Signatures moléculaires dans les vents de disque MHD des proto-étoiles de faible masse

Walter Yvart

▶ **To cite this version:**

Walter Yvart. Signatures moléculaires dans les vents de disque MHD des proto-étoiles de faible masse. Astrophysique stellaire et solaire [astro-ph.SR]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2013. Français. NNT : . tel-00880647

HAL Id: tel-00880647

https://theses.hal.science/tel-00880647

Submitted on 6 Nov 2013

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.

UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

LERMA
OBSERVATOIRE DE PARIS

THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE

spécialité

Astronomie et Astrophysique

présentée par

Walter Yvart

Pour obtenir le grade de
DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

SIGNATURES MOLÉCULAIRES DANS LES VENTS DE DISQUE MHD DES PROTO-ÉTOILES DE FAIBLE MASSE

Thèse soutenue le 4 octobre 2013 devant le jury composé de :

M.	FABRICE HERPIN	LAB	(Rapporteur)
M.	ALEJANDRO RAGA	UNAM	(Rapporteur)
M.	PATRICK BOISSE	IAP	(Président)
M.	SYLVAIN BONTEMPS	LAB	(Examinateur)
M.	FRÉDÉRIC GUETH	IRAM-Grenoble	(Examinateur)
M^{me}	SYLVIE CABRIT	LERMA	(Directrice)
M.	GUILLAUME PINEAU DES FORÊTS	IAS	(Directeur)

Année 2013
3072094

Ecole Doctorale ED127
Astronomie & Astrophysique

À mon Grand père, à mes parents.

Regarder les étoiles. Plus on fixe la lumière, plus on appréhende le vide qui l'entoure ; jusqu'à ce qu'on mette la main sur un outil plus puissant, grâce auquel on découvre que lorsque nous repoussons nos limites, d'autres, plus nombreuses encore, apparaissent. – Camille Denozière

Ce qu'on est n'a rien à voir avec ce qu'on doit être ni avec ce qu'on peut devenir. – Terry Pratchett

Crédit : J. Hester et al. (2007), WFPC2, HST, NASA : dust pillar in the Trifid Nebula, with jet pointing out to the left, the pink dots are newly formed low-mass stars.

Remerciements

Je n'aurais jamais pu réaliser cette thèse et le travail qu'elle représente sans le soutien d'un grand nombre de personnes dont la générosité et la patience furent des biens précieux dans les bons moments comme les moins bons, et dont l'intérêt manifesté à l'égard de ma recherche m'a permis de progresser. En premier lieu je souhaite remercier Camille Denozière, sa famille et toute ma famille. La difficulté tient bien-sûr dans le fait de n'oublier personne. C'est pourquoi, je remercie par avance ceux dont le nom n'apparaît pas dans cette page et qui m'ont aidé d'une manière ou d'une autre. Ils se reconnaîtront.

Je tiens à remercier mes directeur de thèse Sylvie Cabrit et Guillaume Pineau des Forêts pour la confiance qu'ils m'ont accordée, pour leurs multiples et très précieux conseils, et pour toutes ces heures consacrées à diriger ce travail de recherche.

Mes remerciements vont également aux rapporteurs Frabrice Herpin et Alejandro Raga qui ont accepté de juger mon travail et m'ont aidé à l'améliorer. Je remercie tout aussi chaleureusement les membres du jury pour avoir accepté de participer à mon jury et m'avoir aidé à converger vers la version finale de ce manuscrit : Patrick Boisse, Sylvain Bontemps et Frédéric Gueth.

Finalement mes remerciement vont à tous ceux qui m'ont supporté ou soutenu ces trois dernières années, à tout le LERMA, à sa précieuse équipe administrative, aux autres doctorants et à l'ensemble de mes amis.

Un grand merci à tous !

Titre

Signatures moléculaires dans les vents de disque MHD des proto-étoiles de faible masse

Résumé

Le phénomène de jet apparaît couplé à l'accrétion, son rôle et son impact dans le contexte de la formation stellaire et planétaire restent des questions majeures. Nous explorons la possibilité que les jets moléculaires soient issus de vents de disque magnétocentrifuges contenant des grains, et possibilité qu'ils puissent expliquer les composantes larges observées dans les raies H_2O avec Herschel/HIFI, ainsi que les observations à haute résolution au VLT. Notre modèle inclut : 1) Une solution MHD auto-similaire de vent de disque. 2) Une chimie ionisée hors équilibre le long des lignes d'écoulement. 3) Un chauffage dominé par la diffusion ambipolaire et une irradiation du gaz par les rayonnements X et UV de l'étoile. 4) Un auto-écrantage de H_2 et de CO calculé globalement. 5) Les niveaux ro-vibrationnels et le transfert radiatif associé de H_2, CO et H_2O calculés hors équilibre. 6) Le pompage infrarouge des niveaux de CO et H_2O par les poussières. 7) La projection de la probabilité d'échappement des photons non-isotrope sur la ligne de visée. Pour la première fois, un modèle dynamique de vent de disque permet de faire des prédictions synthétiques dans les raies moléculaires qui sont directement comparables aux observations de proto-étoiles. Nous proposons un outil puissant ouvert aux observations avec ALMA et le VTL.

Mots-clés

Vent de disque, molécules, formation stellaire, jets, grains, H_2O, transfert radiatif, Prédictions synthétiques

Title

MHD Disk wind molecular signatures from young low mass stellar objects

Abstract

The origin of protostellar jets, and their role in extracting angular momentum from the accreting system, remain major open questions in star formation research. We explore the possibility that molecular jets may trace dusty magneto-hydrodynamic (MHD) centrifugal disk winds, the possibility they explain the broad component observed with Herschel in H_2O lines and the high angular resolution observations of molecular jets. Our model includes : 1) A self-similar MHD-solution that fits the atomic observations of DG Tau. 2) A non-equilibrium thermo-chemical and ionization gas evolution along streamlines with a network of 134 species. 3) Heating by ambipolar diffusion, irradiation by coronal X-rays and far UV photons from the accretion shock. 4) Non-local self-shielding of H_2 and CO. 5) Non equilibrium integration of 40 rovibrational levels of H_2, 40 rotational levels of CO, and 80 rotational levels of H_2O under the escape probability formalism. 6) water and CO IR-pumping by the dust radiation field and dust thermal profile both calculated using DUSTY. 7) Projection of the anisotropic escape probability along observer's direction. In this unprecedented work, for the first time a dynamical disk wind model is able to make synthetic predictions in molecular lines of Class 0 to class 2 jet for comparison with observations. We build a powerful tool that could be used with ALMA and VLT observations.

Keywords

Disk winds, molecules, star formation, jets, dusts, H_2O, radiative transfert, synthetic predictions

Sommaire

1 De la formation stellaire aux modèles de vent de disques 3

2 Modele Magnétohydrodynamique de vent de disque 15

3 Processus radiatifs, chimie, photodissociation, grains et conditions initiales 35

4 Aspects microphysiques dans le modèle de vent de disque MHD, chauffage et refroidissement 83

5 Traitement détaillé des niveaux rotationnels moléculaires de CO et H_2O 103

6 Prédictions synthétiques de H_2 et comparaisons aux observations 153

7 Prédictions synthétiques de H_2O et comparaisons aux observations 177

8 Prédictions synthétiques de CO et comparaisons aux observations 219

9 Conclusions et perspectives 243

A Chimie 251

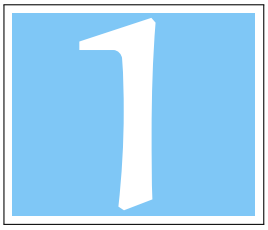
B Transitions de H_2O et CO et densités critiques 271

C Utilisation des codes de calcul 281

Table des Matières 307

Introduction

Chapitre



De la formation stellaire aux modèles de vent de disques

Sommaire

I Les étapes de la formation stellaire et le phénomène d'éjection 4
I.1 Phase préstellaire 4
I.2 Phase protostellaire 4
I.2-1 Proto-étoile de Classe 0 6
I.2-2 Proto-étoile de classe I 7
I.3 Phase pré-séquence principale 8
I.3-1 Proto-étoile de classe II 8
I.3-2 Proto-étoile de classe III 9
II Problèmes ouverts 9
II.1 Formation du disque d'accrétion 9
II.2 Origine des jets 10
II.3 Transport du moment cinétique dans les disques d'accrétion 12
II.4 Survie des molécules dans les jets 13
III Objectifs de cette thèse 13

I Les étapes de la formation stellaire et le phénomène d'éjection

Les étoiles de type solaire se forment dans les nuages moléculaires qui ont une taille et une densité suffisante pour permettre la formation de H_2 et CO. Ils sont aussi composés d'autres molécules et de poussières, mais l'hydrogène moléculaire et l'hélium représentent la grande majorité de la masse. Les nuages moléculaires sont une composante significative du disque galactique. Ils représentent environ la moitié de la masse de gaz disponible. Ces nuages moléculaires sont opaques au rayonnement visible et sont observés en émission depuis l'infrarouge lointain jusqu'au millimétrique (émission thermique des poussières ou excitation des niveaux rotationnels de molécules comme CO). Le processus de formation des étoiles de type solaire et de faible masse peut se décomposer en trois grandes phases (voir Figure 1.1).

I.1 Phase préstellaire

L'effondrement gravitationnel des nuages moléculaires est freiné par le champ magnétique, la rotation (force centrifuge) et la turbulence (Larson 1981). La formation de cœurs denses de masse quasi-stellaire (Bergin & Tafalla 2007) ($n_{\rm H} \geq 10^5\,{\rm cm}^{-3}$, $D \lesssim 0.05\,{\rm pc}$) initie la *phase préstellaire*. Dans ces objets la gravitation est compensée par les forces de pressions thermique et magnétique, la turbulence est beaucoup plus faible. La distribution de masse des cœurs denses ressemble à l'IMF [1] (Motte & André 2001). Les cœurs sont en contraction quasi-statique lente sous l'effet de la diffusion du champ magnétique (Shu et al. 1987; Nakano 1998) Le cœur dense s'effondre ensuite de manière quasi isotherme, soit par perte du support magnétique, soit par l'effet d'une perturbation externe (Hennebelle et al. 2003).

Au cours de l'effondrement, quand la densité atteint $\sim 10^{10}\,{\rm cm}^{-3}$ le centre devient opaque au rayonnement infrarouge et la température augmente. Quand la densité au centre atteint $\sim 10^{12}\,{\rm cm}^{-3}$, un premier cœur protostellaire en équilibre hydrostatique se forme ($R \simeq 5\,{\rm UA}$, $T \simeq 1000\,{\rm K}$ et $M \simeq 10^{-2}\,{\rm M}_\odot$) (Larson 1969). Ce premier cœur continue d'accréter et quand sa température atteint 2000 K, H_2 est dissociée par un processus très endothermique, ce qui provoque l'effondrement rapide ($<$ 1an) vers un deuxième cœur hydrostatique de taille $R \simeq 3{\rm R}_\odot$. Le moment marquant le début de la *phase protostellaire* placé à $t = 0$ (voir Figure 1.1) est associé à la formation de cet embryon d'étoile (Maury 2009).

I.2 Phase protostellaire

La phase protostellaire est la phase *d'accrétion principale* pendant laquelle l'étoile assemble la plupart de sa masse. À l'intérieur de la phase protostellaire on distingue deux étapes ou classes d'objets représentées sur la Figure 1.1. C'est une séquence plutôt empirique et la classification des objets s'effectue sur différents critères observationnels accessibles (distribution spectrale d'énergie SED, température bolométrique, pente spectrale infrarouge [2], rapport $L_{\rm sub}\,/\,L_{\rm bol}$ entre luminosité submillimétrique et luminosité bolométrique) (André & Montmerle 1994; André et al. 2000b; Evans et al. 2009).

1. La fonction de masse initiale des étoiles, ou Initial Mass Function (IMF)
2. L'indice spectral infrarouge est mesuré entre 2 μm et 25 à 60 μm (Myers & Ladd 1993) : $\alpha_{IR} = {\rm d}\log(\lambda S_\lambda)\,/\,{\rm d}\lambda$, où S_λ est le flux reçu à la longueur d'onde λ.

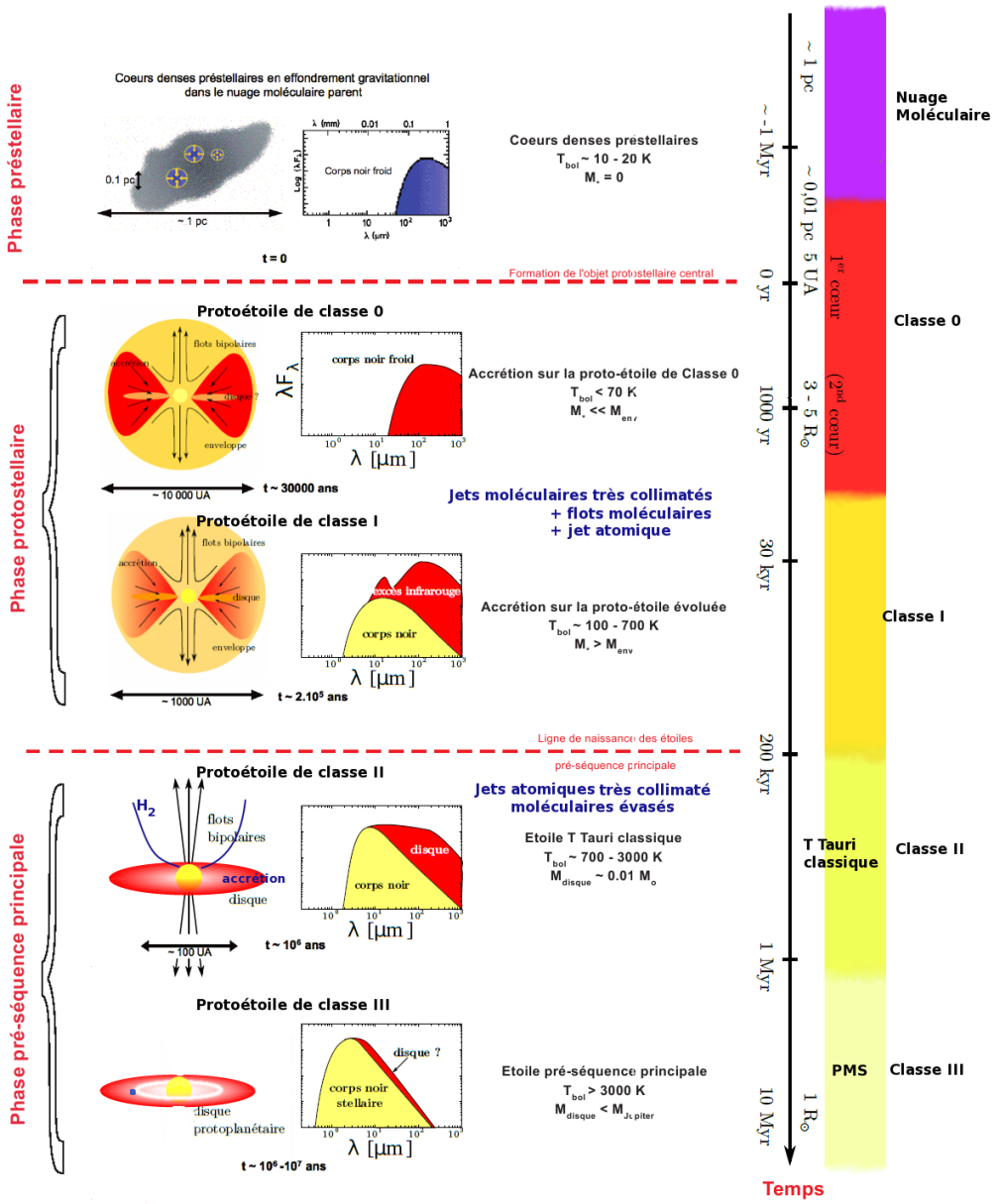


FIGURE 1.1 – *Séquence de la formation des étoiles de faible masse. Sources : Maury (2009); Joos (2012), adapté de André et al. (2000a); André (2001).*

I.2-1 Proto-étoile de Classe 0

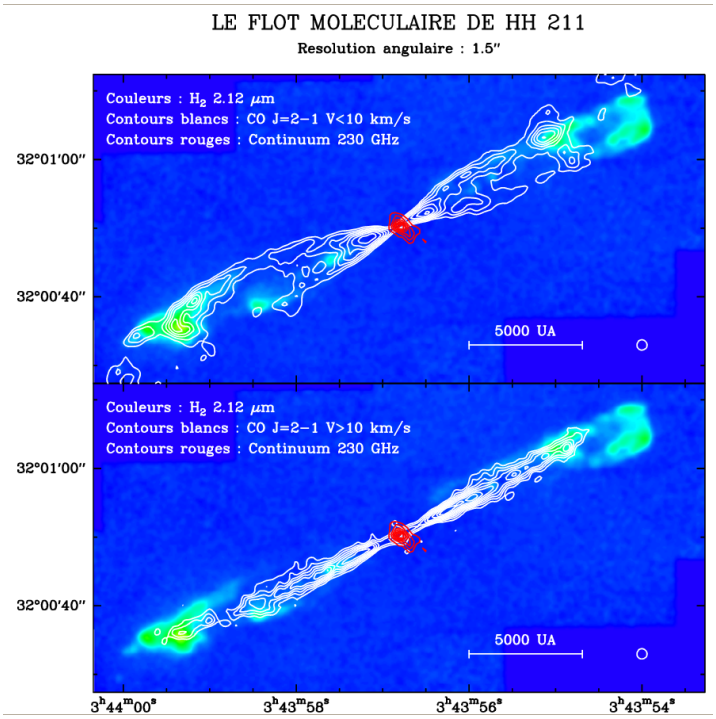


FIGURE 1.2 – *Jet et flot moléculaire bipolaire de la source de classe 0 HH211 située dans Persée à* $\sim$ 300 pc. *Contours :* CO*(2-1) (Gueth & Guilloteau 1999), image couleur : raie de* H_2 *à 2.12* μm *(McCaughrean et al. 1994) montrant les chocs d'étrave. Le flot en* CO *à basse vitesse (*$v < 10\,km\,s^{-1}$*) trace le milieu ambiant entraîné par le jet, qui est à plus haute vitesse* $v > 10\,km\,s^{-1}$.

La SED de ces objets est dominée par une émission dans le domaine radio et submillimétrique correspondant à un corps gris à T_{bol} entre 10 et 30 K. Cette émission est issue du rayonnement des poussières froides contenues dans l'enveloppe encore en effondrement autour de l'astre central. L'enveloppe est massive (avec $M_\star < M_{env}$) et optiquement épaisse. Elle est trop dense pour laisser passer le rayonnement infrarouge proche et moyen.

C'est durant cette phase 0 que l'objet stellaire accrète la moitié de sa masse. Ces objets sont caractérisés par le fait que $L_{sub}/L_{bol} \gg 0.5\%$. (André & Montmerle 1994). On peut relier observationnellement le rapport L_{sub}/L_{bol} (luminosité millimétrique / bolométrique) au rapport $M_{env}/M_\star$ via des suppositions sur une relation masse-luminosité pour les proto-étoiles. On en déduit que $M_\star < M_{env}$ dans cette phase.

Ces objets sont âgés de quelques 10^4 ans. Les proto-étoiles de classe 0 accrètent la matière efficacement avec un taux d'accrétion de l'ordre de $10^{-5}\,M_\odot$ par an (Bontemps et al. 1996).

Jets dans les classes 0

Les sources de classe 0 possèdent toutes des jets détectés en radio et submillimétrique, où la matière est éjectée à haute vitesse $v > 50\,km\,s^{-1}$. Comme ces sources sont profondément enfouies dans une enveloppe de gaz et de poussière ($A_V > 1000$) aucun jet n'est détecté dans le visible. Des jets moléculaires étroits s'étendant jusqu'à

$\sim 0.05 - 0.1$ pc de la source ont été résolus en CO et en SiO (Cabrit et al. 2007). Certaines sources présentent aussi des masers H_2O (Furuya et al. 2002). Le jet en CO à $v > 10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ associé à HH211 est montré sur la Figure 1.2. Ces jets présentent des nœuds alignés, espacés typiquement de ~ 1000 UA (Gueth & Guilloteau 1999; Chandler & Richer 2001), vus aussi en infrarouge en H_2 (voir exemple de HH212 en Fig. 1.4). Une composante atomique est aussi détectée en [Fe II] et [Si II] (Dionatos et al. 2009).

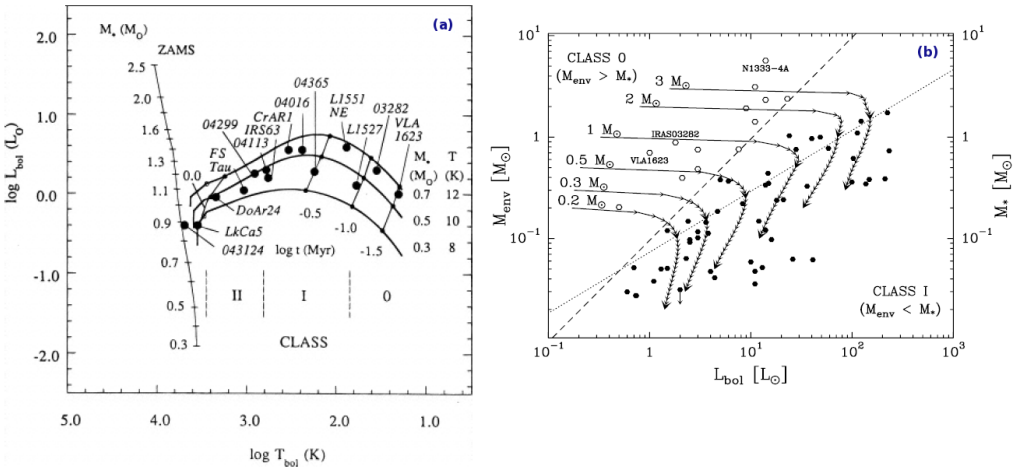


FIGURE 1.3 – ***(a)*** *: Diagramme $L_{\rm bol}$-$T_{\rm bol}$ André et al. (2000b) pour 14 proto-étoiles de classe 0 à II. Les courbes indiquent les modèles d'évolution de Myers & Gammie (1999) en fonction de la masse de l'étoile finale et les lignes quasi-verticales indiquent différents temps en log t en millions d'année depuis le début de l'effondrement.* ***(b)*** *: Diagramme $M_{\rm env}$-$L_{\rm bol}$ (André et al. 2000b) pour des proto-étoiles de classe I (cercles pleins) et pour des proto-étoiles de classe 0 (cercles vides), l'évolution de $L_{\rm bol}$ est tracée en supposant $L_{\rm bol} = GM_\star \dot{M}_{\rm acc}/R_\star + L_\star$ pour différentes valeurs de masse finale de l'étoile. La ligne en traits tiretés suit $M_\star \propto L_{\rm bol}$ et la ligne en pointillés suit $M_\star \propto L_{\rm bol}^{0.6}$.*

I.2-2 Proto-étoile de classe I

Ces objets sont plus évolués. Leur spectre est composé d'un large excès (avec $T_{\rm bol}$ entre 70 et 650 K) dans l'infrarouge lointain ($\alpha_{IR} > 0$) provenant de l'enveloppe résiduelle et du disque d'accrétion, ainsi que d'une émission à $\lambda < 2$ mm issue de l'étoile centrale mais très absorbée par l'enveloppe. Les proto-étoiles de classe I ont accrété la plus grande partie de leur enveloppe de sorte que $M_\star > M_{\rm env}$ et ont un taux d'accrétion typique de l'ordre de $10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$ (Hartigan et al. 1995; Antoniucci et al. 2008). Ils ont un âge de quelques 10^5 ans (établi à partir de statistiques comparant leur nombre à celui des étoiles T Tauri).

L'évolution de la classe 0 vers la classe I est illustrée sur la Figure 1.3 qui montre les diagrammes température bolométrique - luminosité bolométrique et luminosité bolométrique - masse de l'enveloppe établis par André et al. (2000b) pour quelques sources de classe 0 et I.

Jets dans les classes I

Les jets issus de sources de classe I sont moins intenses que dans les classes 0. Les jets moléculaires ne sont plus détectés en CO ou SiO mais deviennent visibles dans la raie H_2 à 2.12 μm à des vitesses intermédiaires entre $\sim 20\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ et $50\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ (Davis

et al. 2001). Les jets étendus deviennent visibles dans les raies optiques comme [O I] (6300 Å), [S II] (6731 Å) ou [Fe II] (1.64 μm) et tracent des chocs à 20-150 km s^{-1} dans les jets de 100 à 400 km s^{-1}.

I.3 Phase pré-séquence principale

Dans la phase *pré-séquence principale* la jeune étoile s'est débarrassée de son enveloppe et a atteint sa masse finale. Elle apparaît visible en optique et descend vers la séquence principale le long de son trajet d'Hayashi [3].

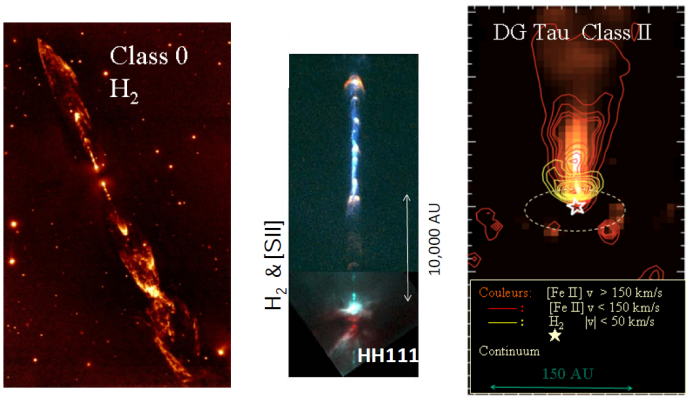


Figure 1.4 – *De gauche à droite : Jet de classe 0 de HH212 en* H_2 *à 2.12 µm (Zinnecker 2002), jet d'un objet de classe I HH111 observé en* H_2 *à 2.12 µm en bas (turquoise) et en [S II] et Hα (Reipurth et al. 1997) et jet atomique d'un objet de classe II de DG Tau dans les raies de fer [Fe II] (en rouge et en couleur) entouré d'une contrepartie moléculaire en* H_2 *(en jaune) (Agra-Amboage et al. 2011, 2013).*

I.3-1 Proto-étoile de classe II

Aussi appelées étoiles T-Tauri (TTS), les proto-étoiles de classe II sont âgées d'environ 10^6 ans. Leur spectre est détectable dans le visible et ressemble à celui d'une étoile de température effective 3000 - 5000 K. Il possède aussi un excès dans l'infrarouge avec une pente $-2 < \alpha_{IR} < 0$, modélisé par l'émission d'un disque d'accrétion visqueux optiquement épais et géométriquement mince. Le taux d'accrétion des objets de classe II est plus faible que dans la classe I, de l'ordre de 10^{-7} à 10^{-8} M$_\odot$ yr^{-1}. L'accrétion sur les objets de classe II produit aussi un excès de rayonnement UV dû au choc d'accrétion sur l'étoile.

Jets dans les classes II

Les objets de classe II possèdent des "micro-jets" à grande vitesse et très collimatés observés dans les raies atomiques de [O I], [S II] et [Fe II] jusqu'à $\sim$ 1000 UA (Dougados et al. 2000). Les signatures moléculaires ne sont plus systématiquement détectées. Certaines T Tauri extrêmes présentent cependant des jets moléculaires entourant le jet atomique plus rapide, comme dans le cas représentatif de DG Tau (Agra-Amboage et al. 2011, 2013) (voir Figure 1.4). Au fur et à mesure que la proto-étoile évolue de la classe

3. Ligne parcourue par les proto-étoiles sur le diagramme de Hertzsprung-Russell.

0 vers la classe II, la contrepartie moléculaire devient de plus en plus évasée et est de moins en moins intense.

I.3-2 Proto-étoile de classe III

Les étoiles T-Tauri de faible émission (WTTS), d'âges 10^6 à 10^7 ans, sont de jeunes étoiles présentant le spectre d'une étoile normale, avec un excès dans l'infrarouge très faible ou nul ($\alpha_{IR} < -2$) et pas de signe d'accrétion. Soit le disque circumstellaire a disparu, soit il est composé d'objets de taille planétaire qui ne diffusent plus le rayonnement de l'étoile. Le disque d'accrétion devient optiquement mince. Ces sources ne présentent pas de jet, ce qui implique que l'éjection repose sur le phénomène d'accrétion.

II Problèmes ouverts

II.1 Formation du disque d'accrétion

En l'absence de champ magnétique, la conservation du moment cinétique non nul du cœur pré-stellaire conduit à la formation rapide d'un disque centrifuge (Terebey et al. 1984). Mais il est peu réaliste que le champ magnétique soit nul.

Le problème de la formation des disques a aussi été abordé par de nombreuses simulations numériques MHD ces dernières années. Les résultats sont très différents avec un champ magnétique non nul et conduisent à la "catastrophe du freinage magnétique" (Dapp & Basu 2010) : le champ magnétique est tellement efficace pour freiner la matière que cela inhibe la formation de disques, sauf dans des conditions particulières (Joos et al. 2012). La dissipation ohmique ou turbulente aux petites échelles est peut-être sous estimée par ces simulations (Tomida et al. 2013).

Le moment de la formation du disque d'accrétion, et sa taille initiale, ne sont donc pas encore résolus, et cela n'est pas clair non plus d'un point de vue observationnel. Car dans le cas des sources enfouies il est difficile de séparer la contribution du disque de celle de l'enveloppe dans les observations (continuum et raies). De plus il est possible d'expliquer les observations actuelles de composantes continuum non résolues (Survey de Jørgensen et al. (2009) et de Enoch et al. (2011)) sans faire intervenir de disque centrifuge (Tassis & Mouschovias 2005). La mise en évidence observationnelle de disque képlérien nécessite de sonder le champ de vitesse de ces structures aux petites échelles, ce qui n'a pu être fait que dans très peu d'objets. Les observations cinématiques en NH_3 de Choi et al. (2010) pour la source de classe 0 NGC 1333 IRAS 4A sont compatibles avec la présence d'un disque képlérien ou sub-képlérien (avec un taux d'accrétion estimé de $\dot{M}_{\rm acc} = 2 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ autour d'une étoile de $M_\star = 0.08 \pm 0.02\,{\rm M}_\odot$). Plus récemment Tobin et al. (2013) a détecté la présence d'un disque képlérien autour de la proto-étoile de classe 0 L1527 (avec une masse stellaire estimée de $M_\star \simeq 0.2\,{\rm M}_\odot$). Mais de telles signatures n'ont pas pu être identifiées dans les autres classes 0 à ce jour.

Dans le cas des sources de classes I, les preuves observationnelles de la présence de disque sont aussi difficiles à obtenir. L'enveloppe contribue toujours fortement et une meilleure compréhension de la structure générale est nécessaire pour séparer la seule contribution du disque. Les observations en raies moléculaires de classes I (Brinch et al.

2007; Lommen et al. 2008) montrent des profils en vitesse cohérents avec la présence de disques képlériens de taille ~ 500 UA, mais d'autres lois de vitesses sont possibles. Les observations de HH 111, (Lee 2011) montrent la présence d'un disque en rotation képlérienne au tour d'une étoile de 0.14 $M_\odot$ avec un rayon de ~ 400 UA. La présence d'un disque képlérien circumbinaire est aussi suggérée pour la source de classe I L1551-NE (Takakuwa et al. 2012) avec un rayon de ~ 300 UA, mais à nouveau les preuves manquent pour la plupart des sources.

II.2 Origine des jets

L'origine précise des jets est un sujet encore débattu. En effet ils trouvent leur origine dans des régions très proches des proto-étoiles (< 10 UA) qui nécessitent une bonne résolution angulaire encore inatteignable.

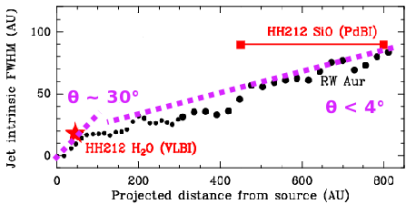


FIGURE 1.5 – *Mi-largeur du jet en fonction de la distance à l'étoile le long de l'axe du jet pour un jet de classe II en noir et un jet de classe 0 en rouge (Cabrit 2007a, et références incluses).*

Une corrélation forte est établie entre accrétion et éjection pour les objets de classe II, suggérant que le processus d'éjection est alimenté par l'énergie gravitationnelle libérée par l'accrétion (Cabrit et al. 1990; Hartigan et al. 1995). Pour toutes les proto-étoiles en accrétion, de classe 0, I et II, les observations semblent montrer que ce mécanisme est universel et très efficace et qu'environ 10% de la masse accrétée se retrouve dans le jet (Cabrit 2007b).

Les observations montrent que les propriétés de collimation des jets sont également universelles et indépendantes de l'âge de la proto-étoile ou de la présence d'une enveloppe. L'ouverture à mi-largeur du jet passe de 30° à seulement quelques degrés à une distance typique de 50 UA de la source (Ray et al. 2007) telle qu'illustrée par la Figure 1.5. La collimation du jet intervient donc dans l'atmosphère du disque. Ces observations montrent aussi qu'une collimation hydrodynamique est insuffisante, car des objets de classe 0 comme HH212 montrent les mêmes propriétés de collimation que les classes II comme DG Tau (Cabrit 2007a). L'enveloppe ne peut donc donc pas être le facteur principal de la collimation des jets qui sont intrinsèquement collimatés. Les modèles magnétohydrodynamiques (MHD) sont actuellement les seuls capables d'expliquer la collimation observée (Cabrit 2007a).

Parmi les modèles MHD de formation des jets on peut distinguer trois composantes possibles (Ferreira et al. 2006) : (1) les vents de disque, (2) les vents stellaires et (3) les éjections magnétosphériques. Ces trois composantes peuvent coexister.

• **Vent de disque** (Blandford & Payne 1982; Ferreira 1997a,b) Dans ce modèle, la présence d'un champ magnétique à grande échelle traverse le disque d'accrétion et l'accrétion de la matière alimente le vent de disque. L'éjection est magnétocentrifuge (le modèle de vent de disque est détaillé au Chapitre 2). Le flux magnétique total limite l'extension radiale de la zone de lancement de la matière à partir du disque. Dans le cas d'un vent de disque étendu (> 0.1 UA) le champ magnétique peut être issu du champ magnétique initial entraîné par l'effondrement et amplifié par effet dynamo à partir du disque d'accrétion. L'éjection peut se produire tant que le couplage entre les neutres et les ions entraînés par le champ magnétique reste suffisant.

Dans le cas où le champ magnétique est supposé provenir seulement de la magnétosphère de l'étoile, la zone d'éjection est très peu étendue (< 0.1 UA), on parle de modèle X-wind (Shu et al. 1995). Il n'est pas évident qu'un vent de disque étendu puisse coexister avec un vent de type X-wind. Dans ces deux cas, le vent de disque emporte avec lui la quantité de moment cinétique nécessaire pour que la matière dans le disque puisse être accrétée sur l'étoile. Il est important de souligner que les vents de disque MHD sont intrinsèquement collimatés. Enfin, le vent de disque peut facilement emporter une grande partie de l'énergie d'accrétion (voir Chapitre 2).

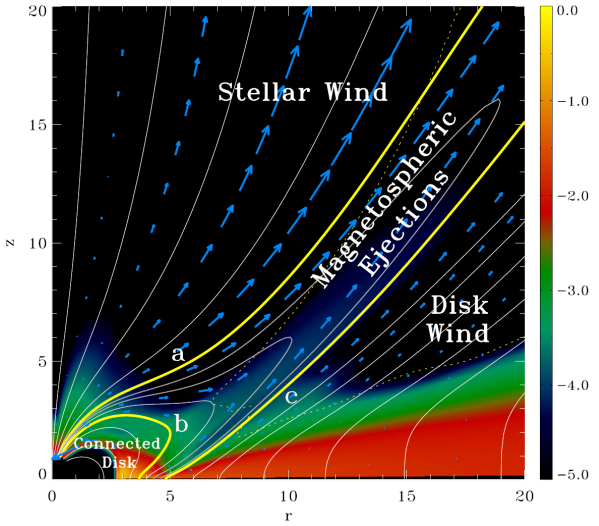


FIGURE 1.6 – *Vue globale de la structure magnétisée d'accrétion éjection (SMAE) autour d'une étoile jeune (Zanni & Ferreira 2013). La carte logarithmique de la densité est représentée en couleurs. La ligne en pointillés situe la surface d'Alfvén (où* $v_p = B_p/\sqrt{4\pi\rho}$*). Les vecteurs en bleu représentent la vitesse poloïdale. Les lignes de champ magnétique sont tracées en blanc. Les courbes en jaune tracent les limites entre les trois différentes composantes du jet : le vent stellaire stationnaire, l'éjection magnétosphérique non stationnaire, et le vent de disque stationnaire.*

• **Vent stellaire** (Sauty et al. 2002; Sauty 2007; Ferreira 1997b) Dans ce modèle la matière éjectée provient de la surface de l'étoile. Le champ magnétique de l'étoile pénètre le bord interne du disque et canalise la matière, ce qui forme des colonnes d'accrétion.
La matière tombe sur l'étoile formant des chocs d'accrétion. Une partie de la matière peut être ré-éjectée en suivant les lignes de champ magnétique ouvertes aux pôles. Les ondes de choc engendrées par l'accrétion de la matière et la turbulence pourraient expliquer le lancement de la matière dans des vents MHD depuis la surface de l'étoile (Matt & Pudritz 2005). Un jet ainsi formé peut permettre de freiner l'étoile, si la masse éjectée représente ∼ 10% de la masse accrétée.
Mais cela semble difficle à atteindre, à moins de supposer un processus extrêmement efficace de conversion de l'énergie des ondes de choc à la surface de l'étoile (Ferreira 1997b).

• **Éjection magnétosphérique** Zanni & Ferreira (2013) (voir Figure 1.6) Contrairement aux modèles précédents de vent de disque et de vent stellaire, qui sont stationnaires, les éjections magnétosphériques sont engendrées par les phénomènes de reconnexions magnétiques dans la magnétosphère de l'étoile (similaires aux processus d'éjection de masse coronale solaire) et sont donc intrinsèquement non stationnaires. Contrairement aux modèles de vent précédents qui sont auto-collimatés, ces éjections ne sont pas collimatées et forment un angle à 45° par rapport à l'axe du jet. Néanmoins elles peuvent être confinées par le vent de disque, cette collimation créée à l'interface du vent de disque des chocs. Ces éjections ont une nature intermittente qui pourrait expliquer les nœuds observés dans certains jets. Il existe plusieurs topologies d'éjections magnétosphériques, conditionnées par les configurations des champs magnétiques et leur inclinaison avec l'axe de rotation (Ferreira et al. 2000). Ce type d'éjection permet de

freiner l'étoile et de l'empêcher d'accélérer en emportant une part du moment cinétique de la matière avant qu'elle ne tombe sur l'étoile.

II.3 Transport du moment cinétique dans les disques d'accrétion

Dans les disques d'accrétions protoplanétaires deux processus sont invoqués pour extraire le moment cinétique de la matière afin qu'elle s'accrète sur l'étoile. Dans le disque en rotation différentielle autour de l'étoile (képlérienne), la matière tourne plus rapidement que les couches situées à des rayons immédiatement plus grands. La viscosité du gaz transfère une partie du moment cinétique vers l'extérieur, ce qui permet au gaz d'accréter sur l'étoile (Shakura & Sunyaev 1973). Mais les taux d'accrétion observés $\gtrsim 10^{-8}\,M_\odot\ yr^{-1}$ demandent une viscosité beaucoup plus grande que celle produite par les collisions entres atomes. La présence de turbulence MHD engendrée par l'instabilité magnéto-rotationnelle (MRI) (Balbus & Hawley 1991a) pourrait fournir la viscosité nécessaire pour rendre compte des taux d'accrétion observés.

Le processus concurrent n'est autre que le vent de disque où la matière éjectée emporte une grande partie du moment cinétique de la matière du disque. Le rapport entre masse éjectée / masse accrétée est de 10% (Cabrit 2007b). Il suffit donc que la matière éjectée emporte 10 fois son moment cinétique spécifique ('bras de levier magnétique' $\lambda = 10$) pour que ce processus devienne efficace pour freiner le disque et permettre l'accrétion.

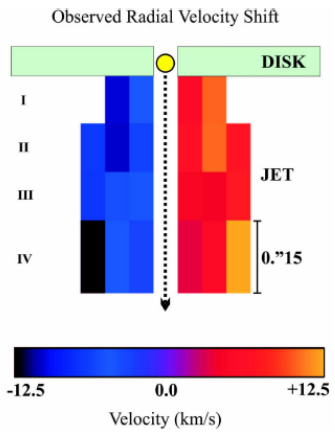


Figure 1.7 – *Signature possible de rotation observée dans le jet atomique de DG Tau : différence de vitesse radiale entre les deux côtés (Bacciotti et al. 2002).*

La MRI requiert que le champ magnétique vertical soit faible alors que les modèles de vent de disque requièrent au contraire qu'un champ magnétique proche de l'équipartition traverse le disque. Mais des simulations numériques MHD récentes de disque d'accrétion incluant une composante de champ magnétique verticale montrent que les instabilités magnétiques dans le disque peuvent se connecter à un vent de disque et lier les deux processus (Bai & Stone 2013a). De plus on s'attend à ce qu'il existe une zone morte dans le disque ("dead zone") où le taux d'ionisation est trop faible pour que la MRI intervienne. Dans cette zone, le vent de disque MHD permettrait d'induire l'accrétion rapide des couches de la surface du disque en extrayant efficacement leur moment cinétique (Bai & Stone 2013b).

Les vents de disque permettraient alors de compenser les limitations de la MRI pour expliquer les taux d'accrétion observés. Mais il faudrait alors prendre en compte les effets du champ magnétique sur la formation et la migration planétaire.

Signatures de rotation

Les observations des raies atomiques suggèrent que les jets sont en rotation (Bacciotti et al. 2002; Pesenti et al. 2004) (Figure 1.7 pour DG Tau), ce qui confirmerait leur rôle

dans l'extraction du moment cinétique du disque. Ces observations suggèrent un rayon de lancement pour les jets atomiques entre 0.3 et 3 UA (Ray et al. 2007; Ferreira et al. 2006).

Des signatures de rotation ont aussi été mises en évidence dans les jets moléculaires de classes 0 (Lee et al. 2007, 2008) cohérentes avec un vent de disque MHD lancé entre 0.15 et 0.6 UA, les signatures de rotation observées dans les jets de classe I (Launhardt et al. 2009) suggèrent des rayons d'éjection plus grands 3-10 UA (Panoglou et al. 2012).

II.4 Survie des molécules dans les jets

La présence des molécules dans les jets de classe 0, I et II (Bachiller & Cernicharo 1990; Gueth & Guilloteau 1999; Claussen et al. 1998; Cernicharo & Reipurth 1996; Davis et al. 2001; Takami et al. 2004; Beck et al. 2008) pose la question de leur survie dans un environnement hostile dû au champ de rayonnement X et UV de la proto-étoile et les longs temps de reformation lorsque les grains ont une faible densité.

Trois processus sont en général invoqués pour expliquer la présence de molécules dans ces jets :

- **Par entraînement du milieu ambiant :** bien qu'intuitive, cette hypothèse peine à expliquer les densités de colonnes observées (Taylor & Raga 1995). L'entraînement de la matière choquée pourrait être plus satisfaisant mais cette hypothèse requiert que le gaz choqué puisse se mélanger rapidement avec le jet supersonique et qu'il soit continuellement réalimenté (Raga & Cabrit 1993).
- **Formation de H_2 :** et des autres molécules à la base du jet par chimie ions-neutres en phase gazeuse. Mais dans un tel vent dépourvu de poussière, pour que la formation de H_2 et son auto-écrantage soient efficaces, il faut des flux de masse beaucoup plus importants que ceux observés (Glassgold et al. 1997; Rawlings et al. 1993; Antoniucci et al. 2008).
- **L'éjection/reformation des molécules dans un vent de disque poussiéreux (travail pionnier de Safier 1993) :** cette hypothèse a été explorée en détail par Panoglou et al. (2012) basée sur un modèle de vent de disque MHD de Casse & Ferreira (2000a). Les résultats de Panoglou et al. (2012) ont montré que les molécules parvenaient à survivre dans le vent de disque au delà d'un certain rayon de lancement, même à proximité de l'étoile. La chimie du vent de disque poussiéreux est de nature complexe, hors équilibre, combinant les propriétés d'un choc de type C chauffé par la diffusion ambipolaire, et les processus alimentés par le rayonnement de l'étoile et du choc d'accrétion présents habituellement dans les PDRs et les XDRs.

III Objectifs de cette thèse

Le principal objectif de cette thèse consiste à tester l'hypothèse de vents de disques MHD afin d'éclairer les question décrites précédemment.

Origine(s) de l'éjection et survie des molécules : Entre vent de disque, vent stellaire et magnétosphérique, le processus dominant n'est pas clairement établi. Le travail de cette thèse a pour but d'apporter des contraintes sur la contribution des vents de disque aux jets protostellaires. Comme les vents stellaires et magnétosphériques proviennent

de régions plus proches de l'étoile, on ne s'attend pas forcément à ce que les molécules y survivent. Les signatures moléculaires constituent donc un test crucial.

Formation des disques et transport du moment cinétique : Si l'hypothèse du vent de disque se confirme, alors les observations des jets apporteraient des preuves de l'existence de disques képlériens dans les sources de classe 0 et I. L'observation des abondances chimiques dans le jet et la détermination du rayon de lancement maximal pourraient alors apporter des contraintes précieuses sur les propriétés et la formation de ces disques, très difficilement observables directement. D'autre part des informations cruciales pourront aussi être obtenues sur le transport du moment cinétique et les conditions initiales de la formation planétaire.

Les molécules sont un traceur important des régions proches de l'étoile et du disque où se forment les jets, et à ce jour il n'existe aucune prédiction dans les raies moléculaires. L'approche et le le travail réalisés dans cette thèse sont inédits.

Approche : L'approche de cette thèse va consister à établir des tests plus discriminants pour les modèles de vents de disque MHD basés sur la production de cartes et de profils de raies moléculaires synthétiques qui soient directement comparables aux récentes observations H_2 avec VLT/SINFONI, H_2O et CO avec le PdBI et Herschel qui a révélé une composante large dans les ailes des raies moléculaires dont l'origine n'a pas encore trouvé d'explication satisfaisante. Les prédictions du modèle pourront aussi, dans un avenir proche, être comparées avec les observations ALMA.

Le travail de cette thèse utilise le même modèle chimique hors équilibre et se base sur le même modèle de vent de disque que ceux utilisés par Panoglou et al. (2012). Nous y apportons de nouvelles améliorations : le calcul de la température des poussières en tenant compte de leur opacité à leur propre rayonnement, l'auto-écrantage de H_2 et de CO plus cohérent avec la structure du vent de disque, la réalisation de prédictions en H_2 pour les comparer aux observations VLT/SINFONI et le traitement des niveaux de H_2O et de CO afin de les comparer aux observations Herschel.

Le Chapitre 2 détaille la solution dynamique MHD de vent de disque développée par Casse & Ferreira (2000a) et qui sert de base à nos calculs. Le Chapitre 3 présente le modèle thermique et chimique qui suit l'évolution du gaz le long des lignes d'écoulement dans le vent de disque. Dans ce chapitre nous présentons notre nouvelle méthode de calcul de la température des poussières et la nouvelle méthode globale du calcul de l'auto-écrantage de H_2 et de CO. Le Chapitre 4 liste les termes de chauffage et de refroidissement que nous utilisons dans notre modèle, dont les nouveaux termes de couplage thermique par H_2O et CO. Le Chapitre 5 aborde le traitement des niveaux rotationnels et émissivités de CO et H_2O sous le formalisme de la probabilité d'échappement introduits dans ce travail de thèse. Le Chapitre 6 présente notre méthode de calcul des prédictions synthétiques à partir des résultats du modèle de vent de disque et présente les résultats obtenus pour H_2, les Chapitres 7 et 8 présentent respectivement nos résultats pour H_2O et CO.

Chapitre

2

Modele Magnétohydrodynamique de vent de disque

Sommaire

I Le modèle de vent de disque MHD 16
I.1 Solution dynamique 16
I.2 Les équations MHD 17
I.3 Paramètres libres et dimensionnalisation 19
I.3-1 Paramètres libres 19
I.3-2 Facteurs de dimensionnalisation 23
II Aspects multifluides 26
II.1 Grandeurs MHD pour le fluide 27
II.2 Echange de quantité de mouvement entre les fluides 27
II.2-1 Conservation de la quantité de mouvement 27
II.2-2 Fréquence et section efficace de collisions ions-neutres et ions-électrons 28
II.3 Vitesses de dérive 30
II.4 Loi d'Ohm généralisée 32

Résumé : ***Le vent de disque, tel qu'il est décrit dans le modèle, constitue une structure magnétique d'accrétion-éjection (SMAE) lancée à partir d'un disque d'accrétion képlérien autour d'une protoétoile de masse $M_\star$, traversé par un champ magnétique dipolaire à grande échelle. Ce chapitre présente dans un premier temps la solution MHD idéale de vent de disque utilisée, qui est calculée par Casse & Ferreira (2000b). Dans un second temps, il traite des aspects multifluides qui constituent une légère déviation par rapport au cas de la MHD idéale mais permettent d'introduire les termes de chauffage MHD (diffusion ambipolaire et effet Ohm).***

I Le modèle de vent de disque MHD

I.1 Solution dynamique

Le modèle de vent de disque est basé sur une solution Magnétohydrodynamique (MHD) qui fixe la densité totale, le champ de vitesse $\vec{v}$, le champ magnétique $\vec{B}$ et le courant électrique $\vec{J}$ dans l'espace, le long des lignes d'écoulement du fluide. C'est une solution dans laquelle l'écoulement est laminaire et qui suppose une zone d'éjection infiniment étendue (pas de terme de pression extérieure). Cette solution suppose un champ magnétique bipolaire traversant le disque sur de grandes échelles. Ce champ magnétique à deux origines possibles : l'advection du champ magnétique initial avec l'accrétion de la matière ou une production *in-situ* par un processus de dynamo dans le disque (Pudritz 1981). La solution vérifie les équations MHD pour *un seul fluide*. Elle a été obtenue en supposant que l'écoulement est stationnaire, que le jet est axisymétrique ($\partial/\partial\phi = 0$), et que toutes les quantités physiques peuvent s'exprimer sous forme auto-similaire. La géométrie du vent de disque est représentée en Figure 2.1.

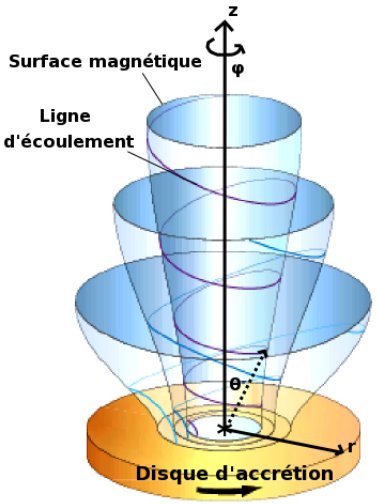


Figure 2.1 – *Géométrie du vent de disque MHD. Plusieurs lignes d'écoulement s'enroulant autour de plusieurs tubes de flux magnétique sont représentées.*

L'équilibre radial quasi-képlérien dans le disque entre la force gravitationnelle et la force centrifuge caractérisé par la vitesse képlérienne $v_K = \sqrt{GM_\star/r}$ où $M_\star$ est la masse de l'étoile centrale, fait que les variables physiques dans le plan du disque auront une dépendance radiale proche d'une loi de puissance si la région d'éjection (plage en r_0) est suffisamment grande.

L'hypothèse d'autosimilarité permet alors de découpler les dépendances radiales et angulaires de chaque grandeur physique $y(r,\theta)$ le long d'une ligne d'écoulement sous la forme :

$$y(r,\theta) = y_0 \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\beta_y} \times f_y(\theta) \tag{2.1}$$

où $\theta = \arctan(r/z)$ est l'angle polaire, r_0 est le rayon d'ancrage [1] de la ligne d'écoulement fluide, β_y est un exposant qui dépend de ξ l'efficacité d'éjection (un paramètre libre et sans dimension précisé dans la section suivante), f_y est une fonction sans dimension de θ, et y_0 est un facteur de dimensionnement. L'autosimilarité permet de résoudre l'équilibre transverse entre les surfaces magnétiques en ramenant les équations différentielles 2D (en r,θ) à un problème 1D (résolution en fonction de θ uniquement).

Le modèle adopté est une extension du modèle de jet MHD idéal de Blandford & Payne (1982). L'originalité consiste en ce que la dynamique sous-jacente dans le disque képlérien en MHD résistive [2] est résolue en 3D, incluant tous les termes dans les direc-

1. Le rayon d'ancrage est le rayon mesuré au plan équatorial du disque où est ancrée la ligne de champ magnétique associée à la ligne d'écoulement. L'indice 0 désigne les grandeurs exprimées dans le plan équatorial du disque.
2. dans laquelle le fluide n'est pas parfaitement conducteur, le champ n'est plus gelé dans la matière.

tions verticale, azimutale et radiale. En particulier, la compression du disque et la légère déviation à la rotation képlérienne provoquée par le champ magnétique, abordée par Shu et al. (2008), sont traitées en détail.

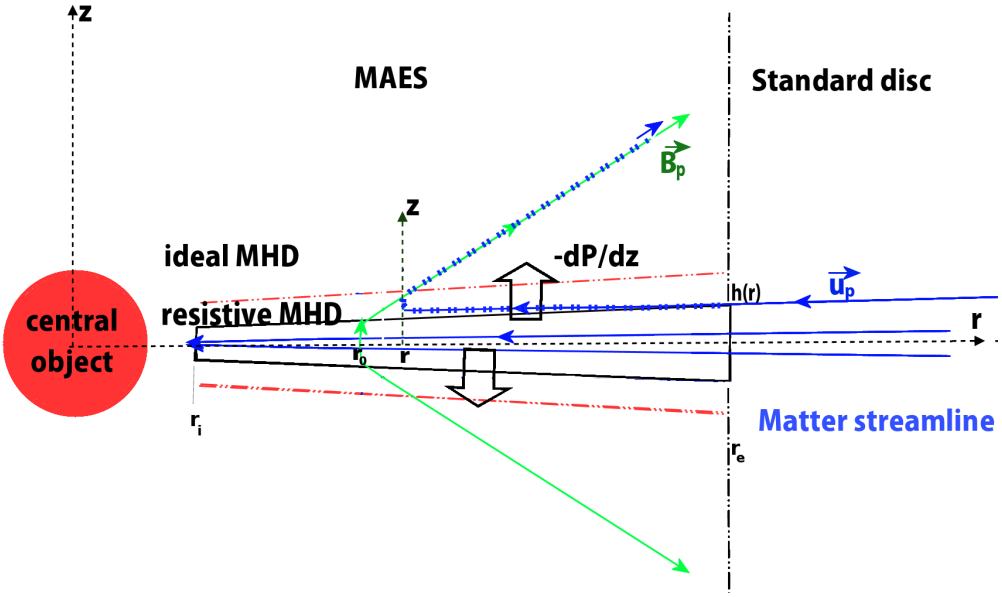


FIGURE 2.2 – *Schématisation d'une structure d'accrétion-éjection (SMAE), avec les lignes d'écoulement suivies par la matière (en bleu). La ligne de champ magnétique poloïdal est ancrée dans le plan équatorial à r_0 (en vert). Une fraction de la matière qui traverse les lignes de champ magnétique dans le disque résistif (entre les droites en rouge) se retrouve éjectée et accélérée en emportant la majeure partie du moment cinétique du flot d'accrétion.*

Une accrétion stationnaire nécessite que la matière parvienne à traverser les lignes de champ magnétique poloïdal. Le modèle suppose que ce transport est assurée par la turbulence dans le disque provoquée par des phénomènes non linéaires issus des instabilités magnétiques [3].

La matière passe d'une MHD non idéale dans le disque résistif à une MHD idéale quand elle est éjectée. La transition entre accrétion et éjection, le flux de masse emporté par le jet et le franchissement du point magnétosonique lent sont déterminés de manière autocohérente à partir d'hypothèses sur le profil vertical de température et de résistivité dans le disque (Ferreira 1997a; Casse & Ferreira 2000c), ces hypothèses sont détaillées en section I.3-1.

I.2 LES ÉQUATIONS MHD

Le champ magnétique et le champ de vitesse se décomposent en composantes poloïdale $\vec{B}_p$ et toroïdale $\vec{B}_\phi$ telles que : [4] $\vec{B} = \vec{B}_p + B_\phi \vec{e}_\phi$ et $\vec{v} = \vec{v}_p + v_\phi \vec{e}_\phi$, où la vitesse toroïdale

3. Le processus de diffusion ambipolaire entre les ions et les neutres a été invoqué pour permettre à la matière de diffuser au travers des lignes d'écoulement (Wardle & Koenigl 1993), néanmoins ce processus dépend du degré d'ionisation du disque qui est mal connu. De plus les disques possédant un champ magnétique développent facilement des instabilités (Balbus & Hawley 1991b; Hawley & Balbus 1991) favorables à la turbulence.

4. La composante poloïdale du champ magnétique, du fait de sa configuration bipolaire, peut s'écrire : $\vec{B}_p = \frac{1}{r}\vec{\nabla}a \wedge \vec{e}_\phi$, où $a(r,z)$ est une fonction paire de z. a = *constante* pour une surface magnétique correspondant à un flux magnétique donné.

est $v_\phi = r\Omega$, avec Ω la vitesse angulaire. Les équations décrivant le vent de disque MHD, résolues par Casse & Ferreira (2000b), sont [5] :

Conservation de la masse :
$$\vec{\nabla} \cdot \rho\vec{v} = 0 \tag{2.2}$$

Conservation de la quantité de mouvement :
$$\rho\vec{v} \cdot \vec{\nabla}\vec{v} = -\vec{\nabla}P - \rho\vec{\nabla}\Phi_G + \frac{1}{c}\vec{J} \wedge \vec{B} + \vec{\nabla}\vec{T} \tag{2.3}$$

Loi d'Ohm :
$$\eta_m J_\phi \vec{e}_\phi = \vec{v}_p \wedge \vec{B}_p \tag{2.4}$$

Induction du champ magnétique toroïdal :
$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\nu'_m}{r^2} \vec{\nabla} r B_\phi \right) = \vec{\nabla} \cdot \frac{1}{r} (B_\phi \vec{v}_p - \vec{B}_p \Omega r) \tag{2.5}$$

Equation de l'énergie :
$$\rho T \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \rho T \cdot \vec{\nabla} S = \frac{\partial \mathfrak{Q}}{\partial t} \tag{2.6}$$

Dans ces équations, ρ est la masse volumique du fluide, $P = \rho k_\mathrm{B} T/\mu$ est la pression thermique (μ est la masse moyenne des particules $\simeq m_p/2$ pour un gaz totalement ionisé), $\Phi_G = -GM_\star / \sqrt{z^2 + r^2}$ est le potentiel gravitationnel de l'étoile centrale, $\vec{J}$ est le courant électrique :

$$\vec{J} = \frac{c}{4\pi} \vec{\nabla} \wedge \vec{B},$$

η_m est la résistivité magnétique, ν_m et ν'_m sont les coefficients de diffusivité magnétique poloïdal et toroïdal. $\vec{T}$ est le tenseur des contraintes visqueuses dans le disque (qui est ici négligeable devant les forces magnétiques). Plus le couple magnétique domine le couple visqueux dans le disque, plus le moment cinétique du disque sera emporté par le jet. Dans l'équation (2.6), S désigne l'entropie spécifique et $\frac{\partial \mathfrak{Q}}{\partial t}$ est la source locale d'entropie issue des processus de chauffage et de refroidissement à la surface du disque : $\frac{\partial \mathfrak{Q}}{\partial t} = \Gamma - \Lambda$. Le refroidissement est radiatif et turbulent, $\Lambda = \Lambda_\mathrm{rad} + \Lambda_\mathrm{turb}$. Le chauffage se fait par effet Ohm, diffusion ambipolaire, par turbulence et peut provenir de sources extérieures comme le rayonnement UV et X de l'étoile, $\Gamma_\mathrm{MHD} + \Gamma_\mathrm{turb} + \Gamma_\mathrm{ext}$, où le terme Γ_MHD somme le chauffage par diffusion ambipolaire et par effet Ohm. La solution suppose que la pression thermique à la surface du disque domine la pression de radiation de l'étoile centrale. La puissance totale nette impliquée dans les processus de turbulence est supposée être nulle. La conservation de l'énergie s'exprime par : $P_\mathrm{acc} = 2P_\mathrm{jet} + 2P_\mathrm{rad}$, où P_acc est la puissance libérée par le processus d'accrétion ($P_\mathrm{acc} = GM_\star \dot{M}_\mathrm{acc}/2(1/r_i - 1/r_e)$, où r_i est le rayon interne de la zone d'éjection et r_e son rayon externe, r_i et r_e sont représentés sur la Figure 2.2), P_jet est la puissance emportée par un lobe du jet et P_rad est la puissance rayonnée par une face du disque. On a ici $P_\mathrm{jet} \gg P_\mathrm{rad}$, le vent de disque est très efficace pour emporter la puissance libérée par le processus d'accrétion.

Dans le disque, le champ magnétique tend à freiner la matière, le moment cinétique et l'énergie y sont stockés sous forme magnétique. Une condition nécessaire pour que la matière soit éjectée est que le couple magnétique exercé change de signe à la surface du disque, ainsi le moment cinétique est progressivement restitué à la matière sous

5. Pour exprimer les relations électrodynamiques on se place dans le système des unités gaussiennes du système cgs. La définition du champ électrique dans ce système d'unités diffère de celui du système SI par $\vec{E}_{cgs} = \frac{1}{c}\vec{E}_{SI}$. Dans le système SI le champ magnétique est relié au champs électrique selon $\|\vec{E}_{SI}\| = c\|\vec{B}_{SI}\|$, ce n'est pas le cas dans les unités cgs.

forme centrifuge [6], ce qui provoque son éjection. La Figure 2.2 illustre ce processus, la matière en s'élevant au dessus du disque se connecte au rayon r à une ligne de champ magnétique qui est elle, ancrée au rayon $r_0 < r$ et qui tourne donc plus vite, ce qui l'accélère.

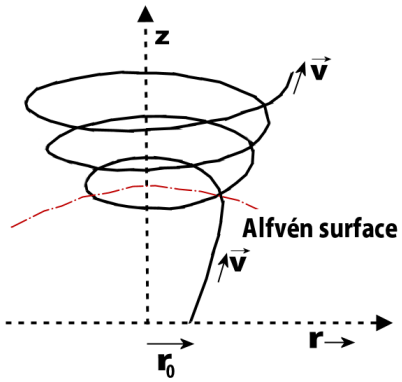


FIGURE 2.3 – *Schéma d'une ligne d'écoulement lancée depuis le plan équatorial du disque d'accrétion, traversant la surface d'Alfvén et s'enroulant autour de la surface magnétique ancrée à r_0.*

Dans le régime de MHD idéale, le long des lignes d'écoulement, le fluide passe le *point magnétosonique lent*, où la vitesse de la matière atteint la vitesse des ondes magnétosonores lentes[7], puis est accéléré jusqu'à la surface d'Alfvén (qui est cônique à θ_A constant dans un contexte d'auto-similarité), où la vitesse poloïdale de la matière atteint la vitesse d'Alfvén[8], c'est à dire $\mathrm{v}_p = \mathrm{v}_{\mathrm{A},p} = B_p/\sqrt{4\pi\rho}$, comme illustré sur la Figure 2.3. Cette accélération traduit le transfert de l'énergie magnétique au fluide sous forme d'énergie cinétique. Le moment cinétique du disque initialement emporté par le champ magnétique est progressivement transmis à la matière à mesure qu'elle s'élève dans le jet. Le fluide atteint finalement le point de recollimation du jet où $\mathrm{v}_r < 0$. Nous arrêtons nos calculs en ce point car un choc peut se développer au delà. Or notre modèle actuel n'implémente pas la contribution de chocs (voir Chapitre 3 et Conclusion).

I.3 Paramètres libres et dimensionnalisation

I.3-1 Paramètres libres

La solution MHD *auto-similaire*, *axisymétrique* et *stationnaire*, calculée par Casse & Ferreira (2000b) fournit en chaque point θ de la ligne d'écoulement les valeurs de la densité ρ, du champ de vitesse $\vec{\mathrm{v}}$ du champ magnétique $\vec{B}$, du courant électrique $\vec{J}$ ainsi que $\mathrm{d}\ln(\rho)/\mathrm{d}\ln(x)$, où $x = z/r$. Dans la solution, l'ionisation est supposée être suffisante pour que les neutres et les ions soient bien couplés (la solution suppose un écoulement monofluide).

La solution est entièrement conditionnée par trois paramètres libres sans dimension : l'efficacité d'éjection (ξ), le rapport d'aspect du disque (ϵ) et le paramètre de diffusivité magnétique (α_m).

6. La fonction permettant de mesurer cette conversion d'énergie magnétique en énergie cinétique est exprimée par la fonction $1 - \frac{\Omega(r)}{\Omega_0} = \frac{(\mathrm{v}_p/\mathrm{v}_\mathrm{A})^2}{(\mathrm{v}_p/\mathrm{v}_\mathrm{A})^2-1} \times \left(1 - \frac{r_\mathrm{A}^2}{r^2}\right)$, qui vaut 0 dans le plan du disque et qui augmente vers sa valeur maximale, $g = 1$ signifie que toute l'énergie magnétique a été convertie en énergie cinétique.

7. $\vec{\mathrm{v}_p} \cdot \frac{\vec{k}}{k} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{v}_\mathrm{A}^2 + c_s^2 - \sqrt{\left(\mathrm{v}_\mathrm{A}^2 + c_s^2\right) - 4c_s^2 \times (\vec{B}\cdot\vec{k}/\sqrt{\mu\rho k^2})}\right)$, où $\vec{k}$ est le vecteur d'onde. Les ondes magnétosonores sont des ondes de perturbation qui ne se propagent librement que si le milieu n'est pas résistif et compressible. La perturbation se propage en provoquant des oscillations transverses à la direction de propagation.

8. l'indice A désigne les grandeurs exprimées à la surface d'Alfvén

► **L'efficacité d'éjection** ξ relie le taux d'accrétion au rayon : $\dot{M}_{\rm acc}(r_0) \propto r_0^{\xi}$, ou encore :

$$\xi = \frac{{\rm dln}(\dot{M}_{\rm acc}(r_0))}{{\rm dln}(r_0)} \tag{2.7}$$

Ce paramètre est une mesure de l'efficacité d'éjection ; il relie le taux de la masse éjectée ($\dot{M}_{\rm ej}$) dans chaque lobe du vent de disque au taux de masse accrétée (comme illustré par la Figure 2.4) :

$$\dot{M}_{\rm ej} = \frac{\xi}{2}\dot{M}_{\rm acc}{\rm ln}(\frac{r_e}{r_i}) \tag{2.8}$$

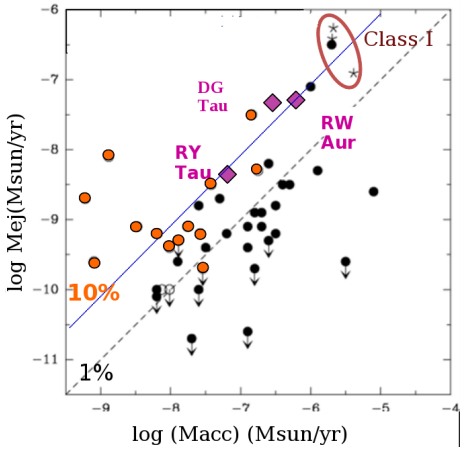


FIGURE 2.4 – *Corrélation entre le taux d'éjection et d'accrétion pour des étoiles de type T Tauri à partir des observations optique de Hartigan et al. (1995) en noir et Gullbring et al. (1998) en orange, ainsi que pour des jets optiques issus d'étoile de classes I. La courbe en pointillés représente* $\dot{M}_{\rm ej}/\dot{M}_{\rm acc} = 0.1$*, figure adoptée de Cabrit (2002)*

où r_e est le rayon externe du vent de disque et r_i est son rayon interne. Tant que les couples magnétiques dans le vent de disque dominent, ce paramètre est relié au paramètre de bras de levier magnétique de Blandford & Payne (1982) $\lambda = (r_{\rm A}/r_0)^2$, selon la relation (Ferreira 1997a) :

$$\lambda = \frac{r_{\rm A}^2}{r_0^2} \simeq 1 + \frac{1}{2\xi} \tag{2.9}$$

où $r_{\rm A}$ est le rayon cylindrique correspondant au point d'Alfvén. λ mesure l'accroissement du moment cinétique specifique emporté par la matière ($L = \Omega_0 r_{\rm A}^2 = \Omega r^2 - rB_\phi/\eta_m$) entre le plan du disque et l'infini,

$$\lambda = \frac{L}{\Omega_0 r_0^2} \simeq \frac{r_{\rm A}}{r_0^2}$$

Si le flux de masse éjectée est important (ξ grand) alors le vent de disque emporte peu de moment cinétique spécifique (λ faible). Inversement, pour un taux d'éjection faible le vent emporte plus de moment cinétique spécifique par gramme de matière. Le flux **total** de moment cinétique emporté reste constant et égal à celui nécessaire pour permettre l'accrétion dans le disque.

La vitesse asymptotique du jet est donnée par Blandford & Payne (1982) :

$$\mathrm{v}_p^\infty = \sqrt{\frac{GM_\star}{r_0} \times (2\lambda - 3)} = \sqrt{2\lambda - 3}\mathrm{v}_K(r_0) \tag{2.10}$$

où v_K est la vitesse képlérienne. Le moment cinétique spécifique asymptotique est :

$$r\mathrm{v}_\phi^\infty = \lambda\sqrt{GM_\star r_0} = \lambda r_0 \mathrm{v}_K(r_0) \tag{2.11}$$

v_p^∞ et $r\mathrm{v}_\phi^\infty$ diminuent quand λ diminue et que ξ augmente.

Le modèle utilisé ici est un modèle de vent de disque *lent* développé par Casse & Ferreira (2000c). Ces solutions correspondent à $\lambda < 20$. Ce type de solution est obtenu en ajoutant un processus de chauffage dans les couches supérieures du disque ($z \leq h$, où h

est l'épaisseur du disque). La région chaude où s'effectue l'éjection est plus dense que dans le cas des solutions MHD supposant un profil vertical isotherme dans le disque (Ferreira et al. 2006). Une atmosphère de disque plus dense augmente la valeur de ξ (d'avantage de masse est emportée) et diminue la valeur de λ (le moment cinétique spécifique emporté peut être plus faible), ce qui est plus compatible avec les observations de de signature de rotation du jet atomique de DG Tau (Pesenti et al. 2004) tel que montré par la Figure 2.5.

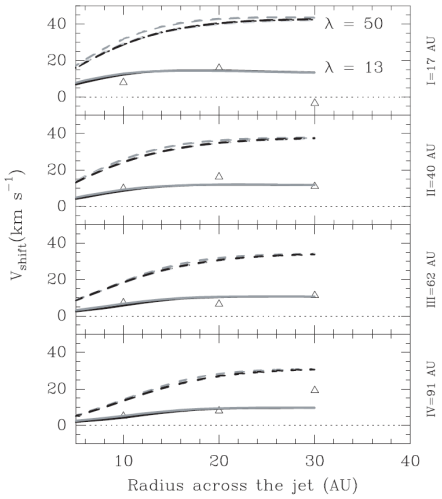


FIGURE 2.5 – *Décalage en vitesse dans le jet en fonction du rayon par rapport à l'axe du jet pour quatre distances déprojetées : de 17 à 91* UA. *Comparaisons effectées par Pesenti et al. (2004) (les courbes en noir correspondent aux prédictions dans la raie [Fe II] 1.644 µm et la courbe en gris à [O I] λ6300) entre les observations du jet de DG Tau de Bacciotti et al. (2002) et les prédictions pour deux modèles de vent de disque, un froid avec* $\lambda = 50$ *et avec chauffage* ($\lambda = 13.8$).

La solution utilisée (*magnéto-thermique*) est représentée sur la Figure 2.6 avec d'autres observations de rotation dans les jets d'étoile T Tauri.

Une partie de la puissance disponible est supposée être déposée à la surface du disque sous forme d'enthalpie (la fraction d'énergie thermique déposée représente 8×10^{-4} de l'énergie d'accrétion). Cette énergie habituellement négligée peut être fournie par le rayonnement UV intense du choc d'accrétion frappant la surface du disque ou par dissipation turbulente de l'énergie MHD dans l'atmosphère du disque.

D'un point de vue dynamique cette solution reste *froide* : l'énergie thermique à la base du jet est négligeable devant la gravitation. L'accélération de la matière est principalement d'origine magnétique. La température au delà du point magnétosonique lent n'affecte pas la dynamique. Elle peut donc être recalculée a posteriori sans que celà n'affecte la cohérence de la solution (voir Chapitre 4 pour les termes de couplage thermique utilisés).

Le terme de chauffage issu de la MHD résistive introduit à la base du disque dans le calcul de la solution MHD (qui permet d'augmenter ξ et de diminuer λ et qui détermine la vitesse assymptotique de la solution) tend vers 0 au delà de deux échelles de hauteur du disque ($z/r \simeq 0.06$). Ce terme n'est pas inclus dans les termes de chauffages calculés le long des lignes d'écoulement (dont le calcul commence à $z/r = 0.05$) dans un contexte de MHD idéale. Ce terme n'affecte pas *a-priori* les prédictions.

Cependant il est possible que la pression thermique influence la dynamique du plasma au delà du point de recollimation, aussi les calculs effectués ici sont arrêtés au niveau du point de recollimation des lignes d'écoulement.

► **Rapport d'aspect du disque** Le paramètre ϵ, donne l'échelle de hauteur de pression du disque en fonction du rayon cylindrique :

$$\epsilon = \frac{h(r)}{r} = \frac{c_s(z=0)}{v_K} \tag{2.12}$$

où $h(r)$ est l'échelle de hauteur du disque, c_s est la vitesse du son dans le plan médian et v_K est la vitesse képlérienne.

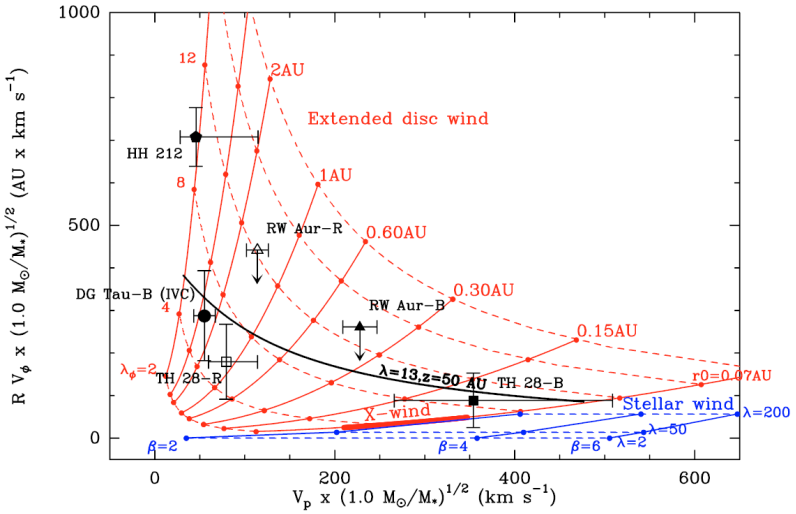


FIGURE 2.6 – *Comparaison entre le moment cinétique spécifique en fonction de la vitesse poloïdale (au delà de la surface d'Alfvén) issue des résultats de Ferreira et al. (2006) pour les modèles de vent de disque en rouge avec les observations à* $z \simeq 50$UA *de jets d'étoiles de type T Tauri effectués par Bacciotti et al. (2002); Coffey et al. (2004); Woitas et al. (2005) et présentant de possibles signatures de rotation du jet. Les observations cinématiques infrarouges de HH212 sont aussi montrées. En ligne continue est tracée la relation entre* $r\mathrm{v}_\phi$ *et* v_p *à des rayons de lancement* r_0 *fixés. Les lignes pointillées tracent les isocontours* $\lambda_\phi = r\mathrm{v}_\phi/(\Omega_0 r_0^2)$ *où* v_ϕ *est la vitesse de rotation. La courbe en trait noir montre la solution à* $\lambda = 13$ *à* $z = 50\,\mathrm{UA}$ *entre* $r_0 = 0.07\,\mathrm{UA}$ *et* $r_0 = 2\,\mathrm{UA}$.

► **Paramètre de diffusivité magnétique MHD** L'autosimilarité suppose :

$$\alpha_m = \frac{v_m}{\mathrm{v}_{\mathrm{A},0} h} = constante \tag{2.13}$$

où v_m est la diffusivité magnétique due à la turbulence et $\mathrm{v}_{\mathrm{A},0}$ est la vitesse alfvénique au plan équatorial du disque. La viscosité turbulente v_v est supposée telle que $v_v/v_m = 1$ (nombre de Prandtl magnétique = 1). Mais le couple dû à la viscosité turbulente est beaucoup plus faible que le couple magnétique du jet, et donc la valeur exacte de v_v n'affecte pas la dynamique.

Le paramètre α_m contrôle la facilité avec laquelle la matière traverse les lignes de champ magnétique ainsi que le module du champ toroïdal à la surface du disque.

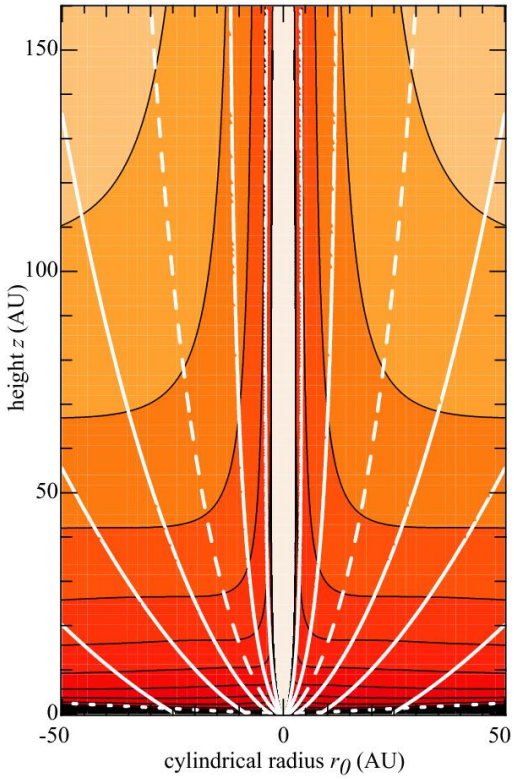


FIGURE 2.7 – *Géométrie d'ensemble de la solution lente et chaude de vent de disque utilisée ici et calculée par Casse & Ferreira (2000c). Les lignes blanches en trait plein montrent les surfaces magnétiques, la surface ancrée à* $r_0 = 1\,\mathrm{UA}$ *est en pointillé. Les contours en couleur indiquent la densité pour* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\,yr^{-1}}$ *commençant à* $8 \times 10^4 \mathrm{cm^{-3}}$ *au plus clair et augmentant d'un facteur 2. La surface magnétosonique lente est tracée en pointillés en bas, elle est située à 1.7 fois la hauteur du disque. C'est sur cette surface que l'intégration thermo-chimique (détaillée aux Chapitres suivants) commence.*

La grandeur dépendant des trois paramètres du modèle

$$\mu = (\mathrm{v_{A,0}}/\Omega_K h)^2$$

mesure le rapport de la pression magnétique sur la pression thermique dans le plan médian. Dans la solution choisie $\mu = 0.33$.

L'inclinaison initiale des lignes de champ magnétique à la surface du disque est $\theta_0 = 57.3°$.

La quantité κ qui mesure la fraction de masse emportée dans le jet par unité de flux magnétique vaut 0.1 pour la solution choisie.

Les valeurs des paramètres libres ξ, ϵ et α_m adoptées dans la solution utilisée ici, ainsi les valeurs des autres "paramètres" λ, μ, et, θ_0 et κ qui sont déduites de ξ, ϵ et α_m sont résumées dans la Table ci-dessous.

ξ	ϵ	α_m
0.04	0.03	2

λ	μ	θ_0	κ
13.8	0.33	57.3°	0.1

La valeur de la vitesse poloïdale asymptotique pour cette solution est :

$$\mathrm{v}_p^\infty = 100\,\mathrm{km\,s^{-1}} \times \left(\frac{r_0}{1\,\mathrm{UA}}\right)^{-0.5} \left(\frac{M_\star}{0.5\,\mathrm{M_\odot}}\right)^{0.5}$$

I.3-2 Facteurs de dimensionnalisation

Les facteurs de dimensionnalisation pour chaque grandeur physique adimensionée de la solution (notée avec un indice a), précisés par le facteur y_0 dans la relation d'auto-

similarité (2.1) sont :

$$
\begin{aligned}
n_0 &= \frac{\dot{M}_{\rm acc}}{4\pi m_p \sqrt{GM_\star r_0^3}} \\
{\rm v}_0 &= \sqrt{\frac{GM_\star}{r_0}} \\
B_0 &= \dot{M}_{\rm acc}^{\frac{1}{2}} \left(\frac{GM_\star}{r_0^5}\right)^{\frac{1}{4}} \\
J_0 &= \frac{c\dot{M}_{\rm acc}^{\frac{1}{2}}}{4\pi r_0} \left(\frac{GM_\star}{r_0^5}\right)^{\frac{1}{4}} = \frac{cB_0}{4\pi r_0}
\end{aligned}
\tag{2.14}
$$

respectivement pour la densité, la vitesse, le champ magnétique et le courant électrique.

La Figure 2.8 montre un exemple de ces variables dimensionnées pour un modèle de proto-étoile de classe II avec $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $M_\star = 0.5\,{\rm M}_\odot$ et $r_0 = 1\,{\rm UA}$. Sur cette figure, la courbe rouge commence au point magnétosonique lent et se termine au point de recollimation. La Table 2.1 décrit l'ensemble des modèles réalisés.

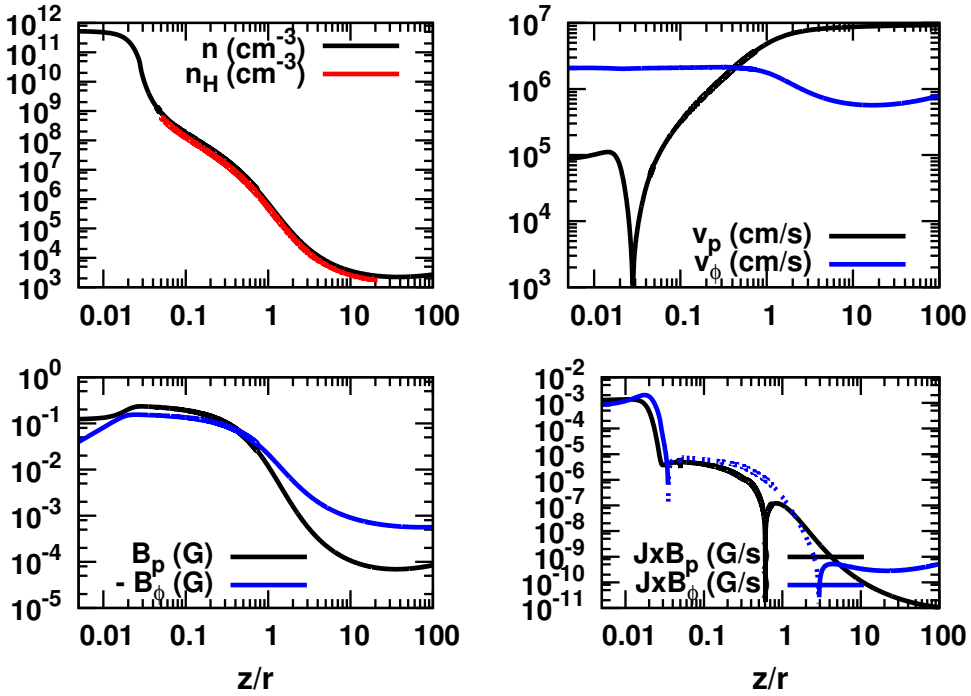


FIGURE 2.8 – *Variables prescrites par la solution MHD dimensionnées pour une classe II avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $M_\star = 0.5\,{\rm M}_\odot$ *le long de la ligne d'écoulement ancrée à* $r_0 = 1\,{\rm UA}$. *Les variables sont données en fonction de* $x = z/r$. *En haut à gauche la densité donnée par la solution (en noir* $n = \rho/\mu = 2\rho/m_p$*), la courbe en rouge indique la plage en* $x \in [0.05,\ 21]$ *où l'on suit l'évolution thermique et chimique du gaz (avec* $n_{\rm H} = \rho/(1.4m_p)$*). En haut à droite est montrée la vitesse poloïdale* ${\rm v}_p$ *(en noir) et toroïdale* ${\rm v}_\phi$ *(en bleu), en bas à gauche les composantes poloïdale et toroïdale du champ magnétique, et en bas à droite le courant électrique.*

Les grandeurs qui affectent la dimensionnalisation sont donc :

- la masse de l'étoile $M_\star$: pour les classes II et I, on utilise $M_\star = 0.5\,{\rm M}_\odot$ et pour les classes 0, $M_\star = 0.1\,{\rm M}_\odot$,
- le taux d'accrétion $\dot{M}_{\rm acc}$: on le fait varier entre $10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ pour des classes II à $2\times10^{-5}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ pour des classes 0 (voir Table 2.1),

- le rayon d'ancrage r_0 de la ligne d'écoulement.

D'autres paramètres interviennent dans le calcul des prédictions observationnelles :

- le rayon d'ancrage de la première ligne d'écoulement r_i. Il est fixé à 0.07 UA pour l'ensemble des modèles. Il correspond à une valeur typique de troncature du disque par la magnétosphère de l'étoile. Ce rayon influe sur l'atténuation des rayons X de la source centrale,
- le rayon de sublimation $R_{\rm sub}$ où commencent notre calcul, et qui détermine l'atténuation du flux UV de l'étoile par les poussières,
- le rayon externe de la zone d'éjection $r_e = r_0^{\rm max}$. On le fait varier entre 1.6 UA et 25 UA. Pour les valeurs adoptées $\xi = 0.04$ et $r_i = 0.07\,{\rm UA}$, $M_{\rm ej}/\dot{M}_{\rm acc} = 10\%$ avec $r_0^{\rm max} = 10\,{\rm UA}$ et 12% avec $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ (cf équation (2.7)).

L'auto-similarité de la solution permet de calculer à θ (ou $x = z/r$) constant la valeur d'une variable sur une ligne d'écoulement ancrée à r_2 connaissant sa valeur sur une ligne d'écoulement ancrée à r_1, par exemple pour la densité :

$$\frac{n_1}{n_2} = \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{-3/2}$$

et pour le rayon sphérique $R = \sqrt{r^2 + z^2}$:

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{r_1}{r_2}$$

TABLE 2.1 – *Modèles utilisés*

$M_\star$ ($M_\odot$)	$\dot{M}_{\rm acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})	$R_{\rm sub}$ (UA)	$r_0^{\rm max}$ (UA)	i (°)	$L_{\rm hs}$ ($L_\odot$)	$L_{\rm tot} = L_{\rm acc} + L_\star$ ($L_\odot$)
Classe 0 standard :						
0.1	**5.10^{-6}**	**0.31**	1.6, 3.2, 6.4, 12.8, **25**	30, **60**, 80	2.6	7.3
Classe 0 extrême :						
0.1	2.10^{-5}	0.63	1.6, 3.2, 6.4, 12.8, 25	30, 60, 80	10.5	23
Classe I standard :						
0.5	1.10^{-6}	0.27	1.6, 3.2, 6.4, 12.8, 25	30, 60, 80	2.6	7.3
Classe I extrême :						
0.5	5.10^{-6}	0.64	1.6, 3.2, 6.4, 12.8, 25	30, 60, 80	13.1	28.2
Classe II :						
0.5	1.10^{-7}	0.15	1.6, 3.2, 6.4, 12.8, 25	30, 60, 80	0.25	2.6

Résumé des paramètres employés pour les différents modèles de vent de disque réalisés. Avec $M_\star$ la masse de l'étoile, $\dot{M}_{\rm acc}$ le taux d'accretion, $R_{\rm sub} = r_0^{\rm min}$ le rayon de sublimation, $r_0^{\rm max} = r_e$ le rayon lancement maximal, et i l'angle d'inclinaison entre l'axe du jet et le plan du ciel. La luminosité des chocs d'acrrétion sur l'étoile centrale est $L_{\rm hs} = \frac{1}{2} L_{\rm acc}$. Les autres paramètres du modèle sont : $T_\star = 4000\,$K, la température des chocs d'accrétion $T_{\rm hs} = 10\,000$ K, le rayon de l'étoile est fixé pour tous les modèles à une même valeur $R_\star = 3 R_\odot$, la luminosité de l'étoile est aussi gardée constante pour tous les modèles en prennant $L_\star = 2.1 L_\odot$, l'énergie caractéristique du spectre X utilisé $k_B T_X = 4\,$KeV et la luminosité X de l'étoile $L_{\rm X} = 10^{30}\,$ergs^{-1}. Le modèle de référence est noté en gras dans la table. La dénomination "standard", "extrême" sera reprise dans la suite.

