Reidel)

CHAPITRE V

La chimie du nuage moléculaire sur la ligne de visée de l'étoile HD 29647

V.I INTRODUCTION

Situé dans le complexe du Taureau (voir Chapitre III), le nuage moléculaire qui se trouve sur la ligne de visée de l'étoile HD 29647 a été étudié à la fois en optique et en radio par Crutcher (1985). L'étoile HD 29647 (BD+25°723) elle-même a été identifiée par Cohen (1972) comme une étoile dont le rougissement n'est dû, pour l'essentiel, qu'à un seul nuage dense, ce qui contraste avec les étoiles lointaines, rougies elles par une ligne de visée plus étendue à travers un milieu diffus. Ce nuage un peu particulier semble être intermédiaire entre les nuages sombres et denses du chapitre précédent, et les nuages diffus. Quelles sont les particularités chimiques d'un tel nuage ? En quoi se distingue-t-il des autres nuages moléculaires ? Peut-on prévoir la composition chimique et élémentaire de sa phase gazeuse ? Telles sont les questions abordées dans ce chapitre. Nous commencerons, dans une première partie, par présenter l'étoile HD 29647 elle-même, et ses propriétés intrinsèques. Ce que l'on connaît du nuage moléculaire sera résumé dans une deuxième partie. Enfin, un modèle de chimie sera développé, sous la forme d'une publication, dans une troisième et dernière partie.

V.II L'ÉTOILE HD 29647

II.1 Situation

HD 29647 est l'étoile B la plus brillante du voisinage du Taureau. Ses coordonnées équatoriales 1950 sont $\alpha = 4^{\text{h}} 38^{\text{m}} 03^{\text{s}}$ et $\delta = 25^{\circ} 53' 50''$, ce qui la situe dans l'aire du nuage moléculaire "Heiles Cloud 2" (HCL2), non loin du fragment très sombre et très dense "Taurus Molecular Cloud 1" (TMCl). La Figure V.1 montre une carte de l'aire intégrée de la raie $J=3-2$ de la molécule CS dans HCL2 (Castets *et al.* 1987). HD 29647 se trouve à environ 8 minutes d'arc au nord de l'extrémité nord de TMCl tracé par CS, c'est à dire dans l'aire du fragment HCL2-C (Cernicharo *et al.* 1984).

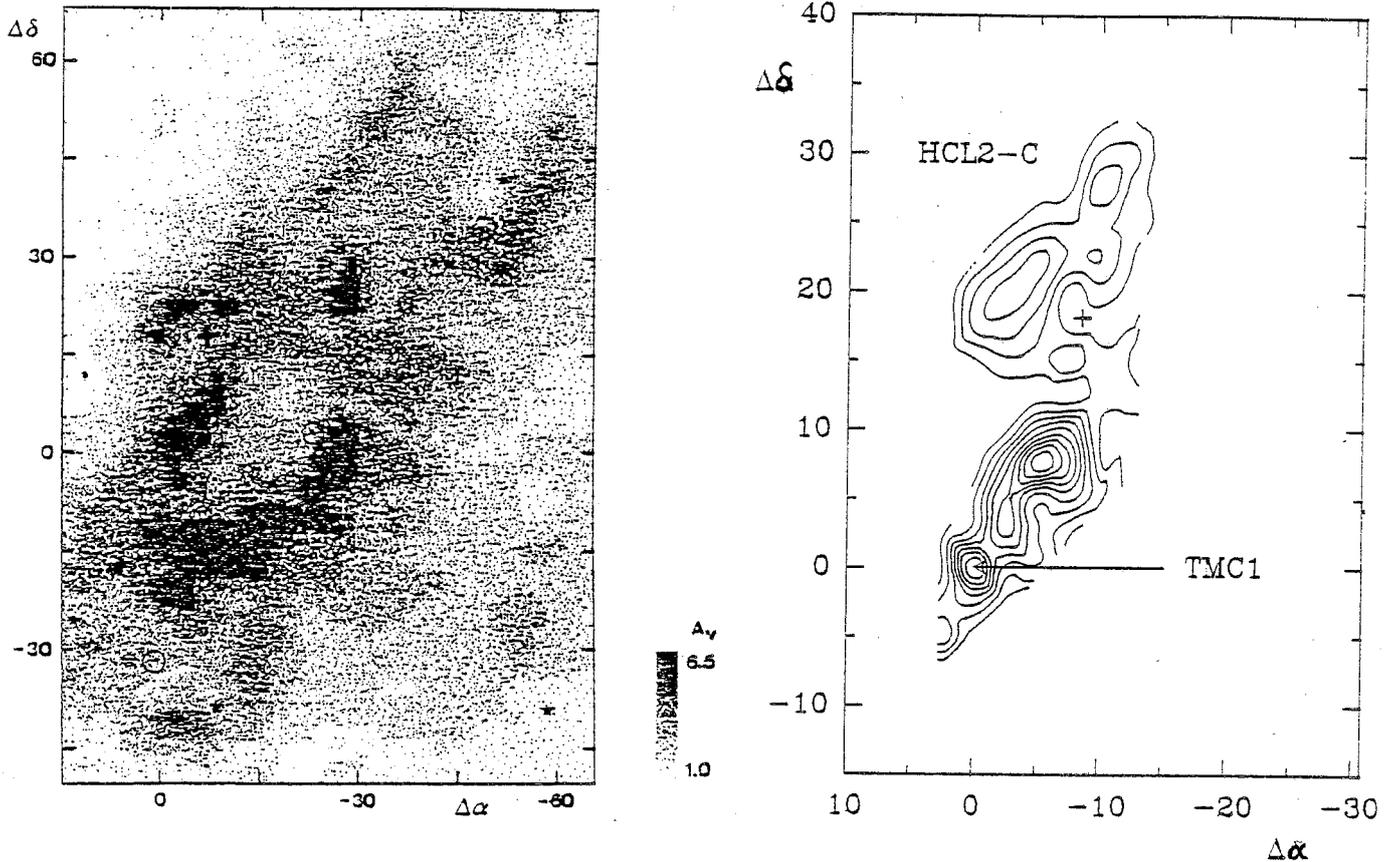


Figure V.1 . Situation de HD 29647 (+) dans HCL2, par rapport à TMC1 et HCL2-C. La carte de gauche montre la distribution de poussière dans HCL2, à partir de comptage d'étoiles (Cernicharo et Bachiller 1984). La carte de droite montre l'émission CS (3-2) d'une région réduite (Castets et al. 1987). Ces deux cartes sont centrées sur TMC1 en $\alpha_{1950} = 4^h 38^m 38^s$ et $\delta_{1950} = 25^\circ 35' 45''$.

II.2 Type spectral et photométrie

Le type spectral de HD 29647, publié par Kennedy et Buscombe en 1974 dans leur catalogue de classification, était le type B8 III. Des observations postérieures (Straizys et al. 1982) tendent à montrer que cette étoile est plutôt de type B6-7 IV ce qui, suivant la classification de Henry Draper (HD), correspond à une étoile sous-géante (IV) de température effective comprise entre 14500 et 15400 K, et dont les raies du mercure et du manganèse sont puissantes, alors que celles de l'hélium sont faibles ; pour ce type d'étoile, $(B-V)_0 = -0.13$. Les paramètres

photométriques de HD 29647 sont $V = 8.40 \pm 0.20$, $B-V = 0.90$ ($\Rightarrow E(B-V) = 1.03$) et $M_V = -1.5$ (magnitude visible absolue, c'est à dire la magnitude à une distance de 10 parsecs, connue grâce au type spectral de l'étoile).

On rappelle que chaque magnitude est définie par $m_{\lambda_0} = -2.5 \log_{10}(e_{\lambda_0}/e_0(\lambda_0))$, où les éclaircissements de référence $e_0(\lambda_0)$ sont choisis, par convention, pour que les différentes magnitudes spectrales (U,B,V,...) des naines blanches de type A0, soient indépendantes de la longueur d'onde λ_0 choisie (ainsi tous les indices de couleur des ces naines blanches sont nuls). Si par exemple $B-V > 0$, cela veut dire que l'éclaircissement dans le bleu est, relativement à l'éclaircissement dans le visible, moins fort que pour le spectre de référence. On parlera alors d'un rougissement du spectre correspondant.

On rappelle également que l'on nomme excès de couleur ($E(\lambda_1-\lambda_2)$ par exemple), la différence $\Delta m(\lambda_1) - \Delta m(\lambda_2)$, où $\Delta m(\lambda)$ est la différence de magnitude à la longueur d'onde λ , entre deux étoiles de même type spectral, l'une rougie, l'autre non. Ainsi, l'excès de couleur $E(\lambda_1-\lambda_2) = (m(\lambda_1) - m(\lambda_2)) - (m(\lambda_1) - m(\lambda_2))_0$, où l'indice 0 se réfère à l'étoile non rougie. Pour les naines de type A0, $(m(\lambda_1) - m(\lambda_2))_0 = 0$ quelles que soient λ_1 et λ_2 .

II.3 Distance

L'extinction visuelle dans la direction de HD 29647 étant $A_V \approx 3.7$ mag (voir plus bas), on peut en déduire le module de distance qui est la différence entre la magnitude apparente sans extinction et la magnitude absolue. Ici, $V_0 - M_V = (V - A_V) - M_V \approx 6.2$. On peut alors estimer la distance d qui nous sépare de l'étoile par $V_0 - M_V = 5 \log_{10} d - 5$, qui donne $d \approx 170$ parsecs. Elias (1978) a déterminé par ailleurs, une distance de $140 \text{ pc} \pm 10$ pour le complexe du Taureau, ce qui signifie que l'étoile est probablement située entièrement derrière le nuage et non enfouie à l'intérieur bien que les incertitudes qui pèsent sur la détermination des distances n'excluent pas tout à fait

cette possibilité. Il y a malgré tout des arguments contre le fait que HD 29647 pourrait être enfouie dans HCL2 :

- les plaques rouge et bleue du Palomar Sky Survey ne montrent aucun signe de la présence d'une nébuleuse par réflexion associée à HD 29647. Or, à l'ouest, au nord et au sud, l'extinction visuelle est nettement plus forte que sur la ligne de visée de HD 29647 (voir figure V.1), et cette inhomogénéité sur une échelle de 5-10' devrait conduire à une nébuleuse par réflexion si une partie du nuage se trouvait à côté ou derrière l'étoile.
- si une partie du nuage était située derrière l'étoile, on devrait obtenir des paramètres d'absorption plus faibles à partir de l'absorption du rayonnement stellaire que par échantillonnage du nuage entier autour de la position de l'étoile. Or l'extinction visuelle déduite de la photométrie de HD 29647 (Straizys *et al.* 1982) est en très bon accord avec celle obtenue par comptage d'étoiles (Cernicharo et Bachiller 1984).
- les colonnes de densités de CN déduites d'observations à la fois en absorption optique et en émission radio (Crutcher 1985) sont également en bon accord.

Ainsi, HD 29647 est certainement située derrière HCL2, et la séparation entre le nuage et l'étoile est d'environ 30 parsecs. A cette distance, les effets du rayonnement stellaire sur le nuage moléculaire pourront être négligés par rapport au champ interstellaire ambiant.

V. III LE NUAGE MOLECULAIRE

III.1 Propriétés des poussières

La courbe d'extinction $E(\lambda-V)/E(B-V)$ rapportée par Snow et Seab (1980) à partir des données du satellite *IUE* ("International Ultraviolet Explorer"), et qui reflète les propriétés UV des poussières sur la ligne de visée de HD 29647, présente des aspects particuliers. Le plus remarquable est l'absence de la bosse à 2200 \AA (figure V.2) : HD 29647 est le seul cas recensé d'une telle faiblesse de la courbe d'extinction à 2200 \AA lorsque l'extinction n'est pas due à de la poussière circumstellaire. Cette faiblesse à 2200 \AA a été attribuée à l'accrétion de manteaux de glace sur les grains de poussières, ce qui modifie leurs propriétés optiques et UV. Goebel (1982) a d'ailleurs réussi à détecter la signature de la glace à 3 \mu m , mais à un niveau beaucoup plus faible que ne le prévoient théoriquement Whittet *et al.* (1981).

Une autre anomalie de la courbe d'extinction, est qu'à courtes longueurs d'onde ($\approx 1500 \text{ \AA}$), l'extinction est environ 1 magnitude supérieure à celle du milieu interstellaire moyen, ce qui pourrait être dû à un nombre inhabituellement important de petits grains.

La photométrie infrarouge JHK de Whittet *et al.* (1981), la photométrie UBVR_IJHKL de Straizys *et al.* (1982) et la polarimétrie de Hsu (1983) ont révélé que le rapport $R_V \equiv A_V/E(B-V)$ vaut ≈ 3.6 en direction de HD 29647, ce qui est supérieur à la valeur canonique de 3.1 du milieu interstellaire : le rapport poussière/gaz semble être légèrement augmenté dans cette région. Ce n'est pas un résultat exceptionnel puisque des valeurs de R_V supérieures à 4 ont déjà été mesurées dans des nuages sombres ($R_V \approx 4.3$ dans ρ Oph).

De $R_V = 3.6$ et $E(B-V) = 1.03$, on déduit que l'extinction visuelle du nuage moléculaire sur la ligne de visée de HD 29647 est $A_V \approx 3.7$ magnitude.

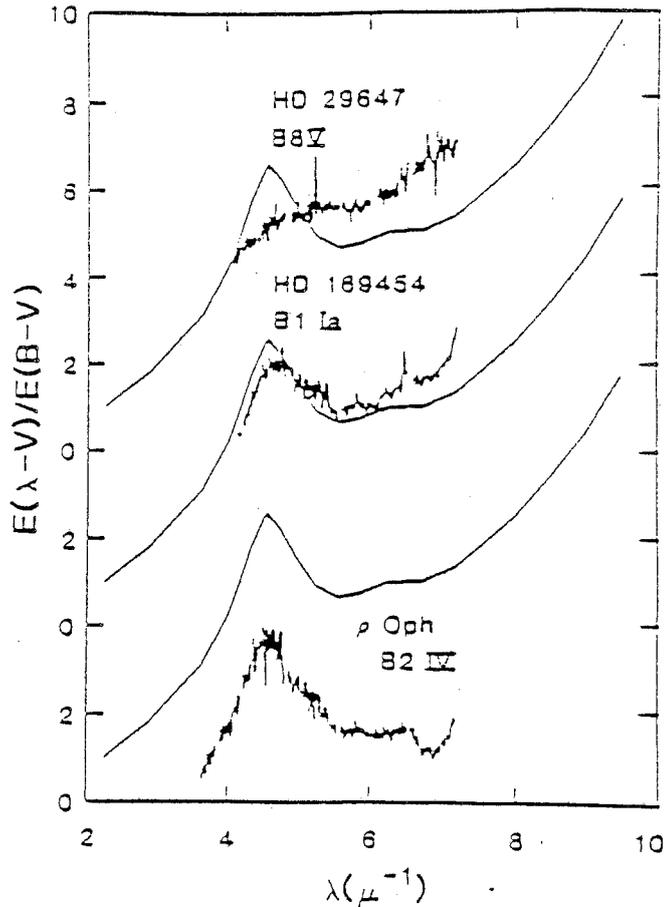


Figure V.2 Courbes d'extinction en fonction de la longueur d'onde pour 3 étoiles rouges (Snow et Seab 1980), comparées à la courbe d'extinction moyenne de Savage et Mathis (1979).

III.2 Le contenu moléculaire

Dans son article, Crutcher (1985) fait état de fortes colonnes de densités dans la direction de HD 29647, pour diverses molécules comme CO, ^{13}CO , C^{18}O , CN, CH, C_2 , HCO^+ et HCN. Par contre CH^+ , NH_2 , C_3 et CO^+ en optique, et HC_3N et C_2H en radio n'ont pu être détectées. D'autres observations moléculaires dans l'entourage proche de HD 29647 ont été publiées, mais aucune n'a intégré exactement sur la ligne de visée de l'étoile. Par exemple, Cernicharo *et al.* (1984) ont observé HCL2-C en NH_3 , mais HD 29647 se trouve juste en bordure de la région cartographiée, Crutcher (1979) et Baud et Wouterloot (1980) ont fait un survol du Taureau en OH, mais là encore la ligne de visée sur HD 29647 n'est pas

observée, Castets *et al.* (1987) ont étudié HCL2 en CS(2-1) et CS(3-2), la source HD 29647 étant là entourée par des points d'observations (voir figure V.1).

La non détection de HC₃N est plutôt surprenante quand on sait que TMC1 très proche est, pour l'heure, la source la plus intense du ciel en cyanopolyynes, et que HC₃N a été détectée facilement au centre de HCL2-C. Ces variations manifestes d'abondance sur des échelles de quelques dizaines de parsecs sont un fait observationnel souvent mentionné (Tölle *et al.* 1981, Cernicharo *et al.* 1984). L'analyse de Crutcher (1985) est que le nuage moléculaire en direction de HD 29647 est un nuage intermédiaire, pour lequel aucun calcul de chimie ion-molécule n'a encore été effectué ; il demande "des calculs avec un traitement sophistiqué de l'extinction", capables de reproduire les abondances observées, de sorte que l'on puisse répondre aux questions de la composition élémentaire du gaz et faire des prévisions d'observabilité d'espèces non observées. Il faut en effet souligner que la brillance importante de l'étoile HD 29647, ainsi que l'extinction exceptionnellement faible de sa lumière UV autour de 2200 Å, font de cette ligne de visée l'une des plus favorables, si ce n'est la plus favorable, à la détection de raies moléculaires d'absorption ultraviolettes. C'est ainsi que Smith *et al.* (1984) proposent que le spectrographe à haute résolution embarqué sur le télescope spatial, soit utilisé à la détection des raies d'absorption de O₂ entre 1760 et 1790 Å.

Jusqu'à présent, les seules études détaillées de nuages particuliers ont concerné soit des nuages diffus (Black et Dalgarno 1977, Viala *et al.* 1987 pour ζ Oph, Black *et al.* 1978 pour ζ Per), soit des nuages sombres (Boland et de Jong 1984, Millar et Freeman 1984a,b pour L134, L183(L134N) et TMC1). Mais aucune ne traite le cas intermédiaire d'un nuage modérément dense : c'est ce qui est fait dans la publication qui suit, où à partir des diverses données observationnelles concernant HD 29647 et sa région, il a été possible de décrire la structure chimique d'un tel nuage moléculaire.

Références

- Baud, B., Wouterloot, J.G.A. : 1980, *Astron. Astrophys.* 90, 297
- Black, J.H., Dalgarno, A. : 1977, *Astrophys. J. Supp Series* 34, 405
- Black, J.H., Hartquist, T.W., Dalgarno, A. : 1978, *Astrophys. J.* 224, 448
- Boland, W., de Jong, T. : 1984, *Astron. Astrophys.* 134, 87
- Castets, A., Cernicharo, J., Mundy, L. : 1987 en préparation
- Cernicharo, J., Guélin, M., Askne, J. : 1984, *Astron. Astrophys.* 138, 371
- Cernicharo, J., Bachiller, R. : 1984, *Astron. Astrophys. Supp. Series* 58, 327
- Cohen, J.G. : 1972 cité par Snow et Seab (1980)
- Crutcher, R.M. : 1979, *Astrophys. J.* 234, 881
- Crutcher, R.M. : 1985, *Astrophys. J.* 288, 604
- Elias, J.H. : 1978, *Astrophys. J.* 224, 587
- Goebel, J.H. : 1982, *Astrophys. J.* 268, L41
- Hsu, J.C. : 1983, cité par Crutcher (1985)
- Kennedy, P.M., Buscombe, W. : 1974, *MK Spectral classifications*
(Evanston : Northwestern University)
- Millar, T.J., Freeman, A. : 1984a, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 207, 405
- Millar, T.J., Freeman, A. : 1984b, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 207, 425
- Smith, P.L., Griesinger, H.E., Black, J.H., Yoshino, K., Freeman, D.E. : 1984,
Astrophys. J. 277, 569
- Snow, T.P., Seab, C.G. : 1980, *Astrophys. J.* 242, L83
- Straizys, V., Glagolewski, Y.V., Romanyvk, I.I., Bychkov, V.D. : 1982,
Sov. Astr. Letters 8, 96 cités par Crutcher (1985)
- Töle, F., Ungerrechts, H., Walmsley, C.M., Winnewisser, G., Churchwell, E. : 1981,
Astron. Astrophys. 95, 143
- Viala, Y.P., Rouef, E., Abgrall, H. : 1987, Soumis à *Astron. Astrophys.*
- Whittet, D.C.B., Bode, M.F., Evans, A., Butchart, I. : 1981, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 196, 81
(cités par Crutcher 1985)

Steady state chemical model of the molecular cloud

towards the star HD 29647

Authors : E.NERCESSIAN⁽¹⁾, J.J.BENAYOUN⁽¹⁾, Y.P.VIALA⁽²⁾

⁽¹⁾ Groupe d'Astrophysique - Observatoire de Grenoble
CERMO BP 68 38402 Saint Martin d'Hères Cedex

⁽²⁾ Observatoire de Paris Meudon - DEMIRM
92195 Meudon Principal Cedex

Running Title : Chemical model of the molecular cloud HD 29647

Send proofs and offprint request to : E.NERCESSIAN

Thesaurus code : 03.03.1

09.11.1

09.19.1

Main Journal

Interstellar Matter

ABSTRACT

A steady state model for the chemical composition of the molecular cloud in front of the star HD 29647 in Taurus is presented. The chemical reactions scheme involves 2472 reactions among 168 species formed from H, C, N, O, S, the isotopic substitutions D, ^{13}C and ^{18}O , and the heavy elements Mg, Fe and Si. The chemical balance equations are solved together with a transfer equation in a self consistent way.

The best fit to the available observations is obtained for the physical conditions of HD 29647 ($A_V = 3.7$ mag, $n_H = 800 \text{ cm}^{-3}$, $T = 10\text{K}$) with carbon, nitrogen and oxygen slightly depleted (depletion factors of 4, 2 and 2 respectively), together with rather strong depletion of sulfur (10^2) and metals (10^3). An enhanced cosmic ray ionization rate $\zeta_{\text{RC}} = 5 \cdot 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ must also be involved for a better agreement between the model calculations and the observations. The mean electron abundance is found to be $3 \cdot 10^{-5}$, larger than the value derived from the molecular observations applied to the HCO^+ chemistry. Predicted column densities of some molecules that could be observable are also presented. The chemical structure of a moderately dense cloud such as HD 29647, intermediate between diffuse and dense conditions, is described through the particularly interesting transition from C and C^+ to CO.

Key Words : - chemical reactions
- interstellar clouds
- interstellar molecules

1. INTRODUCTION

The Taurus molecular cloud towards HD 29647 has been studied at both optical and radio frequencies by Crutcher (1985). This star, HD 29647, is reported there as the brightest known heavily reddened late-B star located within the area of Heiles Cloud 2 (HCL2) (see Cernicharo and Guélin 1987 for a physical and chemical study of this cloud) and probably entirely behind the dark cloud. Large column densities and abundances are derived in Crutcher's work, notably for CO, ^{13}CO , C^{18}O , CN, CH, C_2 , HCO^+ and HCN. The C_2 molecule has also been observed through absorption lines of the (2-0) Phillips band by Lutz and Crutcher (1983) and Hobbs *et al* (1983). On the other hand, optical lines of CH^+ , NH_2 , C_3 and CO^+ and radio lines of HC_3N and C_2H were not detected. The failure to detect HC_3N is somewhat surprising due to the proximity of the Taurus Molecular Cloud 1 (TMC-1), one of the strongest cyanopolyne emitters in the sky. Nevertheless, chemical abundance variations over scales of few tenths of parsec have already been reported elsewhere (Tölle *et al* 1981, Cernicharo *et al* 1984).

From the molecular data and Large Velocity Gradients (LVG) calculations, Crutcher made some estimates of the H_2 density and kinetic temperature and proposed $n \approx 800 \text{ cm}^{-3}$ and $T_K \approx 10 \text{ K}$ as the best fits to his data. A fractional electron abundance of 10^{-6} is inferred from both ionization equilibrium of potassium and ion-molecule chemistry of HCO^+ ; this degree of ionization is considerably smaller than typical values for diffuse clouds (10^{-4}), but at least an order of magnitude higher than in the core regions of dense molecular clouds. From several photometric studies, the ratio of total to selective extinction $R \equiv A_V/E(B-V) = 3.6$ is derived, somewhat larger than the standard interstellar value of 3.1. The color excess $E(B-V) = 1.03$ leads to a visual extinction $A_V = 3.7 \text{ mag}$, in good agreement with the determination from star counts (Cernicharo and Bachiller 1984). All these features show that the cloud in front of HD 29647 is intermediate between diffuse clouds where chemistry is dominated by photodestruction processes and where only a few molecules are present, and dense dark molecular clouds where many complex molecules have been detected indicating a fairly active chemistry.

Up to now detailed chemical models have been performed either for diffuse clouds such as the clouds in front ζ Ophiuchi and ζ Perseï (Black and Dalgarno 1977 ; Black *et al.* 1978 ; Van Dishoeck and Black 1986 ; Viala *et al.* 1987) or for dense dark clouds such as L134, L183 and TMCl (Graedel *et al.* 1982 ; Boland and de Jong 1984 ; Herbst *et al.* 1984 ; Millar and Freeman 1984 ; Herbst and Leung 1986), but not for the intermediate physical conditions prevailing in a moderately dense cloud such as the one in front of HD 29647. Crutcher asked for such "calculations with a sophisticated treatment of extinction" able to reproduce the observed chemical abundances, in order to answer the questions about elemental depletion and to make some predictions on the observability of non-observed molecules.

The purpose of this paper is to present detailed calculations of the chemical composition of the HD 29647 cloud. In section 2, we briefly describe the model whose parameters are given in section 3. The results are presented in section 4 where we compare our computed column densities with the observations. We emphasize the influence of elemental depletion on the chemical structure and the molecular content of the cloud. Our conclusions are summarized in section 5.

2. DESCRIPTION OF THE MODEL

Basically, we have extended the model described in Viala (1986) by considering a noticeably larger chemical reactions scheme involving new molecules and by including the rotational excitation of H_2 and HD as described in Viala *et al.* (1987, hereafter VRA).

The chemical reaction scheme is essentially that adopted in Viala (1986) with some updated reaction rate constants. The set of reactions has been extended to include the chemistry of sulfur-bearing molecules (Duley *et al.* 1980, Prasad et Huntress 1982) and the chemistry of more complex molecules, mainly hydrocarbons including up to four C-atoms, and the cyanopolyynes HC_3N and HC_5N (Leung *et al.* 1984, Herbst and Leung 1986, Anicich and Huntress 1986). The chemistry of some

deuterated species : D , D^+ , HD ($J = 0$ to 9), HD^+ and H_2D^+ has also been considered by including the restricted set of reactions taken from VRA. Finally, the ^{13}C and ^{18}O isotopic chemistry has also been included by replicating the reactions involving carbon and oxygen as done by Langer *et al.* (1984). In summary, the chemical model involves 2472 reactions (841 for ^{13}C and ^{18}O chemistry) among 168 species (including 39 ^{13}C and ^{18}O isotopic substitutions). A list of the chemical species is given in Table 1 and the complete list of the chemical reactions is available on request to the authors.

Assuming steady state equilibrium, the chemical balance equations are solved simultaneously with a transfer equation to allow for the absorption of UV radiation by the dust and the gas. The transfer equation is solved in plane-parallel geometry, assuming a strictly forward scattering phase function for the grains, and using an "effective" albedo, as described in Viala (1986).

The photodestruction rates of chemical species are hence computed as a function of depth within the cloud. For H_2 and HD , the photoabsorption and the photodissociation rates are computed separately for each individual line of the Lyman and Werner band starting from the first ten lowest rotational levels (VRA). For the line profile, we assume a Voigt profile including microturbulent broadening ; we adopt a Doppler parameter $b_D = 1.4$ km/s derived by Crutcher (1985) from the linewidths of $C^{18}O$ millimeter transitions and from a curve of growth analysis of optical absorption lines of CN.

High resolution absorption spectra in the far UV, have shown that the photodissociation of CO does not occur through continuum absorption, but rather through absorption towards discrete predissociated Rydberg states (Letzelter *et al.* 1987a). Thirty eight bands leading to dissociation have been identified in the range $912-1100 \text{ \AA}$. We have computed the photodissociation rates in each individual band by using the absorption oscillator strengths and the dissociation probability taken from Letzelter *et al.* (1987b). The unshielded photodissociation rate of CO is enhanced by a factor 20 with respect to the value derived in the model

calculations of Viala (1986) and VRA, but the decrease of the rate with the optical depth is much steeper, due to enhanced self-shielding. In the lack of any better information, the photodissociation rates of ^{13}CO , C^{18}O and $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ have been computed by adopting the same oscillator strengths and dissociation probabilities, and by assuming that the corresponding bands lie at the same wavelengths as those of ^{12}CO : indeed, most of the excited vibrational upper levels are still unidentified and hence the isotopic shifts cannot be calculated.

3. MODEL PARAMETERS

As far as possible, the bulk parameters of the HD 29647 cloud have been constrained by the observations.

From $A_V = 3.7$ mag (see above), we adopt an optical depth to the cloud center $\tau_V^{\text{tot}} = 1.7$. As a first approach, all our model calculations have been performed by assuming a constant density and temperature throughout the cloud; we adopt the values $n = 800 \text{ cm}^{-3}$ and $T = 10 \text{ K}$ inferred by Crutcher (1985) from LVG models applied to observations of the CO isotopes. As it will be shown throughout this paper, it seems us premature to take into account any internal structure for the cloud as long the observational constraints are not stronger.

The absorption and scattering properties of dust grains are needed to solve the transfer problem. The dust albedo ω_λ is taken from the mixture (graphites plus silicates) model of grains of Mathis *et al.* (1983). In this model, ω_λ lies between 0.4 and 0.7 in the range of wavelengths 910–5500 Å. The dust extinction coefficient is computed from the interstellar extinction curve $E(\lambda-V)/E(B-V)$. As shown by Snow and Seab (1980) from IUE data, the cloud in front of HD 29647 shows an anomalous extinction curve: there is a lack of the 2200 Å absorption feature and an enhancement of the extinction of about 1 magnitude in the far UV ($\lambda \leq 2000 \text{ Å}$). Furthermore, photometry and polarimetry data (Crutcher 1985) indicate a ratio of total to selective extinction $R = A_V/E(B-V) = 3.6$ slightly larger than the mean interstellar value of 3.1. Allowing for this larger value of R , the extinction curve of Snow

and Seab (1980) has been calibrated on the extinction curve of Mathis *et al.* (1983) taken as reference so that the extinction coefficients were the same beyond $\lambda > 3300 \text{ \AA}$. The resulting extinction curve derived for the cloud HD 29647 is shown in Figure 1.

From $A_V = 3.6 E(B-V)$ and using the relation of Bohlin *et al.* (1978) : $N_H = 5.8 \times 10^{21} E(B-V)$, the total hydrogen column density towards HD 29647 is $N_H = N(H) + 2N(H_2) = 6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$.

The mean interstellar UV radiation field is an important parameter in modelling interstellar cloud chemistry. It depends on the distribution of O-B stars in the galaxy as well as the dust distribution and diffusion properties which are far from understood. Here we follow Mathis *et al.* (1983) and adopt their value for the interstellar radiation field between 910 and 5500 \AA in the solar vicinity, i.e. at a galactocentric distance of 10 kpc.

The molecular content of interstellar clouds also strongly depends on the element abundances in the gas phase and on the cosmic ray ionization rate. Our choice for these parameters is discussed in the next section.

4. RESULTS AND DISCUSSION

In the present work, our main purpose is to follow the suggestions of Crutcher (1985) and to make a detailed study of the chemical structure of the HD 29647 cloud. The fractional abundances of chemical species are computed as a function of depth within the cloud and integrations throughout the whole cloud provide column densities which are compared to the observations. In order to achieve the best fit to the observational data, which are essentially taken from Crutcher's work, several model calculations have been performed by varying the elemental abundances and the cosmic ray ionization rate.

Physical conditions in the HD 29647 cloud are intermediate between those prevailing in diffuse and dense dark clouds. The depletion of

elements is believed to increase with increasing density and opacity but is unfortunately unknown in the HD 29647 cloud. It has been often recalled that the molecular abundances in an interstellar cloud are strongly dependent on the elemental composition of the gas, and molecules like CO, HCO^+ or N_2H^+ are the usual guides to probe this composition. Indeed, CO is a good tracer of the carbon content and somewhat of oxygen too, since O and O_2 have never been observed in dark clouds. The HCO^+ chemistry is often used as a check on the ionization structure of clouds (Wooten *et al.* 1979), and hence on the metal abundance in the gas phase, metals being the main source of free electrons in the cloud interior. In fact, in our steady-state model calculations, metal depletion simulates the neutralization for metal ions at the surface of negatively charged grains (see d'Hendecourt *et al.* 1985 for time dependent calculations) and the destruction of metallic ions by negative polycyclic aromatic molecules (Omont 1986). The sulfur content is also important for the ionization structure and, in the lack of any direct detection of a sulfur-bearing species in front of HD 29647, its depletion may only be appreciate through its influence on HCO^+ .

Since the nitrogen is mainly contained in N and N_2 which are both not observed, N_2H^+ can be used as a tracer of nitrogen content of dark clouds. Unfortunately, N_2H^+ has not been observed towards HD 29647 and the nitrogen elemental abundance must be checked through other observed species like CN and HCN.

We define a depletion factor as $\delta(X) \equiv X_t^\ominus / X_t$, where X_t^\ominus is the solar abundance of element X taken as our standard set of abundances : H:He:C:N:O:S:Mg:Si:Fe = 1:0.1:3.7(-4):1.1(-4):6.8(-4):1.6(-5):3.5(-5):3.5(-5):2.5(-5). In all cases, the isotopic elemental ratios $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ and $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ are assumed equal to their terrestrial values of about 90 and 500 ; for the D/H ratio, we adopt the standard value 1.4×10^{-5} (VRA).

Another important parameter which can be inferred from interstellar chemistry is the cosmic ray ionization rate. The formation of molecules such as OH, H_2O , NH_3 , HCN, HCO^+ ,... is initiated by the cosmic ray ionization of molecular hydrogen. We have adopted two values of the rate $\zeta_{\text{RC}} = 10^{-17}$ and $5 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$.

4.1 Comparison with the observations

Table 2 displays our results for five model calculations which differ in depletion factors and cosmic ray ionization rate. The computed ratios $N(X)/N_H$ are given for 36 species whose column density relative to the total hydrogen column density is larger than 10^{-10} . They are compared to the observed values derived by Crutcher (1985) which are listed in the last column of Table 2.

As expected, no agreement with the observations is found if the solar element abundances are used.

The CO chemistry is well established and it is relatively easy to adjust C and O elemental abundances to get the observed value $N(\text{CO})/N_H \approx 6.9 \cdot 10^{-5}$. Depletion factors of 4 and 2 for carbon and oxygen respectively are needed to reproduce the CO abundance (see models 2 to 4). The rarer isotopes ^{13}CO and C^{18}O are assumed to have the same chemistry as CO, but fractionation could alter the isotopic ratio (Langer *et al.* 1984). In fact, fractionation does occur but is confined to the very external layers of the cloud where carbon is mainly ionized. The $n(^{13}\text{CO})/n(\text{C}^{18}\text{O})$ ratio peaks at a value of 82 for $\tau_v = 0.3$, and the terrestrial value of 5.5 is recovered at $\tau_v = 0.5$. The contribution of these layers to the total column density, is only 10% and 6% for ^{13}CO and C^{18}O respectively. Hence, the column density ratio $N(^{13}\text{CO})/N(\text{C}^{18}\text{O})$ doesn't account for fractionation ^{13}CO enhancement, as it is observed in HD 29647.

The relative abundance of HCO^+ in HD 29647 is found to be large, around $4 \cdot 10^{-9}$. HCO^+ is classically used to infer the electron abundance, so it is an important constraint on theoretical models. Due to its efficient electronic recombination rate, HCO^+ is strongly dependent on electron abundance. Strong depletions of metals and sulfur lead to an increase of HCO^+ by several orders of magnitude (see model 2). Through H_3^+ enhancement, a larger cosmic ray flux brings HCO^+ closer to its observed value (see model 3). Note, however, that a lower limit for the sulfur depletion factor compatible with the observed amount of HCO^+ , is

found to be about 10^2 . This factor would be decreased if the electronic recombination rate of H_3^+ is slower than assumed in this work ($\alpha_{H_3^+} \approx 2 \cdot 10^{-7} T^{-1/2}$).

The column density ratio $N(\text{HCN})/N_{\text{H}} \approx 4 \cdot 10^{-9}$ in HD 29647 is comparable to that derived by Churchwell *et al.* (1984) in much darker clouds. In the conditions prevailing within HD 29647, HCN is controlled by the ammonia abundance. An enhanced cosmic ray ionization rate and a large metal depletion, necessary to reproduce the observed amount of HCO^+ , lead to high values of NH_3 , and hence of HCN, which is brought into agreement with the observations (see model 3). Note, however, that the predicted abundance of CN is about 5 times larger than observed.

The observed abundance of CN in HD 29647 is about $2 \cdot 10^{-9}$ i.e. typically an order of magnitude higher than in diffuse clouds. This value is comparable with some observations in dark clouds like L134, L183 and TMCl where CN varies from $2.6 \cdot 10^{-9}$ to $2.1 \cdot 10^{-9}$ (Crutcher *et al.* 1984). A depletion of nitrogen by a factor 2 (see model 4), compatible with what is observed in diffuse clouds such as ζ Oph (Lugger *et al.* 1978), reduces the discrepancy for CN but, of course, underestimates HCN by a factor of 2.

The observed column density ratios $N(\text{CH})/N_{\text{H}} = 2.4 \cdot 10^{-9}$ and $N(\text{C}_2)/N_{\text{H}} = 2.0 \cdot 10^{-9}$ are comparable to values found in diffuse clouds. C_2 has been detected in its first three rotational levels $J = 0, 2$ and 4 (Lutz and Crutcher 1983, Hobbs *et al.* 1983), leading to some confidence in the derived total column density. Our model calculations predict too much CH and C_2 by a factor of about 3 (see models 3 and 4). Reduction by the same factor of the $\text{C}^+ + \text{H}_2$ radiative association rate estimated by Herbst (1982) and used here, would give better agreement with the observations (see model 6). A similar conclusion has been reached by VRA to fit the observed amount of CH in the diffuse cloud ζ Ophiuchi.

4.2 Unobserved species

We discuss here the molecular species which have not been detected by Crutcher (1985) as well as some molecules which have been observed in the vicinity, a few arcminutes off the line of sight of HD 29647. We also make some pronostic upon the observability of some particular species.

The failure to detect HC_3N , particularly the lower excitation transition $J = 2-1$ is somewhat surprising due to the proximity (≈ 5 arcminutes) of the strong cyanopolyne emission source HCl2-C , one cloudlet northern TMCl (Cernicharo *et al.* 1984). However, very dense and opaque conditions seem to be important to detect the HC_3N emission. In agreement, due to weaker conditions of density and opacity, all our model calculations give a very low HC_3N abundance around 10^{-12} , indicating that even the $J = 1-0$ transition will be unobservable.

Likewise, the non detection of the C_2H transition $J = 1-0$ is also surprising due to the proximity of the C_2H emission source TMCl (Wooten *et al.* 1980) located 10-15' away. Our model predictions tend to overestimate the abundance of C_2H . From the upper limit of 0.1 K on the brightness temperature derived by Crutcher (1985), we can estimate an upper value of $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ for $N(\text{C}_2\text{H})$ assuming a full width at half maximum of the line of 1 kms^{-1} . We find $N(\text{C}_2\text{H})/N_{\text{H}} \approx 5 \cdot 10^{-9}$ in models 2 to 4, that is $N(\text{C}_2\text{H}) \approx 3.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Previous model calculations (Boland and de Jong 1984 ; Viala 1986) also overestimated the C_2H abundance in dark clouds, mainly because of the very efficient reaction $\text{C}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}$. This reaction has a large activation energy and has been cancelled from our chemical scheme. Despite this, C_2H is still predicted to be too abundant. As can be seen in figure 2 and predicted in previous models, C_2H is mainly concentrated in the outer parts of the cloud, as most other hydrocarbons. Its large abundance could be due merely to an underestimation of its photodissociation rate. Calculation of its photodissociation cross section would be worthwhile.

The molecule C_3 is predicted with a column density $N(\text{C}_3) \approx 3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. A lower limit of about 8 mÅ can be estimated for the

absorption band equivalent width in the electronic transition from the ground state $A \ ^1\pi_u^- - X \ ^1\Sigma_g^+$ at $4050 \overset{\circ}{\text{A}}$ by using an oscillator strength of $1.8 \cdot 10^{-2}$ (Clegg and Lambert 1982). Such a low feature could not be detected by Crutcher (1985) who furthermore mentioned strong stellar line interference. In our model calculations, C_3 is considered to form by dissociative recombination of C_3H^+ , with the latter formed from reactions of C^+ with C_2H_2 and C_2H . Destruction of C_3 is by photodissociation to form C_2 and C . We must keep in mind all the uncertainties in the large chemical reaction rates; in particular, both the photodissociation rate for C_3 (taken in Herbst and Leung 1986) and the rate and product of distribution for dissociative recombination of C_3H^+ (taken in Leung *et al.* 1984) have not yet been measured.

The NH_2 radical is predicted with a column density of about $4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. If we reasonably assume oscillator strengths of few 10^{-4} (Wong *et al.* 1987) for the lines at $5693 \overset{\circ}{\text{A}}$, our model calculations lead to a non detection of these NH_2 lines in agreement with the optical observations of Crutcher (1985).

NH_3 has been observed in Heiles Cloud 2 by Cernicharo *et al.* (1984), particularly in HCL2-C in the area of which lies HD 29647. The position of the star is outside the lowest contour of the NH_3 map of HCL2-C, which corresponds to a column density of 10^{14} cm^{-2} . Thus, an upper limit to $N(NH_3)$ towards HD 29647 could be a few 10^{13} cm^{-2} , i.e. $N(NH_3)/N_H < 10^{-8}$ or a few 10^{-9} , in qualitative agreement with our predicted value of $7 \cdot 10^{-9}$ in models 4 and 6.

The abundances of the metastable species HNC and of the stable species HCN have been calculated by taking into account the reactions which convert from one to the other i.e. "shuffling" reactions as defined by Churchwell *et al.* (1984). As soon as NH_3 is fairly abundant, both isomers are produced in our model via the electronic recombination of H_2CN^+ . In that case, since we have used the theoretical branching ratio of unity for this recombination (Herbst 1978), we calculate that HNC and HCN have similar abundances (see models 2, 3, 4 and 6). Although this

result should be applicable to TMCl (Leung *et al.* 1984), it is in error (i) for the sample of Taurus dark clouds of Churchwell *et al.* (1984) who find the HNC/HCN column density ratio to lie in the range ≈ 3 to ≈ 10 , (ii) for Orion where HNC/HCN $\approx 1/30$ (Leung *et al.* 1984) and (iii) for the four cores of warm giants molecular clouds of Goldsmith *et al.* (1981) who derive $0.015 \leq \text{HNC/HCN} \leq 0.40$. These latter authors advocate an additional source of HCN through the exothermic neutral reaction $\text{CH}_2 + \text{N} \rightarrow \text{HCN} + \text{H}$ faster than the equivalent neutral formation of HNC, $\text{NH}_2 + \text{C} \rightarrow \text{HNC} + \text{H}$. Our model calculations support this view since our models 1 and 5, in which the formation of HCN and HNC is dominated by the above neutral reactions instead of the ionic pathway, find the values for the HNC/HCN ratio to be 0.01 and 0.59 respectively. Nevertheless, since the best fit to the observations towards HD 29647 is given by models 4 and 6, the column densities of HCN and HNC are predicted to be very similar.

The 18 cm OH mainlines are potentially good tracers for the local molecular complexes, the usually large telescope beam of several tens of arcminutes allowing for relatively fast mapping of large areas of sky. However, it must be kept in mind that such large beams do not account for small-scale clumping in the spatial distribution of OH. Furthermore, while observations of the two mainlines can provide information on the optical depth, whether OH mainlines are thermalized is still a matter of controversy. Assuming local thermodynamic equilibrium (LTE), Baud and Wouterloot (1980) derived a constant value of $N(\text{OH}) \approx 1.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ over the total extent of their survey of Taurus, that is about $2.5 \cdot 10^{-7}$ for $N(\text{OH})/N_{\text{H}}$ towards HD 29647. Conversely, Crutcher (1979) obtained non-LTE values of the excitation temperatures and found a non constant and lower column density: $N(\text{OH}) \approx 8 \cdot 10^{13} A_{\text{V}} \text{ cm}^{-2}$ which means that $N(\text{OH})/N_{\text{H}}$ would be $\approx 4 \cdot 10^{-8}$ in front of HD 29647. In our models, the fit to HCO^+ and HCN required an enhanced cosmic ray flux and a large metal depletion which lead to $N(\text{OH})/N_{\text{H}} \approx 10^{-6}$ in models 4 and 6.

A direct detection of OH in the line of sight towards HD 29647 is very desirable. If a column density ratio around 10^{-7} or even lower is confirmed, our large predicted OH abundance will be the main failure of our chemical model, unless either no metal depletion occurs or the cosmic

ray ionization rate is standard, in which case the correct amount of OH would be predicted (see models 2 and 5). In that case, however, the model predicts too little HCO^+ and HCN by a factor about 4-5. The chemistry of HCO^+ seems well determined and the requirement of both large metal depletion and enhanced cosmic ray flux appears inevitable. A way to reconcile the computed and observed amount of OH would be to assume that its destruction rate has been underestimated. In our model, the main destruction process in the central parts of the cloud, where OH is concentrated, is the neutral reaction $\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$ whose behaviour at low temperature is unknown. It is interesting to note that, if we adopt for this reaction the large rate: $k_{1590} = 6.65 \times 10^{-10} \text{ T}^{-1/2}$ suggested by Howard and Smith (1981) instead of the low rate $k_{1590} = 2.2 \cdot 10^{-12} \text{ T}^{1/2}$ used in our calculations, the column density ratio $N(\text{OH})/N_{\text{H}}$ drops by one order of magnitude, apparently more compatible with the observations.

The reaction above is also the main route to molecular oxygen. This molecule is predicted to be an important oxygen-bearing constituent and the $N(\text{O}_2)/N_{\text{H}}$ ratio in front of HD 29647 is predicted to be $\approx 3 \cdot 10^{-7}$, if a low rate k_{1590} is adopted, and $\approx 10^{-6}$ with the large value for k_{1590} . O_2 has not yet been detected in interstellar clouds. Black and Smith (1984) show that ground-based detection of the 234 GHz line of $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ could be feasible in dark clouds and in giant molecular clouds if the column density of O_2 is of the order of 10^{18} cm^{-2} . Smith *et al.* (1984) proposed the HD 29647 line of sight as a good candidate to detect the UV absorption lines between 1760 \AA and 1790 \AA , in the (3,0) through (16,0) bands of $\text{B } ^3\Sigma_u^- - \text{X } ^3\Sigma_g^-$ Schumann-Runge system, with the High Resolution Spectrograph on Space Telescope. This detection in front of a star whose UV interstellar extinction is known to be abnormally low relative to the column density of the gas, requires, however, an O_2 column density of about 10^{17} cm^{-2} . This large amount of O_2 is far below our theoretical calculations, which at most predict $N(\text{O}_2) \approx 2-7 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, depending on the value of the rate coefficient k_{1590} . Thus, both radio and UV detection of O_2 towards HD 29647 are predicted by our model calculations to be rather difficult.

The $N(\text{H}_2\text{CO})/N_{\text{H}}$ ratio in model 4 is found to be $\approx 3 \cdot 10^{-11}$. It has been already shown (Viala 1986) that the formaldehyde abundance is strongly correlated to the rate coefficient of the radiative association $\text{CH}_3^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_5^+ + h\nu$. The model computations have been made using the rate coefficient of $1.8 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ given by Barlow *et al.* (1984). But, very recently, Bates (1987) has presented a reinterpretation of experimental data at low temperature, and finds $3.2 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ at 13K. This rather crude enhancement increases the H_2CO abundance by more than one order of magnitude up to $\approx 4 \cdot 10^{-10}$, i.e. $N(\text{H}_2\text{CO}) \approx 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Observations of H_2CO towards HD 29647 are not yet available; as an indication, Kahane *et al.* (1984) reported a column density $N(\text{H}_2\text{CO}) \approx 2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ in the envelope of TMCl.

From LVG calculations in two rotational transitions of CS ($J = 3-2$) and ($J = 2-1$), observed in the region around the HD 29647 line of sight, Castets *et al.* (1987) derive a CS column density of $\approx 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, which could lead to a CS abundance of $\approx 10^{-8}$ toward HD 29647. Such a high value for CS is achieved only with a moderate sulfur depletion $\delta(\text{S}) = 10$. In that case, however, the model predicts too few HCO^+ by a factor about 4; the depletion of sulfur would be better constrained if direct measurements of some sulfur-bearing species were undertaken on the line of sight of HD 29647.

4.3 The electron abundance

A basic parameter for understanding both the physical processes and the dynamics of interstellar clouds, is the local fractional electron abundance $x_e = n(e)/n_{\text{H}}$. Here we use a mean value $\bar{x}_e = N(e)/N_{\text{H}}$. In diffuse clouds ($n_{\text{H}} \approx 100 \text{ cm}^{-3}$) typical values of $\bar{x}_e = 10^{-4}$ are attained due to carbon which is primarily in atomic form, singly ionized and only slightly depleted with respect to its solar value. In dense molecular clouds where photoionization of heavy elements is negligible, \bar{x}_e drops to $\approx 10^{-7}$ (Guélin, Langer and Wilson 1982). For a moderately dense cloud, such as the cloud towards HD 29647, the fractional abundance \bar{x}_e is found to be about $3 \cdot 10^{-5}$ in all models with low metal abundances that fit the observed molecular data (see Table 2).

Nevertheless, the mean quantity \bar{X}_e masks some important variations of the local fractional electron abundance throughout the cloud. Indeed, in the external layers of the cloud, the free electrons are mainly produced by photoionization of the atomic carbon at the short wavelengths, and a degree of ionization x_e of about 10^{-4} is obtained up to $\tau_v \approx 0.5$. Beyond $\tau_v \approx 0.5$, the short wavelength photons become strongly absorbed, and ionization of both metals and sulfur is the main source of free electrons if no heavy element depletion occurs, in which case the level of ionization x_e could remain as high as a few 10^{-5} even in the cloud interior. If metals and sulfur are strongly depleted, photoionization of carbon and cosmic ray ionization of H and H_2 are the main source of free electrons in the central parts of the cloud and x_e drops down to a few 10^{-7} . We have seen that strong depletion of metals ($\approx 10^3$) and sulfur ($\approx 10^2$) are needed in order to reproduce the HCO^+ content, so that the electron abundance becomes finally limited by H^+ ions in the cloud interior and hence depends on the cosmic ray flux.

In order to derive the electron abundance from observations, Crutcher (1985) used two different methods. The first one is based on the assumption of ionization equilibrium for potassium; the second one, first introduced by Wooten, Snell and Glassgold (1979), is based on the chemistry of HCO^+ which is a key species in interstellar cloud chemistry. Applying both methods, and arguing that potassium must be depleted in HD 29647, Crutcher derived $\bar{X}_e \approx 10^{-6}$ which is smaller than our model calculations (with large metal depletion) by more than one order of magnitude as can be seen in table 2.

This difference must be understood in terms of the depth dependence of the different species involved in the HCO^+ chemistry. As an illustration, we have computed the electron abundance x_e at each point within the cloud, using Wooten *et al.* (1979)'s formulation together with our calculated local abundances for the species C^+ , OH, O, O_2 , HCO^+ and CO. By integrating over the whole cloud, we found $\bar{X}_e = 1.6 \cdot 10^{-5}$ instead of $3 \cdot 10^{-5}$ in the exact computation. On the other hand, the same calculation with relative column densities instead of the local abundances leads to $\bar{X}_e = 3 \cdot 10^{-6}$. This means that coupling different

layers of the cloud, comes down to neglecting the variations with the optical depth and to underestimating the electron abundance in the cloud.

4.4 The rotational population of H_2 and HD

The rotational population of H_2 and HD have been computed by taking into account 1) UV pumping towards the excited electronic states B and C, followed by radiative decay towards the ground electronic state and radiative cascades within this state, 2) chemical reactions and especially molecule formation on grain surfaces, and 3) collisional processes with H, H_2 ($J = 0$ and 1), He, H^+ and e^- . Detailed calculations are described in VRA. The column densities (relative to total hydrogen) of H_2 in its first six rotational levels and of HD in levels $J = 0$ and 1 computed in model 4, are given in table 3.

The HD 29647 molecular cloud is opaque and dense enough for H_2 to take most of the available hydrogen ; $N(H)/N(H_2)$ is only 6%. If the temperature of 10K suggested by Crutcher (1985) is adopted, most H_2 and HD are in their ground rotational levels $J = 0$, excited rotational levels are only trace compounds. Note however that the rotational population of H_2 and HD is very sensitive to the temperature, as can be seen in table 3 where we display the results obtained with a higher temperature of 25K. Note the increase of the $J = 1, 2$ and 3 levels of H_2 and the large enhancement by three orders of magnitude of HD $J = 1$. Were the cloud extinction not so large, detection of UV absorption lines from levels $J = 0$ and $J = 1$ in the Lyman and Werner band of H_2 and HD, and column density measurements would provide additional useful constraints to the cloud temperature.