II ASPECTS MULTIFLUIDES

La dynamique de la matière dans le vent de disque est décrite par les équations MHD monofluides dépendantes du temps et de l'écoulement (2.2) à (2.6). Le gaz est en fait composé d'une grande diversité d'espèces, où l'on peut distinguer trois composantes : le fluide des neutres f_n, le fluide des ions positifs f_i et le fluide des ions négatifs et électrons f_e. La solution MHD de vent de disque suppose que ces trois composantes sont suffisamment bien couplées, car traiter les aspects dynamiques MHD dans le cas de trois fluides découplés est beaucoup plus complexe. Nous nous intéressons dans cette partie aux écarts au fluide unique qui sont les termes source du chauffage MHD (chauffage par diffusion ambipolaire et par effet Ohm).

II.1 Grandeurs MHD pour le fluide

Pour une composante du fluide moyen notée $f \in \{n,\ i,\ e\}$, si n_f est la densité de particule de cette composante ou du fluide f par unité de volume, alors la masse volumique est $\rho_f = \sum_{a\in f} n_a m_a$. La vitesse barycentrique du fluide est :

$$\vec{\mathrm{v}} = \frac{\rho_e \vec{\mathrm{v}_e} + \rho_i \vec{\mathrm{v}_i} + \rho_n \vec{\mathrm{v}_n}}{\rho_e + \rho_i + \rho_n} \tag{2.15}$$

Ainsi il est possible d'écrire la dérivée moyenne

$$\frac{\mathrm{D}\vec{\mathrm{v}}}{\mathrm{D}t} = \frac{\rho_e \frac{\mathrm{D}\vec{\mathrm{v}_e}}{\mathrm{D}t} + \rho_i \frac{\mathrm{D}\vec{\mathrm{v}_i}}{\mathrm{D}t} + \rho_n \frac{\mathrm{D}\vec{\mathrm{v}_n}}{\mathrm{D}t}}{\rho_e + \rho_i + \rho_n}$$

Le système MHD est complètement décrit par un premier ensemble de variables qui sont la masse volumique du fluide ρ et la vitesse $\vec{\mathrm{v}}$. À ces équations il faut ajouter une grandeur thermodynamique, la pression P, et une grandeur électrodynamique, la densité de courant $\vec{J}$, telles que

$$P = P_e + P_i + P_n$$
$$\vec{J} = q_i n_i \vec{\mathrm{v}_i} + e n_e \vec{\mathrm{v}_e}$$

De telle sorte que

$$\rho = \sum_f \rho_f = \sum_f n_f m_f\ ,$$
$$\rho\vec{\mathrm{v}} = \sum_f m_f n_f \vec{\mathrm{v}_f}\ , \quad P = \sum_f n_f k_\mathrm{B} T_f \quad \text{et} \quad \vec{J} = \sum_f n_f q_f \vec{\mathrm{v}_f}$$

► *Dans notre modèle on suppose que tous les fluides ont la même température* $T_f = T$.

II.2 Echange de quantité de mouvement entre les fluides

II.2-1 Conservation de la quantité de mouvement

L'équation régissant la conservation de la quantité de mouvement dans la solution MHD est donnée par la relation (2.3). On peut la réécrire sous les considérations actuelles en y incorporant les aspects multifluides.

Les équations du mouvement pour un fluide conducteur sont obtenues en appliquant le principe fondamental de la dynamique au travers de l'équation d'Euler. La quantité de mouvement par unité de volume du fluide f est $\vec{p}_f = \rho_f \vec{\mathrm{v}}_f$. Ce volume unitaire est soumis à différentes forces :

- la force de pression : $-\vec{\nabla} P_f$,
- la force gravitationnelle : $-\rho_f \vec{\nabla}\Phi_G$, où Φ_G est le potentiel gravitationnel à symétrie sphérique centrale,

- les forces de friction $\vec{F}_{gf}$ dues aux diffusions élastiques avec les espèces des autres fluide g. Ces diffusions sont à l'origine des termes de chauffage MHD.
- pour les fluides ionique et électronique, il faut ajouter les termes relatifs aux forces de Lorentz.

Ainsi, pour les trois composantes e, i et n du fluide moyen on obtient :

$$\rho_e \frac{\mathrm{D}\vec{\mathrm{v}_e}}{\mathrm{D}t} = -\vec{\nabla}P_e - \rho_e\vec{\nabla}\Phi_G - q_e n_e\left(\vec{E} + \frac{\vec{\mathrm{v}_e}}{c}\wedge\vec{B}\right) + \vec{F}_{ie} + \vec{F}_{ne} \tag{2.16}$$

$$\rho_i \frac{\mathrm{D}\vec{\mathrm{v}_i}}{\mathrm{D}t} = -\vec{\nabla}P_i - \rho_i\vec{\nabla}\Phi_G + q_i n_i\left(\vec{E} + \frac{\vec{\mathrm{v}_i}}{c}\wedge\vec{B}\right) + \vec{F}_{ei} + \vec{F}_{ni} \tag{2.17}$$

$$\rho_n \frac{\mathrm{D}\vec{\mathrm{v}_n}}{\mathrm{D}t} = -\vec{\nabla}P_n - \rho_n\vec{\nabla}\Phi_G + \vec{F}_{in} + \vec{F}_{en} \tag{2.18}$$

où $\vec{E}$ est le champ électrique local.

Les forces de friction entre les particules d'un fluide a et d'un autre b sont issues de collisions élastiques. La force excercée par un type de particule a sur le fluide des particules b, par unité de volume, est :

$$\vec{F}_{ab} = -\vec{F}_{ba} = n_a n_b\langle\sigma\mathrm{v}\rangle_{ab}\times\mu_{ab}(\vec{\mathrm{v}}_a - \vec{\mathrm{v}}_b) \tag{2.19}$$

où $\vec{\mathrm{v}}_a - \vec{\mathrm{v}}_b = \vec{\mathrm{v}}_{ab}$ est la vitesse de dérive entre le fluide de l'espèce a et celui de l'espèce b, $\mu_{ab} = \frac{m_a m_b}{m_a+m_b}$ est la masse réduite des deux espèces. Dans cette expression la quantité de mouvement échangée par collision est $\mu_{ab}\vec{\mathrm{v}}_{ab}$.

La force totale excercée par le fluide g sur le fluide f est :

$$\vec{F}_{gf} = \sum_{a\in f}\sum_{b\in g}\vec{F}_{ab} = \sum_{a\in f}\sum_{b\in g}\mu_{ab}n_a n_b\langle\sigma\mathrm{v}\rangle_{ab}\times(\vec{\mathrm{v}}_g - \vec{\mathrm{v}}_f)$$

La fréquence de collision de a avec b est :

$$\nu_{ab} = n_b\langle\sigma\mathrm{v}\rangle_{ab} \quad (\mathrm{s}^{-1}) \tag{2.20}$$

où $\sigma(\mathrm{v},\theta)$ est la section efficace de collision et $\langle\sigma\mathrm{v}\rangle_{ab}$ un taux de collision moyenné sur la distribution de vitesse relative $\phi(\mathrm{v})$ et sur toutes les directions :

$$\langle\sigma\mathrm{v}\rangle_{ab} = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}\mathrm{v}\int_\Omega \sigma(\mathrm{v},\theta)\mathrm{v}\phi(\mathrm{v})\mathrm{d}\Omega}{\int\mathrm{d}\Omega\int\phi(\mathrm{v})\mathrm{d}\mathrm{v}} \quad [\mathrm{cm}^3\,\mathrm{s}^{-1}]$$

II.2-2 Fréquence et section efficace de collisions ions-neutres et ions-électrons

Collisions ions-neutres

Les collisions entre les ions et les neutres sont en fait comptées entre les trois principales espèces neutres H, He et H_2 avec toutes les espèces ioniques possibles. La force $\vec{F}_{in}$ peut s'écrire comme $\overline{\mu_{in}n_i\nu_{in}}\times(\mathrm{v}_{in})$, ce terme représente le taux moyen d'échange total de quantité de mouvement dans les collisions ions-neutres, où $\overline{\mu_{in}n_i\nu_{in}}$ est donné par :

$$\overline{\mu_{in}n_i\nu_{in}} = \sum_{n\in[\mathrm{H},\mathrm{H}_2,\mathrm{He}]}\sum_i \mu_{ni}n_n n_i\langle\sigma\mathrm{v}\rangle_{in} \tag{2.21}$$

Le taux de collisions $\langle\sigma \mathrm{v}\rangle_{in}$ est calculée dans le modèle pour les paires ions-neutre de la Table 2.2 en utilisant les ajustements de Pinto & Galli (2008), où $\bar{v}$ est la vitesse moyenne relative entre les deux fluides, définie comme Draine (1980) :

$$\bar{\mathrm{v}} = \sqrt{\frac{8k_{\mathrm{B}}T}{\pi\mu_{in}} + \mathrm{v}_{in}^2} \tag{2.22}$$

avec $T_r = \frac{m_i T_n + m_n T_i}{m_i + m_n} = T$.

paire *ab*	$\langle\sigma \mathrm{v}\rangle_{in}$ (cm^3 s^{-1})
H-C$^+$	$1.74\times10^{-9}\times\bar{\mathrm{v}}^{0.2}$
H-H$^+$	$2.13\times10^{-9}\times\bar{\mathrm{v}}^{0.75}$
H-e^-	$2.50\times10^{-9}\times\bar{\mathrm{v}}^{1.20}e^{-\bar{\mathrm{v}}/460\,\mathrm{km\ s^{-1}}}$
H$_2$-HCO$^+$	$2.40\times10^{-9}\times\bar{\mathrm{v}}^{0.6}$
H$_2$-H$_3^+$	$2.00\times10^{-9}\times\bar{\mathrm{v}}^{0.15}$
H$_2$-e^-	$3.16\times10^{-11}\times\bar{\mathrm{v}}^{1.3}$
He-H$^+$	$1.48\times10^{-9}\times\bar{\mathrm{v}}^{-0.02}$
He-e^-	$7.08\times10^{-11}\times\bar{\mathrm{v}}$
H$_2$ – H$^+$	$1.4\times10^{-9}\times\bar{v}^{0.2}$

TABLE 2.2 – *Approximation analytique pour le terme $\langle\sigma \mathrm{v}\rangle_{in}$ pour certaines paires d'ion-neutre adoptés de Pinto & Galli (2008), où $\bar{\mathrm{v}}$ est exprimée en* km s^{-1}.

Pour les autres paires ions-neutres on utilise la même relation que Garcia et al. (2001a) :

$$\langle\sigma \mathrm{v}\rangle_{in} = \max\left(2.41\pi e\sqrt{\frac{\alpha_n}{\mu_{in}}};\ \sigma_s\bar{\mathrm{v}}\right) \tag{2.23}$$

Dans cette relation, le premier membre de la parenthèse correspond à la section efficace $\langle\sigma \mathrm{v}\rangle_{in}$ exprimée par Osterbrock (1961) où α_n est la polarisabilité de H, H_2 ou He donnée par la table ci contre.

espèce	α_n (cm^3)
H	6.67×10^{-25}
He	2.07×10^{-25}
H_2	8.04×10^{-25}

Dans le second terme $\sigma_s = 10^{-15}$ cm^{-2} est la section efficace géométrique typique d'un ion, supposée identique pour tous les ions. On note que $\langle\sigma \mathrm{v}\rangle_{in}$ est une fonction de $\bar{v}$, qui dépend de la vitesse de dérive ions-neutres v_{in}.

Collisions neutres-PAH et grains chargés

Pour les collisions entre les neutres et les PAH$^\pm$ ou les grains$^\pm$, on utilise une relation similaire à l'expression (2.21), avec un $\langle\sigma \mathrm{v}\rangle$ associé calculé selon l'expression (2.23), mais en remplaçant σ_s par 10^{-14} cm^{-2} pour les PAHs, et par la section géométrique efficace des grains, pour les grains. Ce terme joue un rôle important à la base du jet où les échanges de quantité de mouvement entre les PAHs chargés et le gaz moléculaire sont dominant (Panoglou et al. 2012).

Collisions électrons-ions

Le terme d'échange total de quantité de mouvement entre les électrons et les ions est :

$$\vec{F}_{ie} = \overline{\mu_{ei} n_e \nu_{ei}}\vec{\mathrm{v}}_{ie}$$

où,

$$\overline{\mu_{ei} n_e \nu_{ei}} = m_e n_e n_i \langle\sigma \mathrm{v}\rangle_{ei}$$

ce terme intervient dans l'expression de la résistivité électrique qui intervient dans la loi d'Ohm généralisée.

$\langle\sigma v\rangle_{ei}$ est adapté de de Pinto & Galli (2008) entre des espèces simplement chargées et les électrons :

$$\langle\sigma v\rangle_{ei} = \frac{16}{3}\sqrt{\frac{\pi}{m_e}}\frac{e^4}{(2k_B T_{ei})^{3/2}}\ln(\Lambda_{ei})$$

où Λ_{ei} est le facteur de Coulomb,

$$\Lambda_{ei} = \frac{3}{2e^3}\sqrt{\frac{k_B^3 T_{ei}^2 T_e}{\pi m_e}}$$

et où $T_{ei} = \frac{m_e T_e + m_i T_i}{m_e + m_i} = T$.

II.3 Vitesses de dérive

Les vitesses de dérives entre les différents fluides jouent un rôle important dans la loi d'Ohm généralisée caractérisant les dissipations dans l'écoulement MHD du vent de disque.

Vitesse de dérive ions-électrons

Le courant électrique dans l'écoulement est :

$$\vec{J} = \overline{q_i} n_i \vec{v}_i - e n_e \vec{v}_e$$

La vitesse de dérive ions-électrons peut être exprimée à partir de la neutralité de l'écoulement ($q_i n_i = e n_e$) comme :

$$\vec{v}_{ie} = \frac{\vec{J}}{e n_e} \tag{2.24}$$

En additionnant les équations (2.16), (2.17) et (2.18), on obtient l'équation (2.3). Puis en multipliant (2.18) par ρ/ρ_n et en supposant que $\vec{v}_n \simeq \vec{v}$, et $\vec{\nabla}P$ et $\vec{\nabla}P_n$ négligeable devant la force de Lorentz (ce qui est vrai dans le jet), alors la force de Lorentz agissant sur le fluide moyen vérifie :

$$\frac{1}{c}\vec{J}\wedge\vec{B} = (1+X)(\vec{F}_{in} + \vec{F}_{en}) \tag{2.25}$$

où l'on pose $X = \left(\frac{\rho_i}{\rho_n}\right)$.

Vitesse de dérive ions-neutres

En utilisant l'expression de la force de Lorentz (2.25) et la définition de la force de friction (2.19), on obtient :

$$\frac{1}{c}\vec{J}\wedge\vec{B} = (1+X)\left(\overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}\vec{v}_{in} + \overline{\mu_{en} n_e \nu_{en}}\vec{v}_{en}\right)$$

avec $\vec{v}_{en} = \vec{v}_i - \vec{v}_n - \vec{v}_i + \vec{v}_e = \vec{v}_{in} - \vec{v}_{ie}$ on obtient :

$$\frac{1}{c}\frac{\vec{J}\wedge\vec{B}}{(1+X)} = (\overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}} + \overline{\mu_{en} n_e \nu_{en}})\vec{v}_{in} - \overline{\mu_{en} n_e \nu_{en}}\vec{v}_{en}$$

en posant $p = \frac{\overline{\mu_{en} n_e \nu_{en}}}{\overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}}$, et en utilisant la valeur de v_{ie} de l'équation (2.24), il vient :

$$\vec{\mathrm{v}}_{in} = \frac{1}{1+p}\left(\frac{\vec{J}\wedge\vec{B}}{c(1+X)\overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}} + p\frac{\vec{J}}{e n_e}\right) \tag{2.26}$$

En pratique, dans notre modèle, on trouve que le deuxième terme est négligeable, la vitesse de dérive ions-neutres peut être approximée par :

$$\vec{\mathrm{v}}_{in} \simeq \frac{\vec{J}\wedge\vec{B}}{c(1+X)\overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}} \tag{2.27}$$

On note ici que la vitesse de dérive ions-neutres dépend de la fréquence de collisions ν_{in}, et comme la fréquence de collisions ions-neutres ν_{in} est dépendante de la vitesse de dérive $\vec{\mathrm{v}}_{in}$ au travers de $\overline{\mathrm{v}}$ (équation (2.22)). Il nécessaire d'itérer pour calculer $\vec{\mathrm{v}}_{in}$ en chaque point de la ligne d'écoulement.

Contrainte sur la vitesse de dérive ions-neutres

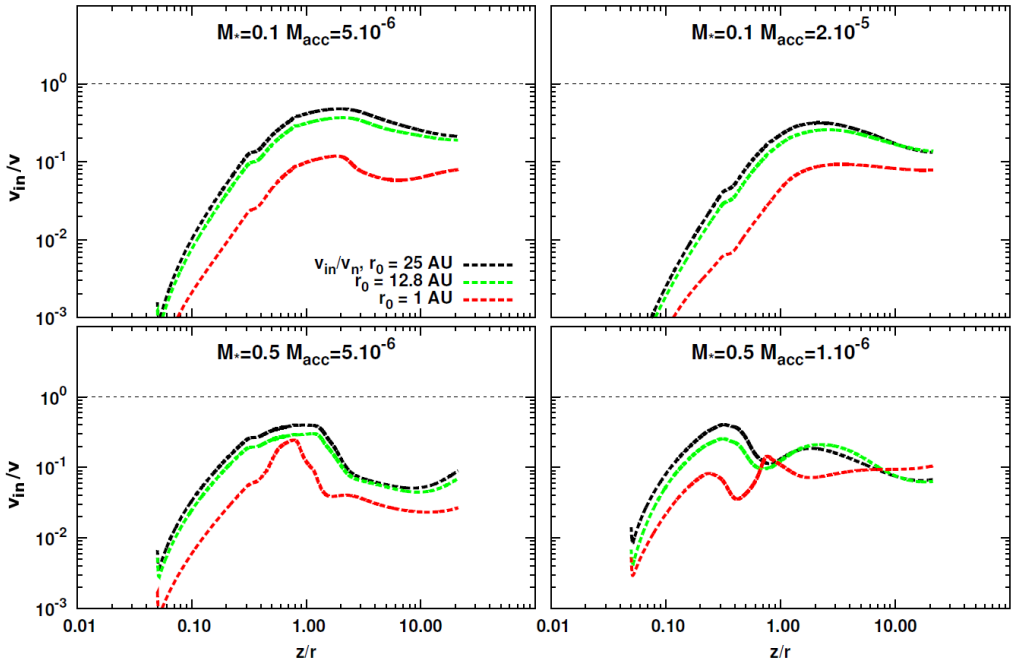


FIGURE 2.9 – *Rapport* $\mathrm{v}_{in}/\mathrm{v}$ *(axe vertical) entre la vitesse de dérive ions-neutres* v_{in} *et la vitesse barycentrique* v *en fonction de la coordonnée* z/r *le long de la ligne d'écoulement lancée à* $r_0 = 25$ UA *en noir,* $r_0 = 12.8$ UA *en vert et* $r_0 = 1$ UA *en rouge pour les différents objets de classe 0 et de classe I. Pour toute la suite, dans les figures on notera le taux d'accrétion* $\dot{M}_{\mathrm{acc}}$ *par* $\mathrm{M}_{\mathrm{acc}}$.

La solution MHD est calculée en supposant que l'on peut décrire la dynamique du système par un seul fluide. Ce qui suppose que le fluide est suffisamment collisionnel pour que les vitesses de dérive entre les différents fluides soient petites devant la vitesse barycentrique : $\|\vec{\mathrm{v}}_{in}\| \ll \|\vec{\mathrm{v}}\|$. On devra vérifier *a posteriori* que c'est bien le cas. La Figure 2.9 montre le rapport entre la vitesse de dérive et la vitesse du fluide. Ceci montre que cette hypothèse est relativement bien vérifiée pour les lignes d'écoulement internes ($r_0 \lesssim 10$ UA). Alors que pour des r_0 plus grand, cette hypothèse approche de sa limite. Néanmoins, pour toutes les lignes d'écoulement calculées dans la suite ($r_0^{\max} = 25$ UA), cette hypothèse reste acceptable.

Vitesse des électrons, des ions et des neutres

La vitesse des neutres est :

$$\vec{v}_n = \vec{v} - \frac{X}{1+X}\vec{v}_{in} \tag{2.28}$$

La vitesse des ions est :

$$\vec{v}_i = \vec{v}_{in} + \vec{v}_n = \vec{v} + \frac{\vec{v}_{in}}{1+X} \tag{2.29}$$

La vitesse des électrons est :

$$\vec{v}_e = \vec{v}_i - \vec{v}_{ie} = \vec{v} - \frac{\vec{J}}{en_e} + \frac{\vec{v}_{in}}{1+X} \tag{2.30}$$

II.4 Loi d'Ohm généralisée

La loi d'Ohm généralisée permet de caractériser les plasmas et fluides partiellements ionisés. Et ainsi d'établir une relation entre les courants générés et la dissipation locale de l'énergie électromagnétique. L'expression de la loi d'Ohm généralisée permet d'aboutir au terme de chauffage MHD comprenant le chauffage par diffusion ambipolaire et le chauffage par effet Ohm.

En reprenant l'équation de la conservation de la quantité de mouvement pour les électrons (2.16) en remplaçant $\vec{v}_e$ par $\vec{v} - (\vec{v} - \vec{v}_e) = \vec{v} - (\vec{v} - \vec{v}_i) - \vec{v}_{ie}$, et en supposant $\rho_e = 0$ dans (2.16) :

$$\vec{E} + \frac{\vec{v} - (\vec{v} - \vec{v_e})}{c} \wedge \vec{B} = -\frac{\vec{\nabla} P_e}{en_e} + \frac{1}{en_e}(\overline{\mu_{ie} n_i \nu_{ie}}\vec{v}_{ie} + \overline{\mu_{ne} n_n \nu_{ne}}\vec{v}_{ne})$$

Dans cette expression et on remplace $\vec{v} - \vec{v}_e$ par son expression (2.30) et $\vec{v}_{ne}$ par $\vec{v}_{ie} - \vec{v}_{in}$. On obtient :

$$\begin{aligned}\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \wedge \vec{B} = {} & \frac{\overline{\mu_{ie} n_i \nu_{ie}} + \overline{\mu_{ne} n_n \nu_{ne}}}{(en_e)^2}\vec{J} - \frac{\left(\vec{J} \wedge \vec{B}\right) \wedge \vec{B}}{c^2(1+X)^2 \overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}} \\ & - \frac{\vec{\nabla} P_e}{en_e} + \frac{\vec{J} \wedge \vec{B}}{cen_e} - \frac{1}{c(1+X)en_e} \times \frac{\overline{\mu_{ne} n_n \nu_{ne}}}{\overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}}\vec{J} \wedge \vec{B}\end{aligned} \tag{2.31}$$

On définit la résistivité électrique η :

$$\eta = \frac{\overline{\mu_{ie} n_i \nu_{ie}} + \overline{\mu_{ne} n_n \nu_{ne}}}{(en_e)^2} = \frac{1}{\sigma} \tag{2.32}$$

la résistivité est l'inverse de la conductivité σ. Elle est due aux collisions entre les électrons et les ions ou les neutres. La loi d'Ohm généralisée est :

$$\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \wedge \vec{B} = \eta\vec{J} - \frac{(\vec{J} \wedge \vec{B}) \wedge \vec{B}}{c^2(1+X)^2 \overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}} - \frac{\vec{\nabla} P_e}{en_e} + \frac{\vec{J} \wedge \vec{B}}{cen_e} \tag{2.33}$$

Le premier terme à droite décrit l'effet Ohm, le deuxième terme décrit la diffusion ambipolaire. Le troisième terme en $\vec{\nabla} P_e$ décrit la génération de courants diffusifs dus au gradient de pression des électrons. Le quatrième terme est associé à l'effet Hall. Le chauffage MHD provient des deux premiers termes (voir Chapitre 4, section II.4).

Modélisation

Chapitre

3

Processus radiatifs, chimie, photodissociation, grains et conditions initiales

Sommaire

I Champ de rayonnement stellaire, UV et X . . . 37
I.1 Rayonnement UV de l'étoile . . . 37
I.2 Rayonnement issu du choc d'accrétion . . . 38
I.3 Extinction par les poussières . . . 40
I.4 Champ de rayonnement X et rayons cosmiques . . . 41
I.4-1 Interaction du rayonnement X avec le gaz . . . 41
I.4-2 Flux du rayonnement X . . . 42
I.4-3 Ionisation par les X . . . 43
II Propriétés des poussières . . . 44
II.1 Distribution en taille des poussières, propriétés géométriques . . . 44
II.2 Propriétés optiques . . . 45
III Température des poussières . . . 46
III.1 Equilibre radiatif . . . 46
III.2 Rayon de sublimation . . . 46
III.3 Température des poussières . . . 47
III.3-1 Paramètres initiaux . . . 47
III.3-2 Distribution de densité dans l'enveloppe de poussière . . . 48
III.3-3 Opacité totale τ_0 . . . 49
III.4 Profil de température des poussières . . . 50
IV Processus chimiques . . . 51
V Conditions initiales : abondances des espèces à la surface du disque d'accrétion . . . 52
V.1 Adsorption sur les grains . . . 53
V.2 Désorption . . . 54
V.2-1 Érosion des manteaux des grains par collisions avec les particules neutres du gaz . . . 54
V.2-2 Désorption induite par les rayons cosmiques . . . 55
V.2-3 Photodesorption par les UV stellaires . . . 55
V.2-4 Photodesorption par les photons secondaires . . . 56
V.2-5 Désorption thermique . . . 56
V.2-6 Conclusion . . . 57
V.3 Conditions initiales . . . 59
VI Composition chimique dans le vent de disque . . . 61
VI.1 Photodissociation de H_2 et de CO . . . 61

VI.1-1 Photodissociation de H_2 . . . 61
VI.1-2 Photodissociation de CO . . . 62
VI.2 Ecrantage, calcul de la densité de colonne . . . 63
VI.3 Discrétisation en r_0 . . . 65
VI.4 Résultats . . . 66
VI.4-1 Cas de H_2 . . . 66
VI.4-2 Cas de CO . . . 69
VI.4-3 Densités de colonne totale . . . 70
VI.5 Température du gaz . . . 72
VI.6 Ionisation . . . 73
VI.7 Abondances des espèces moléculaires . . . 74
VII **Conclusion** . . . 77

Résumé : ***Ce chapitre présente les propriétés des champs de rayonnements UV et X issus de la protoétoile, les propriétés des poussières et la nouvelle méthode adoptée pour le calcul de leur température. Le réseau des réactions chimiques est présenté. Dans celui-ci nous nous sommes intéressé au cas particulier de la photodissociation de*** H_2 ***et de*** CO ***pour lesquelles nous avons développé une nouvelle méthode d'estimation de la densité colonne de molécules, sur la ligne de visée, responsables de l'écrantage. Dans le cadre des processus gaz-grains, nous abordons le problème des abondances des espèces à la surface des manteaux des grains. Enfin nous présentons notre méthode de calcul des abondances chimiques initiales à la base du jet et les résultats obtenus pour quelques molécules.***

Introduction Les équations de la MHD idéale dépendantes du temps permettent de décrire la dynamique dans le jet (voir Chapitres2 et 4). À celles-ci s'ajoutent des équations qui décrivent la structure thermique, l'ionisation et la composition chimique. La densité $n_{\rm H}$, l'extinction A_V, la vitesse $\vec{v}$, la température du gaz et des poussières T_d varient le long des lignes d'écoulement. En particulier, à cause du chauffage ambipolaire le gaz peut atteindre des températures de l'ordre de quelques milliers de Kelvin.

Le temps passé par la matière le long des lignes d'écoulement est court devant les temps caractéristiques chimiques habituels. Le long d'une ligne d'écoulement les abondances chimiques sont le plus souvent éloignées de leur état d'équilibre. En conséquence, la composition chimique du gaz le long de ces lignes d'écoulement dépend fortement des abondances initiales des espèces chimiques à la surface du disque.

Le rayonnement UV et X de l'étoile joue un rôle important à la fois dans les processus chimiques au travers des réactions de photodissociation et de photoionisation, ainsi que dans les processus de chauffage du gaz dans le vent de disque directement exposé au rayonnement.

Ce chapitre détaille le champ de rayonnement, les propriétés des poussières, introduit la chimie et aborde la problématique des conditions initiales. Ce chapitre détaille aussi le changement effectué au cours de mon travail de thèse sur la détermination de la température des poussières et ses implications sur la température du gaz, ainsi sur que la détermination des conditions initiales.

I Champ de rayonnement stellaire, UV et X

Les champs de rayonnement UV et X interagissent avec la matière dans le vent de disque (photoionisation, photodissociation). Le rayonnement a le temps de modifier significativement la structure chimique du gaz lors de son élévation dans le jet. Des luminosités X typiques, telles qu'elles sont observées à proximité des étoiles en formation ($L_{\rm X} \simeq 10^{30}\,{\rm erg\,s^{-1}}$) peuvent ioniser les parties les plus internes du jet. Dans les parties plus externes, où le champ de rayonnement X a été suffisamment atténué, les UV dominent les photoréactions.

I.1 Rayonnement UV de l'étoile

Le traitement du transfert radiatif est celui de Garcia et al. (2001b) : le rayonnement est absorbé par la poussière dans la matière éjectée du disque et se dilue avec la distance, ainsi en coordonnées sphériques dans un plan $\phi = 0$:

$$4\pi I_\nu(R) = \frac{L_\nu}{4\pi R^2} e^{-\tau_\nu(R)} = F_\nu(R) e^{-\tau_\nu(R)}$$

où R est ici le rayon sphérique, $F_\nu(R)$ est le flux de rayonnement total non atténué émis par l'étoile et les chocs d'accrétion, τ_ν est l'opacité sur la ligne de visée jusqu'à l'étoile due à la présence de gaz et de poussières et I_ν est l'intensité spécifique à la fréquence ν, à la distance R de l'étoile. Avec

$$F_\nu(R) = \frac{L_\nu}{4\pi R^2}$$

L'étoile centrale est assimilée à un corps noir de température effective $T_\star$. Ainsi le flux non atténué perçu de ce corps noir à une distance R est :

$$F_{\mathrm{hs},\nu}(R) = \pi\left(\frac{R_\star}{R}\right)^2 B_\nu(T_\star) \quad [\mathrm{erg\,cm^{-2}\,s^{-1}\,Hz^{-1}}] \tag{3.1}$$

où $R_\star$ est la rayon de l'étoile et $B_\nu(T_\star)$ la fonction de Planck. Le facteur de dilution est l'angle solide sous lequel l'étoile est vue à la distance R. La luminosité de l'étoile est :

$$L_{\star,\nu} = 4\pi R_\star^2 \times \pi B_\nu(T_\star)$$

Néanmoins ce seul corps noir ne peut pas expliquer les excès d'émission observés en proche infrarouge et dans l'ultraviolet (Bouvier et al. 1995). Il est nécessaire de faire intervenir une source supplémentaire due à l'interaction entre la photosphère de l'étoile et le disque d'accrétion.

I.2 Rayonnement issu du choc d'accrétion

Les observations des étoiles T-Tauri semblent valider le mécanisme d'accrétion magnétosphérique (Bouvier et al. 2007; Bouvier & Appenzeller 2007) qui fait intervenir le champ magnétique à la surface de la jeune étoile dont la topologie peut être complexe. Ce mécanisme est associé à la présence d'une cavité de quelques rayons stellaires à l'intérieur de la magnétosphère de l'étoile, à la troncature du disque d'accrétion, et à l'existence de colonnes d'accrétion où le plasma ionisé est canalisé par les lignes du champ magnétique (comme illustré par la Figure 3.1) de l'étoile et tombe en chute libre vers sa surface où il produit un choc d'accrétion. Ces chocs d'accrétion produisent des points chauds (*hot spots*) à la surface de l'étoile, plus chauds que le reste de la photosphère. Il existe aussi d'autres indices observationnels pour que ce mécanisme soit aussi valide pour une plus large gamme d'objets allant des naines brunes aux étoiles de Herbig Ae/Be (Muzerolle et al. 2005, 2004).

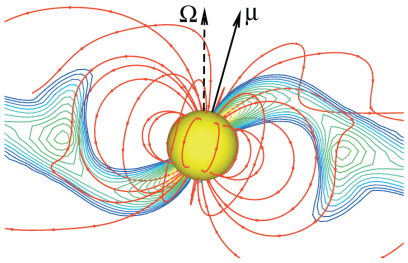


Figure 3.1 – *Exemple de colonne d'accrétion (Funnels) modélisé par Romanova et al. (2004) avec ici un décalage entre l'axe du pôle magnétique de l'étoile et son axe de rotation, ce qui n'est pas le cas dans notre modèle. Les chocs d'accrétion se développent à la surface de l'étoile. Les lignes de champs magnétique sont tracées en rouge et les isocontours qui varient du bleu au vert tracent la densité du gaz.*

Du fait de la rotation de l'étoile, la présence des chocs d'accrétion induit des variations dans les courbes de luminosité de l'étoile (Bouvier et al. 1999). Les prédictions des modèles d'accrétion magnétosphérique sont en accord avec les observations spectrales optiques et des excès observés dans le domaine UV. Elles suggèrent que le choc d'accrétion couvre environ 1% de la surface de l'étoile (Bouvier et al. 1995). Cette proportion peut augmenter avec le taux d'accrétion (Gullbring et al. 2000). Le modèle se place dans le cas d'une approche simplifiée des processus d'accrétion magnétosphérique. Le choc d'accrétion peut être représenté par un corps noir à la température $T_{\mathrm{hs}} = 10^4$ K, choisie de manière à reproduire les observations de l'excès UV des étoiles de type T Tauri (Johns-Krull et al. 2000). Le flux non atténué issu de ces chocs d'accrétion est :

$$F_{\mathrm{hs},\nu}(R) = g_{\mathrm{hs}}\pi\left(\frac{R_\star}{R}\right)^2 B_\nu(T_{\mathrm{hs}}) \tag{3.2}$$

où $g_{\rm hs}$ est un facteur géométrique représentant la fraction de l'étoile couverte par le choc d'accrétion. Pour simplifier on suppose que le flux émis est uniformément réparti à la surface de l'étoile et avec une luminosité égale à la luminosité d'accrétion (une moitié de chaque côté du disque) :

$$L_{\rm hs} = \frac{1}{2} L_{\rm acc} = \frac{G M_\star \dot{M}_{\rm acc}}{2 R_\star}$$

où $M_\star$ est la masse de l'étoile, $\dot{M}_{\rm acc}$ est le taux d'accrétion. Ainsi :

$$g_{\rm hs} = 0.03225 \frac{M_\star}{0.5 {\rm M}_\odot} \frac{\dot{M}_{\rm acc}}{10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}} \left(\frac{3 {\rm R}_\odot}{R_\star}\right)^3 \left(\frac{10^4\,K}{T_{\rm hs}}\right)^4 \tag{3.3}$$

Le flux émis ne dépend ainsi que de la masse de l'étoile et du taux d'accrétion.

TABLE 3.1 – *Propriété des sources du champ de rayonnement dans les différentes classes.*

Type	$M_\star$ ($M_\odot$)	$\dot{M}_{\rm acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})	$T_\star$ (K)	$T_{\rm hs}$ (K)	$g_{\rm hs}$
Classe 0	0.1	2×10^{-5}	4000	10^4	0.12900
		5×10^{-6}	4000	10^4	0.03225
Classe 1	0.5	5×10^{-6}	4000	10^4	0.16125
		1×10^{-6}	4000	10^4	0.03225
Classe 2	0.5	1×10^{-7}	4000	10^4	0.00323

◃ la table ci-contre présente les valeurs des paramètres $M_\star$, $\dot{M}_{\rm acc}$, $T_\star$, $T_{\rm hs}$ et $g_{\rm hs}$ utilisés dans les différents modèles présentés par la suite. Les paramètres supplémentaires, comme la luminosité de l'étoile et du choc d'accrétion, sont récapitulés en section III.3-1.

Ainsi le flux total émi par l'objet central est la somme des deux contributions : étoile et choc d'accrétion :

$$F_\nu(R) = F_{\star,\nu}(R) + F_{{\rm hs},\nu}(R) \tag{3.4}$$

Ce flux est exprimé en erg cm^{-2} s^{-1} Hz^{-1}. Ce flux est calculé dans les unités de Draine (Draine 1978) (dans l'intervalle 5-13.6 eV), qui correspond à un flux de 8.31 $\times10^6$ photons cm^{-2}s^{-1}eV^{-1} à 1000 Å (12.4 eV). Le flux de photons peut être exprimé sous forme polynômiale en cm^{-2} sr^{-1} s^{-1} eV^{-1} :

$$N_E^{Draine} = 1.658\times10^6 \frac{E}{\rm eV} - 2.152\times10^5 (\frac{E}{\rm eV})^2 + 6.919\times10^3 (\frac{E}{\rm eV})^3$$

Ce qui donne un flux UV d'énergie sur 4π stéradians de :

$$F_E^{Draine} = 4\pi h \nu N_E \quad [{\rm erg\,cm^{-2}\,s^{-1}\,eV^{-1}}]$$

ce flux peut être converti en Hz^{-1} en utilisant la relation :

$$F_E^{Draine} {\rm d}E({\rm eV}) = F_\nu {\rm d}\nu({\rm Hz})$$

de cette manière on obtient :

$$F_\nu^{Draine} = 4\pi h \left(1.658\times10^6 \left(\frac{h}{d}\right)^2 \nu^2 - 2.152\times10^5 \left(\frac{h}{d}\right)^3 \nu^3 + 6.919\times10^3 \left(\frac{h}{d}\right)^4 \nu^4\right) \tag{3.5}$$

où $d = 1.602\times10^{-12}$ erg eV^{-1}. Le flux de l'étoile est normalisé au flux de Draine à 1000 Å, $F_{\rm UV}^{Draine} = F_\nu^{Draine}(1000\,{\rm Å}) = 8.48\times10^{-18}$ erg cm^{-2} s^{-1} Hz^{-1}. Dans la suite on utilise le paramètre χ pour quantifier le flux UV local et s'exprimant comme le rapport entre le flux UV dans le vent de disque et le flux de Draine à 1000 Å,

$$\chi = \frac{F_\nu(1000\,{\rm Å})}{F_{\rm UV}^{Draine}} \tag{3.6}$$

On fait le choix d'une normalisation *monochromatique* du flux à 1000 Å plutôt que le rapport au flux interstellaire moyenné entre 910 Å et 2066 Å, G_0, car les photoréactions qui contribuent principalement aux réactions d'ionisation et de dissociation dans notre modèle (C, S, CH^+, H_2, CO) se produisent dans un intervalle plus restreint entre 910 Å et 1200 Å.

I.3 Extinction par les poussières

Les poussières obscurcissent le rayonnement X et UV provenant de l'étoile, Les photons UV et visibles sont diffusés et absorbés par les poussières. L'opacité (ou profondeur optique τ_ν) permet de quantifier l'extinction d'une colonne densité de gaz depuis la distance R_1 de l'étoile, jusqu'au point local à la distance R courante sur la ligne de visée :

$$\tau_\nu(R) = \int_{R_1}^{R} k_\nu(R')\mathrm{d}R'$$

et k_ν est le coefficient d'extinction (diffusion + absorption) dépendant des conditions à la distance R de l'étoile.

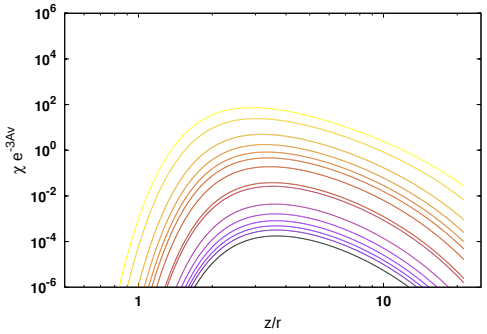


Figure 3.2 – *Flux UV atténué dans les unités de Draine χe^{-3A_v} en fonction de z/r pour toutes les lignes d'écoulement du modèle de classe 0 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$ (du jaune $r_0 = R_{\rm sub}$ au noir $r_0 = 25$ UA). L'échelle verticale va de 10^{-6} à 10^6 par 10.*

L'évolution de la luminosité le long de la ligne de visée est donnée par l'équation du transfert :

$$\frac{\mathrm{d}I_\nu(R)}{\mathrm{d}R} = -k_\nu I_\nu(R)$$
$$I_\nu(R) = I_\nu(R_1)e^{-\tau_\nu(R)}$$

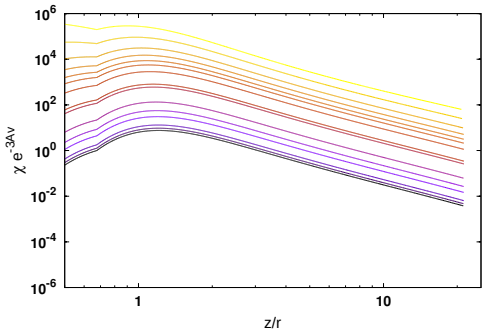


Figure 3.3 – *Flux UV atténué, χe^{-3A_v} en fonction de z/r pour toutes les lignes d'écoulement du modèle de classe 1 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 1\times10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$.*

Le modèle n'inclut que l'absorption des photons. La diffusion de Mie (dont la diffusion de Rayleigh est le cas limite aux très petites particules) et la diffusion Raman ne sont pas prises en compte : d'une part l'effet de la diffusion Raman est négligeable devant celui de la diffusion de Rayleigh et d'autre part, dans le domaine de longueur d'onde qui nous intéresse ($\sim$ 1000-10 000 Å) le rapport entre le nombre de photons diffusés sur le nombre de photons absorbés par les poussières devient très faible $\ll 10^{-3}$.

Les grains sont supposés être des sphères de rayon a. La densité numérique des poussières est notée n_d. La section efficace totale d'extinction (absorption) σ_ν à la fréquence ν pour un grain de taille a est reliée à la section efficace géométrique des poussières par le facteur d'efficacité, Q_ν :

$$\sigma_\nu = Q_\nu \times \pi a^2 \tag{3.7}$$

L'extinction totale dépend donc de la distribution de taille adoptée pour les grains qui est détaillée en section II.

Le champ de rayonnement est atténué par le facteur $e^{-\beta A_\nu}$ où A_ν est l'extinction visuelle donnée par la relation (3.16) : $A_\nu(R,\theta,\nu) = \sigma_{a,\mathrm{H}}(\nu)\mathcal{N}_\mathrm{H}(R,\theta)$, et β est un paramètre traduisant l'écrantage d'une espèce contre le rayonnement UV dissociant

La valeur de ce paramètre dépend de l'espèce considérée ; $\beta = 3$ est le facteur d'atténuation pour la photoionisation du carbone atomique.

On quantifie l'atténuation du champ de rayonnement par la quantité $\chi e^{-\beta A_\nu}$. Les Figures 3.2, 3.3 et 3.4 montrent le flux atténué pour les trois classes d'objet 0,1 et 2 respectivement. Le flux de la classe 1 avec $\dot{M}_\mathrm{acc} = 5\times10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$ est inférieur à celui de la classe 1 avec $\dot{M}_\mathrm{acc} = 10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$ de la Figure 3.3 d'un facteur ~100.

L'extinction A_ν le long d'une ligne d'écoulement lancée à 1 UA pour les différentes classes est présenté en Figure 3.5.

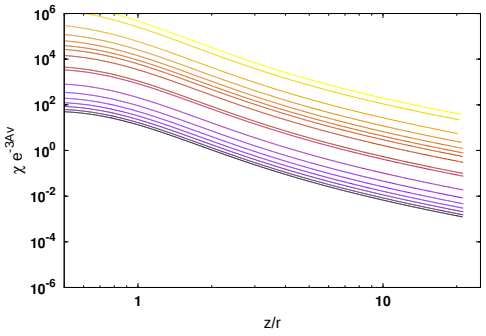


FIGURE 3.4 – *Flux UV atténué, χe^{-3A_ν} en fonction de z/r pour toutes les lignes d'écoulement du modèle de classe 2 avec $\dot{M}_\mathrm{acc} = 1\times10^{-7}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$.*

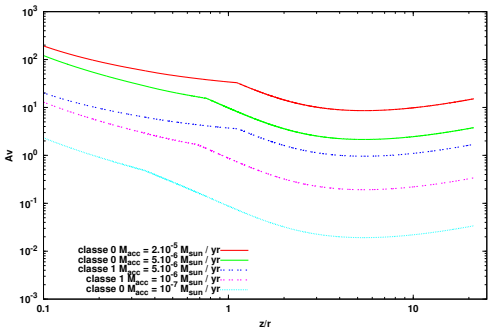


FIGURE 3.5 – *Extinction visuelle A_ν pour les différents modèles de classe 0,1 et 2, à $r_0 = 1$ UA.*

I.4 Champ de rayonnement X et rayons cosmiques

I.4-1 Interaction du rayonnement X avec le gaz

Les rayons X sont émis par l'activité magnétique coronale à la surface de l'étoile et pénètrent dans le vent de disque où ils y déposent leur énergie. Les rayons X sont plus facilement absorbés par les éléments légers quand $h\nu_X < 200\,\mathrm{eV}$ et par les éléments lourds (Magnésium, Silicium, Calcium, Fer, Nickel), présents en phase gazeuse ou dans les grains, à plus haute énergie (Morrison & McCammon 1983). Lors de cette absorption le photon très énergétique ($E \sim 1$ KeV) éjecte un électron des couches électroniques les plus internes de l'atome (couche K) :

$$\mathrm{A} + x \rightarrow \mathrm{A}^+ + \mathrm{e}^-$$

Cet électron primaire emporte alors dans le gaz une énergie égale à l'énergie du photon incident moins l'énergie d'ionisation. Cette énergie emportée est très proche de l'énergie du photon incident.

Le modèle utilise la section efficace d'absorption du rayonnement X par les différents éléments calculés par Morrison & McCammon (1983). Cette section efficace dépend

de l'énergie du photon incident. L'Hydrogène et l'Hélium absorbent ainsi la majorité des photons X de basse énergie ($E < 200\,\mathrm{eV}$), les photons de plus haute énergie sont absorbés majoritairement par les éléments plus lourds ayant des sections efficaces plus importantes et qui sont concentrés dans les grains. Dans le cas des rayons X émis par les protoétoiles avec une énergie caractéristique autour de 4 keV, une part significative de ce rayonnement est absorbée directement par le gaz.

L'électron primaire éjecté interagit ensuite avec le gaz par différents processus :
- production d'électrons secondaires par collision avec les espèces du gaz et principalement H, H_2 et He. Ces électrons ont une énergie allant de $\sim 30\,\mathrm{eV}$ à 1 keV.
- Dissociation collisionnelle d'une molécule.
- Diffusions coulombiennes, entre les électrons thermiques et les électrons énergétiques (collisions élastiques). L'électron primaire perd son énergie cinétique, ce qui contribue à chauffer le milieu.
- Excitations collisionnelles et rotationnelles des molécules.

Les rayons cosmiques qui ont une énergie comprise entre 10 et 100 MeV ionisent H_2 et produisent des électrons secondaires ayant une énergie de $\sim 30\,\mathrm{eV}$ (Gredel et al. 1989). Leur effet est similaire à ceux des électrons secondaires produits par le rayonnement X. Les processus de chauffage dus aux rayons X et aux rayons cosmiques sont traités de manière identique. La manière dont le rayonnement X dépose son énergie dans le gaz et ionise ses espèces est adaptée des résultats de Dalgarno et al. (1999).

I.4-2 Flux du rayonnement X

Le spectre X adopté est un spectre thermique ayant une énergie caractéristique $k_\mathrm{B}T_X = 4\,\mathrm{keV}$ [1] (Güdel 2008) avec une coupure à 100 eV :

$$F_X(E) = \frac{\mathrm{d}L_X(E)}{\mathrm{d}E} = \frac{L_X}{k_\mathrm{B}T_X} e^{-E/(k_\mathrm{B}T_X)} \tag{3.8}$$

où L_X est la luminosité de la source X :

$$L_X = \int_{100\,\mathrm{eV}}^{\infty} F_X(E)\mathrm{d}E = 10^{30}\,\mathrm{erg\,s^{-1}}$$

typique des étoiles T Tauri (Wolk 2005).

Le taux de déposition d'énergie par le flux X atténué dans le gaz et par noyau d'hydrogène, au point (R,θ) est donné par (Shang et al. 2002) :

$$H_X(R,\theta) = \frac{1}{4\pi R^2} \int_{100\,\mathrm{eV}}^{\infty} F_X \sigma_{PE}(E) e^{-\tau_E(R,\theta)} \mathrm{d}E \tag{3.9}$$

où $\tau_E(R,\theta)$ est l'opacité :

$$\tau_E(R,\theta) = \sigma_{PE}(E)\mathcal{N}_\mathrm{H}(R,\theta)$$

avec :
– $\mathcal{N}_\mathrm{H}$ la densité de colonne totale de noyaux d'hydrogène sur la ligne de visée depuis la surface de la première ligne d'écoulement lancée à $r_0 = 0.07$ UA.

1. Faire varier $k_\mathrm{B}T_X$ entre 2.5 et 15 keV ne modifie pas significativement les résultats obtenus (Panoglou et al. 2012).

– $\sigma_{PE}(E)$ est la section efficace d'absorption photoélectrique à l'énergie E, approximée par Glassgold et al. (1997); Henke et al. (1993) :

$$\sigma_{PE}(E) = \sigma_{PE}(1\,\mathrm{keV})\left(\frac{1\,\mathrm{keV}}{E}\right)^{p}$$
$$\sigma_{PE,1\,\mathrm{keV}} = 2.27\times10^{-22}\,\mathrm{cm}^2$$

I.4-3 Ionisation par les X

Le taux d'ionisation dans le vent de disque a été adapté à partir des résultats de Glassgold et al. (1997); Shang et al. (2002); Dalgarno et al. (1999) pour la perte d'énergie des électrons dans différents mélanges gazeux H-H_2-He.

L'énergie moyenne de formation d'une paire d'ions $A^+ + e^-$ par ionisation de l'espèce A par le rayonnement X, $W(A)$, est définie comme étant le rapport entre l'énergie initiale de l'électron (E) et le nombre total d'ionisations produites $N_{ion}(A)$. Cette énergie est supposée ne pas varier avec le taux d'ionisation dans le gaz. W tend à être constant pour les grandes valeurs de E, mais augmente rapidement quand E se rapproche de l'énergie de coupure (100 eV). Cette énergie W pour un mélange de H, H_2 et de He a été ajustée par Dalgarno et al. (1999).

Pour un mélange d'hydrogène atomique et moléculaire avec 10% d'hélium, les énergies moyennes W pour former des paires d'ions avec H, H_2 et He sont ajustées par (Dalgarno et al. 1999) via les fonctions (dans la limite où l'énergie de l'électron incident est grande) :

$$W(H_2^+) = 41.9\,\mathrm{eV}\times\left(1+0.53\frac{n(H)}{n(H_2)}\right) \simeq 20\,\mathrm{eV}\frac{n_H}{n(H_2)}$$
$$W(H^+) = 39.8\,\mathrm{eV}\times\left(1+1.89\frac{n(H_2)}{n(H)}\right) \simeq 40\,\mathrm{eV}\frac{n_H}{n(H)}$$
$$W(He^+) = 470\,\mathrm{eV} \simeq 47\,\mathrm{eV}\frac{n_H}{n(He)}$$

Pour une espèce A, l'énergie moyenne de formation d'une paire d'ion peut s'écrire sous la forme :

$$W(A^+) = \frac{n_H}{n(A)}\epsilon_A$$

où ϵ_A est une énergie d'ionisation caractéristique. Cette énergie ϵ_A est le rapport entre H_X et le taux d'ionisation de l'espèce A dans le gaz :

$$\epsilon_A = \frac{H_X}{\zeta_X(A)}$$

Le taux d'ionisation d'une espèce A, par atome peut s'exprimer par :

$$\zeta_X(A) = \frac{n_H}{n(A)}\frac{H_X}{W(A^+)}$$

Le taux total d'ionisation par noyau d'hydrogène noté ζ_X est relié à ζ_{H_2} par :

$$\begin{aligned}\zeta_X &= \zeta_{H_2}\times\frac{0.5n(H)+n(H_2)+0.4n(He)}{n_H}\\ &= 0.54\zeta_{H_2}\end{aligned} \qquad (3.10)$$

ce taux est exprimé en s^{-1}. Un taux d'ionisation constant $\zeta_{CR}(H_2) = 5 \times 10^{-17}\,s^{-1}$ (Gredel et al. 1989), dû aux rayons cosmiques est ajouté au taux d'ionisation de H_2 par les X, ainsi $\zeta_{H_2} = \zeta_X(H_2) + \zeta_{CR}(H_2)$, mais l'effet des rayons cosmiques est négligeable devant celui des rayons X.

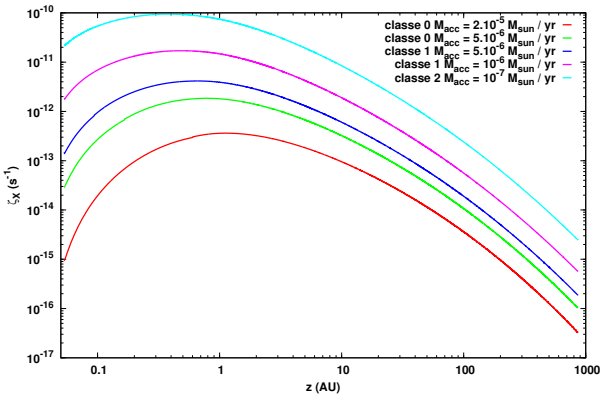


FIGURE 3.6 – *Taux d'ionisation ζ_X le long de la ligne d'écoulement ancrée à $r_0 = 1$ UA pour les 5 modèles réalisés*

Les taux d'ionisation des différentes espèces sont normalisés au taux d'ionisation de H_2, en conséquence :

$$\begin{aligned} \zeta_{H_2} &\simeq \frac{H_X}{20\,\mathrm{eV}} \\ \zeta_H &\simeq 0.5\zeta_{H_2} \\ \zeta_{He} &\simeq 0.4\zeta_{H_2} \end{aligned} \tag{3.11}$$

Le modèle inclut aussi l'ionisation dissociative de H_2 avec un taux égal à $\zeta_{H_2^+}/22$ (Dalgarno et al. 1999). Les taux de dissociation et d'ionisation de CO proviennent des travaux de Gredel et al. (1987) et de Gredel et al. (1989) pour les autres espèces.

II Propriétés des poussières

Le vent de disque emporte et accélère les poussières du disque (Safier 1993). La poussière joue alors un rôle important sur la structure thermique et chimique du gaz, elle est responsable de l'écrantage du rayonnement UV de l'étoile.

Les poussières dans le modèle de vent de disque sont composées d'un mélange de silicates et de graphites. Les grains sont supposés sphériques. La sédimentation et la coagulation des poussières dans le disque affectent surtout les régions proches du plan équatorial mais la distribution en taille à la surface reste peu affectée (Brauer et al. 2008; Schmitt et al. 1997). Puisque les lignes d'écoulement sont ancrées à proximité de la surface du disque, la distribution adoptée est la distribution MRN proposée par Mathis et al. (1977). Les propriétés optiques des grains ont été tabulées par Draine & Lee (1984); Draine & Malhotra (1993); Laor & Draine (1993) pour cette distribution. Les propriétés optique des grains sont constantes partout dans le jet. On ne traite ni la fragmentation, ni la coagulation. Dans le vent de disque, la présence des poussières est responsable de la déplétion d'éléments comme le Carbone, l'Oxygène, le Magnésium, le Silicium et le Fer et d'une partie des espèces chimiques qui peuvent être capturées dans les glaces (voir Table 3.3).

II.1 Distribution en taille des poussières, propriétés géométriques

La distribution en taille des poussières suit la distribution MRN, pour les silicates (S) et les graphites (G), avec a le rayon d'un grain et dn le nombre de grains dont la taille est

comprise dans l'intervalle $[a,\ a+\mathrm{d}a]$:

$$\mathrm{d}n_S = n_\mathrm{H} A_S\, a^{-3.5}\mathrm{d}a$$
$$\mathrm{d}n_G = n_\mathrm{H} A_G a^{-3.5}\mathrm{d}a$$

avec $A_s = 7.762\times10^{-26}\,\mathrm{cm}^{2.5}/\mathrm{H}$ et $A_g = 6.918\times10^{-26}\,\mathrm{cm}^{2.5}/\mathrm{H}$ (Mathis et al. 1977; Draine & Lee 1984), ces coefficients correspondent à l'abondance par rapport au nombre de noyaux d'hydrogène. Pour tous les grains : $\mathrm{d}n_d = \mathrm{d}n_G = n_\mathrm{H}(A_S + A_G)a^{-3.5}\mathrm{d}a$. Après intégration sur a entre les bornes a_min et a_max :

$$n_i = n_\mathrm{H} A_i \frac{a_\mathrm{min}^{-2.5} - a_\mathrm{max}^{-2.5}}{2.5} \quad i \in [G,\ S]$$
$$n_d = n_\mathrm{H}(A_S + A_G)\frac{a_\mathrm{min}^{-2.5} - a_\mathrm{max}^{-2.5}}{2.5}$$

la fraction de silicates est $f_S = n_S/n_d = \frac{A_S}{A_S+A_G} = 53\%$ et celle de graphites est $f_G = 47\%$. On peut décrire les fonctions de distribution en tailles correspondantes, par la densité de probabilité :

$$p_i(a) = \frac{\mathrm{d}n_i}{n_d} = \frac{2.5}{a_\mathrm{min}^{-2.5} - a_\mathrm{max}^{-2.5}} f_i a^{-3.5}\mathrm{d}a \quad i \in [G,\ S]$$
$$p(a) = \frac{\mathrm{d}n_d}{n_d} = \frac{2.5}{a_\mathrm{min}^{-2.5} - a_\mathrm{max}^{-2.5}} a^{-3.5}\mathrm{d}a$$

Les tailles de grain utilisées sont comprises dans l'intervalle $[0.005,\ 0.25]\mu$m. Sur cet intervalle, la variance est $\overline{a}^2 = 1.07\times10^{-4}\,\mu\mathrm{m}^2$, et le rayon moyen est $\overline{a} = 104\,$Å correspondant au volume moyen $4.66\times10^{-6}\,\mu\mathrm{m}^3$.

On en déduit la section efficace géométrique moyenne :

$$\sigma_d = \pi\overline{a}^2 = 3.37\times10^{-12}\,\mathrm{cm}^2 \tag{3.12}$$

$\sigma_d n_d$ est la surface de poussière par cm^{-3} de gaz. La section efficace géométrique par noyau d'hydrogène est :

$$\sigma_{d,\mathrm{H}} = \frac{\sigma_d n_d}{n_\mathrm{H}} = 1.37\times10^{-21}\,\mathrm{cm}^2 \tag{3.13}$$

II.2 Propriétés optiques

La profondeur optique liée aux poussières au point de coordonnées (R,θ) le long d'une ligne d'écoulement est :

$$\tau_\nu(R,\theta) = \int_{R_{min}}^{R} k_\nu(R',\theta)\mathrm{d}R'$$
$$\tau_\nu(R,\theta) = \sigma_\mathrm{H}(\nu)\int_{R_{min}}^{R} n_\mathrm{H}(R',\theta)\mathrm{d}R' = \sigma_\mathrm{H}(\nu)\mathcal{N}_\mathrm{H}(R,\theta)$$
$$\text{avec } \mathcal{N}_\mathrm{H}(R,\theta) = \int_{R_{min}}^{R} n_\mathrm{H}\mathrm{d}R' \tag{3.14}$$

où $\sigma_\mathrm{H}(\nu)$ est la section efficace moyenne d'aborption des poussières par noyau d'hydrogène ($\sigma_\mathrm{H}(\nu) \simeq 10^{-12}\,\mathrm{cm}^2$ pour $\lambda < 0.1\mu$m (Draine & Lee 1984)). La densité de

colonne de noyau d'hydrogène est donnée par (3.39). La section efficace d'absorption du rayonnement $\sigma_a(\nu)$ s'écrit :

$$\sigma_a(\nu) = \int_{a_{min}}^{a_{max}} \pi a^2 Q_{abs}(\nu, a) p(a) \mathrm{d}a = \pi \overline{a^2} \overline{Q_{abs}}(\nu) \tag{3.15}$$

où Q_{abs} est l'efficacité d'absorption d'un grain de rayon a à la fréquence ν et $p(a)$ est la densité de probabilité du nombre de grain de taille a. La section efficace des poussières par noyau d'hydrogène est $\sigma_{a,\mathrm{H}}(\nu) = \sigma_a(\nu) n_d / n_{\mathrm{H}}$.

L'extinction visuelle donnée par la profondeur optique A_v s'exprime par :

$$A_v(R, \theta, \nu) = \sigma_{a,\mathrm{H}}(\nu) \mathcal{N}_{\mathrm{H}}(R, \theta) \tag{3.16}$$

III Température des poussières

III.1 Equilibre radiatif

Dans l'approche de Panoglou et al. (2012) :
On supposait que les poussières étaient optiquement minces à leur propre rayonnement. Les poussières étaient uniquement chauffées par le champ de rayonnement de l'étoile. La température des grains T_d était obtenue en écrivant l'équilibre entre le rayonnement absorbé (étoile + choc d'accrétion) et le rayonnement émis (rayonnement de corps noir des poussières à la température T_d) intégré sur la distribution en taille des grains adoptée ainsi que sur toutes les fréquences :

$$4\pi\sigma_B T_d^4 \langle a^2 \rangle \times \langle Q_{em}(T_d) \rangle = \int_0^\infty \sigma_{a,\mathrm{H}}(\nu) F_\nu(R, \Theta) \times \exp(-\overline{\sigma_{a,\mathrm{H}}(\nu)} \mathcal{N}_{d,\mathrm{H}}(R, \Theta)) \mathrm{d}\nu \tag{3.17}$$

où $F_\nu(R, \Theta)$ est le flux de rayonnement non atténué de l'étoile et du choc d'accrétion, $\mathcal{N}_{\mathrm{H}}$ est la densité de colonne de noyaux d'hydrogène dans le vent de disque à l'extérieur du rayon de sublimation des poussières.
Et $\langle Q_{em}(T_d) \rangle$ correspond à l'efficacité d'émission des grains moyennée sur la distribution de Plank et intégrée sur la distribution de taille des grains :

$$\int_{a_{\min}}^{a_{\max}} \mathrm{d}a p(a) a^2 \int_0^\infty Q_{em}(\nu) \pi B_\nu(T_d) \mathrm{d}\nu = \langle Q_{em}(T_d) \rangle \sigma_B T_d^4 \langle a^2 \rangle$$

σ_B est la constante de Stefan-Boltzman. $\sigma_{a,\mathrm{H}}(\nu)$ est la section efficace d'absorption des poussières par noyau d'hydrogène. Enfin la valeur minimale de la température est de 10 K, qui est la température des poussières dans le disque.

Le chauffage et refroidissement par collisions avec le gaz est négligé car il ne devient important qu'à des densités supérieures à 10^{13} cm^{-3}.

III.2 Rayon de sublimation

Le rayon de sublimation (noté R_{sub}) est le rayon en deçà duquel les poussières se subliment et le milieu ne contient plus qu'une phase gazeuse. Cette surface de sublimation

est supposée sphérique. Le rayon de sublimation est obtenu à partir de l'équilibre thermique (3.17) que l'on résoud en fixant la température des poussières à la température de sublimation $T_d = T_{\rm sub} = 1500\,{\rm K}$:

$$4\pi\sigma_B T_{\rm sub}^4 \overline{r^2}\langle Q_{em}(T_{\rm sub})\rangle = \int_{r_{\rm min}}^{r_{\rm max}} \left(\int_0^\infty Q_{abs}(\nu, r) F_\nu(R_{\rm sub}) \right) \pi r^2 n(r) {\rm d}r \qquad (3.18)$$

Au rayon de sublimation l'opacité des poussières est nulle, $\mathcal{N}_{d,{\rm H}}(R_{\rm sub}, \Theta)) = 0$.

Classe	$M_\star$ ($M_\odot$)	$\dot{M}_{\rm acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})	$R_{\rm sub}$ UA
0	0.1	2×10^{-5}	0.38
0	0.1	5×10^{-6}	0.21
I	0.5	5×10^{-6}	0.42
I	0.5	1×10^{-6}	0.21
II	0.5	1×10^{-7}	0.11

◃ La table ci-contre donne les valeurs des rayons de sublimation correspondant aux différentes classes d'étoiles, masses et de taux d'accrétion associés.

Le modèle thermo-chimique ne considère que les lignes d'écoulement originaires de régions du disque situées à l'extérieur du rayon de sublimation [2] avec un rayon d'ancrage $r_0 \geq R_{\rm sub}$.

III.3 Température des poussières

III.3-1 Paramètres initiaux

Dans le modèle actuel, les poussières ne sont plus supposées être optiquement minces. On utilise le code **DUSTY** de transfert radiatif sur les poussières 1D (donc applicable à une distribution sphérique de poussières [3]) à l'équilibre (Ivezic & Elitzur 1997; Nenkova et al. 1999; Ivezic et al. 1999). Les paramètres de DUSTY caractérisant les propriétés de la distribution sphérique [4] de poussières sont les suivants :

- La densité des poussières est supposée suivre la même loi de densité en $\propto R^{-1.5}$ que le gaz dans le vent de disque (cf Chapitre 2). On se servira de l'expression de la densité d'une enveloppe en effondrement libre (free fall) pour l'exprimer.
- La même distribution MRN des poussières que celle utilisée dans le modèle de vent de disque, avec la même température de sublimation $T_{\rm sub} = 1500\,{\rm K}$.
- La distribution de poussières s'étend depuis le rayon de sublimation $R_{\rm sub}$ jusqu'à un rayon maximal fixé à $20\,000\times R_{\rm sub}$. Le paramètre permettant de dimensionner les échelles d'opacités et les échelles spatiales de la distribution est l'opacité radiale totale τ_0 définie à une longueur d'onde de référence λ_0.
- La distribution de poussières est illuminée et chauffée par deux corps noirs, le premier à 4 000 K ayant une luminosité $L_\star$, correspondant à la photosphère de l'étoile et le second à 10 000 K ayant une luminosité $L_{\rm hs}$, correspondant au choc d'accrétion sur l'étoile. La contribution respective de chacun de ces deux corps noirs au flux total dépend du taux d'accrétion.

2. la première kigne d'écoulement est ancrée à $r_0 = 0.07$ UA

3. Par abus de langage on pourra aussi qualifier cette distribution d'enveloppe de poussières, bien que ce ne soit pas réellement une enveloppe entourant la proto-étoile.

4. Distribution que l'on qualifiera aussi d'enveloppe par abus de langage, bien que le modèle ne tienne pas compte de l'enveloppe entourant la proto-étoile.

III.3-2 Distribution de densité dans l'enveloppe de poussière

On suppose dans ce modèle de poussière une distribution de densité en chute libre (Shu 1977). Dans une enveloppe sphérique en chute libre, la vitesse est :

$$\mathrm{v_{ff}}(R) = \sqrt{\frac{2GM_\star}{R}}$$

et on peut relier cette vitesse à la densité volumique de matière $\rho_{\mathrm{ff}}(R)$ au rayon R, au taux d'accrétion sur l'objet central :

$$\dot{M}_{\mathrm{acc}} = \rho_{\mathrm{ff}}(R)\mathrm{v_{ff}}(R)4\pi R^2$$

on en déduit :

$$\rho_{\mathrm{ff}}(R) = \frac{\dot{M}_{\mathrm{acc}}}{4\pi\sqrt{2GM_\star}} \times R^{-3/2} \tag{3.19}$$

où $\dot{M}_{\mathrm{acc}}$ est le taux d'accrétion et où $M_\star$ est la masse de l'objet central. La densité de noyaux d'hydrogène d'une enveloppe en chute libre est décrite par :

$$n_{\mathrm{ff}}(R) = \frac{\dot{M}_{\mathrm{acc}}}{4\pi 1.4 m_p\sqrt{2GM_\star}} \times R^{-1.5} \tag{3.20}$$

où m_p est la masse du proton.

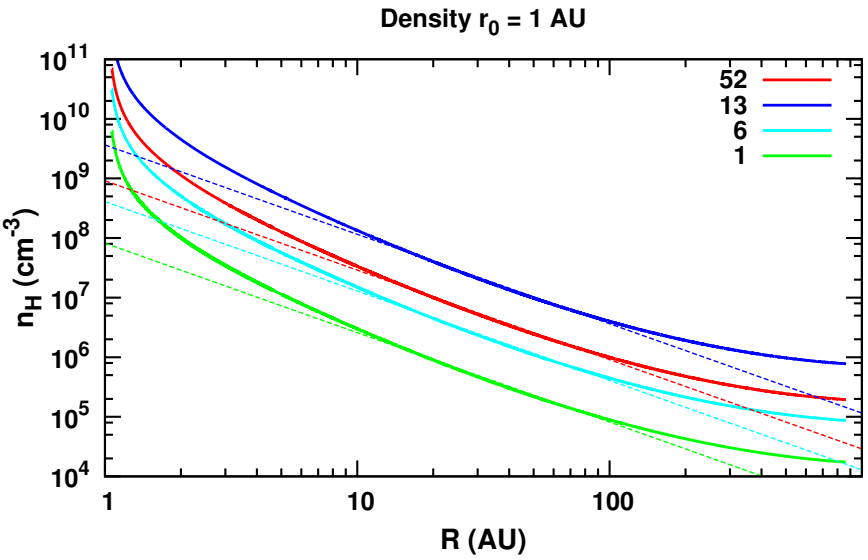


FIGURE 3.7 – *Densité n_{H} le long de la ligne d'écoulement à $r_0 = 1$ UA, pour les différents taux d'accrétions repérés par leur valeur τ_0, (en traits épais) comparée à la densité de l'enveloppe de poussière n_{env} utilisée (équation (3.21) en traits pointillés) pour les calculs de T_d avec DUSTY.*

On fait l'approximation que la densité n_{env} de l'enveloppe des poussières est proportionnelle à la densité de l'enveloppe en chute libre :

$$n_{env}(R) = \frac{1}{55} n_{\mathrm{ff}}(R) \tag{3.21}$$

Le facteur $1/55$ est choisi pour approximer la densité de la distribution de densité n_{env} par une loi 1D en $R^{-1.5}$ qui soit cohérente avec la densité $n_{\mathrm{H}}(R)$ le long de la ligne

d'écoulement. Cette approximation est illustrée sur la Figure 3.7, le long de la ligne d'écoulement. À titre d'exemple, dans le cas de la classe 0 augmenter τ_0 de 13 à 130 à pour effet d'augmenter $R_{\rm sub}$ de 0.31 UA à 0.34 UA et diminue la température des poussières de 10%.

III.3-3 Opacité totale τ_0

La distribution de densité peut être reliée analytiquement à l'opacité totale des poussières, paramètre utilisé par DUSTY, à une longueur d'onde de référence λ_0 :

$$\tau_\lambda(R) = \sigma_{a,\rm H}(\lambda_0) \times \int_{R_{\rm min}}^{R_{\rm max}} n_{\rm env}(r)\mathrm{d}r$$

La densité est intégrée depuis $R_{\rm sub}$ jusqu'à $R_{\rm max}$,

$$\tau_0 = \frac{1}{55}\sigma_{a,\rm H}(\lambda_0) \times \int_{R_{\rm sub}}^{R_{\rm max}} n_{\rm ff}(R)\mathrm{d}R$$

En introduisant $\dot{M}_{\rm acc}$, le taux d'accrétion sur l'étoile, on peut le sortir de l'intégrale, et cette expression s'intègre analytiquement :

$$\tau_0 = \frac{1}{55} \times \frac{\sigma_{a,\rm H}(\lambda_0)\dot{M}_{\rm acc}}{4\pi m_p \sqrt{2GM_\star}} \times \left[-2\,R^{-1/2}\right]_{R_{\rm sub}}^{R_{\rm max}}$$

En supposant $R_{\rm max} \gg R_{\rm sub}$, cette expression se simplifie

$$\tau_0 = \frac{1}{55} \times \frac{\sigma_{a,\rm H}(\lambda_0)\dot{M}_{\rm acc}}{2\pi m_p \sqrt{2GM_\star}} \times R_{\rm sub}^{-0.5}. \tag{3.22}$$

On choisit $\lambda_0 = 5500\,\text{Å}$ avec $\sigma_{a,\rm H}(5500\,\text{Å}) = 2.72 \times 10^{-22} cm^{-2}$. On peut exprimer cette relation en fonction des grandeurs utilisées comme paramètres du modèle :

$$\tau_0 = 13.4 \left(\frac{\dot{M}_{\rm acc}}{5\times10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}}\right)\left(\frac{M_\star}{0.1\,\mathrm{M_\odot}} \times \frac{R_{\rm sub}}{0.31\,\mathrm{UA}}\right)^{-0.5} \tag{3.23}$$

La détermination de τ_0 dépend du rayon de sublimation $R_{\rm sub}$, et inversement $R_{\rm sub}$ calculé par DUSTY dépend τ_0. D'où la nécessité d'itérer pour avoir un modèle auto-cohérent. Dans un premier temps τ_0 est calculé en supposant un rayon de sublimation calculé à partir de la relation (3.18). DUSTY renvoie un paramètre r_1 qui est le rayon de la surface interne de la distribution de poussières déterminée à partir de τ_0 tel que :

$$R_{\rm sub} = r_1 \times \sqrt{\frac{L_{\rm tot}}{10^4\,\mathrm{L_\odot}}}$$

Ce nouveau $R_{\rm sub}$ est injecté dans (3.23) pour obtenir un nouveau τ_0, ce qui permet de déduire un nouveau $R_{\rm sub}$ qui est comparé à l'estimation directe : r_1. En quelques itérations, les deux valeurs convergent. [5].

5. Il est aussi possible de déterminer le rayon de la phostophère de poussière,

$$R_p = \left(10^4 R_{\rm sub} - K\right)^{-2}$$

où

$$K = \frac{110\pi m_p \sqrt{2GM_\star}}{G\dot{M}_{\rm acc}}$$

TABLE 3.2 – *Paramètres DUSTY associés aux différents modèles utilisés.*

Modèle			Paramètres			
Classe	$\dot{M}_{\rm acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})	$M_\star$ ($M_\odot$)	τ_0	$R_{\rm sub}$ (UA)	$L_{\rm hs}$ ($L_\odot$)	$L_\star$ ($L_\odot$)
0	2×10^{-5}	0.1	52	0.63	10.5	2.1
0	5×10^{-6}	0.1	13	0.31	2.6	2.1
I	5×10^{-6}	0.5	6	0.64	13.1	2.1
I	1×10^{-6}	0.5	1.2	0.27	2.6	2.1
II	1×10^{-7}	0.5	0.12	0.15	0.5	2.1

◂ La table-ci contre donne les paramètres utilisés pour calculer les profils de température des les poussières.

III.4 PROFIL DE TEMPÉRATURE DES POUSSIÈRES

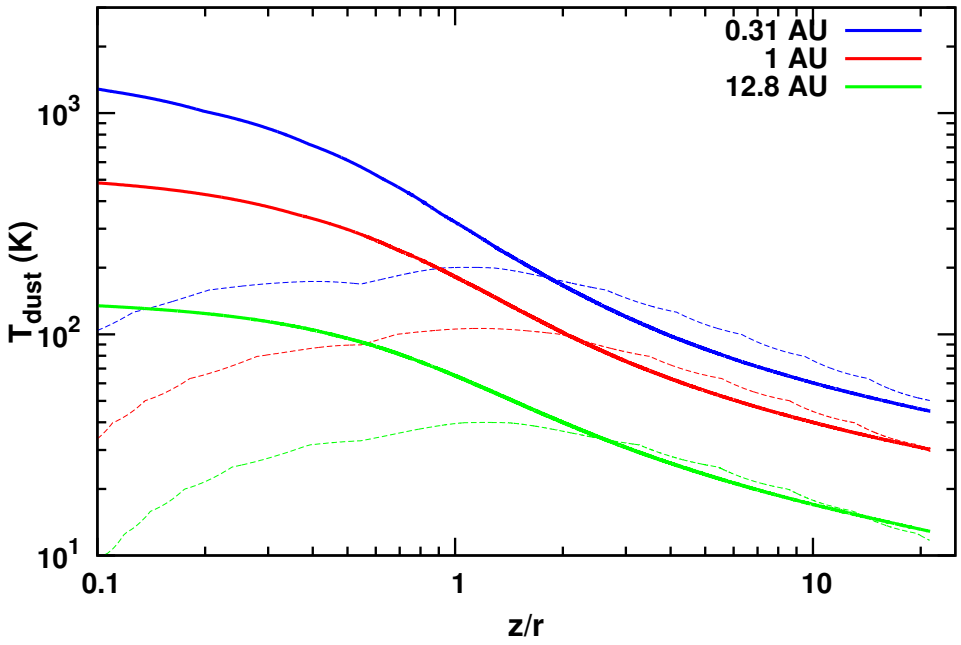


FIGURE 3.8 – *Température des poussières calculée avec DUSTY (en traits gras) comparée avec l'ancienne approche utilisant la relation (3.17) (en trait pointillé), en fonction de z/r, pour le modèle de classe 0, et pour plusieurs lignes d'écoulement à $r_0 = R_{\rm sub}$, $r_0 = 1$ UA et $r_0 = 12.8$ UA, avec $M_\star = 0.1\,M_\odot$ et $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot$ yr^{-1}.*

La Figure 3.8 présente le profil de température des poussières en fonction de z/r dans le jet pour le modèle de référence. La température des poussières calculée par DUSTY est monotone décroissante le long des lignes d'écoulement. La distribution de poussières modélisée par DUSTY est à symétrie sphérique, les poussières sont plus chaudes près du rayon de sublimation. Dans l'ancienne méthode de calcul, la température initiale des poussières dans le disque était de 10 K pour ces modèles. Elle augmentait ensuite à mesure que l'on s'élève dans le jet ou que l'on se rapproche de l'étoile. Les poussières étaient ainsi plus froides à la base du jet. Les deux méthodes de calcul de la température des poussières donnent des profils de température des poussières différents au début des lignes d'écoulement, mais convergent aux grandes valeurs de z/r.

Avec notre nouvelle approche, les poussières se retrouvent plus chaudes à la base des lignes d'écoulement, là où la densité est maximale et où le couplage thermique avec le gaz est important. On peut donc s'attendre à ce que des poussières plus chaudes contribuent à chauffer plus efficacement le gaz à la base du jet (voir Chapitre 4, page 94).

La Figure 3.9 montre l'impact du changement de la température des poussières sur la température du gaz [6]. Au départ des lignes d'écoulements, avec la température des poussières calculée par DUSTY, le gaz est d'abord fortement chauffé par les poussières par rapport au cas où la température des poussières est calculée selon l'ancienne méthode. Puis, rapidement la température des poussières décroit et les grains contribuent ensuite au refroidissement du gaz. Les températures du gaz dans les deux cas convergent vers des comportements similaires à la fin des lignes d'écoulement. On voit que même pour les lignes d'écoulement lancées à grand r_0 la température des poussières à la base du jet est toujours supérieure à 100 K.

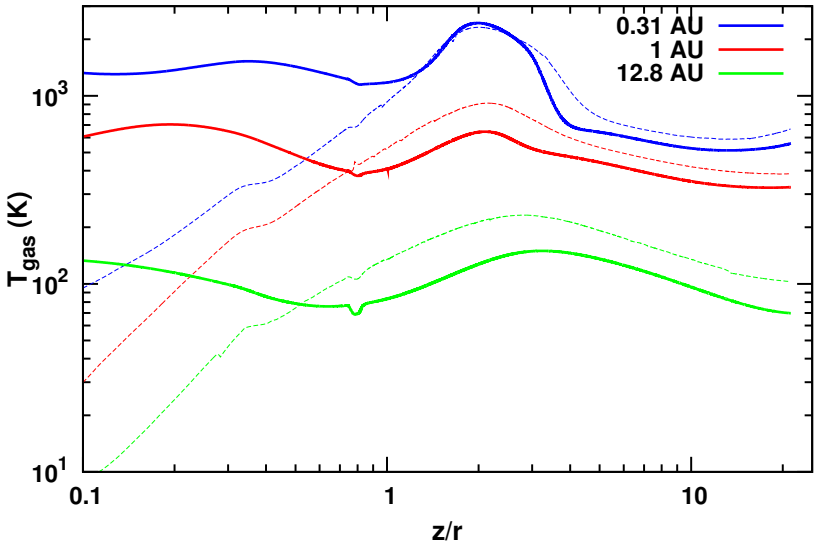


FIGURE 3.9 – *Température du gaz dans les deux cas comme montré dans la Figure 3.8*

La "bosse" observée sur la courbe à $r_0 = 0.31$ UA (en bleu) est due au fait que le chauffage par diffusion ambipolaire l'emporte brièvement sur le refroidissement par H_2O (cf Chapitre 4).

IV Processus chimiques

Le réseau des réactions chimiques (voir annexes) inclus dans le modèle a été construit dans le contexte du milieu interstellaire, en particulier pour le traitement de la chimie dans les chocs et les PDRs. Les réactions chimiques entre les espèces gazeuses et le couplage avec les poussières provient de Flower & Pineau des Forêts (2003); Panoglou et al. (2012). Les photo-réactions ont été incluses à partir des résultats de van Dishoeck

6. Pour effectuer cette comparaison, les termes de refroidissement par H_2O et CO proviennent de Neufeld & Kaufman (1993) (voir Chapitre 4, page 89). C'est à dire que ces molécules ne contribuent qu'au refroidissement du milieu et non au chauffage comme par la suite.

TABLE 3.3 – *Abondances élémentaires fractionnelles initiales et répartition dans les différentes phases adapté de la compilation de Flower & Pineau des Forêts (2003, Table 1 et 2) à partir des données observationnelles de Anders & Grevesse (1989); Savage & Sembach (1996); Sofia & Meyer (2001); Gibb et al. (2000). On suppose ici que ∼ 5% du* Si *se retrouve dans les manteaux des grains sous forme de* SiO.

élément	total	gaz	PAH $x(PAH) = 10^{-6}$	grains (glaces) $n_d/n_H = 4.06\times10^{-10}$ $a \in [5, 250]$ nm	grains (noyaux)
H	1.00	1.00		3.68×10^{-5}	
He	1.00×10^{-1}	1.00×10^{-1}			
C	3.55×10^{-4}	8.27×10^{-5}	5.40×10^{-5}	5.53×10^{-5}	1.63×10^{-4}
N	7.94×10^{-5}	6.39×10^{-5}		1.55×10^{-5}	
O	4.42×10^{-4}	1.24×10^{-4}		1.78×10^{-4}	1.40×10^{-4}
Mg	3.70×10^{-5}				3.70×10^{-5}
S	1.86×10^{-5}	1.47×10^{-5}		3.93×10^{-6}	
Si	3.37×10^{-5}			1.80×10^{-6}	3.19×10^{-5}
Fe	3.23×10^{-5}	1.50×10^{-8}			3.23×10^{-5}

Les abondances fractionnelles des espèces composant les manteaux des grains sont :

CO	CO_2	CH_4	NH_3	H_2O
8.3×10^{-6}	1.3×10^{-5}	1.6×10^{-6}	1.6×10^{-5}	1.0×10^{-4}
CH_3OH	H_2CO	HCOOH	OCS	H_2S
1.9×10^{-5}	6.2×10^{-6}	7.2×10^{-6}	2.1×10^{-7}	3.7×10^{-6}
SiO				
1.8×10^{-6}				

& Black (1988); Roberge et al. (1991). Le réseau chimique du modèle comprend 134 espèces (voir Annexe A, page 252) parmi lesquelles les espèces atomiques, moléculaires, les particules neutres et ionisées, les espèces sur les manteaux des grains et les composants des grains (noyaux réfractaires). Les PAHs sont représentés par $C_{54}H_{18}$ (avec ses formes $C_{54}H_{18}^+$ et $C_{54}H_{18}^-$) Les abondances élémentaires initiales sont basées sur Flower & Pineau des Forêts (2003), voir Table 3.3.

Les réactions chimiques incluent 2 réactants et au maximum 4 produits de réactions. Les réactions à 3 corps ne sont pas incluses car leur temps caractéristique est plus long que le temps dynamique, excepté à l'intérieur de la région de sublimation des poussières où elles pourraient jouer un rôle dans la formation de H_2.

Le réseau complet des réactions chimiques est donné en Annexe A, page 254. Ce réseau chimique n'inclut que des espèces ionisées une fois.

V Conditions initiales : abondances des espèces à la surface du disque d'accrétion

Les conditions initiales ont une importance particulière pour la structure chimique du jet. Dans la mesure où l'équilibre n'a pas le temps de s'installer quand le gaz s'élève le long des lignes d'écoulement, les abondances conservent la trace de l'état initial. On calcule les conditions initiales au départ de chaque ligne d'écoulement en faisant

évoluer le modèle chimique dans les conditions de la surface du disque pendant un temps de l'ordre du temps d'accrétion (défini par la relation (3.33)).

L'objectif de cette section est d'estimer quelle composition chimique adopter pour les manteaux des grains dans le calcul des conditions initiales.

Les espèces chimiques dans le modèle faisant partie des noyaux et des manteaux des grains sont récapitulées dans la Table 3.3 (page 52). Seules les réactions d'érosion des noyaux et des manteaux des grains (V.2-1), et de désorption par les rayons cosmiques (V.2-2) sont incluses dans le réseau chimique le long et à la base des lignes d'écoulement. Si des glaces sont présentes à la base d'une ligne d'écoulement elles ne pourront qu'être érodées à mesure que le gaz s'élève dans le jet. Les autres processus (photodésorption, désorption par les X et désorption thermique) ne sont pas inclus dans le réseau chimique, mais nous allons voir par la suite que leur influence sur les résultats est limitée.

V.1 Adsorption sur les grains

Les glaces des grains se forment par adsorption des espèces gazeuses à leur surface. Il peut y avoir adsorption physique (physisorption Fuchs et al. 2006) où la molécule colle simplement à la surface du grain ou à la couche de surface des glaces par des liaisons de type Van Der Waals. Une autre voie est l'adsorption chimique (chemisorption Fraser et al. 2005) où la molécule établit des liaisons covalentes avec la surface. Mais on ne considère que la physisorption ici. Ainsi, l'adsorption désigne dans le cadre du modèle le processus par lequel une espèce A est capturée dans une fine couche à la surface des grains et forme l'espèce A*.

Le taux, par unité de volume et par unité de temps avec lequel une espèce est adsorbée est :

$$u_{\rm ads} = k_{\rm abs} n_d n({\rm A}) \tag{3.24}$$

La vitesse d'absorption $k_{\rm ads}$, exprimée en cm^3 s^{-1} est exprimée par :

$$k_{\rm ads} = {\rm v}\sigma_d S \tag{3.25}$$

où v est la vitesse effective de collisions donnée par la relation (A.8), S est la probabilité de collage qui sera prise égale à 1 pour simplifier. Le taux avec lequel l'espèce A se colle sur le grain est $v\sigma_{d,{\rm H}} n_d n({\rm A})$. On suppose que les espèces, une fois adsorbées, se saturent immédiatement du fait des réactions de surface (par exemple C+grain$\rightarrow$ CH$_4^*$+grain). L'énergie de liaison est du même ordre de grandeur que l'énergie de condensation de l'espèce absorbée, $E_{bind} = 1200$ K pour CO ; et pour H_2O $E_{bind} = 5600$ K (Fraser et al. 2001) ~ 4800 K (Sandford & Allamandola 1988).

Le temps caractéristique associé à l'adsorption sur les grains est donc :

$$\tau_{ads}(A) = \frac{1}{\sigma_d \overline{{\rm v}({\rm A})} n_d} \tag{3.26}$$

Nous allons comparer ce temps caractéristique avec le temps dynamique le long des lignes d'écoulement mais aussi aux temps caractéristiques de désorption. L'idée est de déterminer l'importance des processus de désorption et d'adsorption dans le modèle. Ainsi que de déterminer où les glaces des grains dans le jet sont susceptibles de se former.