4.5 Chemical structure

Figures 2 and 3 display the fractional abundances of the chemical species versus the optical depth or equivalently the total hydrogen column density, measured inwards from the surface of the cloud (left on the figures). Figure 2 is representative of model 4, i.e. moderate depletion of the elements C, N and O and depletion of sulfur and metals

by a factor 10^2 and 10^3 respectively. Figure 3 shows the results obtained in model 5 which has the same parameters of model 4 but no sulfur and metal depletion. These two figures show a similar behaviour of the abundances of all species except for C and C_2H . Furthermore, most carbon bearing molecules (except for CO, CN, CH_3 and CH_4) are concentrated in the outer parts of the cloud and most nitrogen and oxygen bearing molecules are concentrated in the cloud core. Note also that many species exhibit variation of abundances of several orders of magnitude from the edge to the centre of the cloud, these variations are only due to the attenuation of the UV radiation field since the density and the temperature have been kept constant throughout the whole cloud.

There is however a striking difference in the chemical structure of the two cloud models. We note on Fig.2 that the cloud seems divided in two distinct regions with a break at $\tau_v \approx 0.6$ which corresponds to the transition from C and C^+ to CO. This particular structure is caused by the lack of free electrons obtained when sulfur and metals are strongly depleted and disappears in model 5 where electrons remain abundant as can be seen on Fig.3 and has been discussed in section 4.3 above.

We have plotted on figure 4 the fractional abundances of C, C^+ , CO and e^- (dashed curve) for both models 4 (Fig.4a) and 5 (Fig.4b). The full curves on these two figures show what would have been the abundances of C and C^+ computed from a pure ionization equilibrium. This illustrates well how chemical reactions perturb the ionization equilibrium between C and C^+ . In model 5, due to the reservoir of free electrons, C^+ is primarily converted to C through electronic recombination; a substantial fraction of C^+ is however converted into CO through chemical reactions, the conversion being efficient due to the larger self-shielding to UV radiation as the new data on the photodissociation of CO are used. The reverse situation is obtained in model 4 where, due to the lack of free electrons, C^+ is primarily converted into CO at the expense of the production of C leading to a strong departure to the ionization equilibrium. As a consequence, the abundance of CO rises more abruptly than in model 5, CO rapidly takes most of the available carbon between $\tau_v = 0.5$ and 0.7 leading to a very sharp decrease of both C and C^+ . The

sharp decrease of C^+ explains the sharp increase of nitrogen and oxygen bearing molecules and the sharp decrease of the hydrocarbons reported in Fig.2.

The important consequence of sulfur and metal depletion on the relative column densities of C and CO is illustrated in Table 2. If there is no depletion, neutral atomic carbon is the main carbon bearing species and the ratio $N(C)/N(CO)$ is about 6 (model 5). If depletion occurs, CO takes most of the available gas phase carbon and the ratio $N(C)/N(CO)$ decreases down to 0.1 if a depletion factor of 10^3 is assumed (models 2, 3 and 4). Measurement of the column density of the neutral carbon towards HD 29647 would be worthwhile to probe the metal contents in the cloud.

5. CONCLUSION

A steady state chemical model involving 2472 reactions among 168 species has been used to study the molecular cloud in front of the star HD 29647 in Taurus.

The model calculations have been performed for a cloud whose physical conditions and parameters have been constrained by the observations : a visual extinction $A_v = 3.7$ mag, an hydrogen density $n_H = 800 \text{ cm}^{-3}$ and a kinetic temperature $T = 10\text{K}$. By varying the element depletions and the cosmic ray ionization rate, we have attempted to fit the molecular abundances derived from the observations towards HD 29647. Some pronostics upon the detectability of non observed species are made. The chemical structure of such a moderately dense molecular cloud is also presented with particular attention to the C^+ , C, CO transition.

The main features which can be drawn from this work can be summarized as follows :

- a good fit to the observations has been obtained if carbon, nitrogen, oxygen, sulfur and metals are depleted with respect to their solar abundances. Carbon and oxygen depletion by factors 4 and 2 respectively is found to be necessary to fit the abundance of CO.

A low electron abundance appears essential to reproduce the observed amount of the molecular ion HCO^+ ; it has been obtained by depleting sulfur and metals by factors of 10^2 and 10^3 respectively. A better agreement for both HCO^+ and HCN is achieved if the cosmic ray ionization rate is enhanced by a factor 5. Hence, a slight nitrogen depletion by a factor 2 permits us to reach the observed amount of the N-bearing molecules.

- The high sulfur and metal depletion leads to a cloud with a two layer chemical structure due to the very efficient conversion of C^+ and C into CO . The electrons play a crucial role in this transition as well as the efficient CO self-shielding from the UV photons. The column density of C and CO are very sensitive to sulfur and metal depletion. A large depletion leads to a large abundance of CO compared with that of C . The measurement of the column density of neutral carbon would be very worthwhile.
- the mean electron abundance \bar{X}_e in a moderately dense cloud, with rather strong depletion of sulfur and metals, is found at a value of $3 \cdot 10^{-5}$, intermediate between what is usual in diffuse and dense clouds. A disagreement has appeared between the calculated value of \bar{X}_e and the one derived from molecular observations together with the HCO^+ chemistry (Wooten *et al* 1979). The difference has been understood in term of the depth dependence of the different species involved in the HCO^+ chemistry. Hence, the mean quantity \bar{X}_e masks some important variations of the local fractional electron abundance throughout the cloud.
- the HD 29647 cloud is opaque and dense enough for H_2 to take most of the available hydrogen. Measurements of the rotational population of H_2 and HD would provide useful constraints to the cloud temperature; such measurements are, however, difficult due to the large UV extinction in the direction of the cloud.
- additional constraints on the cloud parameters can also be obtained from model calculations of the rotational population of C_2 whose the

first three levels ($J = 0, 2$ and 4) have been observed. Such calculations will be undertaken in the future by using the model of Lebourlot *et al.* (1987) on the rotational excitation of C_2 .

- the calculated abundances of the hydrocarbons give better agreement with the observations if a rate constant, reduced by a factor of 3 with respect to the values computed by Herbst (1982), is used for the radiative association of C^+ with H_2 . A similar conclusion has been drawn from a study of the diffuse cloud ζ Oph (VRA).
- the unknown photodissociation rate of C_2H could be the main reason for the disagreement between its non detection in front of HD 29647 and the model calculations which predict it to have a detectable column density. Calculations or measurements of the photodissociation cross section would be worthwhile.
- as a consequence of the enhanced cosmic ray ionization rate, the model calculations give a rather high value for the OH abundance. Unless the neutral destruction process of OH by collision with oxygen atoms is faster than previously assumed, our large predicted abundance of OH will be the main failure of our chemical model.
- the detection of O_2 towards HD 29647 through its UV absorption lines as proposed by Smith *et al.* (1984), is predicted by our model calculations to be rather difficult since the maximum value achieved for the molecular oxygen column density is only $7 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, far from the $\approx 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ required.

The conclusion is that reasonable agreement exists between our model calculations and the observations towards the star HD 29647. However, additional observations of this interesting line of sight would be very worthwhile, in particular sulfur-bearing molecules, N_2H^+ , OH, C, NH_3 , HNC and H_2CO . These further measurements would allow a better understanding of the structure and of the chemical processes within interstellar clouds of moderate density and opacity.

Acknowledgements

Computations have been performed on the VAX 780 of the IRAM Institute at Grenoble and at the Centre Interregional de Calcul Electronique (CIRCE) at Orsay. We are indebted to Nicole Bel, Evelyne Roueff and Paul Harvey for a critical reading of the manuscript.

References

- Anicich, V.G., Huntress, W.T. Jr : 1986, *Astrophys. J. Supp. Series* 62, 553
- Barlow, S.E., Dunn, G.H., Schauer, M. : 1984, *Phys. Rev. Letters* 52, 902
- Bates, D.R. : 1987, *Astrophys. J.* 312, 363
- Baud, B., Wouterloot, J.G.A. : 1980, *Astron. Astrophys.* 90, 297
- Black, J.H., Dalgarno, A. : 1977, *Astrophys. J. Supp. Series* 34, 405
- Black, J.H., Hartquist, T.W., Dalgarno, A. : 1978, *Astrophys. J.* 224, 448
- Black, J.H., Smith, P.L. : 1984, *Astrophys. J.* 277, 562
- Bohlin, R.C., Savage, B.D., Drake, J.F. : 1978, *Astrophys. J.* 224, 132
- Boland, W., de Jong, T. : 1984, *Astron. Astrophys.* 134, 87
- Castets, A., Cernicharo, J., Mundy, L. : 1987, private communication
- Cernicharo, J., Bachiller, R. : 1984, *Astron. Astrophys. Supp. Series* 58, 327
- Cernicharo, J., Guélin, M., Askne, J. : 1984, *Astron. Astrophys.* 138, 371
- Cernicharo, J., Guélin, M. : 1987, *Astron. Astrophys.* 176, 299
- Churchwell, E., Nash, A.G., Walmsley, C.M. : 1984, *Astrophys. J.* 287, 681
- Clegg, R.E.S., Lambert, D.L. : 1982, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 201, 723
- Crutcher, R.M. : 1979, *Astrophys. J.* 234, 881
- Crutcher, R.M., Churchwell, E., Ziurys, L.M. : 1984, *Astrophys. J.* 283, 668
- Crutcher, R.M. : 1985, *Astrophys. J.* 288, 604
- D'Hendecourt, L.B., Allamandola, L.J., Greenberg, J.M. : 1985, *Astron. Astrophys.* 152, 130
- Duley, W.W., Millar, T.J., Williams, D.A. : 1980, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 192, 945
- Goldsmith, P.F., Langer, W.D., Ellder, J., Irvine, W., Kollberg, E. : 1981, *Astrophys. J.* 249, 524
- Graedel, T.E., Langer, W.D., Frerking, M.A. : 1982, *Astrophys. J. Supp. Series* 48, 321
- Guélin, M., Langer, W.D., Wilson, R.W. : 1982, *Astron. Astrophys.* 107, 107
- Herbst, E. : 1978, *Astrophys. J.* 222, 508
- Herbst, E. : 1982, *Astrophys. J.* 252, 810

- Herbst, E., Adams, N.G., Smith, D. : 1984, *Astrophys.J.* 285, 618
- Herbst, E., Leung, C.M. : 1986, *Mon.Not.R.Astron.Soc.* 222, 689
- Herbst, E., Leung, C.M. : 1986, *Astrophys.J.* 310, 378
- Hobbs, L.M., Black, J.H., van Dishoeck, E.F. : 1983, *Astrophys.J.* 271, L95
- Howard, M.J., Smith, I.W.M. : 1981, *J.Chem.Soc.Faraday Trans.2.* 77, 997
- Kahane, C., Frerking, M.A., Langer, W.D., Encrenaz, P., Lucas, R. : 1984, *Astron.Astrophys.* 137, 211
- Langer, W.D., Graedel, T.E., Frerking, M.A., Armentrout, P.B. : 1984, *Astrophys.J.* 227, 581
- Leboulrot, J., Roueff, E., Viala, Y.P. : 1987, in press in *Astron.Astrophys.*
- Letzelter, C., Eidelsberg, M., Rostas, F., Breton, J., Thieblemont, B. : 1987a, in press in *Chem.Phys.*
- Letzelter, C., Viala, Y.P., Rostas, F., Eidelsberg, M. : 1987b, submitted to *Astron.Astrophys.*
- Leung, C.M., Herbst, E., Huebner, W.F. : 1984, *Astrophys.J.Supp.Series* 56, 231
- Lugger, P.M., York, D.G., Blanchard, J., Morton, D.C. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 1059
- Lutz, B.L., Crutcher, R.M. : 1983, *Astrophys.J.* 271, L101
- Mathis, J.S., Metzger, P.G., Panagia, N. : 1983, *Astron.Astrophys.* 128, 212
- Millar, T.J., Freeman, A. : 1984, *Mon.Not.R.Astron.Soc.* 207, 405
- Millar, T.J., Freeman, A. : 1984, *Mon.Not.R.Astron.Soc.* 207, 425
- Omont, A. : 1986, *Astron.Astrophys.* 164, 159
- Prasad, S.S., Huntress, W.T.Jr : 1982, *Astrophys.J.* 260, 590
- Smith, P.L., Griesinger, H.E., Black, J.H., Yoshino, K., Freeman, D.E. : 1984, *Astrophys.J.* 277, 569
- Snow, T.P., Seab, C.G. : 1980, *Astrophys.J.* 242, L83
- Tölle, F., Ungerrechts, H., Walmsley, C.M., Winnewisser, G., Churchwell, E. : 1981, *Astron.Astrophys.* 95, 143
- Van Dishoeck, E., Black, J.H. : 1986, *Astrophys.J.Supp.Series* 62, 116
- Viala, Y.P. : 1986, *Astron.Astrophys.Supp.Series* 64, 391
- Viala, Y.P., Roueff, E., Abgrall, H. : 1987, in press in *Astron.Astrophys.*
- Wong, K.N., Anderson, W.R., Vanderhoff, J.A., Kotlar, A. : 1987, *J.Chem.Phys.* 86, 93

Wooten, A.W., Snell, R., Glassgold, A.E. : 1979, *Astrophys. J.* 234, 876

Wooten, A.W., Boyzan, E.P., Garrett, D.B., Loren, R.B., Snell, R.L., : 1980,
Astrophys. J. 239, 844

Figure Captions

Figure 1 : The extinction curve $E(\lambda-V)/E(B-V)$ as a function of wavelength. The full curve refers to the mean interstellar medium and the dashed curve refers to the cloud in front of HD 29647.

Figure 2 : Abundances, relative to hydrogen, of chemical species in a moderately dense cloud with $A_V = 3.7$, $n_H = 800 \text{ cm}^{-3}$ and $T = 10\text{K}$. The computations have been performed with the abundances of model 4, and an enhanced cosmic ray flux. The lower abscissa represents the optical depth τ_V measured inwards from the surface of the cloud. The upper abscissa is the column density of hydrogen nuclei.

Figure 3 : Abundances, relative to hydrogen, of chemical species with the same physical conditions as in Figure 2, but using the elemental abundances of model 5.

Figure 4 : Abundances, relative to hydrogen, of C, C^+ , CO and electrons as a function of the optical depth τ_V from the surface of the cloud. Dashed curves are representative of model calculations, full curves are the result of a true ionization equilibrium for the carbon. Plots are for : a) model 4 b) model 5.

Table 2. Column densities relative to total hydrogen column density in a moderately dense cloud. The computations have been performed with depleted abundances and/or enhanced cosmic ray ionization rate. Model 6 differs from model 4 by using a low rate coefficient for the radiative association of C^+ with H_2 (see text). The observed values quoted with the italic font, have not been derived from the right line of sight to HD 29647 (see text). The others are from Crutcher (1985)'s observations towards HD 29647.

Model	1	2	3	4	5	6	Observations
$\delta(C)$	1	4	4	4	4	4	
$\delta(N)$	1	1	1	2	2	2	
$\delta(O)$	1	2	2	2	2	2	
$\delta(S)$	1	10^3	10^3	10^2	1	10^2	
$\delta(Mg, Si, Fe)$	1	10^3	10^3	10^3	1	10^3	
$\zeta_{RC}(10^{-17}s^{-1})$	1	1	5	5	5	5	
H	2.0(-02)	2.1(-02)	2.8(-02)	2.8(-02)	2.7(-02)	2.7(-02)	
H^+	4.8(-08)	3.2(-07)	9.7(-07)	9.5(-07)	5.0(-07)	1.0(-06)	
H_2^+	4.9(-01)	4.9(-01)	4.9(-01)	4.9(-01)	4.9(-01)	4.9(-01)	
H_3^+	1.1(-09)	9.2(-09)	4.6(-08)	4.9(-08)	6.0(-09)	4.9(-08)	
D	5.4(-06)	1.2(-05)	1.2(-05)	1.2(-05)	6.7(-06)	1.2(-05)	
HD	8.6(-06)	2.5(-06)	1.9(-06)	1.9(-06)	7.2(-06)	1.9(-06)	
H_2D^+	3.3(-12)	7.3(-11)	1.2(-10)	1.4(-10)	1.7(-11)	1.4(-10)	
C	1.7(-04)	6.7(-06)	6.3(-06)	6.1(-06)	5.9(-05)	6.7(-06)	
C^+	4.3(-05)	2.7(-05)	2.6(-05)	2.6(-05)	2.3(-05)	2.8(-05)	
CO	1.6(-04)	5.9(-05)	6.0(-05)	6.1(-05)	1.0(-05)	5.8(-05)	6.9(-05)
HCO^+	3.4(-12)	1.1(-09)	4.0(-09)	3.9(-09)	2.6(-12)	3.8(-09)	4.3(-09)
^{13}CO	2.4(-06)	8.7(-07)	8.5(-07)	8.6(-07)	3.8(-07)	8.2(-07)	1.2(-06)
$C^{18}O$	1.1(-07)	1.4(-07)	1.3(-07)	1.3(-07)	1.2(-08)	1.2(-07)	1.6(-07)
CH	5.7(-08)	7.4(-08)	7.1(-08)	7.0(-08)	5.6(-08)	2.8(-08)	2.4(-08)
CH_2	5.9(-09)	5.0(-09)	4.9(-09)	4.8(-09)	5.6(-09)	1.9(-09)	
C_2H	2.7(-08)	8.6(-08)	6.5(-08)	6.6(-08)	1.4(-08)	2.7(-08)	2.0(-08)
C_2H_2	8.7(-09)	4.6(-09)	4.8(-09)	4.5(-09)	4.0(-09)	1.9(-09)	no detection
C_3	8.3(-11)	1.2(-09)	1.1(-09)	1.1(-09)	9.2(-11)	4.7(-10)	no detection
N	1.1(-04)	1.1(-04)	1.1(-04)	5.6(-05)	5.7(-05)	5.6(-05)	
NH	5.1(-09)	9.2(-08)	4.5(-07)	2.7(-07)	1.5(-08)	2.6(-07)	
NH_2	1.1(-10)	2.8(-09)	1.3(-08)	7.1(-09)	3.0(-10)	7.1(-09)	no detection
NH_3	4.9(-12)	3.5(-09)	1.4(-08)	7.0(-09)	8.6(-12)	7.0(-09)	< 1.0(-08)
N_2	4.2(-09)	6.7(-08)	3.0(-07)	1.0(-07)	6.6(-09)	1.0(-07)	
NO	8.2(-09)	1.2(-07)	5.7(-07)	4.2(-07)	2.2(-08)	4.2(-07)	
CN	7.1(-08)	2.6(-08)	8.8(-08)	4.5(-08)	1.2(-07)	4.1(-08)	1.9(-08)
HCN	6.2(-10)	9.4(-10)	4.8(-09)	2.5(-09)	7.6(-10)	2.5(-09)	4.3(-09)
HNC	5.9(-11)	9.1(-10)	4.8(-09)	2.5(-09)	4.5(-10)	2.5(-09)	
O	5.1(-04)	2.8(-04)	2.8(-04)	2.7(-04)	3.3(-04)	2.8(-04)	
OH	2.6(-08)	1.7(-07)	8.7(-07)	1.2(-06)	1.2(-07)	1.2(-06)	$\approx 1(-7)-1(-8)$
H_2O	1.9(-08)	5.2(-08)	2.4(-07)	2.7(-07)	4.6(-08)	2.7(-07)	
H_3O^+	5.2(-13)	2.8(-10)	1.1(-09)	1.1(-09)	2.0(-12)	1.1(-09)	
O_3	1.4(-08)	4.7(-08)	2.3(-07)	3.2(-07)	4.8(-08)	3.2(-07)	
CO_2	1.4(-09)	1.1(-09)	4.7(-09)	6.9(-09)	3.5(-10)	6.8(-09)	
S	9.2(-06)	5.7(-10)	1.8(-09)	2.2(-08)	8.1(-06)	2.2(-08)	
S^+	7.0(-06)	1.5(-08)	1.4(-08)	1.4(-07)	8.0(-06)	1.4(-07)	
CS	3.7(-08)	1.1(-10)	9.2(-11)	8.6(-10)	3.5(-08)	3.9(-10)	$\approx 1(-08)$
SO^+	6.9(-12)	5.1(-11)	1.6(-10)	1.8(-09)	2.5(-11)	1.8(-09)	
e	1.1(-04)	2.7(-05)	2.7(-5)	2.7(-05)	9.9(-05)	2.9(-05)	

Table 3. Column density, relative to total hydrogen column density, of the first 6 rotational levels of H_2 and the first 2 of HD, in a moderately dense cloud with the parameters of model 4 and two different temperatures $T = 10K$ and $T = 25K$.

		$T = 10K$	$T = 25K$
H_2	$J = 0$	4.8(-01)	4.8(-01)
	$J = 1$	1.1(-03)	5.9(-03)
	$J = 2$	1.3(-07)	3.0(-07)
	$J = 3$	7.0(-08)	1.5(-07)
	$J = 4$	1.3(-08)	2.2(-08)
	$J = 5$	1.1(-08)	8.6(-09)
HD	$J = 0$	1.9(-06)	7.2(-06)
	$J = 1$	8.8(-12)	1.3(-08)

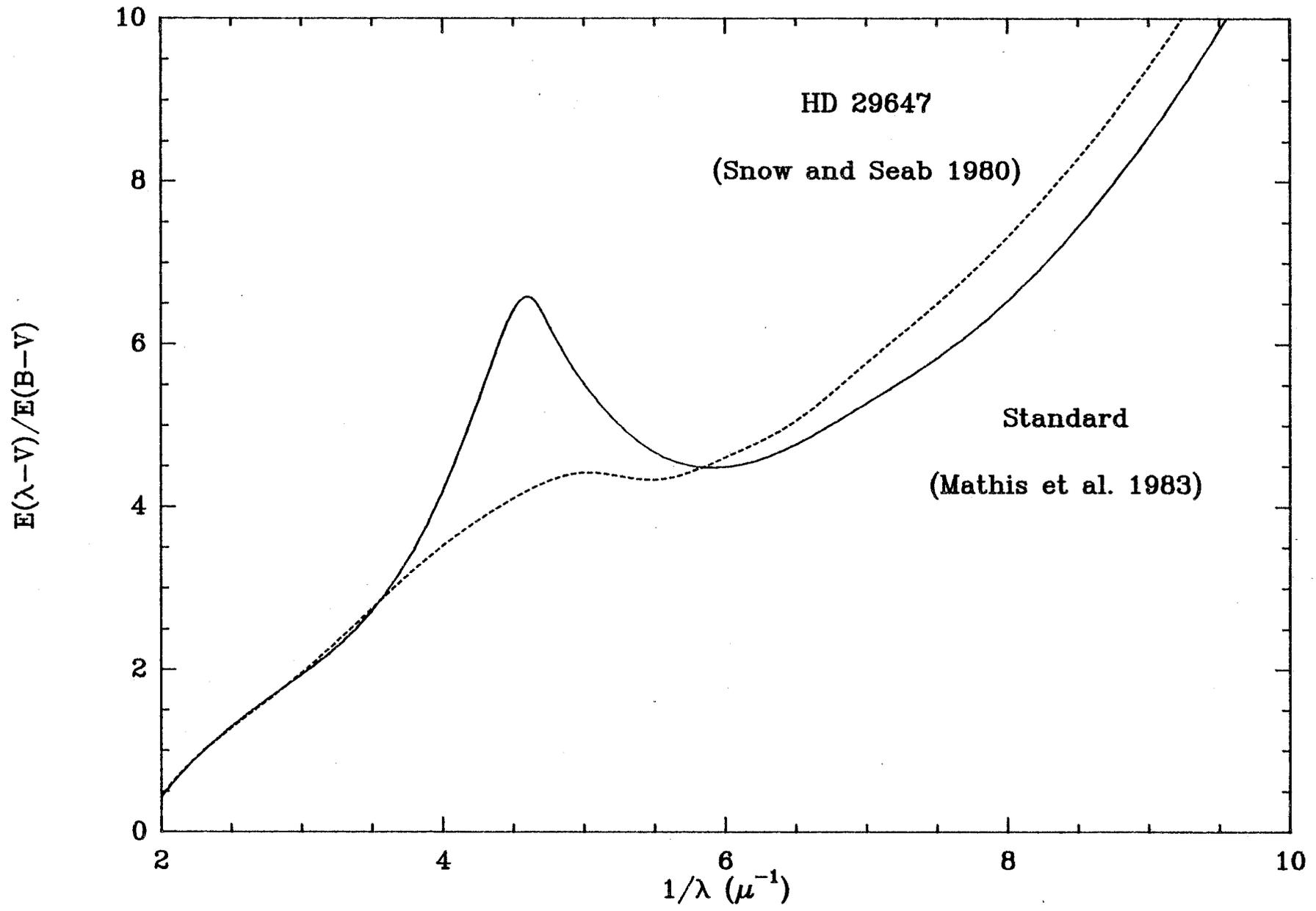


Fig 1

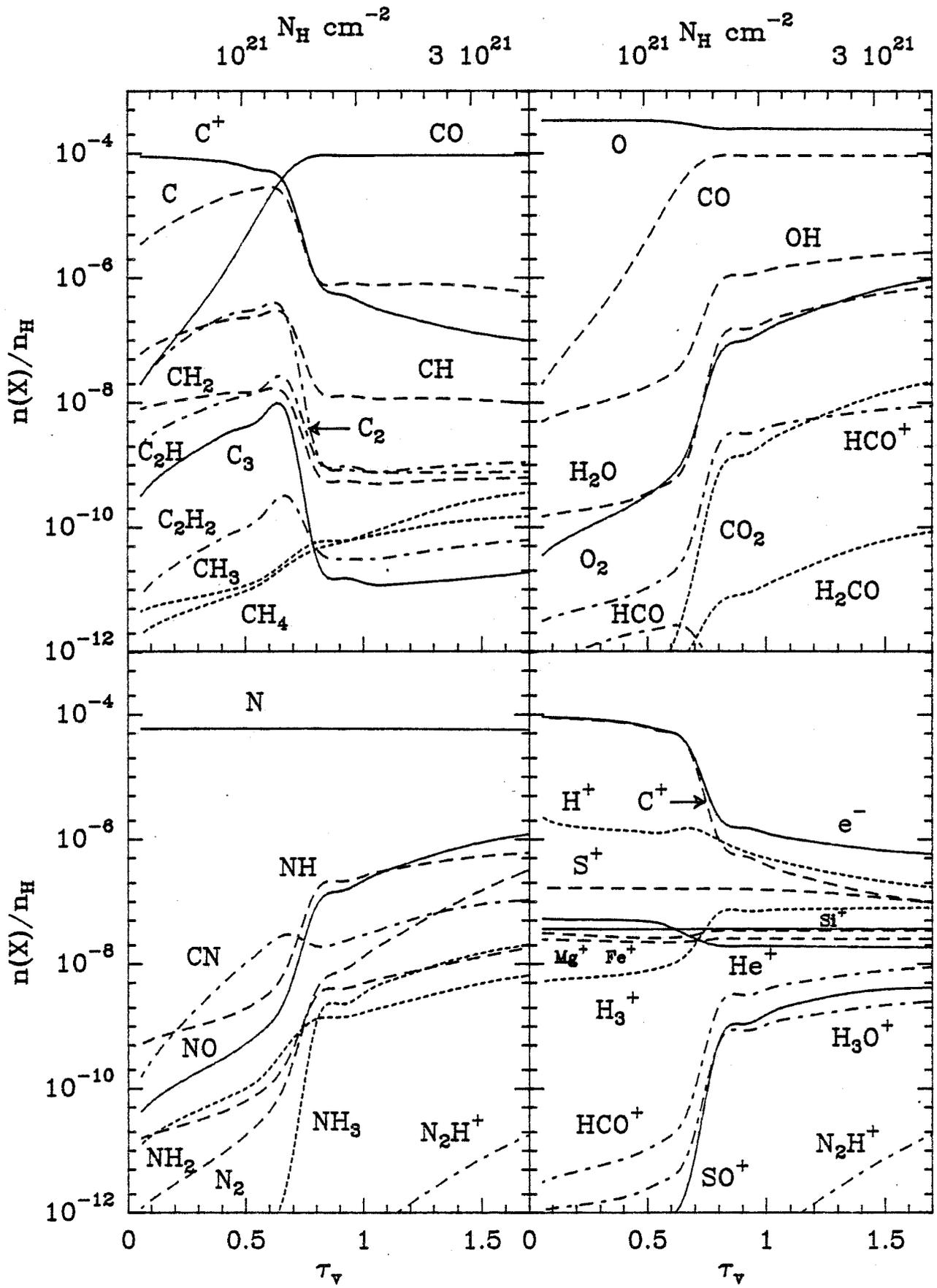


Fig 2

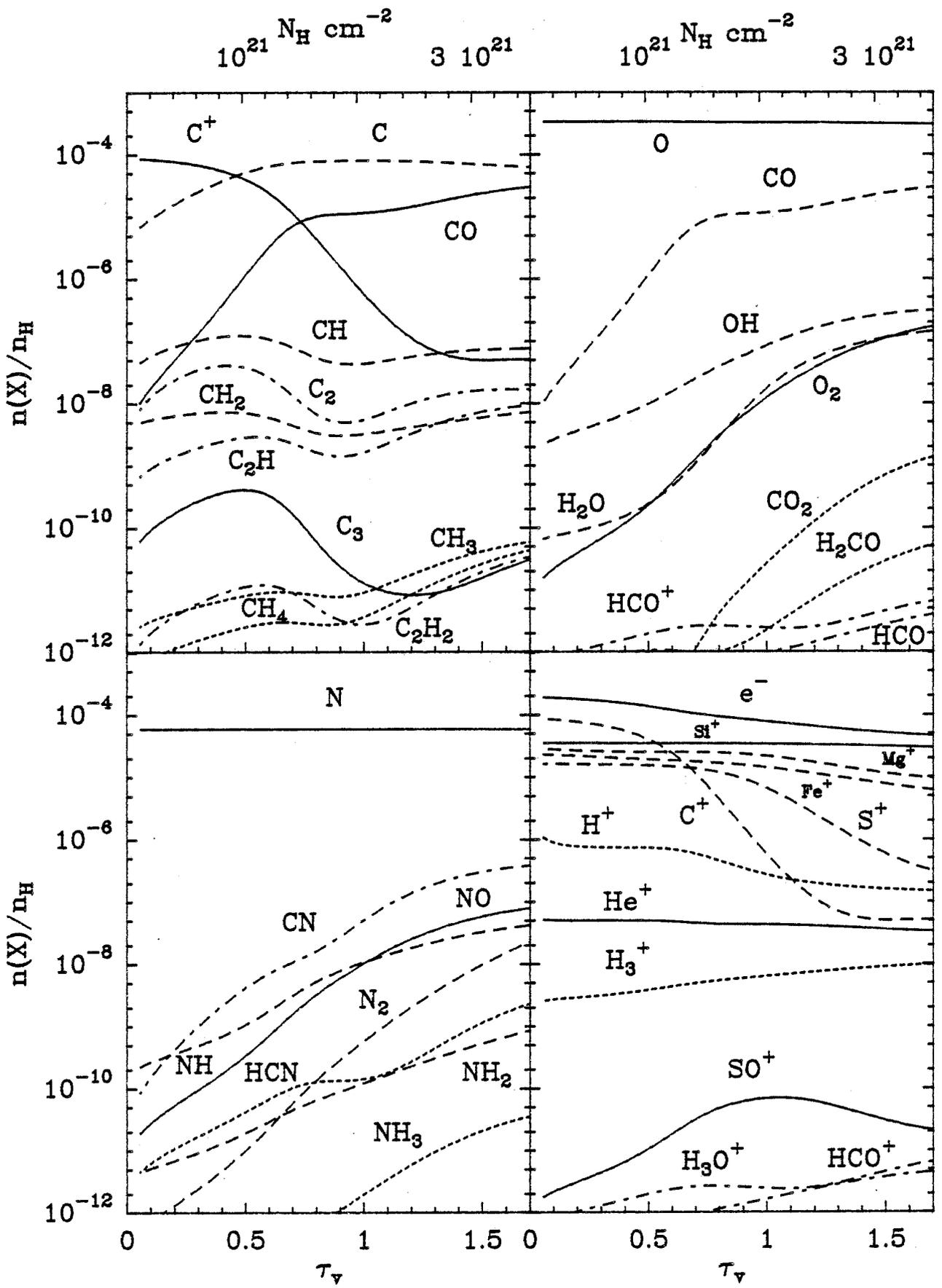


Fig 3

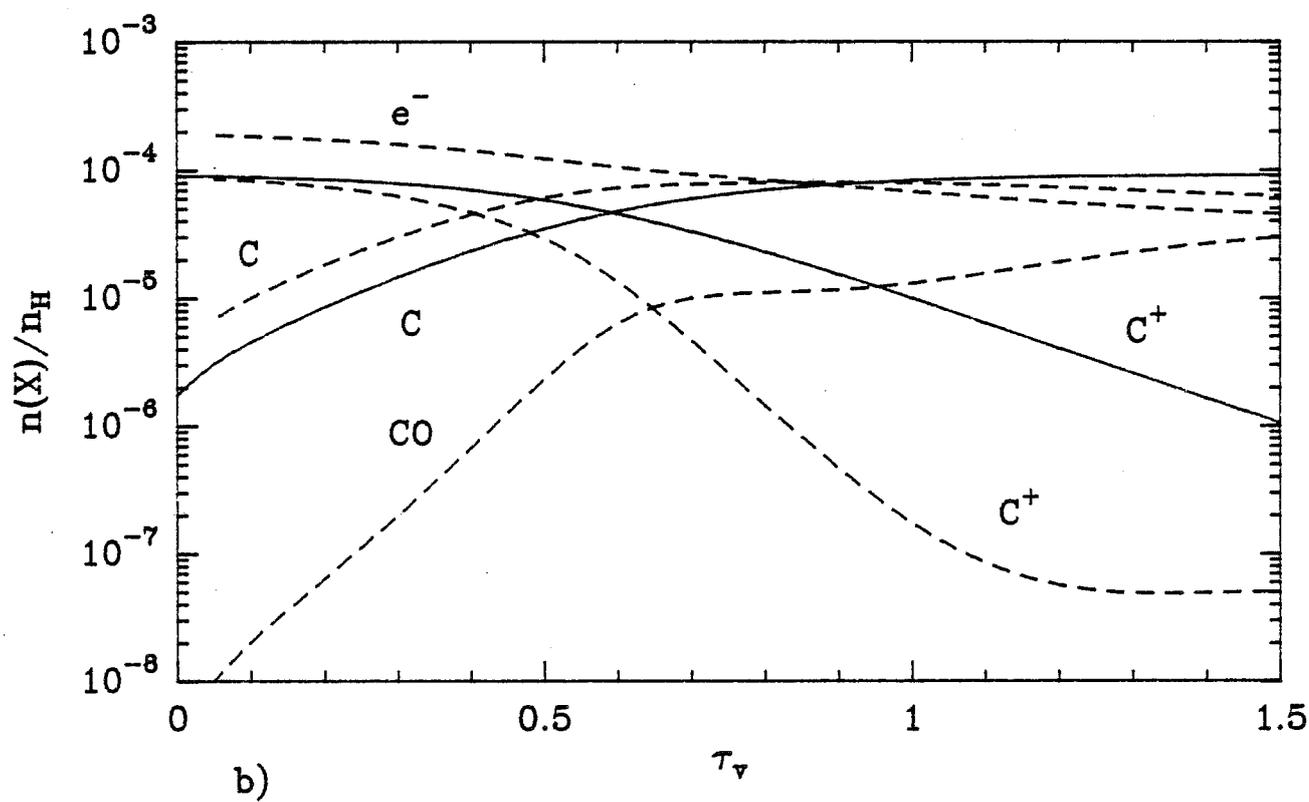
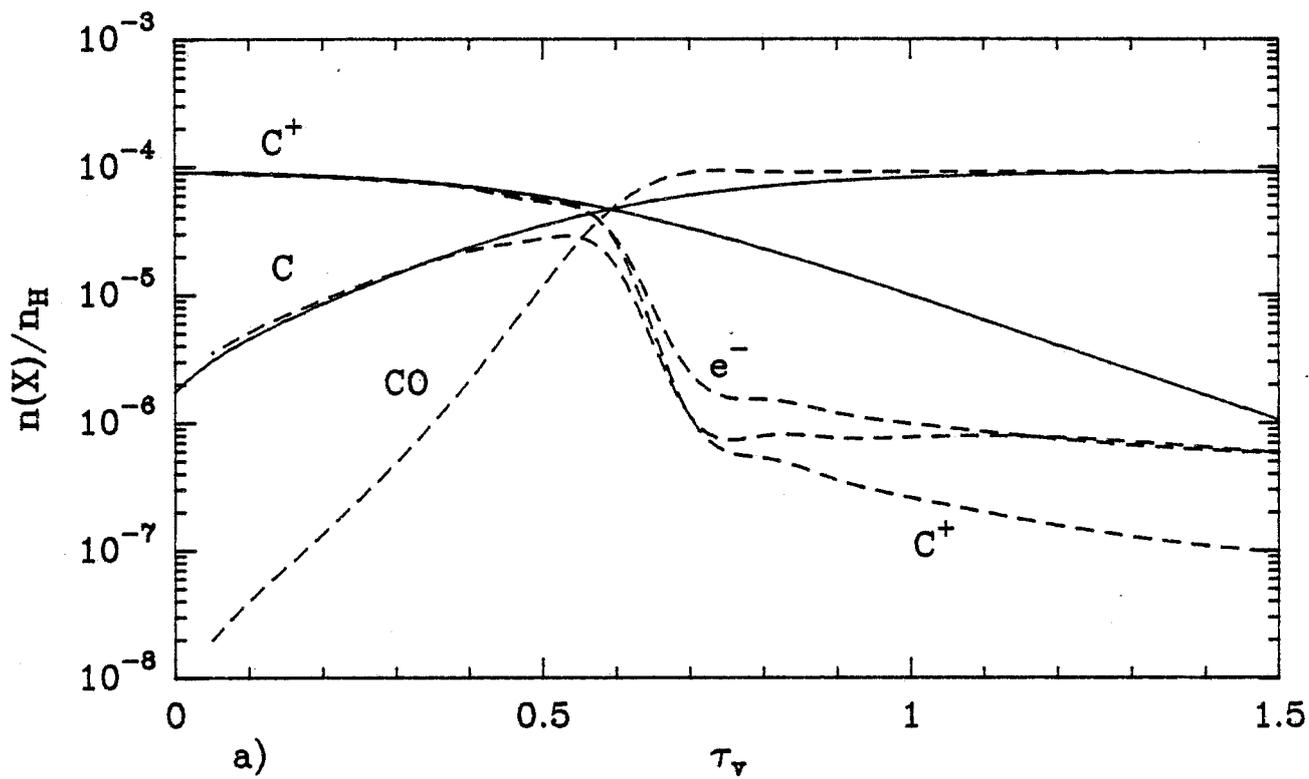


Fig 4

CHAPITRE VI

Photochimie des enveloppes circumstellaires oxygénées

VI. I INTRODUCTION

L'étude des stades ultimes de l'évolution stellaire nécessite une bonne connaissance observationnelle et une bonne analyse de la structure physique et chimique des enveloppes de gaz et de poussière qu'éjectent certaines étoiles géantes ou supergéantes rouges. Les premières informations chimiques sur ces objets ont été obtenues par la détection de signatures spectrales infra-rouges caractéristiques de la formation de poussière dans un environnement carboné ou oxygéné. Ces spectres photosphériques permettent de déduire si le rapport C/O est supérieur à 1 (étoiles R et N), inférieur à 1 (étoiles K et M) ou très proche de 1 (étoile S). La compréhension de la chimie des enveloppes circumstellaires s'est considérablement améliorée grâce à la détection de nombreuses molécules à des fréquences radio. Les profils de raie moléculaire peuvent être interprétés, par exemple, par des modèles d'enveloppes sphériques en expansion uniforme, et donner des indications sur les abondances moléculaires.

L'attention des astronomes s'est longtemps focalisée sur le prototype des étoiles carbonées IRC+10216 qui présente une chimie très riche en hydrocarbures et autres molécules complexes type cyanopolyynes : déjà plus de 20 molécules y sont détectées soit en radio (CN, CS, HNC, C₂H, SiS, SiO, HC₃N, HC₅N, HC₇N, C₄H, etc.), soit en infrarouge (C₂H₂, CH₄, etc.), soit les deux (CO, HCN, NH₃, etc.). L'étude observationnelle des enveloppes oxygénées est bien moins avancée : comme CO prend la plus grande part du carbone disponible, on a longtemps pensé que la chimie serait moins active que dans un contexte carboné. Ainsi jusque vers 1985 l'inventaire des molécules détectées autour des étoiles oxygénées était clairsemé : les masers OH, H₂O et SiO, l'émission thermique millimétrique de SiO, CO et H₂S, l'absorption infrarouge de NH₃ et de CO, l'émission et l'absorption infrarouge de H₂O. Depuis que se développe une nouvelle génération de grands télescopes millimétriques, des recherches nouvelles ont débuté. HCN a été détecté, d'abord par Deguchi et Goldsmith (1985) dans NML Tau et OH 231.8+4.2, puis par Jewell *et al.* (1986) dans IRC+10420. SO₂, recherchée en vain notamment par Zuckerman (1980) et prédite théoriquement par Scalo et Slavsky (1980) puis par Slavsky et

Scalo (1984) comme devant être une molécule très abondante dans les enveloppes oxygénées, a été découverte dans IRC+10011 et IRC-10529 avec le télescope de 30m de l'IRAM par Lucas *et al.* (1986) bien qu'avec une abondance inférieure aux prévisions d'un ordre de grandeur environ. Cette découverte de SO₂ a été rapidement confirmée dans OH231.8+4.2, s'est accompagnée de celle de SO dans cette même source (Guilloteau *et al.* 1986) et s'est étendue ainsi que H₂S à une quinzaine d'autres sources (Omont *et al.* 1987). Morris *et al.* (1987) ont ensuite observé et identifié huit molécules dans OH231.8+4.2. Cinq d'entre elles n'y avaient jamais été détectées (HCN, CS, NH₃, HCO⁺ et OCS), deux sont les premières détections dans un flot circumstellaire autour d'une étoile évoluée (HCO⁺ et OCS). Ainsi 13 molécules sont maintenant connues dans OH231.8+4.2.

Dans ce chapitre, nous allons d'abord essayer de définir et situer les étoiles géantes et supergéantes rouges qui perdent de la masse, puis de comprendre pourquoi il faut leur porter une attention particulière du point de vue de l'évolution stellaire et du recyclage de la matière entre étoiles et milieu interstellaire (paragraphe VI.II). Puis, nous décrirons brièvement les différents modes d'observation utilisés pour détecter les molécules circumstellaires (paragraphe VI.III). A l'aide d'un modèle simple d'enveloppe, nous décrirons les profils de raies millimétriques (paragraphe VI.IV). Nous présenterons enfin des observations collectées dans onze objets oxygénés avec le télescope de 30m de l'IRAM dans la raie J = 1-0 de HCN à 88.6 GHz (paragraphe VI.V). Un modèle de photochimie discutera alors des abondances des espèces azotées dans les couches intermédiaires et externes des enveloppes oxygénées.

VI.II PERTE DE MASSE DES GEANTES ROUGES

II.1 *Les étoiles géantes rouges*

Les géantes et supergéantes rouges sont d'énormes étoiles, favorites des astronomes amateurs et professionnels. Elles émettent jusqu'à un million de fois plus d'énergie que le soleil et sont de ce fait faciles à observer. Une étoile devient une géante rouge lorsqu'à la fin de la combustion de l'hydrogène de ses régions centrales, elle quitte la séquence principale du diagramme couleur-luminosité d'Hertzsprung-Russel (HR). Une période de contraction gravitationnelle commence alors, l'hydrogène continuant de brûler en couche autour du noyau. Cette contraction apporte une énergie supplémentaire à l'étoile et accroît sa luminosité jusqu'à un facteur 10^{2-3} : la pression de radiation devient alors plus intense et l'enveloppe est repoussée vers l'extérieur. Le rayon augmente pour atteindre jusqu'à 50 fois sa valeur initiale : la surface de l'étoile est alors si grande que malgré la forte luminosité, l'énergie rayonnée par unité de surface et donc la température effective diminue. L'étoile est plus rouge que pendant la phase séquence principale, elle est devenue une géante ou une supergéante rouge selon sa masse initiale.

Certaines de ces étoiles changent de taille, de luminosité et de couleur en l'espace de quelques années. L'histoire des étoiles variables (Herman 1983) débute à la fin du XVI^e siècle par la découverte dans la constellation de la Baleine, d'une étoile rouge qui disparut au bout de quelques mois pour réapparaître quelques années plus tard. Cette étoile (connue à présent sous le nom de α Ceti) fut appelée alors "étoile Mira". Par la suite beaucoup de cas similaires furent répertoriés et actuellement le groupe des étoiles variables rouges "Mira" rassemble des objets de grande amplitude de variation, de type spectral M, R, N ou S, géantes ou supergéantes. La variabilité spectroscopique ou photométrique est due à une pulsation des régions externes. Dans les domaines non visibles du spectre électromagnétique, les étoiles variables se caractérisent par leurs nombreuses bandes d'absorption moléculaire dans le proche infrarouge et par une forte émission infrarouge. Il s'agit de

la lumière de l'étoile qui est absorbée dans le visible et le proche IR par une enveloppe de gaz et de poussière, et réémise dans l'IR moyen. Aux fréquences radio certaines étoiles montrent des raies d'émission moléculaire de type maser pour des molécules comme OH, H₂O et SiO.

II.2 Branche asymptotique des géantes rouges

Dans la dernière décennie des cartographies du plan galactique dans les raies centimétriques de OH, ont révélé des centaines d'étoiles à émission maser similaire à celle des Miras. La plupart sont sans contrepartie optique : elles furent baptisées étoiles OH/IR, nom confirmé par l'assignation de plus de la moitié des sources OH à des sources IR ponctuelles. Les observations IR montrent que ces étoiles se trouvent sur la branche asymptotique des géantes rouges dans le diagramme HR, qu'elles ont des enveloppes circumstellaires bien plus épaisses que celles des Miras et que leur perte de masse peut être très importante (jusqu'à $10^{-4} M_{\odot}/\text{yr}$). Les étoiles de cette branche asymptotique sont formées d'un coeur compact d'électrons dégénérés, de carbone et d'oxygène, et d'une enveloppe d'hydrogène, séparés par une couche d'hélium. Le fait que la surface de l'étoile soit plutôt carbonée ou plutôt oxygénée dépend de façon encore peu claire de la masse du coeur et de l'âge de l'étoile.

Quand une étoile évolue le long de la branche asymptotique, son taux de perte de masse s'intensifie jusqu'au point où l'étoile se trouve dépouillée de pratiquement tout l'hydrogène de l'enveloppe (pour une discussion générale voir Iben et Renzini 1983). Le coeur résiduel se contracte rapidement tandis que la matière nébulaire éjectée dérive lentement vers l'extérieur. Quand la température de surface devient assez importante, les photons émis sont suffisamment énergétiques pour provoquer la fluorescence de la matière de la nébuleuse. Cette nébuleuse est alors une nébuleuse planétaire et le coeur devient finalement une naine blanche. Sans cette perte de masse, toute étoile de masse initiale comprise entre 1.4 et 10 M_{\odot} deviendrait une supernova lorsque la masse de son coeur dépasse la limite de Chandrasekhar à 1.4 M_{\odot} . Ainsi, la perte de masse provoque la perte de l'enveloppe d'hydrogène avant que l'explosion centrale ne se déclenche, et toute étoile isolée de masse initiale

inférieure à environ $10 M_{\odot}$ devient une naine blanche composée de carbone et d'oxygène.

Ces étoiles constituent environ la moitié des étoiles mourantes de la galaxie. Les naines blanches ont une masse moyenne d'environ $0.6 M_{\odot}$, mais leurs progéniteurs avaient une masse sur la séquence principale de quelques masses solaires. S'il naît une naine blanche par an alors les étoiles de la branche asymptotique rendent environ $1 M_{\odot}$ par an de matière stellaire au milieu interstellaire de la galaxie. Ainsi ces étoiles auraient rendu $10^{10} M_{\odot}$ depuis le début de l'évolution galactique, à comparer au taux moyen de matière rendue par les supernovae qui est environ un ordre de grandeur plus petit. On souligne par là l'importance de ces objets à l'échelle galactique.

VI.III OBSERVATIONS D'UNE ENVELOPPE CIRCUMSTELLAIRE

On peut observer les enveloppes circumstellaires en infrarouge et en radio (Omont 1985) : en IR on observe des régions assez chaudes (quelques centaines de degré) tandis qu'en radio les molécules détectées sont dans une zone plus froide ($T \leq 60K$).

La spectroscopie infrarouge à haute résolution (interférométrie à transformation de Fourier) et l'extension des techniques hétérodynes à la spectroscopie astronomique infrarouge permet d'étudier les transitions moléculaires de vibration-rotation avec une résolution angulaire élevée (quelques secondes d'arc). Les profils circumstellaires de ces transitions peuvent être complètement résolus et fournir des informations sur la distribution et la dynamique de la matière circumstellaire. De plus l'interprétation des raies est simplifiée par le fait que ce sont souvent des raies d'absorption devant une petite source continuum ($\leq 1''$) formée de la photosphère stellaire et des poussières chaudes qui se trouvent à proximité. On possède ainsi une sonde de la matière le long de la ligne de visée. Toutefois la saturation peut nuire à la détermination des profondeurs optiques, ou l'intensité du continuum peut être trop faible de sorte que l'interprétation des observations IR n'est pas si simple d'autant plus que les raies formées sont le résultat de l'absorption par des couches d'épaisseurs mal définies.

A l'opposé, la résolution spatiale des observations radio en émission est plus faible (de l'ordre de la minute d'arc pour un télescope de 10 mètres de diamètre). A 200 parsecs (\approx distance de IRC+10216), 1" représente $3 \cdot 10^{15}$ cm. Autrement dit l'enveloppe circumstellaire est mal résolue et à l'intérieur d'un lobe la température et la densité varient énormément. L'excitation des raies de rotation dépend fortement du rayonnement IR et dans certains cas (CO) de la température. Il est donc difficile de savoir quelle est la contribution des différentes parties du lobe au signal perçu et on ne peut obtenir que des spectres avec des profils de raies étendus sur tout l'intervalle de vitesse d'expansion projeté. De plus, les abondances relatives ne restent pas forcément constantes dans les enveloppes.

Enfin, les distances des sources ainsi que les moments dipolaires de certaines molécules restent encore mal déterminés.

VI.IV DESCRIPTION DES SPECTRES MOLECULAIRES

Nous reprenons ici le modèle simple de Kuiper *et al.* (1976) qui décrit les profils de raie moléculaire circumstellaire. Il s'inspire de ceux proposés auparavant par Morris (1975) et par Mufson et Liszt (1975), et a été souvent repris soit pour dériver des abondances moléculaires (Olofsson *et al.* 1982), soit pour calculer des taux de perte de masse à partir d'observations de CO (voir par exemple Knapp et Morris 1985).

On considère une enveloppe sphérique en expansion uniforme (voir figure VI.1). Dans la suite nous utiliserons les notations introduites par Morris (1975) : r = distance radiale du point courant à l'étoile centrale ; p = projection de r sur le plan du ciel ; z = projection de r le long de la ligne de visée ; V_{∞} = vitesse d'expansion de la source ; v_p = projection de la vitesse d'expansion le long de la ligne de visée ; $\delta z(p, v_p)$ = élément de distance sur la ligne de visée pour lequel la vitesse sur la ligne de visée est dans l'intervalle δv autour de v_p ; $G(p)$ = forme du lobe de l'antenne ; $T_B(p, v_p)$ = température de brillance dans la raie spectrale observée.

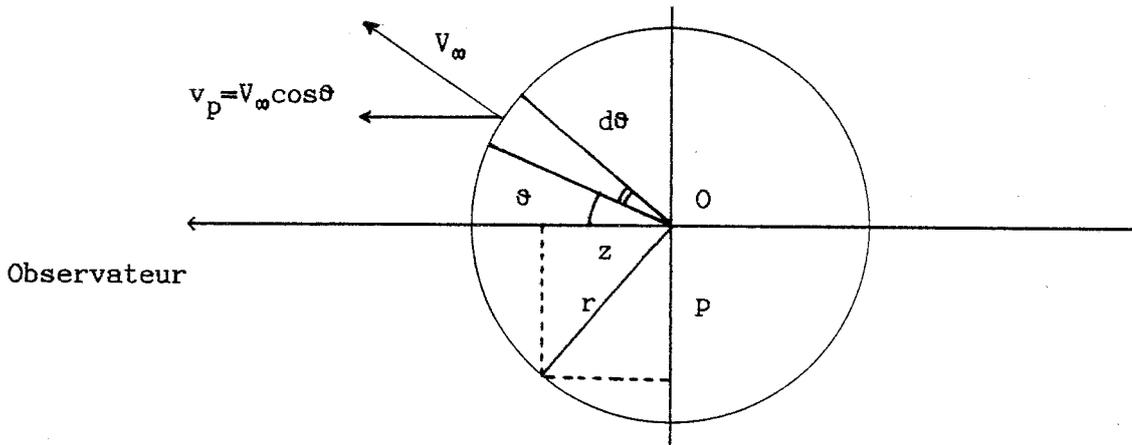


Figure VI.1 Enveloppe sphérique en expansion uniforme

On utilisera les relations suivantes :

$$r = (z^2 + p^2)^{1/2} \quad (1)$$

$$v_p = V_\infty (z/r) \quad (2)$$

$$\frac{p}{r} = \left[1 - (v_p/V_\infty)^2 \right]^{1/2} \quad (3)$$

$$\delta z = \delta v / (dv_p/dz) = \delta v (p/V_\infty) \left[1 - (v_p/V_\infty)^2 \right]^{-3/2} \quad (4)$$

L'opacité totale à la vitesse v_p le long de la ligne de visée est

$$\tau(p, v_p) = \alpha_{J+1, J}(r) f n(r) \delta z(p, v_p) \quad (5)$$

où $\alpha_{J+1, J}$ est un coefficient d'absorption, f l'abondance de la molécule émettrice et $n(r)$ la densité totale d'hydrogène sous toutes ses formes.