V.2 Désorption

Il existe plusieurs mécanismes d'évaporation des manteaux de glace des grains :

- **L'érosion des manteaux** : des molécules à la surface des manteaux des grains sont éjectées par collision entre une particule neutre du gaz et un grain.
- **La photodésorption** : les UV stellaires frappent les grains et augmentent l'énergie cinétique des molécules ou cassent des molécules provoquant une chaîne de réactions qui transmet une part de l'énergie du photon UV aux molécules voisines qui se retrouvent ainsi éjectées vers le milieu gazeux. (Herbst & Cuppen 2006; Fayolle et al. 2012; Walmsley et al. 1999) En général l'efficacité avec laquelle un photon UV à une fréquence donnée parvient à désorber des molécules est mesurée par des expériences de laboratoire et exprimée en molécules/photon. (Fayolle et al. 2011a; Öberg et al. 2009a,b; Westley et al. 1995; Muñoz Caro & Schutte 2003).
- **Désorption thermique** : l'agitation thermique, qui vient du chauffage du grain, parvient à casser les liaisons de Van Der Waals entre les molécules dans les manteaux de glace et éjecte les molécules de la surface des grains (Leger et al. 1985; Fraser et al. 2001; Fayolle et al. 2012).
- **Désorption directe par les X ou rayons cosmiques** : quand un rayon X ou un rayon cosmique frappe le grain il dépose son énergie ce qui augmente localement ou globalement la température du grain et peut conduire à éjecter tout ou partie du manteau de glace (Leger et al. 1985; Voit 1991; Najita et al. 2001). Ce processus n'est pas inclus dans la suite.
- **Désorption induite par les photons UV secondaires du rayonnement X et des rayons cosmiques** : l'origine et le spectre des photons sont différents des UV stellaires, mais ils procèdent à une photodésorption en étant absorbés par la surface du grain (Bringa & Johnson 2004; Herbst & Cuppen 2006).
- **Chimie explosive** : Les réactions exothermiques qui sont susceptibles de se dérouler à la surface du grain peuvent provoquer une évaporation partielle du manteau de glace (D'Hendecourt et al. 1982; Leger et al. 1985), néanmoins ce type de désorption est difficile à quantifier et n'est pas inclus dans le modèle.

V.2-1 Érosion des manteaux des grains par collisions avec les particules neutres du gaz

Quand une espèce neutre (notée B) abondante comme H, H_2 ou He du gaz entre en collision avec la surface d'un grain possédant un manteau de glace, les espèces à sa surface (notées X^*) se retrouvent éjectées en phase gazeuse. Si les grains sont chargés alors ils sont gelés dans le champ magnétique. La collision avec les neutres se fait alors à la vitesse de dérive ions-neutres v_{in}. Le taux d'éjection peut s'écrire :

$$u_{\rm ej} = k_{\rm ej} n_d n({\rm B})$$

le coefficient d'éjection (en $\rm cm^3\ s^{-1}$) s'écrit (Flower & Pineau des Forêts 1994) :

$$k_{\rm ej} = 4v\sigma_{a,{\rm H}} p \frac{n({\rm X}*)}{n_d}\left(1+\frac{T_{{\rm eff},d}}{2\beta}\right)e^{-f}$$

où β correspond à l'énergie de liaison de la particule à la surface du grain, le terme $p\frac{n({\rm A}*)}{n_d}$ est la probabilité que l'espèce A* soit éjectée du grain et $f = \max((4\beta - 1.5T_S)/T_R,\ 4\beta/T_{{\rm eff},d})$

V.2-2 Désorption induite par les rayons cosmiques

Le taux de désorption d'une espèce $X*$ s'écrit :

$$u_{\rm CR} = 7\times10^{-1}\,\frac{\sigma_d n_d}{n(X*)} \tag{3.27}$$

dans cette réaction, un rayon cosmique dépose son énergie dans le grain et augmente sa température, autour de 70 K (Leger et al. 1985), ce qui conduit à une évaporation partielle de son manteau de glaces (Najita et al. 2001; Herbst & Cuppen 2006).

V.2-3 Photodesorption par les UV stellaires

Le taux de photodesorption d'une espèce A* à la surface d'un grain peut s'exprimer ($\rm cm^{-3}\,s^{-1}$) par :

$$u_{\rm ph} = Y({\rm A})I_{UV}n_d\,\sigma_d$$

où σ_d est la section géométrique efficace des grains, n_d la densité numérique de grains et $I_{UV} = \chi e^{-2A_V}$ est le flux de rayonnement en photons par centimètres carrés et par secondes. $Y({\rm A})$ est l'efficacité du processus de photodésorption, exprimée en molécules éjectées par photon incident. Cette efficacité dépend a priori de l'espèce considérée, de la température du grain et de l'épaisseur de la couche de glace. Cependant, seules les dernières couches de la surface des glaces des grains contribuent significativement à la photodésorption (Fayolle et al. 2012).

Dans le cas de H_2O, on utilise l'efficacité de photodésorption ajustée par Walmsley et al. (1999) à partir des résultats expérimentaux de Westley et al. (1995). Cette efficacité expérimentale correspond à quelques 10^{-3} molécules par photon UV incident pour une épaisseur de glace de 500 nm. Cette efficacité s'écrit en fonction de la température du grain T_g et du nombre de couche $x \leq 1$ (couche incomplète) :

$$\begin{aligned} Y(T_g) &= \gamma Y_0(T_g),\ \text{avec} \\ \gamma &= \min\left(1\ ,\ \frac{n(X*)}{n_d 4\pi\overline{a}^2\frac{1}{\delta^2}} = x = \text{nb. de couches}\right), \\ Y_0(T_g) &= 0.0035 + 0.13e^{\frac{-336}{T_g}} \end{aligned} \tag{3.28}$$

où $\delta = 2.6\times10^{-8}$ cm (Walmsley et al. 1999) est la distance moyenne entre deux sites voisins à la surface du grain. $4\pi\overline{a}^2\frac{1}{\delta^2}$ est le nombre de sites à la surface d'un grain de rayon moyen $\overline{a}$. Si la couche n'est pas complète, γ est la fraction du nombre de sites occupés à la surface du grain ($\gamma < 1$). Vers 100-120 K les molécules d'eau désorbent du fait de l'agitation thermique, en dessous de cette température, pour des glaces minces, l'efficacité est de l'ordre de 3×10^{-3} molécules par photon. Westley et al. (1995) suggèrent un effet de seuil à basse température, la photodesorption devient efficace au dessus d'un certain nombre de photons UV absorbés par les glaces, ce seuil est dû à la création et à la diffusion de radicaux comme OH dans la glace. Une fois que la quantité de radicaux arrive à saturation dans le manteau des grains, les molécules commencent à désorber.

Pour CO, Öberg et al. (2009b) obtient une efficacité expérimentale $Y_{\rm CO}(T_g < 30\,{\rm K}) = 2.7\,10^{-3} - (T_g - 15)\times1.7\,10^{-4}$ molécules par photon incident. Cette valeur est plus faible que l'estimation de Muñoz Caro & Schutte (2003) de $Y_{\rm CO} = 6.4 - 3.5\times10^{-2}$. Pour $T_g > 30\,{\rm K}$ une glace de CO désorbe thermiquement. Fayolle et al. (2011a) a

mené une étude de l'efficacité de la photodésorption de CO en fonction de la longueur d'onde des photons UV entre 7 et 13 eV. Dans les conditions d'illumination par un choc d'accrétion typique d'une proto-étoile (corps noir à 10 000 K), l'efficacité pour CO est de 1.6×10^{-2} molécules par photons. Dans le cas d'un coeur préstellaire où le rayonnement UV provient des photons secondaires issus des rayons cosmiques (Gredel et al. 1987), cette efficacité peut descendre à 9.4×10^{-3}.

De plus les épaisseurs de glaces obtenues dans le modèle sont toujours faibles. Pour simplifier on peut se limiter au cas des glaces minces, dans ce cas le taux de photodesorption devient :

$$u_{\rm ph} = Y({\rm A}) \frac{I_{UV} n(X*) \delta^2}{4} \tag{3.29}$$

Finalement on peut exprimer le temps caractéristique de photodésorption pour des glaces fines ($x << 1$)par :

$$\tau_{ph} = \frac{n(X*)}{u_{\rm ph}} = \frac{4}{Y({\rm A}) I_{UV} \delta^2} \tag{3.30}$$

V.2-4 Photodesorption par les photons secondaires

Le grain est soumis au rayonnement des photons secondaires et le processus de désorption peut être traité comme la photodésorption, bien que le flux UV soit différent (Hasegawa & Herbst 1993a; Hasegawa et al. 1992). On suppose que la probabilité d'émission de photon UV par H_2 après une excitation électronique est de 0.15 (Gredel et al. 1989) La forme du spectre UV dans ce cas sera aussi différente du spectre de la source centrale, pour CO le rendement Y est 9.4×10^{-3} au lieu de 1.6×10^{-2}. Le nombre de photons par unité de volume et de temps sera $0.15 \zeta_X n({\rm H_2})$ et le nombre de molécules désorbées est $0.15 \zeta_X n({\rm H_2}) \times Y$, ainsi le temps caractéristique associé à la désorption induite par les X est (en utilisant les mêmes notations que précédemment) :

$$\tau_X = \frac{n(X^*)}{0.15 \zeta_X n({\rm H_2}) Y}$$

V.2-5 Désorption thermique

Pour une glace pure de molécules, le taux de désorption thermique, s'écrit :

$$u_{\rm th} = \frac{-dN_s}{dt} = K_D N_S \tag{3.31}$$

où N_s est le nombre de molécules sur la surface de tous les grains par cm^3 de gaz (nombre de sites multiplié par la densité numérique de grains), et $K_D = \nu e^{E_b/T_g}$ (Hasegawa & Herbst 1993b) est la constante de réaction avec $\nu = 2 \times 10^{12}\ {\rm s^{-1}}$ (Biham et al. 2001) une fréquence caractéristique enfin E_b l'énergie de liaison à la surface du grain. L'énergie de liaison de H_2O à la surface du grain est $E_b/k_{\rm B} \simeq 5600$ K (Fraser et al. 2001), $\simeq 1000$ K pour CO (Sandford & Allamandola 1993). Pour une glace mince $N_s \sim n(X^*)$ et le temps caractéristique associé peut s'exprimer par :

$$\tau_{th} = \frac{1}{K_D}$$

Fraser et al. (2001) et Fayolle et al. (2011b) obtiennent des résultats similaires ; les molécules CO s'évaporent massivement à $T_g \simeq 40$ K, les molécules CO_2 s'évaporent à $T_g \simeq$ 75-80 K et les molécules H_2O s'évaporent vers 120-140 K dans le vide.

V.2-6 Conclusion

Compte tenu du profil de température des grains calculé par DUSTY, $T_g > 100\,\mathrm{K}$ à la base des lignes d'écoulement pour $r_0 < 25\,\mathrm{UA}$ pour tous les modèles, la désorption thermique domine largement et les glaces s'évaporent plus rapidement que le temps dynamique. Pour toutes les lignes d'écoulement, on suppose donc que les grains sont dépourvus de glaces [7].

Tout ceci est illustré par la Figure 3.10 pour le modèle de classe 0 de référence. Le long des lignes d'écoulement, l'adsorption reste importante mais elle est contrebalancée par la désorption thermique à basse altitude puis, à plus haute altitude dans le jet la désorption par les UV prend le relais, en particulier le long des lignes d'écoulement les plus proches de l'étoile, et pour les classes I et II. On ne s'attend pas, donc à ce que les glaces aient le temps de se reformer le long des lignes d'écoulement, à l'exception des modèles de classe 0 pour $r_0 > 10\,\mathrm{UA}$, où, le long des lignes d'écoulement les molécules pourraient avoir le temps de se coller sur les grains. La désorption induite par les X reste négligeable.

On fait néanmoins l'approximation de grains dépourvus de glaces dans tous les modèles de vent de disques produits. Cette approximation peut conduire à surestimer légèrement le flux émis par H_2O et CO dans les raies fondamentales à faible vitesse.

7. D'éventuelles lignes d'écoulement lancées à $r_0 > 30\,\mathrm{UA}$ pour les modèles de classe I et II auraient des grains pourvus de manteaux de glaces.

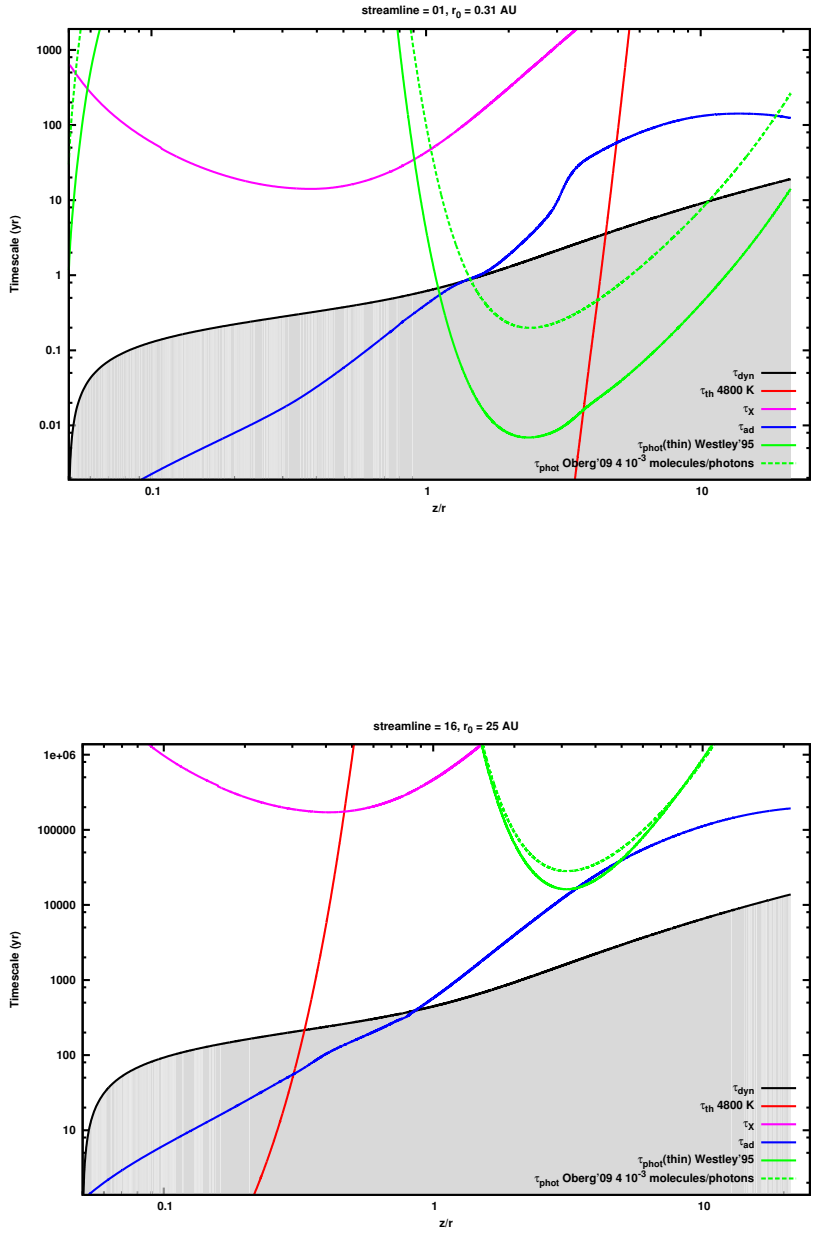


FIGURE 3.10 – *Pour* H_2O*, temps caractéristiques de désorption par le rayonnement UV (vert), le temps en pointillés utilise une efficacité de* 4×10^{-3} *(Öberg et al. 2009a) molécules par photon et celui en trait plein utilise l'efficacité de Westley et al. (1995) (donnée dans le texte) ; en rose le temps associé à la désorption induite par les rayons X ; le temps de désorption thermique (en rouge) et d'absorption (en bleu). Le temps dynamique est indiqué en noir. En haut : le long d'une ligne d'écoulement à* $r_0 = R_{\rm sub}$ *et en bas : à* $r_0 = 25$ UA*, les deux figures sont tracées pour le même modèle de classe 0 avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$*. Seuls les processus dont les temps entrent dans la partie grisée vont être efficaces.*

V.3 Conditions initiales

On tente de reproduire l'évolution chimique du gaz au long de son parcours radial dans le disque d'accrétion. Ainsi on commence par déterminer un premier état initial à partir des abondances élémentaires données par la Table 3.3. Pour ce premier état initial stationnaire, on se place dans les conditions régnant dans l'enveloppe à $r_0 = 100\,AU$. La durée d'évolution du gaz dans ces conditions est de 10^5 ans, ce qui permet de reproduire les conditions chimiques moléculaires de l'enveloppe initiale de la proto-étoile. Pour ces conditions initiales, les grains possèdent des manteaux de glace piégant une partie des espèces à leur surface (voir Table 3.3, partie 2).

Pour reproduire le parcours de la matière lors de l'accrétion dans le disque, l'état chimique final ainsi obtenu au rayon d'ancrage $r_0(i)$ est ensuite utilisé comme condition chimique initiale pour calculer l'état initial du rayon d'ancrage $r_0(i-1)$ suivant dans la direction de l'étoile. Le temps d'évolution à ce rayon d'ancrage $t_{evol}(i-1)$ correspond à la fraction du temps passé par la matière entre les rayons r_0 et $r_0 + \mathrm{d}r_0$ en supposant que la matière accète à la vitesse c_s dans la direction radiale [8]. La ligne d'écoulement lancée à R_{sub} est numérotée $i = 1$. Pour le temps d'accrétion on utilise le fait que $\mathrm{v}_{\mathrm{acc}} \simeq c_s$ dans les disques avec vent MHD, donc :

$$t_{\mathrm{acc}} \simeq \frac{1}{\epsilon} \times t_{\mathrm{K}} = \frac{1}{\epsilon} \times 2\pi r_0^{1.5} (GM_\star)^{-0.5} \tag{3.32}$$

où $\epsilon = h(r)/r = 0.03 = c_s/\mathrm{v}_{\mathrm{K}}$, avec $h(r)$ l'épaisseur du disque. Le temps d'évolution s'exprime ainsi :

$$\begin{aligned} t_{evol}(i-1) &= t_{\mathrm{acc}}(r_0(i)) - t_{\mathrm{acc}}(r_0(i-1)) \\ &= 10 \times 2\pi (GM_\star)^{-0.5} r_0(i-1)^{1.5} \times \left(\left(\frac{r_0(i)}{r_0(i-1)} \right)^{1.5} - 1 \right) \end{aligned}$$

Le temps d'évolution peut encore s'exprimer par :

$$t_{evol}(i) = 2.2 \times 10^4 \text{ ans} \times \left(\frac{M_\star}{0.1\,\mathrm{M}_\odot} \right)^{-0.5} \cdot \left(\frac{r_0(i)}{100\,\mathrm{UA}} \right)^{1.5} \times \left(\left(\frac{r_0(i+1)}{r_0(i)} \right)^{1.5} - 1 \right) \tag{3.33}$$

Le temps total cumulé [9] pour toutes les lignes d'écoulement lancées à $r_0(i)$ ne dépend pas de la discrétisation en r_0.

De proche en proche, les abondances initiales pour tous les rayons d'ancrage sont ainsi calculées. Les abondances initiales de la ligne d'écoulement lancée à partir de $r_0 = R_{\mathrm{sub}}$ sont calculées en dernier.

La Figure 3.11 montre l'établissement des conditions initiales pour chaque ligne d'écoulement à $r_0 < 1$ UA pour le modèle de référence de classe 0. Les processus d'adsorption ne sont pas inclus dans le réseau chimique pour éviter que toutes les espèces gazeuses ne soient adsorbées [10]. Pour tenir compte de la désorption thermique, on considère que les manteaux de glace des grains s'évaporent totalement et instantanément

8. La solution MHD impose $\mathrm{v}_K/c_s = \epsilon = 0.03$, dans nos calculs on prend en fait 0.1 comme approximation de ϵ.

9. On remarque que si l'on choisi une dicrétisation en r_0 telle que $r_0(i+1) = 2r_0(i)$ alors le temps d'évolution devient : $t_{evol}(i) \simeq 2t_{\mathrm{acc}}(i)$

10. Car le réseau chimique utilisé n'inclut pas les réactions de désorption.

quand la température des grains à la base du jet atteint 100 K [11]. Dans les conditions initiales, le carbone est principalement sous forme de CO, alors que l'oxygène encore disponible se réparti entre O à grand r_0, sous forme de H_2O (forme dominante pour les classes 0), ainsi que sous forme de OH (mais moins abondant que H_2O et O).

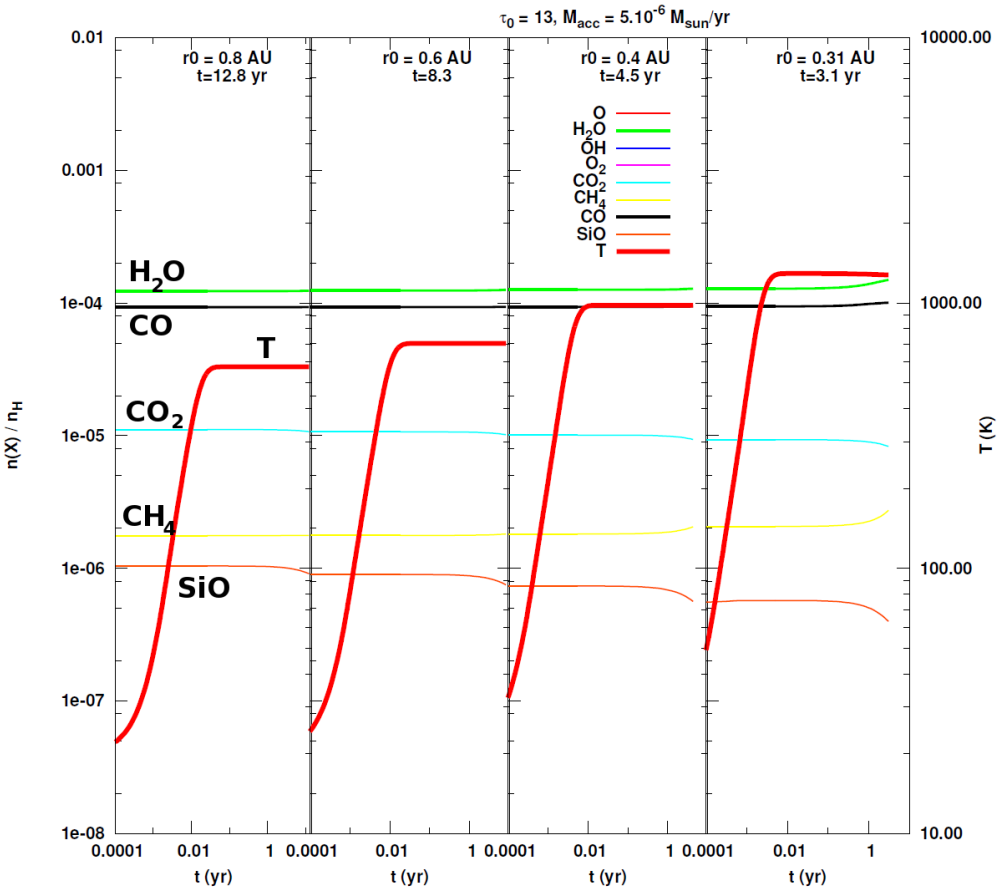


FIGURE 3.11 – *Conditions chimiques initiales pour le modèle de classe 0 de référence* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$. *Les conditions chimiques initiales à la base des lignes d'écoulement correspondent aux abondances fractionnelles obtenues à la droite de chaque graphique.*

Les Figures 3.12 et 3.13 présentent les abondances de H_2O, CO et SiO ainsi que la température et la densité au départ des lignes d'écoulement pour les modèles de classe 0 (modèle de référence) et de classe II respectivement. Dans ce cas de la classe 0, le gaz et les grains sont thermalisés, ce n'est pas le cas pour la classe II ou le gaz n'est pas assez dense. Pour tous les modèles l'hydrogène est complètement moléculaire au départ des lignes d'écoulement. Les conditions initiales pour les trois autres modèles sont placées en Annexe A.I page 253. Dans le cas de la classe II, les abondances diminuent à $r_0 = R_{\rm sub}$ à cause de la photodissociation des molécules à la base du jet.

11. Ce qui est effectivement le cas pour toutes les lignes d'écoulement calculées.

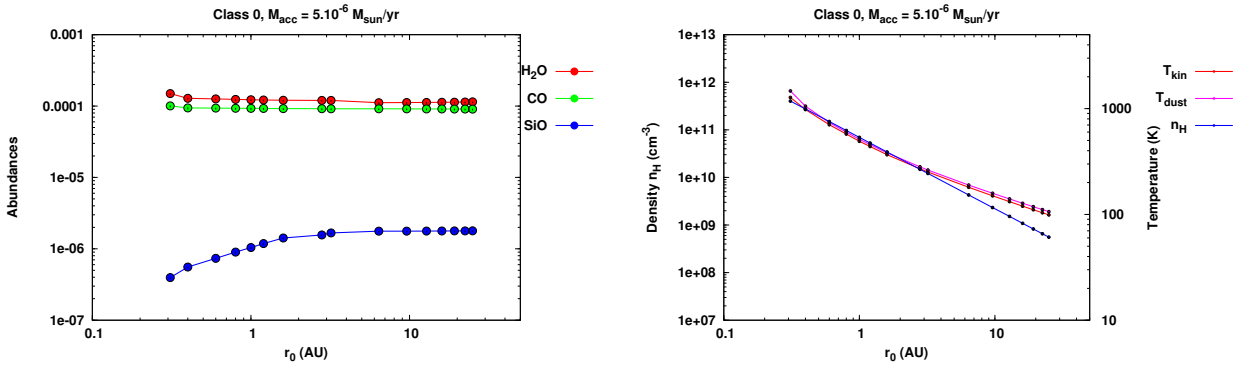


FIGURE 3.12 – Gauche *: abondance initiale en* H_2O, CO *et* SiO *pour chaque ligne d'écoulement du modèle de classe 0 de référence.* Droite *: température du gaz, des grains et densité* n_H *au départ des lignes d'écoulement pour le même modèle.*

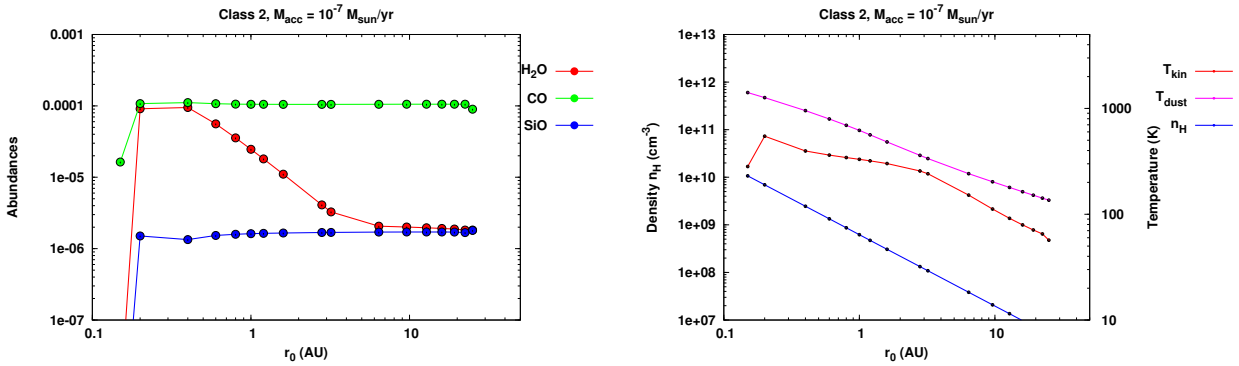


FIGURE 3.13 – Gauche *: abondance initiale en* H_2O, CO *et* SiO *pour chaque ligne d'écoulement du modèle de classe II.* Droite *: température du gaz, des grains et densité* n_H *au départ des lignes d'écoulement pour le même modèle.*

VI Composition chimique dans le vent de disque

VI.1 Photodissociation de H_2 et de CO

VI.1-1 Photodissociation de H_2

La molécule H_2 se photodissocie sous l'influence du rayonnement UV de l'étoile. La photodissociation dans les raies domine celle dans le continuum. Les photons UV dont la longueur d'onde est comprise entre 912 et 1110 Å sont susceptibles, par absorption, d'exciter les niveaux électroniques de H_2, ce qui peut conduire à sa dissociation. En deçà de 912 Å, les photons sont absorbés par l'hydrogène atomique et au delà de 1110 Å les photons ne sont que très faiblement absorbés par H_2. Seuls les photons UV dont les fréquences correspondent aux transitions électroniques de H_2 peuvent être absorbés. Ainsi, un photon UV ayant été absorbé par une molécule de dihydrogène, n'est ensuite plus disponible. Plus profondément dans le gaz le nombre de photons disponibles pour

la photodissociation diminue de plus en plus, H_2 s'écrante lui-même de cette manière. Le modèle implémente la photodissociation de H_2 sous la forme du taux k_p et des coefficients d'écrantage donnés par Draine & Bertoldi (1996) :

$$k_p(H_2) = \chi\, k_0(H_2)\; f_{H_2,dust}\; f_{H_2,H_2}(\mathcal{N}_{H_2}, b) \tag{3.34}$$

où χ est le rapport du flux UV dans le modèle sur le flux de Draine défini par la relation (3.6) et où $k_0(H_2) = 4.2\times10^{-11}\,s^{-1}$ est le taux de photodissociation de H_2 dans le champ de Draine sans atténuation, $f_{H_2,dust} = e^{-\beta A_V}$ avec $\beta = \sigma_d(1000\,Å)/\sigma_d(5000\,Å)$ est le facteur d'écrantage dû aux poussières sur la ligne de visée. Enfin $f_{H_2,H_2}(\mathcal{N}_{H_2}, b)$ est le facteur d'auto-écrantage de H_2 donné par Draine & Bertoldi (1996, équation 32) dépendant de la densité de colonne $\mathcal{N}_{H_2}$ de molécules sur la ligne de visée. :

$$f_{H_2,H_2}(\mathcal{N}_{H_2}, b) = \frac{0.965}{(1+\frac{N\times10^5\,cm\,s^{-1}}{b})^2} + \frac{0.035}{(1+N)^{0.5}}\times e^{-8.5\times10^4(1+N)^{0.5}} \tag{3.35}$$

où $N = \mathcal{N}_{H_2}/5\times10^{14}\,cm^{-2}$. Cette expression reste valide en l'absence de poussières sur la ligne de visée. Le paramètre b rend compte ici de l'élargissement Doppler des raies de H_2 dont dépend la section efficace d'absorbtion des photons UV dans chaque raie. Le paramètre de dispersion en vitesse b dans le vent de disque est égal à la vitesse locale du son c_s.

VI.1-2 Photodissociation de CO

L'abondance de la molécule CO est principalement gouvernée par la photodissociation par les UV de l'étoile. La molécule CO peut être efficacement écrantée par les poussières, et aussi par H_2 au travers de la superposition de certaines raies avec CO, ainsi que par elle-même. Le taux de photodissociation de CO peut s'écrire :

$$k_p(CO) = \chi\, k_0(CO)\; f_{CO,dust}(A_V)\; f_{CO,CO}(\mathcal{N}_{CO})\; f_{CO,H_2}(\mathcal{N}_{H_2}) \tag{3.36}$$

où ici $k_0(CO) = 2\times10^{-10}\,s^{-1}$ correspond au taux de photodissociation dans un champ de Draine non atténué. Les différents coefficients d'écrantage de CO sont ajustés par une expression analytique à partir des résultats de la Table 11 de Lee et al. (1996) :

$$\begin{aligned} f_{CO,\,dust}(A_V) &= \max\left(0.5\times e^{-3.5A_V},\, 0.1\times e^{-3A_V}\right)\\ f_{CO,\,CO}(\mathcal{N}_{CO}) &= \min\left(1,\, \left(\frac{\mathcal{N}_{CO}}{10^{15}\,cm^{-2}}\right)^{-0.75}\right)\\ f_{CO,\,H_2}(\mathcal{N}_{H_2}) &= 0.8\times e^{\frac{-\mathcal{N}_{H_2}}{1.7\times10^{21}\,cm^{-2}}} \end{aligned} \tag{3.37}$$

$f_{CO,\,dust}$ est le facteur d'atténuation du rayonnement UV par les poussières, $f_{CO,\,CO}$ est le facteur d'atténuation du rayonnement UV par CO et $f_{CO,\,H_2}$, est le facteur d'atténuation des UV par H_2. Ces deux derniers facteurs sont dépendant du nombre total de molécules présentes sur la ligne de visée (de CO et H_2).

Ces estimations restent valables à un facteur 2 près dans les conditions rencontrées dans les classes 0, I et II pour des densités de colonne de CO inférieures à $2\times10^{19}\,cm^{-2}$ (Panoglou et al. 2012).

VI.2 Ecrantage, calcul de la densité de colonne

Estimation de la densité de colonne de H_2

Ancienne approximation de la densité de colonne de H_2 :
Le calcul de la densité de colonne de H_2 responsable de l'autoécrantage de la molécule supposait que l'abondance de H_2 restait constante le long de la ligne de visée entre le point courant et la source de rayonnement. Cette abondance de H_2 le long de la ligne de visée était supposée égale à la moitié de l'abondance de H_2 au point courant. La densité de colonne de H_2 produisant l'écrantage était proportionnelle au nombre total de noyaux d'hydrogène sur la ligne de visée ($\mathcal{N}_H$) :

$$\mathcal{N}_{H_2} = \frac{1}{2} x_{H_2} \mathcal{N}_H. \tag{3.38}$$

L'avantage de cette hypothèse était qu'il s'agissait d'un calcul local, donc que les intégrations le long des lignes d'écoulement pouvaient être effectuées indépendamment les unes des autres, $\mathcal{N}_H$ pouvant être déterminé analytiquement en chaque point (Panoglou et al. 2012),

$$\mathcal{N}_H = 2 n_H(R,\Theta) R \left(\sqrt{\frac{R}{R_{sub}}} - 1 \right) \tag{3.39}$$

Ce calcul était approximatif car il ne tenait pas de l'évolution de l'abondance de H_2 le long des lignes d'écoulement. De plus, cette hypothèse surestimait l'écrantage pour les jets de faible densité issus d'objets de classe 2 (Panoglou et al. 2012).
La même méthode était appliquée au calcul de la densité de colonne de CO.

Nouvelle méthode

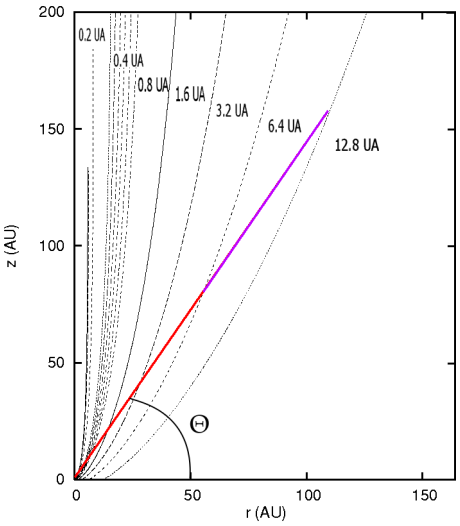


Figure 3.14 – *Lignes d'écoulement intersectées par une ligne de visée formant un angle Θ avec le disque. L'incrément $d\mathcal{N}_{H_2}$ est représenté en mauve.*

La méthode développée dans cette thèse consiste à intégrer cette densité de colonne de manière séquentielle pour chaque angle d'inclinaison dans le jet donné par $\tan(\Theta) = x = z/r$, en commençant par la première ligne d'écoulement.
Les lignes d'écoulement sont numérotées par l'indice j, elles sont lancées depuis un rayon d'ancrage $r_0(j)$. Pour la j^e ligne d'écoulement on calcule l'incrément $d\mathcal{N}_{H_2}$ qui représente la contribution du gaz entre les lignes d'écoulement $j-1$ et j sur la ligne de visée et qui vient s'ajouter à la densité de colonne $\mathcal{N}_{H_2}(j)$ totale :

$$\mathcal{N}_{H_2}(j) = \mathcal{N}_{H_2}(j-1) + d\mathcal{N}_{H_2} \tag{3.40}$$

Ainsi, le long de la ligne d'écoulement précédente il suffit de connaître $\mathcal{N}_{H_2}$ sur la ligne de visée vers l'étoile et $x(H_2)$. La première ligne d'écoulement est ancrée au rayon de

sublimation. On suppose que dans les régions plus proches de l'étoile ($r_0 < R_{\rm sub}$) H_2 est photodissocié plus rapidement qu'il ne se reforme en phase gazeuse en l'absence de grain. Le long de cette ligne d'écoulement, $d\mathcal{N}_{H_2} = 0$ et $\mathcal{N}_{H_2}(j=1) = 0$.

On se place en coordonnées sphériques centrées sur l'étoile ; R désigne le rayon sphérique. Tous les calculs se font à Θ constant.

Du fait des propriétés d'auto-similarité du modèle MHD, la densité du gaz entre deux rayons $R_{\rm min}$ et $R_{\rm max}$ suit une loi de puissance en R ; $n_{\rm H} \propto R^{-1.5}$. On suppose que la densité de H_2 suit la même loi de puissance : $n_{H_2}(R) \propto R^{\alpha}$. Cette hypothèse est bien vérifiée. L'intégrale analytique de l'incrément est donc :

$$d\mathcal{N}_{H_2} = \int_{R_{j-1}}^{Rj} n_{H_2}(R) dR$$

qui s'intègre en tenant compte de la géométrie des lignes d'écoulement :

$$d\mathcal{N}_{H_2} = \frac{R_j}{\alpha+1} n_{H_2}(R_j) \left(1 - \left(\frac{r_0(j-1)}{r_0(j)}\right)^{\alpha+1}\right) \tag{3.41}$$

Par auto similarité on a $R \propto r_0 f(\Theta)$ donc $\frac{R_{j-1}}{R_j} = \frac{r_0(j-1)}{r_0(j)}$ (voir chapitre 2).

Il est possible de déterminer la valeur de l'exposant α. Pour cela, on représente les valeurs logarithmiques de $n_{\rm H} x_{H_2}$ en fonction de R. On suppose que deux points consécutifs $j-1$ et j sur la même ligne de visée sont reliés par un segment de droite. Comme n_{H_2} suit une loi de puissance en α, l'indice α est donné par la pente de $n_{H_2}(R)$ en log-log entre $R(j-1)$ et $R(j)$. Pour $d\mathcal{N}_{H_2}$:

$$\alpha(n_{H_2}) = \frac{log(n_{\rm H} x_{H_2})(j) - log(n_{\rm H} x_{H_2})(j-1)}{log(R(j)) - log(R(j-1))} \tag{3.42}$$

La molécule CO est écrantée à la fois par H_2, par elle-même et par les poussières. L'incrément $d\mathcal{N}_{\rm CO}$ est calculé de la même manière.

L'hypothèse sur la variation de l'abondance $x(H_2)(R,j)$ notée $x_{H_2}(j)$ et $x_{\rm CO}(j)$ entre R_{j-1} et R_j est critique dans l'établissement de la densité de colonne,

Cas 1 : on suppose une loi de puissance pour x_{H_2} entre deux lignes d'écoulement consécutives à z/r constant, mais ce choix pose quelques problèmes, car, par exemple, dans le cas où $x_{H_2}(j-1) = 10^{-6}$ et que $x_{H_2}(i) = 10^{-1}$ une interpolation log-log donnera une valeur moyenne de $x_{H_2} = 10^{-3.5}$ ce qui est déjà très élevé devant les abondances sur la ligne d'écoulement $j-1$, cela suffit à écranter efficacement la ligne d'écoulement suivante, particulièrement à la base du jet où les densités sont très fortes. Cette interpolation surestime donc l'écrantage dans les lignes d'écoulement internes.

Cas 2 : on se place dans une hypothèse plus pessimiste. On choisit x_{H_2} constant entre les deux lignes d'écoulement et égal à $x_{H_2}(j-1)$. Ce qui donne une limite inférieure à l'incrément de densité de colonne de H_2 et donc amène à une valeur minimale pour le coefficient d'auto-écrantage de H_2. Dans ce cas α devient :

$$\alpha = \frac{log(n_{\rm H}(j)) - log(nH(j-1))}{log(R(j)) - log(R(j-1))} = -1.5$$

et $n_{H_2}(R_j)$ devient $x_{H_2}(j-1) n_{\rm H}(R_j)$ dans l'équation (3.41). On verifie que le calcul de α suivant (3.42) donne $\alpha = -1.5$.

Dans la suite c'est donc la méthode correspondant au **Cas 2** qui sera utilisée. Ainsi, l'-expression de l'incrément (3.41) peut se réécrire sous une forme similaire à l'expression (3.39) :

$$\mathrm{d}\mathcal{N}_{\mathrm{H_2}} = 2R_j n_H(R_j) x_{\mathrm{H_2}}(R_{j-1}) \left(\left(\frac{r_0(j)}{r_0(j-1)} \right)^{0.5} - 1 \right) \tag{3.43}$$

VI.3 Discrétisation en r_0

La nouvelle méthode de calcul des densités de colonne de H_2 et CO impose de calculer séquentiellement l'état thermochimique des lignes d'écoulement, en allant de la plus interne vers la plus externe. Une ligne d'écoulement est calculée en connaissant l'abondance de H_2 ainsi que la valeur de la densité de colonne sur la ligne de visée $\mathcal{N}_{\mathrm{H_2}}$ en chaque point le long de la ligne d'écoulement précédente.

Sur la Figure 3.15, on constate que l'augmentation de l'abondance de H_2 se fait de manière rapide en parcourant r_0. De plus, en affinant la discrétisation, on fait converger la courbe d'abondance vers une courbe limite associée à la transition vers un gaz moléculaire à faible r_0. Choisir un échantillonnage lâche, bien qu'économe en temps de calcul, risque de sous estimer les abondances chimiques. Inversement, en raison du phénomène de convergence mis en évidence par cette courbe limite, il n'est pas non plus utile de choisir un pas en r_0 trop fin. On observe aussi les mêmes phénomènes pour CO. La diminution d'abondance s'accentuant à faible r_0 quand l'échantillonage s'affine est dû au fait qu'au départ on reste proche de l'étoile avec toujours peu de H_2 sur la ligne de visée alors que dans un même temps la distance à l'étoile diminue. Ce qui conduit mécaniquement à une destruction de H_2 avant que l'écrantage ne devienne efficace et ne provoque la brusque augmentation d'abondance.

La Table 3.4 (à la fin du chapitre) résume notre choix de discrétisation en r_0 pour calculer l'ensemble des modèles présentés ici. Ces choix tiennent à la fois compte des contraintes liée à un échantillonage suffisamment fin, et aussi de la nécessité d'échantillonner suffisamment le jet pour être capable de générer par la suite des observations synthétiques qui ne soient pas sous-échantillonnées (voir Chapitre 6).

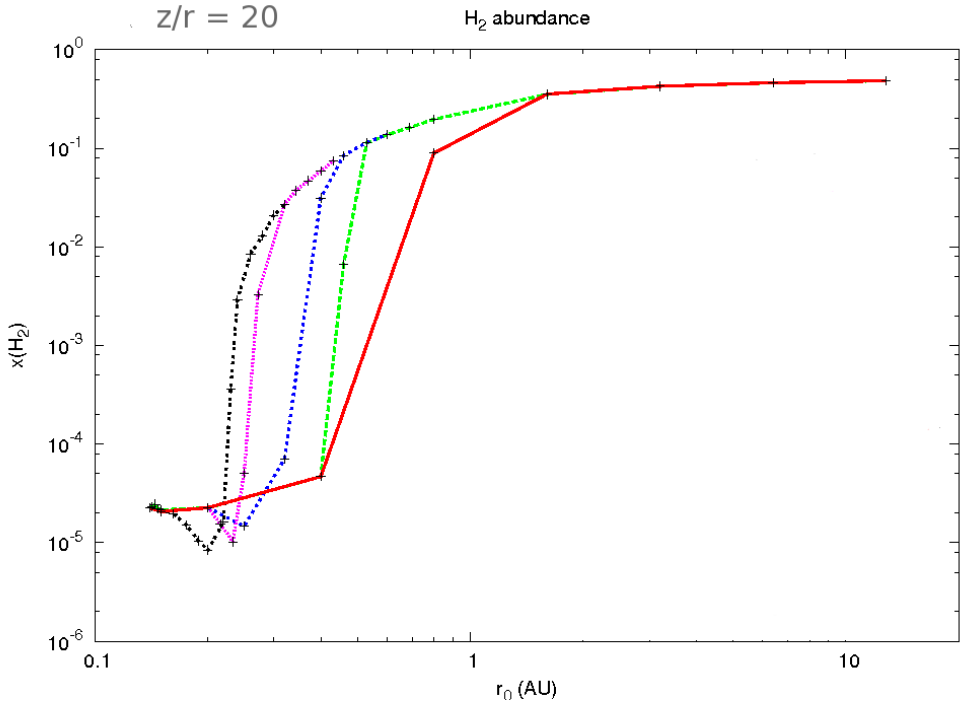


FIGURE 3.15 – *Variation de l'abondance $x(\mathrm{H_2})$ le long d'une ligne de visée d'angle $z/r = 20$ en fonction de r_0, pour plusieurs choix de discrétisation en r_0, du moins dense en* rouge *au plus dense en* noir *pour un modèle de classe II standard.*

VI.4 RÉSULTATS

VI.4-1 Cas de $\mathrm{H_2}$

Abondances de $\mathrm{H_2}$

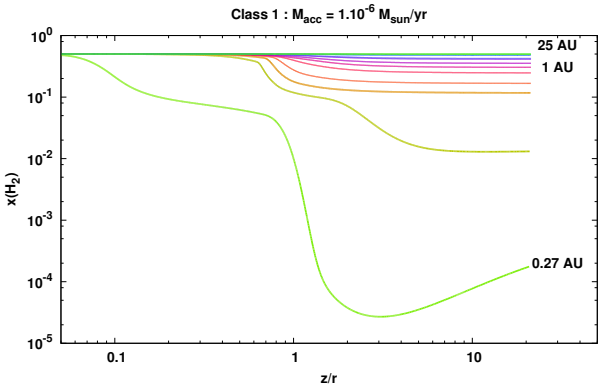


FIGURE 3.16 – *Abondance fractionnelle de* $\mathrm{H_2}$ $x(\mathrm{H_2}) = n(\mathrm{H_2})/n_{\mathrm{H}}$ *le long des lignes d'écoulement pour le modèle standard de classe I (Table 3.4) en fonction de z/r. Le rayon d'ancrage r_0 est indiqué à droite.*

L'abondance de $\mathrm{H_2}$ le long des lignes d'écoulement pour un modèle de classe I (avec la nouvelle méthode présentée ici) est représentée sur la Figure 3.16. Quand on se place à z/r constant, $\mathrm{H_2}$ qui est détruit par les photons UV le long des premières lignes d'écoulement parvient progressivement à s'écranter quand r_0 augmente. Jusqu'à ce que le long des dernières lignes d'écoulement, l'abondance de $\mathrm{H_2}$ reste constante et maximale.

Dans le cas où la densité est plus forte (modèle de classe I avec $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 5\times10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\,yr^{-1}}$ ou modèles de classe 0) l'écrantage de $\mathrm{H_2}$ est encore plus efficace et l'hydrogène reste moléculaire.

Temps caractéristiques de formation et de destruction de H_2

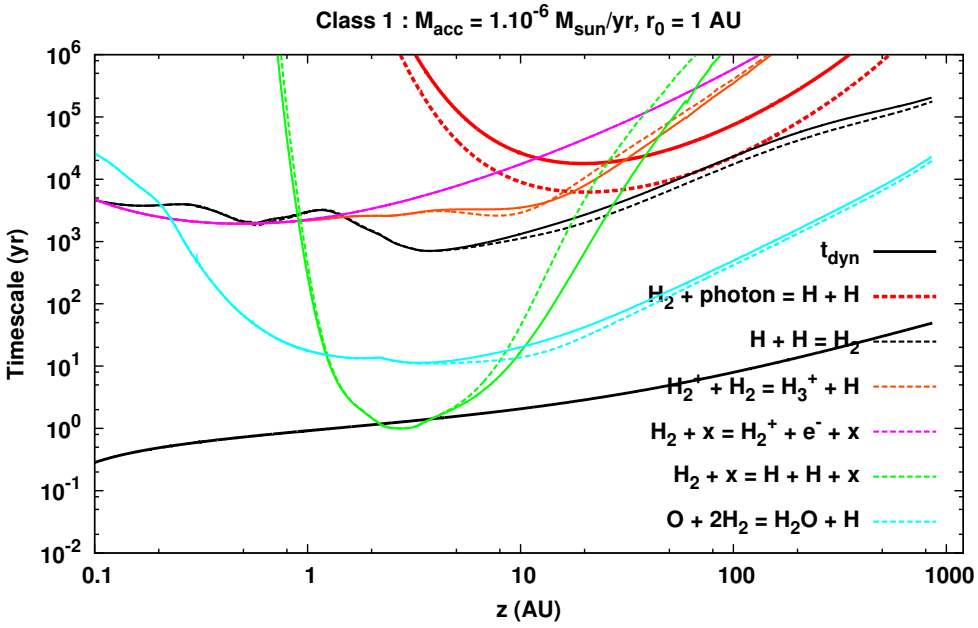


FIGURE 3.17 – *Temps caractéristiques des principales réactions de formation et destruction principales de* H_2 *le long de la ligne d'écoulement à* $r_0 = 1$ UA *pour le modèle de référence de classe I. Les courbes en pointillés montrent les réactions calculées avec la nouvelle estimation de la densité de colonne de* H_2*. Les courbes en trait pleins sont calculées en utilisant l'approximation de Panoglou et al. (2012).*

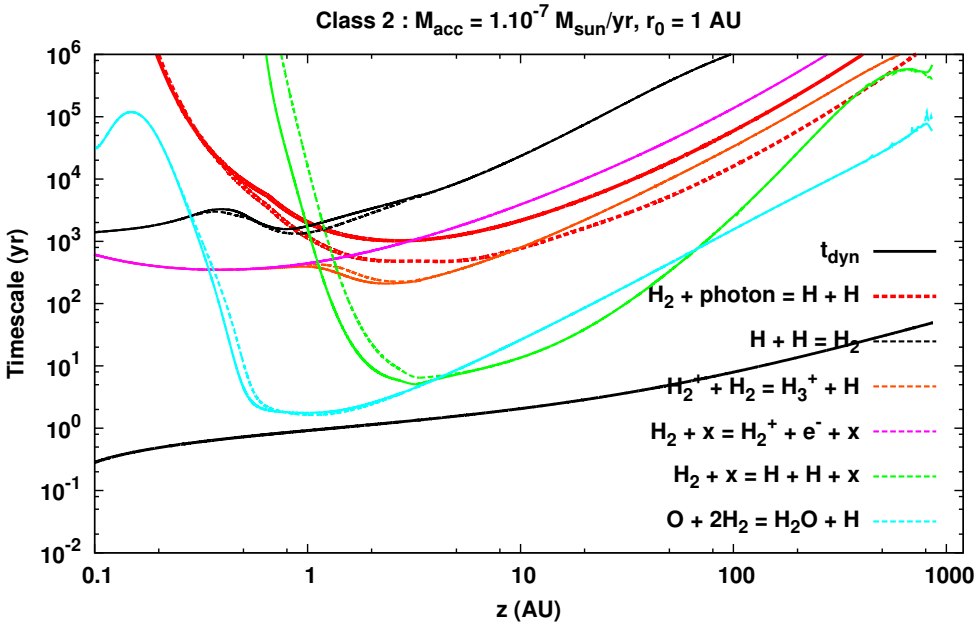


FIGURE 3.18 – *Temps caractéristique des principales réactions de formation / destruction de* H_2 *dans le cas du modèle de classe II,* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*, à* $r_0 = 1$ UA.

Sur la Figure 3.17 figurent les temps caractéristiques des principales réactions de forma-

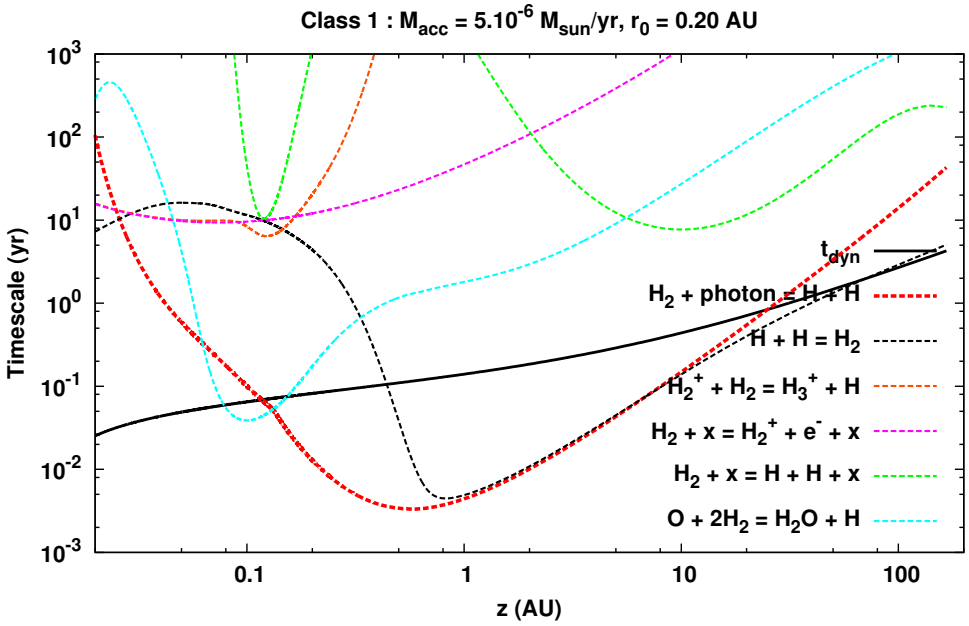


FIGURE 3.19 – *Temps caractéristique des principales réactions de formation / destruction de* H_2 *dans le cas du modèle de classe II,* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*, à* $r_0 = 0.2\,{\rm UA}$*, soit sur la deuxième ligne d'écoulement. Ces résultats sont obtenus avec la nouvelle méthode de calcul de la densité de colonne de* H_2.

tion et de destruction de H_2 pour un modèle de classe I, le long de la ligne d'écoulement à 1 UA. La réaction $H + H = H_2$ est la réaction de formation de H_2 à la surface des grains. La réaction $H_2 + x = H_2^+ + e^- + x$ est la somme les réactions d'ionisations collisionnelle et la réaction $H_2 + x = H + H + x$ la somme les différentes réactions de dissociation collisionnelle (dominées par les collisions avec $x = $ H, He et H_2). $O + 2H_2 = H_2O + 2H$ est la chaine de réaction neutre de formation de H_2O qui est ici très efficace car la température du gaz est élevée :

$$O + H_2 \rightarrow OH + H - 2980\,{\rm K}$$
$$OH + H_2 \rightarrow H_2O + H - 1490\,{\rm K}$$

Les réactions dont le temps caractéristique est inférieur au temps dynamique ont le temps de se produire et de modifier significativement la composition du gaz. Par contre les réactions dont le temps caractéristique est supérieur au temps dynamique n'influent pas ou peu sur la composition chimique. Aussi, dans cet exemple, on voit que la diminution de l'abondance de H_2 observée est provoquée par les dissociations collisionnelles plutôt que par la photodissociation. Les réactions de photodissociation ne dominent pas dans le cas des classes 0 et classes I.

La Figure 3.18 montre la comparaison des temps caractéristiques des réactions de formation et destruction de H_2 obtenues avec les deux méthodes de calcul de la densité de colonne, pour une classe II à $r_0 = 1\,{\rm UA}$. À ce rayon d'ancrage, les temps caractéristiques sont supérieurs au temps dynamique, H_2 est d'abord consommé par les réactions de formation de H_2O puis par collision. Avec la nouvelle méthode de calcul de la densité de colonne, la réaction de photodissociation est légèrement plus rapide, et les réactions de dissociation collisionnelle de H_2 deviennent plus lentes que dans le cas où les temps

caractéristiques des réactions sont calculés en utilisant l'approximation de Panoglou et al. (2012).

Quand $r_0 \geq 1$ UA les réactions n'ont pas le temps de se produire et l'abondance de H_2 tend à rester égale à sa valeur initiale. Cette évolution des temps caractéristiques avce r_0 est illustrée en Annexes (page IV.1).

La Figure 3.19 montre les temps caractéristiques des mêmes réactions obtenus avec la nouvelle méthode de calcul de la densité de colonne de H_2 mais cette fois-ci à un rayon d'ancrage de $r_0 = 0.2\,AU$ [12]. Les réactions y sont plus rapides car la densité est plus élevée et le champ UV est moins écranté que dans le cas $r_0 = 1$ UA.

VI.4-2 Cas de CO

Abondances de CO

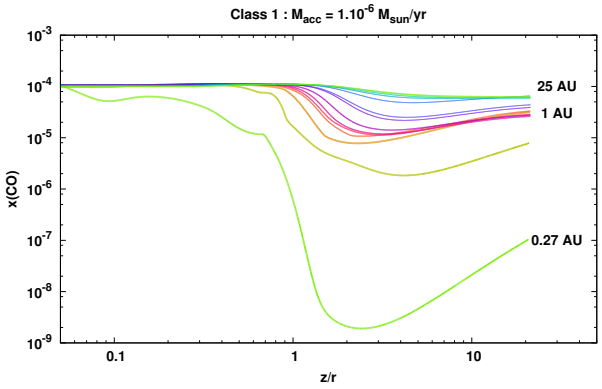


FIGURE 3.20 – *Abondance fractionnelle de* CO*, le long des lignes d'écoulement en fonction de z/r pour le modèle de classe I à $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$. Le rayon de lancement est indiqué à droite.*

L'abondance de CO le long des lignes d'écoulement pour un modèle de classe I est présentée sur la Figure 3.20. À l'instar de H_2, la molécule CO est rapidement détruite le long de la première ligne d'écoulement. Quand on se place à z/r constant on constate que l'abondance de CO tend vers sa valeur maximale quand r_0 augmente.

Temps caractéristiques de formation et de destruction de CO

La Figure 3.21 montre les temps caractéristiques associés aux réactions de formation et de destruction de CO pour un modèle de classe I, le long de la ligne d'écoulement ancrée à $r_0 = 1$ UA. La chimie est plus rapide que celle de H_2 et la nouvelle approche pour le calcul de la densité de colonne d'écrantage influe sur le taux de photodissociation et modifie plus largement l'abondance de CO (Figure 3.21). Les principales réactions de formation et de destruction chimique de CO sont :

$$\begin{aligned} HCO^+ + H_2O &\rightarrow H_3O^+ + CO \\ HCO^+ + e^- &\rightarrow H + CO \\ H_3^+ + CO &\rightarrow HCO^+ + H_2 \end{aligned}$$

12. Ce rayon d'ancrage correspond à la deuxième ligne d'écoulement. Les temps caractéristiques des réactions de formation / destruction de H_2 sur la première ligne d'écoulement ($r_0 = R_{\rm sub}$) sont plus "particuliers" car la densité de colonne de H_2 y est nulle et H_2 n'est pas écrantée contre le rayonnement UV. Sur la Figure 3.16 on constate d'ailleurs que l'abondance de H_2 est très faible comparée à ce qu'elle est sur les lignes d'écoulement suivantes.

la dernière réaction domine la destruction de CO aux faibles altitudes avant de s'inverser pour contribuer à la formation de CO, mais cesse de dominer devant la réaction de formation de CO par recombinaison dissociative de HCO^+ : $HCO^+ + e^- \rightarrow CO + H$.

La Figure 3.22 montre les temps caractéristiques associés aux réactions de formation et de destruction de CO pour le modèle de classe II. La photodissociation et la réaction $H_3^+ + CO \rightarrow HCO^+ + H_2$ consomment CO et sont en compétition avec les réactions de reformation de $HCO^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + CO$. La photodissociation est efficace au plus proche de l'étoile. L'importance de la photodissociation augmente lorsque $\dot{M}_{\rm acc}$ diminue. La photodissociation par les photons secondaires reste négligeable.

De manière générale pour H_2 et CO les réactions de photodissociation ne jouent pas un rôle important pour les jets de classe 0 à cause du trop fort écrantage du rayonnement UV dû à la densité de gaz élevée. Ainsi dans les classes 0, particulièrement au plus fort taux d'accrétion, l'abondance de CO est presque constante, et proche de 10^{-4} relativement à $n_{\rm H}$, de même l'hydrogène est complètement moléculaire pour ces objets.

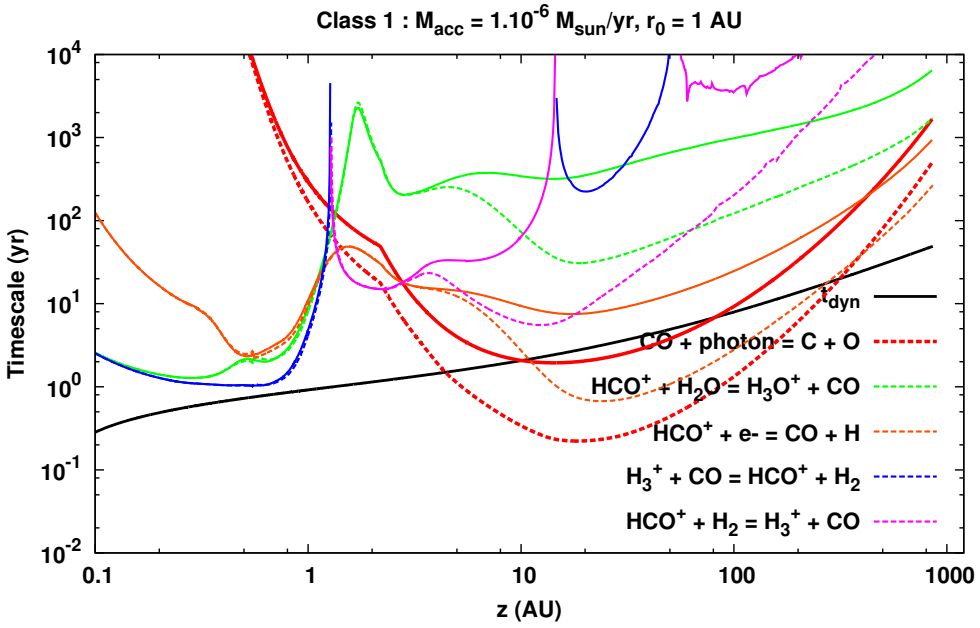


FIGURE 3.21 – *Même figure que la Figure 3.17 mais impliquant* CO. *Les courbes en pointillés correspondent aux résultats obtenus avec la nouvelle approche pour le calcul de la densité de colonne de* CO. *Les courbes en trait plein correspondent à l'approximation de Panoglou et al. (2012).*

Néanmoins, l'abondance finale de CO résulte de la compensation de la réaction de photodissociation par la réaction de formation de CO à partir de HCO^+.

VI.4-3 Densités de colonne totale

Les résultats obtenus avec les deux méthodes (Panoglou et al. (2012) et l'actuelle) sont comparés sur les Figures 3.23 et 3.24 qui présentent la densité de colonne de H_2 et de CO en fonction de z/r. À forte densité (classe 0) les deux méthodes donnent un résultat sensiblement identique puisque H_2 reste moléculaire. Dans le cas de la classe I (et de la classe II) la nouvelle méthode donne un écrantage plus faible par rapport à l'ancienne

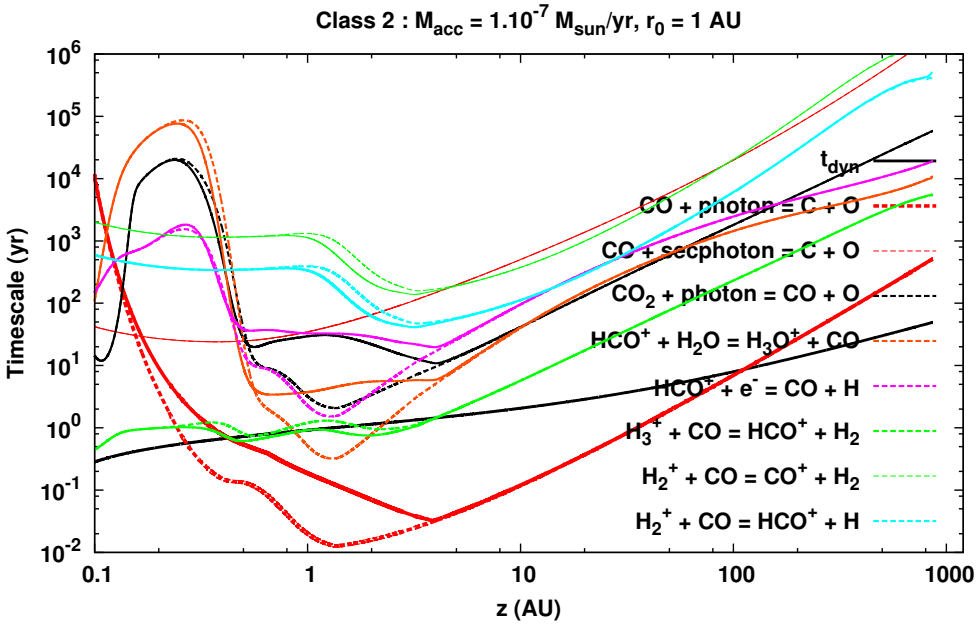


FIGURE 3.22 – *Temps caractéristique pour la formation / destruction de* CO *dans le cas du modèle de classe II,* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*, à* $r_0 = 1\,{\rm UA}$

méthode. L'écart est d'autant plus grand que la ligne d'écoulement est lancée proche de l'étoile. En effet la densité de colonne d'écrantage est nulle sur la première ligne d'écoulement et sur les suivantes elle cumule la quantité de molécules qui ont survécue face au rayonnement UV sur les lignes d'écoulement les plus internes.

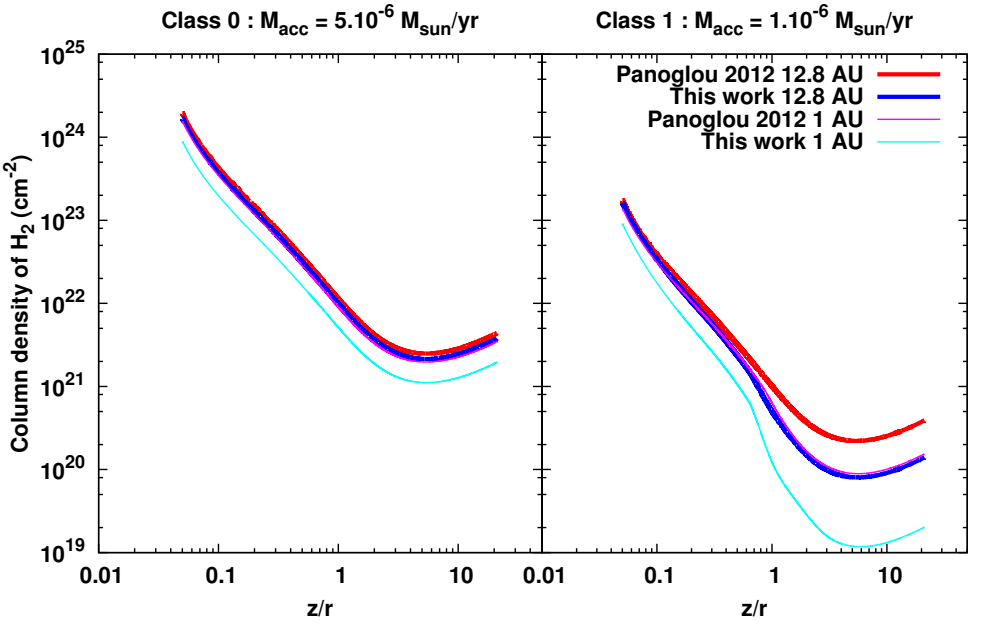


FIGURE 3.23 – *Densité de colonne de* H_2 *le long de deux lignes d'écoulement calculée selon la nouvelle méthode et comparée à la méthode précédente en fonction de* $x = z/r$ *pour deux modèles de vent de disque.*

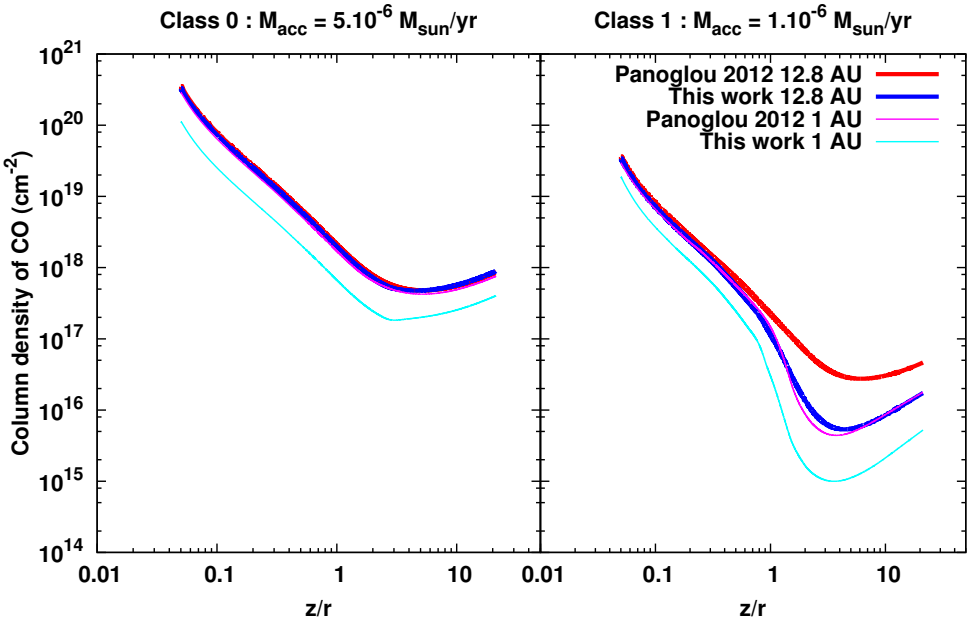


FIGURE 3.24 – *Densités de colonne de* CO *obtenues avec les deux méthodes.*

VI.5 TEMPÉRATURE DU GAZ

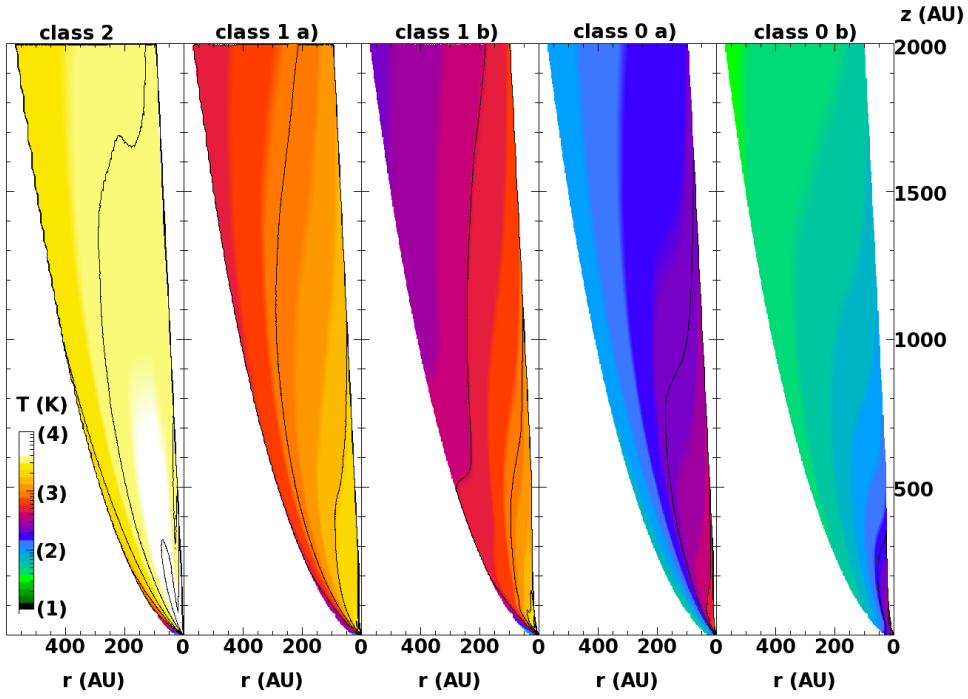


FIGURE 3.25 – *Carte 2D poloïdale de température dans le jet pour les 5 modèles réalisés (classe I a) correspond à* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*, b) correspond à* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*, la classe 0 a) correspond à* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ *et b) à* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*). La température est représentée sur la même échelle de couleur de 10 à* 10^4 K*, les nombres entre parenthèses indiquent la puissance de 10.*

Les cartes de la température dans les différents modèles réalisés (voir Table 2.1) dans une coupe poloïdale du jet (2D) sont représentées sur la Figure 3.25. Pour la classe II, la température est supérieure à 1000 K et diminue pour les objets plus jeunes. Sur les cartes 2D du jet les petites échelles ne sont pas facilement accessibles. La Figure 3.26 montre la température le long de la seule ligne d'écoulement ancrée à $r_0 = 1$ UA. Après une forte augmentation à $z < 10$ UA, notamment pour les objets de classe I et II, la température décroît dans tous les cas relativement lentement quand z augmente.

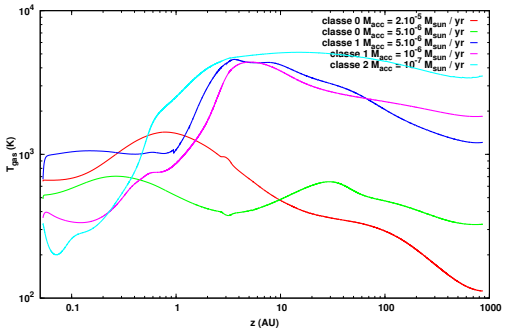


FIGURE 3.26 – *Température du gaz le long de la ligne d'écoulement ancrée à* $r_0 = 1$ UA *pour les 5 modèles de vent de disque.*

Pour les classes I et II, le gaz est plus froid à la base du jet que pour les classes 0. Pour ces deux classes, la température du gaz atteint un même pic à 5000 K à une altitude de 1 UA. Inversement les classes 0 possèdent des températures plus basses que les classes I et II à l'extrémité des lignes d'écoulement (au point de recollimation). Les différents processus de chauffage et de refroidissement aboutissant à l'établissement de la température sont discutés au Chapitre 4.

VI.6 IONISATION

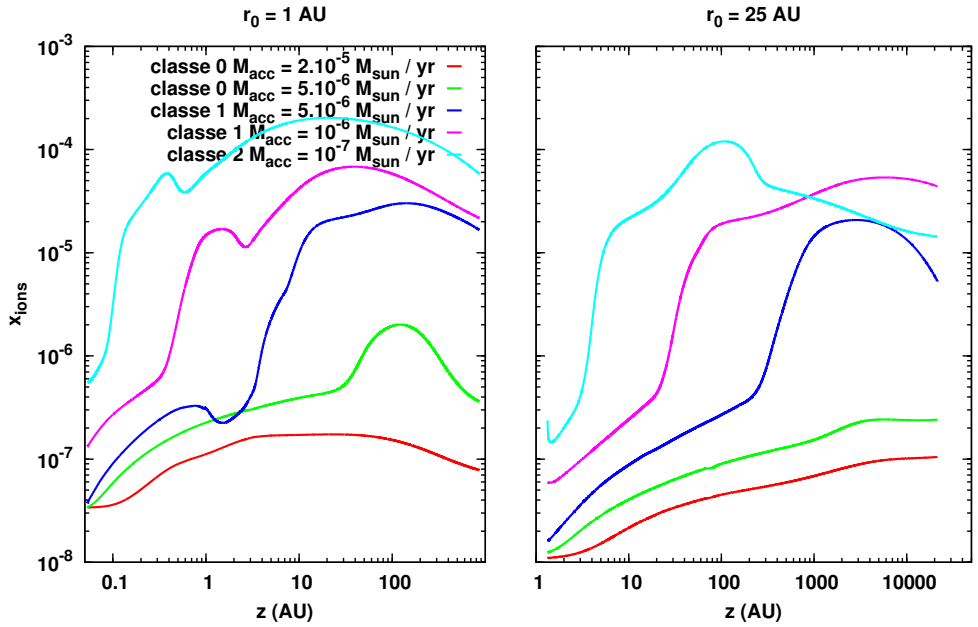


FIGURE 3.27 – *Fraction d'ionisation le long de la ligne d'écoulement ancrée à 1* UA *à gauche et ancrée à 25* UA *pour les différents modèles précisés sur la Figure de gauche*

Les cartes sur la Figure 3.27 montrent l'ionisation le long de quelques lignes d'écoulement pour les 5 modèles présentés. Cette fraction d'ionisation $x(I)$ (fraction totale des

ions relativement à $n_{\rm H}$) est la plus élevée dans la classe II ou le gaz est plus fortement ionisé par le rayonnement UV et X de l'étoile. $x(I)$ diminue pour la classe I à la base des lignes d'écoulement, mais reste élevée à z plus élevé. Par contre la fraction d'ions est fortement réduite dans la classe 0 où le gaz est assez dense pour atténuer efficacement les rayonnements ionisants, en particulier dans le modèle de classe 0 avec le plus fort taux d'accrétion. Pour de telles densités les charges négatives sont portées par les grains et la fraction d'électrons libres devient très faible.

– Quand $x(I) < 10^{-6}$: les principaux porteurs de la charge négative sont les PAH^-, et les principaux porteurs de charge positive sont des molécules comme H_3^+, HCO^+ et H_3O^+.
– Quand $x(I) > 10^{-6}$: la charge négative est toujours portée par les électrons, et la charge positive est portée par les espèces atomiques principalement, comme C^+, H^+ et S^+.

VI.7 Abondances des espèces moléculaires

Les courbes détaillées présentant les abondances de quelques espèces chimiques le long de différentes lignes d'écoulement pour les modèles réalisés de classe 0, I et II sont placées en annexe A.VI (page 267).

Formation, destruction de CO

La Figure 3.28 présente la distribution de l'abondance de CO dans les modèles de classe II, I et 0. Pour les classes 0, CO se reforme aussi rapidement qu'il est détruit et son abondance ne diminue pas. Pour le modèle de classe I avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}, {\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$ son abondance est aussi relativement constante le long du jet, excepté à la base du jet, à grands r_0 où, du fait des conditions initiales, il est 50% moins abondant qu'à la fin des mêmes lignes d'écoulement. Pour une même classe I mais avec un taux d'accrétion cinq fois plus faible, CO est photodissocié par les UV dans la partie interne du jet alors qu'il reste protégé dans la partie externe ce qui forme un jet "creux" en CO où l'abondance diminue d'un facteur ∼10.

Dans le cas de la classe II, CO est abondant $\simeq 10^{-4}$ à la surface du disque mais il est rapidement dissocié par les UV, en particulier sur la première ligne d'écoulement où il n'est pas du tout écranté. À la base des lignes d'écoulement suivantes CO se reforme par la réaction $HCO^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + CO$ (avec une abondance de $\sim 10^{-5}$) dans la région où la température est la plus forte et où le taux d'ionisation est le plus important. Dans la majorité du jet l'abondance de CO est $\sim 10^{-6}$.

Formation, destruction de H_2O

La répartition de l'abondance en H_2O dans les différents jets est représentée sur la Figure 3.29. Dans le cas des classes 0 et I, le temps caractéristique de photodissociation de H_2O est légèrement plus important que le temps dynamique, ainsi H_2O survit en grande

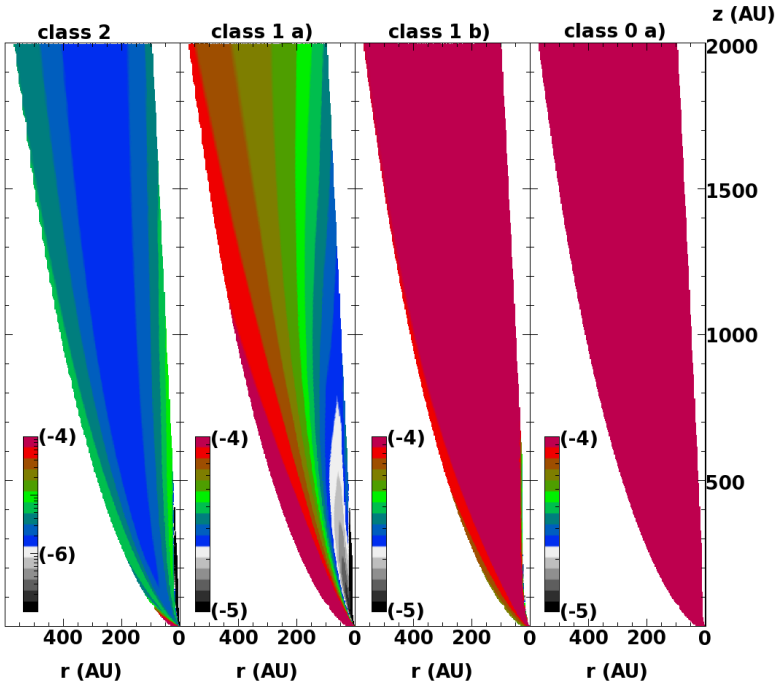


FIGURE 3.28 – *Carte 2D poloïdale de l'abondance en* CO $(n(\mathrm{CO})/n_{\mathrm{H}})$ *dans le jet pour 4 des 5 modèles réalisés. Les nombres entre parenthèses indiquent les puissances de 10. L'abondance de* CO *pour le jet de la classe 0 b) avec* $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 2\times10^{-5}\,\mathrm{M}_{\odot}\,\mathrm{yr}^{-1}$*, qui n'est pas montrée ici, est constante et vaut* 9×10^{-5}

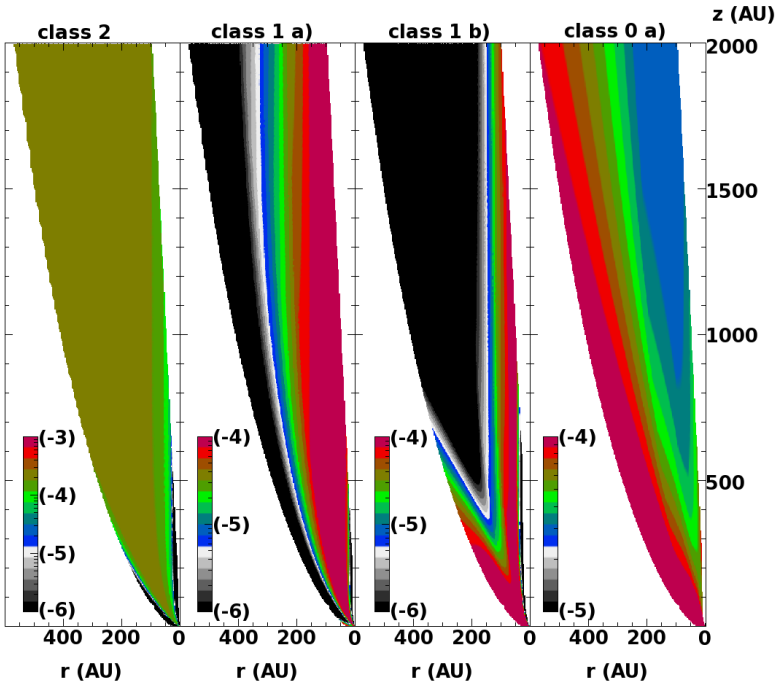


FIGURE 3.29 – *Carte 2D poloïdale de l'abondance en* H_2O $(n(\mathrm{H_2O})/n_{\mathrm{H}})$ *dans le jet pour 4 des 5 modèles réalisés Les nombres entre parenthèses indiquent les puissances de 10. L'abondance de* H_2O *pour le jet de la classe 0 b) avec* $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 2\times10^{-5}\,\mathrm{M}_{\odot}\,\mathrm{yr}^{-1}$*, qui n'est pas montrée ici, est constante et vaut* 1.2×10^{-4}

quantité, car cette réaction est balancée par la chaine de formation neutre-neutre :

$$\begin{aligned} O + H_2 &\rightarrow OH + H - 2980\,K \\ OH + H_2 &\rightarrow H_2O + H - 1490\,K \end{aligned} \tag{3.44}$$

Comme les conditions initiales conduisent à une forte abondance de H_2O au départ des lignes d'écoulement, cette abondance est conservée. Pour la classe 0 avec le plus haut taux d'accrétion le rayonnement UV est fortement atténué et H_2O n'est pas photodissociée et son abondance reste constante et élevée, comme on peut le voir sur la Figure 3.30 à $r_0 = 1$ et 25 UA. Pour la classe 0 avec $\dot{M}_{acc} = 5 \times 10^{-6}\,M_\odot\ yr^{-1}$, l'abondance en H_2O est à sa valeur initiale le long des lignes d'écoulement puis décroit vers $z/r \simeq 10$ mais elle ne passe pas en dessous de 30% de sa valeur initiale. Cette effet est plus limité sur l'extérieur du jet, car ici H_2O est plus rapidement photodissocié par les UV qu'il ne se reforme.

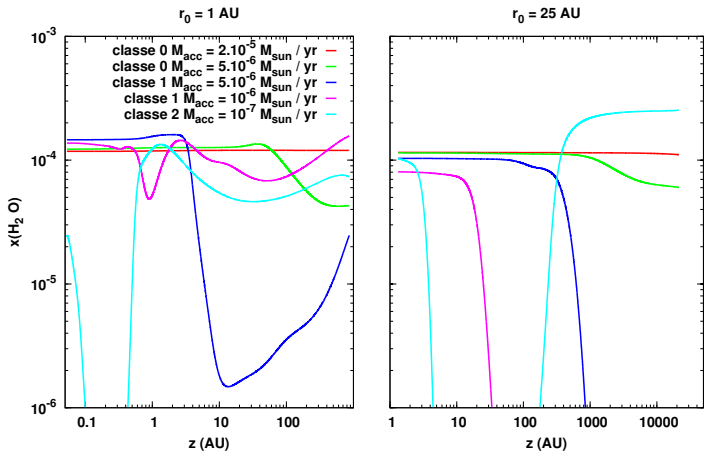


FIGURE 3.30 – *Abondance de* H_2O *le long de la ligne d'écoulement ancrée à 1* UA *à gauche et à 25* UA *à droite pour les différents modèles.*

Le long des jets de classe I, la photodissociation commence à dominer et l'abondance de H_2O diminue plus fortement. Dans le cas du modèle de classe I avec $\dot{M}_{acc} = 5 \times 10^{-6}\,M_\odot\ yr^{-1}$, H_2O est photodissocié sur la face interne du jet (le long de la première ligne d'écoulement,). Pour $r_0 < 6$ UA, H_2O parvient à se reformer aussi rapidement qu'il est photodissocié. Mais ce n'est plus le cas après $r_0 > 6$ UA où H_2O est photodissocié jusque $z \simeq$ 2000UA. L'abondance en H_2O commence à augmenter au delà de $z = 2000$ UA.

Toujours le cas du modèle de classe I a) ($\dot{M}_{acc} = 10^{-6}\,M_\odot\ yr^{-1}$), H_2O est abondante à proximité de l'axe du jet où elle se reforme par réaction neutre-neutre face à la photodissociation grâce à une température du gaz élevée.

Ainsi, la répartition de l'abondance en H_2O dans ce modèle à une forme en L inversé sur la carte 2D : H_2O est aussi abondante que dans les classes 0 près de l'axe du jet et dans les régions de basse altitudes proches du disque d'accrétion. Ailleurs, l'abondance en H_2O décroît rapidement.

À la base du jet, à grand r_0, les réactions de formation / destruction sont plus lentes que le temps dynamique, comme montré sur la Figure 3.31 pour $r_0 = 25$ UA (cette ligne d'écoulement représente bien ce qui se déroule à $r_0 > 6$ UA). Ainsi l'abondance en H_2O reste égale à celle des conditions initiales. H_2O est ensuite photodissociée par le rayonnement UV et ce n'est qu'au delà de $z = 5000$ UA que H_2O se reforme par recombinaison dissociative de H_3O^+.

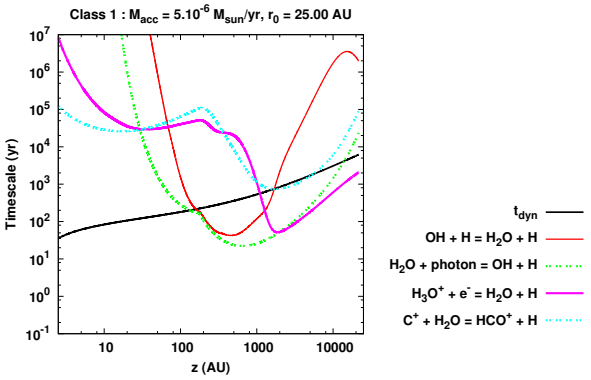


FIGURE 3.31 – *Temps caractéristique de formation (trait continu) et de destruction (trait pointillé) de* H_2O *le long de la ligne d'écoulement à 25* UA *pour le modèle de classe I b).*

Mais son abondance chute rapidement à mesure que r augmente car H_2O est photodissociée. Dans cette zone l'abondance de CO augmente fortement comme montré sur la Figure 3.28.
Dans le modèle de classe II la température élevée permet la formation de H_2O par réaction neutre-neutre qui balance la photodissociation le long des lignes d'écoulement proches de l'étoile. Pour les lignes d'écoulement lancées à grand r_0, la photodissociation est dans un premier temps compensée par la recombinaison dissociative de l'ion H_3O^+ puis à $z > 10$ UA par la formation neutre-neutre à partir de OH.

Ces réactions se compensent et maintiennent une abondance de H_2O proche de 10^{-4}. La réaction $C^+ + H_2O \rightarrow HCO^+ + H$ et l'ionisation de H_2O par les photons UV ont aussi le temps de se produire mais elles jouent un rôle moindre.

Autres molécules

Les cartes de l'abondance de OH dans les différents modèles réalisés sont présentées sur la Figure 3.32. OH est plus abondant dans la classe II et dans les parties du jet les plus proches de l'axe pour la classe I de faible taux d'accrétion. De la même manière, la Figure 3.33 montre la carte de l'abondance en SiO. Cette molécule est abondante dans les jets de classe 0, et ce d'autant plus abondante que le taux d'accrétion est élevé. Car elle y est moins facilement photodissociée par le rayonnement UV de l'étoile que dans les classes I et dans les classes II. Dans ces modèles SiO parvient à se reformer près de l'axe du jet à partir de $z/r > 15$. La Figure 3.34 montre la carte de l'abondance en NH_3. Dans les modèles de classe 0 NH_3 est abondante avec $x(NH_3) \sim 10^{-6}$, mais ce n'est pas le cas dans les modèles de classe I où la molécule est surtout présente près de la surface du disque. Par contre elle est reformée rapidement dans les jets de classe II.

VII Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé :

1) les propriétés du champ de rayonnement dans le vent de disque. Ce rayonnement UV et X issus de la protoétoile a une forte influence sur l'ionisation du gaz et sur les réactions chimiques.
2) les propriétés des poussières ainsi que la nouvelle méthode utilisée au cours de ce travail de thèse pour calculer le profil de température des poussières. Cette méthode possède aussi l'avantage de nous permettre de calculer le pompage infrarouge induit par le rayonnement des poussières sur les niveaux de H_2O et de CO (détaillé au Chapitre 5).
3) de présenter le réseau de réactions chimiques dans lequel nous avons amélioré la méthode de calcul de la densité de colonne d'écrantage de H_2 et de CO face à la photodissociation par les rayons UV. Cette nouvelle approche est plus cohérente et im-

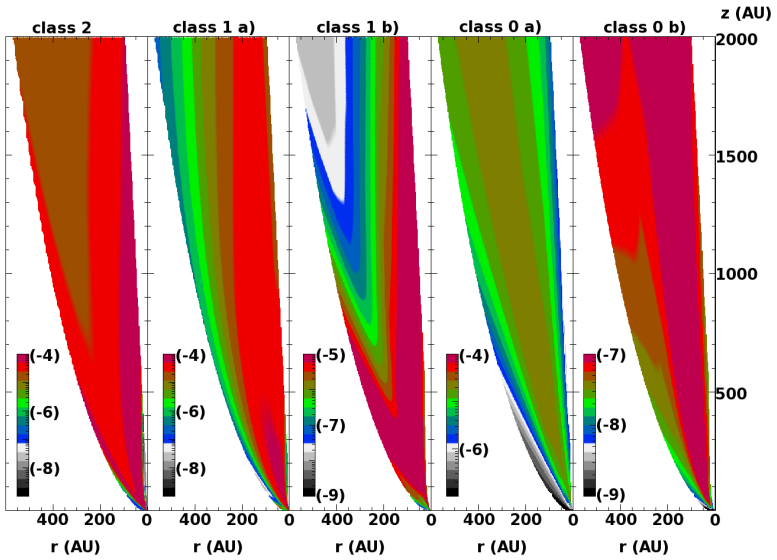


FIGURE 3.32 – *Carte 2D poloïdale de l'abondance en* OH $(n(\mathrm{OH})/n_{\mathrm{H}})$ *dans le jet pour les 5 modèles réalisés Les nombres entre parenthèses indiquent les puissances de 10.*

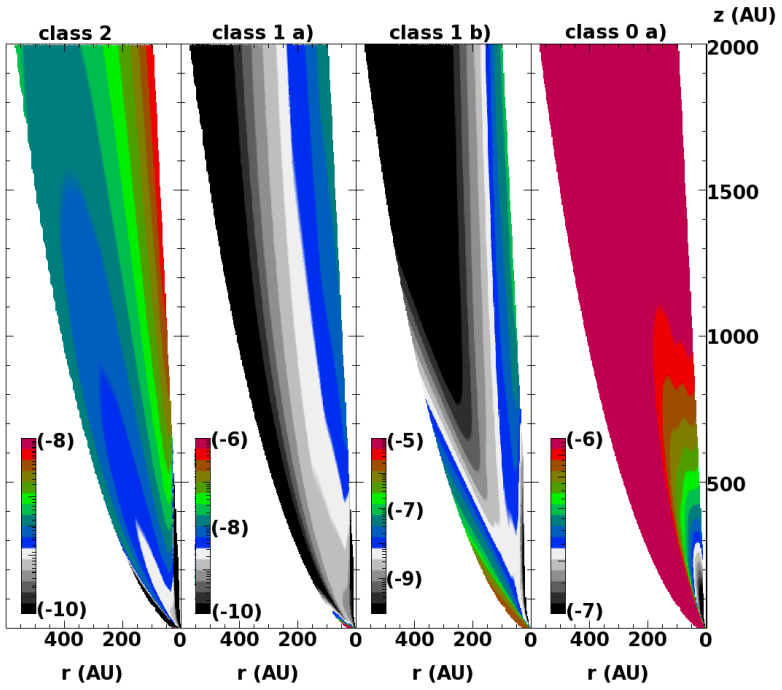


FIGURE 3.33 – *Carte 2D poloïdale de l'abondance en* SiO $(n(\mathrm{SiO})/n_{\mathrm{H}})$ *dans le jet pour les 4 des 5 modèles réalisés Les nombres entre parenthèses indiquent les puissances de 10. Dans le jet de classe 0 b),* $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 2\times10^{-5}\,\mathrm{M}_{\odot}\,\mathrm{yr}^{-1}$*, qui n'est pas montré ici, l'abondance de* SiO *est constante et égale à* 1.8×10^{-6}

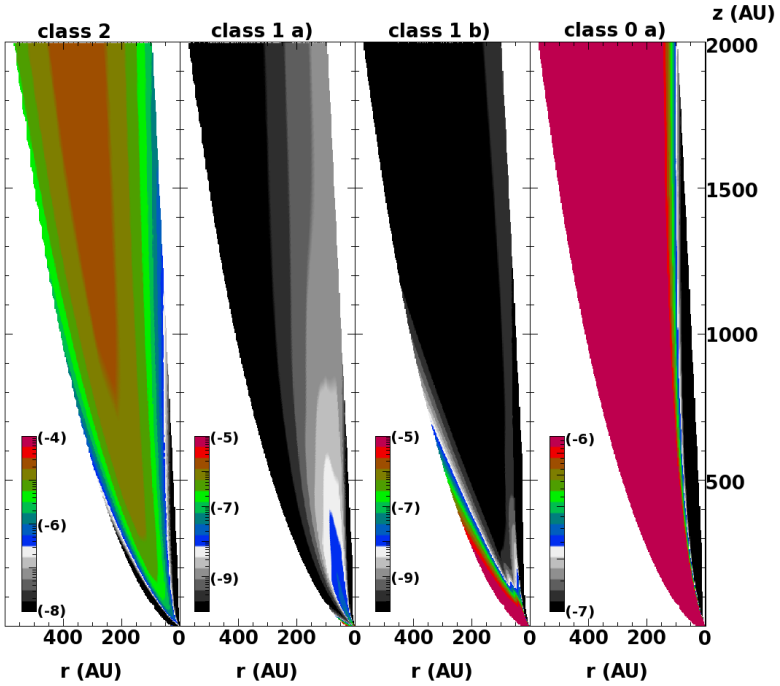


FIGURE 3.34 – *Carte 2D poloïdale de l'abondance en* NH_3 *(*$n(NH_3)/n_H$*) dans le jet pour les 4 des 5 modèles réalisés Les nombres entre parenthèses indiquent les puissances de 10. Dans le jet de classe 0,* $\dot{M}_{acc} = 2 \times 10^{-5}\,M_\odot\,yr^{-1}$*, qui n'est pas montré ici, l'abondance de* NH_3 *est constante et égale à* 2.2×10^{-5}

pose une nouvelle rigueur dans le calcul de l'état thermochimique le long des lignes d'écoulement. Elle modifie le calcul des lignes d'écoulement et impose une discrétisation en r_0 dans le découpage du jet. Il est important de rappeler que H_2 a la capacité de survivre face au rayonnement UV de l'étoile même dans les jets de classe II.

4) le long des lignes d'écoulement, l'étude menée sur les temps de désorption justifie l'hypothèse que les manteaux de glace des grains soient partout évaporés dans les différents modèles.

Les processus de désorption jouent un rôle important et pourraient être intégrés au réseau chimique. Des avancées expérimentales sur les mesures d'efficacité de photodesorption peuvent être attendues. Dans les parties externes du jet, notamment pour les jets de classe 0, il est possible que des glaces puissent se reformer, provoquant une déplétion en H_2O. De plus, un traitement des propriétés optiques des poussières pourrait tenir compte de la présence éventuelle de manteaux à leur surface dans ces régions.

On peut comparer les abondances initiales utilisées ici avec les résultats des travaux de simulation numérique Hincelin (2012) combinant les codes de MHD non idéale RAMSES (Commerçon et al. 2010) et de chimie Nautilus (Hincelin et al. 2011) où pour un objet de faible masse $M_\star + M_{env} \leq 1\,M_\odot$ les abondances fractionnelles dans le disque ou le pseudo disque en CO sont de $\sim 10^{-5}$ et de $< 10^{-5}$. Donc plus faibles que celles que nous obtenons.

Enfin le modèle est pour l'instant limité à l'extérieur du rayon de sublimation des poussières. Une amélioration intéressante serait d'intégrer la chimie le long de lignes d'écoulement à l'intérieur de ce rayon de sublimation. Ce qui suppose d'adapter le traitement de la chimie à un gaz dépourvu de grain et d'y ajouter des réactions à 3 corps comme la formation de H_2 en phase gazeuse.

TABLE 3.4 – *Liste des rayons d'ancrages pour toutes les lignes d'écoulement réalisées.*

Classe II, Modèle de référence $\dot{M}_{\rm acc} = 1 \times 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
Numéro	01	02	03	04	05	06	07	08
r_0(UA)	0.15	0.20	0.40	0.60	0.80	1.00	1.20	1.60
Numéro	09	10	11	12	13	14	15	16
r_0(UA)	2.80	3.20	6.40	9.60	12.8	16.0	19.2	22.4
Numéro	17	-	-	-	-	-	-	-
r_0(UA)	25.0	-	-	-	-	-	-	-
Classe I, Modèle de référence $\dot{M}_{\rm acc} = 1 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
Numéro	01	02	03	04	05	06	07	08
r_0(UA)	0.27	0.40	0.60	0.80	1.00	1.20	1.60	2.80
Numéro	09	10	11	12	13	14	15	16
r_0(UA)	3.20	6.40	9.60	12.8	16.0	19.2	22.4	25.0
Classe I, Second modèle $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
Numéro	01	02	03	04	05	06	07	08
r_0(UA)	0.64	0.70	0.80	1.00	1.20	1.60	2.80	3.20
Numéro	09	10	11	12	13	14	15	-
r_0(UA)	6.40	9.60	12.8	16.0	19.2	22.4	25.0	-
Classe 0, Modèle de référence $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
Numéro	01	02	03	04	05	06	07	08
r_0(UA)	0.31	0.40	0.60	0.80	1.00	1.20	1.60	2.80
Numéro	09	10	11	12	13	14	15	16
r_0(UA)	3.20	6.40	9.60	12.8	16.0	19.2	22.4	25.0
Classe 0, Second modèle $\dot{M}_{\rm acc} = 2 \times 10^{-5}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
Numéro	01	02	03	04	05	06	07	08
r_0(UA)	0.63	0.70	0.80	1.00	1.20	1.60	2.80	3.20
Numéro	09	10	11	12	13	14	15	-
r_0(UA)	6.40	9.60	12.8	16.0	19.2	22.4	25.0	-

Cette table liste l'ensemble des rayons d'ancrage correspondants aux lignes d'écoulement calculées pour tous les modèles présentés ici. Le rayon de sublimation, correspondant à la première ligne d'écoulement de chaque série, est surligné en bleu. Les lignes d'écoulements surlignées en vert correspondent aux valeurs de $r_0^{\rm max}$ utilisées dans le calcul d'observations synthétiques (voir Chapitre 6). Les lignes d'écoulements surlignées en rouge n'ont pas convergé.

Chapitre

4

Chauffage et refroidissement dans le modèle de vent de disque MHD

Sommaire

I Système d'équations résolues . . . 84
I.1 Conservation du nombre de particules . . . 85
I.2 Conservation de la masse des trois fluides . . . 86
I.3 Conservation de l'énergie . . . 87
II Termes de chauffage et de refroidissement . . . 88
II.1 Raies atomiques et moléculaires . . . 88
II.1-1 Refroidissement dans les raies moléculaires . . . 89
II.1-2 Refroidissement dans les raies atomiques . . . 93
II.2 Thermalisation avec les grains . . . 94
II.3 Chauffage par le rayonnement X et UV . . . 94
II.3-1 Chauffage par les rayons X et les rayons cosmiques . . . 94
II.3-2 Effet photo-électrique sur les grains . . . 96
II.4 Chauffage MHD . . . 97
II.5 Reactions chimiques . . . 99
II.5-1 Chauffage par formation de H_2 . . . 100
II.5-2 Refroidissement par dissociation de H_2 . . . 100
III Conclusion . . . 101

Résumé : *Ce chapitre traite des termes d'échange d'énergie intégrés dans le modèle. En première partie, les équations de conservation sont présentées, suivies en seconde partie, des termes de chauffage et de refroidissement constituant les termes sources de l'équation de l'énergie. Le chauffage par diffusion ambipolaire et le refroidissement dans les raies moléculaires de* H_2O *et* H_2 *sont respectivement les deux termes de chauffage / refroidissement dominants. Néanmoins le couplage thermique avec les grains joue un rôle important à la base du jet.*

Une modification importante introduite pendant ce travail de thèse concerne les termes de refroidissement par excitation collisionnelle de CO *et* H_2O*, maintenant calculés à partir des états de peuplement des niveaux rotationnels hors équilibre, en prenant en compte le pompage infrarouge par le champ diffus de l'enveloppe de poussières (voir Chapitre 5).*

Introduction Le calcul de l'état thermochimique du gaz se fait au travers d'une approche lagrangienne, par la résolution numérique de près de 300 équations différentielles couplées, comprenant les équations d'évolution de la température du gaz, de la densité des 134 espèces chimiques et des niveaux rotationnels de H_2, CO et H_2O. La résolution numérique de ces ED couplées fait appel à l'intégrateur Fortran DVODE (Brown et al. 1989). Le suivi de l'évolution thermique, chimique et radiative le long d'une ligne d'écoulement commence au point magnétosonique et s'arrête au point de recollimation.

Ce chapitre présente le calcul des termes source de ces équations. Les modifications effectuées au cours de ce travail de thèse portent sur le refroidissement dans les raies de CO et de H_2O, ainsi que le refroidissement par thermalisation avec les grains dont la température est maintenant calculée de façon plus rigoureuse. Le calcul de l'auto écrantage de H_2 et de CO a également été amélioré (Chapitre 3), ce qui a ajouté une interdépendance entre les différentes lignes d'écoulement (Chapitre 3) qui a nécessité la création de nouveaux fichiers d'entrées-sorties afin de pouvoir connaître la densité de colonne totale d'écrantage sur toutes les lignes d'écoulement internes avant le point courant. Les autres termes de chauffage/refroidissement sont identiques à ce qui est présenté par Panoglou et al. (2012).

I Système d'équations résolues

• Dérivée lagrangienne

Quand l'évolution d'une grandeur est suivie en un point qui se déplace dans l'espace, il est utile d'exprimer sa dérivée lagrangienne $\frac{\mathrm{D}f}{\mathrm{D}t}$*, ou dérivée totale ou encore dérivée convective, qui permet de distinguer les variations purement temporelles de la fonction des variations purement provoquées par le déplacement du point dans l'espace :*

$$\frac{\mathrm{D}f}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\mathrm{v}} \cdot \vec{\nabla} f \tag{4.1}$$

où $\vec{\mathrm{v}}$ *est la vitesse du point considéré.*

Le modèle considéré ici étant stationnaire ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$*) on aura :*

$$\frac{\mathrm{D}f}{\mathrm{D}t} = \vec{\mathrm{v}} \cdot \vec{\nabla} f$$

• Théorème du transport de Reynolds

Pour dériver par rapport au temps l'intégrale spatiale d'une fonction scalaire de plusieurs variables $f(x,t)$*, une de temps et une d'espace et dont les bornes* $a(t)$ *et* $b(t)$ *dépendent de la variable de dérivation, le théorème de Leibnitz permet d'écrire :*

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}\int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t)\mathrm{d}x = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f(x,t)}{\partial t}\mathrm{d}x + f(b(t),t)\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} - f(a(t),t)\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}$$

Cette expression peut se généraliser à 3 dimensions $\vec{r} = (x, y, z)$ pour un volume de contrôle V_f

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}\iiint_{V_f} f(\vec{r},t)\mathrm{d}V = \iiint_{V_f}\frac{\partial f}{\partial t}\mathrm{d}V + \oiint_{S_f} f(\vec{r},t)\vec{\mathrm{v}}(\vec{r},t)\cdot\mathrm{d}\vec{S} \tag{4.2}$$

où $\vec{\mathrm{v}}$ est la vitesse. En appliquant le théorème de Green-Ostrogradsky au deuxième terme de droite, on obtient l'équation suivante :

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}\iiint_{V_f} f(\vec{r},t)\mathrm{d}V = \iiint_{V_f}\left(\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot(f\vec{\mathrm{v}})\right)\mathrm{d}V \tag{4.3}$$

ici dV *est le volume élémentaire. Dans la limite où $V_f \to 0$,*

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}(fV) &= \frac{\mathrm{D}f}{\mathrm{D}t}V + f\frac{\mathrm{D}V}{\mathrm{D}t}\\ &= V\times\left(\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot(f\vec{\mathrm{v}})\right)\end{aligned} \tag{4.4}$$

pour $f = 1$, on obtient :

$$\frac{\mathrm{D}V}{\mathrm{D}t} = V\vec{\nabla}\cdot\vec{\mathrm{v}} \tag{4.5}$$

et

$$\frac{1}{V}\frac{\mathrm{D}V}{\mathrm{D}t} = \frac{\mathrm{D}\ln V}{\mathrm{D}t} = \vec{\nabla}\cdot\vec{\mathrm{v}} \tag{4.6}$$

ainsi la divergence de la vitesse locale du fluide en un point correspond au taux relatif de variation d'un volume élémentaire covariant du fluide au même point. En injectant (4.5) dans (4.4) et en écrivant $\vec{\nabla}(f\vec{\mathrm{v}}) = \vec{\mathrm{v}}\cdot\vec{\nabla}f + f\vec{\nabla}\vec{\mathrm{v}}$, on retrouve la dérivée lagrangienne de f (4.1).

Le gaz, est composé de neutres n (atomes, molécules, grains), d'ions porteurs de charges positives (ions, grains$^+$) notés i, et des porteurs de charges négatives (électrons, grains$^-$) noté e. Les collisions sont supposés être assez importantes entre ces différentes composantes, pour que tous aient la même température.

I.1 Conservation du nombre de particules

La conservation du nombre de particules d'une espèce a appartenant au fluide $f \in \{n,\ i,\ e\}$ s'exprime dans le cas stationnaire par (équation (4.4) stationnaire avec $f = n_a$) :

$$\vec{\nabla}(n_a\vec{\mathrm{v}_f}) = R_a = \frac{1}{V}\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}(n_aV) \tag{4.7}$$

où n_a est le nombre de particules par unité de volume et R_a est le taux de variation du nombre de particules a par unité de volume et de temps.

Ce taux est induit par la création et la destruction d'espèces par les réactions chimiques. R_a dépend de la densité de l'espèce a, des autres espèces, de la température et du champ de rayonnement (voir Chapitre 3). La stationnarité donne aussi :

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{D}n_a}{\mathrm{D}t} &= \vec{\mathrm{v}}_f \cdot \vec{\nabla} n_a \\ &= v_z \frac{\mathrm{d}n_a}{\mathrm{d}z}\end{aligned}$$

on obtient donc l'équation de conservation intégrée dans le modèle :

$$\frac{\mathrm{d}n_a}{\mathrm{d}z} = \frac{R_a - n_a \vec{\nabla}.\vec{\mathrm{v}}_f}{\mathrm{v}_{z,f}} \tag{4.8}$$

Toutes les espèces du fluide f ont la même vitesse $\mathrm{v}_f = \mathrm{v}$. Pour le fluide f, en sommant sur toutes ses espèces a, on peut aussi écrire :

$$\vec{\nabla}(n_f \vec{\mathrm{v}}_f) = R_f$$

Pour obtenir l'équation pour le fluide f, on somme tous les termes des espèces a appartenant à ce fluide :

$$\frac{\mathrm{d}n_f}{\mathrm{d}z} = \frac{R_f - n_f \vec{\nabla}.\vec{\mathrm{v}}}{\mathrm{v}_{z,f}}$$

où v_z est la composante verticale de la vitesse.

I.2 Conservation de la masse des trois fluides

La masse volumique totale $\rho = \rho_n + \rho_i + \rho_e$ est donnée le long de la ligne d'écoulement par la solution MHD. La relation de conservation de la masse de chaque fluide, où ρ_f est la masse volumique du fluide f, est utilisée pour s'assurer de la cohérence des résultats et pour calculer le terme $\chi = \rho_i/\rho_n$ intervenant dans la vitesse de dérive ions-neutres v_{in} (voir Chapitre 2).

La masse volumique du fluide f est :

$$\rho_f = \sum_{a \in f} n_a m_a = n_f \mu_f$$

Le taux de variation de la masse dans le fluide f causée par les réactions d'ionisation ou de recombinaison, S_f est :

$$S_f = \sum_{a \in f} S_a, \quad \text{avec} \quad S_a = R_a m_a$$

et comme pour toutes les espèces a et fluides f, il n'y a ni création, ni destruction de masse :

$$\sum_a S_a = \sum_f S_f = 0$$

Le théorème du transport (4.4) avec $f = \rho_f$ et S_f comme terme source et $\partial/\partial t = 0$ donne :

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho_f \vec{\mathrm{v}}_f) = S_f$$

Pour le fluide f, la conservation de la masse est intégrée numériquement sous la forme :

$$\vec{\mathrm{v}}_f \cdot \vec{\nabla}\rho_f = S_f - \rho_f \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathrm{v}}_f \tag{4.9}$$

Le long des lignes d'écoulement on se ramène à une résolution en 1D, dans la solution en notant que $\vec{\mathrm{v}} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} = \mathrm{v}_z \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}z}$. L'expression précédente devient :

$$\mathrm{v}_{z,f} \frac{\mathrm{d}\rho_f}{\mathrm{d}z} = S_f - \rho_f \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathrm{v}}_f$$

Cette équation s'écrit, pour $f \in \{n, i, e\}$:

$$\frac{\mathrm{d}\rho_f}{\mathrm{d}z} = \frac{S_f - \rho_f \vec{\nabla}.\vec{\mathrm{v}_f}}{\mathrm{v}_{z,f}} \tag{4.10}$$

I.3 Conservation de l'énergie

La première loi de la thermodynamique permet de relier l'apport de chaleur dans le volume V aux variations de l'énergie interne U et du volume :

$$\mathrm{d}U + P\mathrm{d}V = \delta\mathfrak{Q}$$

ici $\delta\mathfrak{Q} = V(\Gamma - \Lambda)\mathrm{d}t$ où les termes d'apport de chaleur Γ et de perte de chaleur Λ sont exprimés par unité de volume et de temps. La pression P est pour un gaz boltzmanien thermalisé :

$$\begin{aligned} P = n_{\mathrm{tot}} k_{\mathrm{B}} T \quad \text{avec } n_{\mathrm{tot}} = n_n + n_i + n_e \\ \text{et } U = uV \quad \text{avec } u = u_{\mathrm{exci}} + \frac{3}{2} n_{\mathrm{tot}} k_{\mathrm{B}} T \simeq \frac{3}{2} n_{\mathrm{tot}} k_{\mathrm{B}} T \end{aligned} \tag{4.11}$$

car les niveaux rotationnels et vibrationnels sont peu peuplés aux densités considérées.

La première loi de la thermodynamique dérivée par rapport au temps, se réécrit dans le formalisme lagrangien sous la forme :

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}(uV) + P\frac{\mathrm{D}V}{\mathrm{D}t} = \frac{\mathrm{D}\mathfrak{Q}}{\mathrm{D}t}$$

En utilisant le théorème du transport (4.4), cette expression se développe en :

$$\begin{aligned} V \cdot \vec{\nabla}(u\vec{\mathrm{v}}) + VP\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathrm{v}} = V(\Gamma - \Lambda) \\ \text{donc } \vec{\nabla}(u\vec{\mathrm{v}}) = \Gamma - \Lambda - P\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathrm{v}} \end{aligned} \tag{4.12}$$

On reconnait ici le terme de refroidissement par expansion adiabatique associé au travail des forces de pression :

$$\Lambda_{\mathrm{adia}} = P\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = n_{\mathrm{tot}} k_{\mathrm{B}} T(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathrm{v}}) \tag{4.13}$$

Ce terme est très important à cause de l'évasement rapide des lignes d'écoulement lors de leur accélération magnétocentrifuge. On a ensuite :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}(u\vec{\mathrm{v}}) &= \frac{3}{2} k_{\mathrm{B}} \vec{\nabla}(n\vec{\mathrm{v}} \times T) \\ &= \frac{3}{2} k_{\mathrm{B}} \left(T\vec{\nabla}(n_f \vec{\mathrm{v}}) + (n\vec{\mathrm{v}}) \cdot \vec{\nabla} T \right) \\ &= \frac{3}{2} k_{\mathrm{B}} \left(T \times R_{\mathrm{tot}} + n\vec{\mathrm{v}} \cdot \vec{\nabla} T \right) \end{aligned} \tag{4.14}$$

avec $R_{\rm tot} = \sum_f R_f$. En réunissant les expressions (4.12) et (4.14), on obtient finalement :

$$\vec{v}\cdot\vec{\nabla}T = \frac{\Gamma - \Lambda - nk_{\rm B}T\vec{\nabla}\cdot\vec{v} - \frac{3}{2}k_{\rm B}TR_{\rm tot}}{\frac{3}{2}k_{\rm B}n}$$

On obtient de la même manière que précédemment, l'équation différentielle qui gouverne le profil de température du gaz le long des lignes d'écoulement :

$$\frac{{\rm d}T}{{\rm d}z} = \frac{\Gamma - \Lambda - n_{\rm tot}k_BT\vec{\nabla}.\vec{v} - \frac{3}{2}k_BTR_{\rm tot}}{\frac{3}{2}k_Bn_{\rm tot}v_z} \tag{4.15}$$

II Termes de chauffage et de refroidissement

Cette seconde partie présente l'ensemble des termes de chauffage Γ et de refroidissement Λ (qui s'ajoutent au refroidissement adiabatique $\Lambda_{\rm adia}$ décrit dans l'équation (4.13)) gouvernant l'évolution de la température du gaz le long des lignes d'écoulement. Les processus de chauffage et de refroidissement inclus dans le modèle et détaillés ci-dessous sont :

- le refroidissement dans les raies moléculaires de H_2O et CO en tenant compte du pompage infrarouge par les poussières et incluant les nouveaux coefficients d'excitation par collisions de Yang et al. (2010) pour CO et de Dubernet et al. (2009); Daniel et al. (2011) pour H_2O. Ces termes d'échange thermique ont fait l'objet durant cette thèse d'une nouvelle implémentation couplée au calcul des populations hors équilibre de ces deux molécules.

Les autres termes de chauffage ont été conservés tels que décrits dans Panoglou et al. (2012) :

- le refroidissement radiatif dans les raies de H_2, Λ_{H_2},
- la thermalisation avec les grains qui utilise le nouveau calcul de la température des grains décrit dans le chapitre 3,
- le chauffage par diffusion ambipolaire $\Gamma_{\rm drag}$ et par effet Ohm Γ_Ω,
- le refroidissement radiatif dans les raies atomiques,
- le chauffage par le rayonnement X, UV et par les rayons cosmiques,
- l'effet photoélectrique sur les grains,
- le chauffage et refroidissement par les réactions chimiques, exo et endothermiques,

II.1 Raies atomiques et moléculaires

Par collisions dues à l'agitation thermique avec les différentes espèces du gaz, une espèce peut voir ses états quantiques internes excités. Pour un gaz moléculaire à une température de l'ordre de quelques $\sim 10^2$-10^3 K, les collisions peuplent uniquement les états rotationnels ou vibrationnels. Une partie de l'énergie cinétique du milieu est ainsi convertie en énergie interne de la molécule ou de l'atome. Cette énergie interne peut être soit renvoyée dans le milieu par désexcitation collisionnelle sous forme d'énergie cinétique, sans qu'il n'y ait aucune contribution au refroidissement. Soit, cette énergie est évacuée par l'émission d'un photon, contribuant de ce fait au refroidissement radiatif du gaz si le photon parvient à s'échapper du milieu. La proportion entre le premier

processus et le second dépend du rapport entre probabilité de désexcitation collisionnelle (C_{ul}) et de la probabilité d'émission spontanée (A_{ul}), c'est à dire du rapport entre la densité de collisionneurs et la densité critique ($n_{\rm crit}$).

II.1-1 Refroidissement dans les raies moléculaires

Pour être un refroidisseur efficace pour le milieu, une espèce moléculaire doit posséder les caractéristiques suivantes :

- être une espèce abondante, comme H_2, CO ou H_2O,
- posséder des niveaux suffisamment nombreux et peuplés aux températures et densités mises en jeu,
- à haute densité, posséder un moment dipolaire, car les densités critiques sont plus fortes pour les transitions dipolaires que quadripolaires (A_{ul} plus fort),
- ne pas avoir une profondeur optique trop grande pour que les photons émis soient capable de s'échapper du milieu.

Le modèle inclut le refoidissement par 4 molécules. Ce sont les principaux refroidisseurs pour un gaz moléculaire : H_2 (quand la température du gaz est élevée), ^{12}CO, H_2O et ^{13}CO (à plus faible température) qui sont des molécules abondantes. Le refroidissement dans ces raies rotationnelles pour CO et H_2O et ro-vibrationnelles pour H_2 excitées par collision avec H, He et H_2 est calculé en le détail, en suivant le peuplement hors équilibre de chaque niveau.

Refroidissement par H_2

H_2, qui est de loin la molécule la plus abondante, ne constitue pas un refroidisseur efficace à faible température $T < 500$ K, du fait de sa constante rotationnelle importante $B_{\rm rot} \simeq 85$ K et de ses niveaux rotationnels espacés (son premier niveau rotationnel excité $J = 3$ est à $E \simeq 845$ K au dessus du niveau fondamental $J = 1$ pour la forme ortho, et $J = 2$ est à $E \simeq 510$ K au dessus du niveau fondamental $J = 0$ pour la forme para). Mais, contrairement aux conditions du milieu interstellaire, les températures sont importantes dans les jets MHD, dues au chauffage par diffusion ambipolaire, en particulier dans les classes I et II, font de H_2 l'un des principaux refroidisseurs du gaz.

Le refroidissement par H_2 est traité de façon identique à celui décrit par Le Bourlot et al. (1999). Comme les transitions radiatives de la molécule sont quadrupolaires, les A_{ul} sont faibles et les raies de H_2 sont optiquement minces. La molécule peut exister sous deux formes, *ortho* quand les deux spins nucléaires sont parallèle ($\uparrow\uparrow$), dans ce cas, le spin total $S = 1$ et seules les valeurs de J impaires sont autorisées pour les niveaux quantiques. La seconde forme est *para* quand les deux spins nucléaires sont anti-parallèles ($\uparrow\downarrow$), le spin total est $S = 0$ autorisant uniquement les valeurs de J paires. Ces deux formes se comportent comme des espèces distinctes du point de vue des transitions radiatives qui ont $\Delta J = \pm 2$. Le modèle inclut environ 320 niveaux rovibrationnels allant jusqu'à $T \sim 57000$ K (le premier niveau vibrationnel est à 6000 K). Si le pompage UV des niveaux est négligé, de sorte que le taux de refroidissement par excitation collisionnelle de H_2 (en erg s^{-1} cm^{-3}) est égal à la luminosité totale émise par H_2, alors :

$$\Lambda_{H_2} = \sum_{u \to l} \Delta E_{u\,l} n_u A(u \to l). \tag{4.16}$$

avec $\Delta E_{u\,l} = h\nu(E_u - E_l)$ et où u et l désignent les niveaux ro-vibrationnels supérieur et inférieur.

Refroidissement par CO et H_2O

La molécule CO possède un moment dipolaire $\mu = 0.110$ Debyes, une énergie rotationnelle caractéristique $B_{\rm rot} \sim 3$ K et des densités critiques rotationnelles de l'ordre de $10^3 \sim 10^5\,{\rm cm}^{-3}$ à 300 K, ce qui en font un refroidisseur efficace à basse température compte tenu de son abondance. Dans le contexte étudié, les raies de CO sont cependant optiquement épaisses et ne peuvent pas être traitées aussi simplement que celles de H_2. On se place donc dans le cadre du formalisme de la probabilité d'échappement. H_2O possède des raies optiquement plus épaisses et se désexcite plus vite que CO, du fait de son moment dipolaire plus important ($\mu = 1.855$ Debyes). Les densités critiques de H_2O sont donc plus élevées, de l'ordre de $10^8\,{\rm cm}^{-3}$ à 300 K. H_2O devient le refroidisseur principal dans les jets de classe 0. De plus, la molécule H_2O se distingue en deux formes *para* et *ortho*.

► **Ancienne méthode :**
Initialement le rayonnement par CO et H_2O était calculé par interpolation à partir des grilles de résultats déterminées par Neufeld & Kaufman (1993). Celles-ci utilisaient les coefficients d'excitation collisionnelle par H_2 de Green et al. (1993) pour H_2O (avec l'extrapolation selon la méthode de Neufeld & Melnick (1987) pour les niveaux de haute énergie) et les coefficients de Viscuso & Chernoff (1988) et de Schinke et al. (1985) pour l'excitation collisionnelle de CO. Les populations des niveaux étaient calculées dans l'approximation du Large Velocity Gradient (LVG), en supposant l'équilibre statistique. Le terme de refroidissement par une espèce X est écrit sous la forme :

$$\Lambda_X^{\rm RAD} = \sum_{u\to l} \beta_{ul} \Delta E_{ul} n_u A(u \to l) \tag{4.17}$$

où β_{ul} est la probabilité d'échappement du photon (définie au Chapitre 5) et où n_u est la densité de molécule X dans l'état u. Le résultat dépend de $n({\rm H_2})$, T_n et du paramètre LVG classique qui détermine la profondeur optique, $Gn(X)/|{\rm d}v_z/{\rm d}z|$ où G est un facteur géométrique sans dimension ~ 1 caractéristique de la géométrie de l'écoulement.
À basse densité le refroidissement est commandé par les excitations collisionnelles depuis le niveau fondamental :

$$\Lambda^0 \simeq (\sum_u C_{0u} \Delta E_{0u} n_0) n({\rm H_2}) n(X)$$

Toute l'énergie dépensée pour l'excitation collisionnelle conduit à des désexcitations radiatives, qui refroidissent le gaz. Λ^0 est proportionnel à $n({\rm H_2})n(X)$, donc à la densité au carré. Dans la limite à haute densité, les niveaux sont peuplés à l'équilibre thermodynamique local (ETL). La luminosité émise est alors :

$$\Lambda_X^{\rm ETL} = \sum_{u,l} A_{ul} \beta_{ul}^{\rm ETL} \Delta E_{ul} n_u^{\rm ETL}(X)$$

qui est seulement linéaire en la densité du gaz (Neufeld & Kaufman 1993).

► **Nouvelle méthode :** J'ai inclus dans le modèle le calcul détaillé de l'évolution des population des niveaux rotationnels de CO et de H_2O en fonction de z, hors équilibre statistique (voir Chapitre 5), pour être en mesure de déterminer de manière autocohérente le refroidissement ou chauffage du gaz pour ces molécules, en incluant le pompage infrarouge par le rayonnement des poussières, et les nouveaux taux d'excitation collisionnelle par H_2 de Dubernet et al. (2009); Daniel et al. (2011) pour H_2O

et de Yang et al. (2010) pour CO, ainsi que les estimations correspondantes pour les collisions avec H et He.

Le modèle inclut 45 niveaux rotationnels de CO allant jusque $J \sim 40$ et $E_{max} - E_0 \sim 4500\,\mathrm{K}$ et 90 niveaux rotationnels de H_2O (45 ortho et 45 para) allant jusqu'à $E_{max} - E_0 \sim 2000\,\mathrm{K}$. À cause du pompage infrarouge, le refroidissement du gaz par H_2O ou CO n'est plus égal à la luminosité Λ_X^{RAD}. Le taux net de refroidissement du gaz par CO et H_2O est calculé comme la différence entre l'énergie perdue par le gaz par excitation collisionnelle et l'énergie récupérée lors des désexcitations collisionnelles. Donc, pour une espèce X :

$$\Lambda_X^{\mathrm{net}} = \Lambda_{\mathrm{col}} - \Gamma_{\mathrm{col}} = \sum_{\substack{\mathrm{collisions} \\ \mathrm{H_2,He,H}}} \sum_i \sum_{j \neq i} n_i(X) C_{ij} (E_j - E_i) n_{\mathrm{coll}} \tag{4.18}$$

où C_{ij} est le coefficient de transition collisionnelle de i vers j. Λ_X^{net} est positif quand la molécule est un refroidisseur effectif, et négatif quand la molécule réchauffe le gaz. Ce dernier cas se présente lorsque le pompage IR est important et $n_{\mathrm{coll}} > n_{\mathrm{crit}}$.

Le terme de refroidissement de ^{13}CO est calculé à partir du terme de refroidissement de CO par la méthode de Neufeld & Kaufman (1993) en supposant que l'abondance de ^{13}CO (qui n'est pas calculée par la chimie) est $n(^{13}\mathrm{CO}) = n(^{12}\mathrm{CO})/90$ (Flower 1989).

Résultats Les Figures 4.1 et 4.2 montrent les principaux termes de chauffage et de refroidissement le long des lignes d'écoulement ancrées à $r_0 = 1\,\mathrm{UA}$ et $r_0 = 12.8\,\mathrm{UA}$, respectivement pour un jet de classe 0 avec $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 5 \times 10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$ et $M_\star = 0.1\,\mathrm{M_\odot}$. Ces figures comparent les valeurs des termes de refroidissement obtenus pour CO et H_2O en utilisant les résultats de Neufeld & Kaufman (1993) (Λ_{KN}) ou en utilisant le refroidissement net dans la nouvelle implémentation ($\Lambda_{\mathrm{net}}(\mathrm{CO})$ et $\Lambda_{\mathrm{net}}(\mathrm{H_2O})$). Ces figures présentent aussi les autres termes de refroidissement, tel que le refroidissement adiabatique (Λ_{adia}) et les différents termes de chauffage, tel que le chauffage ambipolaire (Γ_{drag}). À $r_0 = 1\,\mathrm{UA}$, les termes de refroidissement net par CO et H_2O chauffent d'abord le gaz avant de devenir effectivement refroidisseurs, ce qui explique que la température du gaz soit plus élevée avec la nouvelle implémentation à la base de la ligne d'écoulement.

Le refroidissement adiabatique et le refroidissement par thermalisation entre le gaz et les grains dominent donc pour $z < 1\,\mathrm{UA}$. Sur le reste de la ligne d'écoulement (à z grand) H_2O est le refroidisseur principal (pour la classe 0) suivi par le refroidissement adiabatique, et ensuite CO. Le chauffage par diffusion ambipolaire est dans cette zone le terme de chauffage dominant, et il est compensé par le refroidissement par H_2O. Les résultats sont similaires à 12.8 UA, sauf que CO agit uniquement comme un refroidisseur.

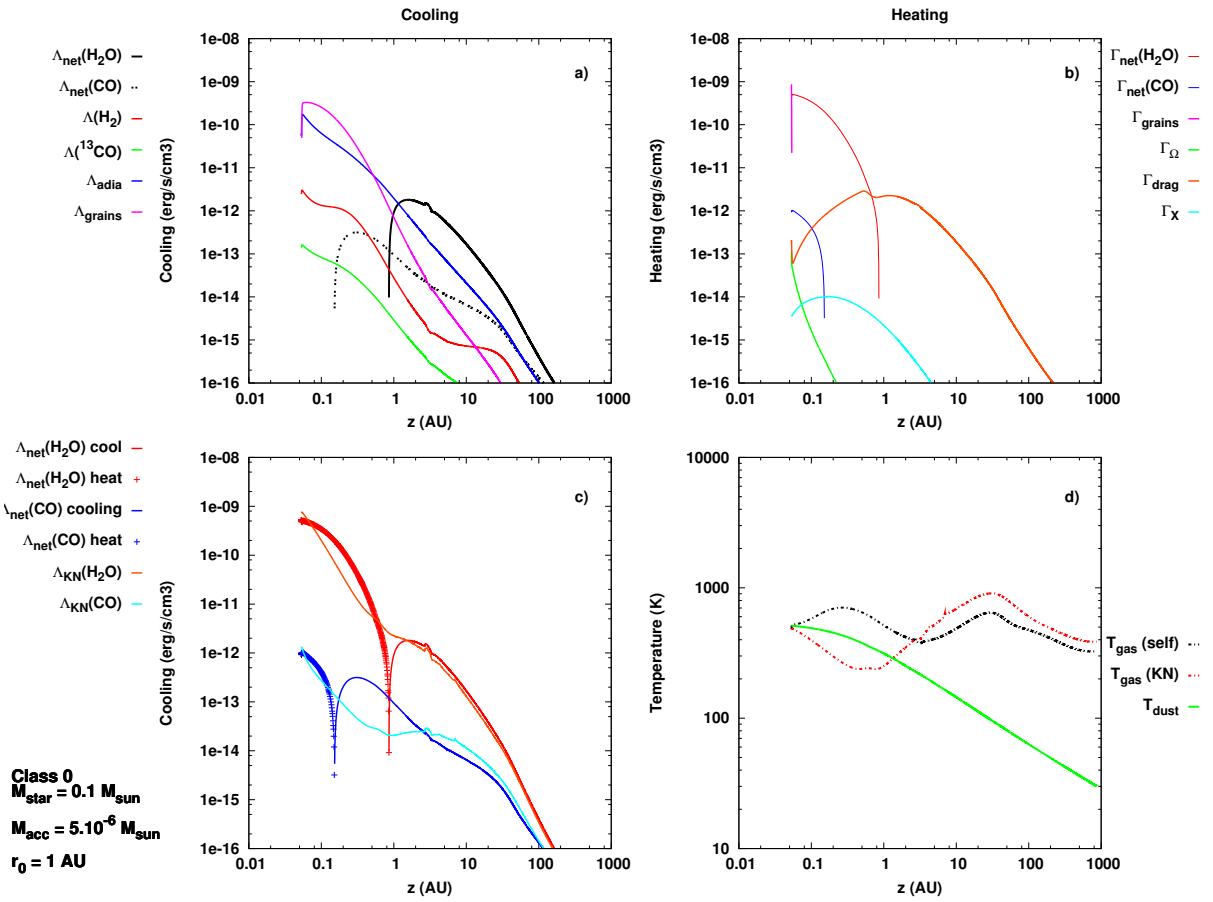


FIGURE 4.1 – *Chauffage à droite et refroidissement à gauche le long de la ligne d'écoulement ancrée à* $r_0 = 1$ UA *pour le modèle de classe 0* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ *: **a)** Termes de refroidissement net par* H_2O *et* CO *(*$\Lambda_{\rm net}(H_2O)$ *et* $\Lambda_{\rm net}$(CO)*, expression (4.18), calculés dans la nouvelle implémentation du modèle), par* H_2 *(*$\Lambda(H_2)$*).* $\Lambda_{\rm adia}$ *est le refroidissement adiabatique et* $\Lambda_{\rm grains}$ *est le terme d'échange thermique avec les grains, ici la poussière à une température inférieure à celle du gaz donc elle agit comme refroidisseur. **b)** Termes de chauffage par les grains, par effet Ohm (*Γ_Ω*) par diffusion ambipolaire (*$\Gamma_{\rm drag}$*), et par les rayons X et les rayons cosmiques (*$\Gamma_{\rm X}$*). Le terme de chauffage par effet photoélectrique sur les grains (*$\Gamma_{\rm PE}$*) peut être négligé dans ce modèle. **c)** Comparaison entre les termes de refroidissement net tels qu'obtenus dans la nouvelle implémentation, et ceux obtenus en utilisant les résultats de Neufeld & Kaufman (1993), (*$\Lambda_{\rm KN}$*) pour* CO *et* H_2O*. Et comparaison entre le taux de refroidissement net (*$\Lambda_{\rm net}$*) et le refroidissement radiatif (*$\Lambda_{\rm rad}$*) calculés dans la nouvelle implémentation. **d)** Comparaison entre la température des grains, la température du gaz en utilisant le refroidissement radiatif par* CO *et* H_2O *de Neufeld & Kaufman (1993) (*$T_{\rm KN}$*) et la température obtenue en utilisant le taux net de refroidissement calculé avec les populations de* CO *et de* H_2O *(*$T_{\rm self}$*).*

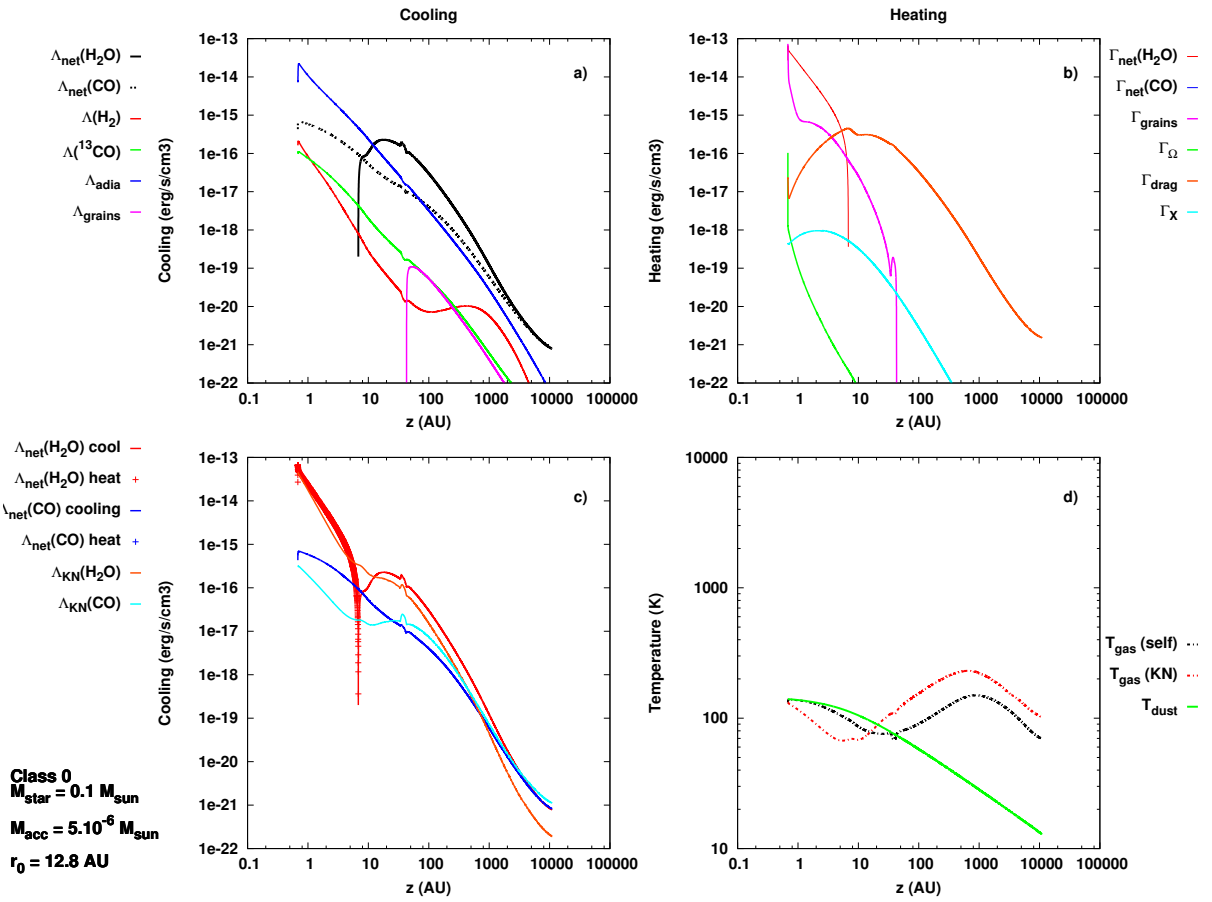


FIGURE 4.2 – *Même chose que la Figure 4.1 pour la ligne d'écoulement ancrée à* $r_0 = 12.8$ UA.

II.1-2 Refroidissement dans les raies atomiques

Le modèle inclut aussi le refroidissement dans les raies métastables et les raies de structure fine des principaux éléments atomiques en phase gazeuse à $T \lesssim 10\,000$ K

– C et N, dont les coefficients d'excitation par collision avec H_2, He, H et par les électrons sont donnés par Schroder et al. (1991); Staemmler & Flower (1991); Roueff & Le Bourlot (1990) et Pequignot & Aldrovandi (1976), et O dont les populations des niveaux et les transitions de structure fine sont donnés par Pequignot (1996, 1990a); Federman & Shipsey (1983) et les coefficients de collision par Monteiro & Flower (1987); Pequignot (1990b); Bell et al. (1998), ainsi que Si et S,
– leurs formes simplement ionisées : C^+, dont les transitions optiquement minces sont données par Lennon et al. (1985), N^+, O^+, Si^+ (Dufton & Kingston 1991), S^+ et Fe^+ (Quinet et al. 1996).

Les raies sont supposées être optiquement minces et les populations des niveaux à l'équilibre statistique. Le pompage UV est négligé car le gaz est loin de la source.

II.2 Thermalisation avec les grains

Les grains sont chauffés à une température T_d par le rayonnement de l'étoile et du choc d'accrétion (voir Chapitre 3, section III.4 page 50 pour les résultats sur la nouvelle implémentation de la température des grains). Les grains échangent de la chaleur avec les particules du gaz par collisions élastiques. Ce processus apporte une contribution minoritaire au chauffage du grain, mais il peut être significatif pour le gaz notamment quand la densité est importante (voir Figures 4.1). Ainsi, si la température des grains est supérieure à la température du gaz ce terme d'échange est un terme de chauffage pour le gaz. Dans la situation opposée c'est un terme de refroidissement. Le terme de chauffage / refroidissement est calculé selon (Tielens & Hollenbach 1985) :

$$\Lambda_{\rm grains} = 3.5 \times 10^{-34} (T_d - T_g) T_g^{0.5} n_{\rm H}^2 \tag{4.19}$$

où T_g est la température du gaz.

La Figure 4.1 présente ce terme de refroidissement pour le modèle de classe 0 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$, et la Figure 4.4 montre que ce terme de chauffage peut être aussi important que le chauffage par diffusion ambipolaire sur la base des lignes d'écoulement. Il dépend de la différence entre la température des grains et celle du gaz.

II.3 Chauffage par le rayonnement X et UV

Tant que la matière est proche du disque, elle reste relativement bien écrantée du rayonnement de l'étoile par les lignes d'écoulement internes, très denses. Mais dès lors qu'elle s'élève dans le jet, elle est exposée au rayonnement intense issu de la couronne stellaire et du choc d'accrétion sur l'astre central. Le chauffage par les X et par effet photoélectrique influe sur l'évolution de la température du gaz le long de la ligne d'écoulement. Ces processus sont d'avantage significatifs dans les jets moins denses issus des objets de classe II où le rayonnement est moins bien écranté que pour les jets très denses de classe 0. Puis à mesure que la matière s'élève dans le jet, les rayonnement X et UV sont de plus en plus dilués et écrantés, leurs contribution diminue.

II.3-1 Chauffage par les rayons X et les rayons cosmiques

Les rayons X sont principalement absorbés par H et He à faible énergie ($E_X < 200\,{\rm eV}$) puis par les éléments lourds (Mg, Si, Ca, Fe, Ni) à plus haute énergie. Cette absorption provoque l'émission d'un photoélectron très énergétique ($E_{e^-} \simeq E_{\rm photon}$) (voir Chapitre 3.I.4 page 41), dont l'interaction avec le gaz génère de nouvelles ionisations (principalement avec H, He et H_2) qui libèrent ainsi des électrons secondaires. Ces électrons secondaires perdent leur énergie :

- par diffusion Coulombienne des électrons secondaires sur les électrons thermiques du milieu, qui chauffent également le gaz. Mais ce processus est peu efficace aux faibles fractions d'ionisation rencontrées ici. Dans un milieu neutre cet électron peut aussi échanger son énergie cinétique avec H_2 (Dalgarno et al. 1999; Aggarwal et al. 1991; Rapp & Englander-Golden 1965).
- En interagissant principalement avec H_2, provoquant sa dissociation, son ionisation et son excitation sur des niveaux ro-vibrationnels. Le gaz est ensuite chauffé par désexcitations collisionnelles.

- Par l'excitation des niveaux électroniques de H_2. Celle-ci ne chauffe pas le gaz car elle conduit soit à la dissociation de la molécule, soit à une cascade radiative. Mais les photons UV *secondaires* ainsi produits peuvent photodissocier d'autres molécules (voir Chapitre 3).

Notre calcul du terme de chauffage par les rayons X exploite les résultats de Dalgarno et al. (1999) établis pour un gaz composé de H, de H_2 et de 10% de He, avec une fraction d'ionisation inférieure à 10% incluant les collisions élastiques entre les électrons primaires et secondaires avec les autres particules du gaz, ainsi que les désexcitations collisionnelles des niveaux rotationnels de H_2. Le taux de chauffage est proportionnel au taux d'ionisation de H_2 par les X et les rayons cosmiques, $\zeta(H_2)$ exprimé en nombre d'ionisations par seconde et par molécule, et à la densité totale de noyaux de H dans le gaz n_H :

$$\Gamma_{X+CR} = y n_H \zeta(H_2) \epsilon_{H_2} \tag{4.20}$$

où $\epsilon_{H_2} = 20\,\text{eV}$ est défini de telle sorte que $n_H\zeta(H_2)\epsilon_{H_2}$ soit égal à $H_X(r,z)$, le taux de déposition de l'énergie des photons X dans le gaz par unité de volume (voir Chapitre 3). Le coefficient y est le rendement du processus de chauffage, il correspond à la fraction de l'énergie du rayonnement X incident qui chauffe effectivement le gaz. Pour le mélange $H_2 + H + He$ considéré, ce rendement est ajusté sur les modèles par la fonction (Dalgarno et al. 1999) :

$$y = \frac{\eta_H + 10\eta_{H_2}\frac{n(H_2)}{n(H)}}{1 + 10\frac{n(H_2)}{n(H)}} \tag{4.21}$$

où η_H et η_{H_2} sont les rendements de chauffage pour un mélange $H + He$ et pour un mélange $H_2 + He$ respectivement. Ces rendements dépendent de la fraction en électrons, approximativement comme :

$$\eta_A = 1 + \frac{\eta_0 - 1}{1 + c x_e^a}$$

avec η_0 donné dans la Table 7 ($E_X = 1\,\text{KeV}$) de Dalgarno et al. (1999).

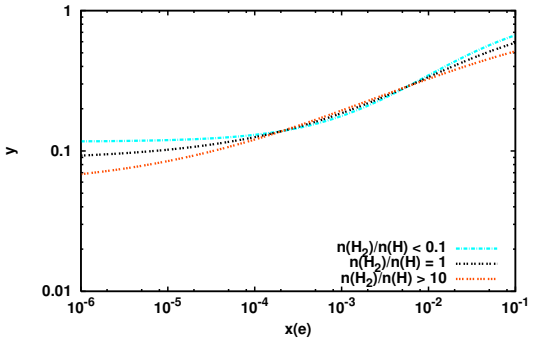


FIGURE 4.3 – *Rendement du chauffage (y) par les X, en fonction de la fraction d'électrons $x(e)$, calculé selon l'expression (4.21), pour différentes valeurs du rapport $n(H_2)/n(H)$.*

La Figure 4.3 montre la valeur du rendement y en fonction de la fraction d'électrons x_e, et de plusieurs rapports $\frac{n(H_2)}{n(H)}$. On voit que $y \simeq 0.1$ quand $x_e \simeq 10^{-5}$, $y \simeq 0.2$ pour $x_e \simeq 10^{-3}$ et $y \simeq 0.6$ pour $x_e \sim 10^{-1}$. La Figure 4.4 montre que la contribution de Γ_X est très minoritaire dans nos modèles de vent de disque avec une luminosité X typique de $10^{30}\,\text{erg s}^{-1}$ et une énergie caractéristique $k_B T_X = 4\,\text{keV}$. Le long des lignes d'écoulement, le terme de chauffage résultant est 10 à 100 fois moins important que le chauffage ambipolaire et décroît rapidement à mesure que l'on s'éloigne de l'étoile.

II.3-2 Effet photo-électrique sur les grains

Quand un photon UV lointain (5-13.6 eV) est absorbé par un petit grain de rayon $a < 100$ Å (Draine 1978), il peut produire l'éjection d'un électron si l'énergie du photon reçue dépasse un certain seuil, égal au potentiel d'ionisation IP du grain. Si le grain est électriquement neutre, alors le potentiel d'ionisation est égal au travail de sortie W qui est l'énergie minimum nécessaire pour arracher un électron depuis le niveau de Fermi jusqu'à un point situé à l'infini (Weingartner & Draine 2001). Ce travail de sortie, pour C est $W = 4.4$ eV, et pour Si est $W = 8$ eV (Nayak et al. 1998).

Si l'électron a assez d'énergie pour être éjecté ($E > W$) alors il perd progressivement son énergie cinétique ($E - W$) par collisions élastiques avec les atomes et molécules, ce qui conduit au chauffage du gaz. Par contre, un électron arraché trop profondément (l'épaisseur maximum de pénétration $l_e \simeq 10$ Å (Bakes & Tielens 1994) [1]) ne quitte pas le grain, il interagit seulement avec les atomes et les phonons du grain ce qui conduit au chauffage du grain. L'épaisseur maximum de pénétration où une éjection d'électron dans le gaz est possible dépend de l'énergie du photon absorbé.

Le long des lignes d'écoulement, la majorité des grains sont chargés et sont donc dynamiquement couplés avec le fluide des espèces chargées. Quand la densité est importante et que la fraction d'ionisation est faible, les grains deviennent les porteurs principaux des charges négatives dans le milieu.

Si le grain est chargé négativement $q < 0$, alors le photon incident peut détacher un électron de valence ou un électron excédentaire sur les orbitales moléculaires (l'énergie d'ionisation IP est alors plus faible de l'ordre de 1-2 eV pour C), on parle alors de photodétachement. Pour ce grain, une collision avec des ions positifs peut conduire à une recombinaison des charges. Au contraire, si le grain est chargé positivement $q \geq 0$, alors les électrons ne proviennent que de la bande de valence. À la surface, l'électron éjecté doit franchir une barrière coulombienne supplémentaire due à l'attraction excercée par la charge positive $q + 1$ du grain, sinon il se recombine avec le grain.

Le calcul du chauffage par effet photo-électrique dans le modèle est implémenté à partir des résultats de Bakes & Tielens (1994, equation 42) qui prennent en compte les effets cités ci dessus moyennés sur une distribution MRN de grains avec la présence de PAHs en forme de disque :

$$\Gamma_{\rm PE} = (10^{-24}{\rm ergs}^{-1})\epsilon G_0 n_{\rm H} \tag{4.22}$$

où $G_0 = u_{\rm rad}/u_{\rm Hab}$ est le rapport des densités d'énergie du champ de rayonnement considéré entre 5 et 13.6 eV et du champ de Habing $u_{\rm Hab} = 5.33 \times 10^{-14}{\rm erg\,s^{-1}\,cm^{-3}}$, et ϵ est un terme d'efficacité dépendant du paramètre $b = G_0\sqrt{T}/n_e$ défini par : (Bakes & Tielens 1994, équation 43) :

$$\epsilon = \frac{4.87 \times 10^{-2}}{1 + 4 \times 10^{-3} b^{0.73}} + \frac{3.65 \times 10^{-2} (T/10^4\,{\rm K})^{0.7}}{1 + 2 \times 10^{-4} b}$$

Le paramètre b permet de décrire la charge du grain (Weingartner & Draine 2001, Figure 11). Pour les faibles valeurs de b, $\epsilon \simeq 20$ et $\Gamma_{\rm PE} \simeq 5 \times 10^{-26} G_0 n_{\rm H}$ (Bakes & Tielens 1994) en erg s^{-1}, le terme de chauffage est donc proportionnel au flux UV. Quand b, augmente, on passe d'une situation où les grains sont majoritairement neutres à une situation où les grains se chargent positivement. Pour les hautes valeurs de b, ϵ devient

1. $l_e \simeq$ 9-6 Å pour le carbone et 6-8 Å pour le silicium (Weingartner & Draine 2001)

inversement proportionnel à b et $\Gamma_{\rm PE}$ devient indépendant de G_0 mais proportionnel au taux de recombinaison e^--grains, $n_e n_{\rm H}$.

Dans les jets on se situe plutôt dans le cas de b faible. G_0 est approximé par $1.7\chi e^{-2.5A_V}$, où χ est défini dans le chapitre 3 (page 38) comme le rapport du flux UV à 1000 Å sur celui du champ de Draine. Et A_V est calculé sur la ligne de visée vers l'étoile. Ce terme de chauffage est présenté sur les Figure 4.4 et 4.5 pour $r_0 = 12.8$ UA et sur la Figure 4.6 pour $r_0 = 1$ UA avec les autres termes de chauffage principaux. Il est négligeable pour les objets de classe 0 mais devient plus important pour les classes II où le rayonnement UV est moins écranté [2].

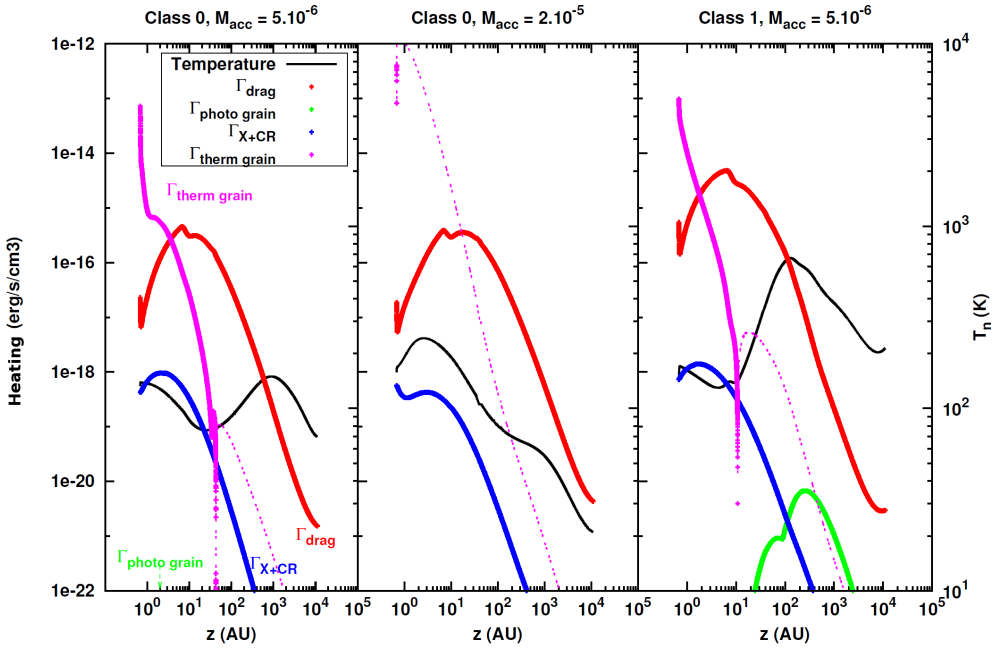


FIGURE 4.4 – *Comparaison des termes de chauffage pour les modèles de classe 0 avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}$ *et* $2\times10^{-5}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$ *et pour le modèle de classe I avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$, $r_0 = 12.8$ UA. *Le chauffage diffusion ambipolaire est en* rouge, *par l'effet photoélectrique sur les grains en* vert, *par le rayonnement X en* bleu *et par thermalisation avec les grains en* rose *(le trait pointillié correspond au refroidissement). La température est en* noir.

II.4 CHAUFFAGE MHD

Par collisions élastiques les fluides des ions et des neutres échangent de la quantité de mouvement, issue de la dérive entre les deux fluides. Les ions sont entraînés par le champ magnétique et entrent en collisions avec les neutres. La vitesse des particules après collisions devient isotrope dans le référentiel du centre de masse alors qu'elle ne l'était pas avant. Le chauffage par diffusion ambipolaire $\Gamma_{\rm drag}$ résulte de cette "isotropisation" de l'énergie cinétique de dérive ions-neutres. Par ailleurs, les collisions entre les électrons et les ions ou les neutres produit du chauffage par effet Ohm Γ_Ω.

Pour obtenir les expressions de $\Gamma_{\rm drag}$ et de Γ_Ω, il est possible de combiner la loi d'Ohm

2. Dans le cas des classes II et I $n({\rm grain}^0)/n({\rm grain}^+) \simeq 10$ et $n({\rm grain}^0) > n({\rm grain}^+)$ pour les classes 0, en général

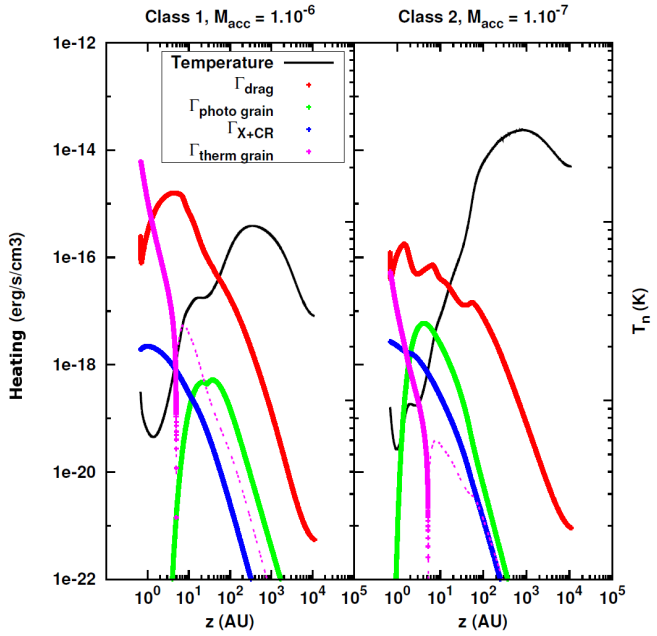


FIGURE 4.5 – *Comme pour la Figure 4.4, comparaison des termes de chauffage pour les modèles de classe I avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ *et de classe II avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0 = 12.8\,{\rm UA}$.

généralisée donnée par l'équation (2.33) :

$$\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{\mathrm{v}} \wedge \vec{B} = \eta \vec{J} - \left(\frac{\rho_n}{\rho_{\rm tot}}\right)^2 \frac{(\vec{J} \wedge \vec{B}) \wedge \vec{B}}{c^2 \overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}} - \frac{\vec{\nabla} P_e}{q_e n_e} + \frac{\vec{J} \wedge \vec{B}}{c q_e n_e}$$

avec l'expression de la dissipation des courants électriques dans un plasma :

$$\Gamma_{\rm MHD} = \vec{J} \cdot \left(\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{\mathrm{v}} \wedge \vec{B}\right) \tag{4.23}$$

Le terme de Hall ne contribue pas au chauffage car il est orthogonal à $\vec{J}$, et le terme relatif au gradient de pression des électrons peut être négligé. Le terme de dissipation MHD devient alors (Garcia et al. 2001a) :

$$\begin{aligned} \Gamma_{\rm MHD} &= \left[\eta \|\vec{J}^2\|\right] + \left[\left(\frac{\rho_n}{\rho_{\rm tot}}\right)^2 \frac{\frac{1}{c^2}\vec{J} \cdot (\vec{J} \wedge \vec{B}) \wedge \vec{B}}{\overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}}\right] \\ &= \Gamma_{\rm drag} + \Gamma_\Omega \end{aligned} \tag{4.24}$$

où ρ_n est la masse volumique des neutres et $\rho_{\rm tot}$ est la masse volumique totale, η est la résistivité électrique du plasma égale à l'inverse de sa conductivité $\eta = 1/\sigma = (\mu_{ie} n_i \nu_{ie} + \mu_{en} n_n \nu_{ne})/(q_e n_e)^2$ et :

$$\begin{aligned} \Gamma_{\rm drag} &= \left(\frac{\rho_n}{\rho_{\rm tot}}\right)^2 \frac{\frac{1}{c^2}\|\vec{J} \wedge \vec{B}\|^2}{\overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}}} \\ \Gamma_\Omega &= \eta \|\vec{J}\|^2. \end{aligned} \tag{4.25}$$

Le terme Γ_Ω correspond à la dissipation thermique par effet Ohm, il provient des collisions entre les électrons et les autres fluides. Le chauffage par diffusion ambipolaire $\Gamma_{\rm drag}$ peut se réexprimer selon (Garcia et al. 2001a) :

$$\Gamma_{\rm drag} = \overline{\mu_{in} n_i \nu_{in}} \times \mathrm{v}_{in}^2 \tag{4.26}$$

où v_{in} est la vitesse de dérive entre les ions et les neutres dont le calcul est explicité au Chapitre 2 (page 26).

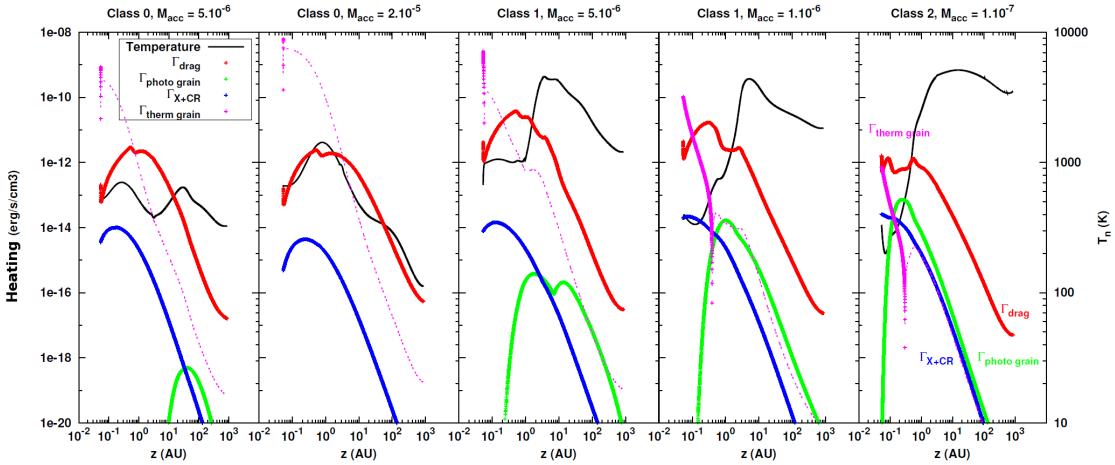


FIGURE 4.6 – *Comparaison des termes de chauffage pour tous les modèles des Figures 4.4 et 4.5 à $r_0 = 1$ UA. Ces termes de chauffage sont comparables aux résultats de Panoglou et al. (2012) excepté pour le chauffage par thermalisation avec les grains ($\Gamma_{\rm thermgrain}$).*

Le chauffage ambipolaire est le terme de chauffage dominant dans les vents de disque MHD (Panoglou et al. 2012; Garcia et al. 2001b; Safier 1993). Sur la Figure 4.1, pour le modèle de classe 0 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$, l'augmentation de température observée entre 10-100 UA est due au fait que le chauffage ambipolaire l'emporte sur le refroidissement par H_2O. Ensuite, plus loin, le refroidissement par H_2O additionné au refroidissement adiabatique compensent ce terme de chauffage et la température devient approximativement constante.

Le terme de chauffage par diffusion ambipolaire peut se réexprimer de manière à faire intervenir la fraction d'ionisation [3] x_i :

$$\Gamma_{\rm drag} \propto n_{\rm H}^2 x_i {\rm v}_{in}^2 \tag{4.27}$$

De plus ${\rm v}_{in} \propto \frac{\|\vec{J}\wedge\vec{B}\|}{n_{\rm H}^2 x_i}$. En utilisant les fonctions de dimensionnement de la solution auto-similaire, on obtient :

$$\frac{\Gamma_{\rm drag}}{n_{\rm H}} \propto \frac{M_\star^{5/2}}{r_0^{5/2} x(i)} \tag{4.28}$$

dans les jets de classe II ce terme de chauffage est plus efficace par particule que dans les jets de classe 0 où $M_\star$ est plus faible et où le taux d'accrétion est plus élevé. Le gaz atteint donc des températures plus élevées $T \geq 2000$ K dans les jets de classe II.

II.5 Reactions chimiques

Les réactions chimiques qui se produisent entre les différentes espèces du gaz peuvent être des sources de chauffage ou de refroidissement (Flower et al. 1985) suivant le signe

3. $$x_i = \sum_{A\in i} \frac{n(A)}{n_{\rm H}}$$

de l'enthalpie de réaction ΔH qui donne directement accès à l'énergie relâchée ou absorbée au cours de la réaction. Pour une réaction (i), l'enthalpie de réaction est exprimée comme la différence entre les enthalpies des produits et des réactifs :

$$\Delta H_i = \sum_{P \in \text{Produit}} H(P) - \sum_{R \in \text{Reactifs}} H(R)$$

Si $\Delta H_i < 0$, alors la réaction est exothermique, elle ne possède pas d'énergie d'activation et la réaction relâche de l'énergie dans le milieu. Si $\Delta H_i > 0$, alors la réaction est endothermique, dans ce cas la réaction ne se produit de manière significative que si la température effective du fluide est supérieure à $-\Delta H_i / k_\mathrm{B}$. Quand la réaction se produit une quantité d'énergie correspondante est prélevée dans le gaz. C'est le cas, par exemple de la réaction de destruction endothermique de H_2 par OH : $H_2 + OH \rightarrow H_2O + H - 1490\,\mathrm{K}$, ou encore par C^+ : $H_2 + C^+ \rightarrow CH^+ + H - 4640\,\mathrm{K}$. Pour une réaction i on peut définir l'énergie libérée par la réaction $\Delta E_i = -\Delta H_i$.

II.5-1 Chauffage par formation de H_2

Le taux volumique de chauffage résultant de la formation de H_2 sur les grains est :

$$\Gamma_{\mathrm{H_2},d} = u_{\mathrm{H_2},d} \frac{\Delta E_{\mathrm{H_2}}}{3}$$

où $u_{\mathrm{H_2},d}$ est le taux de formation de H_2 à la surface des grains par unité de volume et de temps, (voir Annexe A.IV.2, page 264) et où $\Delta E_{\mathrm{H_2}} = 4.48\,\mathrm{eV}$ est l'enthalpie relâchée par la formation de la molécule. Le facteur 3 provient du fait que l'on suppose : (1) qu'un tiers de l'énergie libérée par la formation de H_2 est converti en énergie cinétique, (2) un autre tiers est converti en énergie interne, (3) et le dernier tiers est cédé au grain sous forme de chaleur. L'énergie $\Delta E_{\mathrm{H_2}}/3 = 1.48\,\mathrm{eV}$ est distribuée à tous les niveaux d'énergie de H_2 de manière à ce qu'ils suivent une distribution boltzmanienne [4] correspondant à une température de ~17 200 K.

II.5-2 Refroidissement par dissociation de H_2

Le terme de refroidissement résultant de la dissociation de H_2 est traité individuellement pour chaque niveau de H_2 en suivant la méthode de Le Bourlot et al. (2002). L'énergie prélevée au gaz par une dissociation dans un niveau (v, J) est $k_\mathrm{B}\left(E_{\mathrm{H_2}}(\infty) - E_{\mathrm{H_2}}(v,J)\right)$. Le taux de refroidissement total du gaz qui en résulte est :

$$\Lambda_{\mathrm{disso}}(\mathrm{H_2}) = \sum_{coll\,X} n(X) \times \sum_{v,J} k_{v,J}(X) n(v,J) \left(E_{\mathrm{H_2}}(\infty) - E_{\mathrm{H_2}}(v,J)\right)$$

où $n(X)$ est la densité de collisionneurs (H, He et H_2), et où $n(v,J)$ est la densité de molécules H_2 dans le niveau (v,J), et où $k_{v,J}$ est le taux de dissociation collisionnelle de H_2 dans le niveau (v,J) par collision avec X.

4. La distribution boltzamienne est ajustée pour que l'énergie totale soit répartie sur un nombre fini de niveaux d'énergie.

III Conclusion

Le terme principal de chauffage dans le gaz est le chauffage par diffusion ambipolaire alors que les termes de refroidissement sont dominés par le refroidissement dans les raies moléculaires, notamment celles de H_2O et CO (classe 0) et de H_2 (classes I et II), ainsi que par le refroidissement adiabatique. À la base du jet, quand la densité est la plus élevée le couplage thermique avec les poussières est aussi un terme important (Panoglou et al. 2012).

La nouvelle méthode de calcul termes de chauffage / refroidissement par H_2O et CO, cohérente avec les populations de leurs niveaux, a mis en évidence le fait que ces molécules pouvaient, via le pompage IR dans le continuum des poussières, contribuer de manière importante au chauffage du gaz à la base des lignes d'écoulement. La calcul plus exact de la température des grains tend aussi à accroître la température du gaz à la base des lignes d'écoulement et permettre ainsi l'évaporation des manteaux de glace même à la base des jets de classe 0, voir Chapitre 3.

Chapitre

5

Traitement détaillé des niveaux rotationnels moléculaires de CO et H_2O

Sommaire

I Niveaux d'énergie . . . 105
I.1 Le monoxyde de carbone, CO . . . 105
I.2 La vapeur d'eau, H_2O . . . 108
II Peuplement des niveaux à l'ETL . . . 109
II.1 Population des niveaux . . . 109
II.2 Fonctions de partition rotationnelle . . . 110
II.3 Transitions Radiatives et Collisionnelles . . . 110
II.3-1 Règles de sélection radiatives . . . 111
II.3-2 Coefficients de transition radiative . . . 111
II.3-3 Fonction source et température d'excitation . . . 112
II.4 Densités critiques . . . 112
II.5 Taux de peuplement des niveaux . . . 114
III Formalisme de la probabilité d'échappement . . . 114
III.1 Approximation de Sobolev . . . 115
III.2 Cas d'une enveloppe en expansion monotone . . . 116
III.2-1 Probabilité pour le photon d'être absorbé . . . 116
III.2-2 Profondeur optique . . . 117
III.2-3 Intégration sur le profil de la raie . . . 118
III.2-4 Signe du gradient de vitesse . . . 118
III.2-5 Probabilité pour le photon de s'échapper dans la direction $\mathcal{L}_{OBS}$ . . . 119
IV Intensité locale J_{ul} dans l'approximation LVG . . . 119
IV.1 Intensité spécifique moyenne J_{ul} . . . 119
IV.1-1 Contribution locale . . . 119
IV.1-2 Contribution externe . . . 120
IV.2 Cas d'une inversion de population . . . 123
V Gradient de vitesse 3D dans la solution MHD . . . 124
V.1 Gradient de vitesse dans une direction . . . 125
V.2 Gradient de vitesse moyen . . . 126
V.3 Influence sur la probabilité d'échappement . . . 128
V.3-1 Probabilité d'échappement isotrope pour le gradient moyen 128
V.3-2 Probabilité d'échappement moyennée exacte $<\beta>$ . . . 128
V.3-3 Probabilité d'échappement vers l'observateur . . . 129
VI Résultats . . . 130

VI.1 Effet du pompage infrarouge 132
VI.1-1 Effet sur les températures d'excitation 132
VI.1-2 Effet sur les populations rotationnelles et les émissivités . . 136
VI.2 Résultats : peuplement des niveaux 140
VI.3 Résultats : températures d'excitation 143
VI.4 Résultats : émissivités 147
VII CONCLUSION 147

Résumé : ***Ce chapitre présente en détail le traitement hors équilibre le long des lignes d'écoulement des populations des niveaux rotationnels de*** CO ***et*** H_2O***, sous le formalisme de la probabilité d'échappement, déterminées par les transitions radiatives et collisionnelles. La motivation provient de la nécessité de déterminer à la fois l'émissivité dans chaque raie observée pour comparaison avec les observations (Herschel, ALMA, IRAM), en prenant en compte le pompage infrarouge et les plus récents taux d'excitation collisionnelle. Cela permet aussi d'estimer le couplage thermique résultant (cf. Chapitre 4) de manière plus cohérente avec l'état de la matière dans le modèle de vent de disque.***

Les résultats présentent les températures d'excitations obtenues pour des populations rotationnelles hors équilibre et décrivent l'effet du pompage infrarouge sur l'excitation de H_2O***.***

Introduction Le traitement du transfert radiatif pour une molécule nécessite une connaissance préalable des niveaux d'énergie et des probabilité d'excitation et de désexcitation radiatives et collisionnelles (ici avec H, H_2 et He). L'objectif est de réaliser un calcul détaillé du peuplement de ses niveaux d'énergie et des émissivités et opacités de chaque raie et les termes de couplage thermique cohérents avec l'état local du gaz.

Ce chapitre aborde quelques considérations observationnelles concernant CO et H_2O. Il continue sur la présentation des populations rotationnelles et vibrationnelles à l'ETL puis sur le calcul détaillé des populations hors équilibre soumises au pompage infrarouge des poussières. Ce calcul est conduit sous le formalisme de la probabilité d'échappement.

Enfin, les résultats relatifs aux températures d'excitation, émissivités des raies sont présentés.

I Niveaux d'énergie

Le domaine d'absorption et d'émission des niveaux rotationnels moléculaires va du domaine millimétrique à l'infrarouge lointain, comme illustré par la Figure 5.1. Il correspond à un domaine en énergie de quelques K à quelques milliers de K. Le domaine d'absorption et d'émission des niveaux vibrationnels est lui situé plutôt dans le proche infrarouge ($\lambda = 4.7\mu$m pour $v =$ 1-0 de CO et 2.7 - 6 μm pour H_2O), ce qui correspond à un domaine en énergie de $\approx$ 3000 K.

Les observations Herschel/HIFI donnent accès à de nombreux niveaux rotationnels de CO (de $J = 5$ à $J = 16$) ainsi qu'à un grand nombre de niveaux rotationnels de H_2O permettant de tracer la densité du gaz.

I.1 Le monoxyde de carbone, CO

Après H_2, CO (avec H_2O parfois) est la molécule la plus abondante en phase gazeuse dans le milieu interstellaire. Dans une molécule linéaire comme CO les états rotationnels sont quantifiés par un seul nombre quantique J et les états vibrationnels sont quantifiés par un nombre v. La constante rotationnelle caractéristique de CO et son moment dipolaire sont faibles $\sim$ 3 K. L'échelle des niveaux rotationnels de CO (voir Figure 5.2) est plus resserrée que celle de H_2. Ce qui permet à ses niveaux d'être facilement peuplés dans un gaz froid à des densités commes celles rencontrées dans le vent de vent disque.

Dans le cas du vent de disque où le gaz est dense $n_{\rm H} \sim 10^6$-$10^{10}\,{\rm cm}^{-3}$ et chaud, CO est aussi un traceur important de la structure cinétique. Par ailleurs, cette molécule se comporte comme un refroidisseur efficace dans les jets de classe 0 (voir Chapitre 4).

Le premier niveau vibrationnel de CO est à $E_u \simeq 3100$ K. Ses états vibrationnels peuvent devenir énergétiquement accessibles dans le vent de disque chaud des objets de classe I et II, mais la densité critique est très élevée (cf Annexe B) et nous négligerons la population des niveaux $v > 0$ dans le modèle.

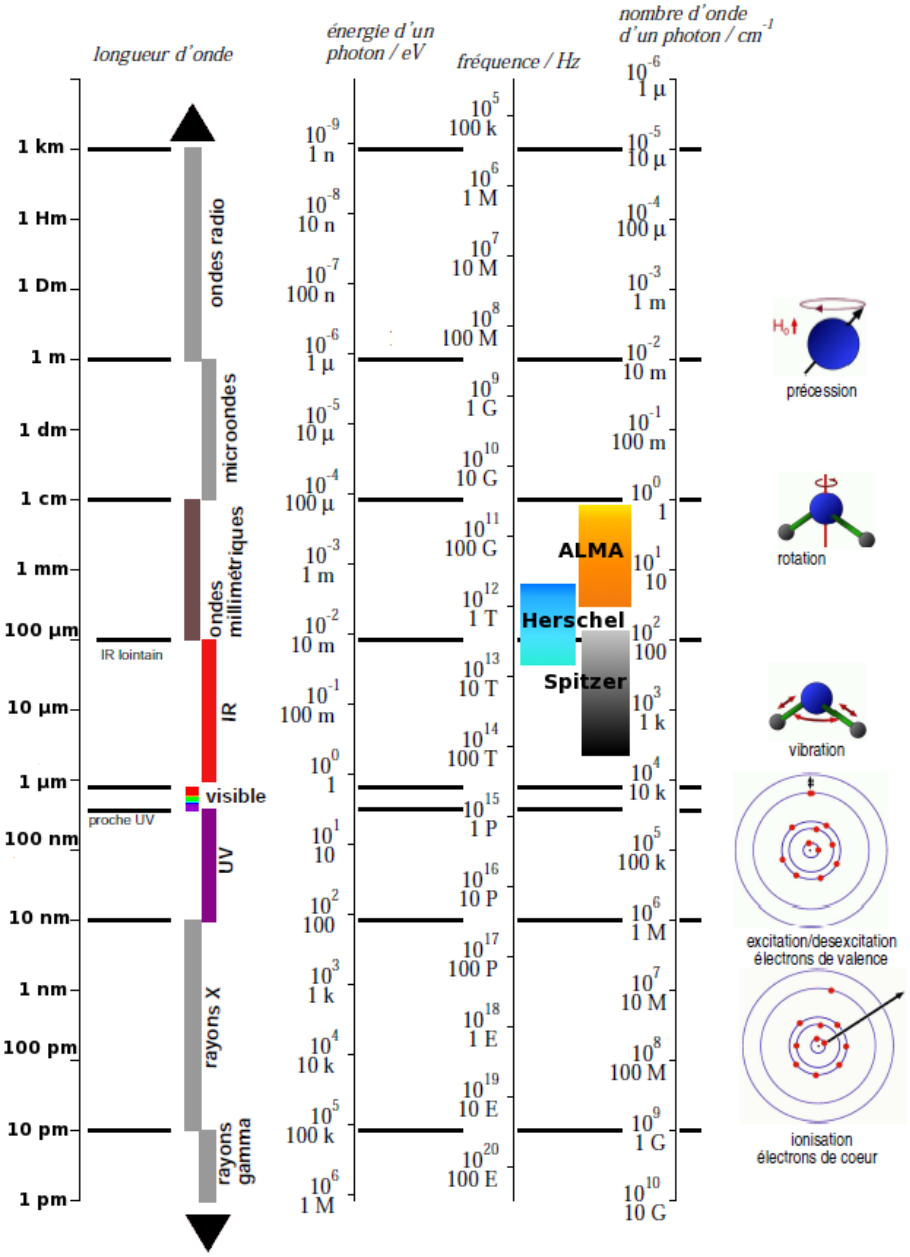


FIGURE 5.1 – *Spectre électromagnétique faisant figurer les nombres d'ondes en* cm^{-1}*, les fréquences en* Hz*, l'énergie associée en* eV *et la longueur d'onde en* m. *(crédit : R. Poteau, 2008)*

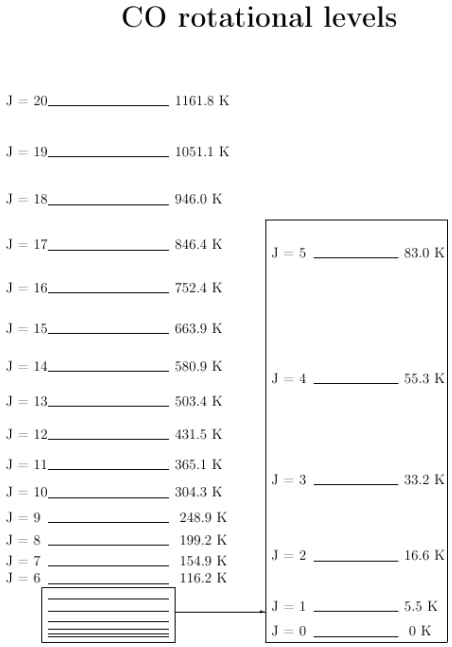


FIGURE 5.2 – *Niveaux rotationnels de* CO *à* $v = 0$. *Les énergies des niveaux proviennent de la base de donnée CDMS (Müller et al. 2001) et JPL.*

Niveaux rotationnels idéaux

CO peut-être modélisée par un rotateur linéaire rigide et asymétrique, le cas le plus simple à traiter. Le moment d'inertie de rotation autour de l'axe de la molécule I_1 est nul, et les moments d'inertie de rotation autour des deux autres axes orthogonaux sont égaux $I_2 = I_3 = I$, tel que $I = \frac{m_C m_O}{m_C + m_O} \times d^2_{C-O}$.