Castor (1970) et Goldreich et Kwan (1974) donnent :

$$\alpha_{J+1, J}(r) = \frac{8\pi^3 \mu_0^2}{3h} (J+1) (n_J - n_{J+1}) \quad (6)$$

où μ_0 est le moment dipolaire de la molécule observée et n_J est la population relative du niveau de rotation J .

Dans la suite nous supposons que le taux de perte de masse d'hydrogène est constant, c'est-à-dire que $n(r) = K/r^2$. On obtient alors pour $\tau(p, v_p)$:

$$\tau(p, v_p) = \frac{8\pi^3 \mu_0^2}{3h\nu_\omega} \frac{fK (J+1)(n_J - n_{J+1})}{p} \left[1 - (v_p/v_\omega)^2 \right]^{-1/2} \quad (7)$$

On définit alors une température d'excitation équivalente par

$$T_X(r) = \frac{h\nu}{k} \left\{ \left[\exp[h\nu/kT_{\text{ex}}(r)] - 1 \right]^{-1} - \left[\exp(h\nu/kT_C) - 1 \right]^{-1} \right\} \quad (8)$$

où $T_{\text{ex}}(r)$ est la température d'excitation de la transition et T_C la température du corps noir cosmologique. Alors la température de brillance s'écrit

$$T_B(p, v_p) = T_X(r) [1 - \exp(-\tau(p, v_p))] \quad (9)$$

Le lobe de l'antenne est supposé avoir une forme Gaussienne de largeur à mi-hauteur BD où B est la résolution angulaire et D la distance de la source observée :

$$G(p) = 4 \frac{\ln 2}{\pi B^2 D^2} \exp \left(- 4 \ln 2 \frac{p^2}{B^2 D^2} \right) \quad (10)$$

Ainsi la température d'antenne observée est

$$T_A(v_p) = 2\pi \int_0^\infty G(p) T_B(p, v_p) p dp \quad (11)$$

en supposant le lobe centré sur la source.

IV.1 Forme des raies optiquement épaisses

Si $\tau(p, v_p) \gg 1$ dans l'équation (9), alors $T_B(p, v_p)$ tend vers $T_X(r)$. La température d'antenne $T_A(v_p)$ devient entièrement caractérisée par BD et R_S le rayon de la source. L'équation (11) s'écrit après changement de variable

$$T_A(v_p) = \frac{8\text{Ln}2}{B^2 D^2} [1 - (v_p/v_\omega)^2] \int_0^{R_S} \exp \left[-4\text{Ln}2 [1 - (v_p/v_\omega)^2] [r/BD]^2 \right] \times T_X(r) r dr \quad (12)$$

Dans le cas où la source n'est pas résolue ($BD \gg R_S$), l'intégrale dans l'équation (12) ne dépend plus de v_p et la raie a un profil parabolique. Si BD devient inférieur à R_S c'est à dire que l'enveloppe est partiellement résolue, la raie est sensible à la réponse du télescope et cela se traduit par un aplatissement de son profil.

IV.2 Forme des raies optiquement minces

Si $\tau(p, v_p) \ll 1$, l'équation (11) s'écrit après changement de variable

$$T_A(v_p) = \frac{8\text{Ln}2}{v_\omega B^2 D^2} \int_0^{R_S} \exp \left[-4\text{Ln}2 [1 - (v_p/v_\omega)^2] [r/BD]^2 \right] \times T_X(r) \alpha_{J+1, J}(r) \delta v K f dr \quad (13)$$

Dans le cas non résolu ($BD \gg R_S$) l'intégrale ne dépend pas de v_p et le profil de la raie est plat. Dans le cas contraire où BD devient inférieur à R_S , l'intégrale est peu sensible à la dépendance en r du produit $T_X \alpha$, et la raie prend l'allure d'un profil à cornes de plus en plus prononcé lorsque la résolution angulaire augmente.

Les figures VI.2 illustrent ces calculs et montrent des spectres ^{12}CO et ^{13}CO de IRC+10216. Ces spectres sont partiellement résolus avec un lobe de $65''$ (Kuiper *et al.* 1976) et sont analysés par le modèle. ^{12}CO est optiquement épais et le profil est parabolique, ^{13}CO est optiquement mince et son profil est un profil à cornes. D'autres spectres de IRC+10216 en SiO, SiS, HNC et HCN, empruntés à Olofsson *et al.* (1982), sont présentés en figure VI.3.

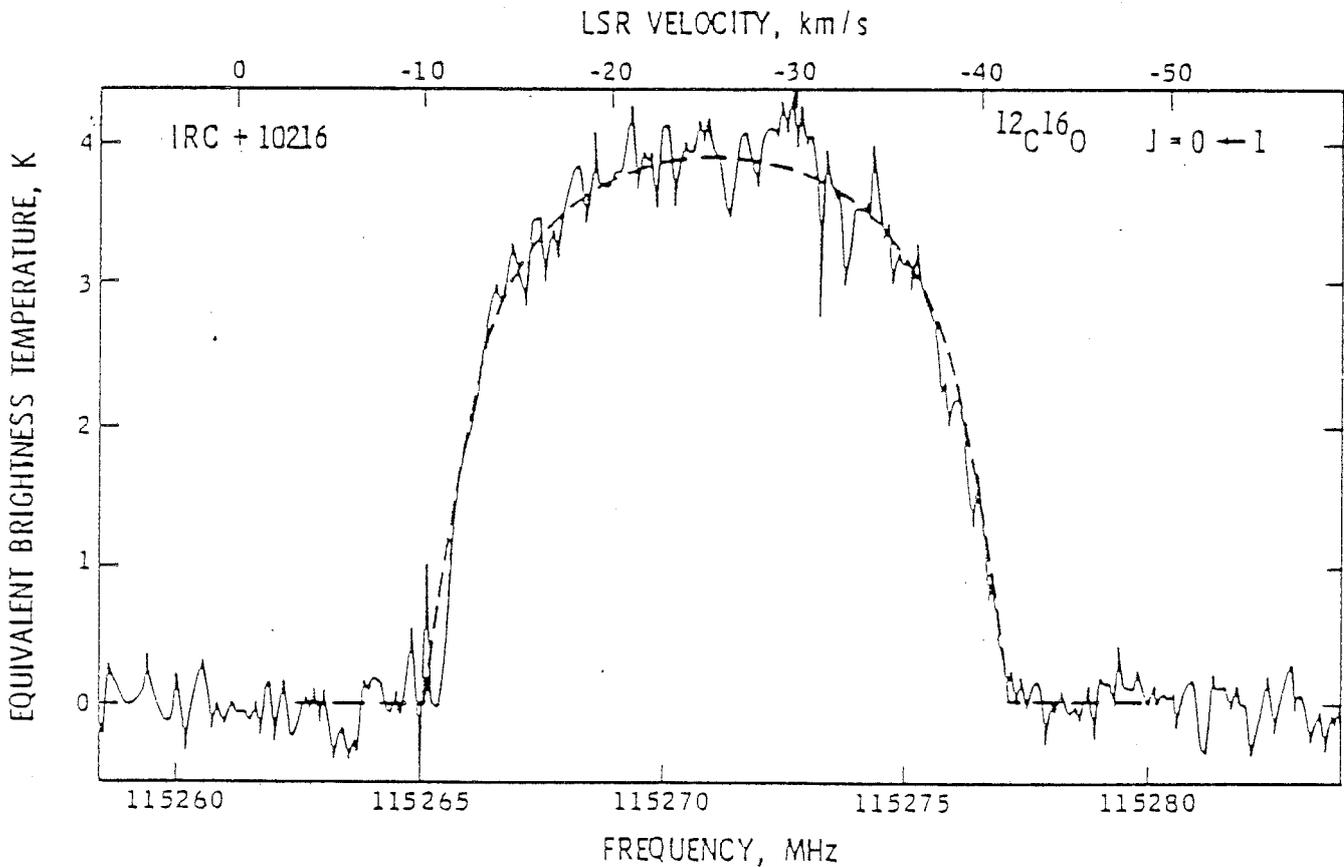


Figure VI.2.a Profil de l'émission ^{12}CO ($J = 1-0$) au centre de IRC+10216 avec une résolution de 100 kHz. Les fréquences sont repérées par rapport à la vitesse de la source à -26 km s^{-1} . La ligne pointillée représente le modèle (équation 12).

LSR VELOCITY, km/s

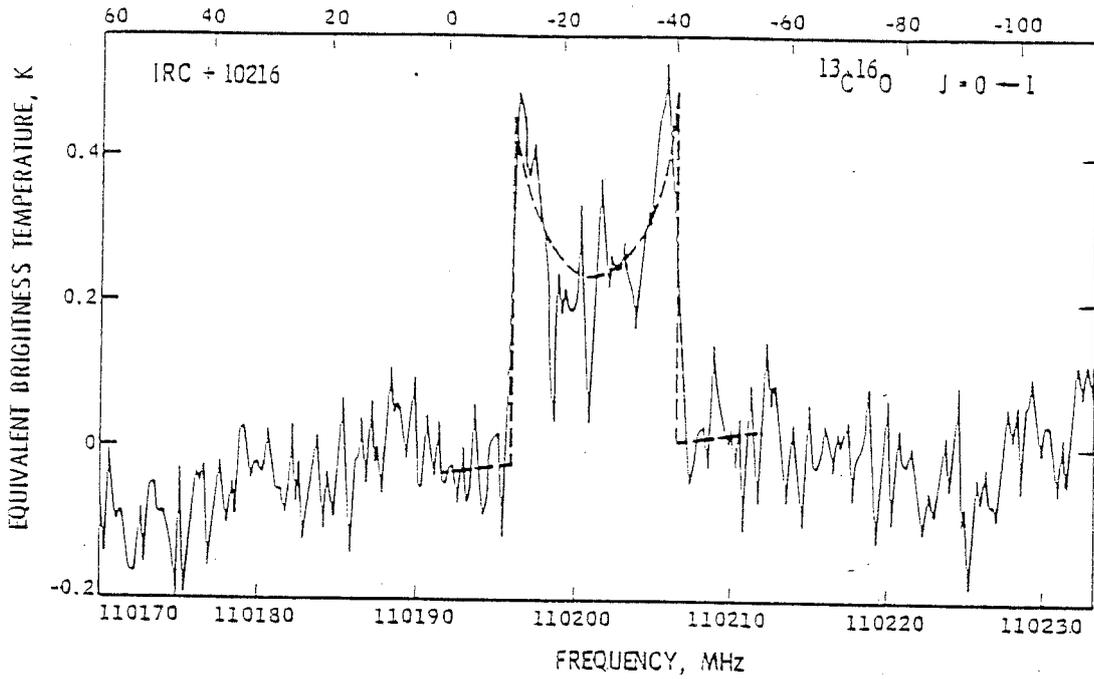
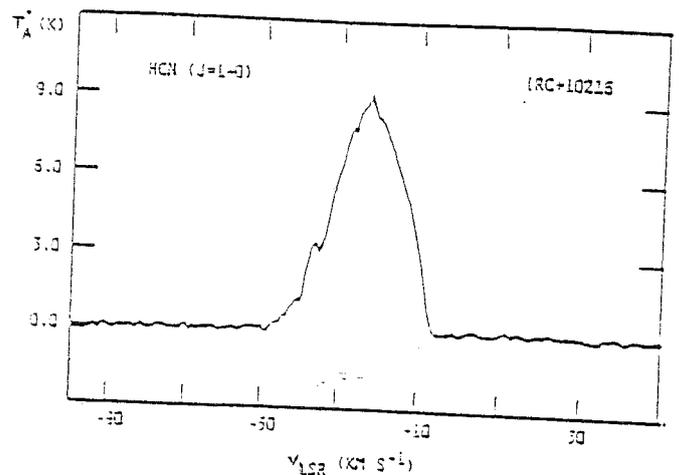
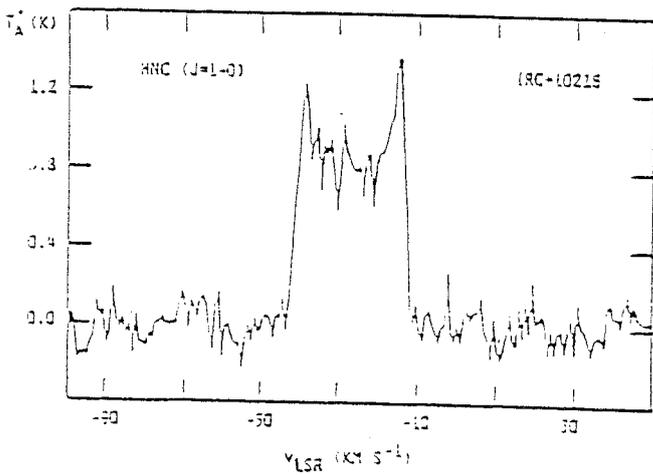
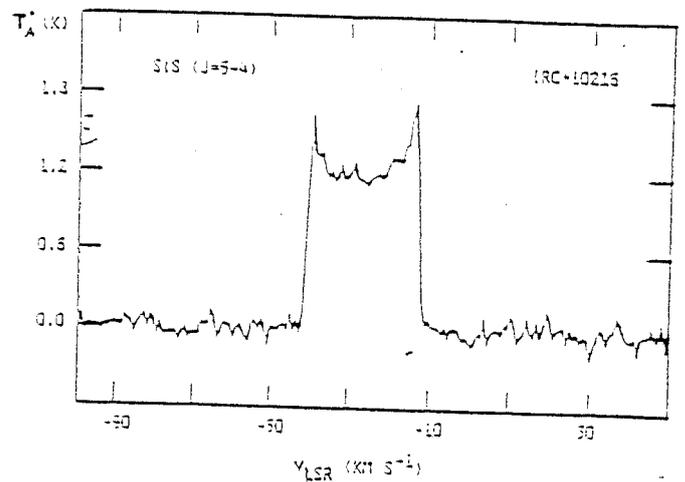
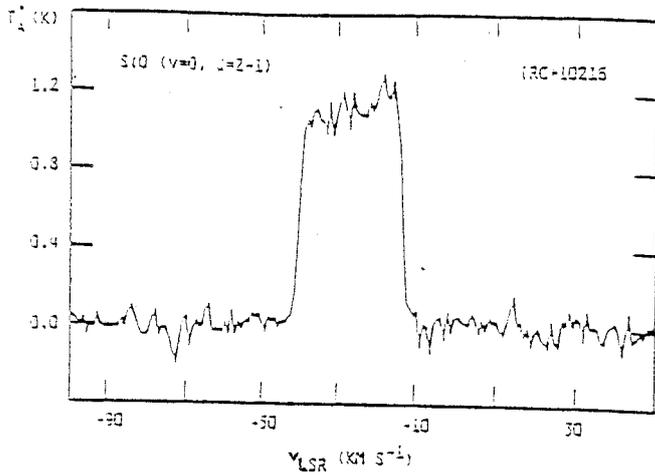


Figure VI.2.b Profil d'émission de ^{13}CO ($J = 1-0$) au centre de IRC+10216 avec une résolution de 250 kHz. La ligne pointillée représente le modèle (équation 13).

Figure VI.3. Spectres de IRC+10216 en SiO ($v = 0, J = 2-1$), SiS ($J = 5-4$), HNC ($J = 1-0$) et HCN ($J = 1-0$) (résolution en vitesse $\approx 0.86 \text{ km s}^{-1}$)



VI.V LA CHIMIE DE L'AZOTE DANS LES ENVELOPPES CIRCUMSTELLAIRES OXYGENÉES

La détection de la molécule HCN dans de nombreuses sources oxygénées, étoiles OH/IR géantes ou objets bipolaires (Deguchi et Goldsmith 1985, Jewell *et al.* 1986, Deguchi *et al.* 1986, Morris *et al.* 1987) est assez surprenante dans la mesure où les calculs d'abondance moléculaire à l'ETL dans les couches internes des enveloppes, indiquent que tout le carbone devrait être bloqué dans CO et l'azote dans N₂ (Tsuji 1973). Dans la suite nous présentons la confirmation de certaines détections de HCN avec le télescope de 30 mètres de l'IRAM (NML Tau, IRC+10420), et la découverte de cinq nouvelles sources HCN, pour l'essentiel des étoiles OH/IR géantes ou supergéantes (NML Cyg, VX Sgr, VY Cma, IRC+10011 et RT Vir). HNC a été cherché sans succès dans deux de ces sources (NML Cyg et IRC+10420 observées également en CO (J = 1-0)). Nous explorerons la possibilité de former des molécules azotées en général, et HCN en particulier, dans les couches intermédiaires des enveloppes oxygénées par des réactions entre molécules "filles", produits de la photodissociation par le champ UV extérieur des molécules "mères" plus stables et formées dans les régions plus proches de l'étoile. On montrera le rôle central tenu par les réactions entre radicaux neutres dans l'activité chimique des enveloppes oxygénées, par opposition aux enveloppes carbonées dans lesquelles l'ionisation par les rayons cosmiques, et la dissociation et l'ionisation de C₂H₂ par le champ UV engendrent une chimie ion-neutre complexe qui forme facilement des hydrocarbures (voir par exemple Glassgold *et al.* 1986, Nejad *et al.* 1984).

V.1 Les observations

Les observations ont été collectées en Mars 1986 avec le télescope de 30 mètres de l'IRAM à Pico Veleta (Espagne). La taille du lobe aux fréquences utilisées (88.6 Ghz pour HCN (1-0) et 90.6 GHz pour HNC (1-0)) est d'environ 26", les rendements de surface et du lobe principal étaient respectivement de 0.53 et 0.60. La précision du pointage sur l'ensemble du ciel était d'environ 5" rms, mais elle pouvait être améliorée en surveillant à intervalles réguliers des sources continuum proches des

points observés. La précision de la poursuite est meilleure que 1" rms. Le mélangeur utilisé était une jonction SIS fonctionnant en double bande. Les températures systèmes en bande latérale unique, rapportées au dessus de l'atmosphère et corrigées des pertes de l'antenne, étaient typiquement de 1000 K au cours des observations.

La ligne de base du récepteur était de bonne qualité. Les spectres ont été obtenus par la technique de changement de position, et l'analyseur de spectre était une batterie de 512 filtres de 1 MHz. Les filtres de 100 kHz étaient centrés sur la raie maser ν_1 de SiO pour s'assurer du pointage et de la vitesse de la source. Une ligne de base linéaire a été retranchée à chaque spectre et l'échelle d'intensité s'exprime en terme de température de brillance dans le lobe principal T_A^* , c'est à dire de température d'antenne affranchie de l'absorption atmosphérique et divisée par le rendement du lobe principal et par le coefficient de couplage de l'antenne avec le ciel. La calibration est basée sur la méthode de la "roue tournante", et a été vérifiée sur Orion A.

V.2 Les résultats

La température d'antenne au pic $T_A(0)$ (ou T_A^*) et la vitesse d'expansion V_∞ peuvent se déduire pour chaque source en décrivant les profils de raie par une fonction de la forme (Knapp et Morris 1985)

$$T_A(v_p) = T_A(0) \left[1 - \left[\frac{v_p - v_{LSR}}{V_\infty} \right]^2 \right] \quad \text{si } |v_p - v_{LSR}| < V_\infty$$

$$= 0 \quad \text{si } |v_p - v_{LSR}| > V_\infty$$

où v_{LSR} est la vitesse radiale de la source. Les résultats sont présentés dans les tables VI.1 et VI.2. La colonne (5) de la table VI.1 est la liste des températures d'antenne au pic, ou une limite supérieure pic à pic. La vitesse au centre de la raie est donnée en colonne (6) et la largeur totale à la base de la raie en colonne (7). La Figure VI.4 montre les spectres de toutes les sources où HCN a été détecté (plus une dans laquelle HCN ne l'a pas été : M1-92). Ces sources sont toutes des étoiles

oxygénées, pour l'essentiel des étoiles OH/IR géantes (NML Tau, IRC+10011) ou supergéantes (IRC+10420, NML Cyg, VX Sgr, VY CMa) avec des taux de perte de masse élevés (10^{-4} - $10^{-5} M_{\odot}/\text{an}$) déterminés par des observations de CO (Knapp et Morris 1985) ou de OH (Bowers *et al.* 1983). Les profils des raies apparaissent plutôt paraboliques bien que le bruit et surtout la superposition des composantes hyperfines de HCN déforment les formes d'origine ($\Delta V_{\text{hfs}}/V_{\infty} \approx 20\%$). Ceci semble indiquer que les raies sont plutôt optiquement épaisses sauf pour NML Cyg et VY CMa dont les sommets des profils sont aplatis. Pour ces deux sources les profils sont paramétrisés en remplaçant la première partie de l'équation ci-dessus par :

$$T_A(v_p) = T_A(0) \left[1 - \exp \left[-\alpha \left[\frac{v_p - v_{\text{LSR}}}{v_{\infty}} \right]^2 \right] \right] (1 - e^{-\alpha})^{-1}$$

Source	R.A.(1950)	Decl.(1950)	Raie	T_A^* (K)	σ (K)	v_{LSR} (km/s)	Δv_{base} (km/s)
IRC+10420 (SG)	19 ^h 24 ^m 28.8 ^s	11 ^o 15' 10.0"	HCN (1-0)	0.45	0.03	77.6	78
			HNC (1-0)	...	0.03		
NML Cyg (SG)	20 44 33.8	39 55 57.0	HCN (1-0)	0.26	0.03	-0.8	60
			HNC (1-0)	...	0.03		
VX Sgr (SG)	18 05 03.0	22 13 55.0	HCN (1-0)	0.09	0.03	7.6	43
VY CMa (SG)	07 20 54.7	25 40 11.0	HCN (1-0)	0.33	0.04	16.0	66
IRC+10011 (G)	01 03 48.0	12 19 51.0	HCN (1-0)	0.27	0.03	9.3	45
NML Tau (G)	03 50 44.0	11 15 31.0	HCN (1-0)	0.22	0.04	33.8	38
RT Vir (M)	13 00 05.6	05 27 15.0	HCN (1-0)	0.20	0.06	-27.2	55
M1-92 (PNP)	19 34 18.0	29 28 04.9	HCN (1-0)	...	0.03		
W Hya (M)	13 46 12.2	28 07 05.0	HCN (1-0)	...	0.02		
RS Cnc (M)	09 07 37.8	31 10 05.0	HCN (1-0)	...	0.05		
RX BOO (SR)	14 21 56.8	25 55 46.0	HCN (1-0)	...	0.04		

Table VI.1 Résultats observationnels. En colonne (1), SG = Super-Géante, G = Géante
M = variable de longue période type Mira, SR = variable Semi-Régulière
PNP = Pré-Nébuleuse Planétaire. Colonne (5) = température d'antenne,
(6) = vitesse de la source, (7) = largeur totale à la base de la raie

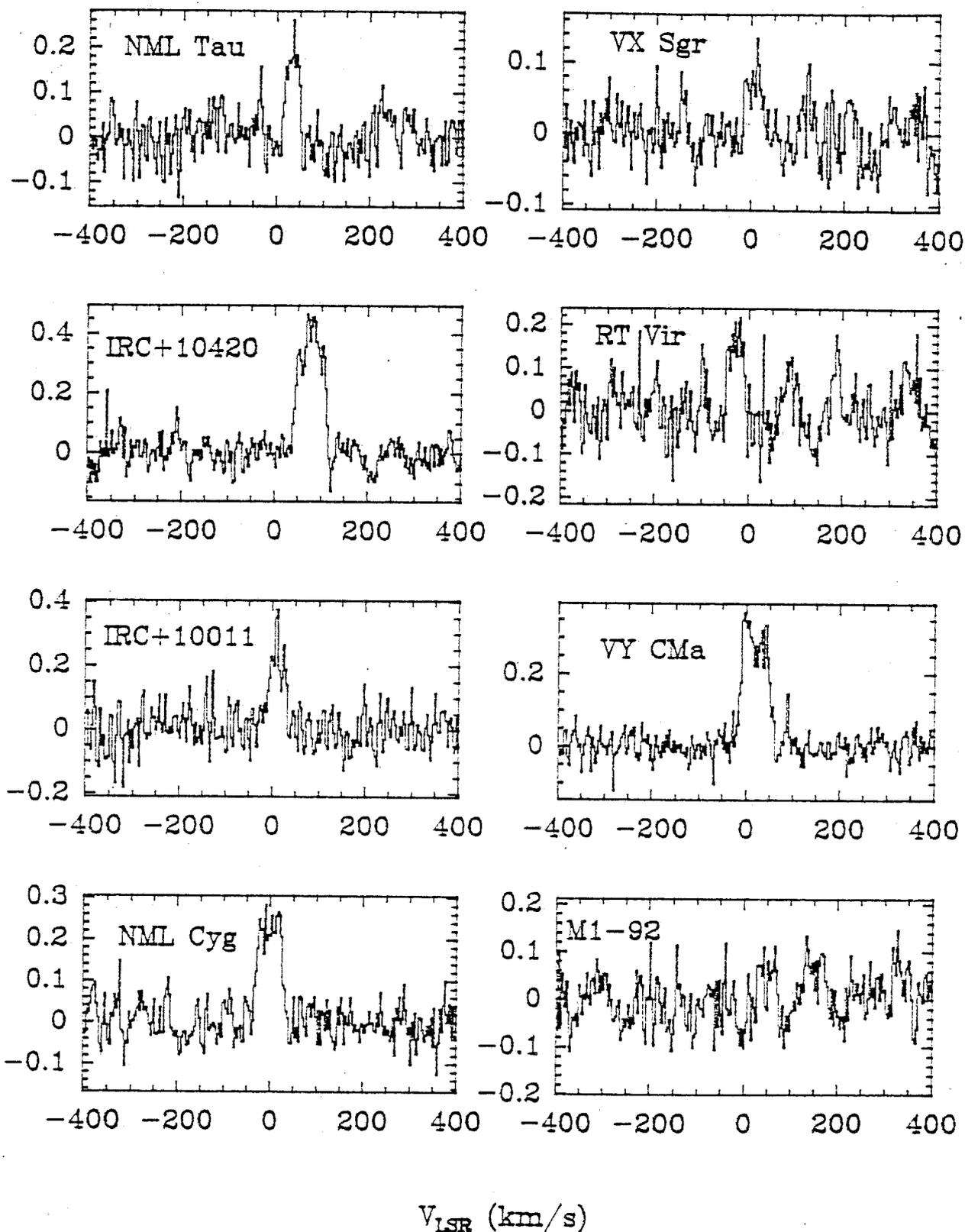
T_A^* (K)

Figure VI.4 Spectres de HCN ($J = 1-0$) dans plusieurs sources oxygénées.

Deux parmi ces sources avaient déjà été détectées en HCN ($J = 1-0$) par ailleurs.

NML Tau

La vitesse radiale et la largeur de raie sont en bon accord avec la détection de Deguchi et Goldsmith (1985) ($V_{\text{LSR}} = 33$ km/s, $\Delta V_{\text{base}} = 38$ km/s). Les émissions maser de OH, H₂O et SiO ont été détectées dans cette source (Snyder et Buhl 1975), et l'émission thermique de CO ($J = 1-0$) également (Knapp et Morris 1985). La vitesse d'expansion $V_{\infty} = 17$ km/s diffère peu de celle mesurée en CO.

IRC+10420

L'accord est bon entre la détection de Jewell *et al.* (1986) et celle présentée ici ($V_{\text{LSR}} = 78$ km/s, $\Delta V_{\text{base}} = 78$ km/s). Knapp et Morris (1985), à partir d'une détection difficile en CO (1-0), donnent une vitesse d'expansion V_{∞} de 51.7 km/s ; cette même raie a été détectée avec le 30 mètres ($T_{\text{A}}^* = 0.55$ K, $V_{\text{LSR}} = 75.3$ km/s) et donne $V_{\infty} = 37.6$ km/s compatible avec la détermination HCN ($V_{\infty} = 33$ km/s). HNC n'a pu être détecté et une limite supérieure à 3σ sur la température d'antenne est d'environ 0.1 K.

IRC+10420 est un objet particulier pour plusieurs raisons. C'est le seul maser OH/IR circumstellaire connu avec une étoile excitatrice de type spectral F8. Aucune émission maser SiO n'y a jamais été détectée ce qui semble bien indiquer que dans l'enveloppe interne où se forment généralement les masers SiO, la température ou la densité du flot est différente de celle d'une étoile M.

Les autres sources

En plus des deux étoiles ci-dessus, HCN a donc été détecté dans cinq nouvelles sources. Parmi elles la seule de type Mira est RT Vir, observée difficilement en CO ($J = 1-0$) par Knapp et Morris (1985) : les estimations de distance, vitesse d'expansion, et donc de taux de perte de masse, sont très incertaines pour cette étoile.

Des détections comme celles de la géante IRC+10011 ou de la supergéante VX Sgr, sont en accord avec les résultats négatifs de Jewell *et al.* (1986) qui donnaient une limite supérieure à 5σ de 0.3 K alors que nous obtenons respectivement 0.27 K et 0.09 K dans ces deux sources. Pour IRC+10011 la vitesse d'expansion de 23 km/s s'accorde bien avec la détermination CO de Knapp et Morris 1985, pour VX Sgr l'accord est moins bon (20 km/s contre 26 km/s ici).

Certaines non détections de Jewell *et al.* (1986) avec une limite supérieure de 0.2K, sont confirmées dans la pré-nébuleuse planétaire M1-92 ($< 0.08K$) et dans les étoiles variables W Hya ($< 0.04K$) et RX BOO ($< 0.07K$). Echec également dans l'étoile de type Mira, RS Cnc avec une limite supérieure de 0.04 K.

Comme pour IRC+10420, aucune émission HNC ($J = 1-0$) n'a pu être détectée en direction de NML Cyg. C'est une étoile classée OH/IR supergéante à cause d'émissions masers OH, H₂O et SiO très puissantes, mais dont Morris et Jura (1983a) pensent qu'elle peut évoluer vers une phase Wolf-Rayet avant d'exploser en supernova. La raie CO ($J = 1-0$) a été détectée dans cette source ($T_A^* = 0.49K$) et permet d'établir $V_{LSR} \approx 0.6$ km/s et $V_{\infty} = 26$ km/s, valeurs compatibles avec les déterminations HCN. Knapp et Morris (1985) ne l'avaient pas détecté à cause d'une émission galactique importante à 0 km/s. Le même problème s'était posé pour la supergéante VY CMa.

V.3 Abondance de HCN

L'abondance de la molécule HCN peut se calculer grâce au modèle de transfert dans une enveloppe sphérique en expansion uniforme de Kuiper *et al.* (1976) (voir paragraphe VI.IV). On supposera que les raies sont optiquement minces. Cette hypothèse ne semble pas réellement justifiée dans la mesure où, comme nous l'avons remarqué, la forme des raies est plutôt parabolique. Dans le cas où cette hypothèse serait erronée, la valeur calculée donne une valeur inférieure de l'abondance.

On supposera également que la température d'excitation est constante

($T_X(r)$ ne dépend plus de r). Bien que cette dernière approximation soit peu vraisemblable, elle peut décrire assez correctement la population du niveau $J = 1$ en moyenne sur l'enveloppe (voir Morris, Lucas et Omont 1985). L'équation (13) du paragraphe VI.IV qui exprime la température d'antenne d'une raie optiquement mince en fonction de la vitesse projetée, s'écrit

$$T_A(v_p) = \frac{8\text{Ln}2}{v_\infty B^2 D^2} \alpha_{J+1,J} f K T_X \int_0^{R_S} \exp\left[-4\text{Ln}2 [1-(v_p/v_\infty)^2] [r/BD]^2\right] \quad (14)$$

soit en changeant de variable

$$T_A(v_p) = \alpha_{J+1,J} T_X f K \frac{R_S}{v_\infty} \left[\frac{4\text{Ln}2}{BD} \right]^2 F\left[2(\text{Ln}2)^{1/2} \frac{R_S}{BD} [1-(v_p/v_\infty)^2]^{1/2}\right] \quad (15)$$

où

$$F(y) = \frac{1}{y} \int_0^y \exp(-x^2) dx$$

Pour chaque enveloppe on suppose que le rayon de la source R_S coïncide exactement avec la moitié du lobe de l'antenne $BD/2$. La température d'excitation est choisie $T_{\text{ex}} = 25 \text{ K}$: c'est la température de rotation déterminée par Guilloteau *et al.* (1986) à partir de la mesure du rapport de deux raies de SO_2 dans OH 231.8+4.2 et OH 26.5+0.6. Le rapport d'intensité des raies $\text{NH}_3(1,1)$ et (2,2) de Morris *et al.* (1987) donnent une température de rotation ($27 \pm 4\text{K}$) compatible avec la détermination de SO_2 .

Par l'observation on a mesuré la température d'antenne au pic $T_A(0)$ et la vitesse d'expansion v_∞ ; si on connaît la distance de la source on peut alors déduire de l'équation (15) la quantité $\alpha_{J+1,J} f K$. La loi de Boltzmann, la fonction de partition $Z(\text{HCN}) \approx kT_{\text{ex}}/B_{\text{rot}}$ et le moment dipolaire $\mu_o(\text{HCN}) = 2.98 \text{ Debye}$ déterminent $\alpha_{J+1,J}$; le taux de perte de masse d'hydrogène détermine K ; l'abondance f est alors accessible.

Les résultats de ce modèle sont présentés dans la table VI.2. On trouvera également dans cette table les grandeurs qui caractérisent chaque source : distance, taux de perte de masse et vitesse d'expansion.

Remarque : dans le cas d'une raie optiquement mince, le signal radio est pour l'essentiel proportionnel au nombre total de molécules émettrices dans le lobe de l'antenne $\mathcal{N} = 4\pi fKR_S = 4\pi f kBD$. En fait la quantité pertinente est \mathcal{N}/D^2 mais pour éviter l'incertitude sur D on l'exprime souvent en terme de colonne densité moyennée dans le lobe \bar{N} :

$$\mathcal{N} = \pi B^2 D^2 \bar{N}$$

Les grandeurs \mathcal{N} et \bar{N} sont également présentées dans la table VI.2.

Source	D (pc)	\dot{M} (M_\odot/an)	V_∞ (km/s)	f	\mathcal{N}	\bar{N} (cm^{-2})
IRC+10420	3400 (1)	$2.0 \cdot 10^{-4}$ (1)	38	$2.9 \cdot 10^{-8}$	$4.5 \cdot 10^{49}$	$8.0 \cdot 10^{12}$
HNC				$< 3 \cdot 10^{-9}$ (3σ)		
NML Cyg	3400 (3)	$4.5 \cdot 10^{-4}$ (3)	29	$5.5 \cdot 10^{-9}$	$2.2 \cdot 10^{49}$	$4.0 \cdot 10^{12}$
HNC				$< 1 \cdot 10^{-9}$ (2σ)		
VX Sgr	1500 (1)	$2.4 \cdot 10^{-5}$ (1)	26	$7.9 \cdot 10^{-9}$	$1.0 \cdot 10^{48}$	$9.7 \cdot 10^{11}$
VY CMa	1900 (3)	$1.9 \cdot 10^{-4}$ (3)	32	$1.8 \cdot 10^{-8}$	$1.1 \cdot 10^{49}$	$6.6 \cdot 10^{12}$
IRC+10011	510 (2)	$1.2 \cdot 10^{-5}$ (2)	23	$2.2 \cdot 10^{-8}$	$4.3 \cdot 10^{47}$	$3.4 \cdot 10^{12}$
NML Tau	270 (2)	$5.1 \cdot 10^{-6}$ (2)	17	$1.2 \cdot 10^{-8}$	$7.1 \cdot 10^{46}$	$2.0 \cdot 10^{12}$
RT Vir	700 (2)	$1.5 \cdot 10^{-5}$ (2)	20	$3.9 \cdot 10^{-8}$	$2.7 \cdot 10^{47}$	$1.2 \cdot 10^{12}$
M1-92	2300 (4)	$3.3 \cdot 10^{-5}$ (4)	26 (5)	$< 2 \cdot 10^{-8}$ (2σ)		
W Hya	150 (5)	$3.0 \cdot 10^{-6}$ (5)	9 (4)	$< 6 \cdot 10^{-10}$ (2σ)		
RS Cnc	410 (2)	$2.9 \cdot 10^{-7}$ (2)	5 (3)	$< 7 \cdot 10^{-9}$ (1σ)		
RX BOO	225 (2)	$3.8 \cdot 10^{-7}$ (2)	11 (3)	$< 2 \cdot 10^{-8}$ (1σ)		

Table VI.2 Abondance de HCN. Pour chaque source on présente sa distance D, son taux de perte de masse \dot{M} et sa vitesse d'expansion V_∞ . $f = \text{HCN}/H_{\text{total}}$
 \mathcal{N} = nombre de particules dans le lobe, \bar{N} = colonne densité moyennée
 (1) Dyck et al. (1984) (2) Knapp et Morris (1985), (3) Knapp (1985)
 (4) Knapp (1986) (5) Spencer et al. (1979). * : perte de masse obtenue à partir des observations OH de Bowers et al. (1983).

V.4 Le modèle de chimie

V.4.1 Hypothèses et paramètres d'entrée

Comme il a été décrit au chapitre II, on considère une enveloppe sphérique en expansion uniforme dont on étudie les couches externes : les calculs débutent à la distance $R_0 = 10^{15}$ cm de l'étoile centrale et on adopte une vitesse d'expansion constante $V_\infty = 15$ km/s. La perte de masse d'hydrogène $dM/dt = \dot{M}$ est également supposée constante et la densité totale d'hydrogène au rayon r s'exprime alors par $n(r) = K/r^2$ où $K = \dot{M}/(4\pi m_H V_\infty)$. Si l'on exprime \dot{M} en unité de $10^{-5} M_\odot/\text{an}$ et si l'on utilise $V_\infty = 15$ km/s, alors

$$n(r) = \frac{2.0 \cdot 10^{37} \text{ cm}^2}{r^2} \frac{\dot{M}}{10^{-5} M_\odot/\text{an}} \text{ cm}^{-3}$$

Dans le modèle standard nous supposons $\dot{M} = 10^{-5} M_\odot/\text{an}$.

La température cinétique du gaz dans les enveloppes circumstellaires est mal connue. Or beaucoup de réactions entre espèces neutres dont nous verrons l'importance, ont des taux sensibles à la température et il est important de choisir un profil approprié. A partir des calculs théoriques de Goldreich et Scoville (1976), nous avons choisi

$$T(r) = 550 \text{ K} \left[\frac{r}{10^{15} \text{ cm}} \right]^{-0.7}$$

en accord avec Mamon *et al.* (1987).

La composition chimique du gaz en R_0 est incertaine. Il semble qu'elle soit d'abord le résultat des conditions d'équilibre qui règnent dans les couches profondes et denses de l'enveloppe, juste au dessus de la photosphère de l'étoile ; toutefois la formation vraisemblable des grains de poussière dans cette zone (Omont 1985) et la présence éventuelle de chocs ou d'autres sources excitatrices, peuvent perturber les abondances moléculaires d'équilibre.

Slavsky et Scalo (1984) ont montré que la présence d'hydrogène atomique, même en faible quantité (moins de 1% de l'hydrogène total)

pouvait avoir des conséquences importantes en particulier sur les espèces (comme NH_3 , CH_4 , H_2S , etc.) qui se forment par des réactions neutres avec l'hydrogène moléculaire auquel elles arrachent un atome. Ces réactions d'abstraction d'un atome d'hydrogène possèdent en général des barrières d'activation importantes ($\approx 10^3$ K voir Annexe E, réactions n° 1652, 1657, 1672, 1677, etc.).

Dans le modèle standard on suppose l'étoile assez froide pour qu'en R_0 le gaz soit composé d'hydrogène entièrement sous forme moléculaire ; CO prend tout le carbone disponible, H_2O l'oxygène qui reste après que CO ait pris sa part, et N_2 tout l'azote. Les abondances élémentaires sont celles du voisinage solaire (voir Table VI.3)

Perte de masse d'hydrogène.....	$\dot{M} = 10^{-5} M_\odot/\text{an}$
Vitesse d'expansion.....	$V_\infty = 15 \text{ km/s}$
Température cinétique du gaz.....	$T(r) = 550 \text{ K } (r/10^{15} \text{ cm})^{-0.7}$
Abondances initiales par rapport à H_{total}	
	CO $4 \cdot 10^{-4}$
	H_2O $3 \cdot 10^{-4}$
	N_2 $1 \cdot 10^{-4}$

Table VI.3 Paramètres du modèle standard

Il est possible que par des processus comme ceux déjà mentionnés (chocs, UV, sources excitatrices,...) certaines des molécules "mères" ci-dessus, comme N_2 ou CO, soient partiellement cassées dans les couches profondes de l'enveloppe et libèrent un peu d'azote et de carbone sous forme atomique. Dans ce cas, et à condition que l'hydrogène soit entièrement sous forme moléculaire, ces atomes réagissent très rapidement avec H_2 par les réactions d'abstraction vues plus haut, et se retrouvent en R_0 sous forme d'ammoniac NH_3 et de méthane CH_4 .

V.4.2 Les réactions chimiques et photochimiques

On considère 69 espèces couplées par 874 réactions. En vue de comprendre la chimie de l'azote dans une enveloppe oxygénée, on a restreint l'étude aux molécules les plus simples détectées soit dans le milieu interstellaire, soit dans des enveloppes circumstellaires, et à celles dont on soupçonne la présence : les hydrures de carbone, d'oxygène d'azote et de soufre, les molécules formées à partir de deux parmi ces éléments lourds, avec éventuellement un ou plusieurs atomes d'hydrogène, et tous les ions correspondants. Les molécules plus complexes observées dans le milieu interstellaire et susceptibles d'être détectées dans des enveloppes oxygénées, ne sont pas introduites. La raison principale est que la chimie de ces espèces est loin d'être vraiment établie : elles sont certainement formées à partir des espèces simples considérées ici, et il faut donc en premier lieu bien comprendre la chimie de ces dernières.

Les réactions sont des ionisations et dissociations par les rayons cosmiques et les photons UV, et tous les types de réaction en phase gazeuse.

Le taux d'ionisation de l'hydrogène par les rayons cosmiques est choisi de façon standard à 10^{-17} s^{-1} (voir chapitre I) et on suppose qu'il n'est pas atténué à travers les couches successives de l'enveloppe.

La photodissociation et la photoionisation par les photons UV du champ de rayonnement galactique jouent un rôle crucial dans la chimie des enveloppes oxygénées en cassant les molécules "mères" CO, H₂O et N₂ qui contiennent les éléments chimiques lourds. Les taux de photodestruction dans un champ de rayonnement interstellaire standard, sont pris chez Van Dishoeck (1986) et Lee (1984) qui utilisent l'expression analytique du champ de rayonnement UV galactique de Draine (1978). Le taux de photodissociation de N₂ est incertain et nous avons adopté la valeur de $2.3 \cdot 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ donnée par Van Dishoeck (1986).

Lorsqu'il pénètre à travers l'enveloppe, le rayonnement UV est

atténué par les poussières et par les espèces moléculaires les plus abondantes. Une approximation à l'atténuation continue des poussières circumstellaires (voir Annexe D) dont les propriétés sont mal connues, est une fonction exponentielle $\exp(-d/r)$ où d est la longueur caractéristique requise pour obtenir une opacité unité dans la bande de longueur d'onde responsable de la photodestruction de l'espèce considérée (voir Glassgold *et al.* 1986, Mamon *et al.* 1987). La table VI.4 indique les taux de photodestruction et les distances d utilisées pour les espèces importantes.

Espèce	$k_{\text{dis}}(\text{s}^{-1})$	$k_{\text{ion}}(\text{s}^{-1})$	$d(10^{16}\text{cm})$
CO ⁽¹⁾	$1.4 \cdot 10^{-10}$		3.5
C		$3.2 \cdot 10^{-10}$	3.3
H ₂ O ⁽²⁾	$5.3 \cdot 10^{-10}$	$2.5 \cdot 10^{-11}$	2.8
OH	$2.8 \cdot 10^{-10}$	$1.2 \cdot 10^{-11}$	2.7
O ₂	$8.9 \cdot 10^{-10}$	$6.2 \cdot 10^{-12}$	2.3
N ₂	$2.3 \cdot 10^{-10}$		2.4
NH ₃	$1.5 \cdot 10^{-9}$	$1.5 \cdot 10^{-10}$	2.5
CH ₄	$1.1 \cdot 10^{-9}$	$9.9 \cdot 10^{-12}$	2.5
HCN	$1.5 \cdot 10^{-9}$		2.5
CN	$3.0 \cdot 10^{-10}$		2.5
NO	$3.2 \cdot 10^{-10}$	$2.0 \cdot 10^{-10}$	2.5

Table VI.4 Taux de photodestruction. Les distances d sont données pour $\dot{M} = 10^{-5} M_{\odot}/\text{an}$ et sont proportionnelles à \dot{M} . En plus de l'atténuation par les poussières, CO⁽¹⁾ absorbe dans ses raies et H₂O⁽²⁾ absorbe dans le continuum.

L'absorption continue par H_2O a également été introduite à cause de la forte abondance et de la grande section efficace d'absorption (Hudson 1971, Lee 1979) de cette molécule. On doit donc calculer l'opacité due à H_2O (voir Annexe D) : comme elle dépend en chaque point de la densité d'eau en tous les points extérieurs, on utilise une procédure itérative qui converge rapidement.

La self-absorption de CO (à travers ses raies discrètes) dans les enveloppes circumstellaires, a été discutée par Morris et Jura (1983b) dans le cadre de l'approximation de Sobolev (Voir Annexe D). Des spectres UV à haute résolution ont montré que CO se dissocie en absorbant des photons dans des états de Rydberg prédissociés : Letzelter *et al.* (1987a) identifient 38 bandes $v''v'$ issues du niveau fondamental $X^1\Sigma^+$ ($v'' = 0$) et conduisant à la dissociation de CO dans l'intervalle 912-1100 Å. Les forces d'oscillateur associées à ses bandes (Letzelter *et al.* 1987b) sont équivalentes à un taux total de photodissociation de $1.4 \cdot 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ dans un champ UV standard non atténué.

En fait chaque bande est composée de raies $J''v''-J'v'$ issues des niveaux de rotation J'' du niveau $X^1\Sigma^+$ ($v'' = 0$) fondamental et aboutissant dans les niveaux J' des états électroniques et vibrationnels excités. Dans chaque bande nous avons calculé les longueurs d'onde des raies de chaque branche P,Q,R ($\Delta J = J' - J'' = -1, 0, +1$) à partir des longueurs d'onde données par Letzelter *et al.* (1987a) et des constantes rotationnelles de Ogawa et Ogawa (1974). La force d'oscillateur d'une raie se déduit de celle de la bande à laquelle elle appartient et des facteurs de Höln-London (Schadee 1967). Lorsque l'état supérieur excité d'une bande est mal identifié (16 sur les 38 cités), on suppose qu'il s'agit d'un état Σ de constante rotationnelle 1.5 cm^{-1} .

En s'appuyant sur le formalisme de Morris et Jura (1983b) (Annexe D) et en considérant qu'à la température de 100-50 K typique des régions de formation moléculaire, seuls les huit premiers niveaux rotationnels de CO sont peuplés avec une température d'excitation supposée égale à la température cinétique, on calcule en tout point de l'enveloppe le taux de photodissociation de CO dans chaque raie d'absorption. Il faut là encore

utiliser une procédure itérative puisque l'opacité due à CO dépend de sa densité locale.

Les effets de la self-absorption de H_2 ont été en partie négligés car sa photodissociation ne se produit que très loin à l'extérieur de l'enveloppe de CO ($r \approx 10^{18}-10^{19}$ cm). Toutefois de nombreuses raies d'absorption de CO coïncident avec des raies des bandes de Lyman et de Werner de H_2 , d'autres avec des raies de Lyman de H : au total nous avons admis que 252 raies se trouvent bloquées par l'absorption de l'hydrogène et finalement 312 raies (l'équivalent de ≈ 18 bandes) participent à la dissociation de CO avec une absorption de H_2 négligeable.

Les réactions en phase gazeuse et les taux de réaction sont pris principalement chez Slavsky et Scalo (1984) et chez Viala (1986). Quelques réactions entre neutres avec des énergies d'activation importantes ($\approx 10^3-4$ K) ont été introduites et empruntées à Mitchell (1984). Elles peuvent jouer un rôle important dans les couches internes proches de R_0 : nous avons déjà mentionné par exemple les réactions d'abstraction d'hydrogène qui peuvent former CH_4 et NH_3 s'il existe des sources internes de carbone et d'azote.

La chimie dans les enveloppes oxygénées se construit à partir des chaînes de photodestruction $H_2O \rightarrow OH \rightarrow O$, $CO \rightarrow C \rightarrow C^+$ et $N_2 \rightarrow N$. Pour la chimie des espèces oxygénées on pourra se référer à Mamon *et al.* (1987) qui montrent notamment l'émergence de l'ion formyl HCO^+ (détecté dans OH 231.8+4.2, Morris *et al.* 1987) par réaction entre C^+ et H_2O , puis celle de l'ion moléculaire H_3O^+ par réaction entre HCO^+ et à nouveau H_2O . Du point de vue qui nous intéresse, la chimie de l'azote, il s'agit principalement d'une chimie radicalaire neutre (voir paragraphe suivant). La figure VI.4 montre l'ensemble des processus photochimiques qui comptent pour plus de 10% en un point de l'enveloppe dans la création ou la destruction de l'une ou l'autre espèce représentée.

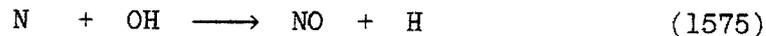
V.5 Abondances moléculaires

Les figures VI.5 représentent les abondances moléculaires calculées avec les hypothèses du modèle standard, en fonction de la distance à l'étoile centrale.

La photodissociation des molécules "mères" par le champ de rayonnement UV extérieur donne beaucoup d'importance à la première génération de molécules "filles" OH, O, N et C qui domine la chimie entre $r \approx 10^{16}$ et $r \approx 10^{17}$ cm. Ces espèces réagissent en effet rapidement les unes avec les autres pour former des espèces comme NO, O₂, CO₂ ou ensuite CN.

NO

Le radical NO se forme par la réaction



dont le taux a été mesuré à température du laboratoire ($\approx 300\text{K}$) sans mise en évidence d'une quelconque barrière d'activation (Howard et Smith 1980) : $k_{1575} = 2.6 \cdot 10^{-11} T^{0.17} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$. NO est l'espèce la plus prompte à profiter de la présence significative de N et OH dans les couches intermédiaires de l'enveloppe. Son abondance culmine à $\approx 3 \cdot 10^{-5}$ en $r \approx 3 \cdot 10^{16}$ cm, la photodissociation devenant alors efficace. C'est la molécule azotée la plus abondante prévue par le modèle. Néanmoins la présence toujours possible d'une petite barrière d'activation sur le chemin de la réaction 1575 (environ 100K) (voir Berthier *et al.* 1987), non détectable avec des mesures à température ambiante, peut ramener NO un ordre de grandeur plus bas à $\approx 10^{-6}$. Or, malgré son moment dipolaire électrique très faible (≈ 0.16 Debye), NO devrait être détectable avec le télescope de 30 mètres de l'IRAM si son abondance excède 10^{-6} dans les couches externes de l'enveloppe. Sa détection, ou sa non détection avec une limite supérieure, dans les enveloppes oxygénées classiques (IRC+10011, NML Tau, OH 231.8+4.2) serait un bon test. Des résultats préliminaires indiquent que NO n'est pas détecté dans OH231.8+4.2 (Forveille 1987).