En supposant que la rotation est découplée des états de vibration, l'énergie des niveaux rotationnels est donnée par :

$$E_{\rm rot}(J) = \frac{h^2}{8\pi^2 k_B I} J(J+1) = 2.78 \times J(J+1) \quad [\rm K] \tag{5.1}$$

Chaque niveau J est dégénéré $2J+1$ fois. J est lié au moment cinétique de la molécule $p_J = \sqrt{J(J+1)}\frac{h}{2\pi}$. On définit ici la constante de rotation de la molécule $T_{\rm rot}$ en Kelvins, telle que :

$$T_{\rm rot} = \frac{h^2}{8\pi^2 k_B I} = 2.78\,{\rm K} = \frac{2hB_{\rm rot}}{k_{\rm B}}$$

avec $B_{\rm rot}$ la constante de rotation en Hz.

Corrections centrifuges

La rotation de la molécule a tendance à éloigner les atomes par effet centrifuge, donc le moment d'inertie de la molécule augmente et $B_{\rm rot}$ décroît. Il en résulte que les niveaux d'énergie sont un peu plus rapprochés que dans le cas du rotateur rigide idéal. Le terme de correction de distorsion centrifuge permet de tenir compte de cet effet :

$$E(J) = B_{\rm rot} J(J+1) + D_{\rm rot} J^2 (J+1)^2$$

où $D_{\rm rot}$ est la constante de distortion centrifuge pour le niveau vibrationnel fondamental considéré ici ($v = 0$), ($D_{\rm rot}/B_{\rm rot} \approx 10^{-6}$) $D_{\rm rot}({\rm CO}) = 8.8 \times 10^{-6}$ K. L'énergie des niveaux peut se développer aux ordres supérieurs sous la forme d'un développement de Taylor :

$$E(J) = B_{rot}J(J+1) + D_{rot}J^2(J+1)^2 + H_{rot}J^3(J+1)^3 + ...$$

avec le terme d'anharmonicité $H_{\rm rot}({\rm CO}) = 8.24798 \times 10^{-12}$ K (Chandra et al. 1996).

I.2 La vapeur d'eau, H_2O

Détectée pour la première fois par son émission maser à 22 GHz (Cheung et al. 1969), H_2O s'est révélée être l'une des molécules les plus abondantes et parmi les plus importantes dans le contexte de la formation stellaire. Avec CO, O et les silicates, H_2O est la forme principale sous laquelle se trouve l'oxygène, qui est lui-même le troisième élément le plus abondant dans l'Univers après H et He. La vapeur d'eau est sous forme de glaces sur les grains dans le gaz froid. Sa présence en phase gazeuse est un traceur efficace permettant de sonder l'état de la matière et les processus énergétiques qui se produisent dans les enveloppes protostellaires et les éjections associées.

H_2O est une molécule non linéaire et une toupie asymétrique qui possède deux plans de symétrie. Ses moments d'inertie selon ses trois axes sont différents, l'énergie d'un niveau rotationnel ne peut pas s'exprimer simplement dans la base des moments d'inertie : $E = J_1^2/2I_1 + J_2^2/2I_2 + J_3^2/2I_3$, où J_1, J_2, J_3 quantifient les états rotationnels.

Ses états rotationnels sont quantifiés par trois nombres quantiques : J associé au moment angulaire total, et les deux nombres $K_a = K_-$ et $K_c = K_+$, associés aux projections du moment angulaire sur ses axes d'inertie. On utilise la notation $J_{K_a\,K_c}$ pour désigner un état rotationnel de H_2O. Par exemple l'état fondamental de ortho-H_2O possédant une énergie de 34 K avec $J = 1$, $K_a = 0$ et $K_c = 1$ est noté 1_{01}. Ces niveaux sont souvent représentés en fonction de $\tau = K_a - K_c$, comme sur la Figure 5.3.

La molécule H_2O possède deux isomères de spin : les valeurs paires de τ caractérisent la forme para (spins anti-parallèles $\uparrow\downarrow$), avec une dégénérescence de spin de $2S+1 = 1$. Les valeurs impaires de τ caractérisent la forme ortho (spins parallèles $\uparrow\uparrow$), avec une dégénérescence de spin égale à 3. Les états rotationnels de H_2O sont excités à des températures cinétiques allant de ~100 à quelques milliers de K. Mais du fait de ses probabilités de désexcitation spontanée plus importantes que celles de CO (μ plus grand), ses niveaux sont moins facilement peuplés.

Les états vibrationnels de H_2O sont quantifiés par trois nombres quantiques v_1 correspondant à l'élongation symétrique des liaisons O-H, v_2 correspondant au pliage de la molécule et v_3 correspondant à l'élongation asymétrique. L'énergie caractéristique associé aux excitations vibrationnelles de type élongation ~ 5500 K est plus élevée que l'énergie d'excitation vibrationnelle de CO. Mais l'énergie caractéristique associée au pliage de la liaison est du même ordre de grandeur avec ~ 2400 K. On négligera ici la population en $v > 0$ car elle reste très inférieure à celle en $v = 0$ dans nos conditions.

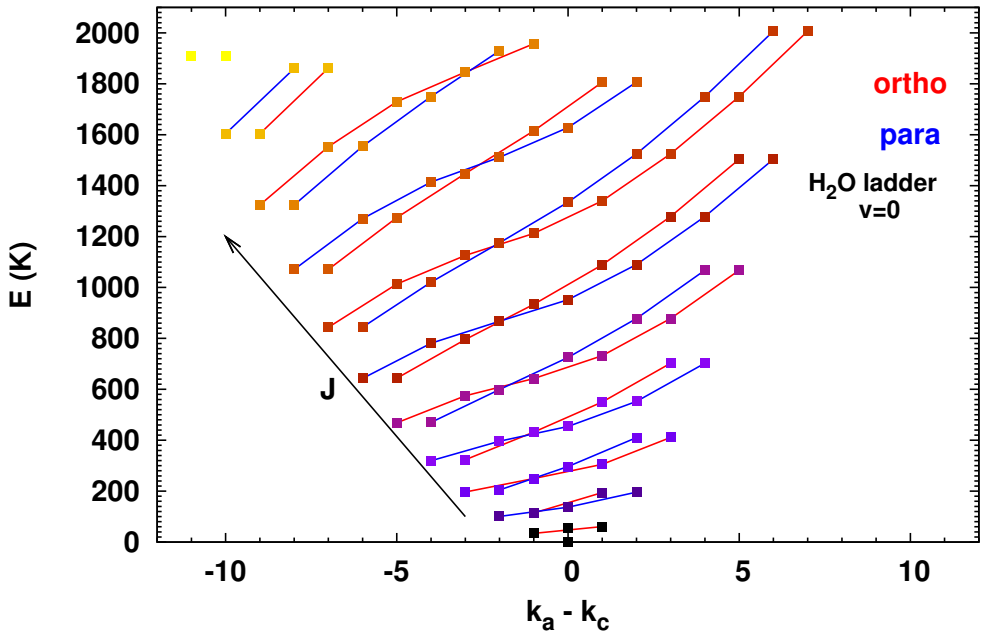


FIGURE 5.3 – *Energie des niveaux de* H_2O *(Tennyson et al. 2001) représentés en fonction des nombres quantiques* $\tau = K_a - K_c$ *pour toutes les valeurs de J implémentés dans le modèle. Les traits bleus indiques les niveaux de para-*H_2O *et les traits rouges les niveaux de ortho-*H_2O*. Les niveaux à même J sont marqués de la même couleur et reliés par un trait.*

II PEUPLEMENT DES NIVEAUX À L'ETL

Le modèle implémente uniquement les 41 premier niveaux rotationnels de CO, à $v = 0$ (base de donnée CDMS Müller et al. 2001), ainsi que les 90 premier niveaux rotationnels de H_2O (45 ortho et 45 para) dont les énergies vont jusque ~2 000 K, déterminés expérimentalement par Tennyson et al. (2001). Dans le modèle, les niveaux rotationnels sont calculés hors équilibre statistique. Par contre au départ de chaque ligne d'écoulement la distribution initiale des populations est supposée être celle de l'ETL, vu les fortes densités rencontrées.

II.1 POPULATION DES NIVEAUX

Dans un premier temps, on s'intéresse donc à la répartition des molécules dans les différents états d'énergie à l'équilibre thermodynamique local. Le niveau de haute énergie est désigné par u (up), avec n_u sa population, E_u son énergie et g_u sa dégénérescence, et l (low) désigne le niveau de basse énergie, avec ses grandeurs associées : n_l, E_l et g_l.

Le rapport de populations entre deux niveaux l et u, avec $E_u > E_l$, ne dépend que de l'écart en énergie $E_u - E_l$ et du rapport des dégénérescences g_u et g_l quand les niveaux suivent une distribution de Boltzmann :

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} e^{\frac{-(E_u - E_l)}{kT}} \tag{5.2}$$

La population du niveau l est donc donnée à l'ETL par :

$$n_l = n_{tot} \times \frac{g_l}{f(T)} e^{\frac{-E_l}{kT}} \tag{5.3}$$

où $f(T)$ est la fonction de partition et $n_{tot} = \sum_l n_l$,

$$f(T) = \sum_l g_l e^{\frac{-E_l}{k_B T}}$$

II.2 Fonctions de partition rotationnelle

La fonction de partition rotationnelle d'une molécule linéaire comme CO est définie en fonction de l'énergie des niveaux rotationnels :

$$f_{rot}(T) = \sum_{J=0}^{\infty} (2J+1) e^{-\left(\frac{B_{\rm rot} J(J+1)}{T}\right)} \tag{5.4}$$

Dans cette expression l'énergie du niveau fondamental est nulle. Lorsque $T \gg T_{\rm rot}$ on peut faire une approximation en supposant que les états sont continus par le changement de variable $z = J + 1/2$, $z^2 = J^2 + J + 1/4 \simeq J(J+1)$, la fonction de partition devient alors :

$$f_{rot}(T) \simeq \int_{J=0}^{\infty} e^{-\left(\frac{B_{\rm rot}}{T}\right) z^2} 2z dz = \frac{T}{T_{\rm rot}} \tag{5.5}$$

On peut aussi définir J_{max} correspondant à la valeur du maximum de population tel que

$$J_{max} = \sqrt{\frac{T}{2T_{rot}}} - \frac{1}{2} \tag{5.6}$$

Pour H_2O les approximations précédentes ne sont pas valides, la fonction de partition doit être déterminée de manière numérique (Vidler & Tennyson 2000; Isaacson et al. 1981).

II.3 Transitions Radiatives et Collisionnelles

Il existe cinq processus qui permettent à une molécule située sur un niveau d'énergie d'en changer :

- **Désexcitation radiative spontanée**. Si la molécule n'est pas sur son niveau fondamental, elle peut passer à un niveau d'énergie inférieur l par émission spontanée d'un photon d'énergie $E_u - E_l$, avec une probabilité A_{ul} exprimée en s^{-1} et reliée à la durée de vie du niveau. Le modèle inclut 40 transitions pour CO (Chandra et al. 1996) avec des probabilités de transition typiquement de l'ordre de 10^{-4}-10^{-3} s^{-1}. Le modèle inclut 640 transitions pour H_2O (para et ortho) (Barber et al. 2006) avec des probabilités de transition typiques de l'ordre de 10^{-2}-10^{-1} s^{-1}.
- **Excitation radiative**. Une molécule peut absorber un photon ayant une énergie égale à $E_u - E_l$ pour passer du niveau l au niveau u, ce qui fait intervenir le coefficient d'excitation stimulée B_{lu} en erg^{-1} cm^2 s^{-1} sr^{-1}.

- **Désexcitation radiative stimulée**. Inversement, un photon ayant une énergie adéquate, peut aussi, en interagissant avec une molécule sur un niveau u, la faire passer au niveau inférieur l par émission d'un second photon identique au photon incident. Cette transition est associée au coefficient de désexcitation stimulée B_{ul}.
- **Désexcitation collisionnelle**. La molécule sur un niveau u peut transférer une partie de son énergie rotationnelle à son partenaire de collision en passant au niveau l. Cette transition est associée au coefficient de désexcitation collisionnelle C_{ul} en $\mathrm{cm^3\ s^{-1}}$. Pour CO, on utilise les coefficients de désexcitation collisionnelle avec H_2 donnés par Yang et al. (2010) et tabulés pour des températures comprises entre 2 et 3000 K. Pour H_2O, on utilise les nouveaux coefficients de désexcitation par H_2 de Dubernet et al. (2009) tabulés entre 10 et 1500 K. Les valeurs des taux collisionnels sont extrapolées en température à leur dernière valeur tabulée.
- **Excitation collisionnelle**. Enfin, par collision, une molécule peut convertir une partie de l'énergie cinétique du collisionneur en énergie interne et passer du niveau l au niveau u. Cette transition est associée au coefficient d'excitation collisionnelle C_{lu} exprimé en $\mathrm{cm^3\ s^{-1}}$. Le coefficient d'excitation collisionnelle est relié au coefficient précédent par $C_{lu} = C_{ul} \times g_u/g_l \times \exp(-(E_u - E_l)/T)$.

Pour les coefficients de transition collisionnelle par collision avec H et He, on utilise la même approximation que Flower & Pineau des Forêts (2010), c'est à dire que l'on utilise les taux d'excitation de ortho H_2 pondérés par la masse réduite, car les taux d'excitation de H et He calculés sont limités à $J < 17$.

Pour chaque partenaire de collision noté X, la probabilité d'excitation par collision avec ce partenaire est $C_{lu}n(X)$, en $\mathrm{s^{-1}}$ et la probabilité de désexcitation est $C_{ul}n(X)$.

II.3-1 Règles de sélection radiatives

Pour CO les règles de sélection issues de la conservation du moment cinétique total imposent $\Delta J = \pm 1$. Pour H_2O, les règles de sélection imposent $\Delta J = 0, \pm 1$, $\Delta K_- = \pm 1, \pm 3$ et $\Delta K_+ = \pm 1, \pm 3$.

II.3-2 Coefficients de transition radiative

On peut relier les constantes de rotation de la molécule au coefficient d'Einstein [1] A_{ul} et au coefficient de désexcitation stimulée B_{ul} associé à la transition $l \rightarrow u$:

$$\frac{A_{ul}}{B_{ul}} = \sigma_{ul} = \frac{2h\nu_{ul}^3}{c^2}. \tag{5.7}$$

Les coefficients de désexcitation stimulée suivent la relation :

$$g_l B_{lu} = g_u B_{ul} \tag{5.8}$$

Le coefficient d'absorption par unité de volume, corrigé de la désexcitation stimulée, pour une raie de fréquence ν_{lu} correspondant à la transition $u \rightarrow l$ et intégré sur le profil de la raie est :

$$\alpha_{lu} = \frac{n_l B_{lu} h\nu_{ul}}{4\pi}\left(1 - \frac{g_l n_u}{g_u n_l}\right) \quad [\mathrm{cm^{-1}\ Hz}] \tag{5.9}$$

1.
$$A_{ul} = \frac{2\nu^3}{3\epsilon_0 hc^3}|\mu_{ul}|^2$$
où μ_{ul} est le moment dipolaire associé à la transition $l \rightarrow u$.

et le coefficient d'émissivité correspondant, intégré sur le profil local est :

$$\epsilon_{ul} = \frac{n_u A_{ul} h\nu_{ul}}{4\pi} \quad [\mathrm{erg\,s^{-1}\,cm^{-3}\,sr^{-1}}] \tag{5.10}$$

II.3-3 Fonction source et température d'excitation

La fonction source de la transition est le rapport entre coefficient d'émission et le coefficient d'absorption : $S_{ul} = \frac{\epsilon_{ul}}{\alpha_{lu}}$. Cette quantité a le dimension d'une intensité spécifique ($\mathrm{erg\,s^{-1}\,cm^{-2}\,Hz^{-1}\,sr^{-1}}$). Ce terme peut se développer selon les expressions de α et de ϵ, selon :

$$\begin{aligned} S_{ul} &= \frac{\epsilon_{ul}}{\alpha_{lu}} \\ &= \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\frac{g_u n_l}{g_l n_u} - 1} \\ &= \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T_{ex}}} - 1} \end{aligned} \tag{5.11}$$

$$S_{ul} = B_\nu(T_{ex}) \quad [\mathrm{erg\,s^{-1}\,cm^{-2}\,Hz^{-1}\,sr^{-1}}] \tag{5.12}$$

où on définit la température d'excitation de la raie $u \rightarrow l$ telle que :

$$n_l = \frac{g_u}{g_l} n_u e^{+\frac{h\nu}{k_B T_{\mathrm{ex}}}} \tag{5.13}$$

Dans nos calculs on ne présuppose pas du fait que les niveaux soient à l'ETL.

II.4 Densités critiques

Les transitions collisionnelles jouent un rôle important dans le gaz, elles influent sur les aspects radiatifs et thermiques. Les règles de sélection n'imposent pas de contraintes sur ΔJ ou Δv. Pour un partenaire de collision X, la densité critique de collisionneurs est définie par la densité limite correspondant à l'égalité des probabilités de désexcitations collisionnelle et radiative.

$$n_{\mathrm{crit}}(X) = \frac{A_{ul}}{C_{ul}(X)} \tag{5.14}$$

telle que :

- Si $n(X) \ll n_{\mathrm{crit}}(X)$, alors ce sont les désexcitations radiatives qui dominent sur les désexcitations collisionnelles. Dans ce cas les niveaux ne sont pas peuplés selon l'ETL et $T_{\mathrm{ex}} < T_{\mathrm{kin}}$, la température cinétique du gaz. On est dans le cas où les excitations collisionnelles déterminent directement les populations des niveaux excités et les émissivités.
- Si $n(X) \gg n_{\mathrm{crit}}(X)$, alors les transitions sont dominées par les excitations et désexcitations collisionnelles. Dans ce cas les niveaux sont peuplés à l'ETL, suivant une distribution de Boltzman :

$$\frac{n_u}{n_l} \frac{C_{lu}}{C_{ul}} = \frac{g_u}{g_l} e^{\frac{-h\nu}{k_B T_{\mathrm{kin}}}} \tag{5.15}$$

Dans un système simple à 2 niveaux où l'on néglige le rayonnement de fond à 3 K, la température d'excitation peut s'exprimer en fonction de la température cinétique et du rapport $n_{\rm crit}(X)/n(X)$:

$$T_{\rm ex} = \frac{h\nu/k_{\rm B}}{\frac{h\nu}{k_{\rm B}T_k} + \ln\left(1+\frac{n_{\rm crit}}{n(X)}\right)} \tag{5.16}$$

Ainsi, à l'ETL $T_{\rm ex} \rightarrow T_{\rm kin}$.

Densité critique rotationnelle de CO

Densité critique avec para-H_2 et ortho-H_2

TABLE 5.1 – DENSITÉS CRITIQUES POUR LES NIVEAUX ROTATIONNELS DE $^{12}C^{16}O$ DONNÉES EN cm^3

	ortho-H_2			para-H_2		
J_u	$n_{\rm crit}$(300 K)	$n_{\rm crit}$(1000 K)	$n_{\rm crit}$(3000 K)	$n_{\rm crit}$(300 K)	$n_{\rm crit}$(1000 K)	$n_{\rm crit}$(3000 K)
1	2×10^3	1.9×10^3	1.7×10^3	2.1×10^3	2.1×10^3	1.9×10^3
2	6×10^3	5.1×10^3	4.4×10^3	6.5×10^3	5.7×10^3	5×10^3
3	1.5×10^4	1.2×10^4	1×10^4	1.6×10^4	1.3×10^4	1.1×10^4
4	2.9×10^4	2.3×10^4	2.2×10^4	3.2×10^4	2.6×10^4	2.8×10^4
5	5.2×10^4	4.1×10^4	4.1×10^4	5.7×10^4	4.5×10^4	4.8×10^4
6	8.2×10^4	6.4×10^4	6.1×10^4	9.2×10^4	7.1×10^4	7.4×10^4
9	2.4×10^5	1.9×10^5	1.8×10^5	2.7×10^5	2×10^5	1.7×10^5
10	3.3×10^5	2.5×10^5	2.2×10^5	3.5×10^5	2.6×10^5	2.2×10^5

On utilise les taux de désexcitations collisionnelles de Yang et al. (2010) pour calculer les densités critiques de CO données dans la Table 5.1 et en annexe pour une table complète (Table B.2). en annexe.

Les densités critiques calculées pour H_2O sont données en fonction de J dans les Table B.5 et B.6 en annexe. Les densités critiques sont moyennées pour un même J sur les niveaux K_a, K_c en pondérant par le poids statistique de chaque niveau K_a, K_c.

$$n_{\rm crit}(J) = \frac{\sum\limits_{u={\rm K_-,K_+}} A_{ul}g_u}{\sum\limits_{u={\rm K_-,K_+}} g_u} \times \frac{1}{\sum\limits_{u={\rm K_-,K_+}} C_{ul}}.$$

Les densités critiques de H_2O sont plus élevées que pour les niveaux rotationnels de CO d'un facteur 10^3-10^4 ($n_{\rm crit} \simeq 2\times10^8$ pour la raie $1_{10}-1_{01}$ à 557 GHz de H_2O). On s'attend donc à ce que H_2O s'écarte plus rapidement de l'ETL à mesure que le gaz s'élève le long de la ligne d'écoulement et que sa densité chute.

Dans les conditions du vent de disque, les niveaux vibrationnels de CO sont sous-critiques (voir densités critiques pour le niveau vibrationnel $v=1$ de CO en Annexe B).

Densité critique avec H

Les densités critiques de H pour les transitions rotationnelles de CO sont calculées avec un rapport fixe par rapport aux densités critiques de H_2, $n_{\rm crit}({\rm H}) \simeq 1.5 n_{\rm crit}(o{\rm H_2})$. De la même manière, pour les collisions avec He, $n_{\rm crit}({\rm He}) \simeq 0.7 n_{\rm crit}(o{\rm H_2})$.

II.5 Taux de peuplement des niveaux

Soit n_l, la densité de molécules en cm^{-3}, pour chaque niveau l. Pour connaitre la variation temporelle de cette population on effectue un *bilan détaillé* des différents processus de transition qui amènent et enlèvent des molécules sur ce niveau au temps t :

$$\frac{dn_l}{dt} = R_l + K_l \tag{5.17}$$

où R_l est le taux volumique de variation provoqué par les transitions radiatives et K_l est le taux volumique de variation dû aux processus collisionnels pour tous les partenaires de collision. Le taux volumique de transitions radiatives est :

$$R_l = \sum_{j \neq l} n_j A_{jl} + \left(n_j B_{jl} - n_l B_{lj}\right) J_{jl} - n_l A_{lj} \quad \mathrm{cm^{-3}.s^{-1}} \tag{5.18}$$

où J_{ul} est l'intensité moyenne locale à la fréquence ν_{ul} et définie par

$$J_{ul} = \int \frac{I_\nu}{4\pi} \mathrm{d}\Omega$$

où I_ν est l'intensité spécifique à la fréquence ν de la transition $u \rightarrow l$.

La première partie de la somme décrit l'émission par rayonnement spontanée correspondant au coefficient d'Einstein A_{ul} et la seconde concerne l'émission et absorption stimulée correspondant aux coefficients B_{ul} et B_{lu}. Pour CO, on n'a que des transitions radiatives rotationnelles $\Delta J = \pm 1$, ce qui permet de simplifier les sommes sur u.

Le taux de variation volumique total pour les collisions est :

$$K_l = \sum_X \sum_{l \neq u} n(X) \times \left(n_u C_{ul}(X) - n_l C_{lu}(X)\right) \quad [\mathrm{cm^{-3}.s^{-1}}] \tag{5.19}$$

où X le partenaire de collisions.

On peut réécrire le terme d'évolution en séparant les termes en fonction des deux niveaux n_l et ceux en n_j :

$$\frac{dn_l}{dt} = -n_l \times \left(\sum_{j \neq l} \left(C_{lj} + B_{lj} J_{lj} + A_{lj}\right)\right) + \left(\sum_{j \neq l} n_j \times \left(C_{jl} + B_{jl} J + A_{jl}\right)\right) \tag{5.20}$$

On est à l'équilibre statistique quand les excitations compensent les desexcitations $\frac{dn_l}{dt} = 0$.

III Formalisme de la probabilité d'échappement

Afin de simplifier le traitement du transfert radiatif pour calculer J_{ul}, pour les raies optiquement épaisses de CO et H_2O, on se place sous le formalisme de la probabilité d'échappement (Sobolev 1957), qui se fonde sur le fait que chaque point est essentiellement découplé radiativement des régions adjacentes de manière radiative grâce à l'effet Doppler dû au gradient de vitesse. Ainsi, il n'est pas nécessaire de tenir compte du champ de rayonnement dans la totalité du vent de disque, mais uniquement de se

concentrer sur un voisinage restreint autour de la zone d'émission (Hummer & Rybicki 1982). Un photon a une probabilité finie β de s'échapper et $1-\beta$ d'être absorbé dans le voisinage de chaque point. Cette méthode de transfert radiatif est adaptée aux raies optiquement épaisses et est très largement utilisée en astrophysique à des fins de prédictions observationnelles et d'inversion pour obtenir $T_{\rm kin}$ et $n(X)$ à partir de rapports de raies observés.

III.1 Approximation de Sobolev

Pour un photon émis dans la raie $u \rightarrow l$, on nomme β_{ul} la probabilité que ce photon ne soit pas absorbé par le milieu et parvienne à s'en échapper, pour éventuellement être détecté.

On considère que le profil local de la raie $u \rightarrow l$, de fréquence centrale ν_{ul} et de largeur $\Delta\nu$, est décrit par une fonction $\Phi(\nu-\nu_{ul})$. Pour simplifier, on suppose que $\Phi(\nu-\nu_{ul}) = 0$ si $|\nu-\nu_{ul}| \geq \frac{\Delta\nu}{2}$. On suppose aussi que la fonction $\Phi(\nu-\nu_{ul})$ est normalisée.

La valeur de $\Delta\nu$, l'élargissement Doppler, est :

$$\frac{\Delta\nu}{\nu_{ul}} = \frac{2\mathrm{v}_{\max}}{c}$$

où $\mathrm{v}_{\max}$ est la vitesse maximale des atomes due aux mouvements aléatoires (thermique, turbulence). On considère un milieu en mouvement et possédant un gradient de vitesse macroscopique important (Sobolev 1957; Surdej 1977; Gusdorf et al. 2008). Le décalage Doppler dû à différence de vitesse $\vec{\mathrm{v}}$ entre la source émettrice du photon et une molécule pouvant absorber le photon et située à la distance ds dans une direction donnée est $\Delta\nu = \nu\frac{\mathrm{v}}{c}$. Donc, par définition :

$$\frac{\Delta\nu}{\nu_{ul}} = \frac{\Delta\mathrm{v}}{c} = \left(\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}\right) \times \frac{\mathrm{d}s}{c} \tag{5.21}$$

où $\mathrm{v}_s = \vec{v}\cdot\vec{s}$.

Un photon émis en un point P_0 de l'enveloppe peut donc,
– soit être absorbé dans le voisinage Δs du point d'émission,
– soit s'échapper de ce voisinage.
Si le photon parvient à s'échapper du voisinage du point P_0 alors il ne sera pas absorbé dans le reste du milieu à cause du fort gradient de vitesse. Le décalage Doppler devient plus important à mesure que l'on s'éloigne du point d'émission.

La distance ΔS à partir de laquelle le décalage Doppler induit par le gradient de vitesse devient supérieur à la largeur locale de la raie est [2] :

$$\Delta S = \frac{2\mathrm{v}_{max}}{\left|\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}\right|}$$

2. Cette condition de validité de cette approximation peut aussi se réexprimer en considérant qu'au delà de la distance ΔS, l'élargissement $\Delta\nu_D$ provoqué par le gradient de vitesse devient nécessairement supérieur à l'élargissement naturel maximal de la raie :

$$\Delta S \left|\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}\right| > \mathrm{v}_{max}$$

Au delà de la distance ΔS, un photon émis en P_0 à la fréquence ν_{ul} subit un déclage Doppler $\Delta\nu_D > \Delta\nu$, et n'est plus réabsorbé. Lorsque ΔS est très petit devant les dimensions caractéristiques de variation du milieu [3] on peut supposer que les grandeurs α_{ul}, ϵ_{ul} et le gradient de vitesse $\frac{\partial v_s}{\partial s}$ sont constants localement (dans le voisinage où le photon peut être réabsorbé). Mais ils peuvent néanmoins varier librement sur les grandes distances.

C'est sous cette condition que l'approximation LVG s'applique, on peut alors calculer J_{ul} à partir des propriétés locales du milieu et de la probabilité d'échappement des photons.

III.2 Cas d'une enveloppe en expansion monotone

On suppose que le milieu est une enveloppe sphérique en expansion (la vitesse a un gradient radial positif à mesure que l'on s'éloigne du centre). Soit P_0 un point fixé de l'enveloppe situé à l'abscisse curviligne $s = 0$ sur la ligne de visée orientée positivement $\mathcal{L}_{OBS}$ de P_0 à Q qui est un point situé hors du milieu (observateur par exemple). On suppose que le photon est émis à la fréquence locale ν dans la raie de la transition $u \to l$, avec un profil de la forme $\Phi(\nu - \nu_{ul})$. Soit P_1, le point situé sur la ligne de visée entre P_0 et Q à l'endroit où le milieu devient transparent au photon émis en P_0 à cause du décalage Doppler provoqué par le gradient de vitesse important.

Il est essentiel ici que le gradient de vitesse soit monotone.

III.2-1 Probabilité pour le photon d'être absorbé

Entre P_0 et P_1 le photon de fréquence ν (dans le référentiel de P_0) émis dans la direction $\mathcal{L}_{OBS}$ peut être absorbé avec une certaine probabilité $\omega_\nu(P_0Q)$. Du fait du décalage Doppler, cette probabilité est donc la probabilité que le photon soit absorbé entre P_0 et P_1. Elle s'exprime par (Surdej 1977) :

$$\omega_\nu(P_0Q) = \int_0^{s(\nu)} e^{-\int_0^s \alpha_{lu}\Phi(\nu-\nu_{ul}-\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s')ds'} \alpha_{ul}\Phi(\nu - \nu_{ul} - \frac{\nu_{lu}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s)\mathrm{d}s \qquad (5.22)$$

On intègre cette probabilité du point P_0, d'abscisse $s = 0$ jusqu'au point P_1 d'abscisse $s(\nu)$. Le point courant est noté $P(s)$, d'abscisse s. On a $\beta_\nu = 1 - \omega_\nu$.

Dans l'exponentielle, la borne inférieure de l'intégrale correspond à l'abscisse du point P_0, la borne supérieure est l'abscisse $P(s)$.

- La différence de vitesse entre P_0 et $P(s)$ est $\frac{\partial v_s}{\partial s}s$ ($P(s)$ s'éloigne de P_0 à la vitesse $\frac{\partial v_s}{\partial s}s$ le long de $\vec{s}$).
- $\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s$ est le décalage Doppler engendré par le gradient de vitesse $\frac{\partial v_s}{\partial s}$ en $P(s)$, à la distance s de P_0 (la fréquence du photon dans le référentiel local de $P(s)$ est $\nu - \frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s$).
- Le terme $\alpha_{ul}\Phi(\nu - \nu_{ul} - \frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s)\mathrm{d}s$ est la probabilité que le photon émis à la fréquence locale ν en P_0 soit absorbé dans le voisinage $[s, s + \mathrm{d}s]$ du point $P(s)$.
- $e^{-\int_0^s \alpha_{ul}\Phi(\nu-\nu_{ul}-\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s')\mathrm{d}s'}$ est la probabilité que le photon émis en P_0, n'ai pas été absorbé entre P_0 et $P(s)$.

3. par exemple $l_T = \frac{T}{\vec{\nabla}T}$ ou $l_\rho = \frac{\rho}{\vec{\nabla}\rho}$.

Dans l'intégrale (5.22) on applique les changements de variable suivant :

$$x = \nu - \nu_{ul} - \frac{\nu_{ul}}{c}\left(\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}s'\right) \Rightarrow dx = -\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}ds'$$
$$y = \nu - \nu_{ul} - \frac{\nu_{ul}}{c}\left(\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}s\right) \Rightarrow dy = -\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}ds \tag{5.23}$$

Par cette transformation on obtient les nouvelles bornes de l'intégrale : $y(s(\nu)) = \nu - \nu_{ul} - \frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s(\nu)$ et $\nu - \nu_{ul}$. On obtient une nouvelle forme de l'intégrale (5.22) donnée par (5.25).

III.2-2 Profondeur optique

La profondeur optique d'absorption est reliée aux termes d'émission et d'absorption stimulés, le long du chemin s par :

$$\tau_\nu = \int (n_l B_{ul} - n_u B_{lu}) J_\nu \mathrm{d}s$$

en éliminant les termes B_{ul} et B_{lu} et en intégrant sur le profil de la raie :

$$\tau_{ul} = \int \tau_\nu \mathrm{d}\nu = \int \mathrm{d}s \frac{c^2}{8\pi \frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}} A_{ul} n_u (e^{h\nu/k_\mathrm{B}T_{ex}} - 1)$$

A partir de l'intégrale 5.22 , on définit donc la quantité sans dimension :

$$\tau_{ul} = \frac{\alpha_{lu}}{\nu_{ul}} \frac{c}{\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}} \tag{5.24}$$

de telle sorte que $\alpha_{ul}\mathrm{d}s = -\tau_{ul}\mathrm{d}y$. τ_{ul} est la profondeur optique. Cette grandeur est une mesure de la transparence du milieu. Quand le milieu est optiquement mince $\tau_{ul} \to 0$ et $\tau_{ul} \gg 1$ quand le milieu devient optiquement épais.

Lorsque Δs devient très petit devant l'échelle de variation de T_{ex}, n_u et $\partial \mathrm{v}_s/\partial s$, la profondeur optique τ_{ul} est constante entre P_0 et P_1, donc sur l'ensemble de l'intervalle d'intégration. L'intégrale s'écrit alors :

$$\omega_\nu(\mathrm{P_0Q}) = \int_{y(s(\nu))}^{\nu-\nu_{ul}} \tau_{ul}\Phi(y) e^{\tau_{ul}\int_{\nu-\nu_{ul}}^{y}\Phi(x)dx} dy \tag{5.25}$$

où la borne inférieure de l'intégrale correspond au point $\mathrm{P}_1(y(s(\nu)))$ et la borne supérieure correspond à $\mathrm{P}_0(\nu - \nu_{ij})$, sous le changement de variable. Dans cette intégrale, on reconnait alors une dévrivée :

$$\omega_\nu(\mathrm{P_0Q}) = \int_{y}^{\nu-\nu_{ul}} \frac{d}{dy}\left(e^{\tau_{ul}\int_{\nu-\nu_{ul}}^{y(s(\nu))}\Phi(x)dx}\right)dy$$
$$\Rightarrow\ \omega_\nu(\mathrm{P_0Q}) = 1 - e^{\tau_{ul}\int_{\nu-\nu_{ul}}^{y(s(\nu))}\Phi(x)dx}$$

III.2-3 Intégration sur le profil de la raie

On intègre ensuite la probabilité que le photon soit absorbé $\omega_\nu(P_0Q)$ sur toutes les fréquences du profil local de la raie en P_0 $\Phi(\nu-\nu_{ul})$ afin d'obtenir la probabilité qu'a un photon émis à une fréquence quelconque dans cette raie d'être absorbé. La probabilité que le photon a de s'échapper est $\beta = 1-\omega$. Comme le profil de la raie $\Phi(\nu-\nu_{ul})$ est supposé nul hors de l'intervalle $[\nu_{ul}-\frac{\Delta\nu}{2}, \nu_{ul}+\frac{\Delta\nu}{2}]$, $\omega(P_0Q)$ s'écrit :

$$\omega(P_0Q) = \int_{\nu_{ul}-\frac{\Delta\nu}{2}}^{\nu_{ul}+\frac{\Delta\nu}{2}} \Phi(\nu-\nu_{ul})\omega_\nu(P_0Q)d\nu$$

$$\omega(P_0Q) = \int_{\nu_{ul}-\frac{\Delta\nu}{2}}^{\nu_{ul}+\frac{\Delta\nu}{2}} \Phi(\nu-\nu_{ul})\left(1-e^{\tau_{ul}\int_{\nu-\nu_{ul}}^{y(s(\nu))}\Phi(x)dx}\right)d\nu$$

On effectue un nouveau changement de variable en posant $l = \nu-\nu_{ul}$, $dl = d\nu$ et $y(s(\nu)) = l - \frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s(\nu)$. Comme $\int_{-\Delta\nu/2}^{+\Delta\nu/2}\Phi(\nu-\nu_{ul}) = 1$ et $\tau_{ul} = cte$ sur l'intervalle on a :

$$\omega(P_0Q) = 1 + \int_{-\frac{\Delta\nu}{2}}^{+\frac{\Delta\nu}{2}} \frac{d}{dl}\frac{\left(e^{\tau_{ul}\int_l^{y(s(\nu))}\Phi(x)dx}\right)}{\tau_{ul}}d\nu$$

$$\omega(P_0Q) = 1 + \left[\frac{e^{\tau_{ul}\int_l^{y(s(\nu))}\Phi(x)dx}}{\tau_{ul}}\right]_{\frac{-\Delta\nu}{2}}^{\frac{+\Delta\nu}{2}} \tag{5.26}$$

III.2-4 Signe du gradient de vitesse

Afin d'exprimer la borne $y(s(\nu))$ dans l'intégrale (5.25) intervenant dans l'expression (5.26) on voit apparaître deux cas :

- Cas 1 Si le long de la trajectoire P_0Q, $\frac{\partial v_s}{\partial s} > 0$ alors la fréquence du photon est décalée vers le rouge dans le référentiel du point P_1. Ici le photon est donc à la limite rouge du profil local. De plus $y(s(\nu)) = \nu - \nu_{ul} - \frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s(\nu)$. On obtient $y(s(\nu)) = \frac{-\Delta\nu}{2}$.
- Cas 2 De même, si $\frac{\partial v_s}{\partial s} < 0$ alors la fréquence du photon arrive décalée vers le bleu de au point P_1. On obtient $y(s(\nu)) = \frac{+\Delta\nu}{2}$.

Le calcul du gradient de vitesse dans le modèle est traité en détail en section V.

L'intégrale (5.26) se simplifie donc :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial v_s}{\partial s} > 0 \Rightarrow \omega(P_0Q) &= 1 + \frac{e^{-\tau_{ul}\int_{-\Delta\nu/2}^{+\Delta\nu/2}\Phi(x)dx} - 1}{\tau_{ul}} \\
&= 1 + \frac{e^{-\tau_{ul}} - 1}{\tau_{ul}} = 1 - \frac{1-e^{-\tau_{ul}}}{\tau_{ul}} \\
\frac{\partial v_s}{\partial s} < 0 \Rightarrow \omega(P_0Q) &= 1 + \frac{-e^{+\tau_{ul}\int_{-\Delta\nu/2}^{+\Delta\nu/2}\Phi(x)dx} + 1}{\tau_{ul}} \\
&= 1 + \frac{1-e^{-\tau_{ul}}}{\tau_{ul}} = 1 - \frac{1-e^{-(-\tau_{ul})}}{(-\tau_{ul})}
\end{aligned}$$

En redéfinissant τ_{ul} comme $\alpha_{ul}/\nu_{ul} \times |\frac{\partial v_s}{\partial s}|$ la profondeur optique de Sobolev, on obtient dans les deux cas :

$$\omega(P_0Q) = 1 - \frac{1-e^{-\tau_{ul}}}{\tau_{ul}} \tag{5.27}$$

Un gradient de vitesse non monotone obligerait à chercher des points distants ayant une vitesse relative nulle avec le point courant ce qui serait plus complexe à traiter numériquement dans le vent de disque.

• Dans la suite de ce document on désignera par commodité *gradient de vitesse* la valeur absolue du gradient $|\frac{\partial v_s}{\partial s}|$ qui est la quantité entrant dans τ_{ul} et β_{ul}.

III.2-5 Probabilité pour le photon de s'échapper dans la direction $\mathcal{L}_{\rm OBS}$

La probabilité pour le photon créé dans la raie de la transition $j \to i$ de s'échapper du milieu dans une seule direction θest :

$$\beta_{ul}(\mathcal{L}_{\rm OBS}) = 1 - \omega(\mathrm{P_0Q})(\mathcal{L}_{\rm OBS}) = \frac{1 - e^{-\tau_{ul}(\mathcal{L}_{\rm OBS})}}{\tau_{ul}(\mathcal{L}_{\rm OBS})} \tag{5.28}$$

IV Intensité locale J_{ul} dans l'approximation LVG

IV.1 Intensité spécifique moyenne J_{ul}

L'évolution de la population n_u à mesure que l'élément fluide avance sur la ligne d'écoulement est dictée par les relations (5.18), (5.19) et (5.20) qui font intervenir J_{ul}. L'intensité spécifique moyenne J_{ul} dans la raie $u \to l$ dépend du champ de rayonnement extérieur qui peut se résumer à trois contributions *possibles*,
– le fond diffus cosmologique(ou CMB) sous la forme d'un corps noir à 2,725 K,
– le rayonnement infrarouge des poussières,
– la contribution du corps de noir de l'étoile, un corp noir à 4000 K avec un facteur de dilution W.
Dans nos calculs on ne tient compte que du rayonnement infrarouge des poussières (qui sont chaudes) qui domine dans le domaine submillimétrique dans notre contexte, mais ici pour simplifier, on fait la dérivation des équations LVG avec le terme du CMB. En pratique on remplace $B_\nu(T_{bb})$ par le terme J_ν des poussières.

L'intensité moyenne dépend aussi du rayonnement local émis par les molécules dans le voisinage (au sens de Sobolev) du point $\mathrm{P_0}$, soit de manière spontanée, soit de manière stimulée.

IV.1-1 Contribution locale

On se place au point $\mathrm{P_0}$ et on considère la direction $\mathcal{L}_0 = \mathrm{QP_0}$ en orientant positivement la ligne de visée dans la direction de Q vers $\mathrm{P_0}$, cette direction, sous les notations précédentes, est équivalente à $-\mathcal{L}_{\rm OBS}$.

L'intensité spécifique au voisinage de $\mathrm{P_0}$, à la fréquence ν proche de ν_{ul} dans la direction $\mathcal{L}_0$ est donnée par :

$$I_\nu(\mathcal{L}_0) = \int_{s'(\nu)}^{0} \epsilon_{ul}\Phi(\nu - \nu_{ul} - \frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s} \times s) e^{\int_s^0 -\alpha_{ul}\Phi(\nu-\nu_{ul}-\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s'}\times s')\mathrm{d}s'} \mathrm{d}s$$

Dans cette intégrale on retrouve (Surdej 1977) :

- $\epsilon\Phi(\nu-\nu_{ul}-\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}\times s)\mathrm{d}s$ la quantité d'énergie émise à la fréquence ν au point $\mathrm{P}(s)$ le long de la ligne de visée,
- $e^{\int_s^0 -\alpha\Phi(\nu-\nu_{ul}-\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s'}\times s')\mathrm{d}s'}$ est l'atténuation du rayonnement entre le point P et le point P_0,
- $s'(\nu)$ correspond à l'abscisse du point P_2 au delà duquel la fréquence du photon émis devient trop décalée à cause de l'effet Doppler, engendré par le gradient de vitesse, pour être en mesure de contribuer à l'intensité locale J_{ul}.

L'intensité spécifique peut être moyennée sur le profil de la raie suivant :

$$I_{ul}(\mathcal{L}_0) = \int_{\nu_{ul}-\Delta\nu/2}^{\nu_{ul}+\Delta\nu/2} \Phi(\nu-\nu_{ul})\times I_\nu(\mathcal{L}_0)\mathrm{d}\nu$$

Cette expression s'intègre par le même procédé que précédemment pour donner :

$$\begin{aligned} I_{ul}(\mathcal{L}_0) &= S_{ul}\left(1-\frac{1-e^{-\tau_{ul}(\mathcal{L}_0)}}{\tau_{ul}(\mathcal{L}_0)}\right) \\ &= S_{ul}\left(1-\beta_{ul}(\mathcal{L}_0)\right) = B_\nu(T_{ex})\left(1-\beta_{ul}(\mathcal{L}_0)\right) \end{aligned} \tag{5.29}$$

où S_{ul} est la fonction source définie en (5.11)

La contribution du rayonnement local à l'intensité moyenne J_{ul} est obtenue en moyennant ce terme sur toutes les directions.

$$\begin{aligned} J_{ul}^{loc} &= \iint_\Omega I_{ul}(\mathcal{L}_0)\frac{d\omega}{4\pi} \\ &= S_{lu}\times(1-<\beta>_{ul}) = B_\nu(T_{\mathrm{ex}})\times(1-<\beta_{ul}>) \end{aligned} \tag{5.30}$$

où $<\beta_{ul}>$ est la probabilité d'échappement moyennée sur toutes les directions, elle est définie en section V.3-2.

IV.1-2 Contribution externe

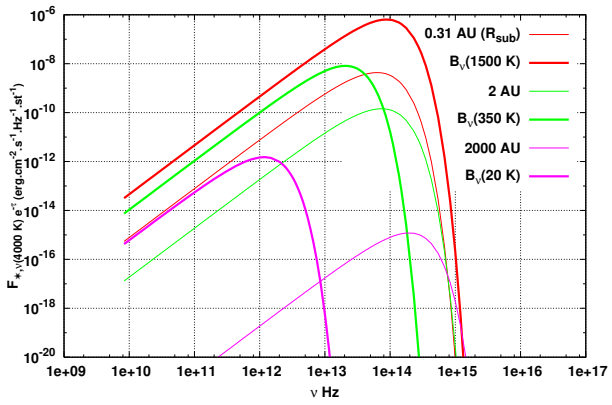


FIGURE 5.4 – *Intensité de l'étoile ($T_\star = 4000\,\mathrm{K}$, $R_\star = 3\,\mathrm{R}_\odot$) perçue à différentes distances R (différentes couleurs) atténuée par l'opacité des poussières ($e^{-\tau}$ en trait fin) prises dans le modèle de classe 0 standard ($\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 5\times10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$) comparée au spectre local des poussières (en trait épais) correspondants aux températures de poussières présentées sur la Figure 5.5*

La seconde contribution à l'intensité locale est la contribution du fond de rayonnement. Dans un premier temps on l'a choisie égale au corps noir du CMB. Cette hypothèse est modifiée avec l'introduction du traitement des niveaux de H_2O et la nécessité de faire intervenir le pompage infrarouge par les poussières. La contribution du rayonnement de l'étoile n'est pas incluse car nous nous intéressons à des échelles spatiales grandes devant le rayon de l'étoile, où cette contribution est fortement diluée (pour $R_\star = 3\,\mathrm{R}_\odot$ le facteur de dilution à $R = 0.31\,\mathrm{UA}$ est $\sim 2\times10^{-3}$) et atténuée par les poussières.

La Figure 5.4 montre que la contribution de l'étoile peut être négligée devant celle des poussières, en particulier à grande distance de l'étoile. Cette approximation cesse d'être valide si l'on considère une proto-étoile plus massive, dans ce cas il faudrait inclure cette contribution.

Contribution du CMB

Le CMB associé à la fonction de corps noir $B_\nu(T_{bb})$, rayonne avec une intensité I_c constante sur l'intervalle de fréquence de la transition. Pour le CMB $T_{bb} = 2.71$ K, ce corps noir pique dans le domaine millimétrique et interagit avec les niveaux rotationnels de la molécule. Pour une transition $u \rightarrow l$ de fréquence ν_{ul} l'intensité I_c est exprimée par :

$$I_c = B_{\nu_{ul}}(T_{bb}) = \frac{2h\nu_{ul}^3}{c^2} \times \frac{1}{e^{\frac{h\nu_{ul}}{k_B T_{bb}}-1}} \quad [\mathrm{erg\,cm^{-2}\,s^{-1}\,sr^{-1}\,Hz^{-1}}]$$

Cette intensité I_c est émise par le fond diffus cosmologique et arrive en P_0 à la fréquence ν proche de ν_{ul} avec l'intensité atténuée par l'absorption par les molécules au voisinage de P_0 :

$$I_{c,\nu}(\mathrm{SP_0}) = I_c e^{-\int_{s'(\nu)}^{0} \alpha_{lu}\Phi(\nu-\nu_{ul}-\frac{\nu_{ul}}{c}\frac{\partial v_s}{\partial s}s')\mathrm{d}s'}$$

Ici l'axe des abscisses est orienté positivement de S vers P_0 et le terme exponentiel représente l'extinction entre le point $P_2(\nu)$ et le point P_0. Au delà du point $P_2(\nu)$ la fréquence est trop décalée par effet Doppler induit par le gradient de vitesse pour interagir avec J_{ul} autour de la fréquence centrale ν_{ul} en P_0. En intégrant $I_{c,\nu}(S\,P_0)$ sur le profil local entre $\nu_{ul} - \Delta\nu/2$ et $\nu_{ul} + \Delta\nu/2$, on obtient :

$$I_c(\mathrm{SP_0}) = I_c \frac{1 - e^{-\tau_{ul}}}{\tau_{ul}} = I_c \beta_{ul}(\mathrm{SP_0}) \tag{5.31}$$

On intègre cette expression sur toutes les directions pour obtenir la contribution du CMB à l'intensité moyenne locale. On peut alors l'exprimer en fonction de la probabilité d'échappement moyennée sur toutes les directions $<\beta_{ul}>$:

$$\begin{aligned} J_{ul}^b = \iint_{\Omega=4\pi} I_c(\mathrm{SP_0})\frac{d\omega}{4\pi} &= I_c \times <\beta_{ul}> \\ &= B_\nu(T_{bb}) \times <\beta_{ul}> \end{aligned} \tag{5.32}$$

Contribution du rayonnement infrarouge des poussières

L'ajout d'un terme de contribution du fond de rayonnement infrarouge des poussières constitue un terme de pompage indispensable dans la prédiction des niveaux de H_2O. La contribution de ce terme à J_{ul} est traitée de manière similaire à la contribution du CMB, c'est à dire $J_{ul}^{\mathrm{dust}} = J_\nu^{\mathrm{dust}} \times <\beta_{ul}>$. Cependant le champ de rayonnement local est calculé par un programme externe DUSTY (Ivezic et al. 1999).

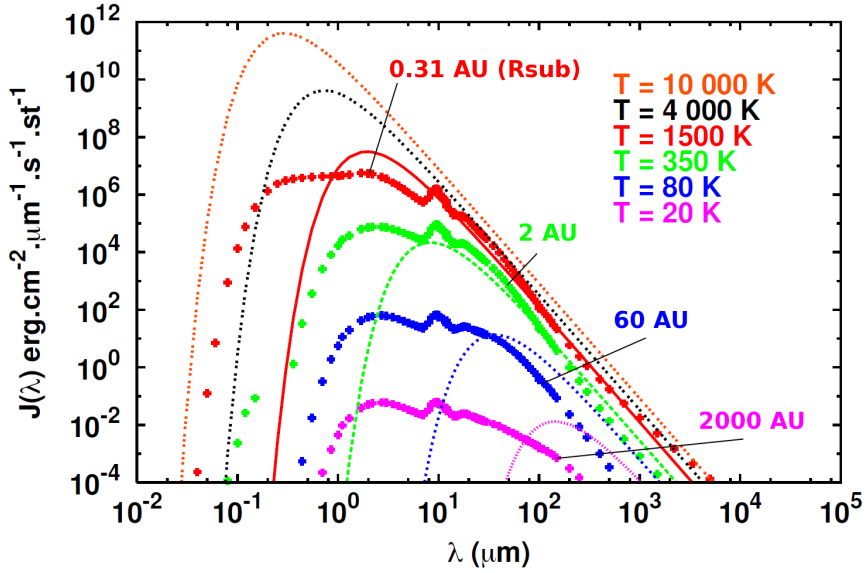


FIGURE 5.5 – *Pour le modèle de classe 0 avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*, spectre local des poussières à différents rayons R* (croix) *correspondant à différentes températures de poussière (1500* K *au rayon de sublimation, 350* K *à 2* UA*, 80* K *à 60* UA *et 20* K *à 2000* UA*). Le spectre de corps noir correspondant à la température locale a été superposé, ainsi que deux spectres de corps noirs à 4 000* K *et 10 000* K *correspondant aux températures de l'étoile et de son choc d'accrétion.*

Le code de calcul DUSTY permet de connaitre à chaque longueur d'onde et à chaque pas spatial la densité d'énergie adimensionnée u_λ du rayonnement diffus des poussières, reliée à l'intensité moyenne J_λ par (Ivezic & Elitzur 1997, Equation C1) :

$$J_\lambda = \frac{u_\lambda F_1}{4\pi y^2}$$

où y est la distance normalisée au centre telle que $R = R_{\rm sub} \times y$, où R est le rayon sphérique. F_1 est le flux bolométrique reçu sur la face interne ($R = R_{\rm sub}$) de l'enveloppe de poussière propre à chaque modèle ($\dot{M}_{\rm acc}$, $M_\star$, voir Chapitre 3).

La Figure 5.5 présente le spectre d'intensité locale des poussières ainsi obtenu. Les spectres obtenus pour les poussières s'écartent de manière importante du simple corps noir à la température d'équilibre locale des grains.

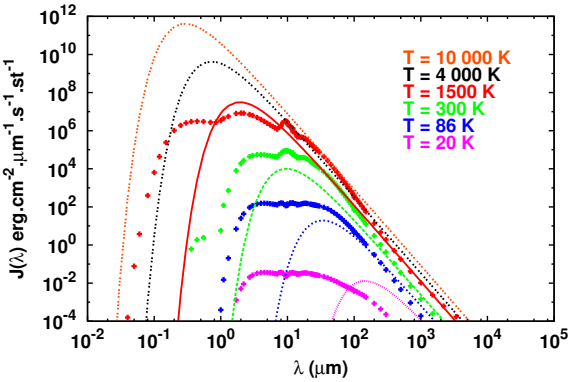


FIGURE 5.6 – *Même chose que la Figure 5.5 mais pour le modèle de classe 0 avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$. *(1500* K *au rayon de sublimation, 300* K *à 3.7* UA*, 86* K *à 60* UA *et 20* K *à 3700* UA*).*

Dans le cas du modèle standard de classe 0 présenté sur cette figure, les deux corps noirs : 4000 K issus de l'étoile et 10 000 K issus du choc d'accrétion ont une contribution sensiblement identique au flux total qui chauffe les poussières.
La Figure 5.6 présente les mêmes résultats pour le modèle de classe 0 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$ donc avec une enveloppe 4 fois plus dense, un rayon de sublimation augmenté d'un facteur 2, et un flux lumineux deux fois plus intense, cette fois dominé par le choc d'accrétion.

IV.2 Cas d'une inversion de population

À partir de la définition (5.24) en appliquant les relations de définition de α_{ul} (5.9), de ϵ_{ul} (5.10) et la relation entre A_{ul} et B_{ul} (5.7), l'expression de la profondeur optique τ_{ul} devient :

$$\begin{aligned}
\tau_{ul} &= \left(\frac{n_l B_{lu} h\nu_{ul}}{4\pi}\left(1-\frac{g_l n_u}{g_u n_l}\right)\right)\frac{c}{\left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right|}\times\frac{1}{\nu_{ul}} \\
&= \frac{A_{ul}\nu_{ul}c^2}{2\nu_{ul}^2 4\pi}\left(\frac{g_u n_l}{g_l n_u}-1\right)\frac{1}{\left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right|} \\
&\left(\text{avec}\quad n_u = \frac{A_{ul}hc}{4\pi\sigma_{ul}\left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right|}\left(\frac{g_u n_l}{g_l n_u}+1\right)\right) \\
\tau_{ul} &= \frac{A_{ul}\lambda^3}{8\pi\left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right|}\times n_u\times\left(\frac{g_u n_l}{g_l n_u}-1\right)
\end{aligned} \tag{5.33}$$

Cette expression donne τ_{ul} tel qu'il est implémenté dans le modèle.

Cas $\tau_{ul} < 0$: Ce cas correspond à une de inversion de population ($T_{\rm ex} < 0$) menant à un effet maser on a $\beta > 1$. On continue de calculer la profondeur optique par le même formule (5.33) mais les approximations faites ici sur le transfert de rayonnement (*i.e.* LVG) sont à la limite de la validité. Il va y avoir saturation du maser si la profondeur optique de Sobolev devient trop négative. Donc pour exprimer la probabilité d'échappement (5.28) : pour des raisons de convergence numérique et pour rester dans le cadre de l'approximation, on ajoute une limitation supplémentaire sous la forme :

$$\text{si } \tau_{ul} < -\tau_{\rm lim}\quad \beta_{ul} = \frac{1-e^{\tau_{\rm lim}}}{-\tau_{\rm lim}} \tag{5.34}$$

En général on choisi $\tau_{\rm lim} = 5$, ce qui correspond à $\beta_{ul} \simeq 7$.

Cas $\tau_{ul} = 0$: Dans certaines raies à effet maser il existe 1 ou 2 points le long de la ligne d'écoulement où

$$e^{\frac{h\nu}{k_B T_{ex}}} - 1 = \frac{g_u n_l}{g_l n_u} - 1 = 0 \quad (T_{\rm ex} \to \pm\infty)$$

la profondeur optique s'annule et la probabilité d'échappement devient égale à 1. Le terme $(1-\beta)\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T_{ex}}}-1}$ qui intervient dans l'expression de J_{ul} (5.30) devient non défini. Comme τ est proche de 0, on fait un développement limité de l'expression de β en τ ce qui nous donne : $\beta \sim 1 - \tau/2$. On exprime ensuite τ comme le produit $\tau_0 \times (e^x - 1)$, avec $\tau_0 = \frac{A_{ul}\lambda^3}{8\pi\left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right|}$, donc :

$$(1-\beta)\frac{1}{e^x - 1} \simeq \frac{\tau}{2(e^x - 1)} \simeq \frac{\tau_0}{2}$$

Dans cette expression la profondeur optique est moyennée sur toutes les directions pour obtenir $<\beta>$. Dans ce cas précis (de ces quelques points isolés) on moyenne le gradient de vitesse sur toutes les directions pour simplifier les calculs et on fait l'approximation que pour la profondeur optique la moyenne du quotient est à égale à la moyenne

On prend comme limite $\tau_0 = \frac{A_{ul}}{8\pi < \frac{\partial v_s}{\partial s} > \sigma^3}$.

V Gradient de vitesse 3D dans la solution MHD

Le gradient de vitesse intervient dans le calcul de la probabilité d'échappement des photons.

Ancienne implémentation :
Le gradient de vitesse moyen était estimé en suivant :

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial s} = \left(\frac{(\vec{\nabla} \cdot \vec{v_n})^2 + c_s^2}{z} \right)^{0.5} \tag{5.35}$$

c_s est la vitesse du son ; dans le modèle de vent de disque la contribution de la vitesse du son au gradient de vitesse est négligeable [a]. Ce gradient était supposé totalement isotrope et utilisé pour calculer le refroidissement par CO et H_2O selon les grilles LVG de Neufeld & Kaufman (1993), mais n'était pas calculé de manière cohérente avec le champ de vitesse 3D dans la solution.

a.
$$c_s = \sqrt{\frac{\frac{5}{3} k_B T_n}{\mu_N}} \ll \|\vec{\nabla} \cdot \vec{v_n}\|$$
avec μ_N la masse réduite des neutres.

• Quadrature Gaussienne

Avant de détailler la nouvelle méthode d'évaluation du gradient de vitesse, il est utile de rappeller la méthode d'approximation de l'intégrale d'une fonction par la somme

d'un nombre restreint de valeurs discrètes, par la méthode la quadrature de Gauss. On veut écrire :

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \simeq \sum_{i=1}^{n} w_i g(x_i)$$

Il suffit de déterminer les valeurs appropriées de w_i, x_i et n et la fonction g. Ce qui détermine le type de quadratrure utilisée et la famille de polynômes orthogonaux à employer, ici les polynomes de Legendre. On se ramène à une intégration sur l'intervalle $[-1\,;\,1]$ par un changement de variable

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}x' + \frac{b+a}{2}\right)\mathrm{d}x' \\ &\simeq \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{b+a}{2}\right)\end{aligned}$$

Les noeuds x_i sont les racines du polynôme de Legendre de degré n. Les coefficients de pondération sont donnés par :

$$w_i = \frac{-2}{(n+1)P_n'(x_i)P_{n+1}(x_i)} = \frac{4}{nP_{n+2}(x_i)P_n'(x_{i+2})} = \frac{2}{(1-x_i^2)[P_n'(x_i)]^2}$$

avec $\sum_{i=1}^{n} w_i = 2$ (Hildebrand 1956).

Par exemple, pour $n = 3$,

n	w_i	x_i	*Polynôme de Legendre*
3	$\frac{5}{9}$, $\frac{8}{9}$, $\frac{5}{9}$	$-\sqrt{3/5}$, 0, $\sqrt{3/5}$	$\frac{1}{2}(5x^3-3x)$

Dans la suite on utilise cette méthode avec $n = 12$.

V.1 Gradient de vitesse dans une direction

On cherche à connaître la valeur du gradient de vitesse $\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}(\theta_1,\phi_1)(\mathrm{P})$ dans une direction quelconque $\vec{u}(\theta_1,\phi_1)$ (Bertout 1984), et pour tous les points P le long d'une ligne d'écoulement. Dans la pratique, en appliquant la méthode de quadrature Gaussienne on se limite à 144 directions différentes (12 valeurs pour l'angle θ_1 et 12 valeurs pour l'angle ϕ_1 si on choisit les coordonnées sphériques $(R,\,\theta,\,\phi)$).

Le long de la ligne d'écoulement lancée à r_0, on se place au point P (indiqué sur la Figure 5.7 où les lignes d'écoulement sont repérées en bleu). La droite (OP) est inclinée de l'angle θ_0 par rapport à l'axe du jet, O étant le centre de la protoétoile, le point P est repéré par les coordonnées cylindrique r, z.

En ce point on connait la vitesse locale $\vec{\mathrm{v}} = (\mathrm{v}_r^{\mathrm{P}},\, \mathrm{v}_\phi^{\mathrm{P}}\, \mathrm{v}_z^{\mathrm{P}})$ qui est prescrite par la solution MHD de vent de disque et que l'on projette sur la direction $\vec{u}(\theta_1,\phi_1)$: $\mathrm{v}_u = \vec{u}\cdot\vec{\mathrm{v}}$ (repérée sur la Figure 5.7).

Dans la direction $\vec{u}(\theta_1, \phi_1)$ on se déplace d'une distance dR. On arrive alors au point $\mathrm{Q} = \mathrm{P} + \mathrm{d}R\vec{u}(\theta_1, \phi_1)$ (sur la Figure 5.7 le cercle en noir représente le lieux des points à la distance dR de P). Le point Q se situe sur une ligne d'écoulement ancrée à un rayon r'_0 inconnu, l'angle θ'_0 formé entre OQ et l'axe du jet est aussi inconnu. Il est possible en utilisant les propriétés d'autosimilarité de la solution MHD de déterminer la vitesse en Q : $\vec{w} = (\mathrm{v}_r^{\mathrm{Q}}, \mathrm{v}_\phi^{\mathrm{Q}}\, \mathrm{v}_z^{\mathrm{Q}})$. On interpole dans la solution MHD les composantes de la vitesse au point correspondant à Q : le rayon cylindrique adimentionné $[r]$ dans la solution MHD est relié au rayon cylindrique r par $[r] = r/r_0$. On dimensionne la valeur de la vitesse dans la solution en utilisant

$$\frac{w}{[w]} = \sqrt{\frac{[r]}{r(Q)} \times (GM_\star)}$$

où $[w]$ est la vitesse adimentionnée interpolée dans la solution.

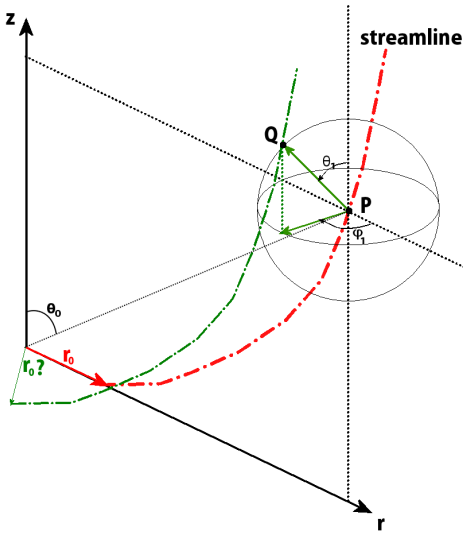


FIGURE 5.7 – *Détermination du gradient de vitesse : voir description dans le texte. La figure montre la sphère de rayon* dR *autour du point* P *le long de la ligne d'écoulement courante ancrée à* r_0 *et le point* $\mathrm{Q} = \mathrm{P} + \mathrm{d}R\vec{u}(\theta_1, \phi_1)$ *sur une ligne d'écoulement ancrée à un rayon inconnu.*

La vitesse $\vec{w}$ est ensuite projetée sur la direction $\vec{u}(\theta_1, \phi_1)$, ce qui fourni w_u. Le gradient de vitesse dans la direction (θ_1, ϕ_1) est finalement obtenu comme :

$$\left|\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}\right|(\theta_1, \phi_1)[\mathrm{P}] = \frac{|w_u - v_u|}{\mathrm{d}R} \tag{5.36}$$

V.2 Gradient de vitesse moyen

En appliquant la méthode de quadrature Gaussienne, en intégrant le gradient de vitesse dépendant des directions sur tout l'angle solide 4π, on obtient le gradient de vitesse moyen :

$$\begin{aligned}\left\langle\left|\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}\right|\right\rangle_{(\theta_1,\phi_1)} &\equiv \iint_{\Omega=4\pi}\left|\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}\right|((\theta_1,\phi_1))\mathrm{d}\frac{\omega(\theta_1,\phi_1)}{4\pi} \\ &= \int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta_1\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\phi_1\left|\frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s}\right|((\theta_1,\phi_1))\sin(\theta_1)\end{aligned}$$

Les noeuds de la sommation sont définis par rapport aux racines du polynôme de Legendre comme $\theta_i = \pi/2 \times x_i + \pi/2$ et $\phi_i = \pi x_i$, pour $x_i \in [-1, 1]$.

La Figure 5.8 montre l'effet d'un changement d'échantillonnage qui est présent dans la solution numérique utilisée sur la valeur du gradient de vitesse. Les effets d'interpolation au voisinage du point d'Alfvén produisent un pic résiduel à petite échelle, qui n'a aucune incidence sur les prédictions dans les raies H_2O ou CO

Sur la Figure 5.9 on peut voir les différences entre la méthode précédente de calcul du gradient de vitesse (5.35) et les valeurs du gradient de vitesse dans quelques directions,

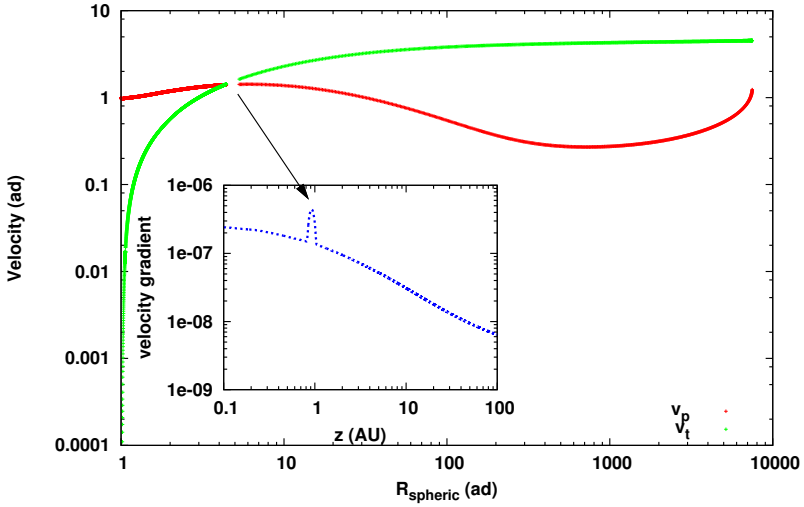


FIGURE 5.8 – *Vitesses poloïdales (*verte*) et toroïdales (*rouge*) (adimensionnées) le long de la ligne d'écoulement en fonction du rayon sphérique (adimensionné) pour la solution utilisée. Le 'trou' au voisinage du point d'Alfvén présent à $R \simeq 5$ entre eux les deux pas d'échantillonnage, est responsable d'une erreur numérique due à un sous échantillonnage dans le calcul du gradient de vitesse (cartouche) qui se répercute aussi sur l'émissivité, mais son impact peut être négligé. Une interpolation des valeurs de la solution permet de supprimer cet artéfact (fléché sur la courbe bleue). Cet artéfact peut être corrigé par un ré-échantillonnage de la solution, cette correction sera appliquée dans les futures versions du modèle.*

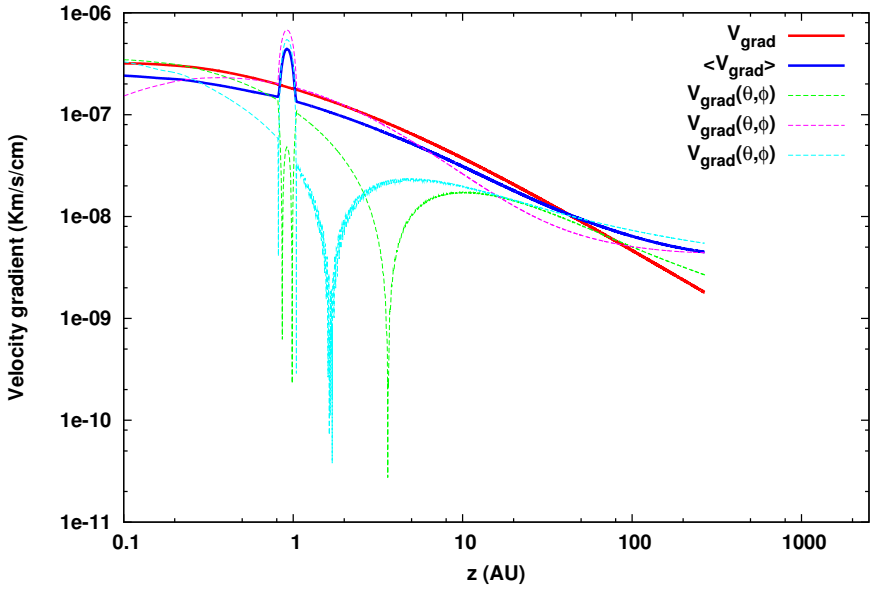


FIGURE 5.9 – *Comparaison entre le gradient de vitesse moyenné sur toutes les directions* $< V_{grad} >$ *(en* bleu*) et le gradient de vitesse calculé selon l'ancienne méthode (en* rouge*). Trois exemples de gradient de vitesse dans trois directions différents sont aussi ajoutés (*cyan, vert *et* magenta*) montrant la complexité inhérente au champ de vitesse de la solution de vent de disque. Certains de ces gradients de vitesse s'annulent en un point de la ligne d'écoulement et changent de signe.*

ainsi que sa valeur moyennée sur toutes les directions. Dans une direction donnée, le gradient de vitesse peut donc être différent d'un facteur 10^2 à 10^3 par rapport au gradient de vitesse moyen.

Ces écarts se retrouvent aussi entre la valeur de la probabilité d'échappement moyenne et la probabilité prise dans une direction, comme illustré en Figure 5.11.

V.3 Influence sur la probabilité d'échappement

V.3-1 Probabilité d'échappement isotrope pour le gradient moyen

Pour obtenir la probabilité qu'a le photon de s'échapper du milieu quelque soit la direction, il faut intégrer l'équation (5.28) sur toutes les directions. Cette intégrale dépend du champ de vitesse 3D.

On peut à l'ordre zéro estimer l'intégration par la probabilité d'échappement *isotrope* symétrique définie par :

$$\beta_s \equiv \beta_{ul} = \iint_\Omega \frac{1-e^{-\tau_{ul}}}{\tau_{ul}} \frac{d\omega}{4\pi} \simeq \frac{1-e^{-\overline{\tau_{ul}}}}{\overline{\tau_{ul}}} \tag{5.37}$$

avec $\overline{\tau_{ul}} = \frac{\alpha_{ul}c}{\nu_{ul}\left\langle\left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right|\right\rangle}$ où $\left\langle\left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right|\right\rangle = \int\left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right|\frac{d\omega}{4\pi}$ calculé en V.2.

Cette approximation devrait être bonne dans ce cas, car lorsque $\tau \gg 1$ dans toutes les directions on a

$$\int \beta \frac{d\omega}{4\pi} \simeq \int \frac{1}{\tau(\theta,\phi)} \frac{d\omega}{4\pi} = \int \left|\frac{\partial v_s}{\partial s}\right| \frac{\nu_{ul}}{\alpha_{ul}c} \frac{d\omega}{4\pi} \simeq \frac{1}{\tau} \underset{\tau\gg1}{\simeq} \beta_s$$

Cette approximation est aussi adéquate lorsque $\tau \ll 1$ dans toutes les directions puisque dans ce cas $<\beta>=\beta_s = 1$.

V.3-2 Probabilité d'échappement moyennée exacte $<\beta>$

Les valeurs du gradient de vitesse dans chaque direction calculées en V.1 permettent de déterminer pour chaque direction la valeur de la profondeur optique selon l'expression (5.33) et la probabilité d'échappement cette direction $\beta(\vec{u}) \equiv \beta_{ul}(\theta_1,\phi_1)$ (5.37). Dans la pratique on calcule la probabilité d'échappement dans $144 = 12 \times 12$ directions différentes (voir la méthode de Quadrature Gaussienne V, page 124).

On estime donc la probabilité d'échappement du photon moyennée sur toutes les directions en intégrant par la méthode de quadrature gaussienne les contribution dans chaque direction $\beta(\vec{u})$ sur l'ensemble des angles solides :

$$<\beta> \equiv \iint_{\Omega=4\pi} \frac{1-e^{-\tau(\theta_1,\phi_1)}}{\tau(\theta_1,\phi_1)} \frac{d\omega(\theta_1,\phi_1)}{4\pi} \tag{5.38}$$

C'est cette valeur de la probabilité d'échappement que l'on utilise dans le calcul de J_{ul}.

V.3-3 Probabilité d'échappement vers l'observateur

On sauvegarde les valeurs de ces probabilités d'échappement dans toutes les directions calculées à chaque point le long des lignes d'écoulement et pour toutes les raies de CO et H_2O. Dans la réalisation des prédictions synthétiques il suffira ensuite de trouver la valeur de la probabilité d'échappement dans la direction de l'observateur. La valeur de ϕ_1 est différente pour chaque angle de rotation ϕ du point P autour de l'axe du jet. La direction de l'observateur dépend aussi de l'inclinaison (i) de l'axe du jet par rapport à la ligne de visée. On a $\phi_1 = \pi - \phi$ et $\theta_1 = i$.

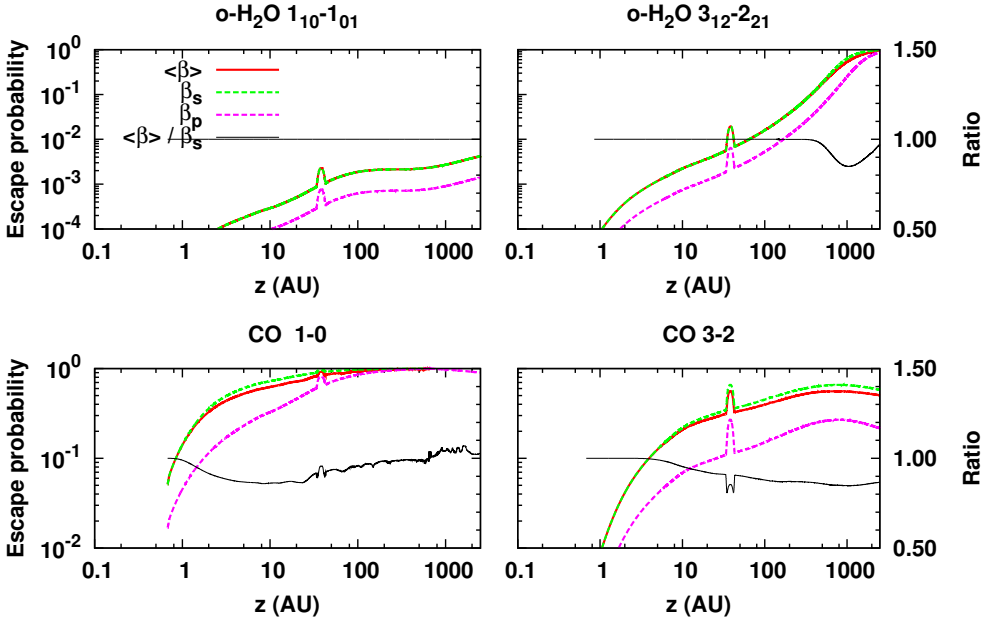


FIGURE 5.10 – *Probabilité d'échappement asymétrique moyennée* $<\beta>$ *et probabilité d'échappement sphérique* $\overline{\beta} \equiv \beta_s$ *et leur rapport, pour deux raies de* CO *et deux raies de* H_2O *le long d'une ligne d'écoulement à* $r_0 = 12.8\,\mathrm{UA}$ *pour le modèle de classe 0* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\mathrm{M}_\odot\ \mathrm{yr}^{-1}$. *La probabilité d'échappement en symétrie plane* β_p *a aussi été ajoutée pour comparaison, mais elle n'est pas utilisée dans le modèle.*

Comparaison de $<\beta>$ (exacte) et β_s (approximation)

On compare les valeurs obtenues pour les probabilités d'échappement β_s et $<\beta>$ pour deux raies de H_2O et de CO le long d'une ligne d'écoulement sur la Figure 5.10. On y a aussi ajouté la valeur obtenue de la probabilité d'échappement dans le cas de la géométrie plan-parallèle Hummer & Rybicki (1982) :

$$\beta_p = \frac{1}{1+3|\tau_{ul}|}$$

pour comparaison.

Quand $\beta \ll 1$, donc que $\tau \gg 1$ les deux probabilités d'échappement β_s et $<\beta>$ convergent vers la même valeur, comme on s'y attend, ce qui est une vérification du calcul de l'intégrale (5.38). Les probabilités convergent aussi vers 1 quand la raie devient optiquement mince. Entre ces deux limites l'écart maximal est de 20% avec $<\beta> > \beta_s$

Anisotropies de $\beta(\vec{u})$ dans la direction de l'observateur

La figure 5.11 montre le rapport entre la probabilité d'échappement dans chaque direction (θ_1, ϕ_1) et la probabilité d'échappement moyennée sur toutes les direction $(<\beta>)$ pour 3 trois points d'élévation croissante le long d'une ligne d'écoulement lancée à $r_0 = 1\,\mathrm{UA}$.

On constate une grande variabilité en ϕ_1 ; de plus, les points moyennés sur tous les ϕ_1 montrent une oscillation en θ_1 qui peut être assimiliée avec l'inclinaison de l'axe du jet par rapport à un observateur. Elle permet de déduire que la luminosité du jet pourrait être plus importante pour des inclinaison proches de 0° et 90° et plus faible pour une inclinaison intermédiaire. Cet effet subi aussi une forte variabilité le long d'un ligne d'écoulement, ainsi, la situation à $z = 100\,\mathrm{UA}$ est différente de celle à $z = 2\,\mathrm{UA}$. L'effet global sur les intensités prédites en fonction de l'angle d'inclinaison à la ligne de visée est décrit dans les Chapitres 6 et 7.

VI Résultats

Les résultats suivants, présentés le long des lignes d'écoulement en fonction de l'altitude z, sont destinés à illustrer l'effet de l'implémentation du traitement des niveaux et des raies optiquement épaisses de CO et de H_2O : les populations des niveaux, les températures d'excitation et les émissivités. Ces résultats sont présentés dans le cadre des différents modèles de protoétoiles sur une ligne d'écoulement lancée à un même rayon d'ancrage. La première partie des résultats présentés ici traite l'effet du pompage infrarouge. Les résultats présentés dans la suite discutent de l'effet du pompage infrarouge par les poussières, la température des grains calculée par DUSTY et de chauffage / refroidissement du gaz par CO et H_2O dans sa nouvelle implémentation telle que décrit au Chapitre 4. La table ci dessous rapelle les propriétés des modèles réalisés.

Table 5.2 – *Propriétés des modèles réalisés, classe, taux d'accrétion $\dot{M}_{\mathrm{acc}}$, masse $M_\star$, paramètre d'opacité DUSTY τ_0, rayon de sublimation R_{sub}, luminosité des chocs d'accrétion L_{hs} et luminosité de l'étoile L_{acc}.*

Modèle			Paramètres			
Classe	$\dot{M}_{\mathrm{acc}}$ ($M_\odot\ \mathrm{yr}^{-1}$)	$M_\star$ ($M_\odot$)	τ_0	R_{sub} (UA)	L_{hs} ($L_\odot$)	$L_\star$ ($L_\odot$)
0	2×10^{-5}	0.1	52	0.63	10.5	2.1
0	5×10^{-6}	0.1	13	0.31	2.6	2.1
I	5×10^{-6}	0.5	6	0.64	14.1	2.1
I	1×10^{-6}	0.5	1.2	0.27	3.7	2.1
II	1×10^{-7}	0.5	0.12	0.15	0.5	2.1

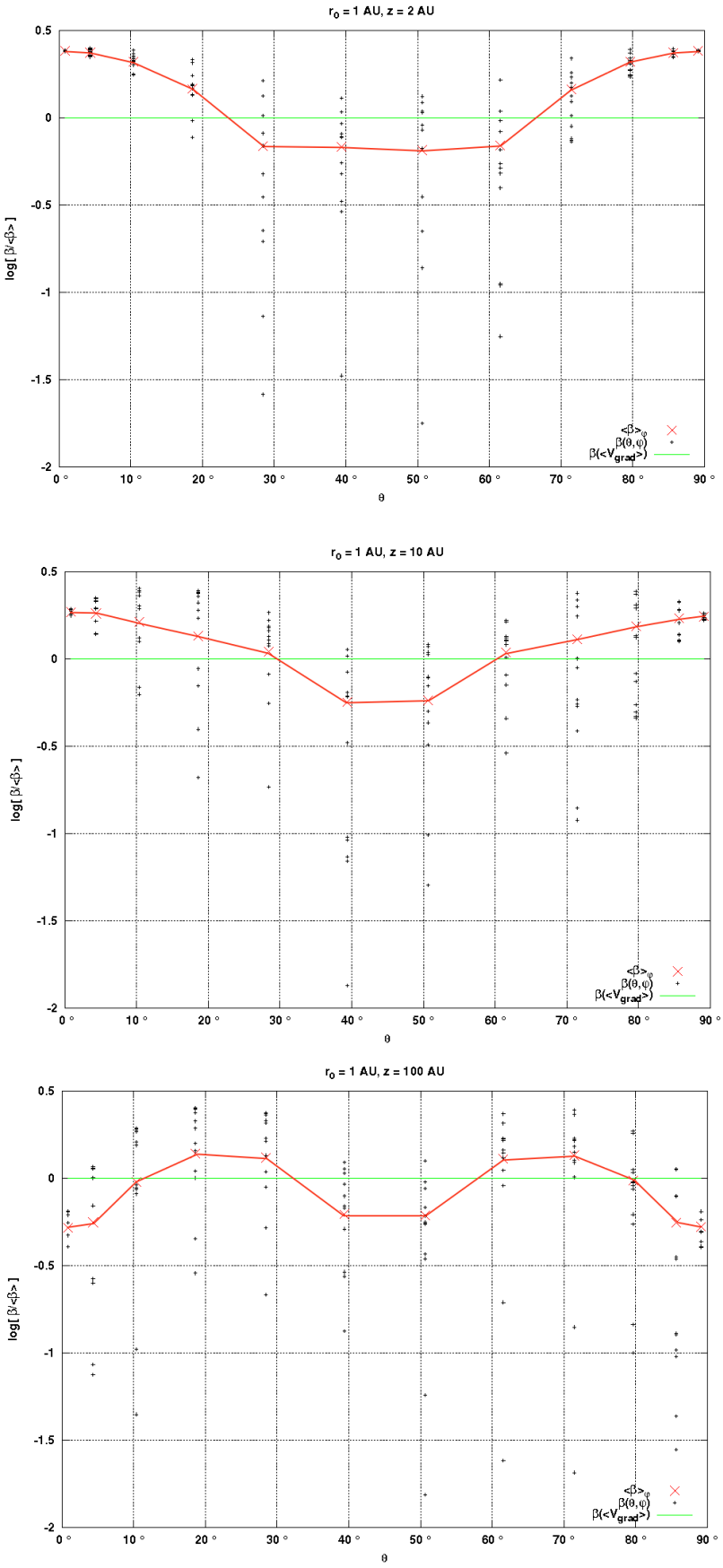


Fig 5.11 – *Rapports en* $log_{10}\ \beta(\theta_1,\phi_1)/<\beta>$ *en fonction de* θ_1 *pour chacune des 144 directions (symboles noirs), et la moyenne* $<\beta(\theta_1)>_{\phi_1}$ *de* $\beta(\theta_1,\phi_1)$ *sur* ϕ_1 *(en rouge), pour 3 points le long de la ligne d'écoulement* ($z = 2, 10$ *et* $100\,\mathrm{UA}$) *à* $r_0 = 1\,\mathrm{UA}$ *dans le modèle standard de classe 0. La variabilité de la probabilité d'échappement* $\beta(\theta_1,\phi_1)$, *quand les raies sont optiquement épaisses, tend à suivre un même motif le long des différentes lignes d'écoulement qui dépend de* z/r. *En vert* $\beta_s/<\beta>$ *qui est ici égal à 1.*

FIGURE 5.11

VI.1 Effet du pompage infrarouge

VI.1-1 Effet sur les températures d'excitation

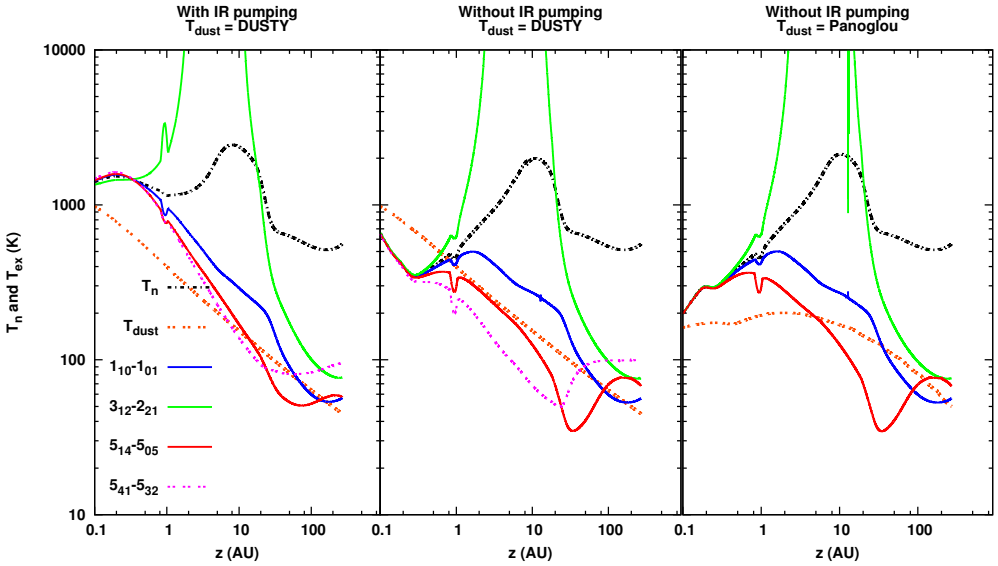


FIGURE 5.12 – *Effet du pompage infrarouge (figures de gauche et centre) et effet du changement de température des poussières (figure du centre et à droite) sur les températures d'excitation associées à quelques transitions de* H_2O*, pour le modèle de classe 0 avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ *et pour* $r_0 = 0.31\,{\rm UA} = R_{\rm sub}$*. Pour cette valeur de* r_0*, et avec le pompage infrarouge* H_2O *et* CO *chauffent la gaz jusque* $z \simeq 0.4\,{\rm UA}$ *(là où* T_n *commence à diminuer). Pour indications* $E_{3_{12}}/k_{\rm B} \simeq 250\,{\rm K}$*,* $E_{5_{14}}/k_{\rm B} \simeq 570\,{\rm K}$ *et* $E_{5_{41}}/k_{\rm B} \simeq 900\,{\rm K}$ *(représentée à gauche et au centre seulement).*

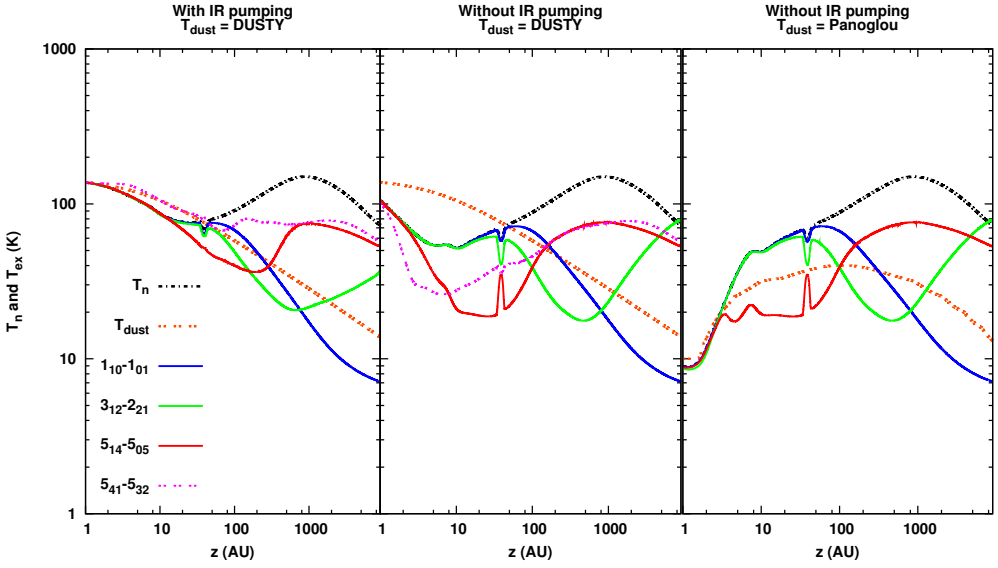


FIGURE 5.13 – *Même chose que pour la Figure 5.12, pour* $r_0 = 12.8\,{\rm UA}$

Effet de la température des grains T_d : Les panneaux centraux et de droite de ces mêmes figures montrent l'effet du changement de température des grains (calculé par DUSTY ou par l'équilibre radiatif avec le rayonnement directe de l'étoile et des chocs d'accrétion (ancienne implémentation) sur les températures d'excitation des transitions H_2O. L'altitude z le long des lignes d'écoulement où les niveaux rotationnels quittent l'ETL n'est pas affectée par T_d. La principale différence observée dans les températures d'excitation est dans la zone à l'ETL et vient de la différence de la température cinétique du gaz induite par les grains plus chauds.

Effet du pompage infrarouge : L'effet du pompage infrarouge par les poussières sur les températures d'excitation de trois raies de H_2O est montré sur les panneaux de gauche et centraux des Figures 5.12 et 5.13 le long de deux lignes d'écoulement pour le modèle de classe 0 de référence. Dans les deux cas T_d est le même. Le pompage infrarouge fait augmenter $T_{\rm kin}$ et $T_{\rm ex}$ d'un facteur 2 à la base du jet et devient 1.5 fois supérieure à la température des poussières car le rayonnement de la source (étoile + choc d'accrétion, qui chauffent l'enveloppe de poussières) diffusé est peu atténué et contribue au pompage infrarouge. La contribution de ce rayonnement est visible sur la Figure 5.5.

Sous l'effet du pompage infrarouge H_2O et CO chauffent le gaz jusque $z \simeq 4\,$UA à $r_0 = 0.31\,$UA, jusque $\simeq 1\,$UA pour $r_0 = 1\,$UA. À $r_0 = 12.8\,$UA seul H_2O chauffe le gaz jusque $z \simeq 4\,$UA mais son effet est compensé par le refroidissement par CO. Le pompage infrarouge fait aussi augmenter les températures d'excitation des différentes raies à la base du jet et fait légèrement augmenter les températures d'excitation des raies issues de niveaux d'énergie supérieur à plus haute altitude. Il a peu d'effet sur la raie fondamentale plus haut dans le jet ($z > 10\,$UA)

À la base du jet (où les densités sont élevées) l'énergie injectée par le pompage infrarouge dans les niveaux rotationnels de H_2O et de CO semble ainsi être efficacement transférée au gaz sous forme de chaleur.

Les Figures 5.14 à 5.17 apportent des précisions sur l'effet du pompage infrarouge et du changement de température des grains sur les températures d'excitation des raies de H_2O (Fig. 5.14 et Fig. 5.15) et des raies de CO (Fig. 5.16 et Fig. 5.17). Sur ces figures on a représenté le rapport entre la température d'excitation et la température du gaz.

Pour H_2O, sans pompage infrarouge, le rapport entre la température d'excitation et la température du gaz ne change pas quand la température des grains est modifiée. L'effet du pompage reste faible sur l'écart à l'ETL qui est principalement régulé par $n(X)/n_{\rm crit}$, sauf pour les niveaux de plus haute énergie dont l'excitation est plus sensible au pompage infrarouge. Le pompage infrarouge a un effet plus faible sur CO que sur H_2O. Sous l'effet du pompage infrarouge $T_{\rm kin}$ augmente de la même manière que $T_{\rm ex}$ pour les raies de CO. La raie 1-0 de CO est supra-thermique ($T_{\rm ex} > T_{\rm kin}$) alors que les raies 10-9 et 20-19 sont sous-thermiques.

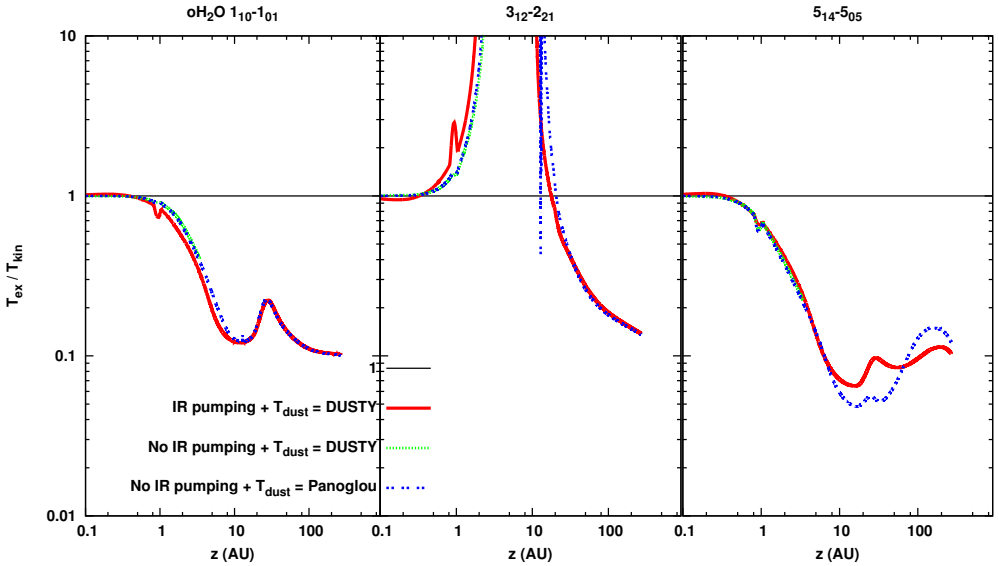


FIGURE 5.14 – *Rapport entre la température d'excitation des raies de ortho-H_2O présentées dans dans la Figure 5.12 sur la température cinétique du gaz pour les trois cas étudiés. $r_0 = 0.31$ UA en haut et $r_0 = 12.8$ UA en bas.*

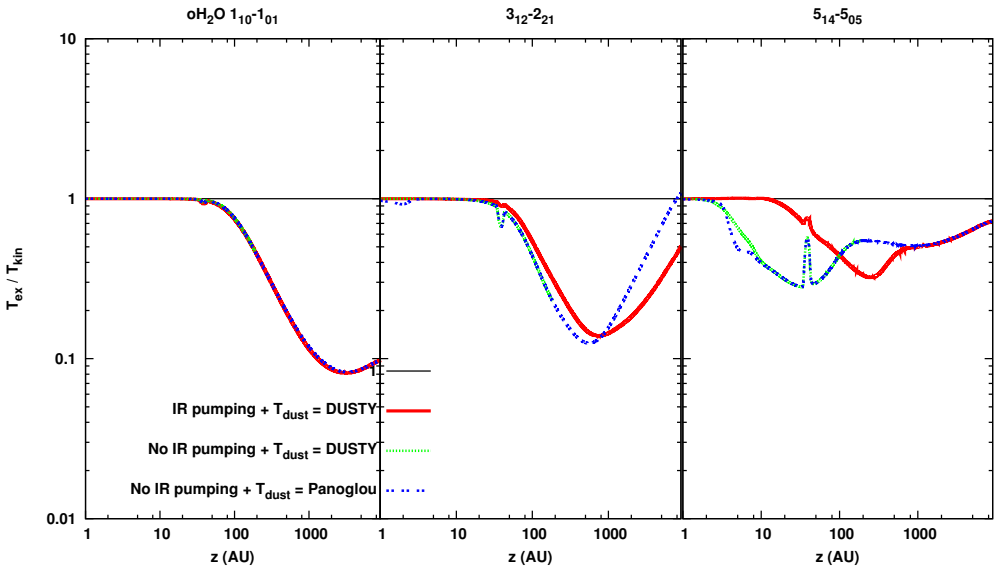


FIGURE 5.15 – *Même chose que pour la Figure 5.14, pour $r_0 = 12.8$ UA en bas.*

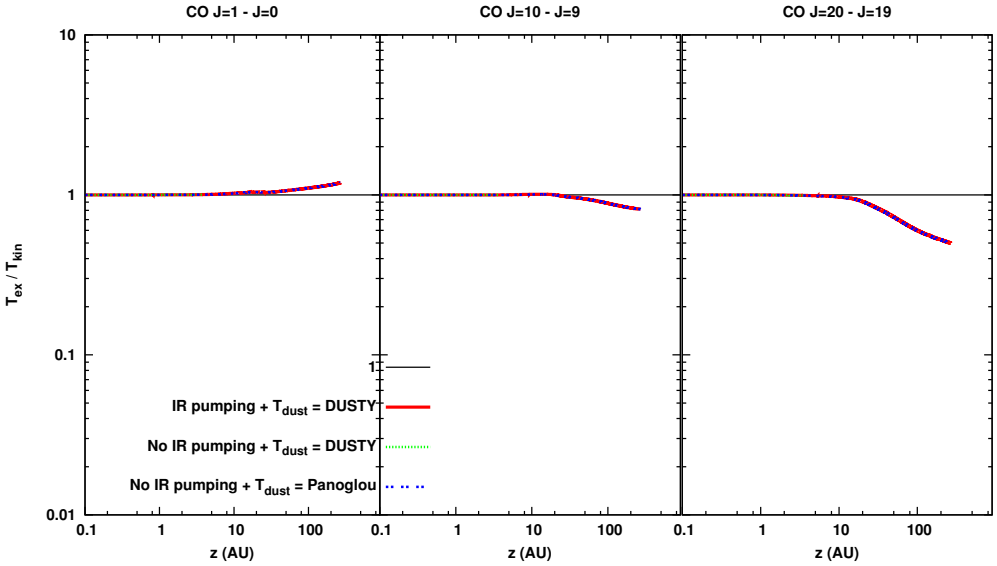


FIGURE 5.16 – *Rapport entre les températures d'excitation des raies de ortho-*CO *dans la même configuration que pour la Figure 5.14, pour* $r_0 = 0.31$ UA.

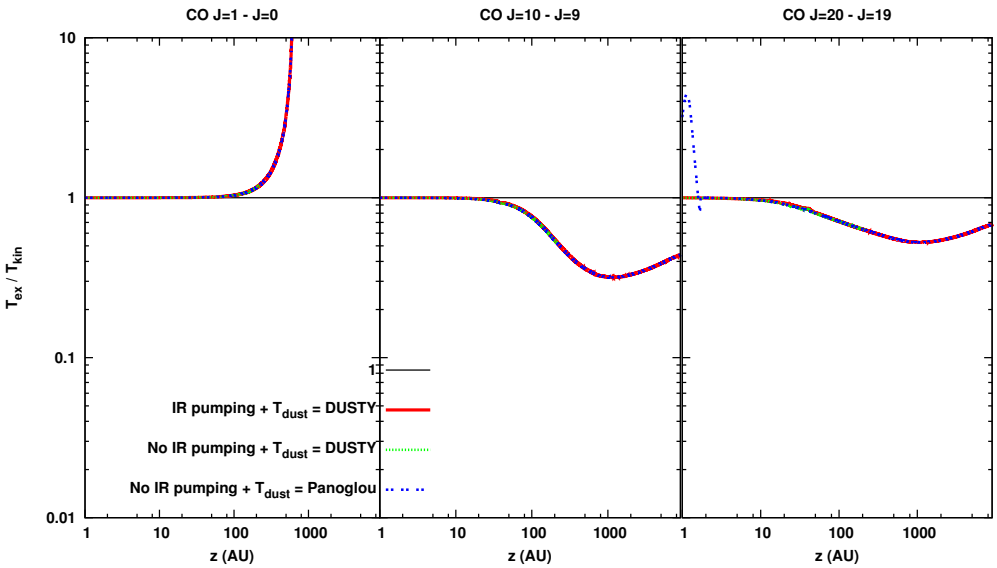


FIGURE 5.17 – *Même chose que pour la figure 5.16, pour* $r_0 = 12.8$ UA.

VI.1-2 Effet sur les populations rotationnelles et les émissivités

TABLE 5.3 – *Liste des premières transitions de* H_2O *présentant une inversion de population.*

Transition H_2O	Fréquence (GHz)	E_{up} (K)
$3_{12} - 2_{21}$	1153.1	249.4
$4_{14} - 3_{21}$	380.2	323.5
$4_{23} - 3_{30}$	448.0	432.2
$5_{23} - 5_{14}$	1410.6	642.4
$6_{16} - 5_{23}$	22.2	643.5
$5_{32} - 4_{41}$	732.1	732.1
$6_{25} - 5_{32}$	795.5	795.5
$3_{13} - 2_{20}$	183.3	204.7
$4_{22} - 3_{31}$	916.2	454.3
$5_{15} - 4_{22}$	325.2	469.9
$5_{24} - 4_{31}$	598.8	598.8
$5_{33} - 6_{06}$	1716.9	725.1
$5_{33} - 4_{40}$	474.7	725.1

◃ Les premières raies présentant une inversion de population dans le jet ($T_{ex} \rightarrow \infty$ et change de signe) sont répertoriées dans la table ci-contre. Le pompage infrarouge n'évite pas ce phénomène mais peut décaler son apparition à des altitudes plus élevées. Les raies $5_{23} - 4_{32}$ à 1918.5 GHz et la $2_{02} - 1_{11}$ à 987.9 GHz deviennent supra-thermique le long de la ligne d'écoulement uniquement dans le cas où le pompage infrarouge est négligé. Aucune raie ne devient supra-thermique quand H_2O est soumise au pompage infrarouge.

Populations rotationnelles : La Figure 5.18 montre le comportement des populations dans les niveaux rotationnels de H_2O correspondants aux transitions présentées sur les Figures 5.14 et 5.15, ainsi que pour deux niveaux à des E_u plus élevées. Les probabilités d'échappement associées sont montrées sur la Figure 5.19.

Le pompage infrarouge diminue les populations des niveaux les plus bas (courbe rouge et verte sur la Figure 5.18), et peuple les niveaux plus haut en énergie ($E_u/k_B > 1200$ K). Dans le même temps la probabilité d'échappement augmente et se rapproche de 1 pour les niveaux de basse énergie car leur densité diminue par rapport au cas sans pompage pompage infrarouge.

Émissivités : Sur les Figures 5.20 et 5.21 on a représenté l'émissivité dans les trois raies de H_2O $1_{10} - 1_{01}$, $3_{12} - 2_{21}$ et $5_{14} - 5_{05}$ et pour les trois cas montrant l'effet du pompage infrarouge (courbes vertes et rouge) et l'effet du changement de température des grains (courbe verte et bleue).

Dans le cas de l'inversion de population présenté pour la transition $3_{12} - 2_{21}$, le pompage infrarouge réduit légèrement l'émissivité associée, mais ne supprime pas l'effet de l'inversion de population. Pour la seconde ligne d'écoulement à $r_0 = 12.8$ UA, montrée sur la Figure 5.21, les variations sont plus importantes dues à la densité plus faible. On voit des Figures5.18 et 5.19 que l'augmentation de la probabilité d'échappement due au pompage infrarouge compense la diminution de la population pour la raie fondamentale, ainsi son émissivité est peu affectée. Les transitions depuis les niveaux d'énergie les plus élevés ont les émissivités les plus sensibles au pompage infrarouge.

Pour les raies optiquement épaisses, quand $<\beta> \ll 1$, on peut approximer l'émissivité

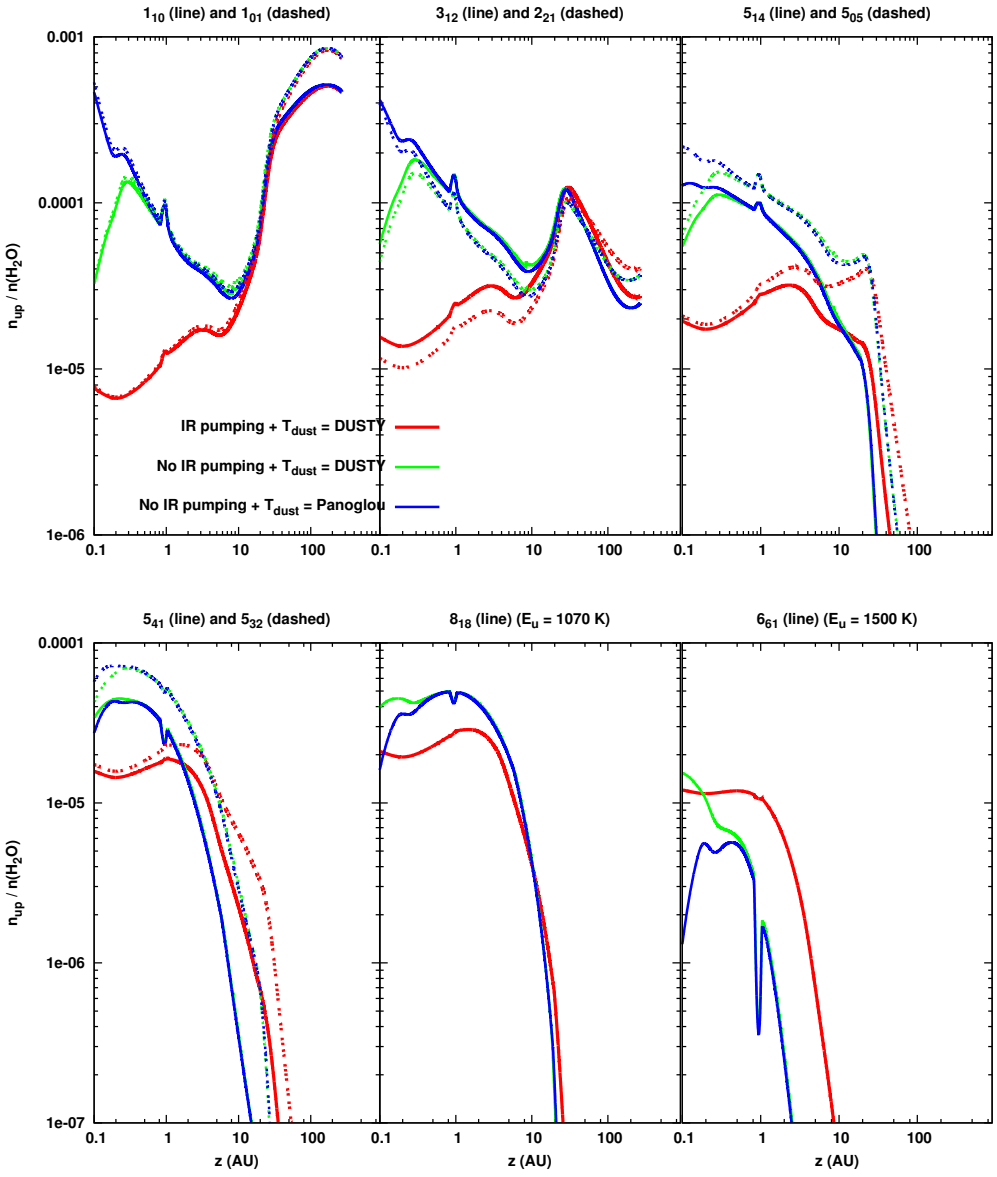


FIGURE 5.18 – *Population dans les niveaux rotationnels de o-*H_2O *correspondants aux transitions présentées en Figures 5.12 et 5.14, ainsi que pour 2 niveaux supplémentaires plus élevés. Le niveau supérieur est en trait plein et le niveau inférieur en trait pointillé.* $r_0 = 0.31$ UA.

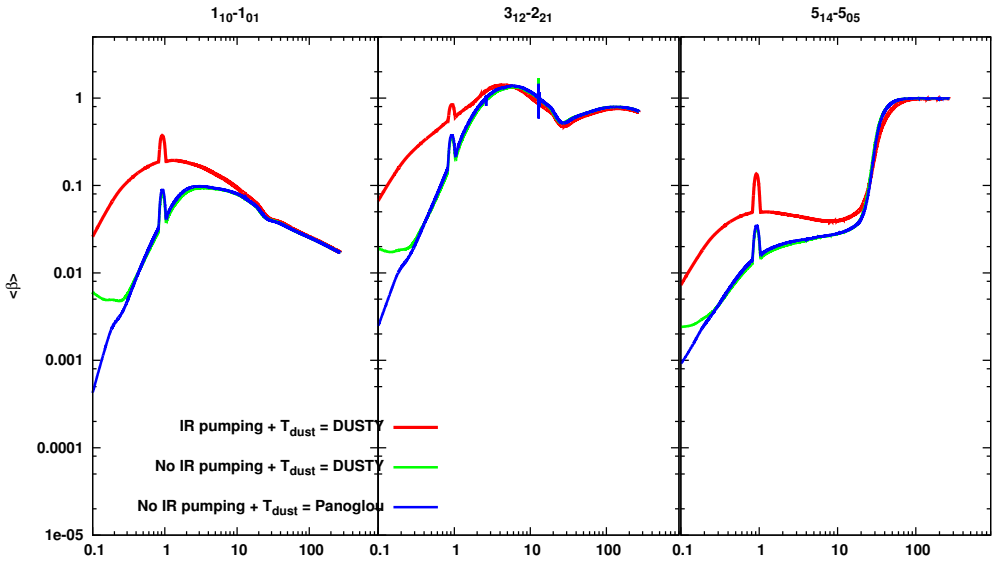


FIGURE 5.19 – *probabilité d'échappement moyenne* $< \beta >$ *pour les trois premières transitions présentées en 5.12 et 5.14.*

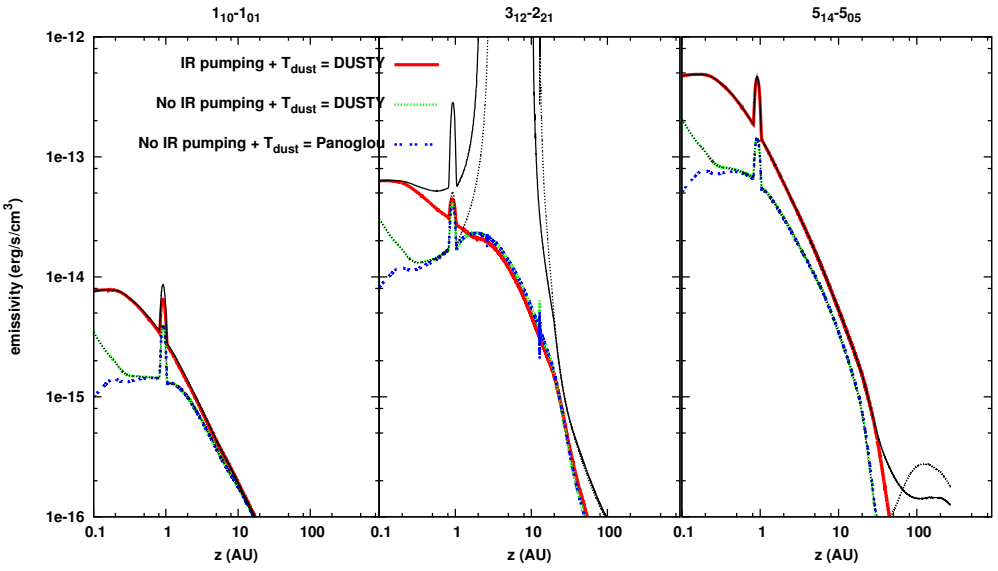


FIGURE 5.20 – *Emissivités dans les même raies de ortho-*H_2O *et dans les 3 cas étudiés précédemment,* $r_0 = 0.31$ UA. *On a superposé en noir* $j_0 = B_\nu(T_{\rm ex}) \times \frac{\nu}{c} \times \langle \frac{\partial v}{\partial s} \rangle$ *à l'émissivité (rouge et verte) des raies* $1_{10} - 1_{01}$ *et* $3_{12} - 2_{21}$.

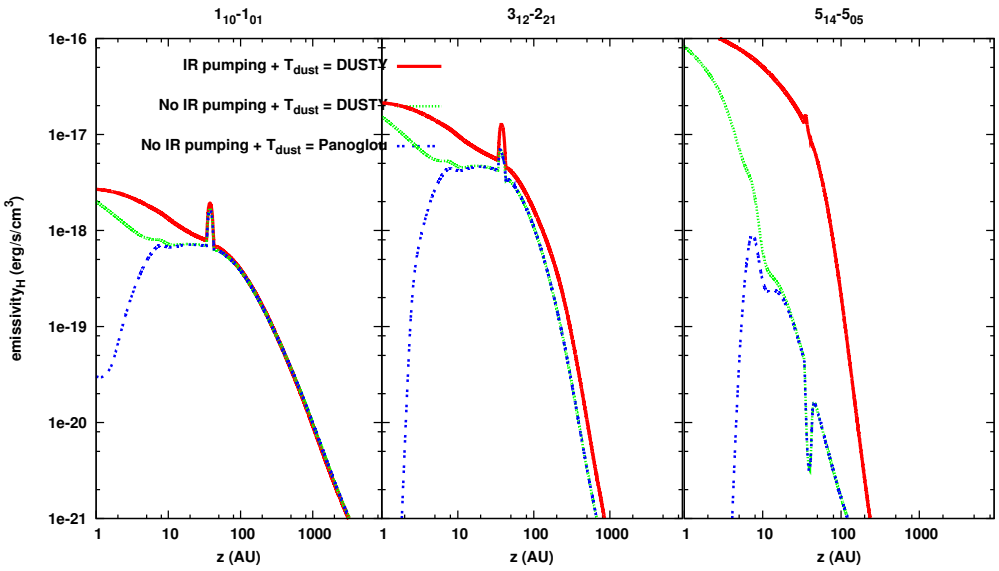


FIGURE 5.21 – *Même que la Figure 5.20, pour* $r_0 = 12.8$ UA.

en utilisant le fait que $\beta \simeq 1/\tau$:

$$j_{ul} = \frac{1}{4\pi} n_u <\beta_{ul}> A_{ul} h\nu_{ul} = <\beta_{ul}> S_{ul}\alpha_{ul} \simeq B_\nu(T_{\rm ex})\frac{\alpha_{ul}}{\tau_{ul}}$$
$$= j_0 = B_\nu(T_{\rm ex}) \times \left(\frac{\nu_{ul}}{c}\langle\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial s}\rangle\right)$$

où S_{ul} est la fonction source et α_{ul} est donnée en (5.9), on a la relation $\nu/c\langle\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial s}\rangle = \partial\nu/\partial s \simeq \Delta\nu/\Delta s$. Cette expression ne fait plus intervenir n_u ni la probabilité d'échappement, l'émissivité provient d'une couche d'épaisseur Δs correspondant à un décalage Doppler $\Delta\nu$. On a superposé la fonction j_0 sur la Figure 5.20 en noir aux émissivités calculées dans les cas avec pompage infrarouge et sans. Cette approximation reproduit bien les courbes d'émissivités quand $\beta \ll 1$ (comme c'est le cas pour la raie $1_{10} - 1_{01}$ et pour la raie $5_{14} - 5_{05}$ pour $z < 30$ UA.), pour la raie $3_{12} - 2_{21}$ cette approximation n'est pas valide car $T_{\rm ex}$ diverge.

L'augmentation de $T_{\rm ex}$ induite par le pompage infrarouge s'accompagne d'une diminution de la population dans les niveaux de basse énergie, donc d'une augmentation de la probabilité d'échappement et d'une augmentation de l'émissivité.

VI.2 Résultats : peuplement des niveaux

Cas de CO

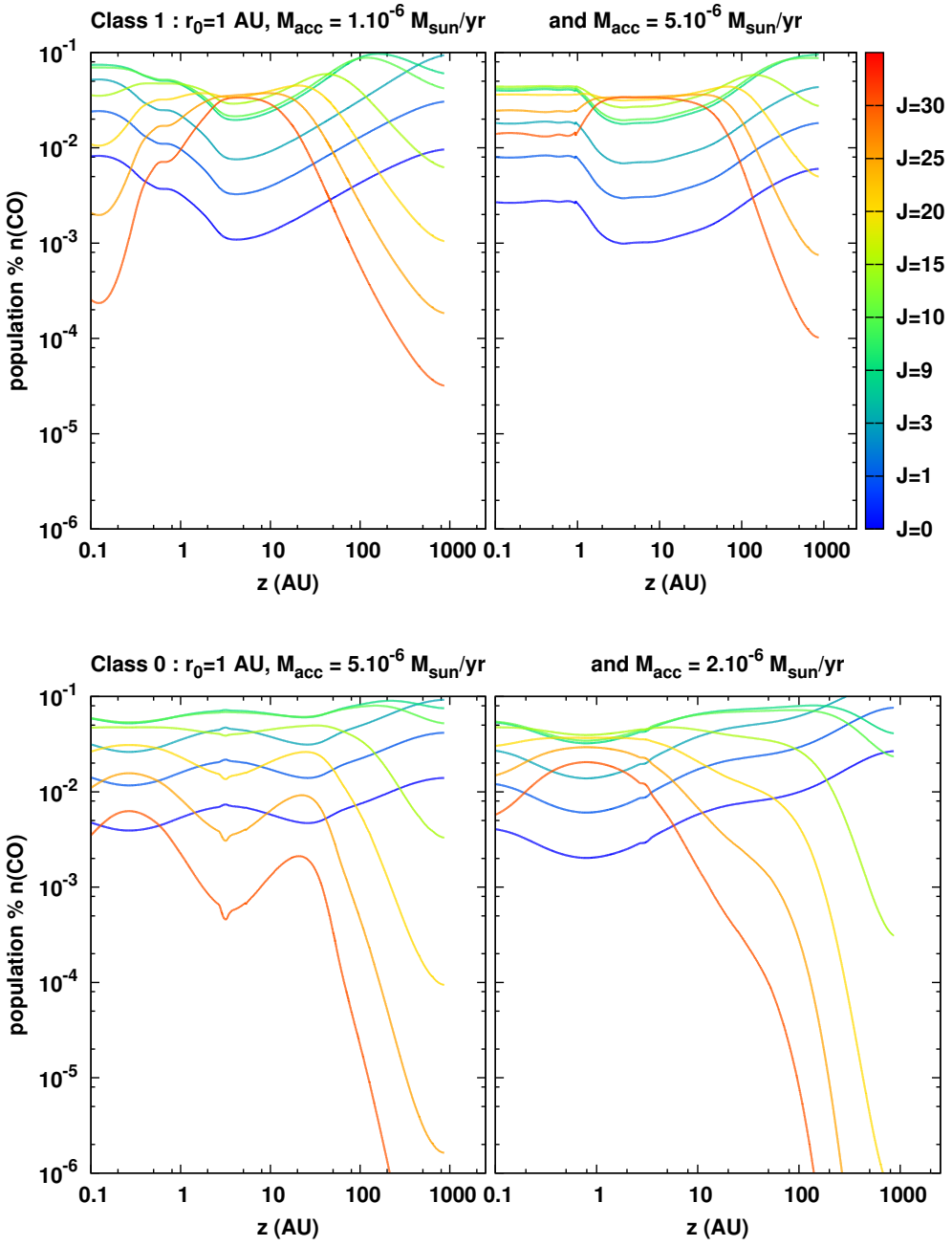


Figure 5.22 – *Populations (en % de $n(\mathrm{CO})$) dans quelques niveaux rotationnels de* CO *(indiqués sur l'échelle de couleur) obtenus pour les deux modèles de classe 0 (en bas) et de classe I (en haut).*

La Figure 5.22 illustre l'état des population rotationnelles de CO jusque $J = 30$. On compare sur la Figure 5.23 les populations rotationnelles de CO calculées par le modèle avec une distribution à l'ETL (relation (5.3) en utilisant l'approximation (5.5) pour

la fonction de partition rotationnelle). Ces populations sont comparées en deux points extrêmes (à la surface du disque et au point de recollimation) des lignes d'écoulement lancées à $r_0 = R_{\rm sub}$ et à $r_0 = 25$ UA pour un modèle de classe 0.

Pour cet exemple, la distribution des populations reste proche de l'ETL à la base de la ligne d'écoulement car la densité du gaz demeure importante. Mais cette distribution s'éloigne sensiblement de l'ETL à la fin de la ligne d'écoulement où la densité et la température sont plus faibles. Pour $r_0 = R_{\rm sub}$ on reste proche de l'ETL à $J \leq 15$, mais pour $r_0 = 25$ UA on voit que seuls les niveaux de basse énergie sont peuplés significativement.

Au départ de la ligne d'écoulement les niveaux sont peuplés suivant une distribution de Boltzman dans un régime collisionnel avec un maximum situé autour de $J \simeq 15$ correspondant à des énergies de l'ordre de ~ 580 K, ce qui correspond à la température cinétique du gaz (Figure 5.25).

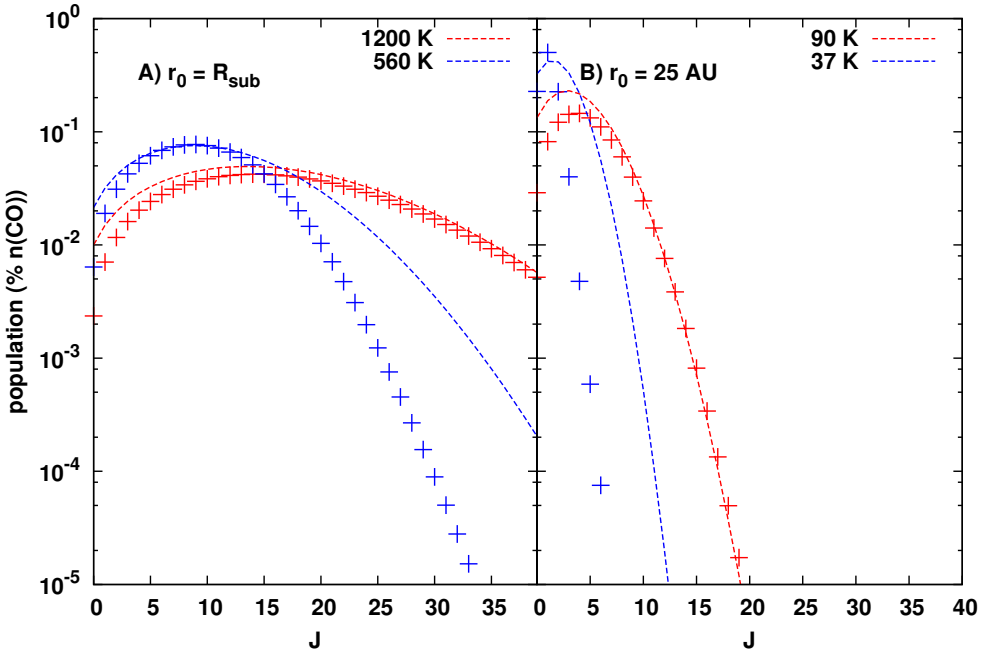


FIGURE 5.23 – *Populations (en % de n(CO)) marquées par les croix pour le modèle de classe 0 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}$ M$_\odot$ yr^{-1}, comparées avec une distribution de boltzman correspondante en trait pointillé.* ***Panneau A*** *$r_0 = R_{\rm sub}$ au point de lancement (en rouge) avec $T_{\rm kin} = 1200$ K, $n_{\rm H} = 4 \times 10^{11}$ cm^{-3} et au point de recollimation (en bleu) avec $T_{\rm kin} = 560$ K avec $n_{\rm H} = 9.7 \times 10^5$ cm^{-3}.* ***Panneau B*** *$r_0 = 25$ UA avec $T_{\rm kin} = 90$ K et $n_{\rm H} = 5.6 \times 10^8$ cm^{-3} au point de lancement et $T_{\rm kin} = 40$ K et $n_{\rm H} = 1.6 \times 10^8$ cm^{-3} au point de recollimation.*

Cas de H_2O

De la même manière que précédemment, on a représenté sur la Figure 5.24 les niveaux rotationnels de ortho-H_2O pour 4 modèles de classe 0 et I. Ces niveaux sont calculés avec le pompage infrarouge par les poussières. Pour les modèles où la densité est plus faible (classe I) presque tous les niveaux cascadent vers le niveau fondamental très rapidement. En conséquence, les températures d'excitation deviennent inférieures à la

température cinétique du gaz. Cette cascade peut être accompagnée d'effet maser si une inversion de population se produit pour certains niveaux.

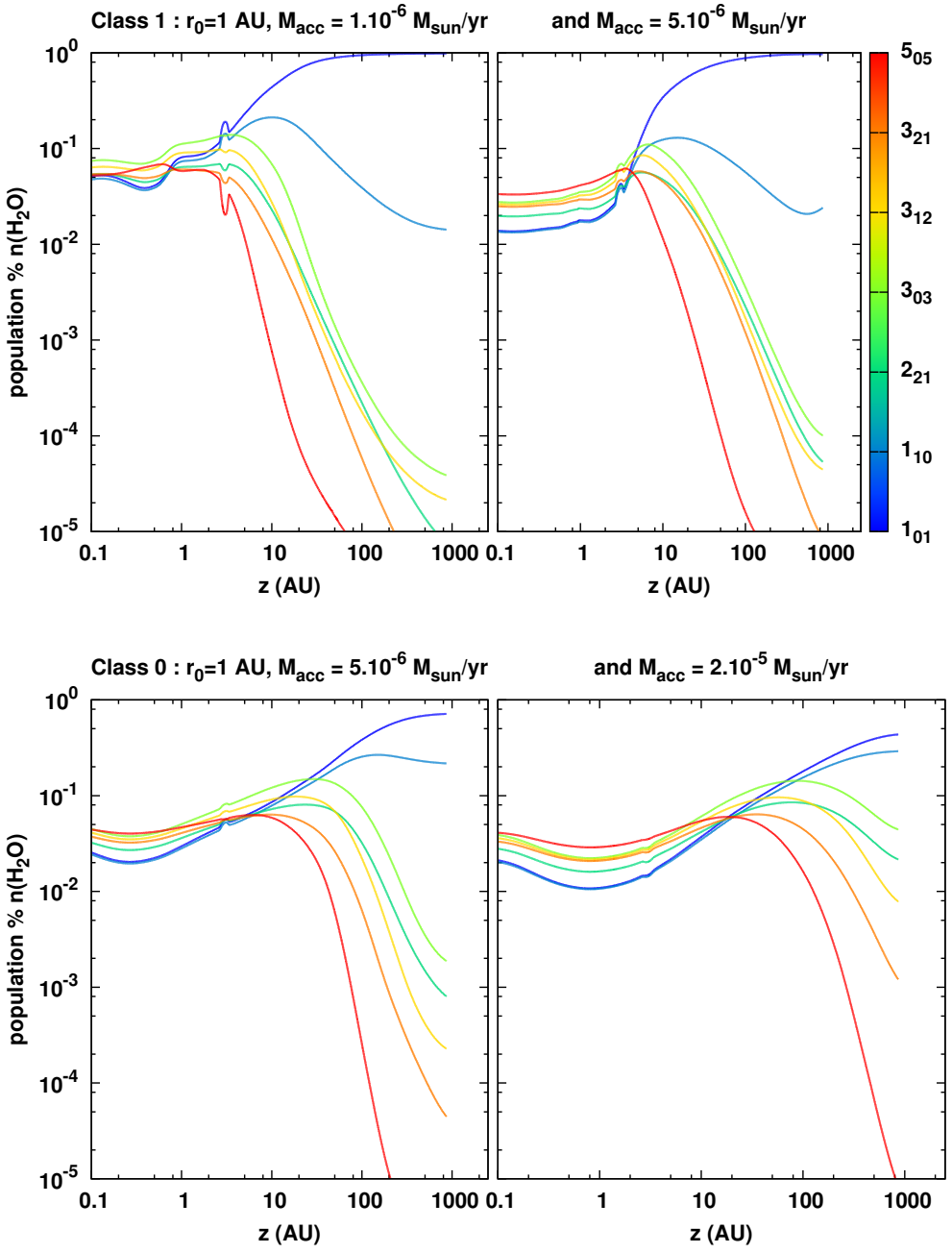


FIGURE 5.24 – *Comme pour la Figure 5.22, représentation des populations dans les niveaux de ortho-H_2O. À la fin des lignes d'écoulement presque toutes les molécules de o-H_2O sont retournées dans l'état fondamental. les niveaux de p-H_2O se comportent de manière similaire.*

VI.3 Résultats : températures d'excitation

Cas de CO

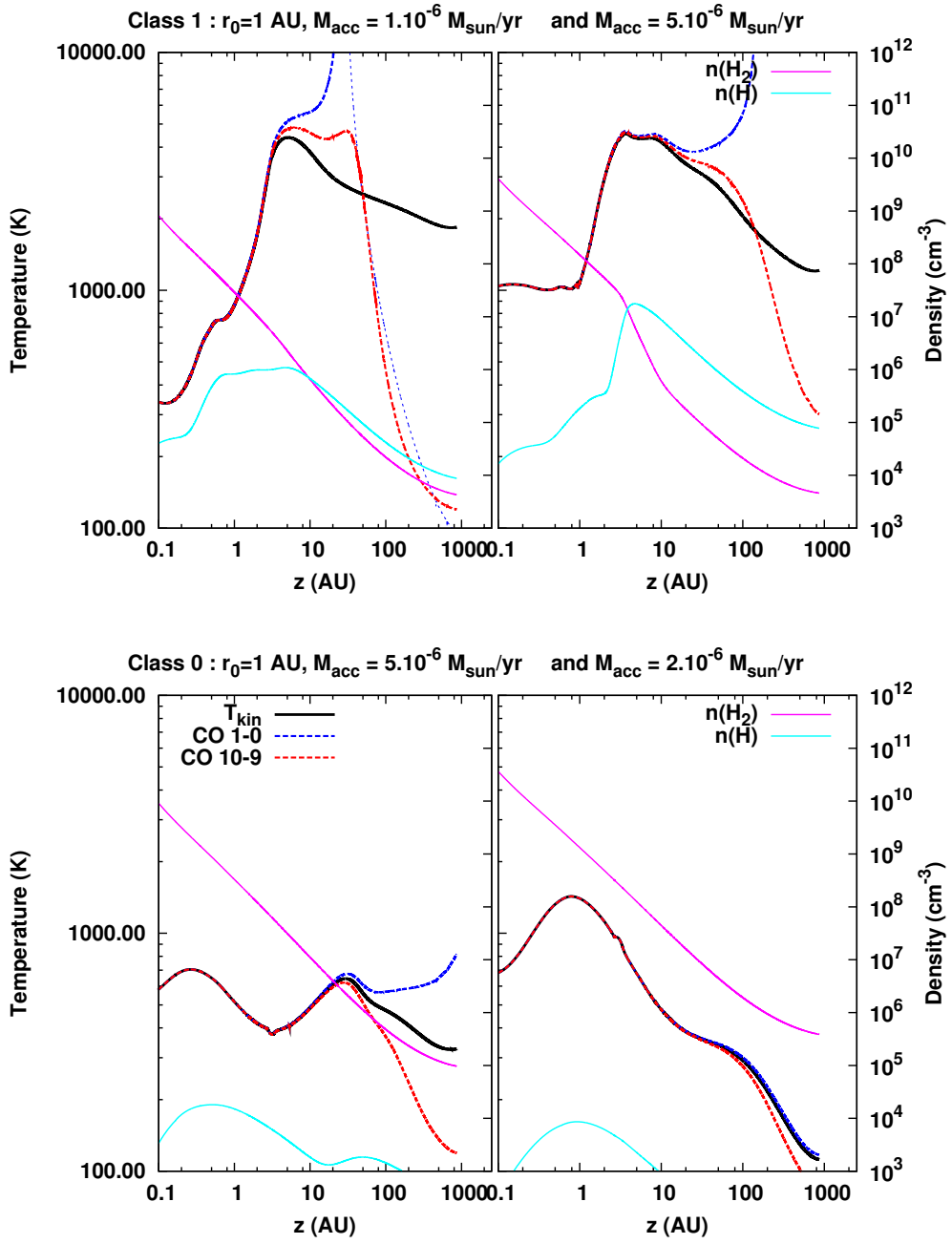


FIGURE 5.25 – *Températures d'excitation T_{ex} de* CO *1-0 (bleu) et 10-9 (rouge), superposées à la température du gaz T_{kin} en noir sont reportées sur l'axe de gauche, Le long de la ligne d'écoulement à $r_0 = 1$* UA *pour les deux modèles de classe I (en haut) et de classe 0 (en bas). Les densités de collisionneurs* H_2 *et de* H *(magenta et cyan respectivement) sont reportées sur l'axe de droite. Pour ces modèles la températures des grains est calculées par DUSTY et les raies sont calculées avec le pompage infrarouge par les poussières. Les températures d'excitation négatives sont marquées par un trait pointillé-fin.*

Les températures d'excitation dans la raie fondamentale 1-0 de CO ainsi que dans la transition 10-9, pour les modèles de classe I et de classe 0 ont été représentées avec la température cinétique du gaz et les densité des collisionneurs H et H_2 sur la Figure 5.25. Les températures d'excitation pour plusieurs raies de CO allant jusque $J = 20$ sont montrées sur la Figure 5.26.

Les températures d'excitation (Fig. 5.25 et Fig. 5.26) sont comparées directement à la température cinétique du gaz $T_{\rm kin}$. On constate qu'au départ des lignes d'écoulement les températures d'excitation dans les différentes raies suivent $T_{\rm kin}$, ce qui indique que les populations se répartissent suivant l'ETL, mais quand z augmente et que la densité diminue, CO décroche de l'équilibre.

Cet écart à l'ETL est d'autant plus important que la densité du gaz diminue, sous ce régime les transitions radiatives dominent. Dans le cas des classes I, où la densité est plus faible et la température du gaz est plus élevée, on remarque que la transition 10-9 devient rapidement sous-thermique. Le niveau $J = 0$ subit une inversion de population dans le même temps due à la cascade rapide des population des niveaux supérieurs vers le niveau $J = 1$. En conséquence la température d'excitation augmente avant de devenir négative.

La Figure 5.25 montre que l'approximation des niveaux de CO à l'ETL est valide tant que les densités de collisionneurs sont supérieures à $5 \times 10^6\,{\rm cm}^{-3}$. Elle est valide sur toutes toute la ligne d'écoulement dans le modèle le plus dense ($\dot{M}_{\rm acc} = 2 \times 10^{-5}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$) mais elle n'est plus suffisante aux densités plus faibles (r_0 plus grand, $\dot{M}_{\rm acc}$ plus faible).

Cas de H_2O

De manière similaire, la Figure 5.27 montre les températures d'excitation pour les transitions 1_{10}-1_{01} et 3_{12}-2_{21} de ortho-H_2O. On constate que l'ETL est atteint pour $n(H_2) > 5 \times 10^8\,{\rm cm}^{-3}$. En dessous de cette densité la raie fondamentale devient très sous-thermique. Pour les modèles de classe 0 la raie $3_{12} - 2_{21}$ devient d'abord brièvement (sur un faible intervalle en z) supra-thermique avant de devenir sous-thermique.

La situation est plus complexe dans le cas des classes I où la raie $3_{12} - 2_{21}$ subit une inversion de population. Les inversions de population surviennent quand les excitations / désexcitations collisionnelles cessent de dominer les transitions radiatives du fait de la décroissance de la densité en z, alors que les molécules sont toujours exposées à un champ de rayonnement infrarouge encore important générant un effet de pompage amenant à une situation d'inversion de populations.

Le long de la ligne d'écoulement lancée à 1 UA, H_2O chauffe le gaz à la base du jet et devient refroidisseur à $z \simeq 1$ UA pour le modèle de classe 0 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$, à $z \simeq 3$ UA pour le modèle de classe 0 avec un taux d'accrétion plus élevé, à $z \simeq 0.3$ UA pour le modèle de classe I avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$, et à $z \simeq 0.5$ UA pour le second modèle de classe I. D'après la Figure 5.27 cette transition chauffage-refroidissement se produit à la même densité $n(H_2) \simeq 5 \times 10^8\,{\rm cm}^{-3}$ et à des altitudes proches de celles où les niveaux de H_2O deviennent quittent l'ETL.

L'énergie injectée dans les niveaux rotationnels de H_2O par le pompage infrarouge (qui peuple les niveaux de haute énergie et dépeuple les niveaux de plus basse énergie à la base des lignes d'écoulement, $z/r \lesssim 1$), est évacuée par collisions avec le gaz à la base du jet, et contribue donc à le chauffer. De plus à la base des lignes d'écoulement le

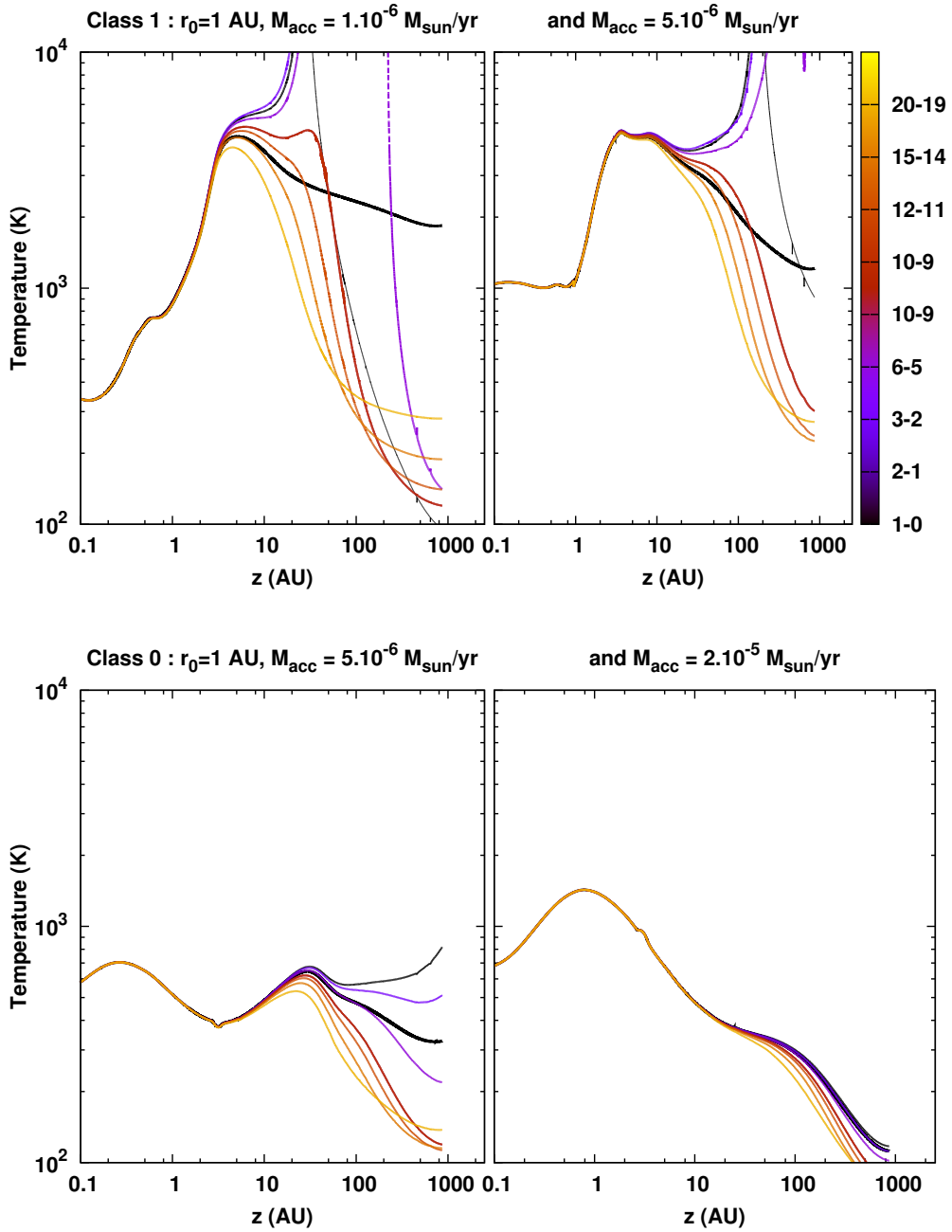


FIGURE 5.26 – *Comme pour la figure 5.25, températures d'excitation pour plusieurs raies de* CO *indiquées sur l'échelle de couleur, les raies sont codées en couleur. Il y a mise en évidence de la cascade énergétique pour les classes I. Les transitions correspondant aux niveaux d'énergie les plus élevés sont toujours sous-thermique, les niveaux d'énergie intermédiaires, dans le cas des classes I passe par état sur-thermique avant de devenir sous-thermiques. Pour les classes I les états de faibles énergie sont sur-excités par la cascade depuis les niveaux plus excités au point que le* T_{ex} *associé puisse devenir négatif. Dans le cas des classes 0 et notamment pour le modèle à haute densité, le peuplement suit quasiment l'ETL.*

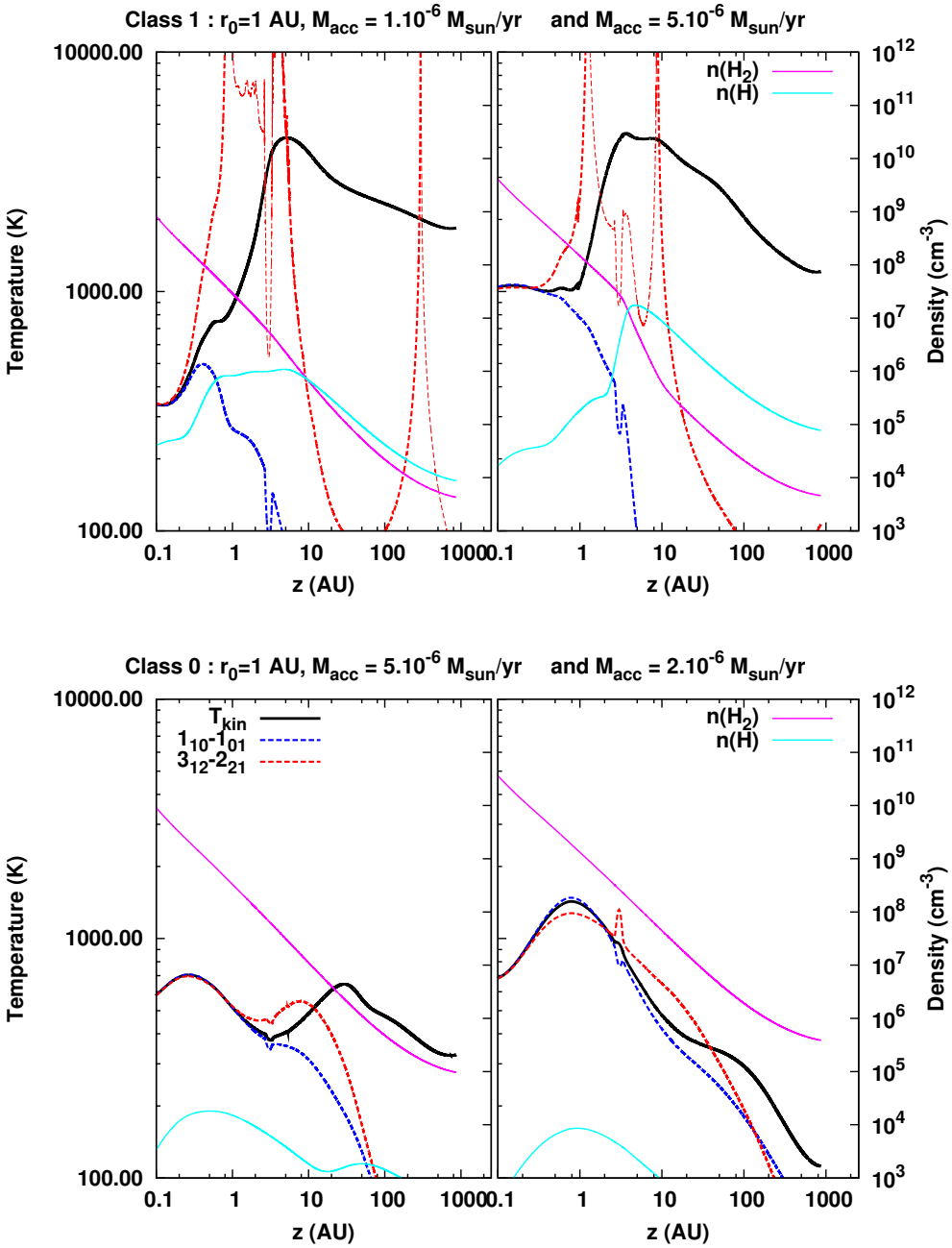


FIGURE 5.27 – *Comme pour la Figure 5.25, cette figure montre la température d'excitation de deux raies de* H_2O 1_{10}-1_{01} *(bleu) et la* 3_{12}-2_{21} *(rouge), superposées à la température du gaz en noir reportées sur l'axe de gauche, le long de la ligne d'écoulement à* $r_0 = 1$ UA *pour les deux modèles de classe I (en haut) et de classe 0 (en bas). Les densités de* H_2 *et de* H *(magenta et cyan respectivement) sont reportées sur l'axe de droite. Pour ces modèles la température des grains est calculée en utilisant DUSTY et le pompage infrarouge par les poussières est actif. Les températures d'excitation négatives sont marquées par un trait pointillé-fin.*

rayonnement de l'étoile et du choc d'accrétion diffusé par les poussières apporte sa contribution au pompage infrarouge. Comme les densités sont élevées, le gaz se thermalise avec la température rotationnelle de H_2O et les niveaux de H_2O sont à l'ETL. Quand la densité diminue (et z augmente) cette énergie ne sert plus à chauffer le gaz et est évacuée sous forme de rayonnement (en tenant compte de la probabilité d'échappement), la température du gaz diminue et les populations des niveaux à E_u élevée cascadent vers les niveaux à faibles E_u.

VI.4 Résultats : émissivités

On présente l'émissivité dans quelques raies de CO sur la Figure 5.28 à $r_0 = 12.8$ UA. Elles sont calculées en utilisant la probabilité d'échappement moyenne $< \beta >$ et elles sont multipliées par le cube du rayon sphérique à l'étoile afin de donner un aperçu des effets de volume : les parties intérieures du jet représentent un faible volume mais ont une densité élevée et une émissivité importante alors que dans les parties extérieures du jet, la densité et l'émissivité sont plus faibles, mais le volume de ces régions est plus important.

Un comportement similaire est observé pour H_2O représenté sur la Figure 5.29. À grandes échelles l'émission est plutôt dominée par les raies $2_{21} - 1_{01}$, $1_{10} - 1_{01}$ pour ortho et de la même manière par les raies $2_{02} - 1_{11}$ et $1_{11} - 0_{00}$ pour para.

VII Conclusion

L'implémentation du traitement des niveaux rotationnels de CO et H_2O
- permet de disposer des émissivités calculées de manière cohérente avec la structure thermique du gaz, ces données sont indispensables aux prédictions synthétiques décrites dans les chapitres suivants.
- apporte une modification notable dans l'équilibre thermique du gaz et influe donc rétroactivement les processus dépendant de la température, comme la chimie.

Les résultats montrent que les populations de CO et de H_2O sont pas à l'ETL seulement à la base du jet jusque $z/r \simeq$ tout le long des lignes d'écoulement.

Inclure le niveau vibrationnel $v = 1$ de CO permettra d'avoir accès à la transition $v = 1 \rightarrow v = 0$ qui peut être un traceur intéressant et certainement vu en absorption.

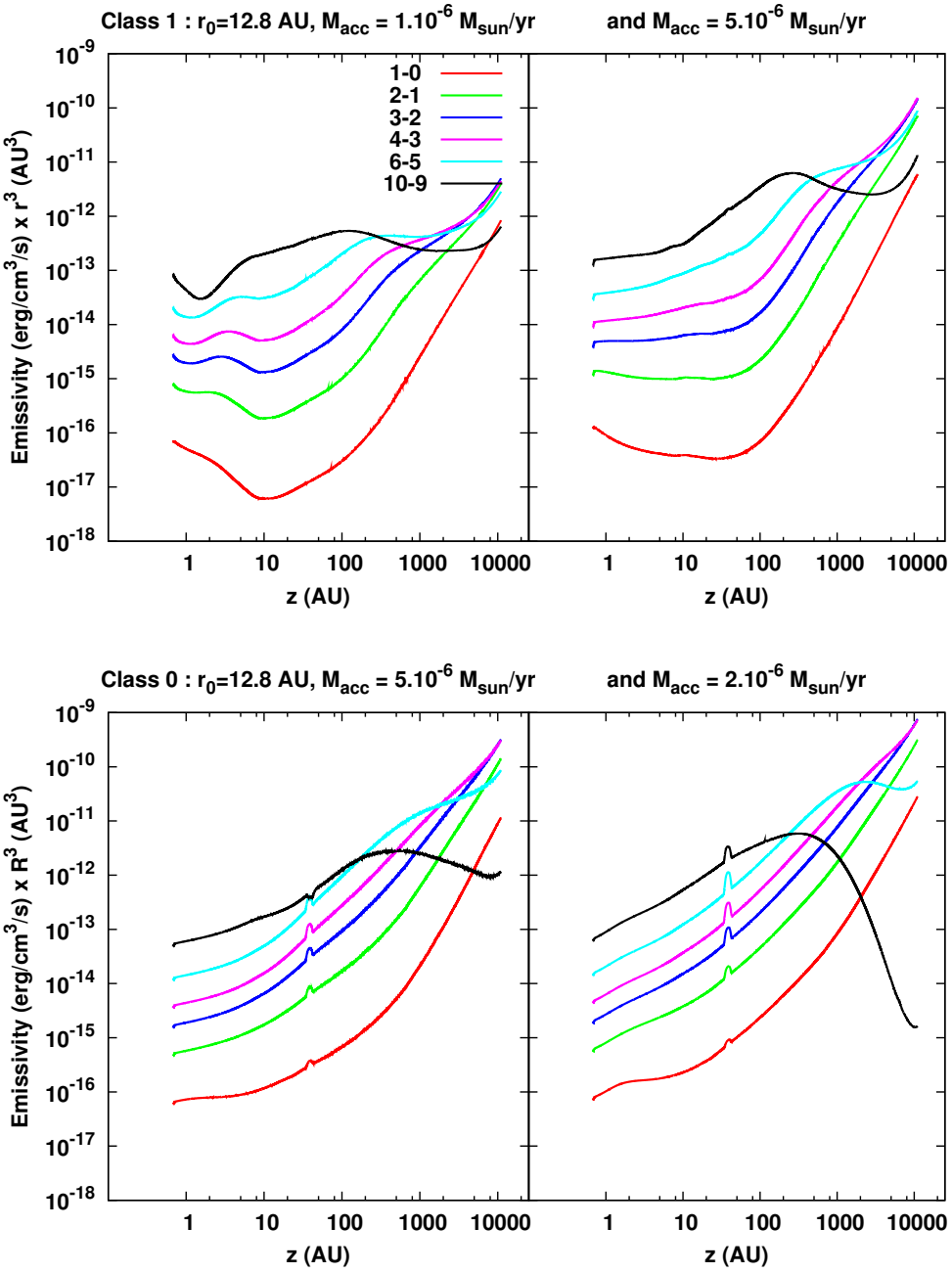


FIGURE 5.28 – *Représentation des émissivités* $\epsilon = <\beta> A_{ul}(E_u - E_l)n_u$ *dans les premières raies de* CO *multipliées par un volume* R^3 *donnant une idée de la contribution dans le jet 3D des émissivités en chaque point de la ligne d'écoulement, appliqué pour les différents modèles le long de la ligne d'écoulement lancée à* $r_0 = 1$UA*, et montrant les effets volumique dans le jet sur les émissivités perçues.*

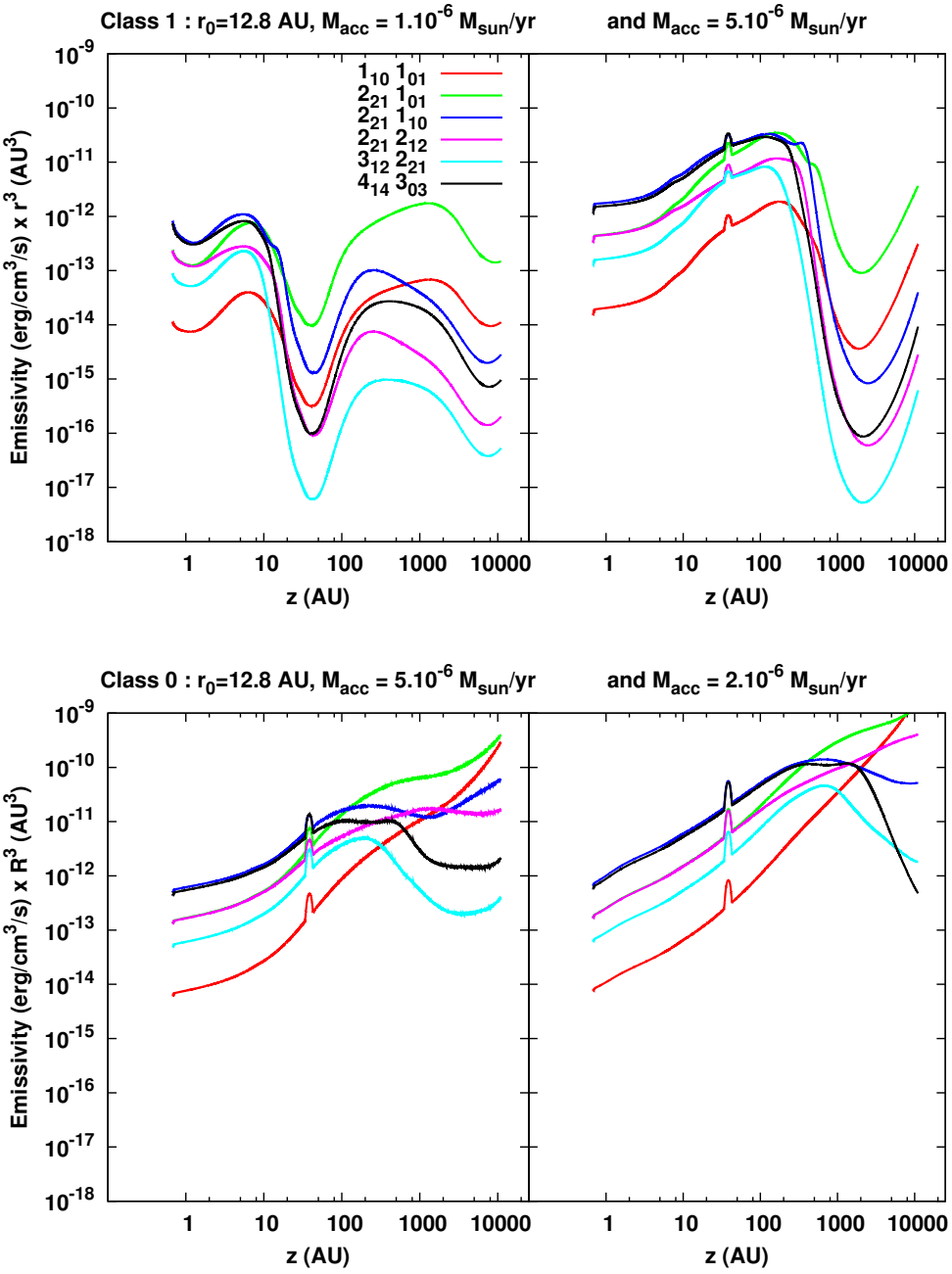


FIGURE 5.29 – *Emissivités de* H_2O*, comme pour la figure 5.28 pour les différents modèles le long de la ligne d'écoulement lancée à* $r_0 = 12.8$UA.

Prédictions synthétiques et comparaisons aux observations

Chapitre

6

Prédictions synthétiques de H_2 et comparaisons aux observations

Sommaire

I Prédictions synthétiques . . . 154
I.1 Méthode . . . 154
I.2 Cartes 2D . . . 157
I.3 Cube de données . . . 158
I.4 Cartes de brillance . . . 160
I.5 Diagrammes Position vitesse (PV) . . . 160
I.6 Convolution . . . 161
I.7 Profils de raies intégrés . . . 161
I.8 Luminosité intégrée . . . 161
II Prédictions, influence des paramètres libres . . . 162
II.1 Champ de vitesse dans la solution MHD . . . 162
II.2 Extension de la zone de lancement du vent de disque : influence de r_0^{max} . . . 162
II.3 Angle d'inclinaison : influence de i . . . 166
II.4 Effet du taux d'accrétion et de la masse de l'étoile . . . 170
III Comparaison avec le jet moléculaire de DG Tau . . . 171
III.1 Présentation . . . 171
III.2 Diagrammes position-vitesse . . . 172
III.3 Cartes de brillance . . . 174
III.4 Flux et rapport de raies . . . 175
IV Conclusion . . . 175

Résumé : *Ce chapitre aborde un deuxième volet du modèle qui est la génération de prédictions synthétiques à partir des résultats du modèle MHD de vents de disques le long de lignes d'écoulement assemblées pour constituer un jet 3D, que l'on projette sur le plan du ciel. Nous traitons ici spécifiquement des raies d'émission de H_2, de la méthodologie employée pour créer des prédictions synthétiques (profils, cartes d'émissivités, diagrammes position-vitesse, rapport de raies, intensités) et de l'effet des différents paramètres libres (angle d'inclinaison du jet, taux d'accrétion, masse de l'étoile, extension de la zone de lancement du vent de disque). Enfin nous interprétons les observations effectuées à haute résolution angulaire de DG Tau avec VLT/SINFONI à l'aide des prédictions du modèle.*

Introduction À partir de l'état physique détaillé obtenu le long des lignes d'écoulement, et en particulier de l'émissivité dans les raies moléculaires et des probabilités d'échappement associées, l'étape suivante consiste à construire des observations synthétiques qui puissent être directement comparées aux observations.

Ce chapitre détaille la méthodologie employée pour créer une observation synthétique (cartes, profils, diagrammes d'excitation...). Le principe consiste à projeter le jet 3D depuis l'espace réel sur le plan du ciel qui est découpé en pixels et convolué par le lobe instrumental. De même la vitesse est projetée sur la ligne de visée pour obtenir le décalage Doppler prédit. Nous avons construit des grilles de prédictions synthétiques en faisant varier ces paramètres : inclinaison du jet, zone de lancement, taux d'accrétion, masse de l'étoile.

Le cas de H_2 est le plus simple, car ses raies sont optiquement minces, ce qui n'est pas le cas pour H_2O et CO, traités dans les chapitres 7 et 8. Les transitions de H_2 sont nommées selon la notation v_u-v_lS(J_l) où S désigne les transitions à $\Delta J = -2$. Donc pour la transition 1-0S(1) : $v_u = 1$, $v_l = 0$ $J_u = 3$ et $J_l = 1$. Les précisions sur les transitions de H_2 utilisées ici sont données en Annexe B.I (page 272).

Nous comparons nos prédictions aux récentes observations à haute résolution angulaire de H_2 1-0S(1) obtenue par Agra-Amboage et al. (2011) pour la source de classe 2 DG Tau. En effet il a été suggéré par Takami et al. (2004) que le H_2 chaud dans cet objet pourrait tracer un vent de disque MHD.

I Prédictions synthétiques

I.1 Méthode

La méthode générale aboutissant à la construction d'observations synthétiques peut se décomposer en plusieurs étapes :

1) Calculer l'état thermochimique et l'émissivité le long d'un grand nombre de lignes d'écoulement pour couvrir le jet avec une bonne discrétisation en r_0.
2) En utilisant les propriétés d'axisymétrie du modèle de vent de disque, on remplit l'espace dans le repère du jet en interpolant l'émissivité entre toutes les lignes d'écoulement disponibles en appliquant une rotation de 2π autour de l'axe du jet, pour obtenir un jet tridimensionnel.
3) Incliner le jet pour tenir compte de l'inclinaison i de son axe par rapport à la ligne de visée.
4) Projeter l'objet incliné sur le plan du ciel et convoluer par le lobe instrumental (en tenant compte de la distance à l'objet) et projeter la vitesse sur la ligne de visée pour obtenir le décalage Doppler. On passe ainsi de l'objet modélisé au cube de données ($r_{\rm obs}$, $z_{\rm obs}$, $v_{\rm rad}$).

Ce procédé fait intervenir quatre paramètres :

- Le rayon de lancement minimal $r_0^{\rm min}$ correspondant au rayon d'ancrage de la première ligne d'écoulement ayant des poussières. On le prendra égal au rayon de sublimation des poussières dans tous les modèles [1].

1. Faire varier ce paramètre suppose de recalculer toute la structure thermochimique du jet pour chaque $r_0^{\rm min}$, en redéfinissant une nouvelle discrétisation en r_0.

- Le rayon de lancement maximal $r_0^{\max}$ correspondant au rayon d'ancrage de la dernière ligne d'écoulement et donc à l'extension maximale de la zone de lancement du vent de disque.
- L'angle d'inclinaison de l'axe du jet par rapport à la ligne de visée i :
  - $i = 90°$correspond à un jet dont l'axe est dans le plan du ciel (*edge-on*),
  - $i = 0°$correspond à un jet perçu par le pôle, dont l'axe est colinéaire à la ligne de visée (*pole-on*).
- La distance D entre l'objet et l'observateur.
- Le lobe instrumental en secondes d'arc.

Il est utile, dans un premier temps, de définir deux repères. Le premier est le repère lié au jet $\Re_{\rm jet}(\vec{x}_{\rm jet}, \vec{y}_{\rm jet}, \vec{z}_{\rm jet})$ associé aux coordonnées cylindriques $(r_{\rm jet}, z_{\rm jet}, \phi_{\rm jet})$ où $\phi_{\rm jet}$ est l'angle de rotation autour de l'axe du jet, centré sur l'astre central, dont l'axe vertical z correspond à l'axe de rotation du disque (Voir Figure 6.1). L'origine pour l'angle de rotation autour de cet axe est choisie dans le plan $(\vec{z}_{\rm jet}, \Omega_{\rm obs})$ dans la direction opposée à l'observateur. La ligne de visée orientée du jet vers l'observateur est notée $\mathcal{L}_{\rm obs}$.

Le second repère $\Re_{\rm sky}$ est lié au plan du ciel (en pointillé noir sur la Figure 6.1). Il est donc incliné d'un angle i par rapport à $\Re_{\rm jet}$; ces deux repères ont la même origine. Ce repère comprend deux directions d'espace $\vec{z}_{\rm sky} = z_{\rm obs}$ (intersectant $\vec{z}_{\rm jet}$ à l'origine) et $\vec{r}_{\rm sky} = r_{\rm obs}$. La troisième dimension est celle de la ligne de visée. La vitesse radiale correspond à la vitesse du gaz projetée sur la ligne de visée $v_{\rm sky}$.

La méthode décrite ici consiste à projeter le jet 3D dans ce nouvel espace des observables $\Re_{\rm sky}$, ce qui permet de constituer le cube de données. L'énergie émise par chaque élément de volume du jet vient ajouter sa contribution en chaque pixel du cube de données où il se projette. Ainsi un même pixel du cube de données peut cumuler la brillance de plusieurs éléments du jet s'ils sont alignés sur une même ligne de visée et si leur vitesse radiale est la même.

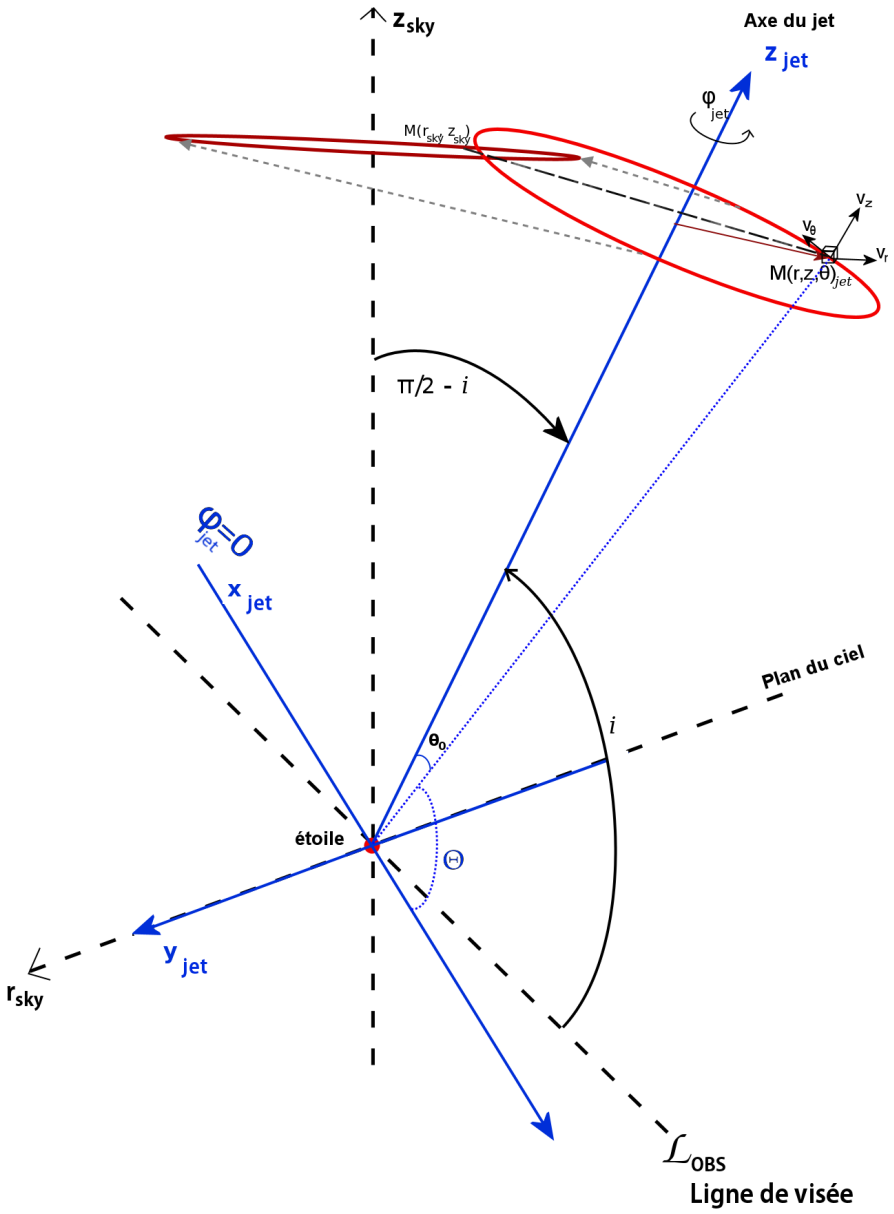


FIGURE 6.1 – *Projection du jet sur le plan du ciel en tenant compte de l'inclinaison. Le repère* $\Re_{\rm jet}$ *est tracé en* bleu. *Les coordonnées du point M sont exprimée dans le repère* $\Re_{\rm jet}$. *Chaque volume* $\mathrm{d}V$ *(qui est le même que celui de la Figure 6.2) issu de la surface* $\mathcal{S}_{\rm jet}$ *génère un anneau par rotation autour de l'axe du jet qui est incliné d'un angle i par rapport à la ligne de visée. Le gaz contenu dans le volume élémentaire* $\mathrm{d}V$ *a une émissivité* $\epsilon \mathrm{d}V = \mathrm{d}\epsilon$ *et une vitesse* $\vec{v}$. *La projection des coordonnées* $z_{\rm jet}$, $r_{\rm jet}$ *et* $\phi_{\rm jet}$ *de chaque volume* $\mathrm{d}V(\theta)$ *sur l'anneau donne* $z_{\rm sky}$ *et* $r_{\rm sky}$, *la vitesse se projette en* $(v_{\rm sky} = v_{\rm rad})$.

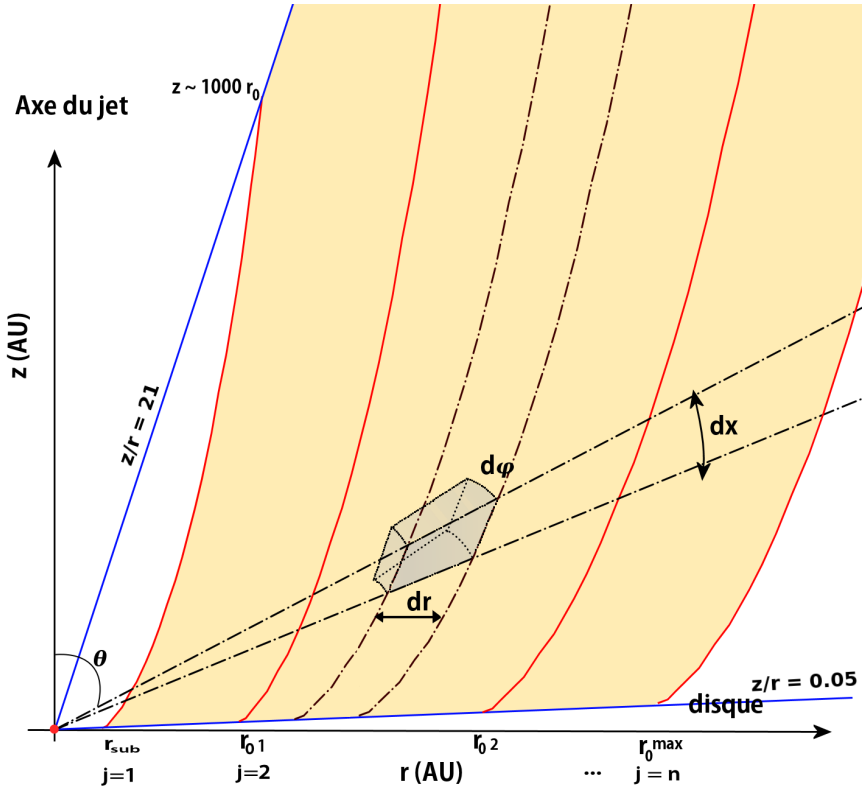


FIGURE 6.2 – *Vue en coupe poloïdale du jet. Les lignes d'écoulement où la thermochimie est calculée sont représentées en rouge, lancées depuis $r_0(j)$ où j est le numéro de la ligne d'écoulement (les lignes d'écoulement interpolées sont en tirets-points). La surface $\mathcal{S}_{\rm jet}$ est représentée en orangé. Le volume* $\mathrm{d}V = r\mathrm{d}r\mathrm{d}z\mathrm{d}\phi$ *contient l'émissivité* $\mathrm{d}\epsilon$ *interpolée au point (x, r, ϕ). Le lieu des points d'ancrage des lignes d'écoulement dans le disque est à $z/r = 0.05$ et le lieu des points de recollimation ($z \simeq 1000 \times r_0$) est à $z/r \simeq 21$.*

I.2 CARTES 2D

On se place dans le repère $\mathfrak{R}_{\rm jet}$ et dans le plan méridional $(r_{\rm jet}, z_{\rm jet})$. On considère l'ensemble des n lignes d'écoulement lancées depuis une série de rayons $r_0(j)$, $j = 1$ à n, avec $r_0(1) = R_{\rm sub}$ et $r_0(n) = r_0^{\rm max}$.

Le long de chacune de ces lignes d'écoulement on s'intéresse à l'émissivité d'une raie. Ici on s'intéresse à H_2 donc on prend $\beta = 1$ (raies optiquement minces), $\epsilon(\lambda, r_{\rm jet}, z_{\rm jet})$ est donnée par :

$$\epsilon(\lambda, r_{\rm jet}, z_{\rm jet}) = \frac{1}{4\pi} A_{ul} n_u (E_u - E_l) \quad [\mathrm{erg\,cm^{-3}\,s^{-1}\,sr^{-1}}],$$

qui est fournie par le modèle en chaque point repéré par la coordonnée $x = z/r = \mathrm{cotan}(\theta)$ le long d'une ligne d'écoulement, θ est l'angle polaire (Figure 6.2) et λ est la longueur d'onde.

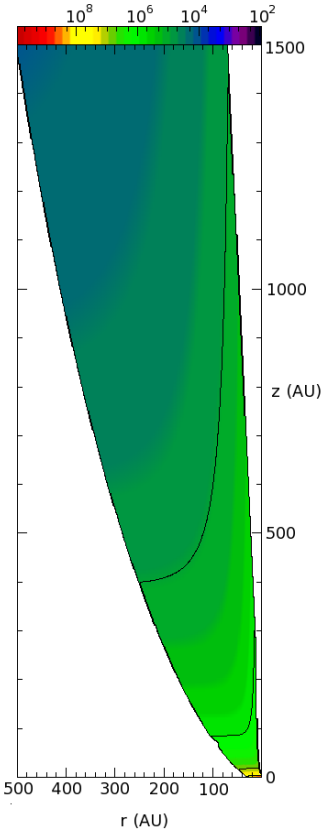


FIGURE 6.3 – *Vue en coupe poloïdale de la moitié d'un jet montrant la densité n_H en cm^{-3}, pour $\dot{M}_{acc} = 5 \times 10^{-6} M_\odot$ yr^{-1} et $M_\star = 0.1 M_\odot$. Les lignes de niveau sont séparées par un facteur 10.*

Les émissivités sont interpolées sur un maillage le plus serré possible en $x = z/r$ et r_0. On couvre ainsi une surface complète notée $\mathcal{S}_{jet}$ et représentée sur la Figure 6.2.
$\mathcal{S}_{jet}$ est délimitée à la base du jet par la ligne $h/r \simeq 0.05$ (correspondant au point magnétosonique lent), à droite par la dernière ligne d'écoulement et à gauche soit par la première ligne d'écoulement, soit par la droite $z/r = 21$ (si $z > 1000 R_{sub}$) correspondant au lieu des points de recollimation. Il est possible de faire varier la valeur de $(z/r)_{max}$ entre 0.05 et 21.
L'interpolation logarithmique entre deux lignes d'écoulement $r_0(j)$ et $r_0(j+1)$ se fait selon x en suivant l'échantillonage de la première ligne d'écoulement, et selon r_0. À x constant, entre chaque ligne d'écoulement $r_0(j)$ on interpole sur un certain nombre de points $n_r \simeq 200$, ce qui revient à créer des lignes d'écoulement supplémentaires entre deux lignes d'écoulement consécutives. La connaissance de l'émissivité de la surface $\mathcal{S}_{jet}$ permet de créer une carte 2D du jet qui est une simple coupe dans un quart du plan total du jet.
Remarque : Il est aussi possible de s'intéresser non pas uniquement à l'émissivité mais à n'importe quelle variable scalaire disponible dans les résultats du modèle. On peut par exemple établir des cartes d'abondances chimiques, de température (voir Chapitre 3) ou de densité (Figure 6.3).