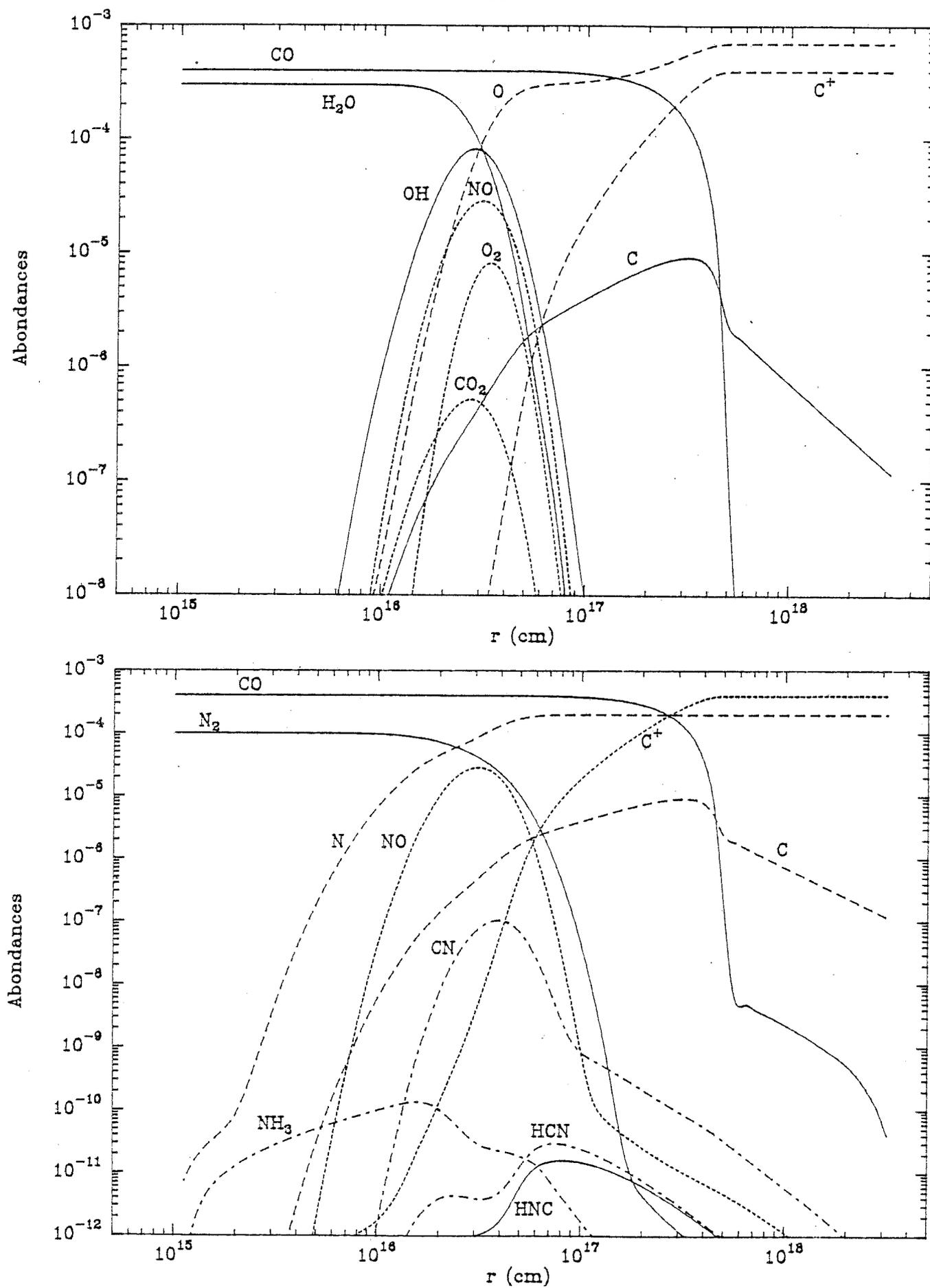
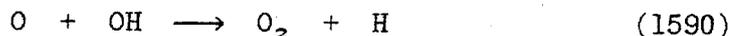


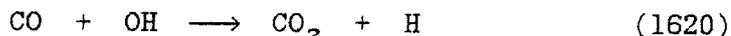
Figure VI.5. Abondances moléculaires dans le modèle standard.
 En haut les chaînes CO et H₂O, en bas CO et N₂.

O₂ et CO₂

Le radical OH forme également O₂ par réaction avec l'atome O



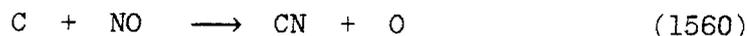
et CO₂ par réaction avec CO



Cette dernière réaction a un taux $k_{1620} = 2.2 \cdot 10^{-13} \exp(-80/T) \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ (Davis *et al.* 1974) et CO₂ n'est formé efficacement que dans les zones de gaz relativement chaud avec une forte présence de OH ; son abondance maximale est de $3 \cdot 10^{-7}$ en $r \approx 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}$.

CN

Contrairement à ce qui se passe dans les enveloppes carbonées, CN n'est pas le produit de la dissociation de HCN. Elle est pourtant une molécule importante entre 10^{16} et 10^{17} cm . Son principal processus de formation est la réaction entre NO déjà formé et le carbone atomique



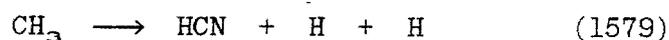
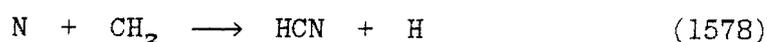
dont le taux $k_{1560} = 7.3 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ a été mesuré à température ambiante (Husain et Kirsch 1971) avec là encore aucune mise en évidence d'une barrière d'activation. L'expansion radiale de CN est limitée par la photodissociation. Son abondance pique à 10^{-7} en $r \approx 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}$ et se trouve fortement corrélée à celle de NO. Elle est de plus exposée aux mêmes incertitudes à savoir que même des faibles barrières d'activation dans la formation de NO ou/et de CN peut lui faire perdre un ou deux ordres de grandeur. Les valeurs calculées dans tous les modèles présentés ici sont en accord avec la limite supérieure de $2 \cdot 10^{-7}$ dans OH231.8+4.2 rapportée par Morris *et al.* (1987). Une recherche de CN dans les enveloppes oxygénées et sa corrélation avec l'émission de NO serait certainement intéressante et apporterait des informations importantes sur la chimie de ces espèces.

HCN (HNC) et NH₃

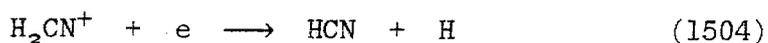
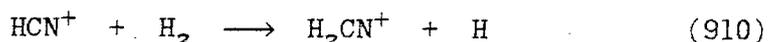
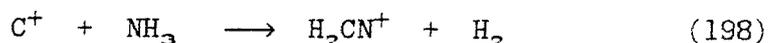
La surprise en regardant la figure VI.5 est l'extrême faiblesse ($\approx 10^{-11}$) de HCN lorsqu'on compare aux observations ($\approx 10^{-6}$). Il faut se rappeler néanmoins que HCN n'a pu être détecté dans toutes les sources. Une autre surprise est de constater la faible abondance ($\approx 10^{-10}$) de l'ammoniac quand on sait qu'elle pourrait être l'une des molécules azotées les plus abondantes dans certaines étoiles OH/IR (voir Morris *et al.* 1987 qui donnent $\text{NH}_3 \approx 10^{-6}$ dans OH 231.8+4.2)

Dans le modèle standard, NH_3 et les hydrides d'azote sont formés principalement par les réactions d'abstraction d'hydrogène $\text{N}(\text{H}_2) \rightarrow \text{NH}(\text{H}_2) \rightarrow \text{NH}_2(\text{H}_2) \rightarrow \text{NH}_3$ qui ont toutes des barrières d'activation importantes, ce qui explique la présence d'ammoniac uniquement dans les couches chaudes assez profondes de l'enveloppe (voir également Slavsky et Scalo 1984). Les réactions ioniques initiées par les rayons cosmiques (voir figure VI.4) ne jouent qu'un rôle mineur dans la formation de NH_3 contrairement à ce qui se passe dans le milieu interstellaire. L'extension spatiale de NH_3 est de plus limitée par une photodissociation assez forte de l'ordre de 10^{-9} s^{-1} .

A priori il existe deux possibilités pour former HCN. La première est une voie neutre



et la seconde une voie ionique



la dernière recombinaison (1504) se produisant avec un rapport de branchement supposé égal entre HCN et HNC (Leung *et al.* 1984). Les premiers processus neutres sont les plus efficaces (comparer HCN et HNC

dans la figure VI.5 : HNC ne se forme que par la recombinaison de H_2CN^+) ; néanmoins les réactions 1578 et 1579 qui avaient été proposées par Deguchi *et al.* (1986) pour former abondamment HCN, laissent celui-ci à un niveau très faible accentué par le fait que la dissociation de HCN est très forte $\approx 10^{-9} \text{ s}^{-1}$.

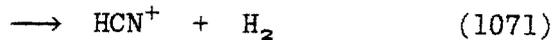
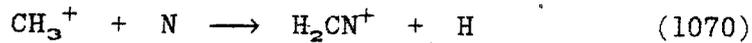
Ainsi la détection des deux espèces NH_3 et HCN est en contradiction avec les résultats du modèle standard et pose la question de savoir quelles sont les sources d'azote et de carbone qui sont à l'origine de leur formation, les molécules "mères" photodissociées ne suffisant pas d'une part, les calculs à l'équilibre thermodynamique les prévoyant bien en deçà de ce qui est observé d'autre part (Tsuji 1973).

Une première solution a été proposée par Morris *et al.* (1987) : la forte abondance d'ammoniac observée en radio et sa détection en IR (par McLaren et Betz dans IRC+10420) suggèrent qu'il existe une source interne d'azote atomique (UV, chocs, etc.) qui, par abstractions successives d'hydrogène, se convertirait instantanément en NH_3 pourvu que le rapport H/H_2 n'exécède pas quelques pourcent. Alors Morris *et al.* (1987) proposent que la voie ionique par H_2CN^+ avec un ammoniac abondant pourrait devenir efficace pour former HCN. La figure VI.6 montre un modèle identique au modèle standard mais avec une abondance d'ammoniac de 10^{-6} en R_0 . L'effet n'est pas celui espéré et si HCN et HNC sont augmentés dans les mêmes proportions (à cause du rapport de branchement unité) autour de $r \approx 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}$ qui est la zone d'intersection entre C^+ et NH_3 , cette hausse reste faible et le processus inefficace. Ceci s'explique fondamentalement par la trop faible présence de C^+ qui n'est formé que par l'ionisation de C et suit la dissociation difficile de CO à travers ses raies d'absorption (comparer l'extension de CO à celles de H_2O ou N_2 sur les figure VI.5), et par le taux de photodissociation élevé de NH_3 qui empêche son extension vers des couches plus périphériques de l'enveloppe.

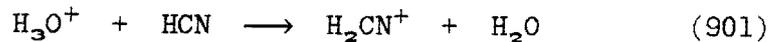
Ainsi du point de vue de HCN, il paraît difficile d'arracher de l'azote à NH_3 . Une autre possibilité est de se servir de l'azote "fille" atomique abondant assez profondément dans l'enveloppe ($\text{N} \approx 10^{-6}$ à $r = 10^{16} \text{ cm}$), et de le faire réagir avec, cette fois-ci, une source

interne de carbone (Nejad et Millar 1987). En effet, si des processus violents ont pu fournir une source interne d'azote atomique, ces mêmes processus alimentent certainement une source interne de carbone atomique qui, par les réactions d'abstractions d'hydrogène, se retrouve sous forme de méthane en R_0 .

La figure VI.7 montre un modèle identique au modèle standard mais dans lequel on a supposé, par analogie avec NH_3 , que l'abondance de CH_4 est déjà 10^{-6} en R_0 . Le résultat est spectaculaire puisque HCN se retrouve à $2 \cdot 10^{-8}$ en $r \approx 2 \cdot 10^{16}$ cm grâce une nouvelle fois à des réactions neutres : celles déjà mentionnées entre CH_3 et CH_2 , produits de la photodestruction de CH_4 , et l'azote atomique. La deuxième voie ionique par H_2CN^+ n'est cependant pas totalement inefficace car elle se trouve alimentée par



D'ailleurs comme dans le milieu interstellaire et dans les enveloppes carbonées, l'origine de HNC est ici la recombinaison électronique de H_2CN^+ qui donne une abondance de HNC de $2 \cdot 10^{-9}$ au maximum, compatible avec les limites supérieures reportées dans la table VI.2. Il faut remarquer que HCN étant formé par ailleurs, il y a une certaine conversion de HCN en HNC notamment par la réaction



et le rapport HCN/HNC est une limite supérieure du rapport de branchement de la recombinaison électronique de H_2CN^+ en HCN ou HNC.

Une autre conséquence de cette source de carbone est d'augmenter CN par une nouvelle réaction radicalaire neutre entre N et CH ; ainsi dans ce modèle, CN vaut $\approx 10^{-7}$ en $r \approx 3 \cdot 10^{16}$ cm.

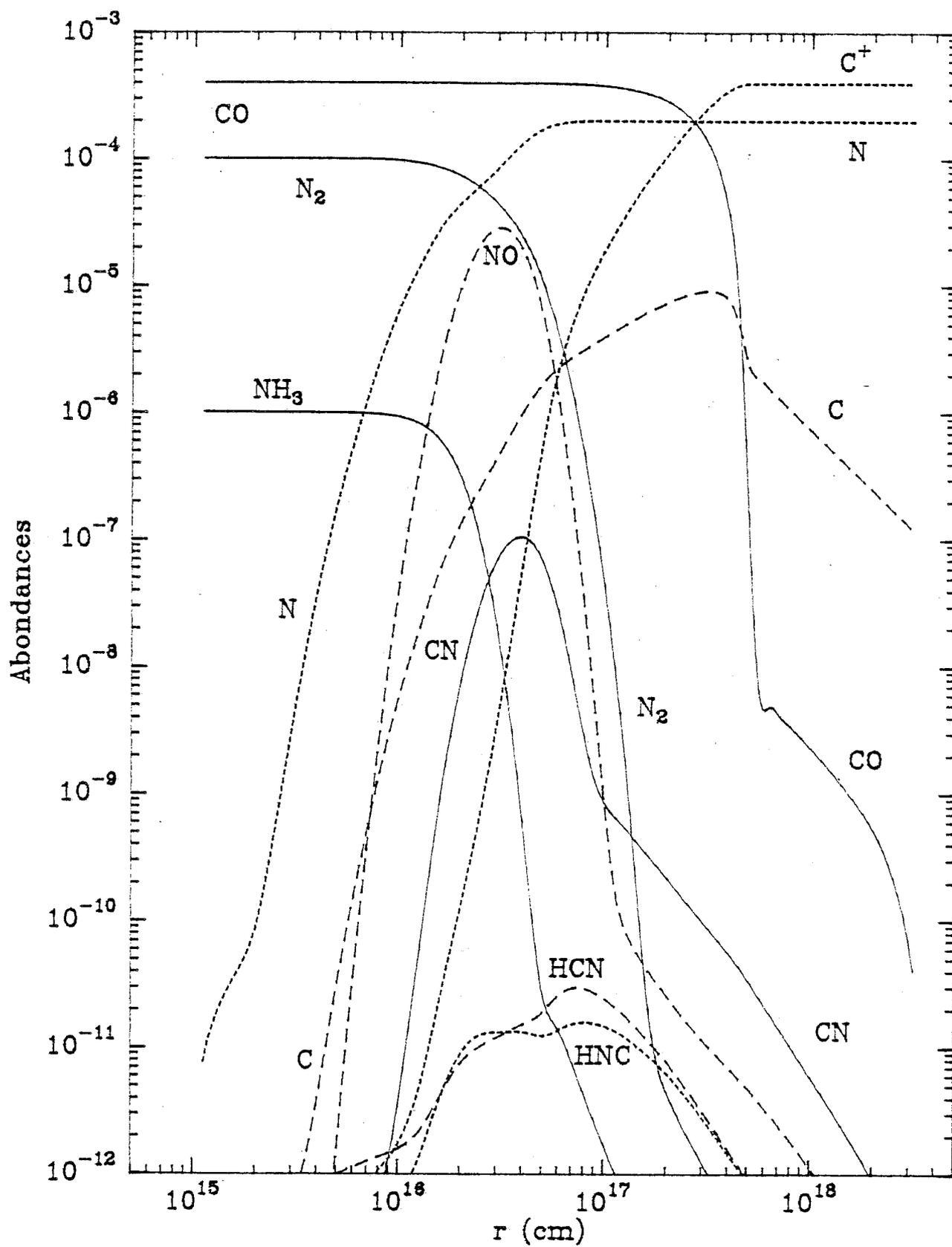


Figure VI.6 Abondances moléculaires dans un modèle avec $\text{NH}_3 = 10^{-6}$ en R_0 .

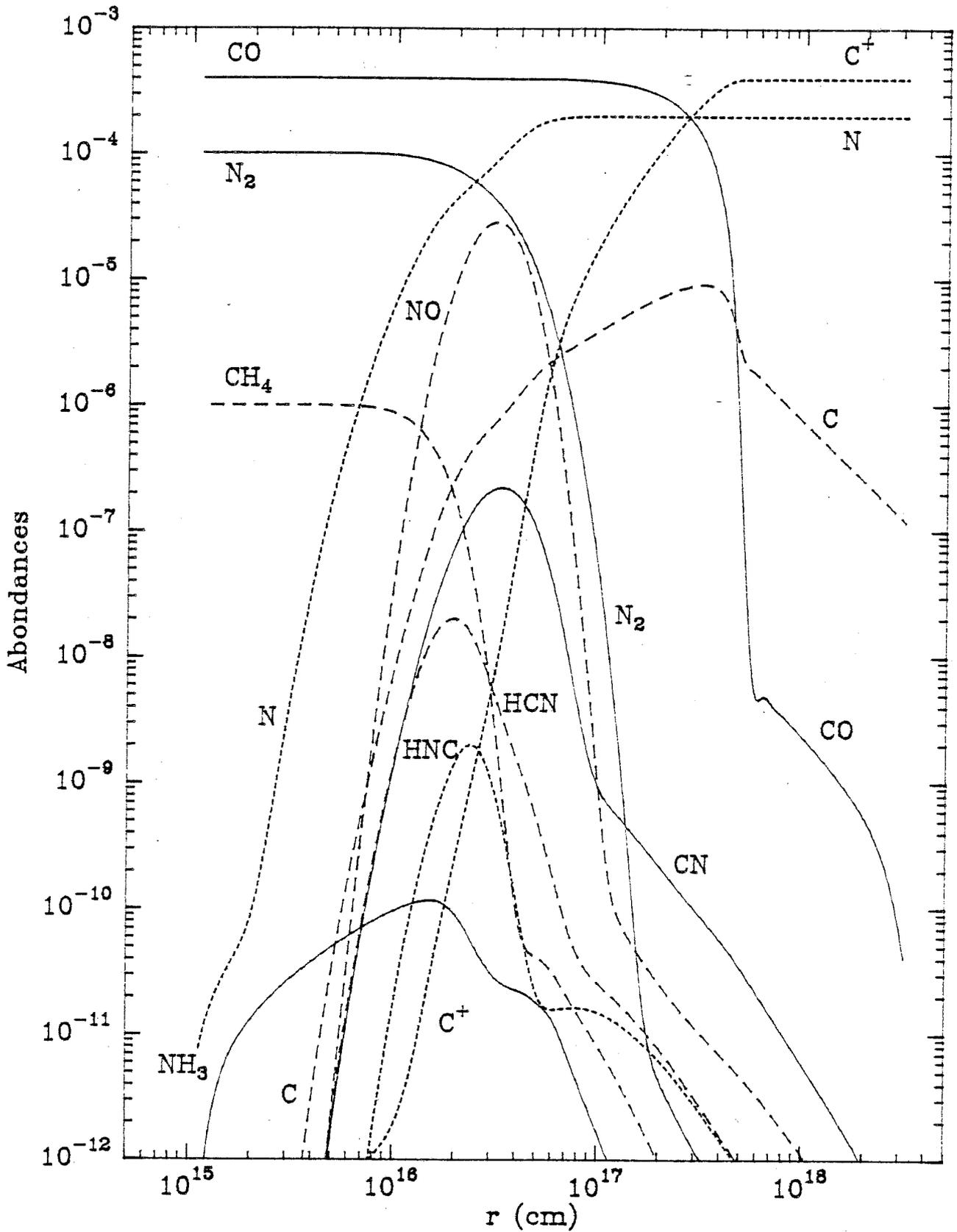


Figure VI.7 Abondances moléculaires dans un modèle avec $CH_4 = 10^{-6}$ en R_0 .

V.6 Conclusions et discussion

Les calculs de chimie dans une enveloppe oxygénée en expansion présentés ci-dessus, montrent que la formation des molécules est dominée largement par des réactions entre les espèces neutres O, OH, C et N qui entraînent la formation rapide et directe de O₂, CO₂, NO et CN. La présence des molécules NH₃ et HCN ne peut par contre s'expliquer qu'en invoquant des sources internes d'azote et de carbone sous forme directe d'ammoniac et de méthane. Les paramètres qui peuvent influencer sur les résultats sont :

- l'existence toujours possible de faibles énergies d'activation ($\approx 100\text{K}$) pour des réactions neutres dont les taux n'ont été mesurés qu'à température ambiante au laboratoire ($\approx 300\text{K}$). Ces énergies d'activation peuvent réduire considérablement l'abondance d'espèces comme NO ou CN (un ordre de grandeur au moins) ;
- l'incertitude sur la photodissociation de N₂. Nous avons choisi une valeur indiquée par Van Dishoeck (1986) mais si cette dissociation s'avère moins efficace, on perd en approvisionnement en azote atomique. En effet si l'on utilise le taux de $5.5 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ que Van Dishoeck (1986) présente comme limite inférieure, alors les abondances de NO, CN, HCN et HNC sont divisées par un facteur 3-4 ;
- l'abondance initiale de CH₄. Le choix de cette abondance entre $\approx 5 \cdot 10^{-7}$ et $\approx 3 \cdot 10^{-6}$ permet de reproduire les valeurs observées pour HCN dans les différentes sources, entre $5 \cdot 10^{-9}$ et $4 \cdot 10^{-8}$ (voir table VI.2) .

Si des observations d'absorption IR dans les bandes vibrationnelles de NH₃ dans VY CMa, IRC+10420 et VX Sgr (McLaren et Betz 1980) et des observations radio à 1.3 cm de NH₃ (dans OH 231.8+4.2, Morris *et al.* 1987) existent, allant dans le sens de l'existence d'une source interne d'azote

dans ces objets là, il faudrait avoir les mêmes éléments observationnels pour confirmer la présence d'une source interne de carbone. Il faudrait pour cela observer CH_4 dans l'une de ses bandes IR de vibration-rotation ν_2 , ν_3 ou ν_4 à 6.52, 3.31 et 7.66 μm , comme l'ont fait Clegg *et al.* (1982) dans IRC+10216 dans la bande ν_3 qui est la plus accessible à des observations au sol (Knacke *et al.* 1985), et corrélérer les détections éventuelles avec l'émission millimétrique de HCN.

On a vu auparavant l'importance des réactions neutres. En fait la seule espèce azotée qui soit principalement formée par des processus ion-neutres, est HNC. Le rapport d'abondance HCN/HNC est de l'ordre de 10 (figure VI.7) ce qui montre la différence d'efficacité entre les processus neutres et ioniques. Ce rapport est compatible avec ce qui est trouvé dans les nuages moléculaires (Goldsmith *et al.* 1981) ; il est seulement de l'ordre de 2 dans OH231.8+4.2 ; il est beaucoup plus élevé dans IRC+10216 (quelques 10^2), HCN étant là une molécule "mère" formée dans les couches profondes de l'enveloppe.

Lorsque la perte de masse augmente, l'atténuation des rayons UV destructeurs de H_2O , N_2 et CO augmente et les chaînes de photodestruction sont déplacées vers des rayons supérieurs. Ceci est illustré en figure VI.8 pour des pertes de masse de 10^{-6} , 10^{-5} et $10^{-4} M_\odot/\text{an}$. Les maxima d'abondance restent du même ordre mais sont déplacées selon r . Les zones d'émission moléculaire sont plus étroites à forte perte de masse.

Enfin une dernière remarque concerne le comportement des abondances moléculaires si le flux UV est augmenté par la présence possible d'une association d'étoiles chaudes dans le voisinage de l'enveloppe circumstellaire (voir NML Cyg, Morris et Jura 1983a). La figure VI.9 montre l'effet d'un flux multiplié par 5 sur les molécules azotées. Chaque molécule est 5 fois plus dissociée et on constate évidemment une hausse de l'abondance des molécules "filles" de bout de chaîne (C^+ , N, etc.) et un recul de toutes les autres molécules vers l'intérieur de l'enveloppe. C'est ce qui se passe pour NO qui perd au passage un facteur 2. CN et HNC restent stables en abondance car leur dissociation rehaussée est compensée par une augmentation de N, de CH et de CH_3^+ . HCN profite

pleinement de la hausse de N couplée à celle de CH_3 et CH_2 et gagne un facteur 2 en abondance.

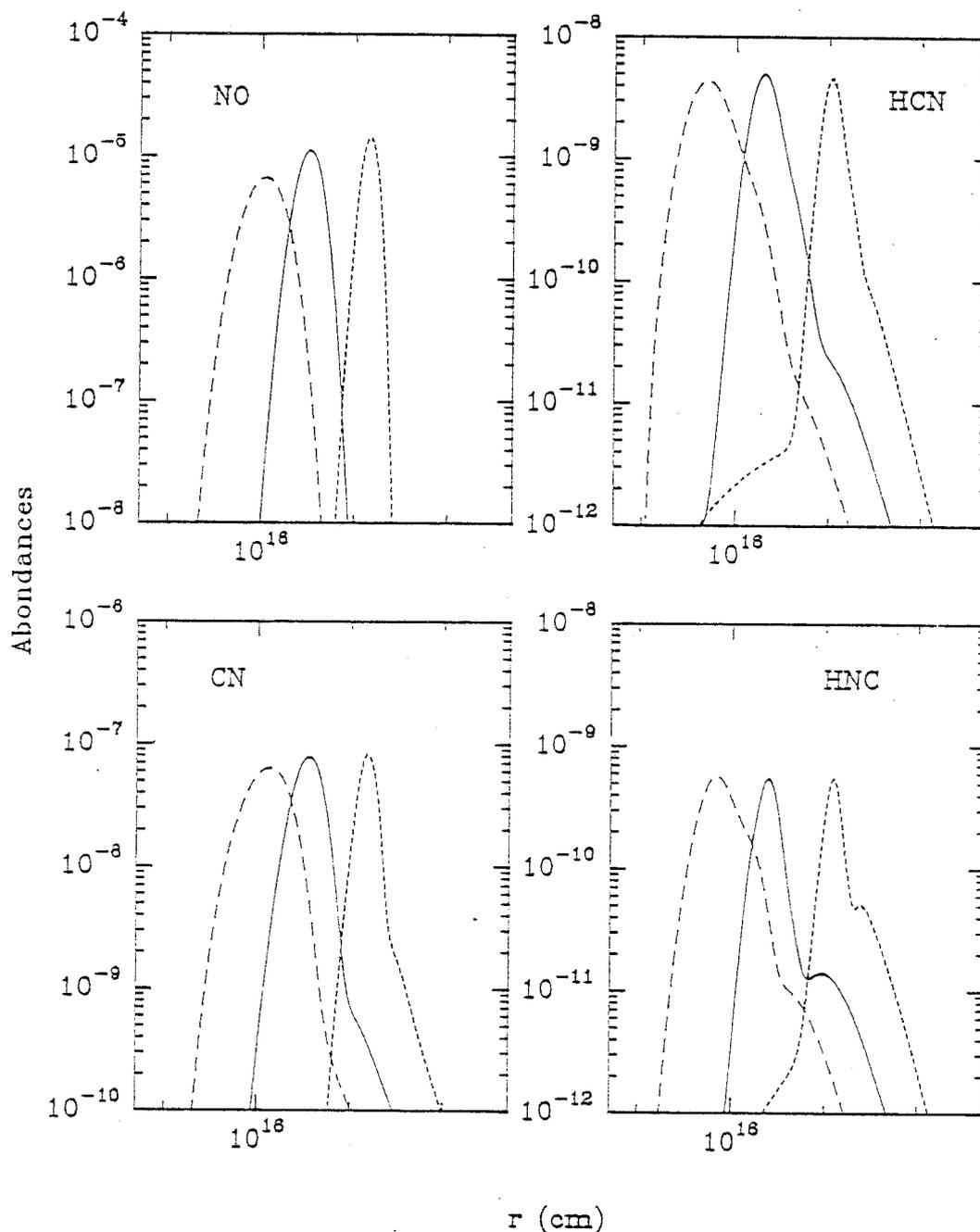


Figure VI.8 Effet d'un changement de taux de perte de masse sur les molécules azotées. (—) = $10^{-6} M_{\odot}/\text{an}$, (---) = $10^{-5} M_{\odot}/\text{an}$ (···) = $10^{-4} M_{\odot}/\text{an}$. Modèle avec $\text{CH}_4 = 10^{-6}$ en R_0 .

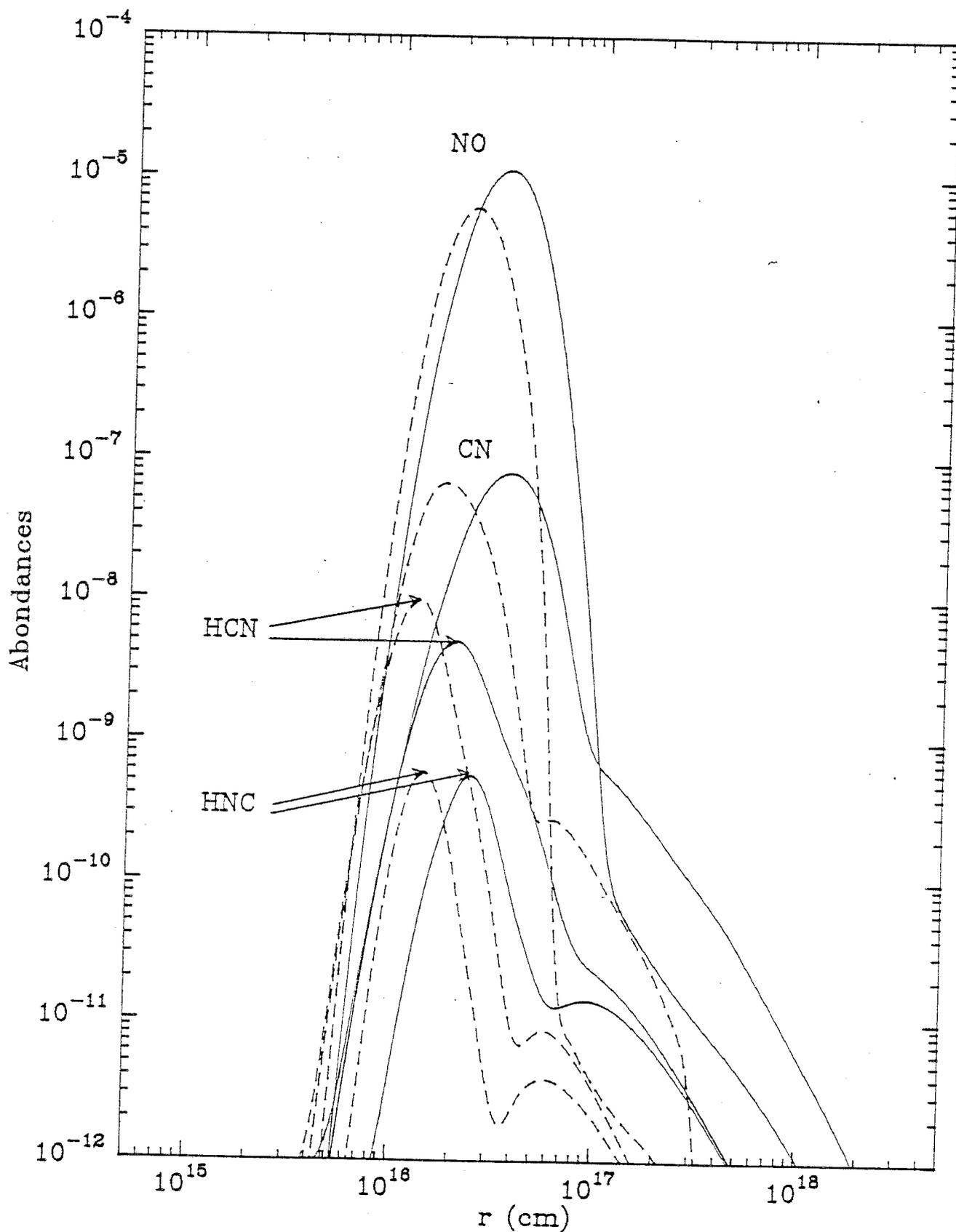


Figure VI.9 Effet d'un flux UV multiplié par 5 (—). Modèle avec $CH_4 = 10^{-6}$ en R_0 .

Références

- Berthier, G., Ellinger, Y., Pauzat, F. : 1987, *Colloque d'ATP-CNRS Obser. Grenoble*
- Bowers, P. F., Johnston, K. J., Spencer, J. H. : 1983, *Astrophys. J.* 274, 733
- Castor, J. I. : 1970, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 149, 111
- Clegg, R. E. S., Hinkle, K. H., Lambert, D. L. : 1982, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 201, 95
- Davis, D. D., Fisher, S., Schiff, R. : 1974, *J. Chem. Phys.* 61, 2213
- Deguchi, P. R., Goldsmith, P. F. : 1985, *Nature* 317, 336
- Deguchi, S., Clausen, M. J., Goldsmith, P. F. : 1986, *Astrophys. J.* 303, 810
- Draine, B. T. : 1978, *Astrophys. J. Supp. Series* 36, 595
- Dyck, H. M., Zuckerman, B., Leniert, C., Beckwith, S. : 1984, *Astrophys. J.* 287, 801
- Forveille, T. : 1987, Communication privée
- Glassgold, A. E., Lucas, R., Omont, A. : 1986, *Astron. Astrophys.* 157, 35
- Goldreich, P., Kwan, J. : 1974, *Astrophys. J.* 189, 441
- Goldreich, P., Scoville, N. Z. : 1976, *Astrophys. J.* 205, 144
- Goldsmith, P. F., Langer, W. D., Ellder, J., Irvine, W., Kollberg, E. : 1981, *Astrophys. J.* 249, 524
- Guilloteau, S., Lucas, R., Nguyen-Q-Rieu, Omont, A. : 1986, *Astron. Astrophys.* 165, L1
- Herman, J. : 1983, *The nature of OH/IR stars* Bengelsdijk Leiden B.V.
- Howard, M. J., Smith, I. W. N. : 1980, *Chem. Phys. Letters* 69, 40
- Hudson, R. D. : 1971, *Rev. Géophys. Space Phys.* 9, 305
- Husain, D., Kirsch, L. J. : 1971, *Trans. Faraday Soc.* 67, 2025
- Iben, I., Renzini, A. : 1983, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 21, 271
- Jewell, P. R., Snyder, L. E., Schenewerk, M. E. : 1986, *Nature* 323, 311
- Knacke, R. F., Geballe, T. R., Noll, K. R., Tokunaga, A. T. : 1985, *Astrophys. J.* 298, L67
- Knapp, G. R. : 1985, *Astrophys. J.* 293, 273
- Knapp, G. R., Morris, M. : 1985, *Astrophys. J.* 292, 640
- Knapp, G. R. : 1986, *Astrophys. J.* 311, 731

- Kuiper, T.B., Knapp, G.R., Knapp, S.L., Brown, R.L. : 1976, *Astrophys.J.* 204, 408
- Lee, L.C. : 1979, *J.Chem.Phys.* 72, 4334
- Lee, L.C. : 1984, *Astrophys.J.* 282, 172
- Letzelter, C., Eidelsberg, M., Rostas, F., Breton, J., Thieblemont, B. : 1987a
sous presse dans *Chem.Phys.*
- Letzelter, C., Viala, Y.P., Rostas, M., Eidelsberg, M. : 1987b soumis à *Astron.Astrophys.*
- Lucas, R., Omont, A., Guilloteau, S., Nguyen-Q-Rieu : 1986, *Astron.Astrophys.* 154, L12
- Mamon, G.A., Glassgold, A.E., Omont, A. : 1987 preprint
- McLaren, R.A., Betz, A.L. : 1980, *Astrophys.J.* 240, L159
- Mitchell, G.F. : 1984, *Astrophys.J.* 54, 81
- Morris, M. : 1975, *Astrophys.J.* 197, 603
- Morris, M., Jura, M. : 1983a, *Astrophys.J.* 267, 179
- Morris, M., Jura, M. : 1983b *Astrophys.J.* 264, 546
- Morris, M. : 1985, dans *Mass loss from Red Giants* eds M.Morris et
B.Zuckerman (Dordrecht : Reidel) p129
- Morris, M., Lucas, R., Omont, A. : 1985, *Astron.Astrophys.* 142, 107
- Morris, M., Guilloteau, S., Lucas, R., Omont, A. : 1987, sous presse dans *Astrophys.J.*
- Mufson, S.L., Liszt, H.S. : 1975, *Astrophys.J.* 202, 183
- Nejad, L.A.M., Millar, T.J., Freeman, A. : 1984, *Astron.Astrophys.* 134, 129
- Nejad, L.A.M., Millar, T.J. : 1987, Preprint
- Ogawa, S., Ogawa, M. : 1974, *Journal of Molecular Spectroscopy* 49, 454
- Olofsson, H., Johansson, L.E., Hjalmarsen, A., Nguyen-Q-Rieu : 1982, *A&A.* 107, 128
- Omont, A. : 1985, dans *Mass loss from Red Giants* eds M.Morris et
B.Zuckerman (Dordrecht : Reidel) p269
- Omont, A., Lucas, R., Morris, M., Cernicharo, J., Utika, : 1987, en préparation
- Scalo, J.M., Slavsky, D.B. : 1980, *Astrophys.J.* 293, L73
- Schadde, A. : 1967, *J.Quant.Spectrosc.Radiat.Transfer.* 7, 169
- Slavsky, D.B., Scalo, J.M. : 1984, Preprint
- Snyder, L.E., Buhl, D. : 1975, *Astrophys.J.* 197, 329

Spencer, J.H., Johnston, K.J., Moran, J.M., Reid, M.J., Walter, R.C. : 1979, *ApJ* 230, 449

Tsuji, T. : 1973, *Astron. Astrophys.* 23, 411

Van Dishoeck, E.F. : 1986, dans *Astrochemistry* eds M.S.Vardya et S.P.Taradfar p51

Viala, Y.P. : 1986, *Astron. Astrophys. Supp. Series* 64, 391

Zuckerman, B. : 1980, *Astron. J.* 86, 1

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Décrire théoriquement l'activité chimique complexe du milieu interstellaire et calculer les abondances moléculaires qui en découlent, est un des aspects d'une étude globale d'un milieu qui présente des conditions physiques totalement étrangères aux possibilités terrestres. Nous avons souligné au cours du premier chapitre à quel point les conditions physiques du milieu interstellaire peuvent être diverses.

La difficulté du problème réside fondamentalement dans la complexité intrinsèque du milieu à modéliser. Par exemple, les nuages moléculaires qui nous ont intéressés, sont un mélange de gaz dilué et froid et de fines poussières auxquels il semble qu'il faut même rajouter une composante nouvelle intermédiaire : les agrégats de 20 à 100 atomes, probablement des molécules polycycliques, mis en évidence par leur spectre infrarouge proche autour de $10 \mu\text{m}$. Le gaz est assez froid : $20 < T < 50 \text{ K}$, la masse des nuages de quelques dizaines ou centaines de masses solaires. Ils sont agités de mouvements aléatoires supersoniques ($\approx 1 \text{ km/s}$) et contiennent des coeurs denses très froids ($\approx 10\text{--}15 \text{ K}$). La matière des nuages moléculaires se fragmente et tout progrès sur l'histoire et l'évolution de la galaxie passe par le problème de la formation des étoiles qui est d'une complexité très supérieure à ceux de la physique de laboratoire et ne peut être abordé directement d'un point de vue théorique. La modélisation sur des points particuliers se fait en partant des données observationnelles, le problème global étant temporairement abandonné.

Ainsi la partie essentielle de cette thèse est décrite dans le chapitre II : c'est l'écriture et la mise au point d'un code informatique qui résout les équations cinétiques de la chimie, couplées au calcul des taux de photodestruction des espèces moléculaires exposées au champ de rayonnement UV interstellaire. Le gaz absorbant lui-même une partie de ce rayonnement, la résolution doit se faire de façon self-consistante.

Le code est entièrement automatique : à partir d'une table de réactions photo-chimiques et d'une sélection des espèces indiquée par l'utilisateur, il écrit le système d'équations non linéaires qu'il lui faudra ensuite résoudre.

Dans le cas des nuages interstellaires où l'hypothèse d'équilibre chimique a été adoptée, ce système d'équations est un système algébrique. Il est couplé à une équation de transfert de rayonnement qui tient compte à la fois de l'absorption et de la diffusion par les poussières, et de l'absorption par le gaz. Cette dernière équation est résolue dans une géométrie plan-parallèle et avec l'approximation d'une diffusion entièrement vers l'avant. Le calcul est effectué en chaque point d'une grille en profondeur optique qui permet finalement le calcul de colonnes densités directement comparables aux observations.

Dans le cas des enveloppes circumstellaires en expansion, on se place dans un formalisme Lagrangien dans lequel on suit un globule de matière au cours de son périple : le système d'équations est un système différentiel. Ce système est toujours couplé au calcul des taux de photodestruction qui s'effectue en tenant compte de l'opacité continue des poussières et du gaz, et de celle dans les raies d'absorption de certaines espèces (CO) en utilisant l'approximation et le formalisme de Sobolev.

L'utilisation de ce code numérique, ainsi que des observations millimétriques effectuées sur POM-1 à l'Observatoire de Bordeaux et sur l'antenne de 30 mètres de l'IRAM à Pico Veleta en Espagne, ont permis :

- d'étudier la corrélation $^{13}\text{CO}/A_V$ dans deux nuages sombres (L1506 et L1529) du complexe du Taureau et de discuter les variations d'abondance des isotopes de CO à travers toute la région Taureau-Persée, en termes de conditions physiques et d'effets photochimiques (fractionnement, photodissociation sélective, rapports isotopiques, etc.) ;
- de modéliser le nuage moléculaire qui se trouve sur la ligne de visée de l'étoile HD 29647 dans Heiles Cloud 2 (Taureau). C'est un nuage intermédiaire entre le milieu diffus et les nuages moléculaires denses. Pour reproduire les observations moléculaires existantes, il a été nécessaire de dépléter modérément les éléments lourds (C, N, O) et fortement les métaux ; un taux d'ionisation par les rayons cosmiques multiplié par un facteur 5

s'est également avéré indispensable. Le modèle fait des prédictions pour l'abondance de nombreuses molécules mais demande à être contraint par des observations complémentaires ;

- d'étudier la chimie de l'azote dans les enveloppes circumstellaires oxygénées sur la base de nouvelles détections de HCN dans des étoiles OH/IR géantes ou supergéantes. Des molécules "mères" injectées à la base de l'enveloppe sont photodissociées par le champ de rayonnement interstellaire extérieur et les réactions entre radicaux neutres déterminent la composition chimique de l'enveloppe. On trouve que NO et CN pourraient être produits efficacement de cette façon dans les couches intermédiaires. On trouve également que la présence de HCN et NH_3 ne peut être reproduite que s'il existe des sources de carbone et d'azote autres que CO et N_2 , probablement du méthane et de l'ammoniac en quantités bien supérieures à ce que prévoient les calculs de chimie à l'équilibre thermodynamique.

Il faut garder à l'esprit que ce genre de calculs nécessite la compilation d'une quantité élevée de données moléculaires, chimiques ou photochimiques. Les connaissances progressent nettement dans ces domaines (voir la dissociation de CO par exemple) mais une fraction importante reste malheureusement encore inconnue malgré les efforts pluridisciplinaires intenses de ces dernières années. Les sections efficaces d'absorption et de dissociation par le rayonnement UV sont particulièrement critiques car les photoprocessus sont un mode majeur de destruction des molécules. Les constantes de réaction et notamment leur variation avec la température, influencent les abondances moléculaires. Par exemple des théories récentes confirmées par des mesures en laboratoire, ont montré que les réactions entre un ion et une molécule polaire ont tendance à être plus rapides à basse température qu'à température ambiante : les taux de Langevin sont alors souvent caducs dans de telles conditions. Nous avons vu au chapitre IV que ces effets provoquent d'une manière générale une diminution sensible des abondances des molécules polaires dans les nuages moléculaires denses et froids.

Le travail présenté peut se développer tant du point de vue observationnel que du point de vue numérique :

- l'utilisation de nouveaux moyens observationnels, dans le domaine millimétriques avec une résolution grandissante (grandes antennes, interféromètre IRAM), et dans les domaines infrarouge et submillimétrique, rendra possible l'observation de nombreuses molécules comme par exemple des hydrures, certains ions importants pour la chimie (H_3^+ , C^+) ou la molécule d'eau qui joue un grand rôle dans la thermodynamique du gaz moléculaire dense et qui est malheureusement, pour des raisons évidentes, très difficiles à observer depuis le sol. Ces mesures nouvelles apporteront plus de contraintes aux modèles de chimie qui devront alors se raffiner.
- un certain nombre d'améliorations au programme de chimie sont d'ores et déjà envisagées : calculer les populations des niveaux rotationnels de molécules comme H_2 ou C_2 (sous les effets conjugués des réactions chimiques, des collisions et du pompage UV), introduire un modèle thermodynamique qui calcule de façon self-consistante le profil de température ; à plus long terme, prévoir le calcul du transfert de rayonnement dans d'autres géométries et pour d'autres fonctions de phase de diffusion de la lumière par les grains ; enfin introduire un modèle dynamique, d'effondrement gravitationnel par exemple, les interactions grains-gaz, agrégats-gaz et l'évolution chimique.

En superposant les progrès indissociables des techniques d'observation et des modèles d'interprétation, avec les raffinements des modèles théoriques, la découverte du milieu interstellaire est certainement amenée à connaître des développements difficiles encore à imaginer à l'heure actuelle.

ANNEXES

ANNEXE A : Dissociation dans les raies d'absorption. Profil de raie.

Certaines molécules comme H_2 , HD ou CO se photodissocient dans leurs raies discrètes d'absorption entre niveaux électroniques; pour d'autres comme OH ou O_2 , ces processus à deux photons peuvent s'ajouter à une photodissociation par un continuum. En terme de force d'oscillateur f_i , la section efficace d'absorption dans une raie est donnée par :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(\nu) d\nu = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_i \quad (A1)$$

(les symboles m_e , c , e et ν ont la signification habituelle). Sous les effets combinés des élargissements Doppler et naturel, la section efficace d'absorption s'écrit :

$$\sigma(\nu) = \sigma_0 H(a, \nu) \quad (A2)$$

où

$$H(a, \nu) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2)}{a^2 + (\nu-t)^2} dt \quad (A3)$$

est une fonction de Voigt, convolution des fonctions de Gauss et de Lorentz, et ν est la fréquence relative au centre de la raie ν_0 , en unité de largeur Doppler à mi-hauteur

$$\nu = \frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D} (\text{Log}2)^{1/2} \quad (A4)$$

Le paramètre α_D est défini par

$$\alpha_D = \frac{\nu_0}{c} \left[\frac{2kT}{M} (\text{Log}2)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (A5)$$

où M est la masse moléculaire et T la température cinétique. Cette expression est adéquate pour un élargissement strictement thermique ; si de la turbulence Gaussienne est introduite (Black et Dalgarno 1977), alors :

$$\alpha_D = 3.5825 \times 10^{-7} \nu_0 \sqrt{(T/M) + 40.4(\delta V)^2} \quad (A6)$$

où M est mesurée en unité de masse atomique et v_0 en Hz. La largeur totale à mi-hauteur de la distribution de vitesse, δv en kms^{-1} , est reliée au paramètre Doppler b_D conventionnel (la dispersion rms) par :

$$b_D = \frac{\delta v}{2(\text{Log}2)^{1/2}} = 0.6006 \delta v \quad (\text{A7})$$

Le paramètre a dans l'équation (A3) est le rapport de la largeur naturelle à la largeur Doppler

$$a = (\text{Log}2)^{1/2} \frac{\alpha_L}{\alpha_D} \quad (\text{A8})$$

où $\alpha_L = A_i^*/4\pi$, A_i^* étant la probabilité totale de transition radiative du niveau supérieur de la raie vers tous les états possibles inférieurs. La fonction de Voigt ainsi définie est normalisée à

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H(a, v) da = \pi^{1/2}$$

et le profil de la raie $\Phi(\lambda)$ est défini par

$$\Phi(\lambda) = \pi^{1/2} H(a, v)$$

Le taux de photodestruction dans une raie d'absorption s'écrit

$$k_i = p_i \frac{\pi e^2}{m_e c^2} f_i \int_{\text{Raie}} J(r, \lambda) \Phi(\lambda) \lambda d\lambda$$

où p_i est la probabilité de désexcitation vers un continuum inférieur, et $J(v)$ l'intensité spécifique moyenne du rayonnement à la fréquence v .

Pour chaque raie, il est nécessaire d'utiliser une grille de fréquence centrée sur la raie et qui s'étend jusqu'à $\approx 10^3$ largeurs Doppler : en effet, l'auto-absorption est si importante que les raies deviennent rapidement opaques et saturées, de sorte que la dissociation a lieu principalement dans les ailes de la raie (on traite également le problème du recouvrement des raies en calculant à chaque fréquence l'absorption dues aux raies adjacentes).

Référence

ANNEXE B : Transfert de rayonnement

On considère un nuage interstellaire exposé à un champ de rayonnement UV isotrope et homogène. On cherche à établir une expression analytique de l'intensité spécifique moyenne du rayonnement en tout point du nuage, en résolvant l'équation de transfert qui contrôle la pénétration des photons UV à l'intérieur du nuage. Pour simplifier l'écriture, la dépendance en longueur d'onde est implicite dans l'équation de transfert suivante :

$$\mu \frac{\partial I(r, \mu)}{\partial r} + \frac{m}{2} \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial I(r, \mu)}{\partial \mu} = - \left[k^g(r) + k^e(r) \right] I(r, \mu) + \frac{\omega k^e(r)}{2} \int_{-1}^{+1} I(r, \mu) p(\mu, \mu') d\mu' \quad (B1)$$

$I(r, \mu)$ est l'intensité spécifique du rayonnement en r dans une direction μ , k^g et k^e sont respectivement les coefficients d'absorption par le gaz et d'extinction par les poussières en cm^{-1} , ω est l'albédo des poussières $0 \leq \omega \leq 1$ (la fraction de lumière qui est réellement absorbée est $1-\omega$), et $p(\mu, \mu')$ est la fonction de phase normalisée de redistribution de la lumière diffusée par les poussières entre les directions μ et μ' :

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} p(\mu, \mu') d\mu' = 1 \quad (B2)$$

Hypothèses : (1) le nuage possède la géométrie plan parallèle $\Rightarrow m = 0$
 (2) les grains de poussière diffusent la lumière vers l'avant strictement, ce qui signifie qu'on choisit une fonction de phase : $p(\mu, \mu') = 2 \delta(\mu, \mu')$ δ = distribution de Dirac

Ainsi l'équation (B1) se simplifie :

$$\mu \frac{\partial I(r, \mu)}{\partial r} = - \left[k^g(r) + (1 - \omega) k^e(r) \right] I(r, \mu) \quad (B3)$$

Soit $\tau_\lambda(r)$ l'opacité à la longueur d'onde λ et au point r définie par :

$$\tau_\lambda(r) = \int_0^r \left[k^g(r') + (1 - \omega) k^e(r') \right] dr' \quad (B4)$$

L'équation (B3) peut se réécrire alors :

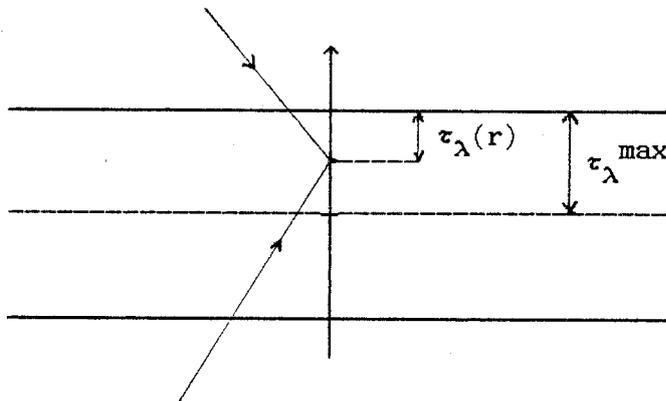
$$\frac{dI(r, \mu)}{I(r, \mu)} = - \frac{d\tau_\lambda}{\mu} \quad (B5)$$

et a pour solution

$$I_\lambda(r, \mu) = A \exp \left[- \frac{\tau_\lambda(r)}{\mu} \right] \quad (B6)$$

où A est une constante d'intégration liée aux conditions limites. La quantité utile qui intervient dans le calcul des taux de photodestruction est l'intensité spécifique moyenne définie par

$$J_\lambda(r) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} I_\lambda(r, \mu) d\mu \quad (B7)$$



Dans les conditions de symétrie d'un plan parallèle limité, c'est la même constante A qui permet d'écrire

$$\begin{aligned} \text{si } \mu > 0 & \longrightarrow I_{\lambda}(r, \mu) = A \exp \left[-\frac{\tau_{\lambda}}{\mu} \right] \\ \text{si } \mu < 0 & \longrightarrow I_{\lambda}(r, \mu) = A \exp \left[-\frac{2\tau_{\lambda}^{\max} - \tau_{\lambda}}{|\mu|} \right] \end{aligned} \quad (\text{B8})$$

et ainsi

$$J_{\lambda}(r) = \frac{A}{2} \left\{ \int_0^1 e^{-\tau_{\lambda}/\mu} d\mu + \int_0^1 e^{-(2\tau_{\lambda}^{\max} - \tau_{\lambda})/\mu} d\mu \right\} \quad (\text{B9})$$

c'est à dire

$$J_{\lambda}(r) = \frac{A}{2} \left\{ E_2(2\tau_{\lambda}^{\max} - \tau_{\lambda}) + E_2(\tau_{\lambda}) \right\} \quad (\text{B10})$$

où E_2 est la fonction exponentielle intégrale de rang 2. Une condition limite est que l'on doit retrouver la moitié de l'intensité spécifique moyenne du rayonnement incident $J_0(\lambda)$ au bord d'un nuage plan infini. Alors la solution analytique que l'on cherche est :

$$J_{\lambda}(r) = \frac{1}{2} J_0(\lambda) \left\{ E_2(2\tau_{\lambda}^{\max} - \tau_{\lambda}) + E_2(\tau_{\lambda}) \right\} \quad (\text{B11})$$

Calcul de $\tau_\lambda(r)$:

Le coefficient d'extinction des poussières qui intervient dans la définition de $\tau_\lambda(r)$ (équation B4), est relié au coefficient d'extinction $k_v(r)$ dans le visible par

$$k_\lambda^e(r) = k_v(r) \left\{ 1 + \frac{1}{R} \frac{E(\lambda-V)}{E(B-V)} \right\}$$

avec

$$\frac{k_v(r)}{n_H(r)} = \frac{\tau_v^{\text{tot}}}{N_H} = \frac{A_v}{1.086 N_H} = \frac{R}{1.086} \frac{E(B-V)}{N_H} = \text{constante}$$

$E(\lambda-V)/E(B-V)$ est la courbe d'extinction du nuage (voir Mathis *et al.* 1983), $n_H(r)$ est son profil de densité en cm^{-3} , N_H est la colonne densité totale d'hydrogène en cm^{-2} sur une ligne de visée normale, τ_v^{tot} est la profondeur optique totale, A_v l'extinction visuelle en magnitude, $R \equiv A_v/E(B-V)$ est le rapport constant (≈ 3) entre l'extinction totale et l'extinction selective, enfin $E(B-V)/N_H$ représente le rapport poussière/gaz du nuage et vaut $\approx 5.8 \cdot 10^{21} \text{ mag}^{-1} \text{cm}^{-2}$ (Bohlin *et al.* 1978). Ainsi,

$$\int_0^r k_\lambda^e(r') dr' = \left\{ 1 + \frac{1}{R} \frac{E(\lambda-V)}{E(B-V)} \right\} \frac{A_v}{1.086 N_H} N_H(r)$$

La profondeur optique est définie par $d\tau = k_v dr$; on voit qu'il apparait alors plus naturel de travailler directement avec une grille en profondeur optique τ plutôt qu'une grille en distance r réelle :

$$\tau(r) = \frac{A_v}{1.086 N_H} N_H(r)$$

et

$$\int_0^r k_\lambda^e(r') dr' = \left\{ 1 + \frac{1}{R} \frac{E(\lambda-V)}{E(B-V)} \right\} \tau(r)$$

Pour le gaz, soit σ_i la section efficace d'absorption de l'espèce i , n_i sa densité et x_i son abondance relative à l'hydrogène. Le premier terme de l'équation (B4) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \int_0^r k_{\lambda}^g(r') dr' &= \sum_i \sigma_i(\lambda) \int_0^r n_i(r') dr' \\ &= \sum_i \sigma_i(\lambda) \int_0^r x_i(r') n_H(r') dr' \\ &= \frac{N_H}{\tau_v \text{tot}} \sum_i \sigma_i(\lambda) \int_0^{\tau} x_i(\tau') d\tau' \end{aligned}$$

Finalement, l'opacité τ_{λ} à la longueur d'onde λ et en chaque point de la grille en profondeur optique $\tau(r)$ se calcule par :

$$\tau_{\lambda} = (1-\omega) \left\{ 1 + \frac{1}{R} \frac{E(\lambda-V)}{E(B-V)} \right\} \tau + \sum_i \sigma_i(\lambda) N_i(\tau)$$

où

$$N_i(\tau) = \frac{1.086 N_H}{A_V} \int_0^{\tau} x_i(\tau') d\tau'$$

est la colonne densité de l'espèce i entre le bord du nuage et le point τ .

L'utilisation d'une fonction de phase de Dirac surestime l'intensité du rayonnement quand la profondeur optique augmente. Pour compenser partiellement cet effet, on utilise un albédo effectif (Viala 1986) relié à l'albédo réel par :

$$1 - \omega_{\text{eff}}(\lambda) = \sqrt{1 - \omega(\lambda)}$$

Références

Bohlin, R.C., Savage, B.D., Drake, J.F. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 132

Mathis, J.S., Metzger, P.G., Panagia, N. : 1983, *Astron.Astrophys.* 128, 212

Viala, Y.P. : 1986, *Astron.Astrophys.Supp.Series* 64, 391

ANNEXE C : Transition hydrogène atomique - hydrogène moléculaire

Cette annexe est une illustration de la distinction qui peut être faite entre le milieu interstellaire diffus et les nuages moléculaires. Elle reprend une discussion de Viala (1986) qui insiste sur l'importance que peut prendre le traitement du transfert de rayonnement dans les calculs qui tentent de délimiter la zone de transition entre le milieu neutre atomique HI et le milieu moléculaire H₂.

Le satellite Copernicus a permis la détection de l'hydrogène moléculaire en absorption devant l'émission continue d'étoiles brillantes, dans un nombre important de ses raies UV des bandes de Lyman et de Werner. Ceci montre que H₂ est présent dans les nuages diffus. Savage *et al.* (1977), puis Bohlin *et al.* (1978, 1983) ont analysé de nombreuses lignes de visée stellaires, et ont pu mesurer des colonnes densités d'hydrogène moléculaire. Dans ces mêmes régions, des observations en absorption dans la raie de recombinaison Lyman α , ont permis à Bohlin *et al.* (1978) de mesurer les colonnes densités d'hydrogène atomique. La comparaison entre $N(\text{H}_2)$ et N_{H} (colonne densité totale d'hydrogène) montre que la transition atomique - moléculaire se produit très brutalement dans les nuages diffus : la fraction $f = 2 N(\text{H}_2)/N_{\text{H}}$ présente en effet une transition très étroite autour de $N_{\text{H}} \approx 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$, entre des faibles valeurs de f ($\approx 10^{-5} - 10^{-4}$) et des fortes valeurs de f ($\approx 10^{-2} - 10^{-1}$).

Dans les modèles de chimie présentés dans cette thèse, l'abondance de H₂ a été déterminée par un équilibre entre sa formation à la surface des grains et sa photodissociation par les photons UV de l'environnement (Hollenbach, Werner et Salpeter 1971). Or, grâce à un mode de dissociation discret à deux photons à travers ses raies d'absorption, la molécule H₂ se protège très efficacement du rayonnement et devient rapidement abondante au fur et à mesure que la profondeur optique augmente. Ainsi, la façon dont les modèles traitent le problème du transfert de rayonnement dans les raies d'absorption de H₂, est cruciale pour déterminer la zone de transition HI/H₂.

Federman, Glassgold et Kwan (1979) ont construit un modèle pour calculer les variations de H et H₂ dans les nuages diffus en fonction de la profondeur optique. Ils ont défini l'épaisseur de la zone de transition, dans laquelle H est converti en H₂, par $N_{tr} = 2 N^*$, où N^* est la colonne densité totale d'hydrogène pour laquelle la fraction f vaut 0.1 (le facteur 2 prend en compte les deux faces d'un nuage plan parallèle d'épaisseur finie). Le taux de photodissociation de H₂ dans chaque raie de la bande de Lyman est calculé en supposant implicitement que le champ de rayonnement est atténué en $\exp(-\tau_\nu)$, où $\tau_\nu = N(H_2) \times (\pi e^2 / m_e c) f_i \Phi(\nu)$ est l'opacité à la fréquence ν le long d'un rayon normal à la surface du nuage (f_i = force d'oscillateur de la transition, $\Phi(\nu)$ = profil de la raie).

Ce modèle a été amélioré par Viala (1986) et c'est ce traitement que nous avons repris dans le programme automatique (voir chapitre II). Une équation de transfert est résolue explicitement dans chaque raie de la bande de Lyman : elle tient compte de la variation de l'opacité dans la raie causée à la fois par les raies adjacentes des bandes de Lyman et de Werner et par l'ionization du carbone ; elle tient compte également de l'absorption des photons qui ont une incidence non normale et qui voient une opacité grandissante lorsque l'angle entre leur direction d'incidence et la normale croît. Une fois moyenné sur toutes les directions, le champ de rayonnement se trouve atténué plus fortement que par une fonction exponentielle et décroît comme $E_2(\tau_\nu)$ (exponentielle intégrale de rang 2) dans une géométrie plan parallèle (voir annexe B). En conséquence, le coeur Doppler de la raie se trouve plus atténué par ce transfert que par l'exponentielle de Federman *et al.* (1979). Pour $10^{15} \text{ cm}^{-2} < N(H_2) < 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, l'opacité τ_ν passe d'environ 1 à 100 au centre de la raie, et de 0.5 à 50 une demi-largeur Doppler plus loin. Dans cet intervalle, le rapport $E_2(\tau_\nu) / \exp(-\tau_\nu)$ croît de 2 à 50, ce qui signifie que Federman *et al.* (1979) ont surestimé la photodissociation du même facteur. Au delà de $N(H_2) \approx 10^{19} \text{ cm}^{-2}$, le coeur Doppler de la raie est complètement opaque, et la dissociation n'a plus lieu que loin dans les ailes de la raie, où l'absorption par les poussières devient dominante et où les deux fonctions donnent essentiellement la même quantité de H₂.

La figure C.1 ci-dessous représente la colonne densité d'hydrogène moléculaire $N(\text{H}_2)$ en fonction de la colonne densité totale d'hydrogène N_{H} . Les calculs ont été effectués dans un nuage diffus plan parallèle infini, de température 100 K et de densité 100 cm^{-3} . Les taux de photodissociation ont été calculés dans les raies issues des 2 premiers niveaux rotationnels de H_2 avec un paramètre Doppler $b_{\text{D}} = 4 \text{ km/s}$. Les résultats sont obtenus avec une atténuation exponentielle ou une atténuation E_2 du champ de rayonnement UV de Mathis *et al.*(1983).

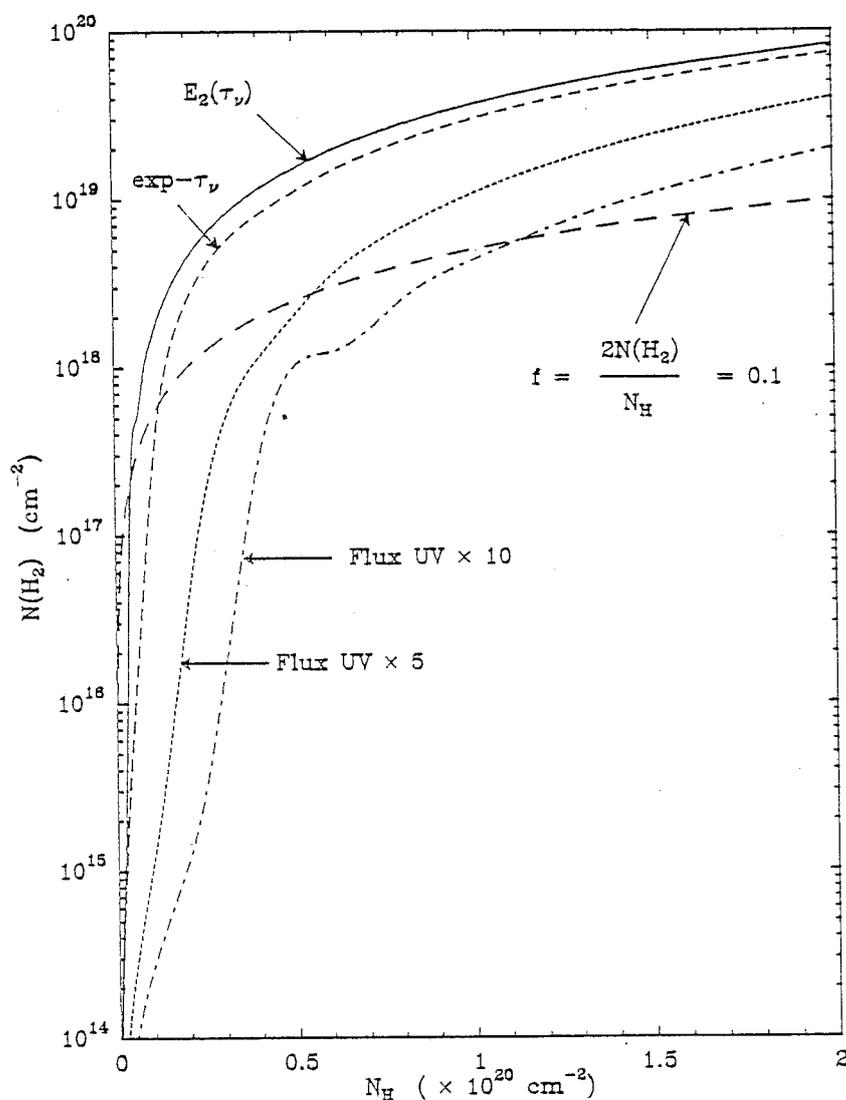


Figure C.1 Zone de transition HI/H_2 .

Comme prévu, la colonne densité calculée avec la fonction E_2 est systématiquement plus grande que celle obtenue en utilisant la fonction exponentielle. Cette différence est faible, moins d'un facteur 2, pour $N_H > 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-2}$. Par contre, elle est supérieure à un ordre de grandeur lorsque N_H est compris entre $3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ et $8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$. Une courbe tiretée de la figure C.1 représente le lieu des points où $f = 0.1$, et l'épaisseur de la zone de transition est ainsi donnée par le double de l'intersection de cette courbe avec les autres. Avec la fonction E_2 , on trouve $N_{tr} = 1.0 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ à comparer à $2.4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ avec l'exponentielle. L'influence d'un champ UV extérieur plus intense, simulant la proximité d'étoiles O-B, est également montrée en figure C.1 : N_{tr} croît jusqu'à $1.1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-2}$ et $2.2 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-2}$ lorsque le flux UV est multiplié par 5 et par 10 respectivement.

Ces valeurs sont plus faibles que celles dérivées des observations par Savage *et al.* (1977) : $5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-2}$. Il n'était pas dans nos intentions de retrouver ici cette valeur en faisant varier les paramètres physiques du nuage : seule l'influence du transfert de rayonnement nous intéressait. De toute façon, avant de tirer des conclusions définitives sur les nuages diffus observés, il faudra absolument introduire dans le modèle le calcul statistique des niveaux rotationnels de H_2 afin de calculer la photodissociation dans des raies moins atténuées de H_2 , issues de niveaux rotationnels excités, et qui doivent augmenter sensiblement N_{tr} . Les gradients de température et de densité qui existent certainement dans les nuages, ainsi que l'épaisseur de ces nuages, doivent également influencer sur le résultat.

Il faut enfin se rappeler que les paramètres physiques qui pourraient être déduits de l'observation du rapport H/H_2 (densité, température, intensité du flux UV) dépendent fortement du taux de formation de H_2 à la surface des grains de poussières, taux qui est plus ou moins bien déterminé. On peut considérer ce taux comme un paramètre libre des modèles ou bien le fixer en choisissant par exemple une efficacité maximum du processus et une section efficace des grains par unité de volume déduite du rapport gaz/poussière observé par l'intermédiaire du rapport $N_H/E(B-V)$. On ne peut exclure toutefois la

possibilité que H_2 se forme sur des grains autres que ceux responsables de l'extinction interstellaire. Une incertitude d'un facteur au moins 2 pèse donc sur le taux de formation de H_2 .

Références

- Bohlin, R.C., Savage, B.D., Drake, J.F. : 1978, *Astrophys.J.* 224, 132
- Bohlin, R.C., Hill, J.K., Jenkins, E.B., Savage, B.D., Snow, T.P., Spitzer, L.Jr., York, D.G. : 1983 *Astrophys.J. Supp. Series* 51, 277
- Federman, S.R., Glassgold, A.E., Kwan, J. : 1979, *Astrophys.J.* 227, 466
- Hollenbach, D., Werner, M.W., Salpeter, E.E. : 1971, *Astrophys.J.* 163, 165
- Mathis, J.S., Metzger, P.G., Panagia, N. : 1983, *Astron. Astrophys.* 128, 212
- Savage, B.D., Bohlin, R.C., Drake, J.F., Bulich, W. : 1977, *Astrophys.J.* 216, 291
- Viala, Y.P. : 1986, *Astron. Astrophys. Supp. Series* 64, 391

ANNEXE D : Atténuation du rayonnement à travers une enveloppe en expansion

La chimie qui se développe à l'intérieur des enveloppes de gaz et de poussières autour de certaines vieilles étoiles, est étroitement liée à l'atténuation des photons UV galactiques qui peuvent en pénétrer les couches externes. En effet, le rayonnement UV déclenche des chaînes de photodestruction qui, en détruisant les précurseurs CO, C₂H₂ et HCN dans les enveloppes carbonées, CO, H₂O et N₂ dans les enveloppes oxygénées, libèrent les éléments lourds et alimentent ainsi la chimie ion-molécule et radicalaire de la phase gazeuse. Le rayonnement qui contribue à la photodestruction, est atténué à la fois par les poussières et par les espèces abondantes du gaz. En fait, pour les processus continus, seules les espèces avec des sections efficaces importantes ($\sigma \approx 10^{17} \text{ cm}^2$) et des abondances élevées ($x \approx 10^{-4}$) sont des absorbants efficaces : dans les enveloppes carbonées la molécule C₂H₂ rentre dans cette catégorie et dans les enveloppes oxygénées seule H₂O est à retenir. Les processus discrets quant à eux, concernent principalement CO dont des spectres d'absorption à haute résolution ont montré récemment qu'il se dissocie à travers 38 bandes identifiées entre 912 et 1100 Å (Letzelter *et al.* 1987).

Morris et Jura (1983) ont développé un modèle pour calculer l'absorption du rayonnement UV dans une enveloppe en expansion. D'une façon générale, le taux de photodissociation d'une espèce du gaz est composé d'une contribution continue et de plusieurs contributions discrètes dans des raies d'absorption. En un point P courant de l'enveloppe à la distance r de l'étoile centrale, le taux de photodissociation peut s'écrire :

$$k(r) = \alpha(r) k_c + \sum_i \beta_i(r) k_i \quad (D1)$$

où k_c et k_i sont les taux de photodissociation dans un champ UV non atténué et calculés respectivement dans le continuum et dans chaque raie discrète i .

En terme de force d'oscillateur

$$k_i = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_i G(v_i) \chi_i \quad (D2)$$

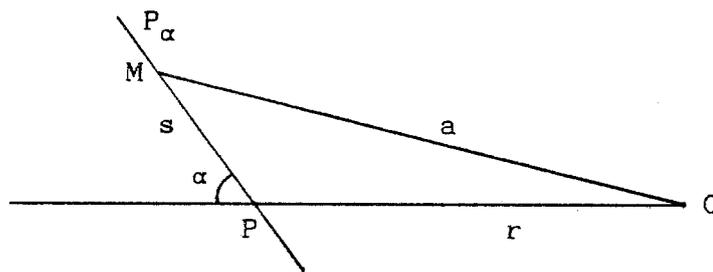
où $G(v_i)$ est 4π fois l'intensité moyenne du rayonnement (en photons $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}\text{Hz}^{-1}$) et χ_i est la population relative du niveau i . $\chi(r)$ est la fraction de photons du continuum qui atteint le rayon r , $\beta_i(r)$ est la probabilité de pénétration d'un photon à l'intérieur de la raie i . On peut remarquer que β_i est équivalent à la probabilité d'échappement pour un photon généré au rayon r dans la raie i .

1. Absorption continue

Le facteur qui mesure l'absorption continuüm au point P peut s'exprimer en fonction de la distance r de ce point à l'étoile, et de l'extinction intégrée sur l'angle solide :

$$\chi(r) = \frac{1}{2} \int_0^\pi \exp(-\tau(r, \alpha)) \sin \alpha \, d\alpha \quad (D3)$$

où $\tau(r, \alpha)$ est l'épaisseur optique de l'enveloppe à partir du point P considéré dans la direction P_α .



L'extinction suivant la direction P_α est proportionnelle à la densité projetée $N(P_\alpha)$ dans cette direction :

$$N(P_\alpha) = \int n(M) \, ds \quad (D4)$$

M est situé à la distance a de l'étoile O et donc, dans un contexte

d'enveloppe avec une perte de masse constante et donc un profil de densité en r^{-2} , $n(M)$ s'écrit :

$$n(M) \approx \frac{k}{a^2} = \frac{k}{r^2 + s^2 + 2rcos\alpha} \quad (D5)$$

et donc

$$N(P_\alpha) = \frac{k}{r} \frac{\alpha}{\sin\alpha} \quad (D6)$$

L'épaisseur optique dans la direction P_α est donc

$$\tau(r) = \tau_0 \frac{r_0}{r} \frac{\alpha}{\sin\alpha} \quad (D7)$$

et le flux UV au point P est donc atténué du facteur

$$\chi(r) = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin\alpha \, d\alpha \exp\left[-\tau(r) \frac{\alpha}{\sin\alpha}\right] \quad (D8)$$

Dans cette équation (D8), le facteur angulaire $\alpha/\sin\alpha$ dans l'exponentielle est minimum dans la direction $\alpha = 0$ et les photons vont donc pénétrer plus facilement selon cette direction normale.

Dans ce modèle, $\tau(r)$ varie en $1/r$ parce que la densité varie en $1/r^2$: $\tau(r)$ ne prend pas en compte les variations d'abondance des espèces moléculaires au cours de leur expansion radiale, mais représente essentiellement l'absorption par les poussières. Il faut donc introduire le calcul explicite de l'opacité $\tau_j(r)$ causée par l'espèce j entre le point P et le rayon extérieur de l'enveloppe :

$$\tau_j(r) = \sigma_j \int_r^{r_{\max}} x_j n(r') \, dr' \quad (D9)$$

où σ_j est la section efficace d'absorption de l'espèce j .

2. Absorption discrète

L'expression de Castor (1970) pour la probabilité d'échappement $\beta_i(r)$, a été adapté par Morris et Jura (1983) pour tenir compte de l'absorption par les poussières :

$$\beta_i(r) = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin\alpha \, d\alpha \exp\left[-\tau(r) \frac{\alpha}{\sin\alpha}\right] \frac{(1 - \exp-\tau_i(r)/\sin^2\alpha)}{\tau_i(r)/\sin^2\alpha} \quad (D10)$$

où τ_i est l'opacité dans la raie i :

$$\tau_i(r) = \frac{\pi e^2}{m_e} (f_i x_i(r)/v_i) n_m(r) r/V \quad (D11)$$

Ici, $n_m(r)$ est la densité de la molécule m , v_i la fréquence au repos de la raie i , $x_i(r)$ la population relative du niveau i , et V la vitesse d'expansion de l'enveloppe. Dans les équations (D8) et (D10), il a été supposé implicitement que l'absorption par les poussières est indépendante de la longueur d'onde dans la région spectrale considérée; la diffusion a été également complètement ignorée.

Quand ils établissent l'équation (D10), Morris et Jura (1983) supposent que $dV/dr = 0$. Ce n'est pas exactement en accord avec le formalisme de Castor (1970) de la probabilité d'échappement qui stipule qu'un photon émis à un rayon r est soit absorbé au voisinage de r , soit pas du tout, et ainsi toutes les quantités qui interviennent dans l'équation de transfert de rayonnement peuvent prendre leur valeur au rayon r . Quand $dV/dr = 0$, un photon émis radialement peut être reabsorbé à n'importe quel rayon. Toutefois, les facteurs $\sin\alpha$ de l'équation (D9) assurent que la contribution à la probabilité d'échappement des photons émis radialement est petite, particulièrement quand $\tau_i(r) > 1$. On peut remarquer que la direction privilégiée de pénétration pour les photons discrets est la direction tangentielle alors que celle des photons continus est la direction radiale.

3. Comparaison

A titre d'illustration de la différence d'efficacité entre atténuation continue et atténuation discrète dans les raies d'absorption, on pourra comparer sur la figure ci-dessous les profils d'abondance de CO et de H₂O à travers une enveloppe en expansion à la vitesse $V = 15$ km/s alimentée par une perte de masse constante de $10^{-5} M_{\odot}/\text{an}$. La distribution spatiale de CO jusqu'à $r \approx 5 \cdot 10^{17}$ cm est beaucoup plus étendue que celle de H₂O qui ne dépasse pas les 10^{17} cm. Ces calculs ont été faits avec les données de Letzler *et al.* (1987) pour la dissociation de CO et avec les sections efficaces de Hudson (1971) pour la dissociation de H₂O.

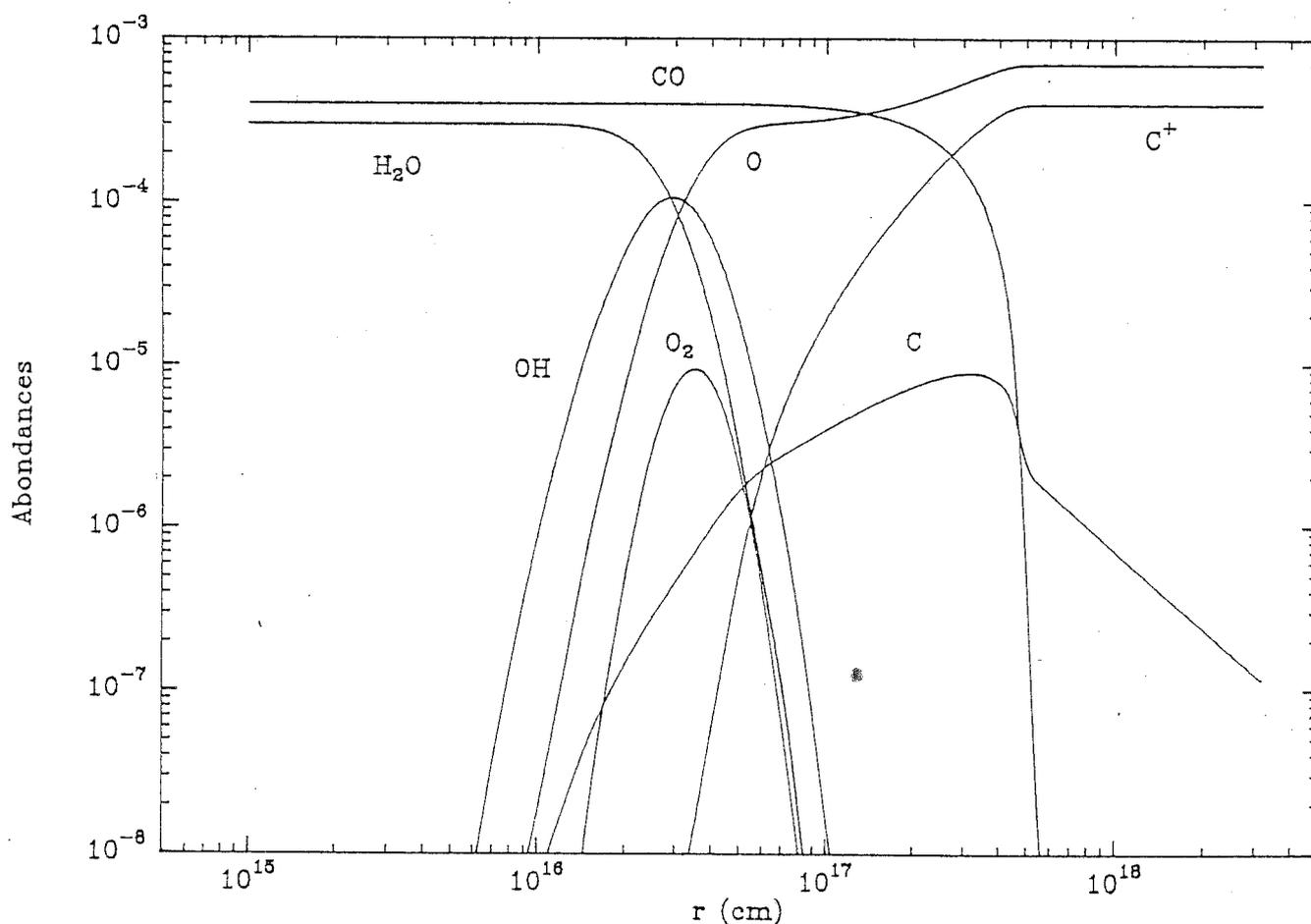


Figure D.1 Abondances chimiques dans une enveloppe oxygénée.

Références

Castor, J.I. : 1970, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 149, 111

Hudson, R.D. : 1971, *Rev. Geophys. Sp. Phys.* 9, 305

Letzelter, C., Eidelsberg, M., Rostas, F., Breton, J., Thieblemont, B. : 1987
in press in *Chem. Phys.*

Morris, M., Jura, M. : 1983, *Astrophys. J.* 264, 546

ANNEXE E : réactions en phase gazeuse

On considère l'ensemble des réactions en phase gazeuse utilisées dans une partie ou une autre de cette thèse ainsi que les références des publications dans lesquelles ont été pris les taux de réaction et les sections efficaces de photodissociation.

La table A présente les photoprocessus avec des taux présentés sous la forme

$$k = a \exp(-bA_v)$$

où A_v est l'extinction visuelle, a est un taux calculé dans un champ ultraviolet standard non atténué. Lorsque les sections efficaces de dissociation sont connues, a est calculé avec le champ de rayonnement UV de Mathis *et al.* (1983) ; dans le cas contraire, il provient de différents auteurs qui utilisent généralement l'expression analytique du champ de Draine (1978). L'influence du champ utilisé est importante et notamment aux courtes longueurs d'ondes autour de 912 Å. Pour attribuer une valeur au flux UV à 912 Å, nous avons effectué un prolongement linéaire à partir des deux points les plus proches de 912 Å. En dessous de cette valeur le flux est strictement nul à cause de l'absorption HI. b est un coefficient tabulé. Les références indiquent les sources des sections efficaces utilisées dans le calcul réel des taux de photodestruction (voir chapitre I).

La table B présente les réactions d'ionisation et de dissociation par les rayons cosmiques dont les taux sont calculés à partir du taux d'ionisation et de dissociation de H_2 : $\zeta_{RC} = 1.1 \cdot 10^{-17} \text{ s}^{-1}$.

Viennent ensuite les réactions ion-neutres (table C), les associations radiatives (table D), les réactions neutre-neutres (table E) et les recombinaisons électroniques (table F). Tous les taux de ces réactions sont écrits sous la forme :

$$k = (a + bT) T^{-\alpha} \exp(-\beta/T) \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$$

Pour environ la moitié des taux de réaction il existe soit une mesure en laboratoire (notée "M" dans les tables), soit des calculs quantiques (notés "C"). Quand aucune mesure ni aucun calcul n'existe (noté "U"), on adopte un taux de Langevin pour les réactions ion-neutres ou une valeur estimée par comparaison avec des réactions similaires pour les autres types de réaction. De nombreuses réactions ont plusieurs voies de sortie ; quand les rapports de branchement ne sont pas connus, on les choisit identiques ce qui entraîne des incertitudes sur les abondances finales.

Références

Draine, B. T. : 1978, *Astrophys. J. Supp. Series* 36, 595

Mathis, J. S., Metzger, P. G., Panagia, N. : 1983, *Astron. Astrophys.* 128, 212

Table A – Photo-destructions par les photons UV

Taux empirique $k = a e^{-bA_v}$

No	Réactions	a s^{-1}	b mag^{-1}		Réf.
18	$CH^+ + h\nu \rightarrow H^+ + C$	2.45(-10)	3.00	C	173
17	$CH^+ + h\nu \rightarrow C^+ + H$	3.11(-13)	3.00	C	173
19	$C + h\nu \rightarrow C^+ + e^-$	2.29(-10)	2.40	C	5, 17
45	$Mg + h\nu \rightarrow Mg^+ + e^-$	2.81(-11)	1.40	C	6
44	$Si + h\nu \rightarrow Si^+ + e^-$	1.68(-09)	1.60	C	7
43	$Fe + h\nu \rightarrow Fe^+ + e^-$	2.85(-10)	1.50	C	8, 166, 167
20	$S + h\nu \rightarrow S^+ + e^-$	1.31(-09)	2.40	C	9
21	$H_2^{ortho} + h\nu \rightarrow H + H$		[1]	C	10, 11, 12
22	$H_2^{para} + h\nu \rightarrow H + H$		[1]	C	10, 11, 12
23	$HD + h\nu \rightarrow D + H$		[1]	C	10, 11, 12
29	$CH + h\nu \rightarrow CH^+ + e^-$	2.85(-10)	2.80	C	15
30	$CH + h\nu \rightarrow C + H$	6.29(-10)	1.50	M	18, 19, 199
65	$CH_2 + h\nu \rightarrow CH_2^+ + e^-$	2.21(-10)	2.30	U	
66	$CH_2 + h\nu \rightarrow CH + H$	7.00(-10)	1.70	U	20, 199, 200
67	$CH_3 + h\nu \rightarrow CH_3^+ + e^-$	2.71(-10)	2.10	U	
68	$CH_3 + h\nu \rightarrow CH + H_2$	3.00(-11)	1.70	U	20
69	$CH_3 + h\nu \rightarrow CH_2 + H$	3.00(-11)	1.70	U	20
70	$CH_4 + h\nu \rightarrow CH_4^+ + e^-$	1.35(-11)	3.50	M	21
71	$CH_4 + h\nu \rightarrow CH + H_2 + H$	5.94(-11)	2.20	M	16, 21, 22, 23, 199, 200
72	$CH_4 + h\nu \rightarrow CH_2 + H_2$	8.59(-10)	2.20	M	16, 21, 22, 23, 199, 200
24	$C_2 + h\nu \rightarrow C_2^+ + e^-$	7.17(-11)	2.00	U	
25	$C_2 + h\nu \rightarrow C + C$	5.71(-11)	1.70	C	158
55	$C_2H + h\nu \rightarrow C_2H^+ + e^-$	4.66(-11)	2.00	U	
57	$C_2H + h\nu \rightarrow CH + C$	2.66(-11)	1.70	U	13
56	$C_2H + h\nu \rightarrow C_2 + H$	2.66(-11)	1.70	U	13
89	$C_2H_2 + h\nu \rightarrow C_2H_2^+ + e^-$	2.14(-10)	3.20	M	21, 132
91	$C_2H_2 + h\nu \rightarrow CH + CH$	8.39(-11)	1.20	M	21, 23, 132
90	$C_2H_2 + h\nu \rightarrow C_2 + H_2$	0.0	1.00	M	
92	$C_2H_2 + h\nu \rightarrow C_2H + H$	5.66(-10)	1.00	M	21, 23, 132
93	$C_2H_3 + h\nu \rightarrow C_2H_3^+ + e^-$	3.00(-10)	2.30	C	188
94	$C_2H_3 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H$	1.00(-09)	1.70	C	188
95	$C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_4^+ + e^-$	1.18(-10)	2.66	C	188
96	$C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H_2$	1.62(-09)	1.61	C	188
26	$C_3 + h\nu \rightarrow C_2 + C$	2.60(-10)	2.28	C	188
59	$C_3H + h\nu \rightarrow C_3 + H$	1.00(-09)	1.70	C	188
97	$C_3H_2 + h\nu \rightarrow C_3 + H_2$	1.00(-09)	1.70	C	188
98	$C_3H_2 + h\nu \rightarrow C_3H + H$	1.00(-09)	1.70	C	188
99	$C_3H_3 + h\nu \rightarrow C_3H + H_2$	1.00(-09)	1.70	C	188
100	$C_3H_3 + h\nu \rightarrow C_3H_2 + H$	1.00(-09)	1.70	C	188
101	$C_3H_4 + h\nu \rightarrow C_3H_4^+ + e^-$	9.88(-10)	2.37	C	188
102	$C_3H_4 + h\nu \rightarrow C_3H_2 + H_2$	2.25(-10)	1.69	C	188
103	$C_3H_4 + h\nu \rightarrow C_3H_3 + H$	1.84(-09)	1.72	C	188
27	$C_4 + h\nu \rightarrow C_2 + C_2$	2.00(-10)	2.30	C	188
28	$C_4 + h\nu \rightarrow C_3 + C$	2.00(-10)	2.30	C	188
62	$C_4H + h\nu \rightarrow C_2H + C_2$	1.00(-09)	1.70	C	188
61	$C_4H + h\nu \rightarrow C_4 + H$	1.00(-09)	1.70	C	188
104	$C_4H_2 + h\nu \rightarrow C_4H_2^+ + e^-$	2.60(-10)	2.28	C	188
105	$C_4H_2 + h\nu \rightarrow C_2H + C_2H$	1.13(-09)	1.64	C	188

C, M, U signifient que les sections efficaces sont Calculées, Mesurées, inconnues.

[1] Taux interpolé entre des valeurs à extinctions visuelles données.

Table A - Photo-destructions par les photons UV (suite)

Taux empirique $k = a e^{-bA\nu}$

No	Réactions	a s ⁻¹	b mag ⁻¹		Réf.
106	C ₄ H ₂ + hν → C ₄ H + H	1.13(-09)	1.64	C	188
35	NH + hν → NH ⁺ + e ⁻	1.08(-11)	2.00	U	
36	NH + hν → N + H	1.94(-10)	1.50	U	13, 199
74	NH ₂ + hν → NH ₂ ⁺ + e ⁻	9.00(-11)	3.10	U	
75	NH ₂ + hν → NH + H	8.00(-10)	1.70	U	24, 199, 200
76	NH ₃ + hν → NH ₃ ⁺ + e ⁻	1.61(-10)	2.30	M	25, 159
77	NH ₃ + hν → NH + H + H	3.00(-10)	1.60	M	23, 25, 26, 27, 199, 200
78	NH ₃ + hν → NH + H ₂	9.06(-11)	2.00	M	23, 25, 26, 27, 199, 200
79	NH ₃ + hν → NH ₂ + H	6.09(-10)	1.65	M	23, 25, 26, 27, 199, 200
34	N ₂ + hν → N + N	2.30(-10)	3.00	M	14, 199
41	OH + hν → OH ⁺ + e ⁻	8.07(-12)	3.10	U	
42	OH + hν → O + H	2.20(-10)	1.80	C	28, 29, 172, 199
48	H ₂ O + hν → H ₂ O ⁺ + e ⁻	2.66(-11)	3.10	M	30, 160
49	H ₂ O + hν → OH + H	4.58(-10)	1.70	M	16, 31, 32, 199, 205
39	O ₂ + hν → O ₂ ⁺ + e ⁻	7.10(-11)	3.10	M	14
40	O ₂ + hν → O + O	3.57(-10)	1.40	M	14, 199
31	CN + hν → N + C	1.25(-09)	2.80	M	33, 188, 199
58	C ₂ N + hν → CN + C	1.00(-09)	1.70	M	188
60	C ₃ N + hν → CN + C ₂	5.00(-10)	1.80	C	188
63	C ₄ N + hν → CN + C ₃	5.00(-10)	1.70	C	188
64	C ₅ N + hν → CN + C ₄	5.00(-10)	1.70	C	188
32	CO + hν → O + C	1.61(-10)	5.00	M	19, 34, 35, 207
73	CO ₂ + hν → CO + O	8.24(-10)	2.30	M	37, 38, 39
33	CS + hν → S + C	1.00(-11)	2.00	U	197
37	NO + hν → NO ⁺ + e ⁻	1.61(-10)	2.00	M	36
38	NO + hν → O + N	3.03(-10)	2.00	M	36, 161, 200
46	SH + hν → S + H	1.00(-11)	2.00	U	197
47	SO + hν → S + O	3.30(-10)	1.40	U	24
50	H ₂ S + hν → SH + H	3.20(-10)	1.70	U	197
80	SO ₂ + hν → SO + O	1.15(-09)	2.00	M	200, 206
51	HCN + hν → CN + H	1.21(-09)	2.00	M	126, 127, 130, 199, 200, 204
54	HNC + hν → CN + H	1.21(-09)	2.00	M	188, 199, 200
86	HC ₃ N + hν → CN + C ₂ H	9.54(-10)	1.83	C	188
87	HC ₅ N + hν → CN + C ₄ H	5.00(-10)	1.83	C	188
88	HC ₅ N + hν → C ₅ N + H	5.00(-10)	1.83	C	188
52	HCO + hν → HCO ⁺ + e ⁻	5.57(-10)	1.30	U	
53	HCO + hν → CO + H	8.80(-10)	1.60	U	20
82	H ₂ CO + hν → HCO ⁺ + H + e ⁻	2.26(-11)	3.10	M	40, 41
81	H ₂ CO + hν → H ₂ CO ⁺ + e ⁻	2.19(-10)	2.80	M	40, 41
84	H ₂ CO + hν → CO + H + H	8.12(-10)	1.60	M	42, 43, 44, 45
83	H ₂ CO + hν → CO + H ₂	1.73(-12)	1.60	M	42, 43, 44, 45
85	H ₂ CO + hν → HCO + H	7.82(-13)	1.60	M	42, 43, 44, 45

C, M, U signifient que les sections efficaces sont Calculées, Mesurées, inconnues.

Table B - Destructons par les rayons cosmiques

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

N°	Réactions	a $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$	b $\text{cm}^3 \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$	α	β K		Réf.
4	$\text{H} + \text{R.C.} \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^- + \text{R.C.}$	6.80(-18)	0.	0.	0.0	C	1
5	$\text{D} + \text{R.C.} \rightarrow \text{D}^+ + \text{e}^- + \text{R.C.}$	6.80(-18)	0.	0.	0.0	C	209
16	$\text{He} + \text{R.C.} \rightarrow \text{He}^+ + \text{e}^- + \text{R.C.}$	6.80(-18)	0.	0.	0.0	C	1, 2
6	$\text{C} + \text{R.C.} \rightarrow \text{C}^+ + \text{e}^- + \text{R.C.}$	2.72(-17)	0.	0.	0.0	C	1, 2
7	$\text{N} + \text{R.C.} \rightarrow \text{N}^+ + \text{e}^- + \text{R.C.}$	2.72(-17)	0.	0.	0.0	C	1, 2
8	$\text{O} + \text{R.C.} \rightarrow \text{O}^+ + \text{e}^- + \text{R.C.}$	3.40(-17)	0.	0.	0.0	C	1, 2
10	$\text{H}_2 + \text{R.C.} \rightarrow \text{H}^+ + \text{H} + \text{e}^- + \text{R.C.}$	3.30(-19)	0.	0.	0.0	C	3
9	$\text{H}_2 + \text{R.C.} \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^- + \text{R.C.}$	1.07(-17)	0.	0.	0.0	C	3
11	$\text{H}_2 + \text{R.C.} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{R.C.}$	1.10(-17)	0.	0.	0.0	C	3
14	$\text{HD} + \text{R.C.} \rightarrow \text{H}^+ + \text{D} + \text{e}^- + \text{R.C.}$	1.65(-19)	0.	0.	0.0	C	209
13	$\text{HD} + \text{R.C.} \rightarrow \text{D}^+ + \text{H} + \text{e}^- + \text{R.C.}$	1.65(-19)	0.	0.	0.0	C	209
12	$\text{HD} + \text{R.C.} \rightarrow \text{HD}^+ + \text{e}^- + \text{R.C.}$	1.07(-17)	0.	0.	0.0	C	209
15	$\text{HD} + \text{R.C.} \rightarrow \text{D} + \text{H} + \text{R.C.}$	1.10(-17)	0.	0.	0.0	C	209

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
107	H ⁺ + D → D ⁺ + H	8.00(-10)	5.00(-12)	0.	42.9	C	210
108	H ⁺ + O → O ⁺ + H	1.04(-10)	4.48(-13)	0.	227.0	C	46
109	H ⁺ + S → S ⁺ + H	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	193
110	H ⁺ + H ₂ ^{ortho} → H ⁺ + H ₂ ^{para}	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	47
111	H ⁺ + H ₂ ^{para} → H ⁺ + H ₂ ^{ortho}	3.00(-10)	0.	0.	170.5	U	47
112	H ⁺ + HD → D ⁺ + H ₂	1.59(-09)	-2.65(-12)	0.	462.0	U	24
116	H ⁺ + CH → CH ⁺ + H	1.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
138	H ⁺ + CH ₂ → CH ⁺ + H ₂	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
137	H ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + H	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
139	H ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + H	3.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
141	H ⁺ + CH ₄ → CH ₃ ⁺ + H ₂	2.28(-09)	0.	0.	0.0	U	48, 190
140	H ⁺ + CH ₄ → CH ₄ ⁺ + H	1.52(-09)	0.	0.	0.0	U	48, 190
113	H ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + H	3.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
131	H ⁺ + C ₂ H → C ₂ ⁺ + H ₂	1.50(-09)	0.	0.	0.0	U	24
130	H ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ⁺ + H	1.50(-09)	0.	0.	0.0	U	24
150	H ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 189
149	H ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₂ ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
152	H ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
151	H ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₂ H ₃ ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
154	H ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₃ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
153	H ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
114	H ⁺ + C ₃ → C ₃ ⁺ + H	4.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
134	H ⁺ + C ₃ H → C ₃ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
133	H ⁺ + C ₃ H → C ₃ H ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
157	H ⁺ + C ₃ H ₂ → C ₃ H ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
156	H ⁺ + C ₃ H ₂ → C ₃ H ₂ ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
159	H ⁺ + C ₃ H ₃ → C ₃ H ₂ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
158	H ⁺ + C ₃ H ₃ → C ₃ H ₃ ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
161	H ⁺ + C ₃ H ₄ → C ₃ H ₃ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
160	H ⁺ + C ₃ H ₄ → C ₃ H ₄ ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
115	H ⁺ + C ₄ → C ₄ ⁺ + H	4.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
136	H ⁺ + C ₄ H → C ₄ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
135	H ⁺ + C ₄ H → C ₄ H ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
163	H ⁺ + C ₄ H ₂ → C ₄ H ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
162	H ⁺ + C ₄ H ₂ → C ₄ H ₂ ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
118	H ⁺ + NH → NH ⁺ + H	2.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
143	H ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + H	2.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
144	H ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + H	5.20(-09)	0.	0.	0.0	M	48
121	H ⁺ + OH → OH ⁺ + H	2.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
125	H ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + H	8.20(-09)	0.	0.	0.0	M	48
120	H ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + H	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	48
132	H ⁺ + C ₂ N → C ₂ N ⁺ + H	4.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
142	H ⁺ + CO ₂ → HCO ⁺ + O	3.00(-09)	0.	0.	0.0	M	50
117	H ⁺ + CS → CS ⁺ + H	4.90(-09)	0.	0.	0.0	U	193
119	H ⁺ + NO → NO ⁺ + H	1.90(-09)	0.	0.	0.0	M	49
123	H ⁺ + SH → S ⁺ + H ₂	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	193
122	H ⁺ + SH → SH ⁺ + H	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	193
124	H ⁺ + SO → SO ⁺ + H	3.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
126	H ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + H	7.60(-09)	0.	0.	0.0	M	190
147	H ⁺ + HC ₃ N → HC ₃ N ⁺ + H	4.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
148	H ⁺ + HC ₅ N → HC ₅ N ⁺ + H	4.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a	b	α	β K		Réf.
		$\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$	$\text{cm}^3 \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$				
129	$\text{H}^+ + \text{HCO} \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{CO}$	9.33(-10)	0.	0.	0.0	U	24
128	$\text{H}^+ + \text{HCO} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{H}_2$	9.33(-10)	0.	0.	0.0	U	24
127	$\text{H}^+ + \text{HCO} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	9.33(-10)	0.	0.	0.0	U	24
146	$\text{H}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2$	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
145	$\text{H}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}$	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
164	$\text{D}^+ + \text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{D}$	8.00(-10)	5.00(-12)	0.	0.0	C	210
165	$\text{D}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}^+ + \text{HD}$	3.34(-09)	-5.56(-12)	0.	0.0	M	138
425	$\text{He}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}^+ + \text{He} + \text{H}$	1.30(-13)	-1.27(-16)	0.	0.0	U	51, 52
426	$\text{He}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{He}$	1.62(-14)	-1.58(-17)	0.	0.0	U	51, 52
424	$\text{He}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$	1.62(-14)	-1.58(-17)	0.	0.0	U	51, 52
434	$\text{He}^+ + \text{CH} \rightarrow \text{C}^+ + \text{He} + \text{H}$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
435	$\text{He}^+ + \text{CH} \rightarrow \text{CH}^+ + \text{He}$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
480	$\text{He}^+ + \text{CH}_2 \rightarrow \text{C}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
481	$\text{He}^+ + \text{CH}_2 \rightarrow \text{CH}^+ + \text{He} + \text{H}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
482	$\text{He}^+ + \text{CH}_2 \rightarrow \text{CH}_2^+ + \text{He}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
483	$\text{He}^+ + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
484	$\text{He}^+ + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_2^+ + \text{He} + \text{H}$	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
485	$\text{He}^+ + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{He}$	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
490	$\text{He}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}^+ + \text{CH}_3 + \text{He}$	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	188
486	$\text{He}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2 + \text{He} + \text{H}$	2.47(-10)	0.	0.	0.0	M	53, 55, 188
487	$\text{He}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	9.62(-10)	0.	0.	0.0	M	53, 55, 188
488	$\text{He}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{He} + \text{H}$	6.50(-11)	0.	0.	0.0	M	53, 55, 188
489	$\text{He}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_4^+ + \text{He}$	3.90(-11)	0.	0.	0.0	M	53, 55, 188
428	$\text{He}^+ + \text{C}_2 \rightarrow \text{C}^+ + \text{C} + \text{He}$	8.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
427	$\text{He}^+ + \text{C}_2 \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{He}$	8.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
474	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}^+ + \text{CH} + \text{He}$	3.75(-10)	0.	0.	0.0	U	24
472	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{CH}^+ + \text{C} + \text{He}$	3.75(-10)	0.	0.	0.0	U	24
471	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{He} + \text{H}$	3.75(-10)	0.	0.	0.0	U	24
473	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{He}$	3.75(-10)	0.	0.	0.0	U	24
513	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}^+ + \text{CH} + \text{He}$	7.70(-10)	0.	0.	0.0	M	55
512	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	1.61(-09)	0.	0.	0.0	M	55
511	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{He} + \text{H}$	8.75(-10)	0.	0.	0.0	M	55
510	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{He}$	2.45(-10)	0.	0.	0.0	M	55
514	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
515	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{He} + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
520	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{CH}_2^+ + \text{CH}_2 + \text{He}$	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	188
519	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{H}_2 + \text{He} + \text{H}$	4.40(-10)	0.	0.	0.0	U	188
518	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	2.20(-09)	0.	0.	0.0	U	188
517	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{He} + \text{H}$	1.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
516	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{He}$	2.40(-10)	0.	0.	0.0	U	188
430	$\text{He}^+ + \text{C}_3 \rightarrow \text{C}^+ + \text{C}_2 + \text{He}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
429	$\text{He}^+ + \text{C}_3 \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{C} + \text{He}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
476	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H} \rightarrow \text{C}_3^+ + \text{He} + \text{H}$	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
525	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
524	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}^+ + \text{He} + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
528	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_3^+ + \text{H}_2 + \text{He} + \text{H}$	6.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
527	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	6.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
526	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{He} + \text{H}$	6.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
532	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3^+ + \text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{He}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	188
531	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}^+ + \text{H}_2 + \text{He} + \text{H}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	188
530	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	188