I.3 CUBE DE DONNÉES

En utilisant le fait que le jet possède une symétrie de révolution, on peut faire tourner la surface $\mathcal{S}_{jet}$ (Figure 6.2) autour de l'axe de rotation du jet. Un point de coordonnées (r_{jet}, z_{jet}) dans le repère $\mathfrak{R}_{jet}$, est au centre d'un volume élémentaire dV défini comme :

$$dV = r dr dz d\phi$$

Ce volume dV contient une émet un flux d$\epsilon = \epsilon \times dV$, où ϵ est l'émissivité volumique en erg cm^{-3} s^{-1} sr^{-1}. Par rotation selon ϕ_{jet} autour de l'axe z ce volume élémentaire génère un anneau, le long duquel l'émissivité est constante. La rotation complète de la surface $\mathcal{S}_{jet}$ génère un cône correspondant au jet nord ou au jet sud.

On projette ensuite les différents anneaux ainsi définis sur le plan du ciel, passant donc au repère $\mathfrak{R}_{sky}$. On projette aussi la vitesse associée à chaque volume élémentaire sur la ligne de visée. On obtient ainsi un cube de données $(r_{sky}, z_{sky}, v_{sky})$

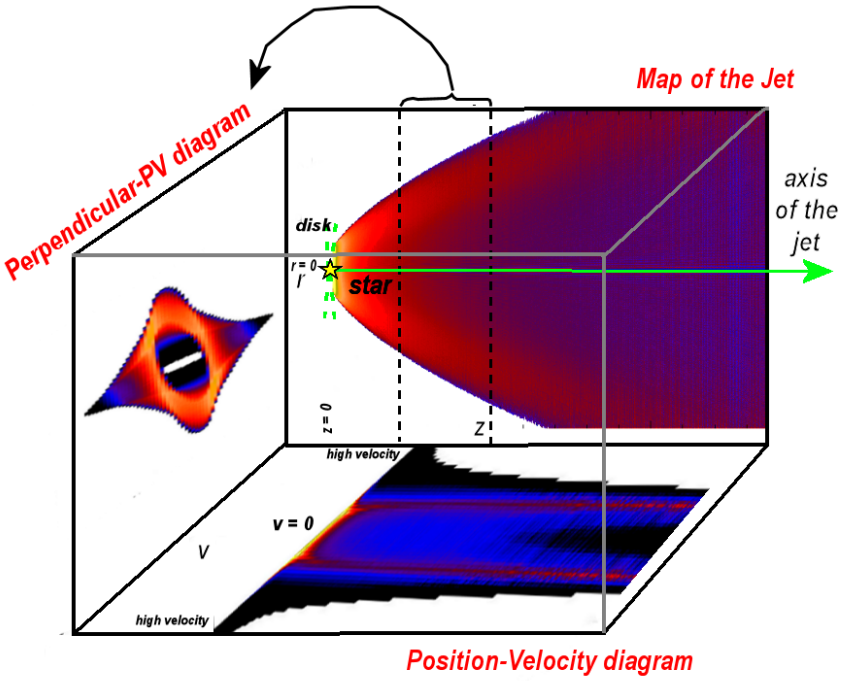


FIGURE 6.4 – *Représentation du cube de données.*

L'axe du jet est incliné d'un angle i dans le repère $\Re_{\rm sky}$. La distance à l'axe $r_{\rm jet}$ projetée sur le plan du ciel est :

$$r_{\rm sky} = r_{\rm jet}\sin(\phi_{\rm jet})$$

L'altitude $z_{\rm jet}$ le long de l'axe est projetée selon :

$$z_{\rm sky} = z_{\rm jet}\sin(i) + r_{\rm jet}\cos(i)\cos(\phi_{\rm jet})$$

où la seconde partie du membre de droite correspond à la différence induite par l'inclinaison de l'anneau d'un angle i. La vitesse d'un point du jet $\vec{v}_{\rm jet} = (v_r,\, v_z,\, v_\phi)_{\rm jet}$ se projette pour donner la vitesse radiale :

$$v_{\rm radiale} = v_{\rm sky} = -v_z\cos(i) + v_r\sin(i)\cos(\phi_{\rm jet}) - v_\phi\sin(i)\sin(\phi_{\rm jet})$$

Le cube de données représenté sur la Figure 6.4 est découpé en voxels [2] P$(r,\, z,\, v)_{\rm sky}$ de largeur δz, δr pour la projection spatiale et δv pour la vitesse radiale.

Représenter des cartes de brillance ou des diagrammes position-vitesse consiste à intégrer ou moyenner l'intensité dans des tranches de ce cube, selon $v_{\rm sky}$ pour une carte d'émissivité, selon $r_{\rm sky}$ pour un diagramme position-vitesse longitudinal et selon $z_{\rm sky}$ pour un diagramme position-vitesse perpendiculaire.

Chaque voxel situé à une position $(r_{\rm sky},\, z_{\rm sky},\, v_{\rm sky})$ du cube de donnée somme l'émissivité de tous les volumes élémentaires dV, dont la position projetée est comprise entre $[r_{\rm sky}\,;\, r_{\rm sky} + \delta r]$ et $[z_{\rm sky}\,;\, z_{\rm sky} + \delta z]$, et dont la vitesse du gaz projetée sur la ligne de visée est comprise dans l'intervalle $[{\rm v}_{\rm sky}\,;\, {\rm v}_{\rm sky} + \delta{\rm v}]$. On obtient ainsi un flux total $I(r_{\rm sky}, z_{\rm sky}, v_{\rm sky})$ en erg s^{-1} sr^{-1} dans chaque voxel.

2. Un voxel (volumic pixel) est l'analogue du pixel en 3D.

I.4 Cartes de brillance

Pour produire des cartes de brillance de surface on peut intégrer l'intensité dans le cube de données selon la vitesse radiale soit sur un intervalle restreint de vitesse entre v_1 et v_2, soit sur toutes les vitesses :

$$I^{map}(r_{sky}, z_{sky}) = \sum_{v_1}^{v_2} \frac{I(r_{sky}, z_{sky}, v_{sky})}{\delta r \times \delta z} \tag{6.1}$$

En chaque pixel $P(r_{sky}, z_{sky})$ du ciel on a donc une brillance I^{map} en unité d'énergie par seconde, par unité d'angle angle solide et par unité de surface (erg s^{-1} cm^{-2} sr^{-1}). Le ciel est découpé en 1024 pixels sur la hauteur et 512 sur la largeur, les pixels sont des carrés de largeur $\delta r = \delta z = (z_{sky,max} - z_{sky,min})/1024$ de telle sorte que l'axe ($r_{sky} = 0$) est placé au milieu. Pour les prédictions en H_2 1-0S(1) on utilise une taille de pixel de ~ 1 UA $\times$ 1 UA. La taille angulaire d'un pixel dépend elle de la distance de l'objet. La brillance ne dépend pas de la taille du pixel.

I.5 Diagrammes Position vitesse (PV)

Diagrammes PV longitudinaux

Ces diagrammes représentent la brillance observée en fonction d'une dimension spatiale sur le plan du ciel et de la vitesse radiale, au travers d'une fente correspondant à une largeur finie dans l'autre dimension spatiale sur le plan du ciel.

Pour calculer les diagrammes position vitesse longitudinaux (le long de l'axe du jet), on intègre l'intensité dans le cube de donnée sur un intervalle de r_{sky} entre r_1 et r_2 correspondant à la largeur de la fente :

$$I^{PV\parallel}(z_{sky}, v_{sky}) = \sum_{r_1}^{r_2} \frac{I(r_{sky}, z_{sky}, v_{sky})}{\delta z} \times \frac{c}{\lambda \delta v} \tag{6.2}$$

où c est la célérité de la lumière, r et z sont en UA et δv est la largeur d'un canal de vitesse (pour les raies H_2, $\delta v \sim 1$ km s^{-1}). Dans le cas de H_2 l'intensité dans un diagramme PV est exprimée en erg cm^{-1} s^{-1} sr^{-1} Å^{-1} et on divise donc le flux par $\delta\lambda = \frac{\lambda \Delta v}{c}$ exprimé en Å.

Il est aussi possible, non pas d'intégrer sur r mais aussi de moyenner, ce qui revient à diviser l'intensité par $|r_1 - r_2|$ dans l'expression (6.2). Dans ce cas on obtient l'intensité spécifique moyenne qui est exprimée en erg cm^{-2} s^{-1} sr^{-1} Å^{-1}. Le diagramme représente donc une carte de l'intensité en fonction de l'altitude projetée z_{sky} et de la vitesse radiale v_{sky}.

Diagrammes PV transverses

De la même manière que précédemment on peut obtenir des diagrammes position vitesse transverses dans la direction perpendiculaire à l'axe du jet, on intègre selon z_{sky} entre deux altitudes z_1 et z_2, pour obtenir une carte de l'intensité en fonction de la vitesse radiale et du rayon cylindrique r_{sky}. Les diagrammes position vitesse prédits pour H_2 sont montrés en page 169.

I.6 Convolution

On suppose pour toute la suite que la réponse instrumentale est une gaussienne à la fois dans la dimension spatiale et spectrale. Les prédictions synthétiques (cartes de brillance, diagramme PV) deviennent alors directement comparables aux observations en les convoluant par une gaussienne à deux dimensions. Dans tous les cas, l'écart type σ de la gaussienne G dans la dimension spatiale correspond au lobe angulaire de l'instrument multiplié par la distance à la source D : $\sigma(r_{\rm sky}) = \sigma(z_{\rm sky}) = \frac{\theta_{\rm beam}}{2.35} \times \frac{D}{\rm pc} \times {\rm UA}$, où $\theta_{\rm beam}$ est la largeur à mi-hauteur du lobe angulaire en arcsecondes ;

$$\begin{aligned}
{\rm I}^{map}_{OBS}(r_{\rm sky}, z_{\rm sky}) &= {\rm I}^{map}(r_{\rm sky}, z_{\rm sky}) \circledast G_{\sigma(r,z)}(r_{\rm sky}, z_{\rm sky}) \\
{\rm I}^{PV\parallel}_{OBS}(z_{\rm sky}, v_{\rm sky}) &= {\rm I}^{PV\parallel}(z_{\rm sky}, v_{\rm sky}) \circledast G_{\sigma(z,v)}(z_{\rm sky}, v_{\rm sky}) \\
{\rm I}^{PV\perp}_{OBS}(v_{\rm sky}, r_{\rm sky}) &= {\rm I}^{PV\perp}(v_{\rm sky}, r_{\rm sky}) \circledast G_{\sigma(v,r)}(v_{\rm sky}, r_{\rm sky})
\end{aligned}$$

I.7 Profils de raies intégrés

Les profils synthétiques intégrés sur le jet sont obtenus en intégrant les diagrammes position-vitesse selon $z_{\rm sky}$. Si ${\rm I}^{PV\parallel}(z_{\rm sky}, {\rm v}_{\rm sky})$ est en erg cm^{-1} s^{-1} sr^{-1} Å^{-1}, alors :

$$p({\rm v}_{\rm sky}) = \sum_{z_{\rm min}}^{z_{\rm cut}} {\rm I}^{PV\parallel}(z_{\rm sky}, {\rm v}_{\rm sky}) \delta z_{\rm sky} \tag{6.3}$$

où $z_{\rm cut} \leq z_{\rm max}$. Si ${\rm I}^{PV\parallel}(z_{\rm sky}, v_{\rm sky})$ a été moyenné sur $r_{\rm sky}$ et exprimé en unités d'intensité spécifique erg cm^{-2} s^{-1} sr^{-1} Å^{-1} alors on somme selon :

$$p({\rm v}_{\rm sky}) = \sum_{z_{\rm min}}^{z_{\rm cut}} {\rm I}^{PV\parallel}(z_{\rm sky}, {\rm v}_{\rm sky}) \times |r_1 - r_2| \delta z_{\rm sky} \tag{6.4}$$

Dans les deux cas l'intensité dans le profil $p({\rm v})$ est exprimée en erg s^{-1} sr^{-1} Å^{-1}.

Pour produire un profil synthétique directement comparable aux profils observés, on convolue $p(v)$ avec une fonction de transfert spectrale qui est supposée gaussienne de largeur typique $G_\sigma({\rm v}) \sim$ 30-80 km s^{-1} (Takami et al. 2004; Agra-Amboage et al. 2013) pour H_2 à 2 μm :

$$p_{\rm OBS}({\rm v}) = p({\rm v}) \circledast G_\sigma({\rm v}).$$

I.8 Luminosité intégrée

Enfin il est aussi possible d'intégrer selon v le profil d'intensité afin d'obtenir la luminosité totale du jet [3] dans la raie de longueur d'onde λ considérée :

$$L_{\rm tot}(\lambda) = \sum_{\rm v_{min}}^{\rm v_{max}} p_{\rm OBS}({\rm v}) 4\pi \left(\frac{\lambda}{\text{Å}}\right) \frac{\delta {\rm v}}{c} \times \frac{1}{2 \times 10^{33} {\rm erg\,s^{-1}}} \quad {\rm en\ L_\odot} \tag{6.5}$$

Afin de vérifier la cohérence des calculs numériques il est aussi possible de calculer l'intensité totale à partir de la carte de brillance de surface donnée par la relation (6.1) :

$$L_{\rm tot}(\lambda) = 2 \iint_{r,z} {\rm I}^{map}_{\rm OBS}(r,z) 4\pi {\rm d}r\, {\rm d}z \times \frac{1}{2 \times 10^{33} {\rm erg\,s^{-1}}} \quad {\rm en\ L_\odot}$$

3. indépendante de D.

On ne calcule que le lobe bleu du jet "au dessus" du disque d'accrétion. Si le lobe rouge du jet est visible sans extinction il faut multiplier par deux la valeur de $L_{\rm tot}(\lambda)$ et sommer les profils bleu et rouge.

En faisant le rapport entre les intensités intégrées, ou les profils de deux raies, on peut aussi prédire des rapports de raie.

II Prédictions, influence des paramètres libres

II.1 Champ de vitesse dans la solution MHD

La Figure 6.5 présente les trois composantes v_ϕ, v_r et v_z du champ de vitesse dans le jet, d'une part aux petites échelles (haut) et d'autre part aux grandes échelles (bas). La connaissance de la vitesse permet d'interpréter les diagrammes positions-vitesse produits. En effet on voit que la vitesse de rotation décroit quand r augmente, mais n'est pas très sensible en z, tout comme la vitesse verticale v_z. Inversement, la vitesse d'expansion latérale v_r varie rapidement en fonction de l'élévation car la matière subit d'abord une forte expansion à la base du jet.

II.2 Extension de la zone de lancement du vent de disque : influence de $r_0^{\rm max}$

Les raies rotationnelles et vibrationnelles de H_2 sont situées dans l'infrarouge moyen et proche à $\lambda \leq 28\mu$m (0-0S(0)). Dans ce domaine de longueur d'onde les protoétoiles de classe 0 souffrent d'une forte extinction. On s'intéresse donc principalement aux prédictions obtenues pour les modèles de classe II (avec $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ et $M_\star = 0.5{\rm M}_\odot$) et de classe I (avec $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ et $M_\star = 0.5{\rm M}_\odot$)

On s'intéresse aux transitions 0-0S(5) à 6.9 μm, 1-0S(0) à 2.2 μm et 1-0S(1) 2.12 μm. Ces deux dernières sont comparées dans la partie III aux observations à haute résolution angulaires du VLT/SINFONI.

La zone de lancement du vent de disque varie entre le rayon de sublimation $R_{\rm sub}$ et $r_0^{\rm max}$ que l'on choisit de faire varier sur une grille de valeurs : 0.8, 1.6, 3.2, 6.4, 12.8 et 25 UA. Le critère de validité de l'hypothèse du fluide unique ($v_{in} \ll v$) limite $r_0^{\rm max}$, car à mesure qu'il augmente la vitesse de dérive ion-neutres devient comparable à la vitesse du fluide.

La Figure 6.6 montre la trajectoire des lignes d'écoulements lancées depuis les différents r_0. Une ligne d'écoulement lancée à un rayon d'ancrage r_0 atteint son point terminal correspondant au point de recollimation à une altitude de $1000 \times r_0$. Le jet s'évase fortement à sa base (sur quelques centaines d'AU) avant de devenir plus collimaté. Le jet s'évase d'autant plus que $r_0^{\rm max}$ est grand. Le rayon maximum atteint au point de recollimation est $40 \times r_0$.

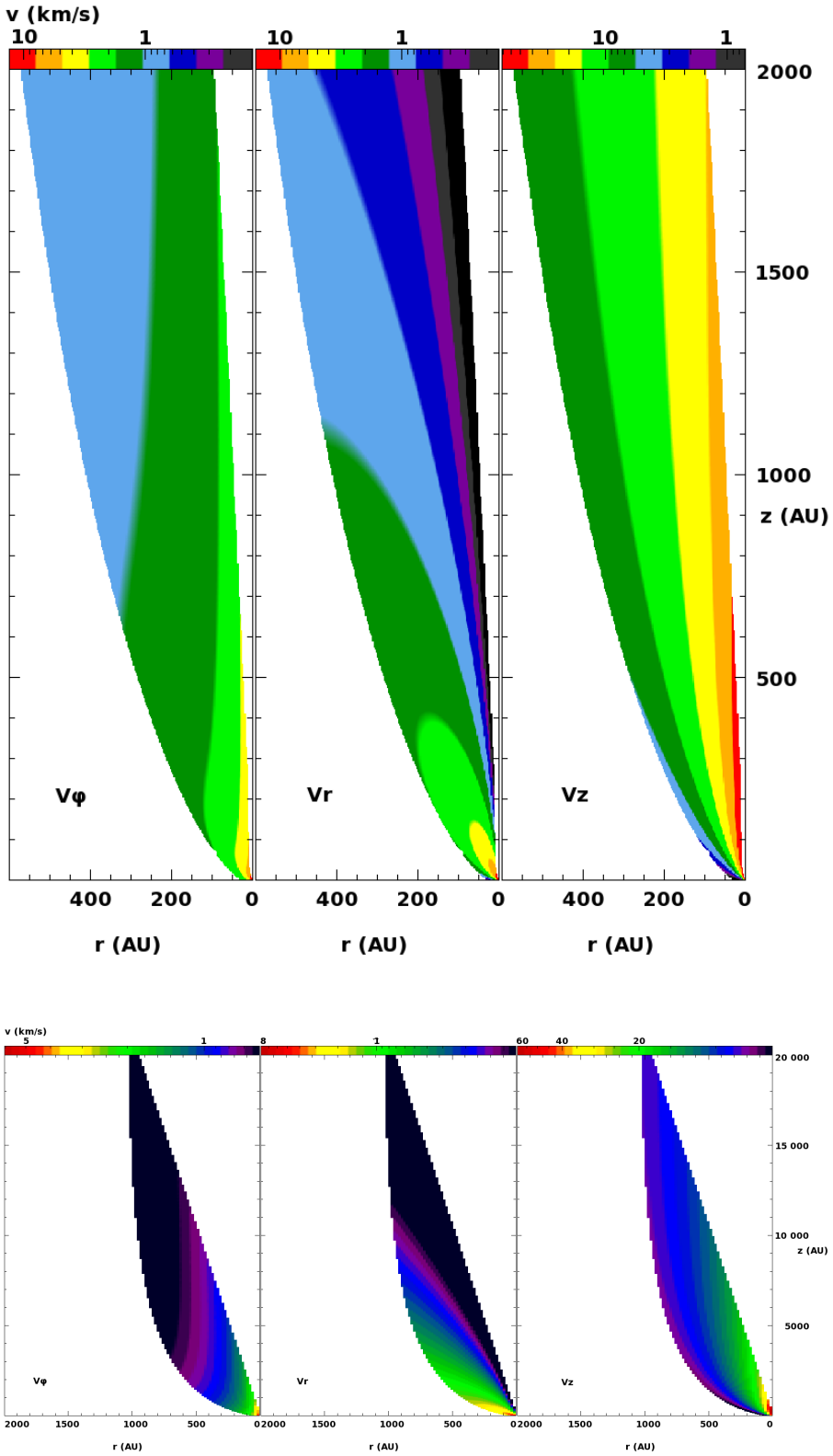


FIGURE 6.5 – *Coupe poloïdale montrant les 3 composantes du champ de vitesse dans le jet, de gauche à droite v_ϕ, v_r et v_z. Pour le modèle standard de classe 0 ($M_\star = 0.1\,\mathrm{M}_\odot$). En haut les petites échelles sont représentées ($z < 2000\,\mathrm{UA}$) et en bas les grandes échelles sont représentées avec $z < 20\,000\,\mathrm{UA}$. En bas, les proportions entre r et z ne sont pas respectées pour plus de clarté. Pour d'autres valeurs de $M_\star$ la vitesse est mutipliée par $\sqrt{M_\star / 0.1\,\mathrm{M}_\odot}$.*

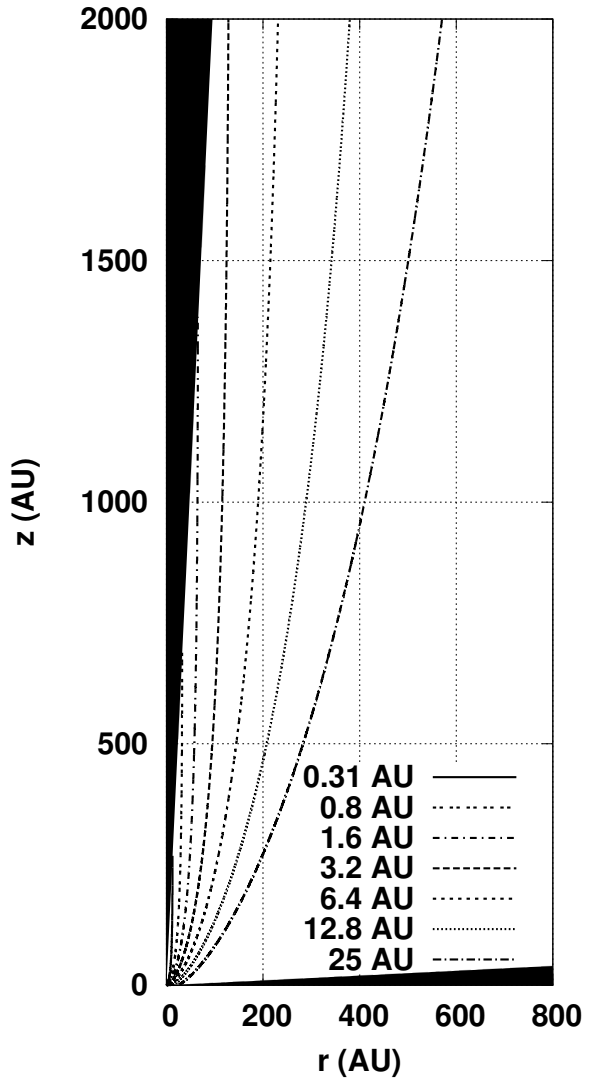


FIGURE 6.6 – *Représentation dans le plan (zr) des lignes d'écoulement lancées depuis r_0 = 0.31, 0.8, 1.6, 3.2, 6.4, 12.8 et 25* UA. *On rappelle que l'abondance de* H_2 *devient* $\sim$ 0.5 *pour* $r_0 > 3$ UA *dans la classe II et pour* $r_0 > 2$ UA *pour la classe I avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ *et* $r_0 > 3$ UA *pour la classe I avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$.

La Figure 6.7 montre une carte 2D la distribution d'émissivité locale dans le jet pour le modèle de classe II dans les trois raies de H_2 0-0S(5), 1-0S(0) et 1-0S(1) représentées avec la même échelle d'émissivité. Les régions de haute altitude ne semblent pas contribuer de manière significative au flux émis par le jet. H_2 est excité et émet de manière notable là où la température et la densité sont les plus élevées. Le flux de la raie 0-0S(5) ($E_u \simeq 4590$ K) provient de régions plus larges et étendue en z que celui dans les raies 1-0S(0) ($E_u \simeq 6470$ K) et 1-0S(1) ($E_u \simeq 6950$ K) plus concentrés le long de l'axe du jet. Pour ces dernières les lignes d'écoulement ajoutées après $r_0 = 12.8$ UA n'apportent plus de contribution notable.

La Figure 6.8 montre de la même manière la distribution d'émissivité dans un jet de classe I pour les trois raies 0-0S(5), 1-0S(0) et 1-0S(1). L'émissivité se répartit de manière similaire au cas de la classe II, avec quelques nuances : les transitions sont plus brillantes dans les régions les plus internes du jet et la région émettrice est légèrement moins étendue car le gaz est plus froid que dans la classe II.

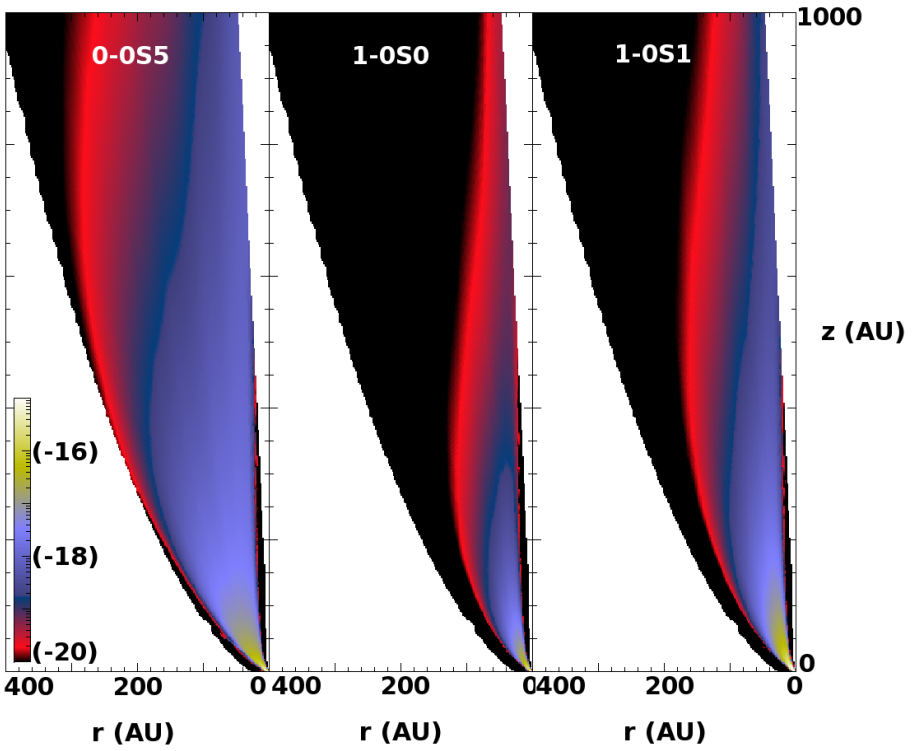


FIGURE 6.7 – *Carte 2D de la distribution de l'émissivité* $\times 4\pi$ *de trois raies de* H_2 *dans le modèle de classe II (*$\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$*) l'échelle de couleur représente l'émissivité en log en* erg cm^{-3} s^{-1}. r_0 *varie de* $R_{\rm sub} = 0.15$ UA *à* $r_0^{\rm max} = 25$ UA. *On voit la zone en noir, à* $z < 500$ UA *près de l'axe où* H_2 *est photodissocié (*$r_0 \lesssim 2$ UA*).*

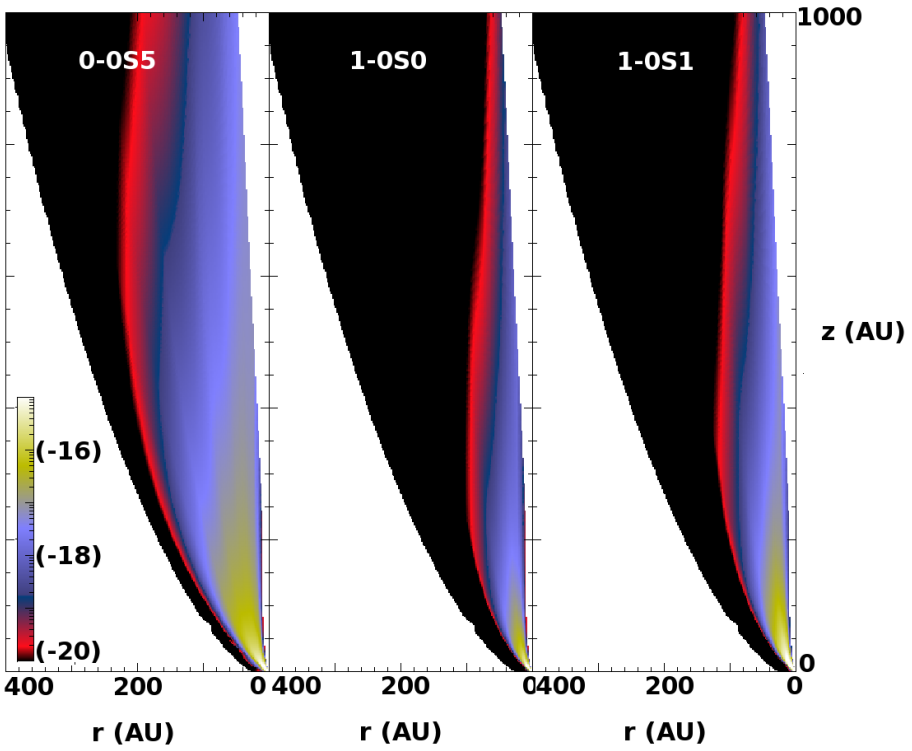


FIGURE 6.8 – *Carte 2D de la distribution de l'émissivité* $\times 4\pi$ *de trois raies de* H_2 *dans le modèle de classe I (*$\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$*) l'échelle de couleur représente l'émissivité en log en* erg cm^{-3} s^{-1}. r_0 *varie de* $R_{\rm sub} = 0.64$ UA *à* $r_0^{\rm max} = 25$ UA.

TABLE 6.1 – *Position (en* km s^{-1}*) des centroïdes des profils convolué (Fig. 6.9).*

i	r_0				
(°)	25 UA	12.8 UA	6.4 UA	3.2 UA	1.6 UA
10	-24.0	-24.8	-25.3	-31.7	-55.2
30	-22.5	-23.0	-26.3	-33.4	-54.6
60	-14.9	-16.0	-19.2	-16.9	-37.4
80	-8.3	-9.0	-11.6	-14.9	-17.8

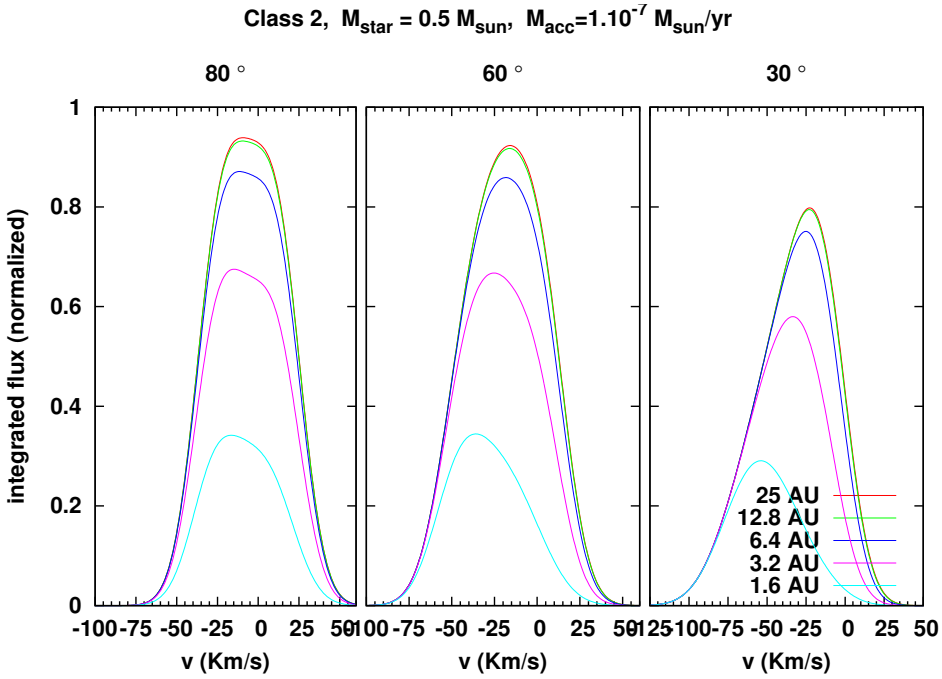


FIGURE 6.9 – *Profils du jet bleu intégrés et convolués par une gaussienne de FWHM 30* km s^{-1} *obtenus dans la raie 1-0S(1) à 2.12 µm pour différentes valeurs de* $r_0^{\max}$ *de 1.6 à 25* UA *et pour 3 angles* $i = 30°$, $60°$ *et* $80°$. *Les flux sont normalisés.*

La Figure 6.9 montre les profils intégrés obtenus dans la raie 1-0S1 de H_2 pour un modèle de classe II pour le jet décalé vers le bleu. Les positions des centroïdes en km s^{-1} ont été reportées dans la Table 6.1 pour les différentes valeurs des paramètres i et $r_0^{\max}$. Les vitesses maximales sont obtenues pour $i = 30°$ et pour les plus petites valeurs de $r_0^{\max}$. Les lignes d'écoulement lancées après $r_0 \geq 12.8$ UA n'apportent plus de contribution. Les parties internes du jet (r_0 faible) contribuent surtout au flux à haute vitesse et les parties externes contribuent surtout à basse vitesse. Les deux pics à haute et basse vitesse se rapprochent de v $= 0$ km s^{-1} quand $r_0^{\max}$ augmente.

II.3 ANGLE D'INCLINAISON : INFLUENCE DE i

Carte de brillance

La Figure 6.10 montre la carte de brillance dans les raies 0-0S(5) et 1-0S(1) de H_2 pour un jet de classe II ($\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}$ M$_\odot$ yr^{-1}) avec $r_0^{\max} = 25$ UA. La transition 0-0S(5) est issue du niveau $v = 0, J = 7$ d'énergie ~4600 K, elle est visible sur des régions plus

vaste que les raies issues de niveaux plus excités comme la 1-0S(0) ou la 1-0S(1). Cette carte de brillance n'est pas convoluée. Les irisations sont d'origine numérique (effets de discrétisation).

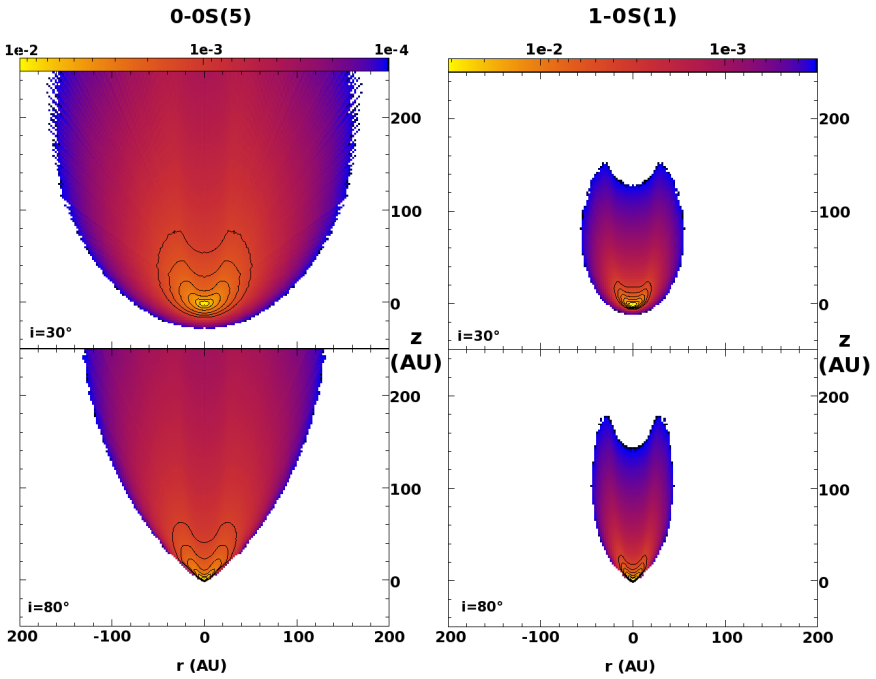


FIGURE 6.10 – *Carte de brillance dans la raie 0-0S(5) à gauche et dans la raie 1-0S(1) à droite pour le modèle de classe II, avec* $r_0 = 25\,\mathrm{UA}$ *et pour deux inclinaisons i différentes* 80° *et* 30°. *Les contours sont séparés par un facteur* $\sqrt{2}$ *à partir du maximum qui est* $1.2 \times 10^{-2}\mathrm{erg\,cm^{-3}\,s^{-1}\,sr^{-1}}$ *pour la raie 0-0S(5) et* $\sim 3.7 \times 10^{-2}\mathrm{erg\,cm^{-3}\,s^{-1}\,sr^{-1}}$.

Comme le cône délimité par la première ligne d'écoulement lancée à R_{sub} (puis par la surface de recollimation pour $z > 300\,\mathrm{UA}$) est vide de matière dans ce modèle et comme H_2 est détruit sur les premières lignes d'écoulement, la répartition de la brillance adopte une forme de bol symétrique de part et d'autre de l'axe $r = 0$ sur la Figure 6.10. Les bords du cône forment deux axes dont l'ouverture angulaire apparente augmente quand i diminue. Cette forme en U (sur une échelle spatiale de $z \sim 50\,\mathrm{UA}$) est présente sur les observations en H_2 de DG Tau (Agra-Amboage et al. 2011) en section III (page 171).

Diagramme PV longitudinal

La Figure 6.11 montre un diagramme position vitesse le long du jet pour deux transitions de H_2 avec deux inclinaisons différentes et pour le lobe du jet décalé vers le bleu uniquement. Ce diagramme est obtenu en intégrant le flux sur toute la largeur du jet. La partie basse est plutôt dominée par un mouvement d'expansion radiale et d'éjection verticale alors que la partie haute est plutôt dominée par un seul mouvement vertical. Sur les diagrammes à 80° les zones noires tracent les régions où H_2 est photodissocié.

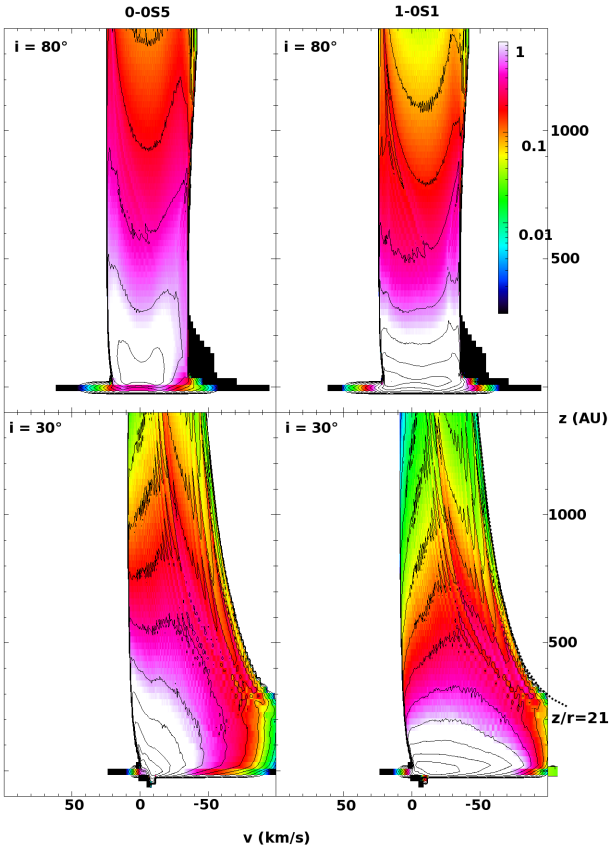


FIGURE 6.11 – *Diagramme position-vitesse longitudinal pour les raies 0-0S(5) (gauche) et 1-0S(1) (droite) et pour* $i = 30°$ *(bas) et* $i = 80°$ *(haut), pour le modèle de classe II, avec* $r_0 = 25\,\mathrm{UA}$. *Les contours sont séparés par un facteur 2 à partir du maximum. L'échelle de couleur est normalisée.*

Diagramme PV transverse

La Figure 6.12 montre la modification avec l'inclinaison du diagramme position-vitesse transverse intégré entre $z = 20$ et $z = 50\,\mathrm{UA}$ et pour les transitions 0-0S(5) et 1-0S(1). À $i = 80°$ la vitesse projetée est dominée par la rotation et l'expansion latérale. La composante d'expansion dans le diagramme PV forme des ellipses centrées sur l'axe du jet ($r = 0, \mathrm{v} = 0$). Chaque couche d'altitude z successive ajoute une ellipse supplémentaire. Les petits r_0 ajoutent des ellipses peu larges en r et allant jusqu'à des vitesses plus grandes en valeur absolue (ellipses horizontales), les grand r_0 ajoutent des ellipses plus élargies en r car le jet s'évase avec r_0, elles sont aussi moins larges en vitesses car la vitesse radiale tend à diminuer.

La contribution de la vitesse de rotation ajoute une inclinaison aux ellipses de la répartition de la brillance : les pointes correspondant aux valeurs extrêmes du rayon ne sont pas tout à fait alignées sur le même axe en vitesse. La figure ainsi formée est limitée par les courbes $\mathrm{v}(r)$ limites correspondant à la vitesse keplérienne (courbe en noir sur le diagramme en haut à gauche sur la Figure 6.12).

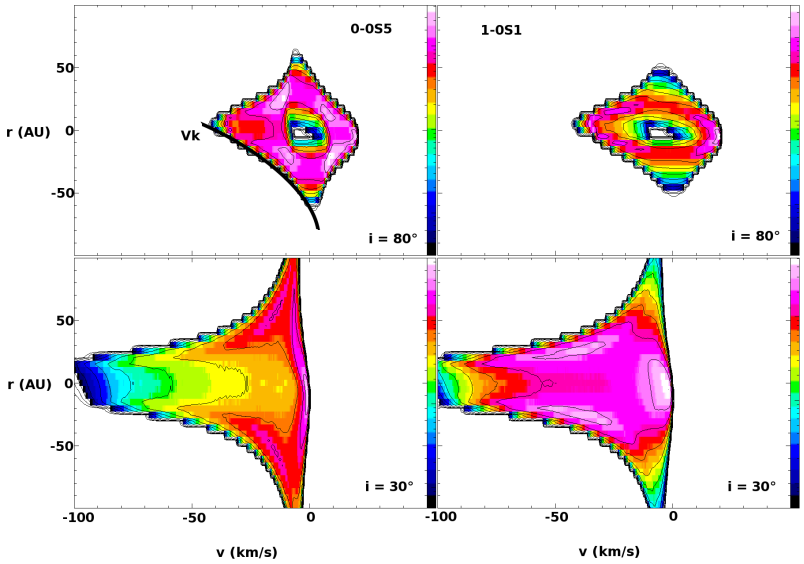


FIGURE 6.12 – *Effet de l'angle sur les diagrammes PV transverses pour la raie 0-0S(5) à gauche, et la raie 1-0S(1) à droite. En haut pour* $i = 80°$*, et bas pour* $i = 30°$*. La coupe transverse est faite entre* $z = 20\,\mathrm{UA}$ *et* $z = 50\,\mathrm{UA}$*. L'échelle de couleur est normalisée et indiquée dans chaque diagramme PV.*

À $i = 30°$ les ellipses sont plus étirées vers les vitesses négatives (on regarde le lobe décalé vers le bleu du jet) qu'à $i = 80°$ car la vitesse devient dominée par sa composante verticale dont la projection sur la ligne de visée augmente (les ellipses horizontales sont étirées de $\mathrm{v} \leq -40\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ à $i = 80°$ vers $\mathrm{v} \simeq -100\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ à $i = 30°$). Cela décale le diagramme vers les vitesses négatives. Le diagramme est aussi plus étiré en r par projection géométrique : à un même z_{sky}, le rayon du jet est plus large à $i = 30°$ qu'à $i = 80°$, car il correspond à un z_{jet} plus grand.

L'angle d'inclinaison influe surtout sur la forme, à la fois des cartes et des diagrammes position-vitesse, mais pas sur l'intensité ou le flux total. Les fortes inclinaison du jet ($i = 30°$) allongent la brillance sur les diagrammes position-vitesse transverses vers des vitesses plus élevées par effet de projection de la vitesse verticale sur la ligne de visée, par contre l'inclinaison des ellipses due à la rotation est moins visible.

II.4 Effet du taux d'accrétion et de la masse de l'étoile

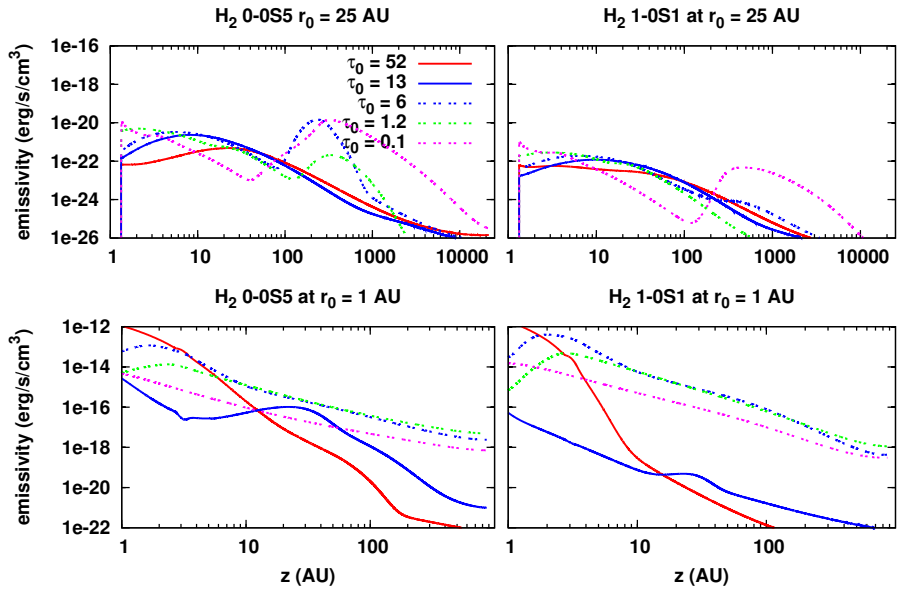


Figure 6.13 – *Emissivité dans la raie 0-0S(5) à 6.9 µm à gauche et dans la raie 1-0S(1) à 2.12 µm, le long de la ligne d'écoulement ancrée à* $r_0 = 1$ UA *en bas et le long de celle ancrée à 25* UA *en haut pour les 5 modèles de classe II, I et 0 repérés par leur valeur de* τ_0.

Nom	Classe	τ_0	$\dot{M}_{\rm acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})	$L_{\rm tot}(1-0S(1))$ ($L_\odot$)
Classe II	II	0.12	10^{-7}	4.1×10^{-5}
Classe I a)	I	1.2	10^{-6}	1.4×10^{-4}
Classe I b)	I	6	5×10^{-6}	3.5×10^{-4}
Classe 0 a)	0	13	5×10^{-6}	1.0×10^{-5}
Classe 0 b)	0	52	2×10^{-5}	7.7×10^{-5}

La Figure 6.13 présente la variation de l'émissivité dans deux raies de H_2 à 6.9 (0-0S(5)) et à 2.1 μm (1-0S(1)). Cette émissivité est donnée le long d'une ligne d'écoulement interne ($r_0 = 1$ UA) et une externe ($r_0 = 25$ UA). Les modèles sur la figure sont nommés selon leur valeur du paramètre τ_0 (proportionnel à $\dot{M}_{\rm acc} M_\star^{-0.5}$, cf Chapitre 3) indiqué dans la table ci-dessus.

Les émissivités dans les classes I et II présentent un comportement proche, différent des classes 0. La masse de l'étoile influence d'avantage l'évolution de l'émissivité le long des lignes d'écoulement que le taux d'accrétion. Pour les classes 0, l'émissivité tend à décroître plus fortement quand z augmente, notamment dans les régions internes ($r_0 = 1$ UA) que dans le cas des classes I et II. À $r_0 = 1$ UA pour la raie 1-0S(1) l'émissivité des classes 0 devient inférieure à celle des classes I d'un facteur 10^4 et à celle de la classe II d'un facteur $\sim 10^3$. Ce sont les zones du jet situées à des altitudes relativement faibles ($z < 1000$ UA) qui contribuent le plus au flux dans le jet, car les densités sont trop faibles au delà pour peupler les niveaux (Fig. 6.7).

III Comparaison avec le jet moléculaire de DG Tau

III.1 Présentation

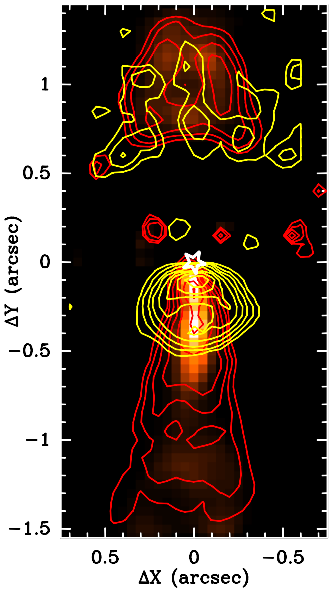


Figure 6.14 – *Jet atomique de DG Tau observé par Agra-Amboage et al. (2011) dans la raie [Fe II] à 1.64 µm : composante à haute vitesse (-200* km s^{-1}*) en couleur et à moyenne vitesse (-100* km s^{-1}*) en contours rouge. Le jet observé dans la raie 1-0S(1) de* H_2 *à 2.12 µm (à basse vitesse* $\lesssim -20$ km s^{-1}*) est en contours jaunes. Le lobe bleu du jet est vers le bas*

DG Tau est une étoile jeune de Classe II de type T Tauri, située à 140 pc. C'est l'une des étoiles T Tauri les plus actives connues, présentant un puissant jet atomique similaire aux jets de Classe I (Eislöffel & Mundt 1998; Davis et al. 2003). L'enveloppe autour de DG Tau n'est pas aussi optiquement épaisse que celle des Classe I typique ($A_V = 2.2$ Muzerolle et al. 1998), ce qui fait de cet objet un candidat idéal pour l'étude des jets dans les régions proches de l'étoile (Solf & Boehm 1993; Kepner et al. 1993; Lavalley et al. 1997; Bacciotti et al. 2000, 2002; Pyo et al. 2003). En particulier Bacciotti et al. (2000) et Lavalley-Fouquet et al. (2000) ont révélé à partir d'observations dans les raies optiques de [O I] (Dougados et al. 2000), [S II] et [N II] la présence d'une structure cinématique en couches imbriquées : la partie interne du jet à grande vitesse est enveloppée par un jet à plus faible vitesse qui est moins collimaté et plus large, et cette structure se répète continuement sur des largeurs de plus en plus grande et des vitesses plus faibles. La même chose est observée par (Agra-Amboage et al. 2013) avec VLT/SINFONI dans la raie de [Fe II], 1.64 μm et montré sur la Figure 6.14.

Le lobe bleu du jet atomique est entouré d'un vent moléculaire chaud à 2000 K plus évasé détecté en H_2 ro-vibrationnel (Takami et al. 2004; Beck et al. 2008; Agra-Amboage et al. 2013), et représenté en contours jaunes sur la Figure 6.14. Cette partie moléculaire, d'une taille de ~ 60 UA, apparaît comme une extension de la structure en couches imbriquées détectées dans le jet atomique. Les profils de raie observés par Takami et al. (2004) présentent un pic à $v \simeq -15$ km s^{-1} à plus faible vitesse que les raies atomiques (-200 à -30 km s^{-1}).

Les vitesses observées et les extensions spatiales suggèrent que l'émission en H_2 et dans les raies interdites provient de deux composantes d'un même vent : un jet rapide et partiellement ionisé près de l'axe et une contrepartie moléculaire plus lente l'entourant (Takami et al. 2004). Une telle géométrie serait compatible avec un vent de disque magnétocentrifuge éjecté jusqu'à des $r_0 > 1$ UA.

Le chauffage du gaz peut être provoqué par des chocs ou par diffusion ambipolaire. Nous testerons ici l'hypothèse du chauffage par diffusion ambipolaire en comparant les résultats de nos modèles aux observations de Takami et al. (2004) avec une résolution spectrale de ~ 30 km s^{-1} et aux observations à plus haute résolution angulaire de

Agra-Amboage et al. (2013) réalisée avec VTL/SINFONI, mais à plus basse résolution spectrale.

III.2 Diagrammes position-vitesse

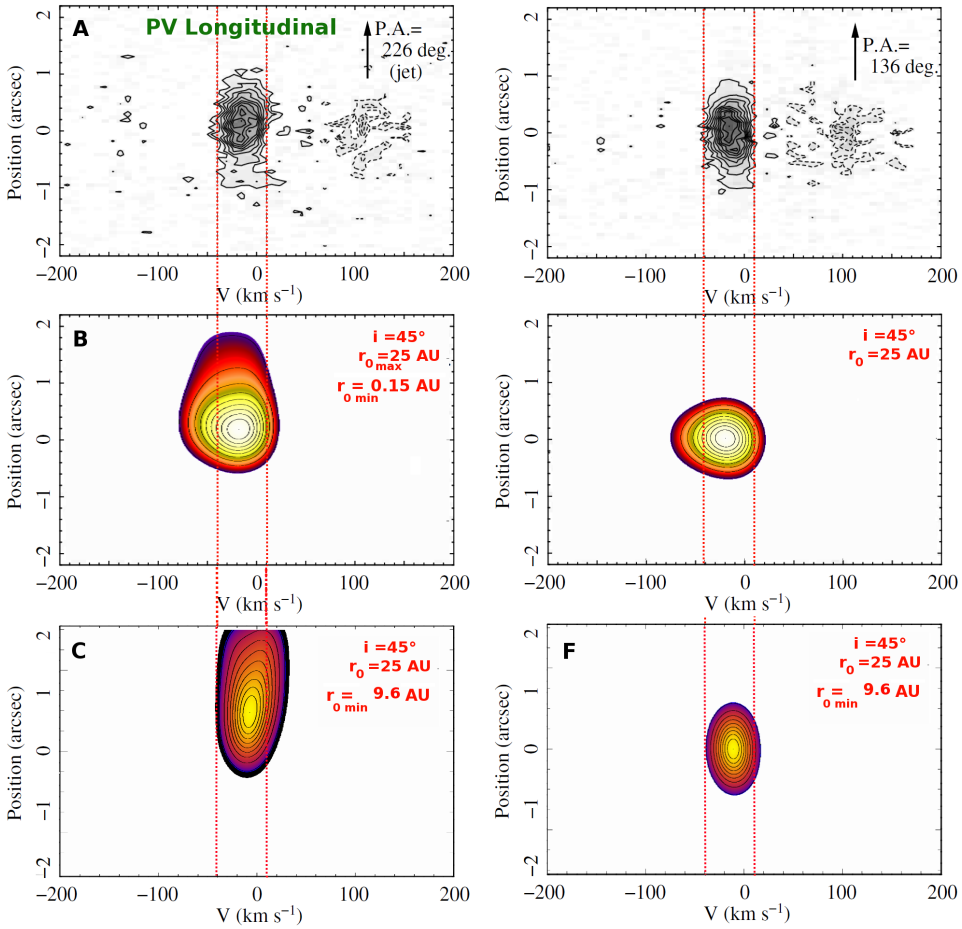


Figure 6.15 – ***À gauche :*** *Comparaison entre les diagrammes position vitesse longitudinaux entre* $r_1 = -0.15''$ *et* $r_2 = +0.15''$ *dans la raie 1-0S(1) de* H_2 *pour DG Tau, (**A**) observé par Takami et al. (2004) (**B**) modèle de classe II avec* $r_0^{\rm min} = R_{\rm sub} = 0.15$ UA, *(**C**) modèle de classe II avec* $r_0^{\rm min} = R_{\rm sub} = 9.6$ UA. ***À droite :*** *Diagramme PV transverse entre* $z_1 = -0.15''$ *et* $z_2 = 0.15''$ *(**D**) observé par Takami et al. (2004), (**E**) modèle de classe II avec* $r_0^{\rm min} = R_{\rm sub} = 0.15$ UA, *(**F**) modèle de classe II avec* $r_0^{\rm min} = R_{\rm sub} = 9.6$ UA. *Les contours sont séparés par un facteur 10%. Les prédictions sont à la même échelle et à la même résolution que les observations.*

La Figure 6.15 présente la comparaison entre les diagrammes position vitesse longitudinaux et transverses observés par (Takami et al. 2004) pour DG Tau et ceux prédits pour un modèle de classe II avec $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25$ UA et $i = 45°$ (Pyo et al. 2003). Nous considérons deux rayons internes pour le vent de disque poussiéreux : $r_0^{\rm min} = R_{\rm sub} = 0.15$ UA dans un cas et 9.6 UA. Dans le second cas les brillances sont plus faibles (facteur $\simeq 10^3$) car ce sont les lignes d'écoulement internes qui contribuaient le plus au flux émis. Les PV synthétiques sont convolués à la même résolution que les observations : par une gaussienne de largeur à mi hauteur $\theta_{\rm beam} = 0.75''$ selon z et $\Delta{\rm v} = 30\,{\rm km\,s}^{-1}$. Les extensions en z (pour le diagramme PV longitudinal) et en r (pour

le PV transverse) sont comparables entre les observations et le modèle. Les centroïdes des deux diagrammes PV, dans le modèle et les observations, sont aussi situées à des vitesses similaires $-20\,\mathrm{km\ s^{-1}}$ à $\sim -15\,\mathrm{km\ s^{-1}}$. Par contre le modèle avec $r_0^{\mathrm{min}} = R_{\mathrm{sub}}$ tend à produire un excès de flux à $\mathrm{v} < -40\mathrm{km\ s^{-1}}$ alors que cet excès n'est pas présent dans le cas où $r_0^{\mathrm{min}} = 9.6\,\mathrm{UA}$ pour lequel les lignes d'écoulement internes (les plus rapides) sont absentes.

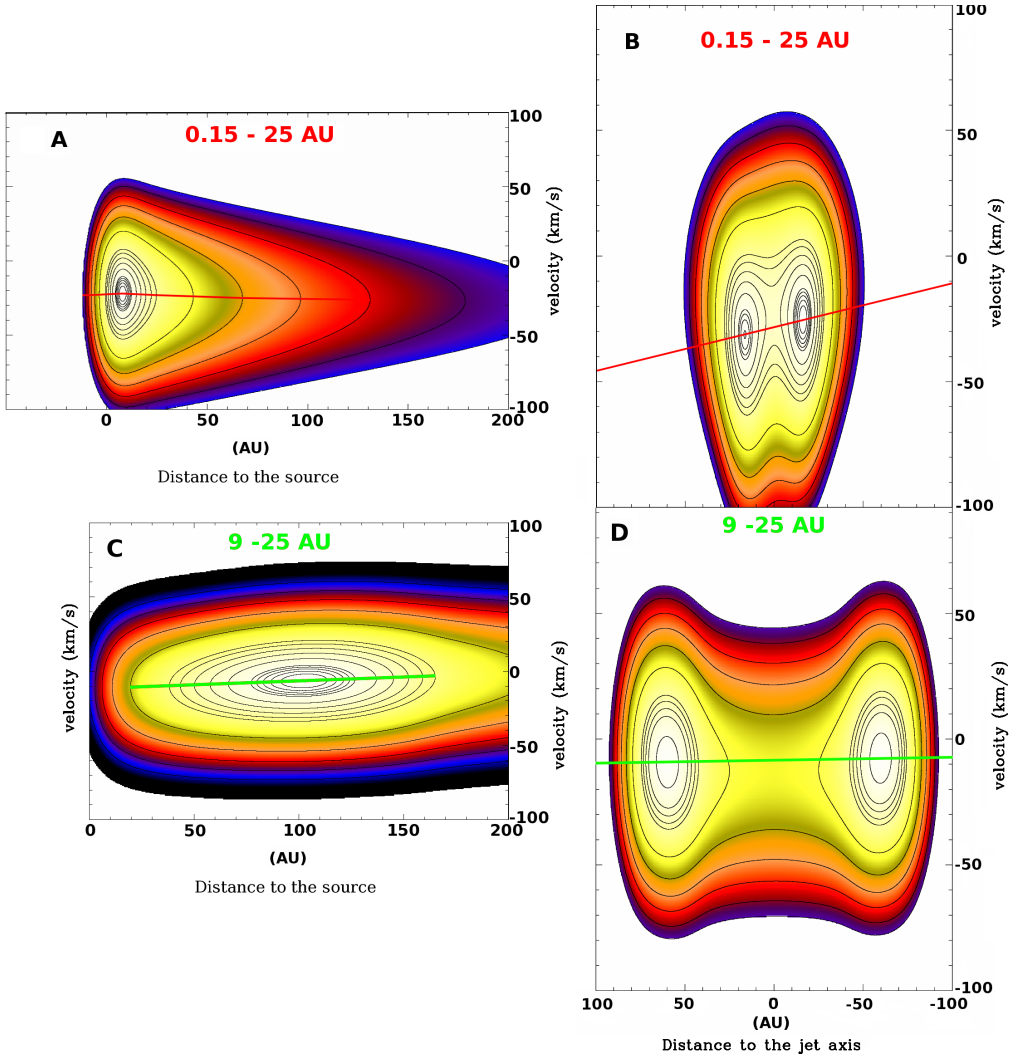


FIGURE 6.16 – *Diagrammes position-vitesse prédits pour les mêmes modèles que dans la Figure 6.15 mais à la résolution de SINFONI ($\theta = 0.12''$ et $\Delta\mathrm{v} = 75\,\mathrm{km\ s^{-1}}$). **À gauche (A et C)** PV longitudinaux sommés en entre $z = 0.15''$ et $0.45''$ **à droite (B et D)** PV transverses sommés entre $r = \pm 1''$. Les diagrammes ont été convolués avec un lobe spatial $\theta = 0.12''$ et une résolution angulaire de 75 $\mathrm{km\ s^{-1}}$ (VLT/SINFONI). Les diagrammes **en haut (A et B)** on été calculés avec $r_0^{\mathrm{min}} = R_{\mathrm{sub}} = 0.15\,\mathrm{UA}$ et les diagrammes **en bas (C et D)** on été calculés avec $r_0^{\mathrm{min}} = 9.6\,\mathrm{UA}$. Il y a un facteur ~ 900 entre les pics des cas B et A, et un facteur ~ 2500 entre le pic des cas D et C.*

Dans la Figure 6.16, on montre les diagrammes position-vitesse transverse et longitudinaux à plus haute résolution spatiale ($0.12''$) et avec une résolution spectrale de $75\,\mathrm{km\ s^{-1}}$ pour les comparer aux observations VLT/SINFONI de Agra-Amboage et al. (2013). Ces diagrammes PV sont à nouveau montrés dans le cas où $r_0^{\mathrm{min}} = R_{\mathrm{sub}} = 0.15\,\mathrm{UA}$ et dans le cas où les lignes d'écoulement internes sont absentes ($r_0^{\mathrm{min}} = 9.6\,\mathrm{UA}$). Cette fois la résolution angulaire est suffisante pour relever une signature de rotation dans le PV

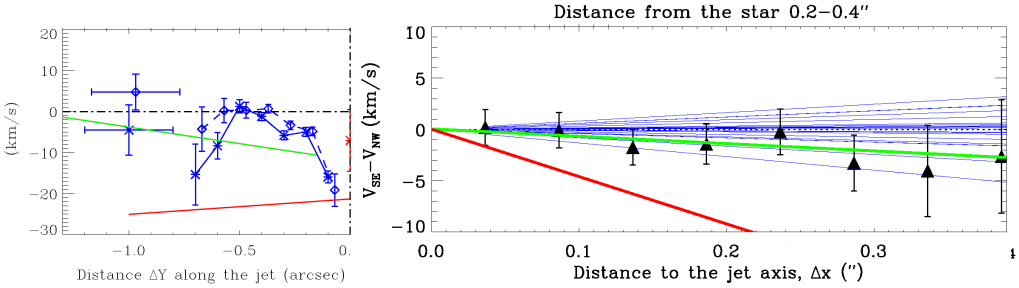


FIGURE 6.17 – ***À gauche :*** *Vitesse du centroïde de* H_2 *en fonction de la distance à la source, et* ***à droite*** Δv *entre les deux côtés du jet en fonction de la distance à l'axe observés par Agra-Amboage et al. (2013) (triangles noir et courbes bleues) et les prédictions des PV de la Figure 6.16 sont représentés par des lignes en vert (pour* $r_0^{\min} = 9\,\mathrm{UA}$*) et en rouge (pour* $r_0^{\min} = 0.15\,\mathrm{UA}$*).*

transverse sous la forme d'une différence de vitesse entre les deux côtés du jet. Les centroïdes des vitesses en fonction de la distance à la source prédites par les diagrammes PV longitudinaux et la différence de vitesse Δv entre les deux côtés du jet, prédite par les diagrammes PV transverses, sont reportés par des traits (rouge pour $r_0^{\min} = R_{\mathrm{sub}}$ et vert pour $r_0^{\min} = 9.6\,\mathrm{UA}$) sur les observations dans la Figure 6.17.

Cette fois, le modèle avec $r_0^{\min} = R_{\mathrm{sub}}$ prédit des vitesses et un Δv clairement trop importants ($v \simeq -20\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ et $\Delta v(0.4'') \simeq 9\,\mathrm{km\,s^{-1}}$) par rapport aux observations, alors que le modèle avec $r_0^{\min} = 9.6\,\mathrm{UA}$ semble beaucoup mieux ajuster les vitesses et Δv observés.

III.3 Cartes de brillance

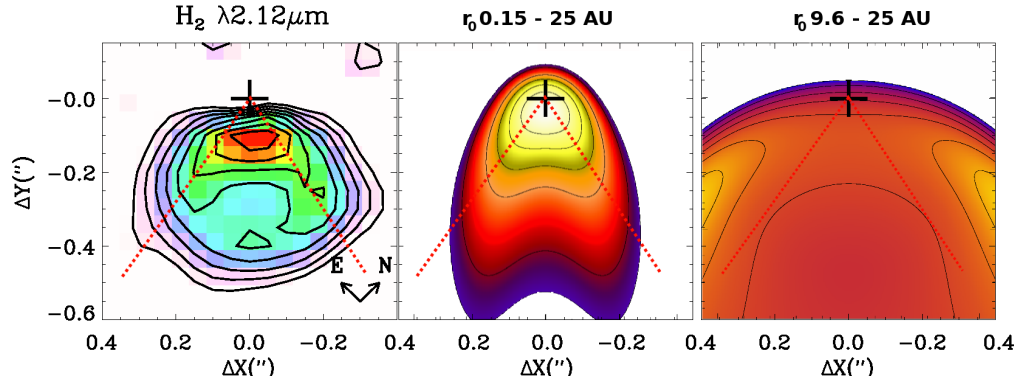


FIGURE 6.18 – ***À gauche*** *image déconvoluée de (Agra-Amboage et al. 2013) du jet de DG Tau dans la raie 1-0S(1) avec VLT/SINFONI (FWHM de la PSF de 0.12″).* ***Au centre*** *carte synthétique dans la même raie pour le modèle de classe II avec* $r_0^{\min} = R_{\mathrm{sub}} = 0.15\,\mathrm{UA}$*.* ***À droite*** *carte pour le modèle de classe II avec* $r_0^{\min} = 9.6\,\mathrm{UA}$*. Les contours sont séparés par un facteur* $\sqrt{2}$*. Les prédictions sont à la même échelle et résolution (0.12″) que les observations.*

La Figure 6.18 montre la comparaison entre la carte d'émissivité intégrée sur toutes les vitesses observée par Agra-Amboage et al. (2013) dans la raie 1-0S(1) de H_2, avec une résolution spatiale effective de 0.12″ et la carte prédite à partir d'un modèle de classe II avec $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 10^{-7}\,\mathrm{M_\odot\,yr^{-1}}$, $r_0^{\max} = 25\,\mathrm{UA}$ et $i = 45°$.

La carte prédite pour $r_0^{min} = R_{\mathrm{sub}}$ (au centre sur la Figure 6.18) a une morphologie

similaire avec une largeur et une hauteur de ~ 40 UA. On retrouve sur les observations et le modèle un arc cônique matérialisé par les pointillés rouges. La forme en arc du modèle est due au fait que H_2 soit photodissocié près de l'axe.

La carte prédite avec $r_0^{\rm min} = 9.6$ UA est beaucoup plus large que pour $r_0^{min} = R_{\rm sub}$. Les régions internes du jet ayant été éliminées, l'émission provient principalement des lignes d'écoulement lancées aux alentours de 10 UA, ce qui produit la carte montrée sur la Figure 6.18, qui n'est pas du tout en accord avec les observations, contrairement à ce que l'on obtient avec la comparaison des vitesses (section III.2).

On note que les cartes de brillances obtenues pour une classe I avec $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$ ne reproduisent pas l'arc cônique matérialisé par les pointillés rouges dans la Figure 6.18 : H_2 possède alors une émissivité trop importante sur les lignes d'écoulement internes (H_2 est moins photodissocié que dans le modèle de classe II), ce qui ne reproduit plus le creux central dans l'image.

III.4 Flux et rapport de raies

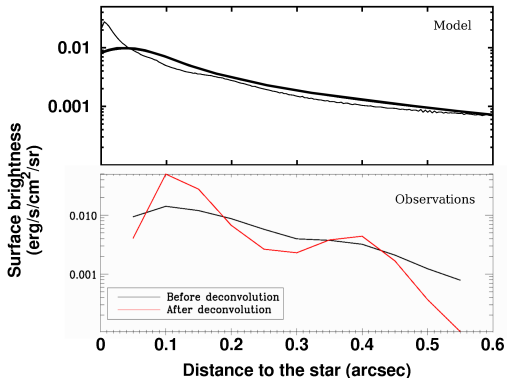


Figure 6.19 – *Coupe dans la carte de brillance à $\Delta x = 0$,* ***en haut*** *brillance le long de z pour la carte convoluée (en trait gras) et non convoluée (en trait fin) et observations par Agra-Amboage et al. (2013)* ***en bas*** *avant et après déconvolution par le lobe instrumental. Le profil prédit est dominé par une décroissance de la brillance en $1/z^2$.*

On compare sur la Figure 6.19 la brillance mesurée le long de l'axe du jet, à $\Delta x = 0''$ pour les observations de Agra-Amboage et al. (2013) et pour les prédictions avec $r_0^{\rm min} = R_{\rm sub}$. Les valeurs des brillances mesurées au pic sont comparables, les courbes prédites et observées suivent une même tendance, si on tient compte du fait que le modèle ne reproduit pas le 'noeud' sur les observations situé à $\Delta x = 0''$ et $\Delta y = -0.4''$ (visible sur la carte de brillance Fig. 6.18). Le rapport de raies au pic 1-0S(0) / 1-0S(1) prédit pour le modèle avec $r_0^{\rm min} = 0.15$ UA est 0.19, en bon accord à nouveau avec le rapport observé de 0.20±0.03 (Takami et al. 2004). Ce rapport ne dépend pas de l'inclinaison (raies optiquement minces). Pour $r_0^{\rm min} = 9.6$ UA, le flux au pic vaut 2×10^{-5} erg cm^{-2} s^{-1} sr^{-1}, 500 fois moins que ce qui est observé, et le rapport de 0.08 ne correspond pas aux observations.

IV Conclusion

On dispose maintenant d'un outil puissant permettant de directement comparer les prédictions du modèle de vent de disque aux observations à haute résolution angulaire en H_2 réalisées au VLT avec l'instrument SINFONI. On a comparé le jet moléculaire de

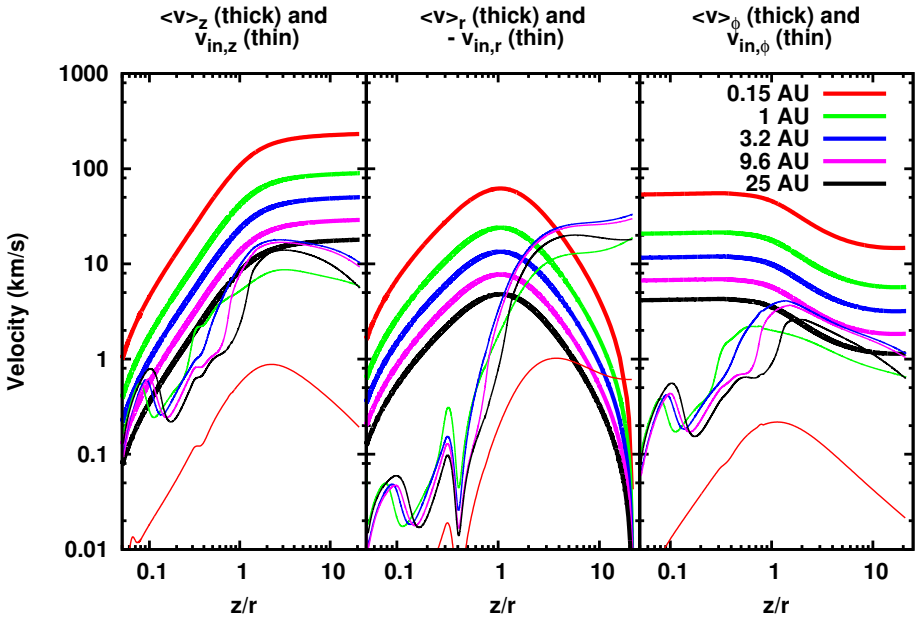


FIGURE 6.20 – *Composantes z, r, ϕ de la vitesse barycentrique de la solution MHD $< \vec{v} >$ (en trait épais) et de la vitesse de dérive ion neutre $\vec{v}_{in}$ (en trait fin, relation (2.27)). Les vitesses sont tracée en fonction de z/r le long des lignes d'écoulement. $z/r = 1$ représente un cône à 45° dans le jet, les régions qui nous intéressent se situent à $z/r \lesssim 1$. Les couleurs correspondent à différents r_0. $v_{in,r}$ est négatif.*

DG Tau observé dans les raies de H_2 avec les prédictions du modèle basé sur la solution MDH de vent de disque ajustée sur les observations de rotation du jet atomique. Les premières comparaisons réalisées ici sont très prometteuses. Les prédictions pour $r_0^{\rm min} = R_{\rm sub}$ sont en bon accord avec les observations en terme de morphologie du jet (Fig. 6.18), d'intensité et de rapport de raies. Cependant la vitesse prédite par la solution est plus grande d'un facteur ~2-3 que celle observée, à la fois dans la direction poloïdale et en terme de rotation (Fig. 6.19).

Il faut tenir compte des limites du modèle dans l'interprétation de ses désaccords avec les observations :

– La PSF instrumentale dans les diagrammes PV est approximée par une gaussienne. En terme de perspectives, on peut envisager de tenir compte de la forme réelle du lobe spatial de SINFONI dans la convolution des diagrammes PV. En effet la PSF produite par la correction d'optique adaptative garde de fortes ailes au delà du 'coeur' gaussien de FWHM 0.12″ qui pourraient dilluer les régions internes d'avantage que dans les prédictions actuelles, diminuant les vitesses.
– L'hypothèse monofluide arrive à la limite de sa validité pour les lignes d'écoulement externes dans les classes II, tel qu'illustré par la Figure 6.20 qui compare la vitesse de la solution MHD à la vitesse de dérive ions-neutres. On note sur cette figure qu'au départ des lignes d'écoulement ($z/r \lesssim 0.2$) $v_{in,z} \geq v_z$ pour $r_0 > 3.2$ UA ce qui signifie que la vitesse de lancement est surestimée dans les prédictions pour ces régions. Un modèle MHD multifluide serait nécessaire.
– Le bras de levier λ pourrait être plus faible pour les grands r_0 que pour la zone à $r_0 \leq 3$ UA qui fait le jet atomique, ce qui diminuerait les vitesses de H_2 par rapport au modèle utilisé ici.

Chapitre

7

Prédictions synthétiques de H_2O et comparaisons aux observations

Sommaire

I Prédictions dans le cas optiquement épais . . . 179
I.1 Intensité spécifique et température de brillance . . . 179
I.2 Observations synthétiques pour des raies optiquement épaisses . . . 180
I.2-1 Cartes de brillance et diagrammes position-vitesse . . . 180
I.2-2 Profils intensité intégrés sur le lobe d'antenne . . . 181
I.2-3 Diagramme d'excitation . . . 181
I.2-4 Sommation des deux côtés du jet . . . 182
II Prédictions et influence des paramètres libres . . . 183
II.1 Influence de l'anisotropie de la probabilité d'échappement sur la ligne de visée . . . 183
II.1-1 Effet sur les cartes de brillance . . . 183
II.1-2 Influence sur les profils intégrés . . . 184
II.1-3 Effet sur l'intensité intégrée . . . 185
II.2 Effet de l'extension de la zone de lancement du vent de disque ($r_0^{\max}$) 186
II.2-1 Effet de $r_0^{\max}$ sur les diagrammes PV . . . 187
II.2-2 Effet de $r_0^{\max}$ sur les profils intégrés . . . 188
II.2-3 Effet de $r_0^{\max}$ sur le flux total . . . 191
II.3 Effet de l'angle d'inclinaison (i) . . . 192
II.3-1 Effet de i sur les cartes de brillance et diagrammes PV . . . 192
II.3-2 Effets de i sur les profils . . . 193
II.3-3 Effet de i sur le flux total et sur la largeur de la raie . . . 195
II.4 Effet du taux d'accrétion et de la masse de l'étoile . . . 196
II.4-1 Effet de $\dot{M}_{\rm acc}$ et $M_\star$ sur les cartes de brillance et les diagrammes PV . . . 196
II.4-2 Effet de $\dot{M}_{\rm acc}$ et de $M_\star$ sur les profils . . . 201
II.4-3 Effet de $\dot{M}_{\rm acc}$ et de $M_\star$ sur le flux total et l'intensité au pic 204
III Comparaison avec les observations H_2O avec Herschel . . . 205
III.1 Observations dans la raie à 557 GHz . . . 205
III.1-1 Comparaison Tdv vs $n_{\rm H}(1000\,{\rm UA})$ . . . 205
III.1-2 Comparaison Tdv vs Δv . . . 206
III.1-3 Ajustement des profils . . . 210
III.2 Observations dans les raies excitées de H_2O . . . 212
III.2-1 Profils des raies excitées de H_2O pour L1448-MM . . . 212
III.2-2 Profils des raies excitées de H_2O pour IRAS 2A, 4A et 4B 212
III.3 Observations complémentaires . . . 213
III.4 Diagrammes d'excitation . . . 215
IV Conclusion . . . 217

Résumé : ***Dans la continuité du chapitre précédent, ce chapitre aborde le traitement des raies optiquement épaisses dans le calcul des prédictions synthétiques (cartes, diagrammes PV, profils) adapté ici au cas de*** H_2O***.***

Les effets des paramètres et de la dépendance angulaire de la probabilité d'échappement sont étudiés dans un premier temps.

Dans un second temps, les prédictions dans les raies de H_2O ***sont comparées aux observations Herschel/HIFI de jets de classe 0 et I.***

I Prédictions dans le cas optiquement épais

Pour réaliser des prédictions synthétiques dans les raies de H_2O, on applique la méthode décrite pour H_2 en tenant compte cette fois-ci de la probabilité d'échappement, car les raies de H_2O sont optiquement épaisses. Il est nécessaire de projeter la probabilité d'échappement dans la direction de la ligne de visée en chaque point du jet.

En chaque point de chaque ligne d'écoulement, on connait la probabilité d'échappement du photon dans chaque direction $\vec{u}, \beta(\vec{u})$ (asymétrique ou anisotrope) ainsi que la probabilité d'échappement moyenne $<\beta>= \int_\Omega \frac{\beta(\vec{u})}{4\pi} \mathrm{d}\vec{\omega}$ (voir Chapitre 5).

I.1 Intensité spécifique et température de brillance

À partir des populations des niveaux et des probabilités d'échappement, on peut calculer l'intensité spécifique et intégrée pour chaque raie de fréquence ν_{ul} associée à la transition de $u \rightarrow l$ (aussi notée ν).

Le flux émis dans la direction de l'observateur par un élément de longueur Δz sur la ligne de visée $\vec{z}$ s'exprime par :

$$j_{lu}\Delta z = \frac{1}{4\pi} h\nu_{ul} n_u A_{ul} \beta(\vec{z}) \Delta z \quad \mathrm{erg\,s^{-1}\,cm^{-2}\,sr^{-1}}$$

où β est la probabilité d'échappement le long de la ligne de visée. En introduisant la largeur spectrale de la raie $\Delta\nu$ associée à la longueur Δz via le gradient de vitesse $\left(\frac{\partial \mathrm{v}_z}{\partial z}\right)$, on en déduit l'intensité spécifique qui est exprimée en $\mathrm{erg\,s^{-1}\,cm^{-2}\,sr^{-1}\,Hz^{-1}}$:

$$I_\nu = \frac{1}{4\pi} h\nu n_u A_{ul} \beta \frac{\Delta z}{\Delta \nu} \tag{7.1}$$

on peut écrire :

$$\beta_z = \frac{1 - e^{-\tau_z}}{\tau_z}$$

avec $\tau_z = \frac{hcB_{lu}n_l}{4\pi\left(\frac{\partial \mathrm{v}_z}{\partial z}\right)}\left(1 - \frac{g_l n_u}{g_u n_l}\right)$ l'opacité dans la direction de l'observateur. On obtient :

$$I_\nu = \frac{A_{ul}}{B_{lu}} \frac{n_u}{n_l} \frac{1}{1 - \frac{g_l n_u}{g_u n_l}} \left(\frac{\partial \mathrm{v}_z}{\partial z}\right) (1 - e^{-\tau_z}) \frac{\nu}{c} \frac{\Delta z}{\Delta \nu} \quad \mathrm{erg\,s^{-1}\,cm^{-2}\,st^{-1}\,Hz^{-1}}$$

En utilisant les relations (5.7) et (5.8) ainsi que la définition de la température d'excitation : $\frac{g_u n_l}{g_l n_u} = e^{\frac{h\nu}{k_B T_{ex}}}$, l'expression de I_ν se simplifie :

$$I_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_\mathrm{B} T_\mathrm{ex}}} - 1} \frac{\nu}{c} \frac{\partial \mathrm{v}_z}{\partial z} (1 - e^{-\tau_z}) \frac{\Delta z}{\Delta \nu}$$

donc :

$$I_\nu = B_\nu(T_\mathrm{ex}) \frac{\partial \mathrm{v}_s}{\partial s} (1 - e^{-\tau}) \frac{\Delta z}{\Delta \nu} \frac{\nu}{c} \quad \mathrm{erg\,s^{-1}\,cm^{-2}\,st^{-1}Hz^{-1}}$$

Remarque : On néglige ici le rayonnement du fond du ciel. Car Herschel permet d'observer à des fréquences assez haute où $B_\nu(T_{bg}) \ll 1$.

On utilise la relation Doppler pour introduire $\Delta v_z = \frac{\Delta\nu}{c}\nu$:

$$I_\nu = B_\nu(T_{ex})(1-e^{-\tau})\frac{\partial v_z}{\partial z}\frac{\Delta z}{\Delta v_z} = B_\nu(T_{\rm ex})(1-e^{-\tau}) \tag{7.2}$$

Car dans la direction z, $\Delta v_z = \frac{\partial v_z}{\partial z}\Delta z$. En radioastronomie il est d'usage d'exprimer l'intensité spécifique (en erg s^{-1} cm^{-2} st^{-1} Hz^{-1}) en unités de température de brillance (en Kelvins). Pour expliquer la définition de T_B et de ses unités on se place ici dans l'approximation de Rayleigh-Jeans pour plus de simplicité, mais les calculs ne sont pas effectués sous cette approximation :

$$T_B \equiv \frac{c^2}{2k_{\rm B}\nu^2}I_\nu = \frac{\lambda^2}{2k_{\rm B}}I_\nu \tag{7.3}$$

et :

$$T_B = B_\nu(T_{\rm ex})(1-e^{-\tau}) \times \frac{c^2}{2k_{\rm B}\nu^2} = J_\nu(T_{\rm ex})(1-e^{-\tau}) \tag{7.4}$$

Dans l'approximation de Rayleigh-Jeans ($k_B T_{\rm ex} \gg h\nu$) et pour une source optiquement épaisse ($\tau \gg 1$), on obtient :

$$\begin{aligned} I_\nu &= B_\nu(T_{\rm ex}) \\ &= \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_{\rm B}T_{\rm ex}}}-1} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{k_B T_{\rm ex}}{c^2 h\nu} = \frac{2k_B\nu^2 T_{\rm ex}}{c^2} \\ &= \frac{2k_B\nu^2 T_B}{c^2} \Rightarrow T_B = T_{\rm ex} \end{aligned} \tag{7.5}$$

On retrouve l'expression (7.3) avec la température de brillance égale à la température d'excitation.

On peut multiplier la relation (7.3) en utilisant la relation Doppler pour exprimer la température de brillance de la raie intégrée sur les vitesses :

$$T_B\Delta v = I_\nu\frac{c^2}{2k_{\rm B}\nu^2}\frac{c}{\nu}\Delta\nu = I\nu\Delta\nu \times \frac{\lambda^3}{2k_{\rm B}}$$

Si on note $B = I_\nu\Delta\nu$, la brillance de surface dans la raie choisie intégrée sur le profil, on obtient que $T\Delta v$ soit exprimé en K km s^{-1} :

$$\frac{T\Delta v}{\rm K\,km\,s^{-1}} = \left(\frac{2\times10^5 k_{\rm B}}{(\lambda/{\rm cm})^3}\right)^{-1}\left(\frac{B}{\rm erg\,s^{-1}cm^{-2}\,sr^{-1}}\right) \tag{7.6}$$

où $k_{\rm B}$ est exprimé en cgs. Le facteur 10^5 cm/km permet d'exprimer Δv en km s^{-1}.

Les relations (7.3) et (7.6) sont utilisées dans la suite pour exprimer les profils et cartes de brillance en unités de température de brillance pour les raies de H_2O.

I.2 Observations synthétiques pour des raies optiquement épaisses

I.2-1 Cartes de brillance et diagrammes position-vitesse

Pour réaliser les cartes de brillance et les diagrammes PV on procède comme dans le cas de H_2 sauf qu'ici on tient compte de la probabilité d'échappement dans la direction

de l'observateur $\beta(\mathcal{L}_{\rm obs})$ (voir Chapitre 5) et on procède au changement d'unités décrit précédemment. En chaque point du jet, on utilise la probabilité d'échappement dans la direction $\vec{u}$ colinéaire à la ligne de visée $\mathcal{L}_{\rm obs}$. Dans la pratique on effectue une interpollation de $\beta(\vec{u}(\theta,\phi))$ dans la direction de l'observateur $\mathcal{L}_{\rm obs}$ et on multiplie l'émissivité dans l'élément de volume $\mathrm{d}V$ ϵ par $\beta(\mathcal{L}_{\rm obs})$.

Pour obtenir des diagrammes position-vitesse en Kelvins, on utilise la relation (7.3) et on multiplie l'expression (6.2) par $\frac{\lambda^2}{2\times10^5 k_{\rm B}} \times |r_1 - r_2|^{-1}$ (en utilisant les mêmes notations qu'au chapitre 6).

I.2-2 Profils intensité intégrés sur le lobe d'antenne

En suivant la méthode décrite en 6.I.7 (page 161) on calcule les profils d'émission de H_2O exprimés en K. Dans le cas d'un lobe gaussien la température d'antenne (en K) est mesurée par :

$$T_A(\mathrm{v}) = \int_{z_{\rm min}}^{z_{\rm max}} T_B^{PV\parallel}(z,\mathrm{v}) \times \frac{|r_1 - r_2| e^{-4\ln(2) z^2/S^2}}{G} \mathrm{d}z \tag{7.7}$$

où S est la largeur à mi hauteur de la gaussienne (FWHM), $z_{\rm min}$ et $z_{\rm max}$ sont les bornes en altitude sur la portion du jet qui nous intéresse, en général $z_{\rm min} = 0\,\mathrm{UA}$ et $z_{\rm max} = 1000 r_0^{\rm max}$. Ici on fait l'approximation $R = \sqrt{z^2 + r^2} \simeq z$, ce qui n'est pas exact mais plus commode pour les calculs (au point de recollimation $z/r \simeq 400$). G vaut :

$$G = \int_z e^{-4\ln(2) z/S^2} \mathrm{d}z = \frac{S^2}{8\ln(2)}$$

La largeur du lobe S dépend de la longueur d'onde λ, du diamètre du téléscope d et de la distance à la source D, elle est déterminée en utilisant la relation :

$$S(\lambda) = 7800\,\mathrm{UA} \times \left(\frac{D}{200\,\mathrm{pc}}\right)\left(\frac{\lambda}{538\,\mu\mathrm{m}}\right)\left(\frac{3.28\,\mathrm{m}}{d}\right). \tag{7.8}$$

La température totale intégrée sur le profil est (exprimé en $\mathrm{K\,km\,s^{-1}}$) :

$$I_{\rm tot} = 2\int_{\mathrm{v}_{\rm min}}^{\mathrm{v}_{\rm max}} T_R(\mathrm{v})\mathrm{dv} \tag{7.9}$$

en général $\mathrm{v}_{\rm min} = -200\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ et $\mathrm{v}_{\rm max} = +200\,\mathrm{km\,s^{-1}}$. Le facteur 2 provient du fait que l'on ajoute la contribution du jet décalé vers le rouge et du jet décalé vers le bleu dans le lobe de l'antenne qui est centré sur l'étoile.