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnus.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a	b	α	β K		Réf.
		cm^3s^{-1}	$\text{cm}^3\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}$				
529	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{He} + \text{H}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	188
433	$\text{He}^+ + \text{C}_4 \rightarrow \text{C}^+ + \text{C}_3 + \text{He}$	6.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
432	$\text{He}^+ + \text{C}_4 \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{C}_2 + \text{He}$	6.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
431	$\text{He}^+ + \text{C}_4 \rightarrow \text{C}_3^+ + \text{C} + \text{He}$	6.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
479	$\text{He}^+ + \text{C}_4\text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{C}_2 + \text{He}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
478	$\text{He}^+ + \text{C}_4\text{H} \rightarrow \text{C}_4^+ + \text{He} + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
534	$\text{He}^+ + \text{C}_4\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{C}_2\text{H} + \text{He}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
533	$\text{He}^+ + \text{C}_4\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_4\text{H}^+ + \text{He} + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
445	$\text{He}^+ + \text{NH} \rightarrow \text{N}^+ + \text{He} + \text{H}$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
444	$\text{He}^+ + \text{NH} \rightarrow \text{NH}^+ + \text{He}$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
495	$\text{He}^+ + \text{NH}_2 \rightarrow \text{N}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	8.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
496	$\text{He}^+ + \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH}^+ + \text{He} + \text{H}$	8.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
497	$\text{He}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	1.54(-09)	0.	0.44	0.0	M	55, 56, 177
498	$\text{He}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2^+ + \text{He} + \text{H}$	1.54(-08)	0.	0.44	0.0	M	55, 56, 177
499	$\text{He}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{He}$	2.30(-09)	0.	0.44	0.0	M	55, 56, 177
442	$\text{He}^+ + \text{N}_2 \rightarrow \text{N}^+ + \text{N} + \text{He}$	8.97(-10)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 176
443	$\text{He}^+ + \text{N}_2 \rightarrow \text{N}_2^+ + \text{He}$	4.03(-10)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 176
452	$\text{He}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{O}^+ + \text{He} + \text{H}$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
451	$\text{He}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{OH}^+ + \text{He}$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 133
456	$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH}^+ + \text{He} + \text{H}$	7.88(-08)	0.	0.94	0.0	M	55, 177
457	$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{He}$	1.61(-08)	0.	0.94	0.0	M	55, 177
450	$\text{He}^+ + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}^+ + \text{O} + \text{He}$	9.90(-10)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 176
449	$\text{He}^+ + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}_2^+ + \text{He}$	1.00(-11)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 176
437	$\text{He}^+ + \text{CN} \rightarrow \text{C}^+ + \text{N} + \text{He}$	8.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
436	$\text{He}^+ + \text{CN} \rightarrow \text{N}^+ + \text{C} + \text{He}$	8.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
475	$\text{He}^+ + \text{C}_2\text{N} \rightarrow \text{C}^+ + \text{CN} + \text{He}$	8.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
477	$\text{He}^+ + \text{C}_3\text{N} \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{CN} + \text{He}$	8.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
439	$\text{He}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{C}^+ + \text{O} + \text{He}$	1.48(-09)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55, 176
438	$\text{He}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{He}$	1.50(-11)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55, 176
494	$\text{He}^+ + \text{CO}_2 \rightarrow \text{C}^+ + \text{O}_2 + \text{He}$	4.00(-11)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55
493	$\text{He}^+ + \text{CO}_2 \rightarrow \text{O}^+ + \text{CO} + \text{He}$	1.80(-10)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55
491	$\text{He}^+ + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O} + \text{He}$	7.70(-10)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55
492	$\text{He}^+ + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}_2^+ + \text{He}$	1.00(-11)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55
440	$\text{He}^+ + \text{CS} \rightarrow \text{C}^+ + \text{S} + \text{He}$	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24
441	$\text{He}^+ + \text{CS} \rightarrow \text{S}^+ + \text{C} + \text{He}$	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24
446	$\text{He}^+ + \text{NO} \rightarrow \text{N}^+ + \text{O} + \text{He}$	1.38(-09)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55
447	$\text{He}^+ + \text{NO} \rightarrow \text{O}^+ + \text{N} + \text{He}$	2.08(-10)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55
448	$\text{He}^+ + \text{NO} \rightarrow \text{NO}^+ + \text{He}$	1.60(-11)	0.	0.	0.0	M	53, 54, 55
453	$\text{He}^+ + \text{SH} \rightarrow \text{S}^+ + \text{He} + \text{H}$	1.70(-09)	0.	0.	0.0	U	24
454	$\text{He}^+ + \text{SO} \rightarrow \text{O}^+ + \text{S} + \text{He}$	8.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
455	$\text{He}^+ + \text{SO} \rightarrow \text{S}^+ + \text{O} + \text{He}$	8.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
459	$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{S}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	3.61(-09)	0.	0.	0.0	M	190
458	$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{SH}^+ + \text{He} + \text{H}$	4.84(-10)	0.	0.	0.0	M	190
460	$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{H}_2\text{S}^+ + \text{He}$	3.08(-10)	0.	0.	0.0	M	190
502	$\text{He}^+ + \text{SO}_2 \rightarrow \text{S}^+ + \text{O}_2 + \text{He}$	7.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
501	$\text{He}^+ + \text{SO}_2 \rightarrow \text{O}_2^+ + \text{S} + \text{He}$	7.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
500	$\text{He}^+ + \text{SO}_2 \rightarrow \text{SO}^+ + \text{O} + \text{He}$	7.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
462	$\text{He}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{C}^+ + \text{N} + \text{He} + \text{H}$	6.82(-10)	0.	0.	0.0	M	24, 55
465	$\text{He}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{N}^+ + \text{CH} + \text{He}$	1.86(-10)	0.	0.	0.0	M	24, 55
463	$\text{He}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{CH}^+ + \text{N} + \text{He}$	5.89(-10)	0.	0.	0.0	M	24, 55
464	$\text{He}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{CN}^+ + \text{He} + \text{H}$	1.61(-09)	0.	0.	0.0	M	24, 55

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a	b	α	β K		Réf.
		$\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$	$\text{cm}^3 \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$				
461	$\text{He}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{HCN}^+ + \text{He}$	3.10(-11)	0.	0.	0.0	M	24, 55
470	$\text{He}^+ + \text{HNC} \rightarrow \text{C}^+ + \text{N} + \text{He} + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
469	$\text{He}^+ + \text{HNC} \rightarrow \text{NH}^+ + \text{C} + \text{He}$	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
508	$\text{He}^+ + \text{HC}_3\text{N} \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{HCN} + \text{He}$	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	188
506	$\text{He}^+ + \text{HC}_3\text{N} \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{CN} + \text{He}$	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	188
507	$\text{He}^+ + \text{HC}_3\text{N} \rightarrow \text{C}_3^+ + \text{NH} + \text{He}$	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	188
505	$\text{He}^+ + \text{HC}_3\text{N} \rightarrow \text{C}_2\text{N}^+ + \text{CH} + \text{He}$	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	188
509	$\text{He}^+ + \text{HC}_3\text{N} \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{C}_3\text{N} + \text{He}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
466	$\text{He}^+ + \text{HCO} \rightarrow \text{CH}^+ + \text{O} + \text{He}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
467	$\text{He}^+ + \text{HCO} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{He} + \text{H}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
468	$\text{He}^+ + \text{HCO} \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{CO}$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
503	$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	1.05(-09)	0.	0.	0.0	U	24
504	$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{He} + \text{H}$	1.05(-09)	0.	0.	0.0	U	24
166	$\text{C}^+ + \text{S} \rightarrow \text{S}^+ + \text{C}$	1.50(-09)	0.	0.	0.0	U	193
1635	$\text{C}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$	4.41(-13)	2.10(-16)	-0.75	4600.0	M	203
168	$\text{C}^+ + \text{CH} \rightarrow \text{CH}^+ + \text{C}$	3.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 184
167	$\text{C}^+ + \text{CH} \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{H}$	3.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 184
190	$\text{C}^+ + \text{CH}_2 \rightarrow \text{CH}_2^+ + \text{C}$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
189	$\text{C}^+ + \text{CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{H}$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
192	$\text{C}^+ + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{C}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
193	$\text{C}^+ + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
191	$\text{C}^+ + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 189
195	$\text{C}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{H}_2$	4.06(-10)	0.	0.	0.0	M	57
194	$\text{C}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{H}$	9.94(-10)	0.	0.	0.0	M	57
187	$\text{C}^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_3^+ + \text{H}$	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 184
208	$\text{C}^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}^+ + \text{H}$	2.70(-09)	0.	0.	0.0	U	143, 184, 189
210	$\text{C}^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	184, 189
211	$\text{C}^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	184, 189
209	$\text{C}^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	184, 189
213	$\text{C}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C}$	1.70(-10)	0.	0.	0.0	U	189
214	$\text{C}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{H}_2$	5.10(-10)	0.	0.	0.0	U	184, 189
212	$\text{C}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	184, 189
188	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H} \rightarrow \text{C}_4^+ + \text{H}$	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	184, 189
221	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_4^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
220	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_4\text{H}^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
223	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{C}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
224	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_4\text{H}^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
222	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_2^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
229	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
228	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H}$	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
227	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{CH}$	4.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
225	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4^+ + \text{C}$	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
226	$\text{C}^+ + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_2^+ + \text{H}_2$	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
170	$\text{C}^+ + \text{NH} \rightarrow \text{CN}^+ + \text{H}$	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
197	$\text{C}^+ + \text{NH}_2 \rightarrow \text{HCN}^+ + \text{H}$	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
199	$\text{C}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{C}$	8.30(-09)	0.	0.39	0.0	M	57, 177
200	$\text{C}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{HCN}^+ + \text{H}_2$	4.98(-10)	0.	0.39	0.0	M	57, 177
198	$\text{C}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{H}$	7.80(-09)	0.	0.39	0.0	M	57, 177
174	$\text{C}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{H}$	7.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
180	$\text{C}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	2.42(-07)	0.	0.91	0.0	M	57, 177
173	$\text{C}^+ + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}^+ + \text{CO}$	4.32(-10)	0.	0.	0.0	M	57

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
172	C ⁺ + O ₂ → CO ⁺ + O	7.68(-10)	0.	0.	0.0	M	57
196	C ⁺ + CO ₂ → CO ⁺ + CO	1.10(-09)	0.	0.	0.0	M	57
169	C ⁺ + CS → CS ⁺ + C	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	193
171	C ⁺ + NO → NO ⁺ + C	5.20(-10)	0.	0.	0.0	M	145
175	C ⁺ + SH → CS ⁺ + H	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	193
179	C ⁺ + SO → S ⁺ + CO	2.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
178	C ⁺ + SO → CO ⁺ + S	2.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
177	C ⁺ + SO → CS ⁺ + O	2.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
176	C ⁺ + SO → SO ⁺ + C	2.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
182	C ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + C	6.00(-10)	0.	0.	0.0	M	188
181	C ⁺ + H ₂ S → HCS ⁺ + H	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	188, 195
201	C ⁺ + SO ₂ → SO ⁺ + CO	2.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 190
183	C ⁺ + HCN → C ₂ N ⁺ + H	3.20(-09)	0.	0.	0.0	M	57
186	C ⁺ + HNC → C ₂ N ⁺ + H	3.20(-09)	0.	0.	0.0	U	189
206	C ⁺ + HC ₃ N → C ₃ H ⁺ + CN	4.88(-09)	0.	0.	0.0	U	188, 191
205	C ⁺ + HC ₃ N → C ₄ N ⁺ + H	1.22(-09)	0.	0.	0.0	U	188, 191
207	C ⁺ + HC ₅ N → HC ₅ N ⁺ + C	5.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
185	C ⁺ + HCO → CH ⁺ + CO	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
184	C ⁺ + HCO → HCO ⁺ + C	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
204	C ⁺ + H ₂ CO → CH ₂ ⁺ + CO	2.11(-09)	0.	0.	0.0	M	57
203	C ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + CH	9.24(-10)	0.	0.	0.0	M	57
202	C ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + C	1.38(-09)	0.	0.	0.0	M	57
232	N ⁺ + H ₂ → NH ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	59, 188
230	N ⁺ + H ₂ ^{ortho} → NH ⁺ + H	5.10(-10)	0.	0.	40.0	M	175
231	N ⁺ + H ₂ ^{para} → NH ⁺ + H	5.10(-10)	0.	0.	215.0	M	175
236	N ⁺ + CH → CH ⁺ + N	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
235	N ⁺ + CH → CN ⁺ + H	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
259	N ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + N	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
260	N ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + N	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	
263	N ⁺ + CH ₄ → CH ₃ ⁺ + N + H	2.92(-10)	0.	0.	0.0	M	55, 176
266	N ⁺ + CH ₄ → CH ₃ ⁺ + NH	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
262	N ⁺ + CH ₄ → CH ₄ ⁺ + N	2.20(-11)	0.	0.	0.0	M	55, 176, 188
265	N ⁺ + CH ₄ → HCN ⁺ + H ₂ + H	5.50(-11)	0.	0.	0.0	M	55, 176
261	N ⁺ + CH ₄ → H ₂ CN ⁺ + H + H	1.76(-10)	0.	0.	0.0	M	55, 176
264	N ⁺ + CH ₄ → H ₂ CN ⁺ + H ₂	1.76(-10)	0.	0.	0.0	M	176, 188
234	N ⁺ + C ₂ → C ⁺ + CN	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
233	N ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + N	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
258	N ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ⁺ + N	9.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
278	N ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₂ ⁺ + NH ₂	1.60(-10)	0.	0.	0.0	M	190
277	N ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₃ ⁺ + NH	4.80(-10)	0.	0.	0.0	M	190
276	N ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + N	4.00(-10)	0.	0.	0.0	M	190
242	N ⁺ + NH → NH ⁺ + N	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
241	N ⁺ + NH → N ₂ ⁺ + H	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
269	N ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + N	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
272	N ⁺ + NH ₃ → NH ₂ ⁺ + NH	2.70(-09)	0.	0.53	0.0	M	59, 177
270	N ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + N	2.46(-08)	0.	0.53	0.0	M	59, 177
271	N ⁺ + NH ₃ → N ₂ H ⁺ + H ₂	2.70(-09)	0.	0.53	0.0	M	59, 177
249	N ⁺ + OH → OH ⁺ + N	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
248	N ⁺ + OH → NO ⁺ + H	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
250	N ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + N	5.86(-08)	0.	0.54	0.0	M	59, 177
247	N ⁺ + O ₂ → O ⁺ + NO	3.30(-11)	0.	0.	0.0	M	55, 59, 148, 176

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnus.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

N°	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
245	$N^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + N$	2.81(-10)	0.	0.	0.0	M	55, 59, 148, 176
246	$N^+ + O_2 \rightarrow NO^+ + O$	2.36(-10)	0.	0.	0.0	M	55, 59, 148, 176
238	$N^+ + CN \rightarrow C^+ + N_2$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
237	$N^+ + CN \rightarrow CN^+ + N$	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
240	$N^+ + CO \rightarrow CO^+ + N$	1.39(-09)	0.	0.17	0.0	M	55, 176
239	$N^+ + CO \rightarrow NO^+ + C$	1.72(-10)	0.	0.17	0.0	M	55, 176
268	$N^+ + CO_2 \rightarrow CO^+ + NO$	2.50(-10)	0.	0.	0.0	M	59
267	$N^+ + CO_2 \rightarrow CO_2^+ + N$	7.50(-10)	0.	0.	0.0	M	59
244	$N^+ + NO \rightarrow N_2^+ + O$	4.48(-11)	0.	0.	0.0	M	55
243	$N^+ + NO \rightarrow NO^+ + N$	5.15(-10)	0.	0.	0.0	M	55
254	$N^+ + H_2S \rightarrow S^+ + NH_2$	2.28(-10)	0.	0.	0.0	M	190
253	$N^+ + H_2S \rightarrow NH^+ + SH$	5.70(-11)	0.	0.	0.0	M	190
252	$N^+ + H_2S \rightarrow SH^+ + NH$	5.51(-10)	0.	0.	0.0	M	190
251	$N^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + N$	1.06(-09)	0.	0.	0.0	M	190
255	$N^+ + HCN \rightarrow HCN^+ + N$	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
257	$N^+ + HCO \rightarrow NH^+ + CO$	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
256	$N^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + N$	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
275	$N^+ + H_2CO \rightarrow NO^+ + CH_2$	2.90(-10)	0.	0.	0.0	M	59
274	$N^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + NH$	7.25(-10)	0.	0.	0.0	M	59
273	$N^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + N$	1.89(-09)	0.	0.	0.0	M	59
279	$O^+ + H \rightarrow H^+ + O$	6.00(-10)	0.	0.	0.0	M	46, 180
280	$O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$	1.30(-09)	0.	0.	0.0	M	58, 180
285	$O^+ + CH \rightarrow CH^+ + O$	3.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
284	$O^+ + CH \rightarrow CO^+ + H$	3.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
300	$O^+ + CH_2 \rightarrow CH_2^+ + O$	9.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
301	$O^+ + CH_3 \rightarrow CH_3^+ + O$	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
303	$O^+ + CH_4 \rightarrow CH_3^+ + OH$	1.10(-10)	0.	0.	0.0	M	59
302	$O^+ + CH_4 \rightarrow CH_4^+ + O$	8.90(-10)	0.	0.	0.0	M	59
283	$O^+ + C_2 \rightarrow C^+ + CO$	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
282	$O^+ + C_2 \rightarrow C_2^+ + O$	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
281	$O^+ + C_2 \rightarrow CO^+ + C$	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
298	$O^+ + C_2H \rightarrow C_2H^+ + O$	4.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
299	$O^+ + C_2H \rightarrow CO^+ + CH$	4.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
289	$O^+ + NH \rightarrow NH^+ + O$	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
288	$O^+ + NH \rightarrow NO^+ + H$	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
305	$O^+ + NH_2 \rightarrow NH_2^+ + O$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
306	$O^+ + NH_3 \rightarrow NH_3^+ + O$	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	59
287	$O^+ + N_2 \rightarrow NO^+ + N$	9.10(-11)	0.	0.70	0.0	M	60
293	$O^+ + OH \rightarrow OH^+ + O$	3.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
292	$O^+ + OH \rightarrow O_2^+ + H$	3.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
294	$O^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + O$	3.20(-09)	0.	0.	0.0	M	59
291	$O^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + O$	7.74(-10)	0.	0.65	0.0	M	60, 178
286	$O^+ + CN \rightarrow NO^+ + C$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	13
304	$O^+ + CO_2 \rightarrow O_2^+ + CO$	9.40(-10)	0.	0.	0.0	M	59
290	$O^+ + NO \rightarrow NO^+ + O$	2.20(-11)	0.	0.53	0.0	M	60
295	$O^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + O$	1.36(-09)	0.	0.	0.0	M	190
297	$O^+ + HCO \rightarrow OH^+ + CO$	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
296	$O^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + O$	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
308	$O^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + OH$	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	59
307	$O^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + O$	2.10(-09)	0.	0.	0.0	M	59
315	$S^+ + Mg \rightarrow Mg^+ + S$	2.80(-10)	0.	0.	0.0	U	193

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
314	S ⁺ + Si → Si ⁺ + S	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	193
313	S ⁺ + Fe → Fe ⁺ + S	1.80(-10)	0.	0.	0.0	U	193
310	S ⁺ + CH → CS ⁺ + H	6.20(-10)	0.	0.	0.0	U	193
316	S ⁺ + CH ₂ → HCS ⁺ + H	1.00(-11)	0.	0.	0.0	U	193
309	S ⁺ + C ₂ → CS ⁺ + C	8.10(-10)	0.	0.	0.0	U	193
318	S ⁺ + NH ₃ → NH ₂ ⁺ + SH	7.00(-11)	0.	0.	0.0	U	193
317	S ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + S	1.44(-09)	0.	0.	0.0	M	190
312	S ⁺ + OH → SO ⁺ + H	6.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
311	S ⁺ + O ₂ → SO ⁺ + O	2.00(-11)	0.	0.	0.0	M	190
319	H ₂ ⁺ + H → H ⁺ + H ₂	6.40(-10)	0.	0.	0.0	M	134
320	H ₂ ⁺ + C → CH ⁺ + H	2.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
321	H ₂ ⁺ + N → NH ⁺ + H	1.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
322	H ₂ ⁺ + O → OH ⁺ + H	1.50(-09)	0.	0.	0.0	U	24
323	H ₂ ⁺ + H ₂ → H ₃ ⁺ + H	2.50(-09)	0.	0.	0.0	M	62, 190
327	H ₂ ⁺ + CH → CH ⁺ + H ₂	7.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
326	H ₂ ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + H	7.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
352	H ₂ ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + H ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
351	H ₂ ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
354	H ₂ ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + H ₂	1.25(-09)	0.	0.	0.0	U	24
353	H ₂ ⁺ + CH ₃ → CH ₄ ⁺ + H	1.25(-09)	0.	0.	0.0	U	24
357	H ₂ ⁺ + CH ₄ → CH ₃ ⁺ + H ₂ + H	2.28(-09)	0.	0.	0.0	M	63
356	H ₂ ⁺ + CH ₄ → CH ₄ ⁺ + H ₂	1.41(-09)	0.	0.	0.0	M	63
355	H ₂ ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + H	1.14(-10)	0.	0.	0.0	M	63
325	H ₂ ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + H ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
324	H ₂ ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + H	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
350	H ₂ ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ⁺ + H ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
349	H ₂ ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
365	H ₂ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂	4.82(-09)	0.	0.	0.0	U	63
364	H ₂ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + H	4.77(-10)	0.	0.	0.0	U	63
368	H ₂ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂ + H ₂	8.82(-10)	0.	0.	0.0	M	190
367	H ₂ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₃ ⁺ + H ₂ + H	1.81(-09)	0.	0.	0.0	M	190
366	H ₂ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + H ₂	2.20(-09)	0.	0.	0.0	M	190
334	H ₂ ⁺ + NH → NH ⁺ + H ₂	7.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
333	H ₂ ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + H	7.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
360	H ₂ ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + H ₂	2.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
361	H ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + H ₂	5.70(-09)	0.	0.	0.0	M	63
332	H ₂ ⁺ + N ₂ → N ₂ H ⁺ + H	2.00(-09)	0.	0.	0.0	M	63
340	H ₂ ⁺ + OH → OH ⁺ + H ₂	7.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
339	H ₂ ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + H	7.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
342	H ₂ ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + H ₂	3.87(-09)	0.	0.	0.0	M	63
341	H ₂ ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + H	3.43(-09)	0.	0.	0.0	M	63
338	H ₂ ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + H ₂	7.83(-10)	0.	0.	0.0	U	63
337	H ₂ ⁺ + O ₂ → O ₂ H ⁺ + H	1.92(-09)	0.	0.	0.0	U	63
329	H ₂ ⁺ + CN → CN ⁺ + H ₂	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
328	H ₂ ⁺ + CN → HCN ⁺ + H	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
331	H ₂ ⁺ + CO → CO ⁺ + H ₂	6.44(-10)	0.	0.	0.0	U	63
330	H ₂ ⁺ + CO → HCO ⁺ + H	2.16(-09)	0.	0.	0.0	U	63
359	H ₂ ⁺ + CO ₂ → CO ⁺ + H ₂ O	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
358	H ₂ ⁺ + CO ₂ → CO ₂ ⁺ + H ₂	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
336	H ₂ ⁺ + NO → NO ⁺ + H ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
335	H ₂ ⁺ + NO → HNO ⁺ + H	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
345	H ₂ ⁺ + H ₂ S → S ⁺ + H ₂ + H ₂	7.70(-10)	0.	0.	0.0	M	190
343	H ₂ ⁺ + H ₂ S → SH ⁺ + H ₂ + H	8.60(-10)	0.	0.	0.0	M	190
344	H ₂ ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + H ₂	2.70(-09)	0.	0.	0.0	M	190
346	H ₂ ⁺ + HCN → HCN ⁺ + H ₂	2.70(-09)	0.	0.	0.0	U	24
348	H ₂ ⁺ + HCO → H ₃ ⁺ + CO	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
347	H ₂ ⁺ + HCO → HCO ⁺ + H ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
363	H ₂ ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + H ₂ + H	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
362	H ₂ ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + H ₂	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
374	H ₃ ⁺ + C → CH ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
376	H ₃ ⁺ + N → NH ⁺ + H ₂	2.60(-10)	0.	0.	0.0	U	188
375	H ₃ ⁺ + N → NH ₂ ⁺ + H	3.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 188
377	H ₃ ⁺ + O → OH ⁺ + H ₂	8.00(-10)	0.	0.	0.0	U	64
394	H ₃ ⁺ + Mg → Mg ⁺ + H ₂ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
393	H ₃ ⁺ + Si → Si ⁺ + H ₂ + H	3.70(-09)	0.	0.	0.0	U	24
392	H ₃ ⁺ + Fe → Fe ⁺ + H ₂ + H	4.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
378	H ₃ ⁺ + S → SH ⁺ + H ₂	2.60(-09)	0.	0.	0.0	U	193
379	H ₃ ⁺ + HD → H ₂ D ⁺ + H ₂					[1] M	139
383	H ₃ ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + H ₂	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
405	H ₃ ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + H ₂	1.70(-09)	0.	0.	0.0	U	24
406	H ₃ ⁺ + CH ₃ → CH ₄ ⁺ + H ₂	2.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
407	H ₃ ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + H ₂	2.40(-09)	0.	0.	0.0	M	55, 149
380	H ₃ ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + H ₂	1.80(-09)	0.	0.	0.0	U	24
401	H ₃ ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂	1.70(-09)	0.	0.	0.0	U	24
415	H ₃ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + H ₂	3.50(-09)	0.	0.	0.0	M	55, 188
416	H ₃ ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₂ H ₄ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
418	H ₃ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₃ ⁺ + H ₂ + H ₂	1.20(-10)	0.	0.	0.0	U	189
417	H ₃ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₅ ⁺ + H ₂	1.90(-09)	0.	0.	0.0	U	189
381	H ₃ ⁺ + C ₃ → C ₃ H ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
402	H ₃ ⁺ + C ₃ H → C ₃ H ₂ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
420	H ₃ ⁺ + C ₃ H ₂ → C ₃ H ₃ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
421	H ₃ ⁺ + C ₃ H ₃ → C ₃ H ₄ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
422	H ₃ ⁺ + C ₃ H ₄ → C ₃ H ₅ ⁺ + H ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
382	H ₃ ⁺ + C ₄ → C ₄ H ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
404	H ₃ ⁺ + C ₄ H → C ₄ H ₂ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
423	H ₃ ⁺ + C ₄ H ₂ → C ₄ H ₃ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
388	H ₃ ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + H ₂	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24
409	H ₃ ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + H ₂	1.80(-09)	0.	0.	0.0	U	24
410	H ₃ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + H ₂	4.70(-09)	0.	0.	0.0	M	55
387	H ₃ ⁺ + N ₂ → N ₂ H ⁺ + H ₂	1.80(-09)	0.	0.	0.0	M	149, 152
391	H ₃ ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + H ₂	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24
397	H ₃ ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + H ₂	5.90(-09)	0.	0.	0.0	M	55
390	H ₃ ⁺ + O ₂ → O ₂ H ⁺ + H ₂	6.70(-10)	0.	0.	0.0	M	149
384	H ₃ ⁺ + CN → HCN ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
403	H ₃ ⁺ + C ₃ N → HC ₃ N ⁺ + H ₂	9.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
385	H ₃ ⁺ + CO → HCO ⁺ + H ₂	1.60(-09)	0.	0.	0.0	M	152
408	H ₃ ⁺ + CO ₂ → HCO ₂ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	M	152
386	H ₃ ⁺ + CS → HCS ⁺ + H ₂	6.00(-09)	0.	0.	0.0	C	196
389	H ₃ ⁺ + NO → HNO ⁺ + H ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	M	152
395	H ₃ ⁺ + SH → H ₂ S ⁺ + H ₂	1.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
396	H ₃ ⁺ + SO → HSO ⁺ + H ₂	1.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

[1] k(379) = 1.76 10⁻⁹ - 5.71 10⁻¹² T si T ≤ 80Kk(379) = 1.38 10⁻⁹ - 9.26 10⁻¹³ T si T > 80K

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
411	H ₃ ⁺ + SO ₂ → HSO ₂ ⁺ + H ₂	1.30(-09)	0.	0.	0.0	M	190
398	H ₃ ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + H ₂	8.00(-09)	0.	0.	0.0	M	55
400	H ₃ ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + H ₂	8.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
413	H ₃ ⁺ + HC ₃ N → H ₂ C ₃ N ⁺ + H ₂	9.10(-09)	0.	0.	0.0	U	189
414	H ₃ ⁺ + HC ₃ N → H ₂ C ₃ N ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
399	H ₃ ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + H ₂	1.70(-09)	0.	0.	0.0	U	24
412	H ₃ ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + H ₂	2.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
852	H ₂ D ⁺ + H ₂ → H ₃ ⁺ + HD			[1]		M	139, 211
1636	CH ⁺ + H → C ⁺ + H ₂	3.86(-13)	1.84(-16)	-0.75	0.0	M	203
570	CH ⁺ + C → C ₂ ⁺ + H	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
571	CH ⁺ + N → CN ⁺ + H	1.90(-10)	0.	0.	0.0	M	145
572	CH ⁺ + O → CO ⁺ + H	3.50(-10)	0.	0.	0.0	M	145
589	CH ⁺ + Mg → Mg ⁺ + CH	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
588	CH ⁺ + Si → Si ⁺ + CH	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
587	CH ⁺ + Fe → Fe ⁺ + CH	2.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
575	CH ⁺ + S → S ⁺ + CH	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
573	CH ⁺ + S → CS ⁺ + H	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
574	CH ⁺ + S → SH ⁺ + C	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
576	CH ⁺ + H ₂ → CH ₂ ⁺ + H	1.50(-09)	0.	0.	0.0	M	58, 180, 184
578	CH ⁺ + CH → C ₂ ⁺ + H ₂	7.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
601	CH ⁺ + CH ₂ → C ₂ H ⁺ + H ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
602	CH ⁺ + CH ₃ → C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	
604	CH ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₂ ⁺ + H ₂ + H	1.56(-10)	0.	0.	0.0	M	77, 188
605	CH ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₃ ⁺ + H ₂	1.07(-09)	0.	0.	0.0	M	77, 188
603	CH ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₄ ⁺ + H	6.50(-11)	0.	0.	0.0	M	190
577	CH ⁺ + C ₂ → C ₃ ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
600	CH ⁺ + C ₂ H → C ₃ ⁺ + H ₂	9.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
614	CH ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₃ H ₂ ⁺ + H	2.40(-09)	0.	0.	0.0	M	190
581	CH ⁺ + NH → CN ⁺ + H ₂	7.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
607	CH ⁺ + NH ₂ → HCN ⁺ + H ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
610	CH ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + CH	4.59(-10)	0.	0.	0.0	M	80
608	CH ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + C	4.05(-10)	0.	0.	0.0	M	80
609	CH ⁺ + NH ₃ → H ₂ CN ⁺ + H ₂	1.84(-09)	0.	0.	0.0	M	80
586	CH ⁺ + OH → CO ⁺ + H ₂	7.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
591	CH ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + C	2.90(-10)	0.	0.	0.0	U	76
592	CH ⁺ + H ₂ O → HCO ⁺ + H ₂	2.32(-09)	0.	0.	0.0	U	76
590	CH ⁺ + H ₂ O → H ₂ CO ⁺ + H	2.90(-10)	0.	0.	0.0	U	76
585	CH ⁺ + O ₂ → O ⁺ + HCO	9.70(-11)	0.	0.	0.0	U	76
584	CH ⁺ + O ₂ → CO ⁺ + OH	9.70(-11)	0.	0.	0.0	U	76
583	CH ⁺ + O ₂ → HCO ⁺ + O	7.76(-10)	0.	0.	0.0	U	76
579	CH ⁺ + CN → C ₂ N ⁺ + H	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
580	CH ⁺ + CO → HCO ⁺ + C	7.00(-12)	0.	0.	0.0	U	188
606	CH ⁺ + CO ₂ → HCO ⁺ + CO	1.60(-09)	0.	0.	0.0	M	76
582	CH ⁺ + NO → NO ⁺ + CH	7.60(-10)	0.	0.	0.0	M	145
593	CH ⁺ + H ₂ S → HCS ⁺ + H ₂	1.47(-10)	0.	0.	0.0	M	190
595	CH ⁺ + HCN → C ₂ N ⁺ + H ₂	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	156, 200
594	CH ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + C	2.40(-09)	0.	0.	0.0	U	156, 188, 200
599	CH ⁺ + HNC → C ₂ N ⁺ + H ₂	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	156
598	CH ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + C	2.40(-09)	0.	0.	0.0	U	188
597	CH ⁺ + HCO → CH ₂ ⁺ + CO	4.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

[1] Le taux est interpolé entre des valeurs à températures données.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
596	CH ⁺ + HCO → HCO ⁺ + CH	4.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
612	CH ⁺ + H ₂ CO → CH ₃ ⁺ + CO	9.60(-10)	0.	0.	0.0	U	79
613	CH ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + CH ₂	9.60(-10)	0.	0.	0.0	U	79
611	CH ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + C	9.60(-10)	0.	0.	0.0	U	79
1043	CH ₂ ⁺ + C → C ₂ H ⁺ + H	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1045	CH ₂ ⁺ + N → CN ⁺ + H ₂	1.10(-10)	0.	0.	0.0	U	145
1044	CH ₂ ⁺ + N → HCN ⁺ + H	2.20(-10)	0.	0.	0.0	U	145, 188
1046	CH ₂ ⁺ + O → HCO ⁺ + H	7.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1047	CH ₂ ⁺ + S → HCS ⁺ + H	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1048	CH ₂ ⁺ + H ₂ → CH ₃ ⁺ + H	7.20(-10)	0.	0.	0.0	M	58, 184
1050	CH ₂ ⁺ + CH → C ₂ H ₂ ⁺ + H	7.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1059	CH ₂ ⁺ + CH ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1061	CH ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂ + H ₂	1.44(-10)	0.	0.	0.0	M	77
1062	CH ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + H ₂	9.10(-10)	0.	0.	0.0	U	188
1060	CH ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ₅ ⁺ + H	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	188
1049	CH ₂ ⁺ + C ₂ → C ₃ H ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1067	CH ₂ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₃ H ₃ ⁺ + H	2.50(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1051	CH ₂ ⁺ + NH → H ₂ CN ⁺ + H	7.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1064	CH ₂ ⁺ + NH ₂ → H ₂ CN ⁺ + H ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1065	CH ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + CH	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	76, 188
1055	CH ₂ ⁺ + OH → H ₂ CO ⁺ + H	7.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1056	CH ₂ ⁺ + H ₂ O → H ₃ CO ⁺ + H	2.90(-09)	0.	0.	0.0	M	79
1054	CH ₂ ⁺ + O ₂ → HCO ⁺ + OH	9.10(-10)	0.	0.	0.0	U	76, 188
1053	CH ₂ ⁺ + O ₂ → H ₂ CO ⁺ + O	7.28(-10)	0.	0.	0.0	U	76
1063	CH ₂ ⁺ + CO ₂ → H ₂ CO ⁺ + CO	1.60(-09)	0.	0.	0.0	M	76
1052	CH ₂ ⁺ + NO → NO ⁺ + CH ₂	4.20(-10)	0.	0.	0.0	M	145
1057	CH ₂ ⁺ + H ₂ S → HCS ⁺ + H ₂ + H	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	188
1058	CH ₂ ⁺ + HCO → CH ₃ ⁺ + CO	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1066	CH ₂ ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + CH ₃	2.81(-09)	0.	0.	0.0	M	79
1069	CH ₃ ⁺ + C → C ₂ H ⁺ + H ₂	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 189
1068	CH ₃ ⁺ + C → C ₂ H ₂ ⁺ + H	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 189
1071	CH ₃ ⁺ + N → HCN ⁺ + H ₂	3.35(-11)	0.	0.	0.0	U	64
1070	CH ₃ ⁺ + N → H ₂ CN ⁺ + H	3.35(-11)	0.	0.	0.0	U	64
1074	CH ₃ ⁺ + O → H ₃ ⁺ + CO	8.80(-11)	0.	0.	0.0	U	64, 189
1073	CH ₃ ⁺ + O → HCO ⁺ + H ₂	3.10(-10)	0.	0.	0.0	U	64, 189
1072	CH ₃ ⁺ + O → H ₂ CO ⁺ + H	4.40(-11)	0.	0.	0.0	U	64
1084	CH ₃ ⁺ + Mg → Mg ⁺ + CH ₃	3.50(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1083	CH ₃ ⁺ + Si → Si ⁺ + CH ₃	9.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1082	CH ₃ ⁺ + Fe → Fe ⁺ + CH ₃	2.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1075	CH ₃ ⁺ + S → HCS ⁺ + H ₂	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1077	CH ₃ ⁺ + CH → C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂	7.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1091	CH ₃ ⁺ + CH ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + H ₂	9.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1092	CH ₃ ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ₅ ⁺ + H ₂	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1076	CH ₃ ⁺ + C ₂ → C ₃ H ⁺ + H ₂	9.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1088	CH ₃ ⁺ + C ₂ H → C ₃ H ₂ ⁺ + H ₂	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1087	CH ₃ ⁺ + C ₂ H → C ₃ H ₃ ⁺ + H	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1096	CH ₃ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₃ H ₃ ⁺ + H ₂	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1099	CH ₃ ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₂ H ₃ ⁺ + CH ₃	3.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1097	CH ₃ ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₃ H ₃ ⁺ + H ₂ + H	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1098	CH ₃ ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₃ H ₄ ⁺ + H ₂	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1102	CH ₃ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₃ ⁺ + CH ₄	3.50(-10)	0.	0.	0.0	U	189

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1100	CH ₃ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₃ H ₃ ⁺ + H ₂ + H ₂	4.60(-11)	0.	0.	0.0	U	189
1101	CH ₃ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₃ H ₅ ⁺ + H ₂	5.20(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1090	CH ₃ ⁺ + C ₃ H → C ₃ H ⁺ + CH ₃	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1089	CH ₃ ⁺ + C ₃ H → C ₄ H ₂ ⁺ + H ₂	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1078	CH ₃ ⁺ + NH → H ₂ CN ⁺ + H ₂	7.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1093	CH ₃ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + CH ₂	3.04(-10)	0.	0.	0.0	M	147
1081	CH ₃ ⁺ + OH → H ₂ CO ⁺ + H ₂	7.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1080	CH ₃ ⁺ + O ₂ → HCO ⁺ + H ₂ O	4.30(-11)	0.	0.	0.0	M	55
1079	CH ₃ ⁺ + NO → NO ⁺ + CH ₃	1.00(-09)	0.	0.	0.0	M	145
1095	CH ₃ ⁺ + HC ₃ N → C ₃ H ₃ ⁺ + HCN	2.52(-09)	0.	0.	0.0	U	191
1085	CH ₃ ⁺ + HCO → CH ₄ ⁺ + CO	4.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1086	CH ₃ ⁺ + HCO → HCO ⁺ + CH ₃	4.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1094	CH ₃ ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + CH ₄	1.00(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1105	CH ₄ ⁺ + H → CH ₃ ⁺ + H ₂	1.00(-11)	0.	0.	0.0	U	24, 188
1107	CH ₄ ⁺ + O → CH ₃ ⁺ + OH	1.42(-10)	0.	0.	0.0	U	55, 88
1106	CH ₄ ⁺ + O → H ₂ CO ⁺ + H ₂	5.88(-10)	0.	0.	0.0	U	55, 88
1108	CH ₄ ⁺ + H ₂ → CH ₅ ⁺ + H			[1]		M	58, 180, 185
1115	CH ₄ ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + CH ₃	1.50(-09)	0.	0.	0.0	U	77, 188
1123	CH ₄ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₂ ⁺ + CH ₄	1.13(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1122	CH ₄ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + CH ₃	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	55, 188
1121	CH ₄ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₃ H ₃ ⁺ + H ₂ + H	1.25(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1126	CH ₄ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + CH ₄	1.38(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1125	CH ₄ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₅ ⁺ + CH ₃	4.23(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1124	CH ₄ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₃ H ₅ ⁺ + H ₂ + H	5.52(-11)	0.	0.	0.0	M	190
1118	CH ₄ ⁺ + NH ₃ → CH ₅ ⁺ + NH ₂	6.00(-11)	0.	0.	0.0	M	147
1117	CH ₄ ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + CH ₄	1.60(-09)	0.	0.	0.0	M	147
1116	CH ₄ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + CH ₃	1.50(-09)	0.	0.	0.0	M	147
1111	CH ₄ ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + CH ₃	2.50(-09)	0.	0.	0.0	M	147
1110	CH ₄ ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + CH ₄	4.40(-10)	0.	0.	0.0	M	76
1109	CH ₄ ⁺ + CO → HCO ⁺ + CH ₃	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	76
1112	CH ₄ ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + CH ₄	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	188
1113	CH ₄ ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + CH ₃	2.10(-09)	0.	0.	0.0	M	154
1114	CH ₄ ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + CH ₃	2.10(-09)	0.	0.	0.0	M	
1120	CH ₄ ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + CH ₄	1.62(-09)	0.	0.	0.0	M	79
1119	CH ₄ ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + CH ₃	1.98(-09)	0.	0.	0.0	M	79
1128	CH ₅ ⁺ + H → CH ₄ ⁺ + H ₂			[1]		M	180
1131	CH ₅ ⁺ + C → CH ⁺ + CH ₄	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 189
1130	CH ₅ ⁺ + C → C ₂ H ₃ ⁺ + H ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1129	CH ₅ ⁺ + C → C ₂ H ₄ ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1132	CH ₅ ⁺ + O → H ₃ O ⁺ + CH ₂	2.16(-10)	0.	0.	0.0	M	145
1138	CH ₅ ⁺ + Mg → Mg ⁺ + CH ₄ + H	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	188
1134	CH ₅ ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + CH ₄	6.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1144	CH ₅ ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + CH ₄	9.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1133	CH ₅ ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + CH ₄	9.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1143	CH ₅ ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + CH ₄	9.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1148	CH ₅ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + CH ₄	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	68, 188
1136	CH ₅ ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + CH ₄	7.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1145	CH ₅ ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + CH ₄	9.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1146	CH ₅ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + CH ₄	2.50(-09)	0.	0.	0.0	U	83, 188

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

[1] Le taux est interpolé entre des valeurs à températures données.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1137	CH ₅ ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + CH ₄	7.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1139	CH ₅ ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + CH ₄	3.70(-09)	0.	0.	0.0	M	84
1135	CH ₅ ⁺ + CO → HCO ⁺ + CH ₄	9.90(-10)	0.	0.	0.0	U	149, 188
1140	CH ₅ ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + CH ₄	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1142	CH ₅ ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + CH ₄	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	
1141	CH ₅ ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + CH ₄	8.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1147	CH ₅ ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + CH ₄	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
535	C ₂ ⁺ + C → C ⁺ + C ₂	1.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
536	C ₂ ⁺ + N → C ⁺ + CN	4.00(-11)	0.	0.	0.0	M	145
538	C ₂ ⁺ + O → C ⁺ + CO	1.55(-10)	0.	0.	0.0	U	145
537	C ₂ ⁺ + O → CO ⁺ + C	1.55(-10)	0.	0.	0.0	U	145
540	C ₂ ⁺ + S → S ⁺ + C ₂	5.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
539	C ₂ ⁺ + S → CS ⁺ + C	5.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
541	C ₂ ⁺ + H ₂ → C ₂ H ⁺ + H	1.10(-09)	0.	0.	0.0	M	58, 184
544	C ₂ ⁺ + CH → CH ⁺ + C ₂	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
543	C ₂ ⁺ + CH → C ₃ ⁺ + H	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
556	C ₂ ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + C ₂	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
555	C ₂ ⁺ + CH ₂ → C ₃ H ⁺ + H	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
558	C ₂ ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + C ₂	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	
557	C ₂ ⁺ + CH ₃ → C ₃ H ⁺ + H ₂	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	
563	C ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ⁺ + CH ₃	2.38(-10)	0.	0.	0.0	M	67
562	C ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ₂ ⁺ + CH ₂	1.82(-10)	0.	0.	0.0	M	67
560	C ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ⁺ + H ₂ + H	1.96(-10)	0.	0.	0.0	M	67
561	C ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₂ ⁺ + H ₂	5.74(-10)	0.	0.	0.0	M	190
559	C ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₃ ⁺ + H	2.10(-10)	0.	0.	0.0	M	190
542	C ₂ ⁺ + C ₂ → C ₃ ⁺ + C	8.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
565	C ₂ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₄ H ⁺ + H	1.70(-09)	0.	0.	0.0	M	190
546	C ₂ ⁺ + NH → C ₂ H ⁺ + N	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
545	C ₂ ⁺ + NH → C ₂ N ⁺ + H	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
564	C ₂ ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + C ₂	4.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
549	C ₂ ⁺ + H ₂ O → C ₂ H ⁺ + OH	4.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
548	C ₂ ⁺ + O ₂ → CO ⁺ + CO	8.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
547	C ₂ ⁺ + NO → NO ⁺ + C ₂	3.40(-10)	0.	0.	0.0	M	145
551	C ₂ ⁺ + HCN → C ₂ H ⁺ + CN	2.60(-10)	0.	0.	0.0	M	190
550	C ₂ ⁺ + HCN → C ₃ H ⁺ + N	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	188
554	C ₂ ⁺ + HNC → C ₃ H ⁺ + N	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	188
553	C ₂ ⁺ + HCO → C ₂ H ⁺ + CO	3.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
552	C ₂ ⁺ + HCO → HCO ⁺ + C ₂	3.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
994	C ₂ H ⁺ + C → C ₃ ⁺ + H	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
995	C ₂ H ⁺ + N → CH ⁺ + CN	9.00(-11)	0.	0.	0.0	U	145, 188
999	C ₂ H ⁺ + O → C ⁺ + HCO	8.25(-11)	0.	0.	0.0	M	145
998	C ₂ H ⁺ + O → CH ⁺ + CO	8.25(-11)	0.	0.	0.0	M	145
997	C ₂ H ⁺ + O → CO ⁺ + CH	8.25(-11)	0.	0.	0.0	M	145
996	C ₂ H ⁺ + O → HCO ⁺ + C	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	145, 188
1000	C ₂ H ⁺ + S → S ⁺ + C ₂ H	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1001	C ₂ H ⁺ + H ₂ → C ₂ H ₂ ⁺ + H	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	58, 184
1003	C ₂ H ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + C ₂	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1002	C ₂ H ⁺ + CH → C ₃ H ⁺ + H	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1012	C ₂ H ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + C ₂	4.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1015	C ₂ H ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ₂ ⁺ + CH ₃	3.74(-10)	0.	0.	0.0	M	67
1014	C ₂ H ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₃ ⁺ + H ₂	3.74(-10)	0.	0.	0.0	M	190

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1013	C ₂ H ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₄ ⁺ + H	1.43(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1019	C ₂ H ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₄ H ₂ ⁺ + H	1.70(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1016	C ₂ H ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + C ₂	4.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1017	C ₂ H ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + C ₂	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1004	C ₂ H ⁺ + NO → NO ⁺ + C ₂ H	1.20(-10)	0.	0.	0.0	M	145
1007	C ₂ H ⁺ + HCN → C ₂ H ₂ ⁺ + CN	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	155, 190
1006	C ₂ H ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + C ₂	9.50(-10)	0.	0.	0.0	U	155, 188, 190
1005	C ₂ H ⁺ + HCN → HC ₃ N ⁺ + H	1.80(-09)	0.	0.	0.0	U	188, 190
1011	C ₂ H ⁺ + HNC → C ₂ H ₂ ⁺ + CN	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	155, 190
1010	C ₂ H ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + C ₂	9.50(-10)	0.	0.	0.0	U	188
1009	C ₂ H ⁺ + HNC → HC ₃ N ⁺ + H	1.80(-09)	0.	0.	0.0	U	188
1008	C ₂ H ⁺ + HCO → C ₂ H ₂ ⁺ + CO	7.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1018	C ₂ H ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + C ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1304	C ₂ H ₂ ⁺ + C → C ⁺ + C ₂ H ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1303	C ₂ H ₂ ⁺ + C → C ₃ ⁺ + H ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1302	C ₂ H ₂ ⁺ + C → C ₃ H ⁺ + H	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 189
1306	C ₂ H ₂ ⁺ + N → CH ⁺ + HCN	2.50(-11)	0.	0.	0.0	U	145, 189
1305	C ₂ H ₂ ⁺ + N → C ₂ N ⁺ + H ₂	7.50(-11)	0.	0.	0.0	U	145, 189
1307	C ₂ H ₂ ⁺ + O → HCO ⁺ + CH	8.50(-11)	0.	0.	0.0	U	145, 189
1313	C ₂ H ₂ ⁺ + Mg → Mg ⁺ + C ₂ H ₂	3.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1312	C ₂ H ₂ ⁺ + Si → Si ⁺ + C ₂ H ₂	1.70(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1311	C ₂ H ₂ ⁺ + Fe → Fe ⁺ + C ₂ H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1308	C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + H	1.00(-11)	0.	0.	0.0	M	190
1325	C ₂ H ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₄ ⁺ + H ₂	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1324	C ₂ H ₂ ⁺ + CH ₄ → C ₃ H ₅ ⁺ + H	8.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1309	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + C ₂ H	8.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1323	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ H → C ₄ H ₂ ⁺ + H	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1333	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₄ H ₂ ⁺ + H ₂	5.20(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1332	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₄ H ₃ ⁺ + H	8.80(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1336	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₂ H ₃ ⁺ + C ₂ H ₂	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1335	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₃ H ₃ ⁺ + CH ₂	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1334	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₄ H ₃ ⁺ + H ₂	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1338	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + C ₂ H ₂	4.10(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1337	C ₂ H ₂ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₃ H ₃ ⁺ + CH ₃	5.20(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1326	C ₂ H ₂ ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + C ₂ H	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1328	C ₂ H ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + C ₂ H ₂	2.41(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1327	C ₂ H ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + C ₂ H	9.61(-10)	0.	0.	0.0	M	55
1314	C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + C ₂ H	2.20(-10)	0.	0.	0.0	M	55
1310	C ₂ H ₂ ⁺ + NO → NO ⁺ + C ₂ H ₂	1.20(-10)	0.	0.	0.0	M	145
1315	C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂ S → C ₂ H ₃ ⁺ + SH	4.60(-11)	0.	0.	0.0	M	190
1316	C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + C ₂ H ₂	2.21(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1318	C ₂ H ₂ ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + C ₂ H	2.40(-10)	0.	0.	0.0	M	155, 188
1317	C ₂ H ₂ ⁺ + HCN → H ₂ C ₃ N ⁺ + H	1.20(-10)	0.	0.	0.0	U	188
1322	C ₂ H ₂ ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + C ₂ H	2.40(-10)	0.	0.	0.0	M	188
1321	C ₂ H ₂ ⁺ + HNC → H ₂ C ₃ N ⁺ + H	1.20(-10)	0.	0.	0.0	U	188
1331	C ₂ H ₂ ⁺ + HC ₃ N → C ₄ H ₂ ⁺ + HCN	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	191
1319	C ₂ H ₂ ⁺ + HCO → C ₂ H ₃ ⁺ + CO	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1320	C ₂ H ₂ ⁺ + HCO → HCO ⁺ + C ₂ H ₂	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1330	C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + C ₂ H ₂	8.80(-10)	0.	0.	0.0	U	55
1329	C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + C ₂ H	4.18(-10)	0.	0.	0.0	U	55
1344	C ₂ H ₃ ⁺ + H → C ₂ H ₂ ⁺ + H ₂	1.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

N°	Réactions	a	b	α	β K		Réf.
		$\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$	$\text{cm}^3 \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$				
1346	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_3\text{H}^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1345	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1347	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{O} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_2$	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	184
1354	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5^+ + \text{H}_2$	2.20(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1353	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1352	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_2^+ + \text{H}_2$	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1351	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_3^+ + \text{H}$	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1356	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_3^+ + \text{H}_2$	7.20(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1357	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{C}_2\text{H}$	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1358	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{CH}_3$	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1359	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	9.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1355	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	2.50(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1348	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	1.10(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1349	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	2.90(-09)	0.	0.	0.0	M	155, 188
1350	$\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{HNC} \rightarrow \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	2.90(-09)	0.	0.	0.0	M	188
1363	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1362	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1364	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{O} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_3$	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1367	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{CH}_2$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1366	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_3^+ + \text{H}_2$	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1370	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{CH}_3$	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1372	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_4$	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1371	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1373	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5^+ + \text{CH}_3$	7.30(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1369	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_4$	1.24(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1368	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{C}_2\text{H}_3$	1.94(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1365	$\text{C}_2\text{H}_4^+ + \text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{H}_2\text{S}^+ + \text{C}_2\text{H}_4$	6.57(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1375	$\text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1374	$\text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1376	$\text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{O} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_4$	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1378	$\text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{CH}_4$	6.80(-11)	0.	0.	0.0	U	189
1379	$\text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5^+ + \text{CH}_4$	2.48(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1377	$\text{C}_2\text{H}_5^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{C}_2\text{H}_4$	2.18(-09)	0.	0.	0.0	M	190
566	$\text{C}_3^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}^+ + \text{H}$	3.00(-10)	0.	0.	0.0	U	184, 189
1031	$\text{C}_3\text{H}^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_4^+ + \text{H}$	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1036	$\text{C}_3\text{H}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	3.85(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1035	$\text{C}_3\text{H}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{CH}_2$	1.10(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1034	$\text{C}_3\text{H}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_3^+ + \text{H}_2$	5.50(-11)	0.	0.	0.0	U	188
1037	$\text{C}_3\text{H}^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	9.02(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1033	$\text{C}_3\text{H}^+ + \text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{CS}$	3.60(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1386	$\text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_4^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1385	$\text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_4\text{H}^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1387	$\text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{N} \rightarrow \text{HC}_3\text{N}^+ + \text{H}$	2.50(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1388	$\text{C}_3\text{H}_2^+ + \text{O} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{C}_2\text{H}$	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1390	$\text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_4\text{H}^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1389	$\text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_2^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1392	$\text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{N} \rightarrow \text{HC}_3\text{N}^+ + \text{H}_2$	1.20(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1391	$\text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{N} \rightarrow \text{H}_2\text{C}_3\text{N}^+ + \text{H}$	1.20(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1393	$\text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{O} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{C}_2\text{H}_2$	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1395	$\text{C}_3\text{H}_4^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_2^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1394	$\text{C}_3\text{H}_4^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_3^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnus.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1397	C ₃ H ₄ ⁺ + N → H ₂ C ₃ N ⁺ + H ₂	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1396	C ₃ H ₄ ⁺ + N → H ₃ C ₃ N ⁺ + H	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1398	C ₃ H ₄ ⁺ + O → HCO ⁺ + C ₂ H ₃	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1399	C ₃ H ₅ ⁺ + C → C ₄ H ₃ ⁺ + H ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1401	C ₃ H ₅ ⁺ + N → C ₂ H ₄ ⁺ + HCN	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1400	C ₃ H ₅ ⁺ + N → H ₃ C ₃ N ⁺ + H ₂	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
1402	C ₃ H ₅ ⁺ + O → HCO ⁺ + C ₂ H ₄	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
567	C ₄ ⁺ + H ₂ → C ₄ H ⁺ + H	7.00(-10)	0.	0.	0.0	U	184, 189
568	C ₄ ⁺ + HCN → C ₄ H ⁺ + CN	8.40(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1039	C ₄ H ⁺ + Mg → Mg ⁺ + C ₄ H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1038	C ₄ H ⁺ + Fe → Fe ⁺ + C ₄ H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
1040	C ₄ H ⁺ + HCN → HC ₅ N ⁺ + H	1.62(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1041	C ₄ H ⁺ + HNC → HC ₅ N ⁺ + H	1.62(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1403	C ₄ H ₂ ⁺ + HCN → HC ₅ N ⁺ + H ₂	0.	0.	0.	0.0	M	190
1404	C ₄ H ₂ ⁺ + HNC → HC ₅ N ⁺ + H ₂	0.	0.	0.	0.0	M	190
1405	C ₄ H ₃ ⁺ + HCN → H ₃ C ₃ N ⁺ + C ₂ H	0.	0.	0.	0.0	M	190
1406	C ₄ H ₃ ⁺ + HNC → H ₃ C ₃ N ⁺ + C ₂ H	0.	0.	0.	0.0	M	190
719	NH ⁺ + C → CH ⁺ + N	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
720	NH ⁺ + N → N ₂ ⁺ + H	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24
722	NH ⁺ + O → OH ⁺ + N	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
721	NH ⁺ + O → NO ⁺ + H	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
724	NH ⁺ + S → S ⁺ + NH	6.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
723	NH ⁺ + S → SH ⁺ + N	6.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
726	NH ⁺ + H ₂ → H ₃ ⁺ + N	2.25(-10)	0.	0.	0.0	M	136
725	NH ⁺ + H ₂ → NH ₂ ⁺ + H	1.28(-09)	0.	0.	0.0	M	136
730	NH ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + N	9.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
751	NH ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + N	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
752	NH ⁺ + CH ₃ → CH ₄ ⁺ + N	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
753	NH ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + N	9.60(-11)	0.	0.	0.0	M	136
755	NH ⁺ + CH ₄ → NH ₂ ⁺ + CH ₃	1.92(-10)	0.	0.	0.0	M	136
754	NH ⁺ + CH ₄ → H ₂ CN ⁺ + H ₂ + H	6.72(-10)	0.	0.	0.0	M	136
729	NH ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + N	3.27(-10)	0.	0.	0.0	U	24
727	NH ⁺ + C ₂ → C ₂ N ⁺ + H	3.27(-10)	0.	0.	0.0	U	24
728	NH ⁺ + C ₂ → HCN ⁺ + C	3.27(-10)	0.	0.	0.0	U	24
750	NH ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + N	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
765	NH ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + N	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	
768	NH ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₂ ⁺ + NH ₃	1.50(-10)	0.	0.	0.0	M	190
767	NH ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₃ ⁺ + NH ₂	3.75(-10)	0.	0.	0.0	M	190
766	NH ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + NH	3.75(-10)	0.	0.	0.0	M	190
734	NH ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + N	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
759	NH ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + N	1.50(-09)	0.	0.	0.0	U	24
761	NH ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + NH	1.80(-09)	0.	0.	0.0	M	136
760	NH ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + N	6.00(-10)	0.	0.	0.0	M	136
733	NH ⁺ + N ₂ → N ₂ H ⁺ + N	6.50(-10)	0.	0.	0.0	U	136
740	NH ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + N	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
745	NH ⁺ + H ₂ O → NH ₂ ⁺ + OH	8.75(-10)	0.	0.	0.0	M	136
742	NH ⁺ + H ₂ O → NH ₃ ⁺ + O	1.75(-10)	0.	0.	0.0	M	136
744	NH ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + NH	1.05(-09)	0.	0.	0.0	M	136
741	NH ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + N	1.05(-09)	0.	0.	0.0	M	136
743	NH ⁺ + H ₂ O → HNO ⁺ + H ₂	3.50(-10)	0.	0.	0.0	M	136
738	NH ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + NH	4.51(-10)	0.	0.	0.0	M	136

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
737	NH ⁺ + O ₂ → O ₂ H ⁺ + N	1.64(-10)	0.	0.	0.0	M	136
739	NH ⁺ + O ₂ → NO ⁺ + OH	2.05(-10)	0.	0.	0.0	M	136
731	NH ⁺ + CN → HCN ⁺ + N	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
732	NH ⁺ + CO → HCO ⁺ + N	4.41(-10)	0.	0.	0.0	M	136
758	NH ⁺ + CO ₂ → NO ⁺ + HCO	3.30(-10)	0.	0.	0.0	M	136
757	NH ⁺ + CO ₂ → HNO ⁺ + CO	3.85(-10)	0.	0.	0.0	M	136
756	NH ⁺ + CO ₂ → HCO ₂ ⁺ + N	3.85(-10)	0.	0.	0.0	M	136
735	NH ⁺ + NO → N ₂ H ⁺ + O	1.78(-10)	0.	0.	0.0	M	136
736	NH ⁺ + NO → NO ⁺ + NH	7.12(-10)	0.	0.	0.0	M	136
746	NH ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + NH	9.35(-10)	0.	0.	0.0	M	190
747	NH ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + N	1.80(-09)	0.	0.	0.0	U	24
749	NH ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + N	1.80(-09)	0.	0.	0.0	U	
748	NH ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + N	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24
764	NH ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + NH ₂	1.82(-09)	0.	0.	0.0	M	136
763	NH ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + NH	9.90(-10)	0.	0.	0.0	M	136
762	NH ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + N	4.95(-10)	0.	0.	0.0	M	136
1188	NH ₂ ⁺ + N → N ₂ H ⁺ + H	9.10(-11)	0.	0.	0.0	U	24
1189	NH ₂ ⁺ + O → HNO ⁺ + H	7.20(-11)	0.	0.	0.0	U	24
1190	NH ₂ ⁺ + H ₂ → NH ₃ ⁺ + H	1.20(-10)	0.	0.	0.0	M	58
1193	NH ₂ ⁺ + CH → CH ⁺ + NH ₂	3.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1192	NH ₂ ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + NH	3.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1209	NH ₂ ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + NH ₂	4.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1208	NH ₂ ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + NH	4.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1210	NH ₂ ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + NH ₂	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	
1211	NH ₂ ⁺ + CH ₄ → NH ₃ ⁺ + CH ₃	9.20(-10)	0.	0.	0.0	M	136
1191	NH ₂ ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + NH	9.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1207	NH ₂ ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + NH	9.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1218	NH ₂ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + NH ₂	4.50(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1217	NH ₂ ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₅ ⁺ + NH	3.00(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1195	NH ₂ ⁺ + NH → NH ₃ ⁺ + N	7.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1212	NH ₂ ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + NH	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1214	NH ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + NH ₂	6.90(-10)	0.	0.	0.0	M	136
1213	NH ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + NH	1.61(-09)	0.	0.	0.0	M	136
1198	NH ₂ ⁺ + H ₂ O → NH ₄ ⁺ + O	1.45(-10)	0.	0.	0.0	M	136
1199	NH ₂ ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + NH	2.75(-09)	0.	0.	0.0	M	136
1197	NH ₂ ⁺ + O ₂ → HNO ⁺ + OH	2.10(-11)	0.	0.	0.0	M	136
1194	NH ₂ ⁺ + CN → H ₂ CN ⁺ + N	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1196	NH ₂ ⁺ + NO → NO ⁺ + NH ₂	7.00(-10)	0.	0.	0.0	M	136
1201	NH ₂ ⁺ + H ₂ S → NH ₃ ⁺ + SH	4.50(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1200	NH ₂ ⁺ + H ₂ S → NH ₄ ⁺ + S	1.80(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1203	NH ₂ ⁺ + H ₂ S → SH ⁺ + NH ₃	1.80(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1202	NH ₂ ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + NH ₂	7.20(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1204	NH ₂ ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + NH	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1206	NH ₂ ⁺ + HCO → HCO ⁺ + NH ₂	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1205	NH ₂ ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + NH	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1216	NH ₂ ⁺ + H ₂ CO → NH ₃ ⁺ + HCO	5.60(-10)	0.	0.	0.0	M	136
1215	NH ₂ ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + NH	2.24(-09)	0.	0.	0.0	M	136
1219	NH ₃ ⁺ + O → HNO ⁺ + H ₂	1.00(-11)	0.	0.	0.0	U	24
1228	NH ₃ ⁺ + Mg → Mg ⁺ + NH ₃	3.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1227	NH ₃ ⁺ + Si → Si ⁺ + NH ₃	1.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1226	NH ₃ ⁺ + Fe → Fe ⁺ + NH ₃	2.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1220	NH ₃ ⁺ + H ₂ → NH ₄ ⁺ + H			[1]		M	87, 144, 151, 181
1222	NH ₃ ⁺ + CH → NH ₄ ⁺ + C	6.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1234	NH ₃ ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + NH ₂	9.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1235	NH ₃ ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + NH ₃	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	
1236	NH ₃ ⁺ + CH ₄ → NH ₄ ⁺ + CH ₃	4.80(-10)	0.	0.	0.0	M	136
1221	NH ₃ ⁺ + C ₂ → C ₂ H ₂ ⁺ + NH	1.00(-11)	0.	0.	0.0	U	24
1240	NH ₃ ⁺ + C ₂ H ₄ → NH ₄ ⁺ + C ₂ H ₃	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1223	NH ₃ ⁺ + NH → NH ₄ ⁺ + N	7.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1237	NH ₃ ⁺ + NH ₂ → NH ₄ ⁺ + NH	1.00(-11)	0.	0.	0.0	U	24
1238	NH ₃ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + NH ₂	1.10(-09)	0.	0.26	0.0	M	83
1225	NH ₃ ⁺ + OH → NH ₄ ⁺ + O	7.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1229	NH ₃ ⁺ + H ₂ O → NH ₄ ⁺ + OH	3.00(-11)	0.	0.	0.0	M	136
1224	NH ₃ ⁺ + NO → NO ⁺ + NH ₃	7.20(-10)	0.	0.	0.0	M	136
1230	NH ₃ ⁺ + HCN → NH ₄ ⁺ + CN	1.00(-11)	0.	0.	0.0	M	157
1233	NH ₃ ⁺ + HNC → NH ₄ ⁺ + CN	1.00(-11)	0.	0.	0.0	M	
1231	NH ₃ ⁺ + HCO → NH ₄ ⁺ + CO	4.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1232	NH ₃ ⁺ + HCO → HCO ⁺ + NH ₃	4.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1239	NH ₃ ⁺ + H ₂ CO → NH ₄ ⁺ + HCO	4.90(-10)	0.	0.	0.0	M	157
1241	NH ₄ ⁺ + C → H ₂ CN ⁺ + H ₂	1.00(-11)	0.	0.	0.0	U	24
688	N ₂ ⁺ + H → H ⁺ + N ₂	1.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
689	N ₂ ⁺ + C → C ⁺ + N ₂	1.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
690	N ₂ ⁺ + N → N ⁺ + N ₂	1.00(-11)	0.	0.	0.0	M	68
692	N ₂ ⁺ + O → O ⁺ + N ₂	3.64(-11)	0.	0.23	0.0	M	69
691	N ₂ ⁺ + O → NO ⁺ + N	6.04(-10)	0.	0.	0.0	M	69
703	N ₂ ⁺ + Mg → Mg ⁺ + N ₂	4.50(-10)	-9.90(-13)	0.	0.0	U	70
702	N ₂ ⁺ + Fe → Fe ⁺ + N ₂	4.95(-10)	-2.20(-13)	0.	0.0	U	71
693	N ₂ ⁺ + H ₂ → N ₂ H ⁺ + H	1.70(-09)	0.	0.	0.0	M	55
695	N ₂ ⁺ + CH → CH ⁺ + N ₂	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
710	N ₂ ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + N ₂	8.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
711	N ₂ ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + N ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	
713	N ₂ ⁺ + CH ₄ → CH ₂ ⁺ + N ₂ + H ₂	7.00(-11)	0.	0.	0.0	M	59
712	N ₂ ⁺ + CH ₄ → CH ₃ ⁺ + N ₂ + H	9.30(-10)	0.	0.	0.0	M	59
694	N ₂ ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + N ₂	8.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
709	N ₂ ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ⁺ + N ₂	7.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
698	N ₂ ⁺ + NH → NH ⁺ + N ₂	6.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
715	N ₂ ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + N ₂	8.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
716	N ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + N ₂	1.90(-09)	0.	0.	0.0	M	59
701	N ₂ ⁺ + OH → OH ⁺ + N ₂	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
705	N ₂ ⁺ + H ₂ O → N ₂ H ⁺ + OH	5.04(-10)	0.	0.	0.0	M	59
704	N ₂ ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + N ₂	2.30(-09)	0.	0.	0.0	M	59
700	N ₂ ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + N ₂	2.77(-09)	0.	0.73	0.0	M	72, 178
696	N ₂ ⁺ + CN → CN ⁺ + N ₂	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
697	N ₂ ⁺ + CO → CO ⁺ + N ₂	7.40(-11)	0.	0.	0.0	M	59, 147
714	N ₂ ⁺ + CO ₂ → CO ₂ ⁺ + N ₂	7.70(-10)	0.	0.	0.0	M	59
699	N ₂ ⁺ + NO → NO ⁺ + N ₂	3.30(-10)	0.	0.	0.0	M	73
706	N ₂ ⁺ + HCN → HCN ⁺ + N ₂	3.60(-10)	0.	0.	0.0	M	154
707	N ₂ ⁺ + HCO → N ₂ H ⁺ + CO	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
708	N ₂ ⁺ + HCO → HCO ⁺ + N ₂	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
717	N ₂ ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + N ₂ + H	2.52(-09)	0.	0.	0.0	M	59
718	N ₂ ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + N ₂	3.80(-10)	0.	0.	0.0	M	59

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnus.

[1] Le taux est interpolé entre des valeurs à températures données.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1165	N ₂ H ⁺ + C → CH ⁺ + N ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1637	N ₂ H ⁺ + O → OH ⁺ + N ₂	1.40(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1166	N ₂ H ⁺ + S → SH ⁺ + N ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1168	N ₂ H ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + N ₂	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1178	N ₂ H ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + N ₂	8.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1179	N ₂ H ⁺ + CH ₃ → CH ₄ ⁺ + N ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	
1180	N ₂ H ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + N ₂	8.90(-10)	0.	0.	0.0	M	66
1167	N ₂ H ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + N ₂	8.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1177	N ₂ H ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + N ₂	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1186	N ₂ H ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + N ₂	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	68, 188
1170	N ₂ H ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + N ₂	6.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1182	N ₂ H ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + N ₂	8.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1183	N ₂ H ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + N ₂	2.30(-09)	0.	0.	0.0	U	93, 188
1172	N ₂ H ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + N ₂	6.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1173	N ₂ H ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + N ₂	2.60(-09)	0.	0.	0.0	M	152
1169	N ₂ H ⁺ + CO → HCO ⁺ + N ₂	8.80(-10)	0.	0.	0.0	M	94
1181	N ₂ H ⁺ + CO ₂ → HCO ₂ ⁺ + N ₂	1.20(-09)	-1.10(-12)	0.	0.0	U	95
1171	N ₂ H ⁺ + NO → HNO ⁺ + N ₂	3.40(-10)	0.	0.	0.0	M	152
1184	N ₂ H ⁺ + SO ₂ → HSO ₂ ⁺ + N ₂	1.70(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1174	N ₂ H ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + N ₂	3.20(-09)	0.	0.	0.0	U	90, 188
1176	N ₂ H ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + N ₂	3.20(-09)	0.	0.	0.0	U	188
1175	N ₂ H ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + N ₂	7.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1185	N ₂ H ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + N ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
796	OH ⁺ + C → CH ⁺ + O	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 88
795	OH ⁺ + C → CO ⁺ + H	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 88
797	OH ⁺ + N → NO ⁺ + H	8.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
798	OH ⁺ + O → O ₂ ⁺ + H	7.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
799	OH ⁺ + S → SO ⁺ + H	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
800	OH ⁺ + H ₂ → H ₂ O ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	M	153
804	OH ⁺ + CH → CH ⁺ + OH	3.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
803	OH ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + O	3.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
823	OH ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + OH	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
822	OH ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + O	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
825	OH ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + OH	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	
824	OH ⁺ + CH ₃ → CH ₄ ⁺ + O	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	
826	OH ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + O	1.95(-10)	0.	0.	0.0	M	149
827	OH ⁺ + CH ₄ → H ₃ O ⁺ + CH ₂	1.30(-09)	0.	0.	0.0	M	149
802	OH ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + OH	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
801	OH ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + O	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
821	OH ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ⁺ + OH	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
820	OH ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + O	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
809	OH ⁺ + NH → NH ⁺ + OH	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
808	OH ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + O	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
830	OH ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + OH	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
829	OH ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + O	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
832	OH ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + OH	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	55
831	OH ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + O	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	55
807	OH ⁺ + N ₂ → N ₂ H ⁺ + O	3.60(-10)	0.	0.	0.0	M	153
812	OH ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + O	7.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
814	OH ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + OH	1.60(-09)	0.	0.	0.0	M	77
813	OH ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + O	1.31(-09)	0.	0.	0.0	M	77

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
811	OH ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + OH	5.90(-10)	0.	0.	0.0	M	153
805	OH ⁺ + CN → HCN ⁺ + O	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
806	OH ⁺ + CO → HCO ⁺ + O	9.20(-10)	0.	0.	0.0	U	147
828	OH ⁺ + CO ₂ → HCO ₂ ⁺ + O	1.60(-09)	0.	0.	0.0	M	147
810	OH ⁺ + NO → NO ⁺ + OH	6.70(-10)	0.	0.	0.0	M	145
815	OH ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + OH	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	188
816	OH ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + O	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
818	OH ⁺ + HCO → H ₂ O ⁺ + CO	2.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
819	OH ⁺ + HCO → HCO ⁺ + OH	2.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
817	OH ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + O	2.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
834	OH ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + OH	7.60(-10)	0.	0.	0.0	M	146
833	OH ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + O	1.14(-09)	0.	0.	0.0	M	146
854	H ₂ O ⁺ + C → CH ⁺ + OH	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
853	H ₂ O ⁺ + C → HCO ⁺ + H	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	13, 24
856	H ₂ O ⁺ + N → NO ⁺ + H ₂	9.50(-11)	0.	0.	0.0	M	145
855	H ₂ O ⁺ + N → HNO ⁺ + H	9.50(-11)	0.	0.	0.0	M	145
857	H ₂ O ⁺ + O → O ₂ ⁺ + H ₂	4.00(-11)	0.	0.	0.0	M	141
869	H ₂ O ⁺ + Mg → Mg ⁺ + H ₂ O	2.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24
868	H ₂ O ⁺ + Fe → Fe ⁺ + H ₂ O	1.60(-09)	-4.30(-13)	0.	0.0	U	71
858	H ₂ O ⁺ + H ₂ → H ₃ O ⁺ + H	8.30(-10)	0.	0.	0.0	M	150, 153
862	H ₂ O ⁺ + CH → CH ⁺ + H ₂ O	3.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
861	H ₂ O ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + OH	3.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
878	H ₂ O ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + H ₂ O	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
877	H ₂ O ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + OH	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
879	H ₂ O ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + H ₂ O	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	
880	H ₂ O ⁺ + CH ₄ → CH ₄ ⁺ + H ₂ O	2.31(-10)	0.	0.	0.0	M	146
881	H ₂ O ⁺ + CH ₄ → H ₃ O ⁺ + CH ₃	8.69(-10)	0.	0.	0.0	M	146
860	H ₂ O ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + H ₂ O	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
859	H ₂ O ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + OH	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
876	H ₂ O ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ⁺ + H ₂ O	4.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
875	H ₂ O ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + OH	4.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
864	H ₂ O ⁺ + NH → H ₃ O ⁺ + N	7.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
883	H ₂ O ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + H ₂ O	4.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
882	H ₂ O ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + OH	4.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
885	H ₂ O ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + H ₂ O	2.17(-09)	0.	0.	0.0	M	55
884	H ₂ O ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + OH	9.30(-10)	0.	0.	0.0	M	55
867	H ₂ O ⁺ + OH → H ₃ O ⁺ + O	6.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
870	H ₂ O ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + OH	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	77, 188
866	H ₂ O ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + H ₂ O	3.30(-10)	0.	0.	0.0	M	150, 153
863	H ₂ O ⁺ + CO → HCO ⁺ + OH	4.20(-10)	0.	0.	0.0	M	150, 153
865	H ₂ O ⁺ + NO → NO ⁺ + H ₂ O	3.60(-10)	0.	0.	0.0	M	145
871	H ₂ O ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + OH	2.10(-09)	0.	0.	0.0	M	155
872	H ₂ O ⁺ + HCO → H ₃ O ⁺ + CO	2.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
874	H ₂ O ⁺ + HCO → HCO ⁺ + H ₂ O	2.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
873	H ₂ O ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + OH	2.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
887	H ₂ O ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + H ₂ O	1.43(-09)	0.	0.	0.0	M	146
886	H ₂ O ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + OH	6.72(-10)	0.	0.	0.0	M	146
899	H ₃ O ⁺ + C → HCO ⁺ + H ₂	1.00(-11)	0.	0.	0.0	U	24
900	H ₃ O ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + H ₂ O	6.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
903	H ₃ O ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + H ₂ O	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 89
902	H ₃ O ⁺ + CH ₂ → H ₃ CO ⁺ + H ₂	4.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24, 89

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
904	H ₃ O ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + H ₂ O	9.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
905	H ₃ O ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + H ₂ O	2.20(-09)	0.	0.	0.0	M	157
901	H ₃ O ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + H ₂ O	3.50(-09)	0.	0.	0.0	M	93
906	H ₃ O ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + H ₂ O	3.00(-09)	0.	0.	0.0	M	91
773	O ₂ ⁺ + C → C ⁺ + O ₂	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
772	O ₂ ⁺ + C → CO ⁺ + O	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
774	O ₂ ⁺ + N → NO ⁺ + O	1.20(-10)	0.	0.	0.0	M	74
783	O ₂ ⁺ + Mg → Mg ⁺ + O ₂	1.10(-09)	4.40(-13)	0.	0.0	M	70
782	O ₂ ⁺ + Si → Si ⁺ + O ₂	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
781	O ₂ ⁺ + Fe → Fe ⁺ + O ₂	1.20(-09)	-2.40(-13)	0.	0.0	M	71
778	O ₂ ⁺ + CH → CH ⁺ + O ₂	3.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
777	O ₂ ⁺ + CH → HCO ⁺ + O	3.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
787	O ₂ ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + O ₂	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
786	O ₂ ⁺ + CH ₂ → H ₂ CO ⁺ + O	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
789	O ₂ ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + O ₂	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	
788	O ₂ ⁺ + CH ₃ → H ₃ CO ⁺ + O	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	
791	O ₂ ⁺ + CH ₄ → H ₂ O ⁺ + H ₂ CO	9.45(-13)	0.	0.	0.0	M	59
790	O ₂ ⁺ + CH ₄ → H ₂ CO ⁺ + H ₂ O	9.45(-13)	0.	0.	0.0	M	59
776	O ₂ ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + O ₂	4.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
775	O ₂ ⁺ + C ₂ → CO ⁺ + CO	4.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
779	O ₂ ⁺ + NH → HNO ⁺ + O	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
792	O ₂ ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + O ₂	8.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
793	O ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + O ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	M	59
780	O ₂ ⁺ + NO → NO ⁺ + O ₂	4.40(-10)	0.	0.	0.0	M	75
784	O ₂ ⁺ + HCO → O ₂ H ⁺ + CO	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
785	O ₂ ⁺ + HCO → HCO ⁺ + O ₂	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
794	O ₂ ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + O ₂	2.07(-09)	0.	0.	0.0	M	59
1242	O ₂ H ⁺ + C → CH ⁺ + O ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1243	O ₂ H ⁺ + O → OH ⁺ + O ₂	6.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1245	O ₂ H ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + O ₂	6.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1256	O ₂ H ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + O ₂	8.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1257	O ₂ H ⁺ + CH ₃ → CH ₄ ⁺ + O ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	
1258	O ₂ H ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + O ₂	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	
1244	O ₂ H ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + O ₂	8.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1255	O ₂ H ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + O ₂	7.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1249	O ₂ H ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + O ₂	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1260	O ₂ H ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + O ₂	8.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1261	O ₂ H ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + O ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	M	83
1248	O ₂ H ⁺ + N ₂ → N ₂ H ⁺ + O ₂	2.00(-09)	0.	0.15	0.0	M	83
1251	O ₂ H ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + O ₂	6.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1252	O ₂ H ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + O ₂	8.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1246	O ₂ H ⁺ + CN → HCN ⁺ + O ₂	8.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1247	O ₂ H ⁺ + CO → HCO ⁺ + O ₂	8.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1259	O ₂ H ⁺ + CO ₂ → HCO ₂ ⁺ + O ₂	1.10(-09)	0.	0.	0.0	M	83
1250	O ₂ H ⁺ + NO → HNO ⁺ + O ₂	5.84(-10)	0.	0.	0.0	M	75
1253	O ₂ H ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + O ₂	9.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1254	O ₂ H ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + O ₂	7.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1262	O ₂ H ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + O ₂	9.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
615	CN ⁺ + H → H ⁺ + CN	1.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
616	CN ⁺ + C → C ⁺ + CN	1.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
617	CN ⁺ + N → C ⁺ + N ₂	2.00(-10)	0.	0.	0.0	U	13

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
619	CN ⁺ + O → O ⁺ + CN	3.25(-11)	0.	0.	0.0	U	13, 24
618	CN ⁺ + O → NO ⁺ + C	3.25(-11)	0.	0.	0.0	U	13, 24
620	CN ⁺ + H ₂ → HCN ⁺ + H	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	55
622	CN ⁺ + CH → CH ⁺ + CN	6.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
634	CN ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + CN	8.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
635	CN ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + CN	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	
637	CN ⁺ + CH ₄ → CH ₃ ⁺ + HCN	3.23(-10)	0.	0.	0.0	M	97
636	CN ⁺ + CH ₄ → CH ₄ ⁺ + CN	3.23(-10)	0.	0.	0.0	M	97
638	CN ⁺ + CH ₄ → H ₂ CN ⁺ + CH ₂	3.23(-10)	0.	0.	0.0	M	97
621	CN ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + CN	8.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
633	CN ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ⁺ + CN	8.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
644	CN ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₂ ⁺ + CN	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	
624	CN ⁺ + NH → NH ⁺ + CN	6.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
640	CN ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + CN	9.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
641	CN ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + CN	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	
627	CN ⁺ + OH → OH ⁺ + CN	6.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
628	CN ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + CN	8.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
629	CN ⁺ + H ₂ O → HCN ⁺ + OH	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	188
626	CN ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + CN	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
623	CN ⁺ + CO → CO ⁺ + CN	8.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
639	CN ⁺ + CO ₂ → CO ₂ ⁺ + CN	9.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
625	CN ⁺ + NO → NO ⁺ + CN	8.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
630	CN ⁺ + HCN → HCN ⁺ + CN	2.80(-09)	0.	0.	0.0	M	156
632	CN ⁺ + HCO → HCN ⁺ + CO	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
631	CN ⁺ + HCO → HCO ⁺ + CN	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
643	CN ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + HCN	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
642	CN ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + CN	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1023	C ₂ N ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ₃ ⁺ + HCN	2.64(-12)	0.	0.	0.0	M	97
1024	C ₂ N ⁺ + CH ₄ → H ₂ CN ⁺ + C ₂ H ₂	4.40(-13)	0.	0.	0.0	M	97
1022	C ₂ N ⁺ + CH ₄ → H ₂ C ₃ N ⁺ + H ₂	2.20(-13)	0.	0.	0.0	M	190
1026	C ₂ N ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₃ H ⁺ + HCN	8.01(-10)	0.	0.	0.0	M	97
1028	C ₂ N ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₄ ⁺ + C ₂ N	1.30(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1027	C ₂ N ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₃ H ₃ ⁺ + HCN	3.90(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1025	C ₂ N ⁺ + NH ₃ → H ₂ CN ⁺ + HCN	1.80(-09)	0.	0.	0.0	M	97
1020	C ₂ N ⁺ + H ₂ O → HCO ⁺ + HCN	3.10(-10)	0.	0.	0.0	M	97
1021	C ₂ N ⁺ + H ₂ S → HCS ⁺ + HCN	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	190
1042	C ₄ N ⁺ + CH ₄ → H ₂ C ₅ N ⁺ + H ₂	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	188
645	CO ⁺ + H → H ⁺ + CO	8.00(-10)	0.	0.	0.0	M	24, 180
646	CO ⁺ + C → C ⁺ + CO	1.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
647	CO ⁺ + N → NO ⁺ + C	2.00(-11)	0.	0.	0.0	M	49
648	CO ⁺ + O → O ⁺ + CO	1.40(-10)	0.	0.	0.0	M	49
649	CO ⁺ + H ₂ → HCO ⁺ + H	1.20(-09)	0.	0.	0.0	M	163, 180
652	CO ⁺ + CH → CH ⁺ + CO	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
651	CO ⁺ + CH → HCO ⁺ + C	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
667	CO ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + CO	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	28
666	CO ⁺ + CH ₂ → HCO ⁺ + CH	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
668	CO ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + CO	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	
669	CO ⁺ + CH ₃ → HCO ⁺ + CH ₂	5.50(-10)	0.	0.	0.0	U	
670	CO ⁺ + CH ₄ → CH ₄ ⁺ + CO	7.93(-10)	0.	0.	0.0	M	91
671	CO ⁺ + CH ₄ → HCO ⁺ + CH ₃	4.55(-10)	0.	0.	0.0	M	91
650	CO ⁺ + C ₂ → C ₂ ⁺ + CO	8.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

N°	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
665	CO ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ⁺ + CO	3.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
664	CO ⁺ + C ₂ H → HCO ⁺ + C ₂	3.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
679	CO ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₂ ⁺ + CO	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	
680	CO ⁺ + C ₂ H ₂ → HCO ⁺ + C ₂ H	6.00(-10)	0.	0.	0.0	U	
654	CO ⁺ + NH → NH ⁺ + CO	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
653	CO ⁺ + NH → HCO ⁺ + N	3.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
673	CO ⁺ + NH ₂ → NH ₂ ⁺ + CO	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
674	CO ⁺ + NH ₂ → HCO ⁺ + NH	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
675	CO ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + CO	1.80(-09)	0.	0.	0.0	M	91
659	CO ⁺ + OH → OH ⁺ + CO	2.07(-10)	0.	0.	0.0	U	24
657	CO ⁺ + OH → CO ₂ ⁺ + H	2.07(-10)	0.	0.	0.0	U	24
658	CO ⁺ + OH → HCO ⁺ + O	2.07(-10)	0.	0.	0.0	U	24
660	CO ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + CO	2.20(-09)	0.	0.	0.0	M	91
656	CO ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + CO	1.20(-10)	0.	0.	0.0	M	91
672	CO ⁺ + CO ₂ → CO ₂ ⁺ + CO	1.00(-09)	0.	0.	0.0	M	91
655	CO ⁺ + NO → NO ⁺ + CO	3.30(-10)	0.	0.	0.0	M	49
676	CO ⁺ + SO ₂ → SO ⁺ + CO ₂	1.50(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 190
662	CO ⁺ + HCN → HCN ⁺ + CO	3.10(-09)	0.	0.	0.0	M	154
661	CO ⁺ + HCN → HCO ⁺ + CN	3.40(-10)	0.	0.	0.0	M	154
663	CO ⁺ + HCO → HCO ⁺ + CO	7.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
678	CO ⁺ + H ₂ CO → HCO ⁺ + HCO	1.65(-09)	0.	0.	0.0	M	91
677	CO ⁺ + H ₂ CO → H ₂ CO ⁺ + CO	1.35(-09)	0.	0.	0.0	M	91
1151	CO ₂ ⁺ + H → H ⁺ + CO ₂	8.36(-11)	0.	0.	0.0	M	134
1150	CO ₂ ⁺ + H → HCO ⁺ + O	2.64(-11)	0.	0.	0.0	M	134
1152	CO ₂ ⁺ + N → NO ⁺ + CO	1.00(-11)	0.	0.	0.0	M	73
1154	CO ₂ ⁺ + O → O ⁺ + CO ₂	1.64(-10)	0.	0.	0.0	M	73
1153	CO ₂ ⁺ + O → O ₂ ⁺ + CO	9.62(-11)	0.	0.	0.0	M	73
1155	CO ₂ ⁺ + H ₂ → HCO ₂ ⁺ + H	5.80(-10)	0.	0.	0.0	M	134
1163	CO ₂ ⁺ + CH ₄ → CH ₄ ⁺ + CO ₂	2.50(-10)	0.	0.	0.0	M	147
1162	CO ₂ ⁺ + CH ₄ → HCO ₂ ⁺ + CH ₃	7.50(-10)	0.	0.	0.0	M	147
1164	CO ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + CO ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	M	147
1159	CO ₂ ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + CO ₂	1.70(-09)	0.	0.	0.0	M	147
1158	CO ₂ ⁺ + H ₂ O → HCO ₂ ⁺ + OH	5.00(-10)	0.	0.	0.0	M	147
1157	CO ₂ ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + CO ₂	6.50(-09)	0.	0.78	0.0	M	96
1156	CO ₂ ⁺ + NO → NO ⁺ + CO ₂	1.20(-10)	0.	0.	0.0	M	73
1161	CO ₂ ⁺ + HCN → HCN ⁺ + CO ₂	8.10(-10)	0.	0.	0.0	M	154
1160	CO ₂ ⁺ + HCN → HCO ₂ ⁺ + CN	9.00(-11)	0.	0.	0.0	M	154
681	CS ⁺ + O → CO ⁺ + S	6.00(-11)	0.	0.	0.0	U	24
686	CS ⁺ + Mg → Mg ⁺ + CS	2.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
685	CS ⁺ + Si → Si ⁺ + CS	1.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
684	CS ⁺ + Fe → Fe ⁺ + CS	1.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
682	CS ⁺ + H ₂ → HCS ⁺ + H	4.80(-10)	0.	0.	0.0	U	188
687	CS ⁺ + CH ₄ → HCS ⁺ + CH ₃	5.00(-10)	4.80(-10)	0.	0.0	M	190
683	CS ⁺ + O ₂ → SO ⁺ + CO	1.60(-11)	0.	0.	0.0	M	190
771	NO ⁺ + Mg → Mg ⁺ + NO	4.60(-10)	1.30(-12)	0.	0.0	M	70
770	NO ⁺ + Si → Si ⁺ + NO	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
769	NO ⁺ + Fe → Fe ⁺ + NO	9.60(-10)	-2.60(-13)	0.	0.0	M	71
990	HeH ⁺ + H → H ₂ ⁺ + He	9.10(-10)	0.	0.	0.0	M	134
991	HeH ⁺ + H ₂ → H ₃ ⁺ + He	1.50(-09)	0.	0.	0.0	M	149
992	HeH ⁺ + N ₂ → N ₂ H ⁺ + He	1.70(-09)	0.	0.	0.0	M	68
993	HeH ⁺ + O ₂ → O ₂ H ⁺ + He	1.10(-09)	0.	0.	0.0	M	149

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
835	SH ⁺ + C → CS ⁺ + H	9.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
837	SH ⁺ + O → S ⁺ + OH	2.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
836	SH ⁺ + O → SO ⁺ + H	2.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
842	SH ⁺ + Mg → Mg ⁺ + SH	2.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
841	SH ⁺ + Si → Si ⁺ + SH	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	24
840	SH ⁺ + Fe → Fe ⁺ + SH	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
838	SH ⁺ + S → S ⁺ + SH	9.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
839	SH ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + S	5.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
848	SH ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + SH	8.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
847	SH ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + S	7.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
843	SH ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + S	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	188
844	SH ⁺ + H ₂ S → H ₂ S ⁺ + SH	4.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
845	SH ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + S	8.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
846	SH ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + S	8.90(-10)	0.	0.	0.0	U	
888	H ₂ S ⁺ + C → HCS ⁺ + H	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
890	H ₂ S ⁺ + O → SH ⁺ + OH	3.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
889	H ₂ S ⁺ + O → SO ⁺ + H ₂	3.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
895	H ₂ S ⁺ + Mg → Mg ⁺ + H ₂ S	2.80(-09)	0.	0.	0.0	U	24
894	H ₂ S ⁺ + Si → Si ⁺ + H ₂ S	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
893	H ₂ S ⁺ + Fe → Fe ⁺ + H ₂ S	1.80(-09)	0.	0.	0.0	U	24
891	H ₂ S ⁺ + S → S ⁺ + H ₂ S	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
898	H ₂ S ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + H ₂ S	5.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
897	H ₂ S ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + SH	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	4
896	H ₂ S ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + SH	7.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
892	H ₂ S ⁺ + NO → NO ⁺ + H ₂ S	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	188
850	SO ⁺ + Mg → Mg ⁺ + SO	1.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
849	SO ⁺ + Fe → Fe ⁺ + SO	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
851	SO ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + SO	1.30(-09)	0.	0.	0.0	U	24
907	HCN ⁺ + H → H ⁺ + HCN	3.70(-11)	0.	0.	0.0	U	24, 188
908	HCN ⁺ + C → CH ⁺ + CN	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
909	HCN ⁺ + O → O ⁺ + HCN	6.50(-11)	0.	0.	0.0	U	24
910	HCN ⁺ + H ₂ → H ₂ CN ⁺ + H	9.00(-10)	0.	0.	0.0	M	55
912	HCN ⁺ + OH → CH ₂ ⁺ + CN	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
925	HCN ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + CN	8.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
926	HCN ⁺ + CH ₃ → CH ₄ ⁺ + CN	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	
928	HCN ⁺ + CH ₄ → C ₂ H ₃ ⁺ + NH ₂	2.08(-10)	0.	0.	0.0	M	97
927	HCN ⁺ + CH ₄ → H ₂ CN ⁺ + CH ₃	1.09(-09)	0.	0.	0.0	M	97
911	HCN ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + CN	8.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
924	HCN ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + CN	7.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
936	HCN ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₂ ⁺ + HCN	4.75(-10)	0.	0.	0.0	M	97
935	HCN ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + CN	3.80(-10)	0.	0.	0.0	M	97
914	HCN ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + CN	6.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
930	HCN ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + CN	9.00(-10)	0.	0.	0.0	U	24
932	HCN ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + HCN	1.68(-09)	0.	0.	0.0	M	154
931	HCN ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + CN	1.40(-10)	0.	0.	0.0	M	154
933	HCN ⁺ + NH ₃ → H ₂ CN ⁺ + NH ₂	8.40(-10)	0.	0.	0.0	M	154
917	HCN ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + CN	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
920	HCN ⁺ + H ₂ O → H ₂ O ⁺ + HCN	1.80(-09)	0.	0.	0.0	M	154
918	HCN ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + CN	1.80(-09)	0.	0.	0.0	M	154
919	HCN ⁺ + H ₂ O → H ₂ CN ⁺ + OH	1.80(-10)	0.	0.	0.0	M	154
916	HCN ⁺ + O ₂ → O ₂ ⁺ + HCN	3.20(-10)	0.	0.	0.0	M	154

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
913	HCN ⁺ + CO → HCO ⁺ + CN	1.40(-10)	0.	0.	0.0	M	154
929	HCN ⁺ + CO ₂ → HCO ₂ ⁺ + CN	2.10(-10)	0.	0.	0.0	M	154
915	HCN ⁺ + NO → NO ⁺ + HCN	8.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
921	HCN ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + CN	1.60(-09)	0.	0.	0.0	M	154
923	HCN ⁺ + HCO → H ₂ CN ⁺ + CO	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
922	HCN ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + CN	3.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
934	HCN ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + CN	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
937	HCO ⁺ + C → CH ⁺ + CO	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
947	HCO ⁺ + Mg → Mg ⁺ + HCO	2.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
946	HCO ⁺ + Fe → Fe ⁺ + HCO	1.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
938	HCO ⁺ + S → SH ⁺ + CO	3.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
942	HCO ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + CO	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
957	HCO ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + CO	8.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
939	HCO ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + CO	8.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
954	HCO ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + CO	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
963	HCO ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	68, 188
964	HCO ⁺ + C ₂ H ₃ → C ₂ H ₄ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
965	HCO ⁺ + C ₂ H ₄ → C ₂ H ₅ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
940	HCO ⁺ + C ₃ → C ₃ H ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
955	HCO ⁺ + C ₃ H → C ₃ H ₂ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
966	HCO ⁺ + C ₃ H ₂ → C ₃ H ₃ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
967	HCO ⁺ + C ₃ H ₃ → C ₃ H ₄ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
968	HCO ⁺ + C ₃ H ₄ → C ₃ H ₅ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
941	HCO ⁺ + C ₄ → C ₄ H ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
956	HCO ⁺ + C ₄ H → C ₄ H ₂ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
969	HCO ⁺ + C ₄ H ₂ → C ₄ H ₃ ⁺ + CO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	U	189
944	HCO ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + CO	6.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
958	HCO ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + CO	8.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
959	HCO ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + CO	2.60(-09)	0.	0.	0.0	M	55
945	HCO ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + CO	6.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
950	HCO ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + CO	3.20(-09)	0.	0.	0.0	M	152
943	HCO ⁺ + CS → HCS ⁺ + CO	1.20(-09)	0.	0.	0.0	U	24, 196
948	HCO ⁺ + SH → H ₂ S ⁺ + CO	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	194
949	HCO ⁺ + SO → HSO ⁺ + CO	7.50(-10)	0.	0.	0.0	U	24
951	HCO ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + CO	4.00(-09)	0.	0.	0.0	M	55, 188
953	HCO ⁺ + HNC → H ₂ CN ⁺ + CO	4.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188
961	HCO ⁺ + HC ₃ N → H ₂ C ₃ N ⁺ + CO	3.70(-09)	0.	0.	0.0	U	189
962	HCO ⁺ + HC ₅ N → H ₂ C ₅ N ⁺ + CO	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	189
952	HCO ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + CO	7.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
960	HCO ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + CO	3.20(-09)	0.	0.	0.0	M	91
972	HNO ⁺ + C → CH ⁺ + NO	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
974	HNO ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + NO	6.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
983	HNO ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + NO	8.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
984	HNO ⁺ + CH ₃ → CH ₄ ⁺ + NO	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	
985	HNO ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + NO	1.00(-10)	0.	0.	0.0	M	85
973	HNO ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + NO	8.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
982	HNO ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + NO	7.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
976	HNO ⁺ + NH → NH ₂ ⁺ + NO	6.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
987	HNO ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + NO	8.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
988	HNO ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + NO	1.10(-09)	0.	0.	0.0	U	24
978	HNO ⁺ + OH → H ₂ O ⁺ + NO	6.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table C - Réactions Ion - Neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
979	HNO ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + NO	2.30(-09)	0.	0.	0.0	M	152
975	HNO ⁺ + CO → HCO ⁺ + NO	1.00(-10)	0.	0.	0.0	M	85
986	HNO ⁺ + CO ₂ → HCO ₂ ⁺ + NO	1.00(-10)	0.	0.	0.0	M	85
977	HNO ⁺ + NO → NO ⁺ + HNO	7.00(-10)	0.	0.	0.0	M	66
980	HNO ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + NO	9.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
981	HNO ⁺ + HCO → H ₂ CO ⁺ + NO	7.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
989	HNO ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + NO	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
970	HCS ⁺ + O → HCO ⁺ + S	5.00(-10)	0.	0.	0.0	U	189
971	HCS ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + CS	2.00(-09)	0.	0.	0.0	M	203
1263	H ₂ CN ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + HCN	8.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1266	H ₂ CN ⁺ + C ₂ H ₂ → H ₃ C ₃ N ⁺ + H	0.	0.	0.	0.0	M	190
1264	H ₂ CN ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + HCN	8.90(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1265	H ₂ CN ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + HCN	2.20(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1274	H ₂ CO ⁺ + Mg → Mg ⁺ + H ₂ CO	2.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1273	H ₂ CO ⁺ + Si → Si ⁺ + H ₂ CO	1.60(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1272	H ₂ CO ⁺ + Fe → Fe ⁺ + H ₂ CO	1.90(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1269	H ₂ CO ⁺ + CH → CH ⁺ + H ₂ CO	3.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1268	H ₂ CO ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + HCO	3.10(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1281	H ₂ CO ⁺ + CH ₂ → CH ₂ ⁺ + H ₂ CO	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1280	H ₂ CO ⁺ + CH ₂ → CH ₃ ⁺ + HCO	4.30(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1282	H ₂ CO ⁺ + CH ₃ → CH ₃ ⁺ + H ₂ CO	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	
1283	H ₂ CO ⁺ + CH ₄ → H ₃ CO ⁺ + CH ₃	9.35(-11)	0.	0.	0.0	M	91
1267	H ₂ CO ⁺ + C ₂ → C ₂ H ⁺ + HCO	8.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1279	H ₂ CO ⁺ + C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺ + HCO	7.70(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1270	H ₂ CO ⁺ + NH → H ₃ CO ⁺ + N	6.40(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1284	H ₂ CO ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + HCO	8.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1286	H ₂ CO ⁺ + NH ₃ → NH ₃ ⁺ + H ₂ CO	1.15(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1285	H ₂ CO ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + HCO	1.15(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1275	H ₂ CO ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + HCO	2.60(-09)	0.	0.	0.0	M	91
1271	H ₂ CO ⁺ + NO → NO ⁺ + H ₂ CO	7.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1276	H ₂ CO ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + HCO	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1278	H ₂ CO ⁺ + HCO → HCO ⁺ + H ₂ CO	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1277	H ₂ CO ⁺ + HCO → H ₃ CO ⁺ + CO	3.60(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1287	H ₂ CO ⁺ + H ₂ CO → H ₃ CO ⁺ + HCO	3.20(-09)	0.	0.	0.0	M	91
1288	H ₃ CO ⁺ + CH → CH ₂ ⁺ + H ₂ CO	6.20(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1290	H ₃ CO ⁺ + NH ₂ → NH ₃ ⁺ + H ₂ CO	8.80(-10)	0.	0.	0.0	U	24
1291	H ₃ CO ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + H ₂ CO	2.30(-09)	0.	0.	0.0	M	55
1289	H ₃ CO ⁺ + HCN → H ₂ CN ⁺ + H ₂ CO	1.30(-09)	0.	0.	0.0	M	68
1294	HCO ₂ ⁺ + C → CH ⁺ + CO ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	24
1295	HCO ₂ ⁺ + N → HCO ⁺ + NO	7.20(-10)	0.	0.	0.0	U	98
1296	HCO ₂ ⁺ + O → HCO ⁺ + O ₂	5.90(-10)	0.	0.	0.0	U	98
1299	HCO ₂ ⁺ + CH ₄ → CH ₅ ⁺ + CO ₂	7.80(-10)	0.	0.	0.0	M	149
1301	HCO ₂ ⁺ + C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺ + CO ₂	1.40(-09)	0.	0.	0.0	M	68
1300	HCO ₂ ⁺ + NH ₃ → NH ₄ ⁺ + CO ₂	2.00(-09)	0.	0.	0.0	U	147
1298	HCO ₂ ⁺ + H ₂ O → H ₃ O ⁺ + CO ₂	2.30(-09)	0.	0.	0.0	M	152
1297	HCO ₂ ⁺ + CO → HCO ⁺ + CO ₂	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	147
1292	HC ₃ N ⁺ + H ₂ → H ₂ C ₃ N ⁺ + H	1.00(-12)	0.	0.	0.0	U	188
1293	HC ₃ N ⁺ + CO → HCO ⁺ + C ₃ N	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	184

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnus.

Table D - Associations radiatives

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm^3s^{-1}	b $\text{cm}^3\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}$	α	β K		Réf.
1407	$\text{C}^+ + \text{H} \rightarrow \text{CH}^+ + h\nu$	6.79(-17)	0.	0.	0.0	C	100
1408	$\text{C}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_2^+ + h\nu$	1.25(-15)	0.	0.20	0.0	C	20, 151, 183, 188
1409	$\text{C}^+ + \text{C}_3 \rightarrow \text{C}_4^+ + h\nu$	3.00(-11)	0.	1.00	0.0	U	188
1415	$\text{CH}_3^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_5^+ + h\nu$	5.20(-13)	0.	0.50	0.0	U	174, 188
1412	$\text{C}_2\text{H}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5^+ + h\nu$	2.38(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1416	$\text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4^+ + h\nu$	4.50(-12)	0.	1.00	0.0	U	188
1413	$\text{C}_3\text{H}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3^+ + h\nu$	9.00(-11)	0.	1.00	0.0	M	187, 188
1410	$\text{C}_4^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{HC}_5\text{N}^+ + h\nu$	5.60(-10)	0.	0.	0.0	M	190
1414	$\text{C}_4\text{H}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{H}_2\text{C}_5\text{N}^+ + h\nu$	8.50(-11)	0.	0.	0.0	M	190
1411	$\text{HCO}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3\text{CO}^+ + h\nu$	1.00(-18)	0.	0.	0.0	C	102, 103
1417	$\text{H}_2\text{C}_3\text{N}^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{H}_4\text{C}_5\text{N}^+ + h\nu$	1.00(-09)	0.	0.	0.0	U	188

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table E - Réactions neutre - neutres

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1646	H + CH ₂ → CH + H ₂	5.00(-13)	0.	-0.67	12850.0	M	201
1647	H + CH ₃ → CH ₂ + H ₂	2.00(-11)	0.	-0.17	6500.0	M	201
1648	H + CH ₄ → CH ₃ + H ₂	3.00(-10)	0.	0.	6560.0	M	201
1556	H + C ₂ H ₃ → C ₂ H ₂ + H ₂	7.00(-12)	0.	0.	0.0	U	192
1640	H + NH → H ₂ + N	1.00(-12)	0.	-0.50	2400.0	U	201
1650	H + NH ₂ → NH + H ₂	5.80(-14)	0.	-0.79	2200.0	U	198
1651	H + NH ₃ → NH ₂ + H ₂	2.40(-11)	0.	-0.17	5700.0	U	198
1639	H + N ₂ → NH + N	4.00(-11)	0.	0.	70500.0	U	198
1641	H + OH → H ₂ + O	1.40(-14)	0.	-1.00	3500.0	M	201
1645	H + H ₂ O → OH + H + H	5.80(-09)	0.	0.	52900.0	M	201
1644	H + H ₂ O → OH + H ₂	1.50(-10)	0.	0.	10250.0	M	201
1643	H + O ₂ → OH + O	3.70(-10)	0.	0.	8450.0	M	201
1638	H + CN → NH + C	4.00(-11)	0.	0.	48000.0	U	198
1649	H + CO ₂ → CO + OH	2.50(-10)	0.	0.	13300.0	M	201
1642	H + NO → OH + N	4.20(-12)	0.	-0.50	24460.0	U	201
1553	H + SH → H ₂ + S	2.50(-11)	0.	0.	0.0	M	198, 202
1554	H + H ₂ S → SH + H ₂	1.50(-11)	0.	0.	850.0	M	202
1555	H + HCO → CO + H ₂	1.16(-11)	0.	-0.50	0.0	U	24
1652	C + H ₂ → CH + H	2.70(-12)	0.	-0.50	14100.0	U	201
1557	C + H ₂ → CH ₂ + h ν	1.00(-17)	0.	0.	0.0	U	189
1558	C + CH → C ₂ + H	4.22(-12)	0.	-0.50	0.0	U	19
1567	C + CH ₂ → C ₂ H + H	2.31(-12)	0.	-0.50	0.0	U	110
1568	C + CH ₃ → C ₂ H ₂ + H	2.90(-12)	0.	-0.50	0.0	U	184, 189
1654	C + NH → CH + N	1.00(-12)	0.	-0.50	4000.0	M	201
1559	C + NH → CN + H	4.22(-12)	0.	-0.50	0.0	U	106
1570	C + NH ₂ → HNC + H	2.02(-13)	0.	-0.50	0.0	U	189
1653	C + N ₂ → CN + N	2.20(-12)	0.	-0.50	22750.0	M	201
1656	C + OH → CH + O	1.30(-12)	0.	-0.50	14800.0	M	201
1562	C + OH → CO + H	4.22(-12)	0.	-0.50	0.0	U	106
1566	C + H ₂ O → CO + H ₂	2.08(-14)	0.	-0.50	0.0	M	105
1561	C + O ₂ → CO + O	1.91(-12)	0.	-0.50	0.0	M	105
1569	C + CO ₂ → CO + CO	5.77(-16)	0.	-0.50	0.0	M	105
1560	C + NO → CN + O	7.30(-11)	0.	0.	0.0	M	105, 198
1655	C + NO → CO + N	1.00(-12)	0.	-0.50	4000.0	M	201
1563	C + SH → CS + H	3.00(-11)	0.	0.	0.0	M	198
1564	C + SO → CO + S	1.16(-12)	0.	-0.50	0.0	M	202
1565	C + SO → CS + O	1.16(-12)	0.	-0.50	0.0	M	202
1657	N + H ₂ → NH + H	4.20(-12)	0.	-0.50	10700.0	M	201
1658	N + CH → NH + C	1.70(-12)	0.	-0.50	6995.0	M	201
1572	N + CH → CN + H	2.89(-12)	0.	-0.50	0.0	M	111
1578	N + CH ₂ → HCN + H	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	U	24
1579	N + CH ₃ → HCN + H + H	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	U	24
1571	N + C ₂ → CN + C	2.89(-12)	0.	-0.50	0.0	U	19, 24
1577	N + C ₃ H → C ₃ N + H	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	M	208
1580	N + C ₃ H ₂ → HC ₃ N + H	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	M	208
1573	N + NH → N ₂ + H	2.90(-12)	0.	-0.50	0.0	U	24, 106
1661	N + OH → NH + O	2.20(-12)	0.	-0.50	17765.0	M	201
1575	N + OH → NO + H	2.60(-11)	0.	-0.17	0.0	M	106, 107, 198
1660	N + O ₂ → NO + O	4.40(-12)	0.	0.	3150.0	M	201
1659	N + CN → N ₂ + C	8.70(-15)	0.	-0.50	4500.0	U	201
1662	N + CO ₂ → NO + CO	3.40(-13)	0.	0.	1700.0	U	201

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table E - Réactions neutre - neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a	b	α	β K		Réf.
		cm^3s^{-1}	$\text{cm}^3\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}$				
1574	$\text{N} + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}$	2.00(-12)	0.	-0.50	0.0	M	109
1576	$\text{N} + \text{SO} \rightarrow \text{NO} + \text{S}$	1.00(-12)	0.	-0.50	750.0	M	202
1663	$\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	3.00(-14)	0.	-1.00	4480.0	M	198
1584	$\text{O} + \text{CH} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{e}^-$	1.63(-12)	0.	-0.44	0.0	M	111
1664	$\text{O} + \text{CH} \rightarrow \text{OH} + \text{C}$	1.00(-12)	0.	-0.50	4000.0	M	201
1585	$\text{O} + \text{CH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}$	2.31(-12)	0.	-0.50	0.0	U	111, 184
1669	$\text{O} + \text{CH}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{CH}$	3.30(-13)	0.	-0.70	13100.0	M	201
1602	$\text{O} + \text{CH}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{H}$	8.30(-11)	0.	0.	0.0	M	24, 112, 201
1603	$\text{O} + \text{CH}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{H}$	1.16(-13)	0.	-0.50	0.0	U	24, 112
1604	$\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$	4.04(-13)	0.	-0.50	0.0	M	113, 114
1605	$\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$	7.68(-12)	0.	-0.50	0.0	M	113, 114
1670	$\text{O} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_3$	3.50(-11)	0.	0.	4550.0	U	201
1581	$\text{O} + \text{C}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{C}$	2.89(-12)	0.	-0.50	0.0	U	19, 24
1595	$\text{O} + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{CH}$	1.00(-10)	0.	0.	250.0	U	24
1608	$\text{O} + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{CH}_2$	8.66(-15)	0.	-0.50	0.0	U	112
1582	$\text{O} + \text{C}_3 \rightarrow \text{CO} + \text{C}_2$	2.90(-12)	0.	-0.50	0.0	U	184, 189
1597	$\text{O} + \text{C}_3\text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{C}_2\text{H}$	1.00(-10)	0.	0.	250.0	U	184, 189
1583	$\text{O} + \text{C}_4 \rightarrow \text{CO} + \text{C}_3$	2.90(-12)	0.	-0.50	0.0	U	184, 189
1599	$\text{O} + \text{C}_4\text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{C}_3\text{H}$	1.00(-10)	0.	0.	250.0	U	184, 189
1589	$\text{O} + \text{NH} \rightarrow \text{OH} + \text{N}$	1.67(-12)	0.	-0.50	0.0	U	24
1588	$\text{O} + \text{NH} \rightarrow \text{NO} + \text{H}$	1.00(-12)	0.	-0.50	0.0	M	201
1606	$\text{O} + \text{NH}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{NH}$	1.82(-14)	0.	-0.50	0.0	M	115
1607	$\text{O} + \text{NH}_2 \rightarrow \text{HNO} + \text{H}$	1.84(-13)	0.	-0.50	0.0	M	115
1671	$\text{O} + \text{NH}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{NH}_2$	2.50(-12)	0.	0.	3020.0	U	201
1590	$\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$	2.20(-12)	0.	-0.50	0.0	M	97, 116
1667	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	1.10(-11)	0.	0.	9240.0	M	201
1586	$\text{O} + \text{CN} \rightarrow \text{CO} + \text{N}$	1.04(-12)	0.	-0.50	0.0	M	24, 117
1665	$\text{O} + \text{CN} \rightarrow \text{NO} + \text{C}$	2.20(-12)	0.	-0.50	14545.0	M	201
1596	$\text{O} + \text{C}_2\text{N} \rightarrow \text{CO} + \text{CN}$	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	U	184, 189
1598	$\text{O} + \text{C}_3\text{N} \rightarrow \text{CO} + \text{C}_2\text{N}$	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	U	184, 189
1600	$\text{O} + \text{C}_4\text{N} \rightarrow \text{CO} + \text{C}_3\text{N}$	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	U	189
1601	$\text{O} + \text{C}_5\text{N} \rightarrow \text{CO} + \text{C}_4\text{N}$	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	U	189
1587	$\text{O} + \text{CS} \rightarrow \text{CO} + \text{S}$	2.00(-10)	0.	0.	750.0	U	24
1666	$\text{O} + \text{NO} \rightarrow \text{O}_2 + \text{N}$	2.60(-13)	0.	-1.00	19500.0	U	198
1591	$\text{O} + \text{SH} \rightarrow \text{SO} + \text{H}$	9.24(-12)	0.	-0.50	0.0	M	202
1668	$\text{O} + \text{HCN} \rightarrow \text{CN} + \text{OH}$	8.70(-12)	0.	0.	4100.0	U	201
1592	$\text{O} + \text{HCO} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$	7.03(-12)	0.	-0.50	0.0	M	118, 119
1593	$\text{O} + \text{HCO} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	5.09(-12)	0.	-0.50	0.0	M	118, 119
1594	$\text{O} + \text{HNO} \rightarrow \text{NO} + \text{OH}$	2.31(-12)	0.	-0.50	0.0	U	115
1609	$\text{S} + \text{CH} \rightarrow \text{CS} + \text{H}$	2.89(-12)	0.	-0.50	0.0	U	202
1612	$\text{S} + \text{OH} \rightarrow \text{SH} + \text{O}$	2.20(-12)	0.	-0.50	0.0	M	202
1613	$\text{S} + \text{OH} \rightarrow \text{SO} + \text{H}$	1.15(-12)	0.	-0.50	0.0	M	202
1611	$\text{S} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SO} + \text{O}$	2.00(-12)	0.	0.	0.0	M	198, 202
1610	$\text{S} + \text{CN} \rightarrow \text{CS} + \text{N}$	1.00(-12)	0.	-0.50	0.0	M	202
1614	$\text{S} + \text{SO}_2 \rightarrow \text{SO} + \text{SO}$	3.00(-14)	0.	0.	0.0	M	198
1672	$\text{H}_2 + \text{CH} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$	5.00(-13)	0.	-0.67	8820.0	U	201
1677	$\text{H}_2 + \text{CH}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$	2.00(-11)	0.	-0.17	6400.0	M	201
1678	$\text{H}_2 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$	1.40(-12)	0.	0.	5500.0	M	201
1679	$\text{H}_2 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2 + \text{H}$	3.30(-07)	0.	0.	44035.0	M	201
1615	$\text{H}_2 + \text{C}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}$	7.97(-14)	0.	-0.50	0.0	M	168
1616	$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$	1.39(-14)	0.	-0.50	0.0	M	169, 170

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table E - Réactions neutre - neutres (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1674	H ₂ + NH → NH ₂ + H	5.80(-14)	0.	-0.79	6700.0	M	201
1681	H ₂ + NH ₂ → NH ₃ + H	2.40(-11)	0.	-0.17	6300.0	U	198
1682	H ₂ + NH ₃ → NH ₂ + H ₂ + H	1.50(-08)	0.	0.	42400.0	M	201
1676	H ₂ + OH → H ₂ O + H	7.70(-12)	0.	0.	2100.0	M	201
1675	H ₂ + O ₂ → OH + OH	4.20(-12)	0.	0.	9300.0	M	201
1673	H ₂ + CN → HCN + H	1.00(-10)	0.	0.	2670.0	U	201
1680	H ₂ + CO ₂ → CO + H ₂ O	1.70(-15)	0.	-0.50	7550.0	M	201
1684	CH + CH ₄ → CH ₃ + CH ₂	4.20(-13)	0.	-0.70	3000.0	M	201
1683	CH + N ₂ → HCN + N	1.70(-13)	0.	0.	9560.0	M	201
1617	CH + NO → HCN + O	3.30(-12)	0.	0.	0.0	M	201
1699	CH ₂ + CH ₂ → CH ₃ + CH	8.30(-13)	0.	-0.50	3000.0	M	201
1700	CH ₂ + CH ₄ → CH ₃ + CH ₃	2.20(-12)	0.	-0.70	10000.0	M	201
1695	CH ₂ + OH → CH ₃ + O	8.30(-13)	0.	-0.50	3000.0	M	201
1694	CH ₂ + OH → H ₂ O + CH	8.30(-13)	0.	-0.50	3000.0	M	201
1628	CH ₂ + OH → H ₂ CO + H	1.00(-10)	0.	0.	250.0	U	24
1687	CH ₂ + CN → HCN + CH	5.30(-12)	0.	0.	2500.0	M	201
1701	CH ₃ + NH ₃ → NH ₂ + CH ₄	1.70(-13)	0.	0.	5100.0	M	201
1696	CH ₃ + OH → H ₂ O + CH ₂	1.00(-13)	0.	-0.70	1000.0	M	201
1698	CH ₃ + H ₂ O → OH + CH ₄	1.20(-11)	0.	0.	12900.0	M	201
1688	CH ₃ + CN → HCN + CH ₂	1.70(-13)	0.	-0.70	1500.0	M	201
1697	CH ₄ + OH → H ₂ O + CH ₃	2.40(-12)	0.	0.	1710.0	M	201
1689	CH ₄ + CN → HCN + CH ₃	5.30(-13)	0.	-0.70	2500.0	M	201
1634	C ₂ H + C ₂ H ₂ → C ₄ H ₂ + H	6.70(-11)	0.	0.	0.0	U	188
1621	NH + NH → N ₂ + H ₂	1.70(-11)	0.	0.	0.0	M	201
1691	NH + OH → H ₂ O + N	8.30(-13)	0.	-0.50	1000.0	M	201
1685	NH + CN → HCN + N	1.70(-13)	0.	-0.50	1000.0	M	201
1622	NH + NO → N ₂ + O + H	2.71(-12)	0.	-0.50	0.0	M	123
1630	NH ₂ + OH → NH ₃ + O	1.00(-13)	0.	0.	0.0	M	201
1629	NH ₂ + OH → H ₂ O + NH	1.00(-13)	0.	0.	0.0	M	201
1623	NH ₂ + NO → H ₂ O + N ₂	1.40(-10)	0.	0.	0.0	M	123
1631	NH ₃ + OH → H ₂ O + NH ₂	2.30(-12)	0.	0.	800.0	M	201
1624	OH + OH → H ₂ O + O	4.90(-11)	0.	0.	400.0	M	198
1686	OH + CN → HCN + O	5.30(-12)	0.	0.	1500.0	M	201
1620	OH + CO → CO ₂ + H	2.20(-13)	0.	0.	80.0	M	121
1625	OH + SH → H ₂ O + S	7.20(-12)	0.	0.	0.0	M	198
1626	OH + SO → SO ₂ + H	5.77(-12)	0.	-0.50	0.0	M	202
1627	OH + H ₂ S → SH + H ₂ O	1.00(-11)	0.	0.	200.0	M	202
1693	OH + HCN → CN + H ₂ O	3.30(-13)	0.	-0.60	2500.0	M	201
1632	OH + H ₂ CO → HCO + H ₂ O	5.00(-12)	0.	0.	0.0	M	122
1619	O ₂ + CN → NO + CO	5.30(-13)	0.	0.	0.0	M	201
1690	O ₂ + CO → CO ₂ + O	4.20(-12)	0.	0.	24000.0	M	201
1618	CN + NO → CO + N ₂	5.30(-13)	0.	0.	0.0	M	135, 201
1692	NO + NO → O ₂ + N ₂	2.20(-10)	0.	0.	38060.0	M	201
1633	SH + SH → H ₂ S + S	7.50(-13)	0.	-0.50	0.0	M	202

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Table F - Recombinaison électroniques

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

N°	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1418	H ⁺ + e ⁻ → H + hν	1.37(-10)	0.	0.60	0.0	C	124
1419	D ⁺ + e ⁻ → D + hν	1.37(-10)	0.	0.60	0.0	C	124
1428	He ⁺ + e ⁻ → He + hν	1.38(-10)	0.	0.60	0.0	C	124
1420	C ⁺ + e ⁻ → C + hν	1.35(-10)	0.	0.60	0.0	C	124
1421	N ⁺ + e ⁻ → N + hν	1.27(-10)	0.	0.61	0.0	C	124
1422	O ⁺ + e ⁻ → O + hν	1.22(-10)	0.	0.62	0.0	C	124
1443	Mg ⁺ + e ⁻ → Mg + hν	1.08(-10)	0.	0.64	0.0	C	124
1442	Si ⁺ + e ⁻ → Si + hν	1.45(-10)	0.	0.59	0.0	C	124
1441	Fe ⁺ + e ⁻ → Fe + hν	5.20(-10)	0.	0.89	0.0	C	165
1423	S ⁺ + e ⁻ → S + hν	1.28(-10)	0.	0.61	0.0	C	124
1424	H ₂ ⁺ + e ⁻ → H + H	8.80(-07)	0.	0.50	0.0	M	125
1427	HD ⁺ + e ⁻ → D + H	4.40(-06)	0.	0.50	0.0	C	125
1425	H ₃ ⁺ + e ⁻ → H + H + H	9.75(-08)	0.	0.50	0.0	M	171
1426	H ₃ ⁺ + e ⁻ → H ₂ + H	9.75(-08)	0.	0.50	0.0	M	171
1446	H ₂ D ⁺ + e ⁻ → D + H + H	1.15(-07)	0.	0.50	0.0	M	171
1447	H ₂ D ⁺ + e ⁻ → H ₂ + D	1.15(-07)	0.	0.50	0.0	M	171
1448	H ₂ D ⁺ + e ⁻ → HD + H	1.15(-07)	0.	0.50	0.0	M	171
1432	CH ⁺ + e ⁻ → C + H	5.00(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1473	CH ₂ ⁺ + e ⁻ → C + H + H	2.90(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1474	CH ₂ ⁺ + e ⁻ → H ₂ + C	2.90(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1475	CH ₂ ⁺ + e ⁻ → CH + H	2.90(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1476	CH ₃ ⁺ + e ⁻ → CH + H + H	4.00(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1477	CH ₃ ⁺ + e ⁻ → CH + H ₂	4.00(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1478	CH ₃ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ + H	4.00(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1479	CH ₄ ⁺ + e ⁻ → CH + H ₂ + H	3.20(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1480	CH ₄ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ + H + H	3.20(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1481	CH ₄ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ + H ₂	3.20(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1482	CH ₄ ⁺ + e ⁻ → CH ₃ + H	3.20(-06)	0.	0.50	0.0	M	140
1483	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH + H ₂ + H ₂	1.18(-06)	0.	0.30	0.0	M	171
1484	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ + H ₂ + H	1.18(-06)	0.	0.30	0.0	M	171
1485	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH ₃ + H + H	1.18(-06)	0.	0.30	0.0	M	171
1486	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH ₃ + H ₂	1.18(-06)	0.	0.30	0.0	M	171
1487	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH ₄ + H	1.18(-06)	0.	0.30	0.0	M	171
1429	C ₂ ⁺ + e ⁻ → C + C	1.00(-05)	0.	0.50	0.0	M	141
1464	C ₂ H ⁺ + e ⁻ → CH + C	5.00(-06)	0.	0.50	0.0	M	141
1463	C ₂ H ⁺ + e ⁻ → C ₂ + H	5.00(-06)	0.	0.50	0.0	M	141
1522	C ₂ H ₂ ⁺ + e ⁻ → CH + CH	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	M	141
1521	C ₂ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₂ + H + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	M	141
1523	C ₂ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	M	141
1525	C ₂ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H + H + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	M	141, 189
1524	C ₂ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H + H ₂	5.33(-06)	0.	0.50	0.0	M	141
1526	C ₂ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H ₂ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	M	141, 189
1527	C ₂ H ₄ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H ₂ + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1528	C ₂ H ₄ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H ₃ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1529	C ₂ H ₅ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H + H ₂ + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1530	C ₂ H ₅ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H ₂ + H ₂ + H	5.20(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1531	C ₂ H ₅ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H ₃ + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1532	C ₂ H ₅ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H ₄ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1430	C ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₂ + C	5.20(-06)	0.	0.50	0.0	U	24, 189
1468	C ₃ H ⁺ + e ⁻ → C ₂ H + C	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	24, 189
1467	C ₃ H ⁺ + e ⁻ → C ₃ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnus.

Table F – Recombinaison électroniques (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1533	C ₃ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₃ + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1534	C ₃ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1535	C ₃ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1536	C ₃ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H ₂ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1537	C ₃ H ₄ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H ₂ + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1538	C ₃ H ₄ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H ₃ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1539	C ₃ H ₅ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H ₃ + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1540	C ₃ H ₅ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H ₄ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1431	C ₄ ⁺ + e ⁻ → C ₃ + C	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1470	C ₄ H ⁺ + e ⁻ → C ₂ H + C ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1469	C ₄ H ⁺ + e ⁻ → C ₄ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1541	C ₄ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₄ + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1542	C ₄ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₄ H + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1543	C ₄ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₄ H + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1544	C ₄ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₄ H ₂ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1437	NH ⁺ + e ⁻ → N + H	1.90(-06)	0.	0.50	0.0	M	125
1492	NH ₂ ⁺ + e ⁻ → N + H + H	1.73(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1493	NH ₂ ⁺ + e ⁻ → H ₂ + N	1.73(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1494	NH ₂ ⁺ + e ⁻ → NH + H	1.73(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1496	NH ₃ ⁺ + e ⁻ → NH + H + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1495	NH ₃ ⁺ + e ⁻ → NH + H ₂	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1497	NH ₃ ⁺ + e ⁻ → NH ₂ + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1498	NH ₄ ⁺ + e ⁻ → NH + H ₂ + H	4.80(-06)	0.	0.50	0.0	M	142
1499	NH ₄ ⁺ + e ⁻ → NH ₂ + H ₂	4.80(-06)	0.	0.50	0.0	M	142
1500	NH ₄ ⁺ + e ⁻ → NH ₃ + H	4.80(-06)	0.	0.50	0.0	M	142
1436	N ₂ ⁺ + e ⁻ → N + N	6.20(-06)	0.	0.50	0.0	M	125
1491	N ₂ H ⁺ + e ⁻ → NH + N	2.33(-05)	0.	1.00	0.0	M	171
1490	N ₂ H ⁺ + e ⁻ → N ₂ + H	2.33(-05)	0.	1.00	0.0	M	171
1440	OH ⁺ + e ⁻ → O + H	1.40(-06)	0.	0.50	0.0	M	125
1449	H ₂ O ⁺ + e ⁻ → O + H + H	4.33(-07)	0.	0.50	0.0	M	125
1450	H ₂ O ⁺ + e ⁻ → H ₂ + O	4.33(-07)	0.	0.50	0.0	M	125
1451	H ₂ O ⁺ + e ⁻ → OH + H	4.33(-07)	0.	0.50	0.0	M	125
1454	H ₃ O ⁺ + e ⁻ → OH + H + H	1.33(-05)	0.	0.50	0.0	M	128
1455	H ₃ O ⁺ + e ⁻ → OH + H ₂	1.33(-05)	0.	0.50	0.0	M	128
1456	H ₃ O ⁺ + e ⁻ → H ₂ O + H	1.33(-05)	0.	0.50	0.0	M	128
1439	O ₂ ⁺ + e ⁻ → O + O	3.30(-06)	0.	0.50	0.0	M	125
1502	O ₂ H ⁺ + e ⁻ → OH + O	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1501	O ₂ H ⁺ + e ⁻ → O ₂ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1433	CN ⁺ + e ⁻ → N + C	3.10(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1465	C ₂ N ⁺ + e ⁻ → C ₂ + N	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1466	C ₂ N ⁺ + e ⁻ → CN + C	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1471	C ₄ N ⁺ + e ⁻ → C ₂ N + C ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	M	188
1472	C ₄ N ⁺ + e ⁻ → C ₃ N + C	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	M	188
1434	CO ⁺ + e ⁻ → O + C	3.10(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1489	CO ₂ ⁺ + e ⁻ → O ₂ + C	3.30(-06)	0.	0.50	0.0	M	131
1488	CO ₂ ⁺ + e ⁻ → CO + O	3.30(-06)	0.	0.50	0.0	M	131
1435	CS ⁺ + e ⁻ → S + C	3.46(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1438	NO ⁺ + e ⁻ → O + N	4.10(-06)	0.	0.50	0.0	M	125
1462	HeH ⁺ + e ⁻ → He + H	3.50(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1444	SH ⁺ + e ⁻ → S + H	3.46(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1452	H ₂ S ⁺ + e ⁻ → S + H + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	24

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnus.

Table F - Recombinaison électroniques (suite)

Taux de réaction $k = (a + bT) T^{-\alpha} e^{-\beta/T}$

No	Réactions	a cm ³ s ⁻¹	b cm ³ s ⁻¹ K ⁻¹	α	β K		Réf.
1453	H ₂ S ⁺ + e ⁻ → SH + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1445	SO ⁺ + e ⁻ → S + O	2.00(-07)	0.	0.50	0.0	U	24
1457	HCN ⁺ + e ⁻ → CN + H	3.50(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1458	HCO ⁺ + e ⁻ → CO + H	2.76(-05)	0.	1.00	0.0	M	171
1460	HNO ⁺ + e ⁻ → NO + H	5.20(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1459	HCS ⁺ + e ⁻ → CS + H	3.60(-06)	0.	0.75	0.0	M	203
1461	HSO ⁺ + e ⁻ → SO + H	2.00(-07)	0.	0.50	0.0	U	24
1503	H ₂ CN ⁺ + e ⁻ → CN + H + H	5.20(-06)	0.	0.50	0.0	U	24, 189
1504	H ₂ CN ⁺ + e ⁻ → HCN + H	5.20(-06)	0.	0.50	0.0	U	24, 189
1505	H ₂ CN ⁺ + e ⁻ → HNC + H	5.20(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1506	H ₂ CO ⁺ + e ⁻ → CO + H + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1507	H ₂ CO ⁺ + e ⁻ → CO + H ₂	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1508	H ₂ CO ⁺ + e ⁻ → HCO + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1510	H ₃ CO ⁺ + e ⁻ → CO + H ₂ + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1511	H ₃ CO ⁺ + e ⁻ → HCO + H + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1512	H ₃ CO ⁺ + e ⁻ → H ₂ CO + H	3.33(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1517	HCO ₂ ⁺ + e ⁻ → CO + O + H	5.00(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1518	HCO ₂ ⁺ + e ⁻ → CO ₂ + H	5.00(-06)	0.	0.50	0.0	U	24
1519	HSO ₂ ⁺ + e ⁻ → SO + O + H	2.00(-07)	0.	0.50	0.0	U	
1520	HSO ₂ ⁺ + e ⁻ → SO ₂ + H	2.00(-07)	0.	0.50	0.0	U	
1513	HC ₃ N ⁺ + e ⁻ → CN + C ₂ H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1514	HC ₃ N ⁺ + e ⁻ → C ₃ N + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1515	HC ₅ N ⁺ + e ⁻ → CN + C ₄ H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1516	HC ₅ N ⁺ + e ⁻ → C ₅ N + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1545	H ₂ C ₃ N ⁺ + e ⁻ → C ₃ N + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1546	H ₂ C ₃ N ⁺ + e ⁻ → HC ₃ N + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1547	H ₂ C ₅ N ⁺ + e ⁻ → C ₅ N + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1548	H ₂ C ₅ N ⁺ + e ⁻ → HC ₅ N + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1549	H ₃ C ₃ N ⁺ + e ⁻ → C ₃ N + H ₂ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1550	H ₃ C ₃ N ⁺ + e ⁻ → HC ₃ N + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1551	H ₄ C ₅ N ⁺ + e ⁻ → C ₅ N + H ₂ + H ₂	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189
1552	H ₄ C ₅ N ⁺ + e ⁻ → HC ₅ N + H ₂ + H	2.60(-06)	0.	0.50	0.0	U	189

C, M, U signifient que les taux de réaction sont Calculés, Mesurés, inconnUs.

Références des tables A à F

- 1 Spitzer, L., Tomasko, M.G. : 1968, *Astrophys. J.* **152**, 971.
- 2 Weisheit, J.C. : 1973, *Astrophys. J.* **185**, 877.
- 3 Loetz, W. : 1967, *Astrophys. J. Suppl.* **14**, 207.
- 4 Cravens, T.E., Dalgarno, A. : 1978, *Astrophys. J.* **219**, 750.
- 5 Taylor, K.T., Burke, P.G. : 1976, *J. Phys.* **B9**, L353.
- 6 Dubau, J., Wells, J. : 1973, *J. Phys.* **B6**, 231.
- 7 Chapman, R.D., Henry, R.J. : 1972, *Astrophys. J.* **173**, 243.
- 8 Lombardi, G.G., Smith, P.L., Parkinson, W.H. : 1978, *Phys. Rev.* **A18**, 2131.
- 9 Tondello, G. : 1972, *Astrophys. J.* **172**, 771.
- 10 Stecher, T.P., Williams, D.A. : 1967, *Astrophys. J.* **149**, L29.
- 11 Allison, A.C., Dalgarno, A. : 1970, *Atomic Data* **1**, 289.
- 12 Stephens, T.L., Dalgarno, A. : 1972, *J. Quant. Spectrosc. & Rad. Transfer* **12**, 569.
- 13 Barsuhn, J. : 1977, *Astron. Astrophys. Suppl.* **28**, 453.
- 14 Kirby, K., Constantinides, E.R., Babeu, S., Oppenheimer, M., Victor, G.A. : 1979, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **23**, 63.
- 15 Barsuhn, J., Nesbet, R.K. : 1978, *J. Chem. Phys.* **68**, 2783.
- 16 Hudson, R.D. : 1971, *Rev. Geophys. Space Phys.* **9**, 305.
- 17 Hofmann, H., Treffitz, E. : 1980, *Astron. Astrophys.* **82**, 256.
- 18 Elander, N., Smith, W.H. : 1973, *Astrophys. J.* **184**, 663.
- 19 Solomon, P.M., Klemperer, W. : 1972, *Astrophys. J.* **178**, 389.
- 20 Black, J.H., Dalgarno, A. : 1977, *Astrophys. J. Suppl.* **34**, 405.
- 21 Metzger, P.H., Cook, G.R. : 1964, *J. Chem. Phys.* **41**, 642.
- 22 Mount, G.H., Warden, E.S., Moos, H.W. : 1977, *Astrophys. J.* **214**, L47.
- 23 Strobel, D.F. : 1975, *Rev. Geophys. Space Phys.* **13**, 372.
- 24 Prasad, S.S., Huntress, W.T.Jr. : 1980, *Astrophys. J. Suppl.* **43**, 1.
- 25 Watanabe, K., Sood, S.P. : 1965, *Science of Light* **14**, 36.
- 26 Watanabe, K. : 1954, *J. Chem. Phys.* **22**, 1564.
- 27 Stief, L.J., Donn, B., Glicker, S., Gentieu, E.P., Mentall, J.E. : 1972, *Astrophys. J.* **171**, 21.
- 28 Van Dishoeck, E.F., Langhoff, S.R., Dalgarno, A. : 1983, *J. Chem. Phys.* **78**, 4552.
- 29 Van Dishoeck, E.F., Dalgarno, A. : 1983, *J. Chem. Phys.* **79**, 873.
- 30 Katayama, D.H., Huffman, R.E., O'Bryan, C.L. : 1973, *J. Chem. Phys.* **59**, 4309.
- 31 Watanabe, K., Jursa, A.S. : 1964, *J. Chem. Phys.* **41**, 1650.
- 32 Laufer, A.H., McNesby, J.R. : 1965, *Can. J. Chem.* **43**, 3487.
- 33 Lavendy, H., Gandara, G., Robbe, J.M. : 1984, *J. Molec. Spectrosc.* **106**, 395.
- 34 Cook, G.R., Metzger, P.H., Ogawa, M. : 1965, *Can. J. Phys.* **43**, 1706.
- 35 Lee, L.C., Guest, J.A. : 1981, *J. Phys.* **B14**, 3415.
- 36 Watanabe, K., Matsunaga, F.M., Sakai, H. : 1967, *Applied Optics* **6**, 391.
- 37 Nakata, R.S., Watanabe, K., Matsunaga, F.M. : 1965, *Science of Light* **14**, 54.
- 38 Schemansky, D.E. : 1972, *J. Chem. Phys.* **56**, 1582.
- 39 Slinger, T.G., Black, G. : 1978, *J. Chem. Phys.* **68**, 1844.
- 40 Mentall, J.E., Gentieu, E.P., Krauss, M., Neumann, D. : 1971, *J. Chem. Phys.* **55**, 5471.
- 41 Warneck, P. : 1971, *Z. Naturforschung* **26A**, 2049.
- 42 Glicker, S., Stief, L.J. : 1971, *J. Chem. Phys.* **54**, 2852.
- 43 Gentieu, E.P., Mentall, J.E. : 1970, *Science* **169**, 681.
- 44 Calvert, J.G., Pitts, J.N. : 1966, in *Photochemistry*, John Wiley and Sons Inc.
- 45 Clark, J.H., Moore, C.B., Nogar, N.S. : 1978, *J. Chem. Phys.* **68**, 1264.
- 46 Chambaud, G., Launay, J.M., Levy, B., Millie, P., Roueff, E., Tran-Minh, F. : 1980, *J. Phys.* **B13**, 4205.
- 47 Dalgarno, A., Black, J.H., Weisheit, J.C. : 1973, *Astrophys. Letters* **14**, 77.
- 48 Huntress, W.T.Jr., Kim, J.K., Theard, L.P. : 1974, *Chem. Phys. Letters* **2**, 189.
- 49 Fehsenfeld, F.C., Ferguson, E.E. : 1972, *J. Chem. Phys.* **56**, 3066.
- 50 Fehsenfeld, F.C., Ferguson, E.E. : 1971, *J. Geophys. Res.* **76**, 8453.
- 51 Johnsen, R., Chen, A., Biondi, M.A. : 1980, *J. Chem. Phys.* **72**, 3085.
- 52 Huntress, W.T.Jr., Anicich, V.G. : 1976, *Astrophys. J.* **208**, 237.
- 53 Laudenslager, J.B., Huntress, W.T.Jr., Bowers, M.T. : 1974, *J. Chem. Phys.* **61**, 4600.
- 54 Anicich, V.G., Laudenslager, J.B., Huntress, W.T.Jr., Futrell, J.H. : 1977, *J. Chem. Phys.* **67**, 4340.
- 55 Huntress, W.T.Jr. : 1977, *Astrophys. J. Suppl.* **33**, 435.
- 56 Lindinger, W., Albritton, D.L., Fehsenfeld, F.C. : 1975, *J. Chem. Phys.* **62**, 4957.
- 57 Anicich, V.G., Huntress, W.T.Jr., Futrell, J.H. : 1976, *Chem. Phys. Letters* **40**, 233.

- 58 Kim, J.K., Theard, L.P., Huntress, W.T.Jr. : 1975, *J. Chem. Phys.* **62**, 45.
- 59 Smith, D., Adams, N.G., Miller, T.M. : 1978, *J. Chem. Phys.* **69**, 308.
- 60 Albritton, D.L., Dotan, I., Lindinger, W., McFarland, M., Tellinghuissen, J., Fehsenfeld, F.C. : 1977, *J. Chem. Phys.* **66**, 410.
- 62 Theard, L.P., Huntress, W.T.Jr. : 1974, *J. Chem. Phys.* **60**, 2840.
- 63 Kim, J.K., Huntress, W.T.Jr. : 1975, *J. Chem. Phys.* **62**, 2820.
- 64 Fehsenfeld, F.C. : 1976, *Astrophys. J.* **209**, 638.
- 66 Burt, J.A., Dunn, J.L., McEwan, M.J., Sutton, M.M., Roche, A.E., Schiff, H.I. : 1970, *J. Chem. Phys.* **52**, 6062.
- 67 Adams, N.G., Smith, D. : 1977, *Chem. Phys. Letters* **47**, 383.
- 68 Albritton, D.L. : 1978, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **22**, 1.
- 69 McFarland, M., Albritton, D.L., Fehsenfeld, F.C., Ferguson, E.E., Schmeltekopf, A.L. : 1974, *J. Geophys. Res.* **79**, 2925.
- 70 Rutherford, J.A., Mathis, R.F., Turner, B.R., Vroom, D.A. : 1971, *J. Chem. Phys.* **55**, 3785.
- 71 Rutherford, J.A., Vroom, D.A. : 1972, *J. Chem. Phys.* **57**, 3091.
- 72 Lindinger, W., Fehsenfeld, F.C., Schmeltekopf, A.L., Ferguson, E.E. : 1974, *J. Geophys. Res.* **79**, 4753.
- 73 Fehsenfeld, F.C., Dunkin, D.B., Ferguson, E.E. : 1970, *Planet. Space Sci.* **18**, 1267.
- 74 Fehsenfeld, F.C. : 1977, *Planet. Space Sci.* **25**, 195.
- 75 Lindinger, W., Albritton, D.L., Fehsenfeld, F.C., Ferguson, E.E. : 1975, *J. Geophys. Res.* **80**, 3725.
- 76 Smith, D., Adams, N.G. : 1977, *Astrophys. J.* **217**, 741.
- 77 Huntress, W.T.Jr., Pinizzoto, R.F. : 1973, *J. Chem. Phys.* **59**, 4742.
- 79 Adams, N.G., Smith, D. : 1978, *Chem. Phys. Letters* **54**, 530.
- 80 Smith, D., Adams, N.G. : 1977, *Chem. Phys. Letters* **47**, 145.
- 83 Lindinger, W., Albritton, D.L., Fehsenfeld, F.C., Schmeltekopf, A.L., Ferguson, E.E. : 1975, *J. Chem. Phys.* **62**, 3549.
- 84 Betowski, D., Payzant, J.D., MacKay, G.I., Bohme, D.K. : 1975, *Chem. Phys. Letters* **31**, 321.
- 85 Roche, A.E., Sutton, M.M., Bohme, D.K., Schiff, H.I. : 1971, *J. Chem. Phys.* **55**, 5480.
- 87 Fehsenfeld, F.C., Lindinger, W., Schmeltekopf, A.L., Albritton, D.L., Ferguson, E.E. : 1975, *J. Chem. Phys.* **62**, 2001.
- 88 Oppenheimer, M. : 1975, *Astrophys. J.* **196**, 251.
- 89 Dalgarno, A., Black, J.H. : 1976, *Rep. Progr. Phys.* **39**, 573.
- 90 MacKay, G.I., Betowski, L.D., Payzant, J.D., Schiff, H.I., Bohme, D.K. : 1976, *J. Phys. Chem.* **80**, 2919.
- 91 Adams, N.G., Smith, D., Grief, D. : 1978, *Int. J. Mass Spectrom. & Ion Phys.* **26**, 405.
- 93 Hemsworth, R.S., Payzant, J.D., Schiff, H.I., Bohme, D.K. : 1974, *Chem. Phys. Letters* **26**, 417.
- 94 Herbst, E., Bohme, D.K., Payzant, J.D., Schiff, H.I. : 1975, *Astrophys. J.* **201**, 603.
- 95 Rakshit, A.B., Stock, H.M.P., Wareing, D.P., Twiddy, N.D. : 1978, *J. Phys.* **B24**, 4237.
- 96 Lindinger, W., McFarland, M., Fehsenfeld, F.C., Albritton, D.L., Schmeltekopf, A.L., Ferguson, E.E. : 1975, *J. Chem. Phys.* **63**, 2173.
- 97 Schiff, H.I., MacKay, G.I., Vlachos, G.D., Bohme, D.K. : 1981, in *Interstellar Molecules IAU Symp.* **87**, ed. Andrew, B.H., D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, p. 307.
- 98 Herbst, E., Green, S., Thaddeus, P., Klemperer, W. : 1977, *Astrophys. J.* **215**, 503.
- 100 Graff, M.M., Moseley, J.T., Roueff, E. : 1983, *Astrophys. J.* **269**, 796.
- 102 Fehsenfeld, F.C., Dunkin, D.B., Ferguson, E.E. : 1974, *Astrophys. J.* **188**, 43.
- 103 Herbst, E. : 1976, *Astrophys. J.* **205**, 94.
- 105 Husain, D., Kirsh, L.J. : 1971, *Trans. Faraday Soc.* **67**, 2025.
- 106 Herbst, E., Klemperer, W. : 1973, *Astrophys. J.* **185**, 505.
- 107 Howard, M.J., Smith, I.W.M. : 1980, *Chem. Phys. Letters* **69**, 40.
- 109 Lee, J.H., Michael, J.V., Payne, W.A., Stief, L.J. : 1978, *J. Chem. Phys.* **69**, 3069.
- 110 Gerola, H., Glassgold, A.E. : 1978, *Astrophys. J. Suppl.* **37**, 1.
- 111 Messing, I., Filseth, S.V., Sadowski, C.M., Carrington, T. : 1981, *J. Chem. Phys.* **74**, 3874.
- 112 Brown, J.M., Trush, B.A. : 1967, *Trans. Faraday Soc.* **63**, 630.
- 113 Washida, N., Bayes, K.D. : 1973, *Chem. Phys. Letters* **23**, 373.
- 114 Washida, N. : 1980, *J. Chem. Phys.* **73**, 1665.
- 115 Gehring, J., Hoyerman, K., Schacke, H., Wolfrum, J. : 1973, in *14th International Symposium on Combustion*, Pittsburg, p. 99.
- 116 Baulch, D.L., Cox, R.A., Crutzen, P.J., Hampson, R.F.Jr., Kerr, J.A., Troe, J., Watson, R.T. : 1982, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **11**, 327.
- 117 Schmatjko, K.J., Wolfrum, J. : 1976, in *16th International Symposium on Combustion*, Pittsburg, p. 819.
- 118 Washida, N., Martinez, R.I., Bayes, K.D. : 1974, *Z. Naturforschung* **A29**, 251.
- 119 Westenberg, A.A., De Haas, N. : 1972, *J. Phys. Chem.* **76**, 2215.

- 121 Davis, D.D., Fisher, S., Schiff, R. : 1974, *J. Chem. Phys.* **61**, 2213.
- 122 Stief, L.J., Nava, D.F., Payne, W.A., Michael, J.V. : 1980, *J. Chem. Phys.* **73**, 2254.
- 123 Hampson, R.F.Jr., Garvin, D. : 1977, in *Reaction Rate and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry - 1977*, NBS Special Publication 513, NBS, Washington DC 20234.
- 124 Aldrovandi, S.M.V., Pequignot, D. : 1973, *Astron. Astrophys.* **25**, 137.
- 125 McGowan, J.W., Mul, P.M., D'Angelo, V.S., Mitchell, J.B.A., Defrance, P., Froelich, H.R. : 1979, *Phys. Rev. Letters* **42**, 373.
- 126 Lee, L.C. : 1980, *J. Chem. Phys.* **72**, 6414.
- 127 Nagata, T., Kondow, T., Ozaki, Y., Kuchitsu, K. : 1981, *Chem. Phys.* **57**, 45.
- 128 Heppner, R.A., Walls, F.L., Armstrong, W.T., Dunn, G.H. : 1976, *Phys. Rev.* **A13**, 1000.
- 130 Nuth, J.A., Glicker, S. : 1982, *J. Quant. Spectrosc. & Rad. Transfer* **28**, 223.
- 131 Weller, G.S., Biondi, M.A. : 1967, *Phys. Rev. Letters* **19**, 59.
- 132 Nakayama, T., Watanabe, K. : 1964, *J. Chem. Phys.* **40**, 558.
- 133 Langer, W.D. : 1976, *Astrophys. J.* **206**, 699.
- 134 Karpas, Z., Anicich, V.G., Huntress, W.T.Jr. : 1979, *J. Chem. Phys.* **70**, 2877.
- 135 Lam, L., Dugan, C.H., Sadowski, C.M. : 1978, *J. Chem. Phys.* **69**, 2877.
- 136 Adams, N.G., Smith, D., Paulson, J.F. : 1980, *J. Chem. Phys.* **72**, 288.
- 138 Henschman, M.J., Adams, N.G., Smith, D. : 1981, *J. Chem. Phys.* **75**, 1201.
- 139 Adams, N.G., Smith, D. : 1981, *Astrophys. J.* **248**, 373.
- 140 Mul, P.M., Mitchell, J.B.A., D'Angelo, V.S., Defrance, P., McGowan, J.W., Froelich, H.R. : 1981, *J. Phys.* **B14**, 1353.
- 141 Mul, P.M., McGowan, J.W. : 1981, *Astrophys. J.* **237**, 749.
- 142 Dubois, R.D., Jeffries, J.B., Dunn, G.H. : 1978, *Phys. Rev.* **A17**, 1314.
- 143 Schiff, H.I., Bohme, D.K. : 1979, *Astrophys. J.* **232**, 740.
- 144 Smith, D., Adams, N.G. : 1981, *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* **197**, 377.
- 145 Viggiano, A.A., Howorka, F., Albritton, D.L., Fehsenfeld, F.C., Adams, N.G., Smith, D. : 1980, *Astrophys. J.* **236**, 492.
- 146 Karpas, Z., Huntress, W.T.Jr. : 1978, *Chem. Phys. Letters* **59**, 87.
- 147 Huntress, W.T.Jr., McEwan, M.J., Karpas, Z., Anicich, V.G. : 1980, *Astrophys. J. Suppl.* **44**, 481.
- 148 Howorka, F., Dotan, I., Fehsenfeld, F.C., Albritton, D.L. : 1980, *J. Chem. Phys.* **73**, 758.
- 149 Bohme, D.K., MacKay, G.I., Schiff, H.I. : 1980, *J. Chem. Phys.* **73**, 4976.
- 150 Dotan, I., Lindinger, W., Rowe, B., Fahey, D.W., Fehsenfeld, F.C., Albritton, D.L. : 1980, *Chem. Phys. Letters* **72**, 67.
- 151 Luine, J.A., Dunn, G.H. : 1981, in *XII International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions*, North Holland Publishing Company, p. 1035.
- 152 Rakshit, A.B. : 1982, *Int. J. Mass Spectrom. & Ion Phys.* **41**, 185.
- 153 Jones, J.D.C., Birkinshaw, K., Twiddy, N.D. : 1981, *Chem. Phys. Letters* **77**, 484.
- 154 McEwan, M.J., Anicich, V.G., Huntress, W.T.Jr. : 1981, *Int. J. Mass Spectrom. & Ion Phys.* **37**, 273.
- 155 MacKay, G.I., Vlachos, G.D., Bohme, D.K., Schiff, H.I. : 1980, *Int. J. Mass Spectrom. & Ion Phys.* **36**, 259.
- 156 Freeman, C.G., Harland, P.W., Liddy, J.P., McEwan, M.J. : 1978, *Aust. J. Chem.* **31**, 963.
- 157 Anicich, V.G., Kim, J.K., Huntress, W.T.Jr. : 1977, *Int. J. Mass Spectrom. & Ion Phys.* **36**, 259.
- 158 Pouilly, B., Robbe, J.M., Schamps, J., Roueff, E. : 1983, *J. Phys.* **B16**, 437.
- 159 Wight, G.R., Van der Wiel, M.J., Brion, C.E. : 1977, *J. Phys.* **B10**, 1863.
- 160 Tan, K.H., Brion, C.E., Van der Leeuw, P.E., Van der Wiel, M.J. : 1978, *Chem. Phys.* **29**, 299.
- 161 Guest, J.A., Lee, L.C. : 1981, *J. Phys.* **B14**, 3401.
- 163 Huntress, W.T.Jr., Prasad, S.S., Kemper, P.R., Cates, R.D., Bowers, M.T. : 1982, *Astron. Astrophys.* **114**, 275.
- 165 Pequignot, D., Aldrovandi, S.M.V. : 1985, private communication (unpublished result).
- 166 Tondello, G. : 1975, *Mem. Soc. Astron. Italiana* **46**, 113.
- 167 Hansen, J.E., Ziegenbein, B., Lincke, R., Kelly, H.P. : 1977, *J. Phys.* **B10**, 37.
- 168 Pasternak, L., McDonald, J.R. : 1979, *Chem. Phys.* **43**, 173.
- 169 Okabe, H. : 1981, *J. Chem. Phys.* **75**, 2772.
- 170 Laufer, A.H., Bass, A.M. : 1979, *J. Phys. Chem.* **83**, 310.
- 171 Adams, N.G., Smith, D., Alge, E. : 1984, *J. Chem. Phys.* **81**, 1778.
- 172 Van Dishoeck, E.F., Dalgarno, A. : 1984, *Astrophys. J.* **277**, 576.
- 173 Kirby, K., Roberge, W.G., Saxon, R.P., Liu, B. : 1980, *Astrophys. J.* **239**, 855.
- 174 Barlow, S.E., Dunn, G.H., Schauer, M. : 1984, *Phys. Rev. Letters* **52**, 902.
- 175 Marquette, J.B., Rowe, B.R., Dupeyrat, G., Roueff, E. : 1985, *Astron. Astrophys.* **147**, 115.
- 176 Rowe, B.R., Marquette, J.B., Dupeyrat, G. : 1985, *Chem. Phys. Letters* **113**, 403.
- 177 Rowe, B.R., Marquette, J.B., Dupeyrat, G. : 1985, Colloque ATP-CNRS.

- 178 Rowe, B.R., Marquette, J.B., Dupeyrat, G. : 1985, in *Molecular Astrophysics*, eds. Diercksen, G.H.F., Huebner, W.F., Langhoff, P.W., D. Reidel Publishing Company, p. 631.
- 179 Federer, W., Villinger, H., Howorka, F., Lindinger, W., Tosi, P., Bassi, D., Ferguson, E. : 1984, *Phys. Rev. Letters* **52**, 2084.
- 180 Federer, W., Villinger, H., Tosi, P., Bassi, D., Ferguson, E., Lindinger, W. : 1985, in *Molecular Astrophysics*, eds. Diercksen, G.H.F., Huebner, W.F., Langhoff, P.W., D. Reidel Publishing Company, p. 649.
- 181 Böhringer, H., Arnold, F. : 1985, in *Molecular Astrophysics*, eds. Diercksen, G.H.F., Huebner, W.F., Langhoff, P.W., D. Reidel Publishing Company, p. 639.
- 182 Ferguson, E.E. : 1985, in *Molecular Astrophysics*, eds. Diercksen, G.H.F., Huebner, W.F., Langhoff, P.W., D. Reidel Publishing Company, p. 471.
- 183 Herbst, E. : 1985, *Astrophys. J.* **291**, 226.
- 184 Herbst, E. : 1983, *Astrophys. J. Suppl.* **53**, 41.
- 185 Smith, D., Adams, N.G. : 1977, *Int. J. Mass Spectrom. & Ion Phys.* **23**, 123.
- 186 Herbst, E., Adams, N.G., Smith, D. : 1983, *Astrophys. J.* **269**, 329.
- 187 Herbst, E., Adams, N.G., Smith, D. : 1984, *Astrophys. J.* **285**, 618.
- 188 Herbst, E., Leung, C.M. : 1985, *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* **222**, 689.
- 189 Leung, C.M., Herbst, E., Huebner, W.F. : 1984, *Astrophys. J. Suppl.* **56**, 231.
- 190 Anicich, V.G., Huntress, W.T.Jr. : 1986, *Astrophys. J. Suppl.* **62**, 553.
- 191 Bohme, D.K., Rakshit, A.B. : 1985, *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* **213**, 717.
- 192 Lafont, S., Lucas, R., Omont, A. : 1982, *Astron. Astrophys.* **106**, 201.
- 193 Prasad, S.S., Huntress, W.T.Jr. : 1982, *Astrophys. J.* **260**, 590.
- 194 Millar, T.J. : 1982, *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* **199**, 309.
- 195 Duley, W.W., Millar, T.J., Williams, D.A. : 1980, *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* **192**, 945.
- 196 McAllister, T. : 1978, *Astrophys. J.* **225**, 857.
- 197 Goldsmith, P.F., Langer, W.D., Ellder, J., Irvine, W., Kollberg, E. : 1981, *Astrophys. J.* **249**, 524.
- 198 Slavsky, D.B., Scalo, J.M. : 1986, *Chemistry in oxygen-rich circumstellar shells*, preprint and the references quoted in.
- 199 Van Dishoeck, E.F. : 1986, in *Astrochemistry*, eds. Vardia, M.S., Tarafdar S.P., D. Reidel Publishing Company, p. 51.
- 200 Lee, L.C. : 1984, *Astrophys. J.* **282**, 172.
- 201 Mitchell, G.F. : 1984, *Astrophys. J. Suppl.* **54**, 81.
- 202 Mitchell, G.F. : 1984, *Astrophys. J.* **287**, 665.
- 203 Chesnavich, W.J., Akin, V.E., Webb, D.A. : 1984, *Astrophys. J.* **287**, 676.
- 204 Lee, L.C. : 1980, *J. Chem. Phys.* **72**, 12.
- 205 Lee, L.C. : 1980, *J. Chem. Phys.* **72**, 8.
- 206 Suto, M., Day, R.L., Lee, L.C. : 1982, *J. Phys.* **B15**, 4165.
- 207 Letzelter, C., Vial, Y.P., Rostas, F., Eidelsberg, M. : 1987, submitted to *Astron. Astrophys.*
- 208 Nejad, L.A.M., Millar, T.J., Freeman, A. : 1984, *Astron. Astrophys.* **134**, 129.
- 209 Viala, Y.P., Roueff, E., Abgrall, H. : 1987, submitted to *Astron. Astrophys.*
- 210 Davis, J.P., Thorson, W.R. : 1978, *Can. J. Phys.* **56**, 996.
- 211 Smith, D., Adams, N.G., Alge, E. : 1982, *Astrophys. J.* **263**, 123.

ANNEXE F : Méthode de résolution de l'équilibre chimique

Soit un système de n équations de la forme :

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 = \sum_j \sum_k K_{ij}^{(i)} x_j x_k \quad (F1)$$

où $K_{jk}^{(i)}$ est le taux de la réaction entre les espèces j et k , d'abondances relatives à l'hydrogène x_j et x_k , qui crée ou détruit l'espèce i . La solution de ces équations avec la contrainte $x_i \geq 0$ peut s'obtenir numériquement par itérations successives jusqu'à convergence. Pour faciliter cette convergence, le système est partagé en sous-systèmes contenant chacun des espèces supposées très couplées chimiquement. A chaque pas et dans chaque sous-système, les équations (F1) sont linéarisées terme à terme en considérant que toute espèce extérieure au sous-système traité, a une abondance constante et égale à sa valeur au pas précédent. On est donc amené à choisir un jeu d'abondances initiales ; l'intérêt de la méthode est que les résultats sont totalement indépendants de ce choix.

Ainsi les équations (F1) se réécrivent :

$$f_i = \sum_{j,k} A_{jk}^{(i)} x_j x_k + \sum_j B_j^{(i)} x_j + C^{(i)} = 0 \quad (F2)$$

Les termes $C^{(i)}$ représentent les réactions impliquant des espèces extérieures au sous-système ; les termes en $B_j^{(i)}$ représentent les réactions impliquant une espèce du sous-système et une espèce extérieure ; enfin les termes en $A_{jk}^{(i)}$ représentent les réactions impliquant deux espèces du sous-système. Ces derniers termes sont linéarisés à leur tour en supposant l'une ou l'autre espèce d'abondance constante selon des critères difficiles à justifier (par exemple dans l'équation (F2), si $j = i$ alors $x_k = \text{constante}$, ou si $x_j > x_k$ alors $x_j = \text{constante}$, etc.).

Le sous-système ainsi linéarisé est résolu et la solution injectée dans le sous-système suivant. Ce procédé est réitéré jusqu'à convergence avec la précision souhaitée : de cinq à quinze itérations sur l'ensemble des sous-systèmes sont en moyenne nécessaires pour que toutes les espèces convergent à 1% près. Pour une grille d'une vingtaine de points, un système de 80 espèces couplées par environ 1200 réactions, la résolution de l'équilibre chimique prend 30 à 40 minutes de temps de calcul sur VAX 780.

Résumé

Décrire théoriquement l'activité chimique complexe du milieu interstellaire et calculer les abondances moléculaires qui en découlent, est un des aspects d'une étude globale d'un milieu qui présente des conditions physiques totalement étrangères aux possibilités terrestres.

Nous avons mis au point un code informatique automatique qui résout les équations cinétiques de la chimie couplées au calcul des taux de photodestruction des espèces moléculaires exposées au champ de rayonnement UV interstellaire. Dans le cas d'un nuage interstellaire l'hypothèse d'équilibre chimique a été adoptée, dans le cas d'une enveloppe circumstellaire en expansion un globule de matière est suivi au cours de son périple dans un formalisme Lagrangien.

L'utilisation de ce code numérique ainsi que des observations millimétriques effectuées sur POM-1 à l'Observatoire de Bordeaux et sur l'antenne de 30 mètres de l'IRAM à Pico Veleta en Espagne, ont permis :

- d'étudier la corrélation $^{13}\text{CO}/A_V$ dans deux nuages sombres (L1506 et L1529) du complexe du Taureau et de discuter les variations d'abondance des isotopes de CO à travers toute la région Taureau-Persée ;
- de modéliser le nuage moléculaire qui se trouve sur la ligne de visée de l'étoile HD 29647 dans Heiles Cloud 2, et qui est un nuage intermédiaire entre le milieu diffus et les nuages moléculaires denses ;
- d'étudier la chimie de l'azote dans les enveloppes circumstellaires oxygénées, sur la base de nouvelles détections de HCN dans des étoiles OH/IR géantes ou supergéantes.

Mots Clefs : - Milieu interstellaire
- Molécules interstellaires
- Radioastronomie millimétrique