I.2-3 Diagramme d'excitation

À partir de la température intégrée calculée $T_R\mathrm{dv}$ pour chaque raie de H_2O on peut établir un diagramme d'excitation. Pour simplifier cette démonstration, on suppose qu'on prend ici $\beta = 1$ (mais les densités de colonne obtenues par la suite tiennent compte de la probabilité d'échappement). On utilise l'égalité entre l'émissivité intégrée sur z et l'intensité spécifique intégrée sur les fréquences,

$$\int j(z)\mathrm{d}z = \int I_\nu \mathrm{d}_\nu \tag{7.10}$$

le premier terme s'écrit :

$$\int j(z)\mathrm{d}z = \frac{1}{4\pi}A_{ul}h\nu \int n_u(s)ds = \frac{1}{4\pi}A_{ul}h_n u N_u$$

Où N_u est la densité de colonne en molécules dans le niveau u.

En utilisant la relation (7.3), on peut aussi réécrire la seconde intégrale en fonction de la brillance de surface T_B :

$$\int I_\nu \mathrm{d}_\nu = \int 2k_\mathrm{B}T_B\nu^2/c^2 \times \frac{\nu}{c}\mathrm{dv} = \frac{2k_\mathrm{B}}{\lambda^3}T_B\mathrm{dv}$$

Ainsi on établi une relation directe entre N_u et $T_B$dv,

$$\frac{1}{4\pi}A_{ul}h\nu N_u = \frac{2k_B\nu^3}{c^3} \times T_B\mathrm{dv}.$$

Donc : [1]

$$N_u = \frac{8\pi k_\mathrm{B}\nu^2}{c^3 h A_{ul}}T_B\mathrm{dv} = \frac{8\pi k_\mathrm{B}}{c^3 h} \times \frac{\nu^2(T_B\mathrm{dv})}{A_{ul}}$$

Quand on exprime $T_B$dv en K km s^{-1}, on fait apparaître un facteur 10^5 au numérateur. On exprime aussi ν en GHz, ce qui fait apparaître un facteur 10^{18} au numérateur. Le terme constant est alors égal à $b = 1937\ cm^{-2}$ (Yıldız et al. 2010) et on obtient :

$$N_u = \frac{b\nu^2 \quad [\mathrm{GHz}] \times T_B\mathrm{dv} \quad [\mathrm{K\,km\,s^{-1}}]}{A_{ul} \quad [\mathrm{s^{-1}}]} \tag{7.11}$$

En pratique on observe une température d'antenne moyennée sur le lobe donc N_u est aussi moyennée sur le lobe. Pour tracer un diagramme d'excitation on représente $\ln(N_u/g_u)$ obtenu en (7.11) en fonction de l'énergie E_u. De cette manière l'inverse de la pente est égal à la température d'excitation.

I.2-4 Sommation des deux côtés du jet

Dans la réalisation des profils le jet est isolé, l'enveloppe et le rayonnement du fond du ciel sont négligés. On peut s'attendre à ce que la contribution de l'enveloppe soit significative à faible vitesse (de l'ordre de quelques km s^{-1} seulement), uniquement, dans les profils. La contribution de l'enveloppe n'interfère donc pas avec les ailes des profils obtenus. **Ce sont les ailes des raies que nous cherchons à reproduire**. Il est également nécessaire de sommer les contributions des deux lobes du jet : décalé vers le bleu et décalé vers le rouge. Dans le cas de raies optiquement minces, cette sommation est faite simplement. Ce n'est pas le cas pour les raies optiquement épaisses (en particulier pour la raie fondamentale de H_2O), mais il est possible de faire quelques simplifications.

L'interaction du rayonnement issu du jet décalé vers le rouge (vitesses positives) avec celui décalé vers le bleu (vitesses négatives) peut modifier l'intensité dans les profils. Cependant, à faible inclinaison (i) les positions projetées des deux lobes du jet sont très

1. De manière équivalente on a la relation :

$$N_u = \frac{4\pi\lambda I_\mathrm{tot}(\lambda)}{hc^2 A_{ul}}$$

.

proches, mais leurs intervalles de vitesses radiales sont bien différenciés. Inversement, à forte inclinaison ($i > 60°$) leurs vitesses radiales se recouvrent, mais leurs positions projetées sont bien différenciées. Ainsi nous avons choisi à l'ordre zéro de négliger cette interaction, ce qui permet de simplifier considérablement le traitement du transfert radiatif dans le calcul des observations synthétiques. Cette simplification aboutit à l'obtention de profils très symétriques, d'avantage que dans les observations où une partie de l'émission décalée vers le rouge peut être absorbée par l'enveloppe (en fonction de sa composition moléculaire), ou par le jet bleu dans le cas où l'inclinaison est proche de $i = 60°$.

La partie décalée vers le bleu du jet correspond à une inclinaison d'angle i par rapport à la ligne de visée et la partie décalée vers le rouge correspond à une inclinaison d'angle $j = \pi - i$. Mais l'écart entre les profils calculés avec un angle i et un angle $\pi - i$ est inférieur à 2% à la fois en intensité et en largeur. Cette propriété nous permet de ne pas avoir à calculer le lobe rouge mais juste sommer la contribution de la partie décalée vers le bleue avec son symétrique par rapport à $v = 0\,\mathrm{km\,s^{-1}}$, comme dans le cas des raies optiquement minces.

Cette simplification du transfert et l'absence de contribution de l'enveloppe impliquent que les parties du profil à basse vitesse (v de l'ordre de quelques $\mathrm{km\,s^{-1}}$) possèdent une grande incertitude. Mais les ailes des profils ne sont pas affectées. De plus, comme notre modèle n'inclut pas la contribution de l'enveloppe on ne s'attend pas à ce que le profil de type P-Cygni inverse , présent à basse vitesse sur certains profils observés, soit reproduit.

II Prédictions et influence des paramètres libres

II.1 Influence de l'anisotropie de la probabilité d'échappement sur la ligne de visée

La projection de la probabilité d'échappement sur la ligne de visée $\beta(\mathcal{L}_{\mathrm{obs}})$ utilisée dans le calcul des émissivités en chaque point du jet dépend non seulement de (r, z) mais aussi de ϕ_{jet} et de l'angle d'inclinaison du jet. Pour discuter des effets des anisotropies de la probabilité d'échappement projetée on choisit le modèle de référence de classe 0, avec $r_0^{\mathrm{max}} = 25\,\mathrm{UA}$, $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 5 \times 10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\,yr^{-1}}$ ($\tau_0 = 13$). On calcule les prédictions de référence en supposant que la probabilité d'échappement sur la ligne de visée est égale à la valeur moyennée sur toutes les directions $< \beta >$ pour les comparer aux prédictions réalisées avec la probabilité d'échappement réelle ($\beta(\mathcal{L}_{\mathrm{obs}})$) en chaque point du jet dans la direction de l'observateur.

II.1-1 Effet sur les cartes de brillance

Un premier effet de l'anisotropie de la probabilité d'échappement est visible sur les cartes de brillance, telles que montrées sur la Figure 7.1 pour la raie à 557 GHz de H_2O. La distribution du flux sur les cartes est modifiée par la dépendance dans la direction de projection. Dans le cas où l'on suppose la probabilité d'échappement isotrope la carte de brillance obtenue est symétrique par rapport à l'axe du jet. Alors que si l'on utilise la probabilité d'échappement anisotrope ($\beta(\vec{u})$), la carte de brillance présente

une asymétrie gauche-droite. L'asymétrie provient des projections différentes du terme $v_p + v_\phi$ de part et d'autre de l'axe jet. Comme le jet est en rotation, le champ de vitesse est asymétrique et la probabilité d'échappement qui dépend directement du gradient du champ de vitesse conserve cette asymétrie. La rotation du jet créé ainsi une nouvelle signature indépendante des mesures de vitesse.

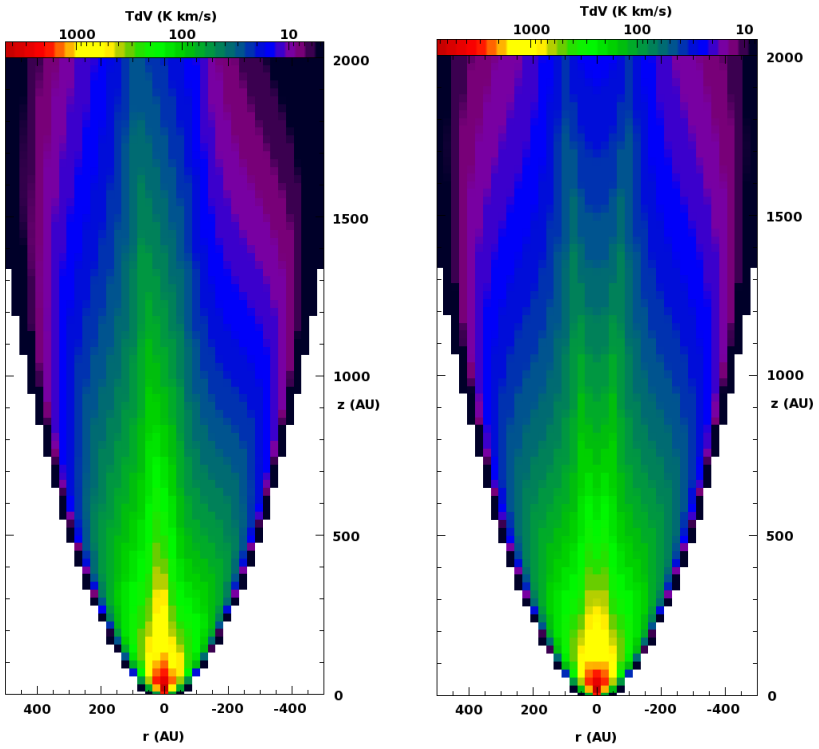


FIGURE 7.1 – *Cartes d'émissivité dans la raie à 557* GHz *de* H_2O *avec une inclinaison de* $i = 80°$ *et* $r_0^{\max} = 25$ UA *pour une classe 0 avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,M_\odot\ {\rm yr}^{-1}$. *À gauche : carte réalisée en prenant la probabilité d'échappement sur la ligne de visée. On voit apparaître une asymétrie gauche-droite qui reflète la rotation du jet. À droite : carte réalisée en utilisant la probailité d'échappement moyenne. Les deux figures sont représentées avec des échelles de couleur différentes.*

II.1-2 Influence sur les profils intégrés

On peut calculer les profils en supposant que la probabilité d'échappement sur la ligne de visée est égale à $< \beta >$, et les comparer avec ceux calculés avec la probabilité d'échappement réelle $\beta(\vec{u})$.

Les profils obtenus pour la raie fondamentale de o-H_2O sont représentées dans la Figure 7.2. Pour $i = 30°$ à $60°$, on constate assez peu de différence entre les ailes des raies et un facteur 0.5 à $v = 0\,{\rm km\ s^{-1}}$. Par contre, à $i = 80°$ le rapport est ~1.5 sur les ailes des raies et 1 à $v = 0\,{\rm km\ s^{-1}}$. On peut en déduire que ce sont les parties externes du jet qui sont d'avantage influencées par la dépendance angulaire de la probabilité d'échappement.

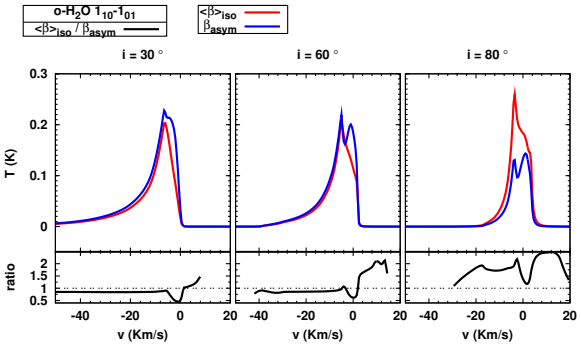


FIGURE 7.2 – *Profils obtenus avec la probabilité d'échappement moyenne* $<\beta>$ *en* rouge *et avec la probabilité d'échappement réelle* $\beta(\vec{u})$ *en* bleu *ainsi que leur rapport en* noir*, pour les 3 valeurs d'inclinaison, pour la raie fondamentale de o-*H_2O *à* $r_0^{\max} = 25$ UA*. Les profils sont tracés pour le lobe bleu seul.*

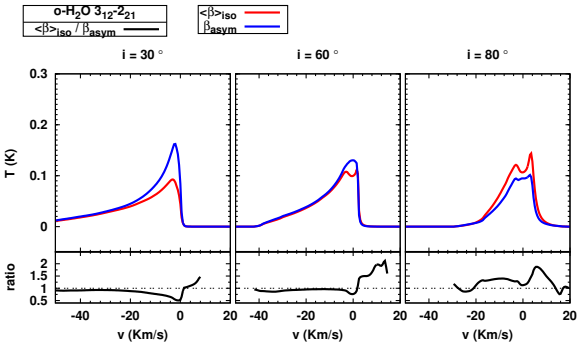


FIGURE 7.3 – *Même chose que pour la Figure 7.2 appliqué à la raie* $3_{12} - 2_{21}$.

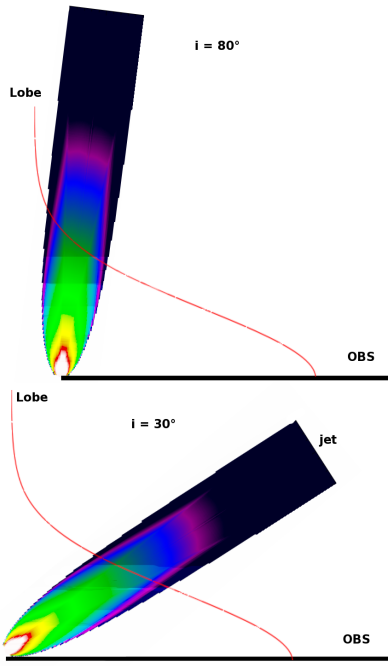


FIGURE 7.4 – *Illustration de l'incorporation du jet dans le lobe avec différentes inclinaisons. Si la région émettrice est étendue en z, comme c'est le cas de la raie fondamentale de* H_2O *alors à* $i = 80°$ *une partie du flux n'est pas inclue dans le lobe.*

Ces différences de forme sont plus marquées à $i = 80°$ où le pic à $v = -5\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ qui apparaît avec $\beta = <\beta>$ (isotrope) chute d'un facteur 2 avec $\beta = \beta(\vec{u})$. Pour toute inclinaison, avec $\beta = \beta(\vec{u})$ un pic secondaire à $v = 0\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ apparaît. Comme montré sur la Figure 5.11 la probabilité d'échappement asymétrique peut amplifier ou réduire le flux perçu, en fonction des directions d'observation, d'un facteur pouvant aller jusqu'à 2.

La Figure 7.3 est réalisée pour une raie excitée de o-H_2O, on constate que les effets de $<\beta>$ et $\beta(\vec{u})$ sont très similaires à ceux sur la raie fondamentale mais d'amplitude plus faible, surtout à $i = 80°$. Ici le double pic présent avec $<\beta>$ devient un simple pic avec $\beta(\vec{u})$.

II.1-3 Effet sur l'intensité intégrée

La Table 7.1 regroupe les variations de $T\mathrm{d}v$ dans différentes raies en fonction du choix de la probabilité d'échappement ($<\beta>$ ou $\beta(\vec{u})$), et de $r_0^{\max}$ et i. La variation du flux total avec l'inclinaison dépend fortement de la probabilité d'échappement choisie. Dans le cas où elle est isotrope $T\mathrm{d}v$ n'est évidemment pas modifié quand i passe de 80° à 30° (sauf ~10% à $r_0^{\max} = 25$ UA pour la fondamentale car une grande partie du jet qui se retrouve dans le lobe à $i = 30°$ n'y est plus à $i = 80°$, voir Figure 7.4). Ce qui

TABLE 7.1 – *Rapport des flux intégrés constatés lors de la variation d'un paramètre parmi i, r_0^{max} et la probabilité d'échappement. La table montre le rapport de flux intégré Tdv calculé avec la probabilité d'échappement isotrope $<\beta>$ sur le flux intégré calculé avec la probabilité d'échappement $\beta(\vec{u})$ pour les trois angles et à différents r_0^{max}. Les résultats ont été rassemblés pour les raies fondamentales à 557* GHz *et la raie à 1113* GHz *de* H_2O *et pour deux raies excitées des formes ortho et para. Dans les calculs, la distance est fixée à* $D = 200$pc*, le lobe est 20″ et on utilise le modèle de classe 0 avec* $\dot{M}_{acc} = 5\times10^{-6}M_\odot$ yr^{-1}.

H_2O $1_{10}-1_{01}$, 557 GHz, $E_u/k_B = 61$ K			
$\beta:\beta(\vec{u}) \rightarrow <\beta>$			
r_0^{max} (UA)	$i=80°$	$i=60°$	$i=30°$
25	1.65	0.85	0.79
12.8	1.65	0.84	0.79
6.4	1.68	0.84	0.79
3.2	1.67	0.83	0.79
Moy.	1.66	0.84	0.79

H_2O $1_{11}-0_{00}$, 1113 GHz, $E_u/k_B = 53$ K			
$\beta:\beta(\vec{u}) \rightarrow <\beta>$			
r_0^{max} (UA)	$i=80°$	$i=60°$	$i=30°$
25	1.64	0.87	0.78
12.8	1.64	0.86	0.78
6.4	1.64	0.85	0.78
3.2	1.67	0.83	0.79
Moy.	1.65	0.85	0.78

H_2O $3_{12}-2_{21}$, 1153 GHz, $E_u/k_B = 250$ K			
$\beta:\beta(\vec{u}) \rightarrow <\beta>$			
r_0^{max} (UA)	$i=80°$	$i=60°$	$i=30°$
25	1.31	0.91	0.76
12.8	1.31	0.90	0.77
6.4	1.27	0.89	0.79
3.2	1.25	0.89	0.81
Moy.	1.29	0.90	0.78

H_2O $2_{02}-1_{11}$, 988 GHz			
$\beta:\beta(\vec{u}) \rightarrow <\beta>$			
r_0^{max} (UA)	$i=80°$	$i=60°$	$i=30°$
25	1.61	0.87	0.77
12.8	1.61	0.86	0.76
6.4	1.61	0.85	0.78
3.2	1.61	0.84	0.79
Moy.	1.61	0.86	0.78

signifie que l'essentiel de la variation de Tdv avec i pour $\beta(\vec{u})$ est due à l'anisotropie de la probabilité d'échappement elle-même.

La Table 7.1 met directement en évidence la variation de flux induite par la dépendance angulaire de la probabilité d'échappement. L'extension en r_0^{max} du jet n'a que très peu d'influence, les raies issues des niveaux d'énergie basse sont multipliées par ∼0.6 à $i = 80°$ et par ∼ 1.3 à $i = 30°$ quand on passe de $\beta = <\beta>$ à $\beta = \beta(\vec{u})$. Avec $\beta(\vec{u})$, le jet apparaîtra donc globalement moins brillant pour les forts angles d'inclinaison. Les raies issues des niveaux plus haut en énergie sont elles multipliées par ∼0.8 à $i = 80°$. L'influence de la dépendance angulaire de la probabilité d'échappement est plus faible dans les zones plus excitées du jet.

De plus, on remarque que le flux intégré de la transition $3_{12}-2_{21}$ n'est pas sensible à l'inclinaison du jet dans le cas où $\beta = <\beta>$, on vérifie d'autre part que l'ensemble de la région émettrice est incluse dans le lobe (voir Fig. 7.4) alors qu'on note une légère dépendance pour le flux intégré de la transition $1_{10}-1_{01}$ (multiplié par 1.12 quand i passe de 80° à 30° pour $r_0^{max} = 25$ UA), car une partie des régions d'émission se retrouvent hors du lobe à faible inclinaison.

II.2 Effet de l'extension de la zone de lancement du vent de disque (r_0^{max})

Pour discuter de l'effet du paramètre r_0^{max}, on choisit de se placer dans le cadre du modèle de référence de *classe 0 standard* : $M_\star = 0.1\,M_\odot$, $\dot{M}_{acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot$ yr^{-1} ($\tau_0 = 13$) sous une inclinaison intermédiaire de 60°. Dans certains cas on choisira de se placer sous une inclinaison différente afin d'améliorer la clarté des résultats présentés.

II.2-1 Effet de $r_0^{\max}$ sur les diagrammes PV

L'évolution du diagramme position-vitesse (PV) sur la grille en $r_0^{\max}$ choisie (0.8, 1.6, 3.2, 6.4, 12.8 et 25 UA) est présentée sur la Figure 7.5. Elle permet de rendre compte des différentes contributions ajoutées par les parties du jet lancées depuis des rayons de plus en plus grand. Seule la partie du jet décalée vers le bleu, est représentée ici. Ce sont les parties les plus internes du jet, lancées depuis les plus petits r_0 qui contribuent le plus à l'émission à grande vitesse ($v < -10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$). L'angle d'inclinaison a ici été fixé à $i = 80°$ pour rendre ces diagrammes PV plus lisibles.

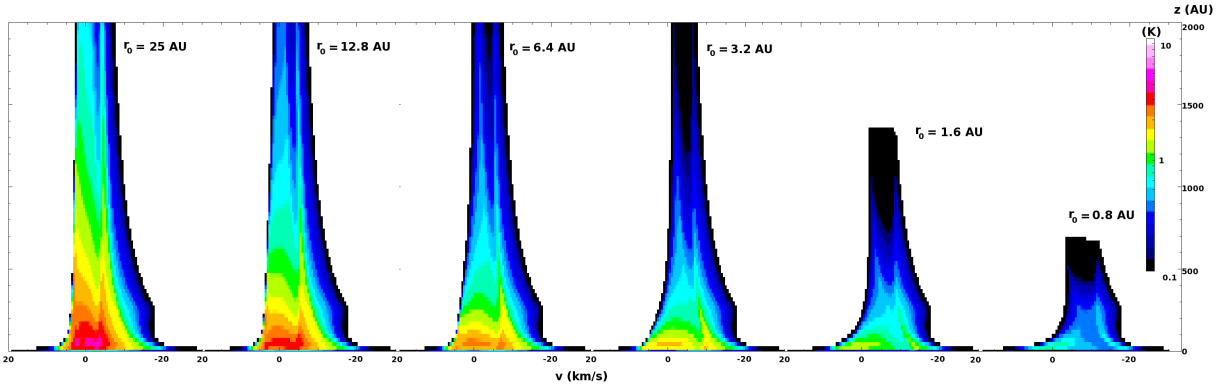


FIGURE 7.5 – *Évolution du diagramme PV en fonction de $r_0^{\max}$ pour la raie à 557* GHz *de o-H_2O. Tous les diagrammes sont tracés sur la même échelle de couleur. Le modèle utilisé correspond à $i = 80°$ (pour plus de lisibilité), $\tau_0 = 13$, $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$ et $M_\star = 0.1\,M_\odot$. Dans chaque cas, le jet est sommé sur toute sa largeur. La coordonnée z correspond à la distance sur le plan du ciel.*

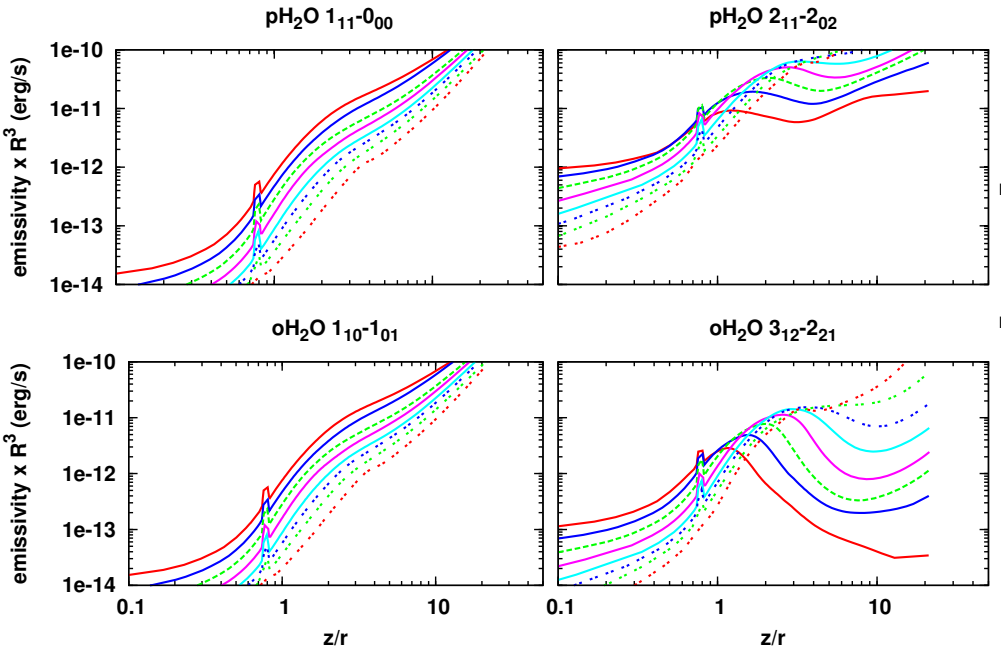


FIGURE 7.6 – *Émissivité multipliée par le rayon au cube en fonction de z/r dans deux raies de p-H_2O et de o-H_2O pour le modèle de référence de classe 0 ($\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-5}\,M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$, $M_\star = 0.1\,M_\odot$) le long de différentes lignes d'écoulement pour $r_0 = 25$, 12.6, 6.4, 3.2, 1.6, 1, 0.6 et $R_{\rm sub} = 0.31$ UA (respectivement de la rouge en trait continu à la rouge en pointillé sur la figure en haut à gauche).*

La Figure 7.6 montre l'émissivité multipliée par le rayon sphérique au cube pour tenir compte des effets de volume dans le jet, le long de différentes lignes d'écoulement ($r_0 = 25\,\mathrm{UA}$ à $r_0 = R_{\mathrm{sub}}$) pour le modèle de référence de *classe 0 standard*. L'émissivité diminue d'un facteur 100 entre $r_0 = 25\,\mathrm{UA}$ et $r_0 = R_{\mathrm{sub}}$. Dans le cas des raies fondamentales, plus les lignes d'écoulement sont externes (r_0 grand) et plus leur contribution à la brillance dans le diagramme PV est importante, quelque soit l'élévation. Les deux raies fondamentales de para et ortho-H_2O ont un comportement similaire. Inversement pour les raies issues de niveaux plus énergétiques il y a une inversion située autour de $z/r \simeq 2$: au delà de cette valeur le flux est dominé par les lignes d'écoulement plus internes, donc par les régions les plus proches de l'axe du jet où le rayonnement de l'étoile est reçu avec le plus d'intensité et où la densité est la plus élevée.

II.2-2 Effet de r_0^{max} sur les profils intégrés

Les profils présentés sur les Figures 7.7 à 7.9 sont obtenus en intégrant les diagrammes PV-longitudinaux de la Figure 7.5 sur $z = 0$ à $25\,000\,\mathrm{UA}$ après convolution par une gaussienne de largeur à mi-hauteur correspondant au lobe d'Herschel pour chaque raie pour une distance $D = 200\,\mathrm{pc}$. L'angle d'inclinaison est $i = 60°$. L'effet de la variation de r_0^{max} sur la raie $1_{10} - 1_{10}$ à 557 GHz de H_2O pour une seule moitié du jet et pour les deux moitiés du jet sommées est mis en évidence par la Figure 7.7. On se rend compte que la forme du profil est très sensible à ce paramètre. Le flux des ailes à haute vitesse ($-40\,\mathrm{km\,s^{-1}} < v < -20\,\mathrm{km\,s^{-1}}$) provient des parties les plus internes du jet $r_0^{\mathrm{max}} < 1\,\mathrm{UA}$. À mesure que r_0^{max} augmente du flux est ajouté à des vitesses de plus en plus faibles. Sur le profil sommant les deux parties du jet, on passe progressivement d'un profil en deux pics très séparés avec un trou central à un profil piqué sur zéro (ce dernier étant très incertain).

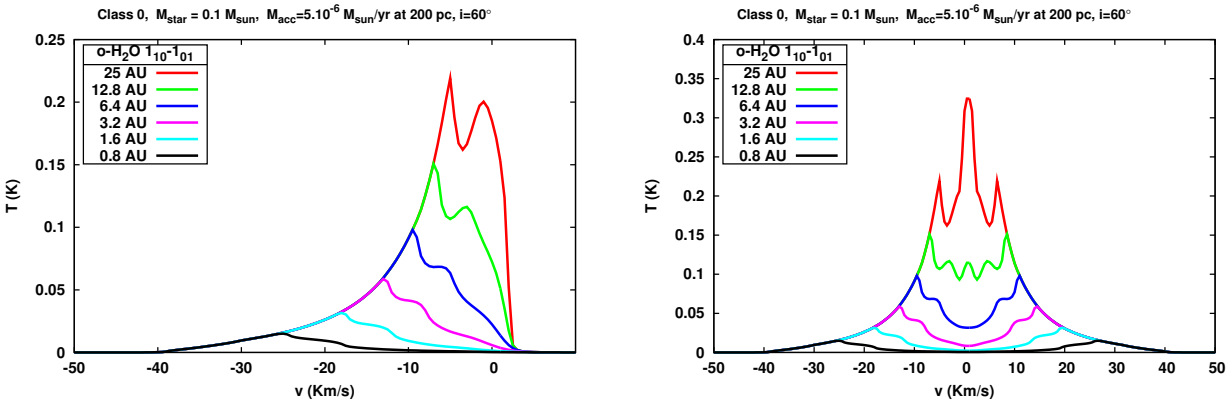


FIGURE 7.7 – *Effet de la variation du rayon d'extention maximal de la zone de lancement de jet r_0^{max} sur les profils de la raie à 557* GHz *de* H_2O *au travers d'un lobe de 39″ (Kristensen et al. 2012). À gauche seul le jet en direction de l'observateur est montré, à droite les deux côtés du jet sont sommés (voir section I.2-4)*

L'effet de r_0^{max} pour les raies plus excitées de H_2O à 1153 GHz et à 1097 GHz est présenté sur la Figure 7.8. Ces deux raies sont issues du niveau 3_{12}. On constate que ces transitions sont moins sensibles à la variation en r_0^{max} que la raie fondamentale, en effet la majorité de l'émission provient de la base du jet et de régions proches de l'axe, comme montré dans la coupe 2D d'émissivité sur la Figure 7.10. Étendre le jet en r_0 ne va pas ajouter de flux dans les ailes de raie. Alors que l'émission dans la raie

fondamentale est issue à la fois des parties internes du jet mais aussi des régions plus éloignées. De la même manière, la Figure 7.9 montre l'effet de la variation de $r_0^{\max}$ sur la raie fondamentale de p-H_2O à 1113 GHz. Comme pour la transition fondamentale de la forme ortho, ce profil est sensible à la variation de $r_0^{\max}$. La raie à 752 GHz est moins sensible, pour les mêmes raisons que celles invoquées précédemment pour les raies excitées.

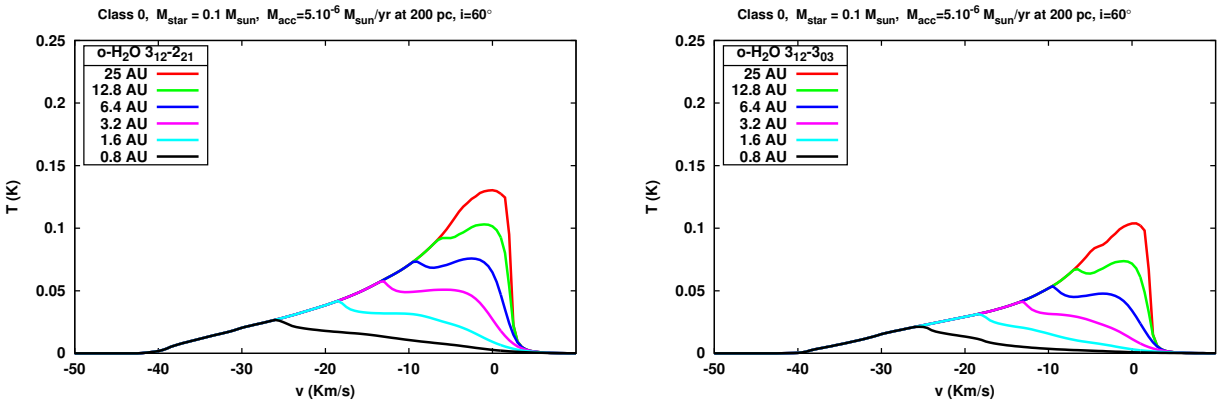


FIGURE 7.8 – *Effet de $r_0^{\max}$ sur la raie $3_{12} - 2_{21}$ à 1153* GHz *de o-H_2O au travers d'un lobe de 19″ à gauche et sur la raie $3_{12} - 3_{03}$ à 1097* GHz *de o-H_2O au travers d'un lobe de 20″ (Kristensen et al. 2012) à droite, avec le même modèle que sur la Figure 7.7. Dans les deux cas, un seul côté du jet est tracé.*

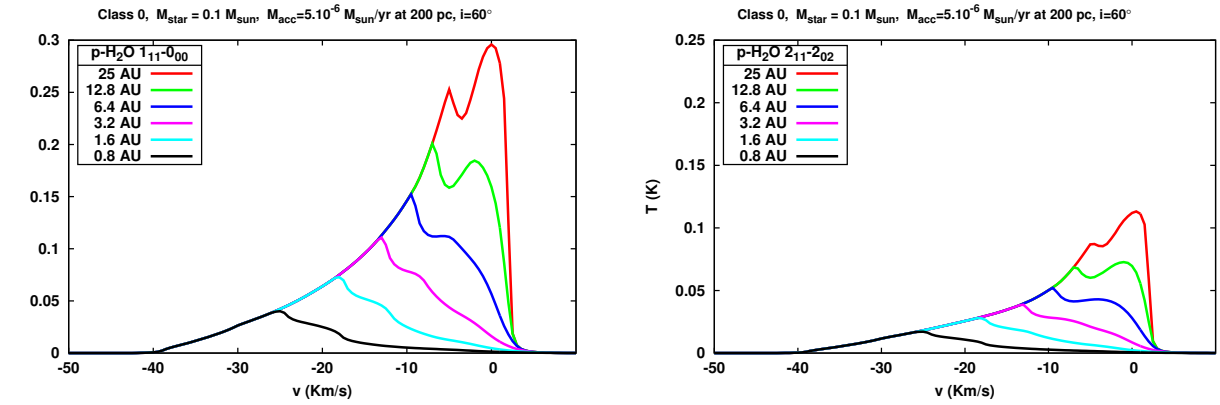


FIGURE 7.9 – *Effet de $r_0^{\max}$ sur la raie $1_{11} - 0_{00}$ à 1113* GHz *de p-H_2O au travers d'un lobe de 19″ à gauche et sur la raie $2_{11} - 2_{02}$ à 752* GHz *de p-H_2O au travers d'un lobe de 28″ à droite, avec le même modèle que sur la Figure 7.7. Dans les deux cas, un seul côté du jet est tracé.*

► Augmenter $r_0^{\max}$ contribue ainsi à plusieurs effets sur les profils :

- Ajout progressif de flux aux basses vitesses dans le profil, car la vitesse du fluide est une fonction de $r_0^{-0.5}$ (auto-similarité du modèle). Le flux dans les ailes, est peu affecté par l'ajout de lignes d'écoulement à r_0 de plus en plus grand.
- Une sensibilité selon la fréquence de la raie : les raies issues des niveaux de faible énergie, plus facilement excitées, même dans les régions externes du jet, montrent un accroissement du flux important à faible vitesse quand $r_0^{\max}$ augmente. Alors que les raies provenant de niveaux de plus haute énergie qui ne sont excités que dans les

parties internes du jet montrent une sensibilité plus faible à la variation du $r_0^{\max}$ (voir Figure 7.10).

- Du fait de l'ajout de flux à basse vitesse, on note une forte diminution de la largeur à mi-hauteur de la raie lorsque $r_0^{\max}$ augmente, dans le cas de la Figure 7.7. Mais l'emission à $v \simeq 0\,\mathrm{km\ s^{-1}}$ n'étant pas reproduite dans nos modèles la FWHM ne sera pas un critère de comparaison fiable avec les observations.

▸ Pics dans les profils

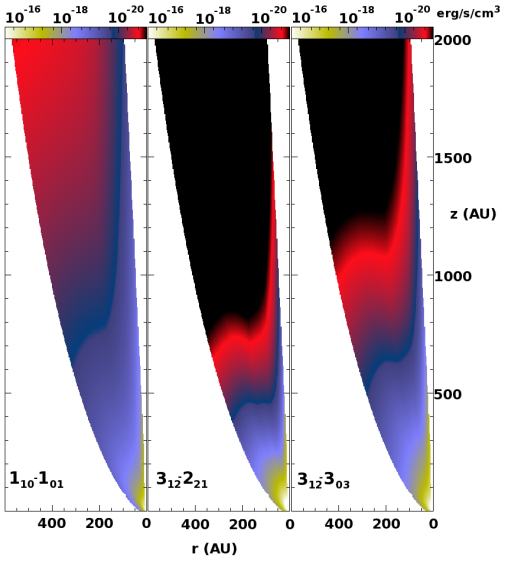


FIGURE 7.10 – *Coupe 2D de l'émissivité en* $\mathrm{erg\,s^{-1}\,cm^{-3}}$ *dans les raies de o-*H_2O *dans le jet à* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$ *et* $M_\star = 0.1\,\mathrm{M_\odot}$.

Les profils calculés pour un lobe du jet présentent deux pics dans les raies $1_{10} - 1_{01}$ et $1_{11} - 0_{00}$ (aussi visibles sur les diagrammes PV, Fig 7.5). Le premier pic est centré autour de 0 $\mathrm{km\ s^{-1}}$, il correspond au flux cumulé depuis une région étendue en altitude dans le jet. La partie du flux légèrement décalée vers le rouge correspond à une émission provenant de régions où la rotation et l'expansion radiale l'emportent encore sur le mouvement vertical du jet. Le second pic se forme à partir de l'émission provenant de régions plus proches de l'axe à $z/r > 5$, comme montré dans la Figure 7.11. Ce deuxième pic est absent ou peu prononcé dans les raies excitées de H_2O. Pour H_2O ce pic se forme à des vitesses assez faibles, ce qui indique que la région responsable de l'émission s'étend en altitude dans le jet.

▸ Contribution en fonction de z/r

Il est aussi possible de distinguer la contribution des régions correspondant à différentes ouvertures angulaires dans le jet (en fonction de $x = z/r$), en n'intégrant le flux que depuis la base du jet à $z/r = 0.05$ jusqu'à une valeur maximale de z/r. Plus cette valeur sera grande et plus l'ouverture se rapproche de l'axe du jet. Ces contributions sont illustrées par la Figure 7.11 pour une raie excitée et une raie fondamentale de H_2O. Le flux émis dans les régions avec $z/r < 5$ représente ~60% du flux total pour les raies fondamentales de H_2O et presque tout le flux de ses raies excitées. Le flux émis entre $z/r = 5$ et $z/r = 21$, qui correspond à la zone le long du jet la plus proche de l'axe de rotation, contribue au second pic à $v \simeq 5\,\mathrm{km\ s^{-1}}$ du profil des raies fondamentales et à leurs ailes à haute vitesse.

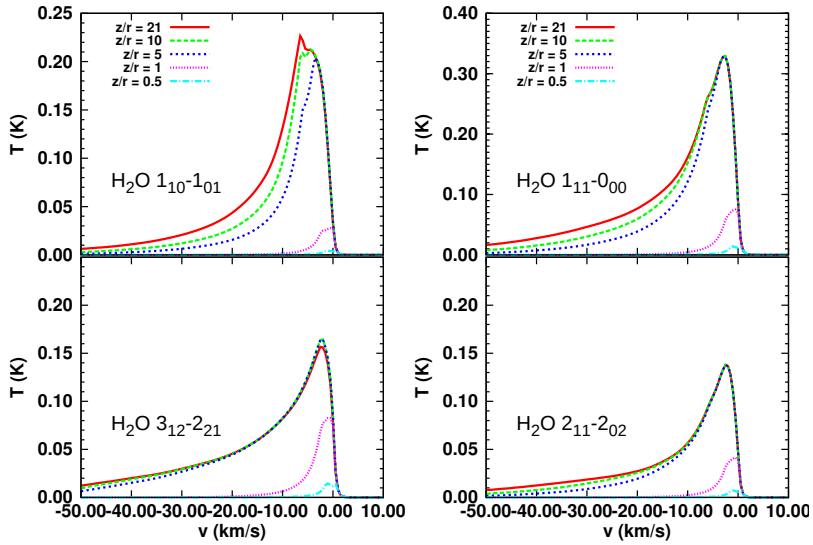


FIGURE 7.11 – *Profils pour quatre raies de* H_2O *pour lesquelles l'émissivité du jet est sommée jusqu'à différentes valeurs limites de* z/r*, avec* $r_0^{\max} = 25\,\mathrm{UA}$ *et* $i = 30°$*.* $z/r = 21$ *correspond à l'ensemble du jet alors que* $z/r = 0.5$ *correspond uniquement à la partie du jet qui est proche de la surface du disque d'accrétion. La distance à l'objet est supposée être* $D = 200\,\mathrm{UA}$*. La raie* $1_{10} - 1_{01}$ *est représentée sous un lobe de 39″, la raie* $3_{12} - 2_{21}$ *sous une lobe de 19″, la raie* $1_{11} - 0_{00}$ *sous un lobe de 20″ et la raie* $2_{11} - 2_{02}$ *sous un lobe de 29″.*

II.2-3 Effet de $r_0^{\max}$ sur le flux total

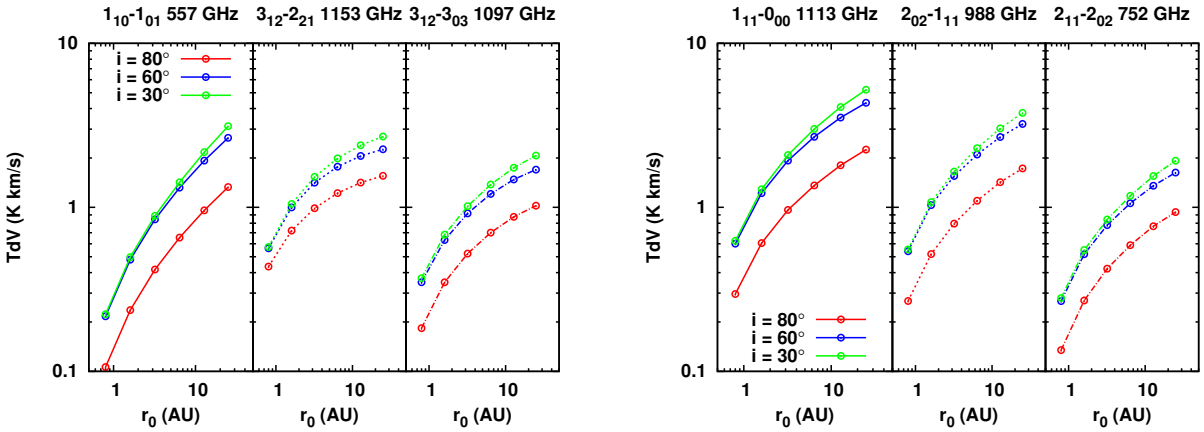


FIGURE 7.12 – *Effet de la variation de* $r_0^{\max}$ *et de i sur le flux total dans les trois raies considérées de o-*H_2O *à gauche et sur les trois raies de p-*H_2O *à droite, pour un seul lobe du jet (qui vaut la moitié du flux total pour le jet complet).*

La Figure 7.12 montre la variation du Tdv (pour le côté decalé vers le bleu du jet seulement) dans les raies de H_2O en fonction de l'accroissement de $r_0^{\max}$ et pour les trois différents angles d'inclinaison. Le flux dans la raie fondamentale de para-H_2O est plus élevé d'un facteur ~ 1.5 que dans la raie fondamentale ortho. Dans les raies excitées les

TABLE 7.2 – *Rapport des Tdv constatés lors de la variation de i, r_0^{max} pour les deux cas de probabilité d'échappement. Les résultats ont été rassemblés pour les raies fondamentales à 557* GHz *et la raie à 1113* GHz *de* H_2O *et pour deux raies excitées des formes ortho et para. Dans les calculs, la distance est fixée à* $D = 200$pc*, le lobe est 20″ et on utilise le modèle de classe 0 avec* $\dot{M}_{acc} = 5 \times 10^{-6} M_\odot\ yr^{-1}$.

H_2O $1_{10} - 1_{01}$, 557 GHz, $E_u/k_B = 61$ K

i : 80° → 30°			r_0^{max} : 25 UA → 3.2 UA		
r_0^{max} (UA)	$\beta(\vec{u})$	$<\beta>$	i (°)	$\beta(\vec{u})$	$<\beta>$
25	2.35	1.12	80	0.32	0.32
12.8	2.26	1.08	60	0.32	0.32
6.4	2.18	1.04	30	0.28	0.28
3.2	2.12	1.01	Moy.	0.31	0.31
Moy.	2.22	1.06			

H_2O $1_{11} - 0_{00}$, 1113 GHz, $E_u/k_B = 53$ K

i : 80° → 30°			r_0^{max} : 25 UA → 3.2 UA		
r_0^{max} (UA)	$\beta(\vec{u})$	$<\beta>$	i (°)	$\beta(\vec{u})$	$<\beta>$
25	2.30	1.09	80	0.43	0.43
12.8	2.30	1.08	60	0.44	0.43
6.4	2.20	1.05	30	0.40	0.41
3.2	2.20	1.01	Moy.	0.42	0.42
Moy.	2.25	1.06			

H_2O $3_{12} - 2_{21}$, 1153 GHz, $E_u/k_B = 250$ K

i : 80° → 30°			r_0^{max} : 25 UA → 3.2 UA		
r_0^{max} (UA)	$\beta(\vec{u})$	$<\beta>$	i (°)	$\beta(\vec{u})$	$<\beta>$
25	1.73	1.00	80	0.61	0.60
12.8	1.69	1.00	60	0.62	0.61
6.4	1.63	1.00	30	0.57	0.61
3.2	1.56	1.00	Moy.	0.60	0.61
Moy.	1.65	1.00			

H_2O $2_{02} - 1_{11}$, 988 GHz

i : 80° → 30°			r_0^{max} : 25 UA → 3.2 UA		
r_0^{max} (UA)	$\beta(\vec{u})$	$<\beta>$	i (°)	$\beta(\vec{u})$	$<\beta>$
25	2.17	1.04	80	0.46	0.46
12.8	2.13	1.03	60	0.48	0.46
6.4	2.09	1.02	30	0.44	0.45
3.2	2.06	1.02	Moy.	0.46	0.46
Moy.	2.11	1.03			

flux pour les deux formes sont équivalents. La pente reflète directement la dépendance de la raie dans l'extension de la zone de lancement du jet. Une pente forte ($1_{10} - 1_{01}$) est associée à une contribution bien répartie des zones contribuant à l'émission dans les différentes parties du jet lancées depuis des r_0 croissants. À l'inverse une pente faible est associée à une émission provenant presque uniquement des régions les plus internes du jet.

Quelque soit l'inclinaison et quelque soient les hypothèses faites sur la probabilité d'échappement des photons, lorsque l'on passe de $r_0^{max} = 3.2$ UA à $r_0^{max} = 25$ UA, le flux intégré est multiplié par un même facteur. La valeur de ce facteur dépend de la raie choisie, valant ~3.3 à 557 GHz, ~2.5 à 1113 GHz, ~1.7 à 1153 GHz et ~2.0 à 988 GHz (Voir Table 7.2). Plus ce facteur est faible et plus ce sont les régions internes qui contribuent au flux total de la raie. La largeur à mi-hauteur de la raie diminue d'un facteur ~5 quand r_0^{max} augmente de 1.6 à 25 UA.

II.3 Effet de l'angle d'inclinaison (i)

II.3-1 Effet de i sur les cartes de brillance et diagrammes PV

L'effet de l'inclinaison sur la forme du jet est présenté par la Figure 7.13. Le jet apparaît plus large quand l'inclinaison de l'axe sur la ligne de visée diminue (plus "pole-on"), par simple effet de projection géométrique. On note aussi que la raie à 557 GHz apparaît plus brillante et plus étendue que la raie fondamentale de la forme para.

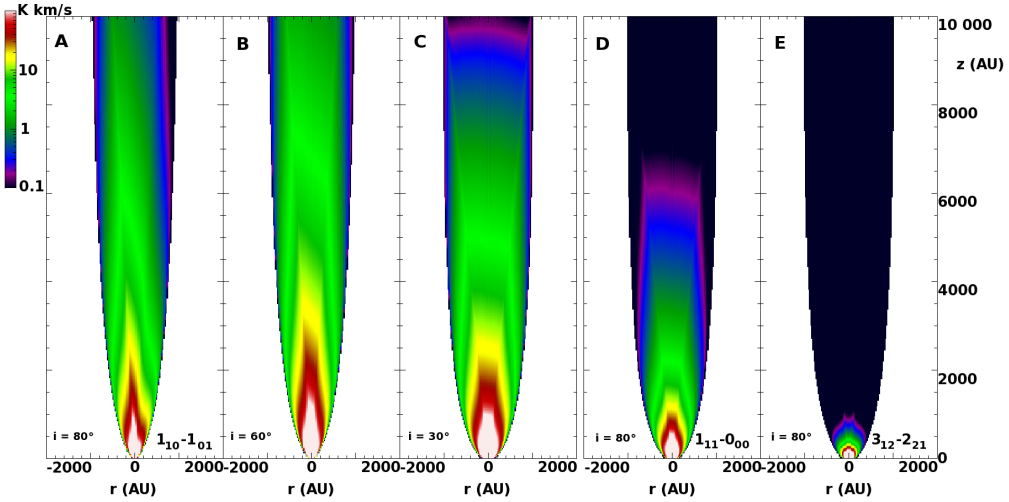


FIGURE 7.13 – *De gauche à droite : carte de brillance du jet (avec le modèle de référence de la classe 0) dans la raie à 557* GHz *de* H_2O *pour* $i = 80°$ *(A),* $60°$ *(B) et* $30°$ *(C). À droite : carte de brillance du jet dans la raie fondamentale de para-*H_2O *à 1113* GHz *à* $i = 80°$ *(D) et dans la raie excitée* $3_{12} - 2_{21}$ *de o-*H_2O *à* $i = 80°$ *(E). Toutes les cartes sont représentées sur la même échelle de couleur.*

La Figure 7.14 présente la variation induite par les trois inclinaisons choisies sur les diagrammes PV dans la raie à 557 GHz de H_2O . La vitesse verticale est multipliée par $\cos(i)$. Aux faibles inclinaisons (i le plus faible) le flux se retrouve projeté à des vitesses plus importantes. Les doubles pics mentionnés précédemment s'écartent mutuellement par effet d'étirement. La Figure 7.14 montre aussi le diagramme PV à $i = 30°$ pour la raie $3_{12} - 2_{21}$ de H_2O. L'émission ne se localise pas identiquement et n'aura ainsi pas la même sensibilité à l'inclinaison dans les profils.

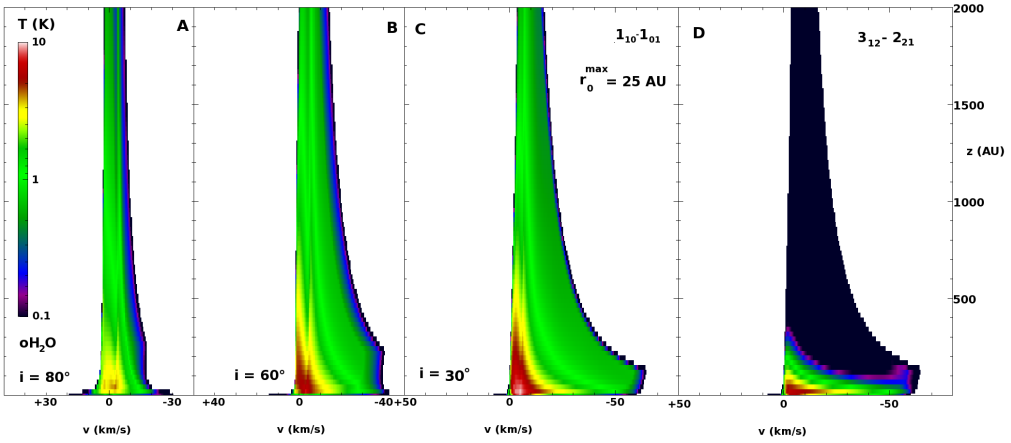


FIGURE 7.14 – *De gauche à droite : diagrammes PV (pour un seul côté du jet) pour la raie de* H_2O *à 557* GHz *sous les trois inclinaisons* $i = 80°$ *(A),* $60°$ *(B) et* $30°$ *(C) (avec le modèle de référence de la classe 0), ainsi que pour la raie* $3_{12} - 2_{21}$ *à* $i = 30°$ *(D) à droite. La même échelle de couleur est utilisée pour tous les diagrammes.*

II.3-2 Effets de *i* sur les profils

Les profils présentés ici, sur les Figures 7.15 et 7.16, supposent toujours que la distance à l'objet est $D = 200$ pc et sont convolués par les mêmes lobes Herschel que précédem-

ment. La Figure 7.15 présente les profils synthétiques obtenus pour la raie à 557 GHz de H_2O, pour un seul lobe du jet et pour les deux lobes additionnés. L'inclinaison influe fortement sur la largeur totale du profil sommant les deux parties du jets. On observe une diminution de l'extension en vitesse (de $\sim \pm 60$km s^{-1} à $\sim \pm 20$km s^{-1}) quand l'inclinaison passe de 30° à 80°. À fort angle d'inclinaison $i = 80°$ il y a superposition en vitesse entre le lobe du jet décalé vers le rouge et celui décalé vers le bleu, ce qui créé un pic important centré sur 0. À contrario pour les faibles inclinaisons ($i = 30°$) les deux parties du profil sont bien distinctes et leur sommation laisse un manque d'émission (un trou) à faible vitesse ($v \sim 0$ km s^{-1}). Dans ce cas le double pic disparaît. La situation à $i = 60°$ est intermédiaire. Elle montre une intensité au pic central plus importante que dans la situation $i = 30°$. Dans ce cas la prédiction du profil aux vitesses proches de 0 est entachée d'erreur due aux simplifications faites pour la sommation des deux parties du profil.

Les profils des raies $3_{12} - 2_{21}$ et $1_{11} - 0_{00}$ pour différentes inclinaisons sont présentés en Figure 7.16. La situation où l'inclinaison est la plus forte présente les ailes les plus étendues ($v_{max} \sim$ 50-70 km s^{-1}) et a une intensité plus élevée. La complexité des profils obtenus implique qu'ils ne peuvent pas être ajusté fiablement par des fonctions gaussienne ou lorentzienne.

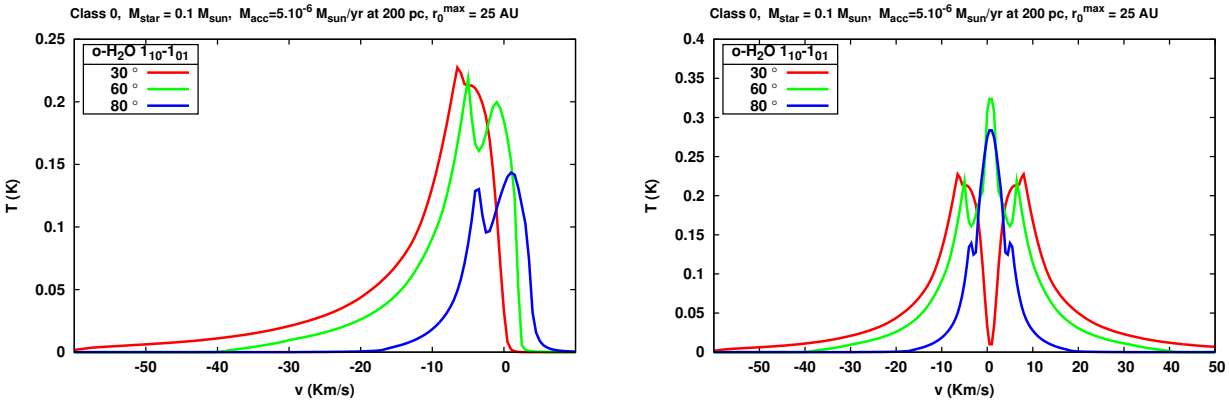


FIGURE 7.15 – *Effet de l'angle d'inclinaison sur la raie à 557* GHz *de* H_2O*, à gauche pour un seul côté du jet, à droite pour les deux côtés du jet. Le modèle utilisé est le modèle de référence de classe 0 avec* $r_0^{max} = 25$ UA.

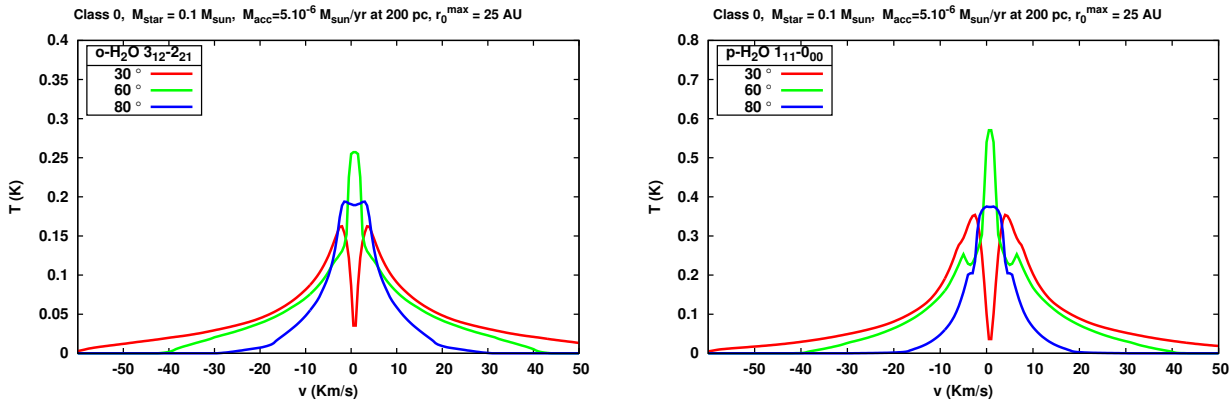


FIGURE 7.16 – *Comme pour la Figure 7.15, effet de l'angle sur la raie à 1153* GHz *($3_{12}-2_{21}$) et sur la raie fondamentale de para-H_2O à 1113* GHz *à droite. Dans les deux cas les deux parties du jet ont été sommées.*

►Les principaux effets de l'inclinaison sur la forme des profils sont donc de modifier :

- La largeur à mi-hauteur, ainsi que n'importe quelle largeur mesurée à un certain seuil.
- Il faut ajouter l'effet de projection du jet dans le lobe de l'instrument qui peut exclure certaines parties du jet et modifier le flux reçu.
- À $i = 30°$ les deux contributions des jets décalés vers le bleu et vers le rouge sont bien séparées ; à $i = 60°$ ceux deux contributions se rapprochent et le pic central est maximal ; à $i = 80°$ ces deux contributions se chevauchent mais le pic à basse vitesse n'est pas forcément maximal.

II.3-3 Effet de i sur le flux total et sur la largeur de la raie

Le flux intégré des raies qui sont émises dans les zones proches de la base du jet, comme dans le cas de la la raie $3_{12}-2_{21}$ est affecté par un facteur ∼1.7 quand i passe de 30° à 80°. Alors que le flux intégré des raies qui sont émises sur de très vastes régions dans le jet, comme les raies issues de niveaux de plus basse énergie, sera plus faible d'un facteur 2 à $i = 80°$ qu'à $i = 30°$ (voir Table 7.2).

On constate sur la Figure 7.12 que l'angle n'a d'influence que sur le flux et peu sur la pente de la courbe obtenue. Les flux pour $i = 30°$ et 60° sont similaires. Ils sont un facteur 2 au dessus des flux obtenus pour $i = 80°$ (Voir Table 7.2). Ce facteur 2 provient principalement de l'anisotropie de $\beta(\vec{u})$. Ce facteur dépend aussi légèrement de la valeur de $r_0^{\max}$, il est plus important à grand $r_0^{\max}$ car de plus vastes régions du jet se retrouvent incluses dans le lobe instrumental lorsque i diminue (Fig. 7.4). Les raies issues de niveaux haut en énergie sont un peu moins affectées par l'inclinaison que les raies issues des niveaux de faible énergie (facteur ∼1.7 au lieu de ∼2.3 pour les raies fondamentales ; dans la Table 7.2).

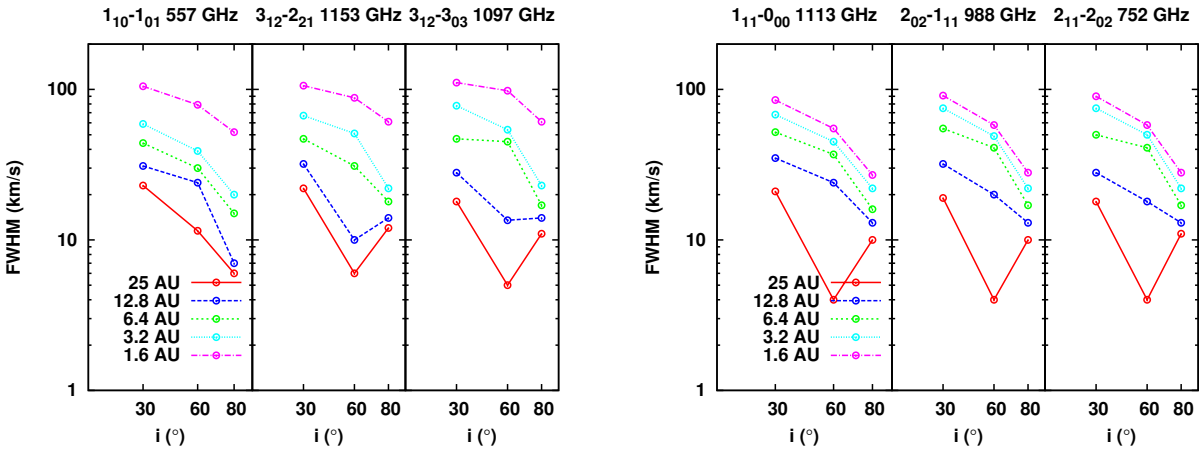


FIGURE 7.17 – *Effet de la variation de l'inclinaison i et de la variation de $r_0^{\max}$ sur la largeur à mi hauteur dans les trois raies de o-H_2O à gauche et sur les trois raies de p-H_2O à droite. La largeur à mi-hauteur est mesurée sur le profil sommant les deux côtés (rouge + bleu) du jet.*

La largeur au pied de la raie est strictement monotone avec i (elle augmente quand i diminue). La Figure 7.17 indique que la largeur à mi-hauteur (FWHM) de la raie varie en général de manière monotone avec l'inclinaison pour les faibles valeurs de $r_0^{\max}$ ($\leq$ 6.4 UA). La FWHM diminue quand i augmente, ce qui correspond bien à un rétrécissement de la raie. Mais pour $i = 80°$ et les plus grandes valeurs de $r_0^{\max} \geq$ 12.8 UA, à cause des effets de chevauchement des profils décalés vers le rouge et vers le bleu, la variation n'est plus monotone en i et la FWHM peut réaugmenter dans certaines raies.

II.4 Effet du taux d'accrétion et de la masse de l'étoile

II.4-1 Effet de $\dot{M}_{\rm acc}$ et $M_\star$ sur les cartes de brillance et les diagrammes PV

On fait varier le taux d'accrétion et la masse de l'étoile. L'évolution d'une proto-étoile de classe 0 vers une classe II ($\dot{M}_{\rm acc}$ diminue et $M_\star$ augmente) implique une diminution de la densité dans le vent de disque ($\propto \dot{M}_{\rm acc} M_\star^{-1/2} \propto \tau_0$) et une exposition plus forte au flux UV photodissociant H_2O. On se place dans le cadre des paramètres de référence $r_0^{\max} = 25$ UA et $\beta = \beta(\vec{u})$ avec un lobe Herschel et $D = 200$ pc.

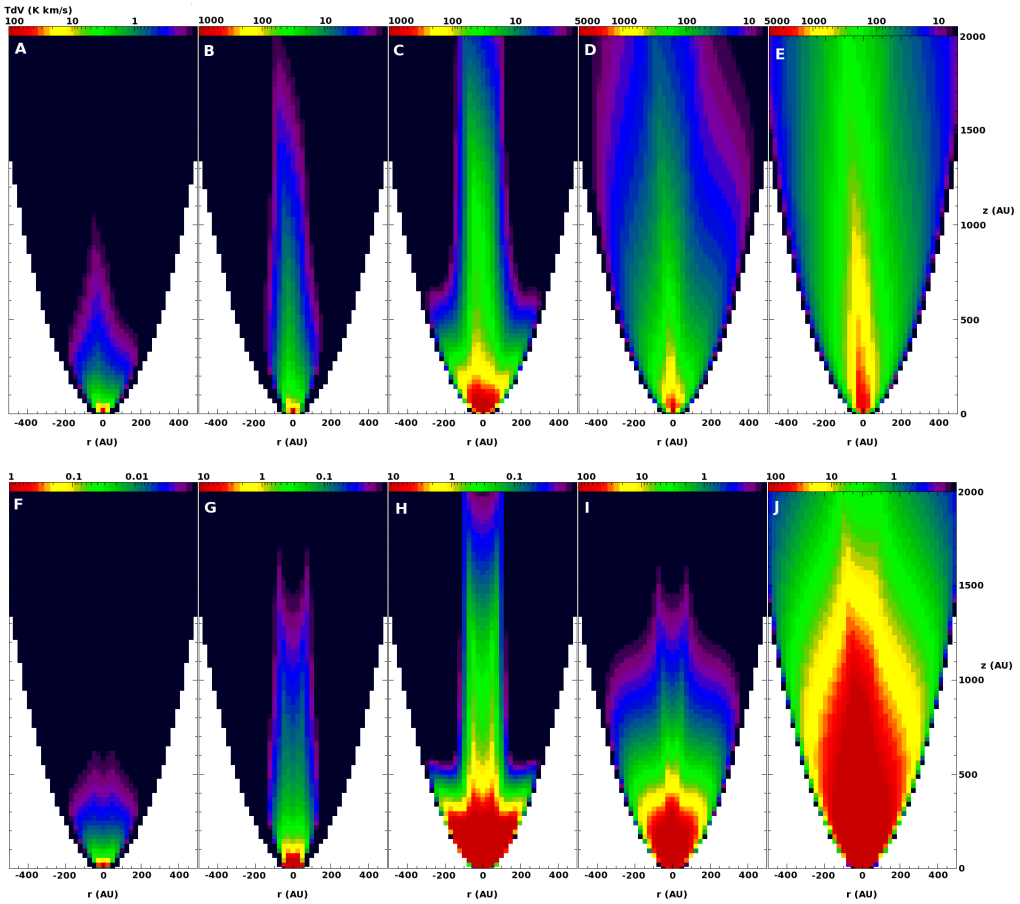


FIGURE 7.18 – *Cartes de brillance à* $i = 80°$ *et* $r_0^{\max} = 25$ UA *comparant l'effet du changement du taux d'accrétion et de la masse de l'étoile. En haut (A à E) dans la raie fondamentale de* o-H_2O *à 557* GHz, *en bas (F à J) dans la raie* $3_{12} - 2_{21}$ *à 1153* GHz. *De gauche à droite : (*$\dot{M}_{\rm acc}$ *augmente et* $M_\star$ *diminue) classe II,*$M_\star = 0.5$, $\dot{M}_{\rm acc} = 1 \times 10^{-7}$ *(A et F) ; classe I standard,* $M_\star = 0.5$, $\dot{M}_{\rm acc} = 1 \times 10^{-6}$ *(B et G) ; classe I extrême,* $M_\star = 0.5$, $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}$ *(C et H) ; classe 0 standard,* $M_\star = 0.1$, $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}$ *(D et I) ; classe 0 extrême,* $M_\star = 0.1$, $\dot{M}_{\rm acc} = 2 \times 10^{-5}$ *(E et J). Pour une raie, deux cartes d'une même classe partagent la même échelle de couleur.*

Classe	$M_\star$ ($M_\odot$)	$\dot{M}_{\rm acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})	$R_{\rm sub}$ (UA)	τ_0
0 standard	0.1	5×10^{-6}	0.31	13
0 extrême	0.1	2×10^{-5}	0.63	52
I standard	0.5	10^{-6}	0.27	1.2
I extrême	0.5	5×10^{-6}	0.64	6
II	0.5	10^{-7}	0.15	0.1

Les cartes de brillance pour deux transitions de H_2O (557 GHz et 1153 GHz) pour les différents modèles de classe 0, I et II (voir Table 2.1 et la table ci-contre) sont présentées sur la Figure 7.18. Les classes 0 sont les plus brillantes en H_2O, en particulier quand on fait augmenter le taux d'accrétion.

Ce sont aussi les objets dans lesquels l'abondance en H_2O est la plus importante. Pour les deux raies présentées, on constate que la brillance s'étire en z le long de l'axe du jet quand $\dot{M}_{\rm acc}$. La raie à 1153 GHz subit un étirement de la zone où la brillance est la plus forte quand on fait augmenter $\dot{M}_{\rm acc}$. Cet étirement est plus important que pour la raie fondamentale. En comparant les cartes pour la classe 0 standard et la classe I extrême

(même taux d'accrétion $\dot{M}_{\rm acc}$) on voit que la zone de brillance maximale s'étire en r à la base du jet quand $M_\star$ augmente.

La Figure 7.19 présente l'évolution du diagramme position-vitesse avec le changement du taux d'accrétion et de $M_\star$ depuis un objet de classe II (à gauche) vers un objet de classe 0 (à droite) dans la raie fondamentale de o-H_2O. On distingue deux caractéristiques importantes qui se retrouvent dans les profils :

– La brillance est plus forte pour les objets jeunes et ayant un fort taux d'accrétion, car dans ces objets la densité est plus élevée. Si la raie est en régime sur-critique ($n(X) > n_{\rm crit}$) alors l'intensité est proportionnelle à $n_{\rm H}^2$, sinon elle est proportionnelle à $n_{\rm H}$.
– Le diagramme PV est plus large pour des objets évolués et ayant un faible taux d'accrétion. Cet élargissement est directement corrélé d'une part à l'augmentation de $M_\star$ donc de la vitesse képlérienne $v_K \propto \sqrt{M_\star}$ et d'autre part à la diminution du rayon de sublimation ce qui permet l'émission depuis des régions (r_0) plus proches de l'étoile qui sont donc à des vitesses plus grandes.

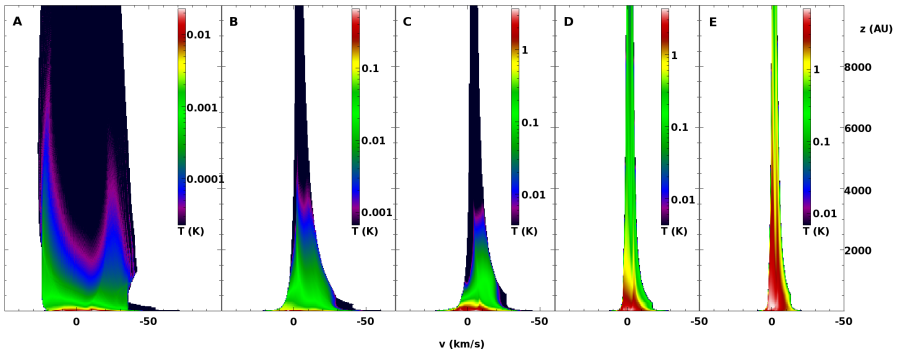


FIGURE 7.19 – *Diagramme PV longitudinaux dans la raie à 557* GHz *pour les différents taux d'accrétion et classes d'étoile, de gauche à droite : classe II (A), classe I (B), classe I extrême (C), classe 0 (D) et classe 0 extrême (E).*

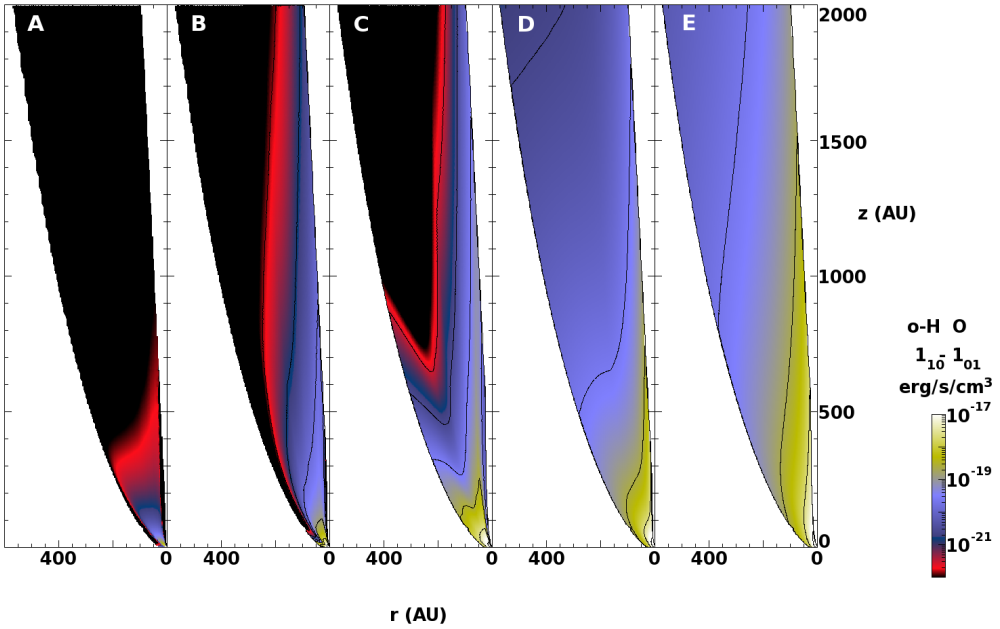


FIGURE 7.20 – *Distribution de l'émissivité multipliée par $<\beta>$ dans une coupe 2D du jet dans la raie $1_{10}-1_{01}$ de H_2O, de gauche à droite : classe II, classe I standard (classe I a)), classe I extrême (classe I b)), classe 0 standard (classe 0 a)) et classe 0 extrême (classe 0 b)).*

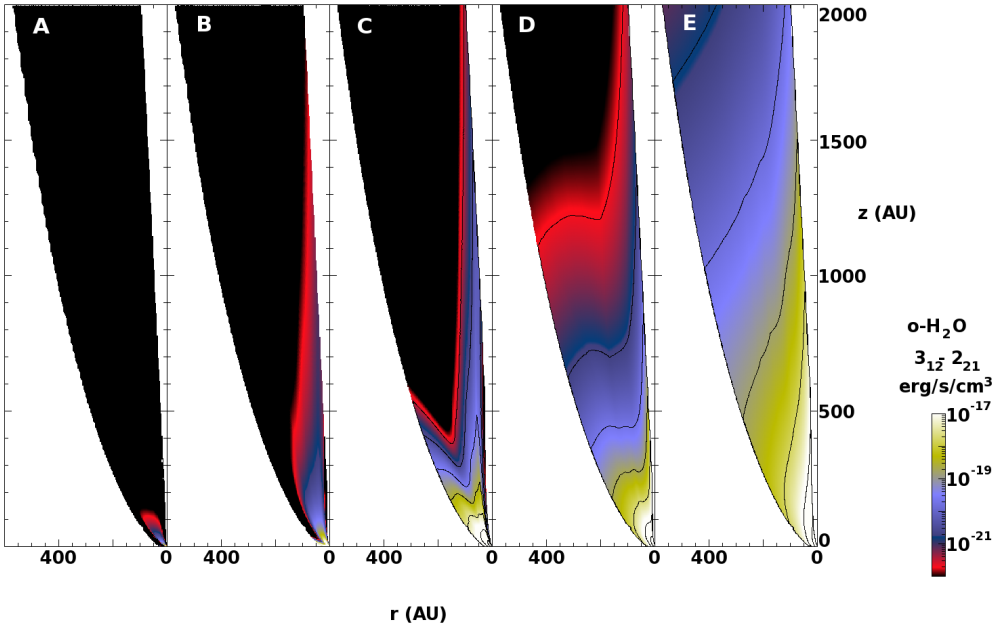


FIGURE 7.21 – *Distribution de l'émissivité dans une même coupe poloïdale 2D du jet dans la raie $3_{12}-2_{21}$ de H_2O, pour les mêmes modèles qu'en Figure 7.20*

La distribution de l'émissivité dans le jet représentée en Figures 7.20 et 7.21 pour la raie fondamentale et une raie excitée de H_2O permet de comprendre les prédictions faites pour les différents modèles. Dans la classe II ($\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-7}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$) H_2O est très peu excitée rotationnellement, la raie fondamentale émet dans une région en forme de bol à la base du jet, comme H_2. Pour un objet de classe I avec un taux d'accrétion dix fois plus

important, l'émission est plus intense et se fait le long de l'axe du jet principalement. Les parties externes du jet ne contribuent pas au flux observé.

Pour un même objet mais avec un taux d'accrétion 5 fois plus important (panneau central sur les Figures 7.20 et 7.21) le flux provient de la même région, mais aussi des parties issues des r_0 les plus grand mais restant proches du plan disque. Cette émission possède aussi la même distribution dans la raie $3_{12} - 2_{21}$. Pour un objet de classe 0 avec un taux d'accrétion de 5×10^{-6}, le jet apparaît plus brillant et l'émissivité diminue graduellement avec l'élévation [2].

Les Figures 7.22 et 7.23 précisent le comportement de l'émissivité le long de deux lignes d'écoulement pour les différentes densités du jet. On s'intéresse à une première ligne d'écoulement plutôt interne à $r_0 = 1$ UA et à une seconde externe $r_0 = 25$ UA. Ces courbes reflètent directement l'émissivité observée sur les coupes 2D (voir Figures 7.20 et 7.21).

Néanmoins les émissivités ont des comportements similaires pour une même classe d'étoile indépendamment du taux d'accrétion. L'emissivité semble ne dépendre que de $M_\star$. Le long des lignes d'écoulement à $r_0 = 1$ UA $n > n_{\rm crit}$, si les raies sont optiquement épaisses ($\beta \ll 1$), l'émissivité suit une émission de corps noir à $T_{\rm ex}$: $B_\nu(T_{\rm ex}) \times (\frac{\nu}{c}\langle\frac{\partial v_s}{\partial s}\rangle)$. Quand r_0 augmente et que la densité diminue, β devient proche de 1 et l'émissivité chute fortement quand la densité du gaz devient inférieure à la densité critique (effet de seuil).

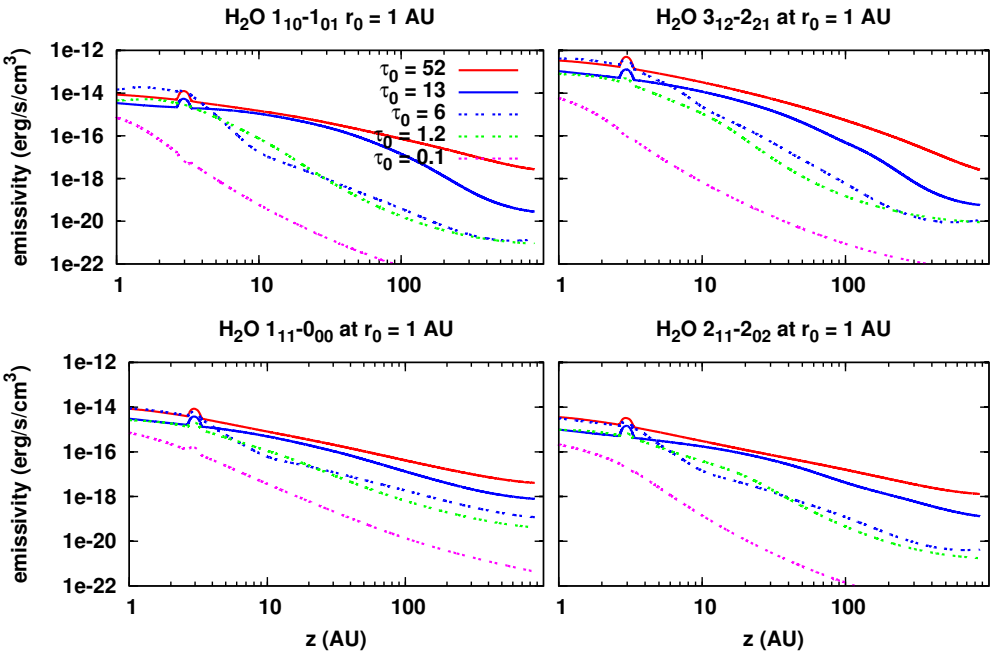


FIGURE 7.22 – *Emissivité multipliée par* $<\beta>$ *dans les raies* $1_{10} - 1_{01}$, $3_{12} - 2_{21}$, $1_{11} - 0_{00}$ *et* $2_{11} - 2_{02}$ *de* H_2O *pour les modèles de classe II, I et 0 de la Figure 7.20 le long de la ligne d'écoulement à 1* UA *(en trait continue* $M_\star = 0.1\,M_\odot$ *et en trait pointillé* $M_\star = 0.5\,M_\odot$*).*

2. Les modèles à $\tau_0 = 13$ et à $\tau_0 = 6$ possèdent le même taux d'accrétion de $5 \times 10^{-6}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, seule la masse de l'étoile diffère (0.1 et 0.5 masses solaires).

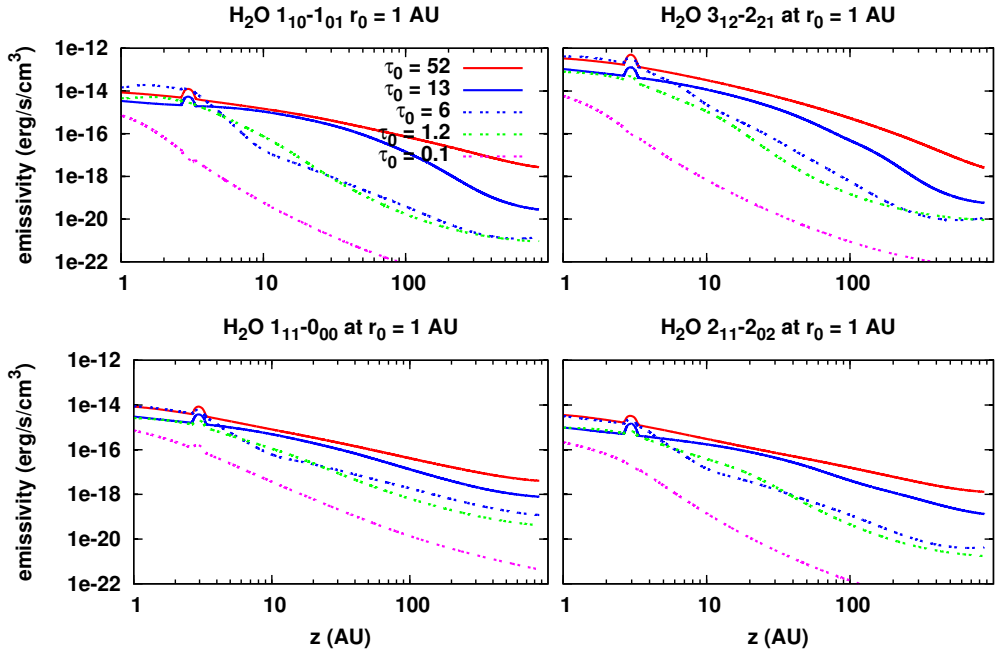


FIGURE 7.23 – *Emissivité multipliée par* $<\beta>$ *dans les raies* $1_{10}-1_{01}$, $3_{12}-2_{21}$, $1_{11}-0_{00}$ *et* $2_{11}-2_{02}$ *de* H_2O *pour les modèles de classe II, I et 0 de la Figure 7.20 le long de la ligne d'écoulement à 25* UA.

II.4-2 Effet de $\dot{M}_{\rm acc}$ et de $M_\star$ sur les profils

Les Figures 7.24 et 7.25 présentent les profils pour les deux raies à 557 GHz et 1153 GHz de o-H_2O pour les différentes classes et taux d'accrétion. Les profils de raies pour les modèles de classe 0 et I ont des morphologies assez différentes, sauf dans le cas de la raie à 1153 GHz où les profils pour la classe 0 standard et la classe I extrême sont semblables, pour la raie à 557 GHz et à $i = 80°$ la classe I extrême reproduit les mêmes ailes que la classe 0. La forme particulière des profils pour la classe II est décomposée selon $r_0^{\rm max}$, i et z/r en Figure 7.26 pour les mêmes transitions. Le modèle de classe I avec le taux d'accrétion de $5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$ est décomposée de la même manière en Figure 7.27.

Les profils obtenus pour la classe I avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$ possèdent de larges ailes ($-80\,{\rm km\ s}^{-1} < v < +80\,{\rm km\ s}^{-1}$ à $i = 30°$), deux fois plus large que la classe 0 avec le même taux d'accrétion, car $M_\star$ augmente d'un facteur 5. Ces ailes sont aussi plus intenses dans la raie fondamentale que dans la raie excitée. Les ailes s'élargissent à plus grande vitesse quand le taux d'accrétion diminue car $R_{\rm sub}$ diminue, mais l'intensité décroît autant. Pour la classe II, le flux est décalé vers le rouge ; l'émission ne provient que de la base du jet où l'expansion et la rotation dominent, d'où la forme en double pic plus marquée avec le second pic situé à une vitesse positive. Ce qui augmente le chevauchement entre les flux émis par le lobe décalé vers le rouge et le lobe le bleu du jet, même à i faible. Ainsi dans le cas de la classe II le profil à 30° est très piqué et à peine plus large qu'à 80°. Les profils H_2O issus des vents de disque pour la classe II ne sont certainement pas détectables. De plus, dans la raie à 557 GHz, les profils des classes II et I (standard) sont certainement dominés par l'émission des parties externes

du disque irradiées. Dans le cas de DG Tau, pour H_2O détecté à la surface du disque, la température au pic détectée et ramenée à 200 pc est de 0.012 K (Podio et al. 2013).

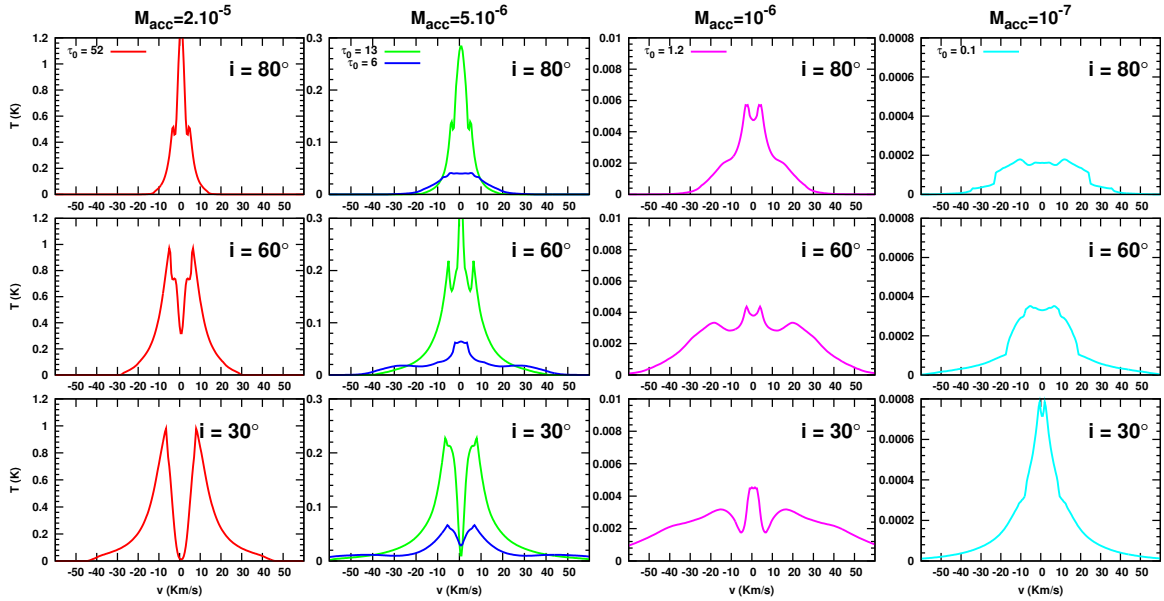


FIGURE 7.24 – *Profils dans la raie* $1_{10} - 1_{01}$ *à* $D = 200$ pc *pour les 5 modèles identifiés par leur valeur de* τ_0 *pour les 3 angles d'inclinaison* $i = 30$, *60 et 80° à* $r_0^{\max} = 25$ UA. *Chaque colonne correspond à un taux d'accrétion* $\dot{M}_{\rm acc}$ *en* $M_\odot$ yr^{-1}.

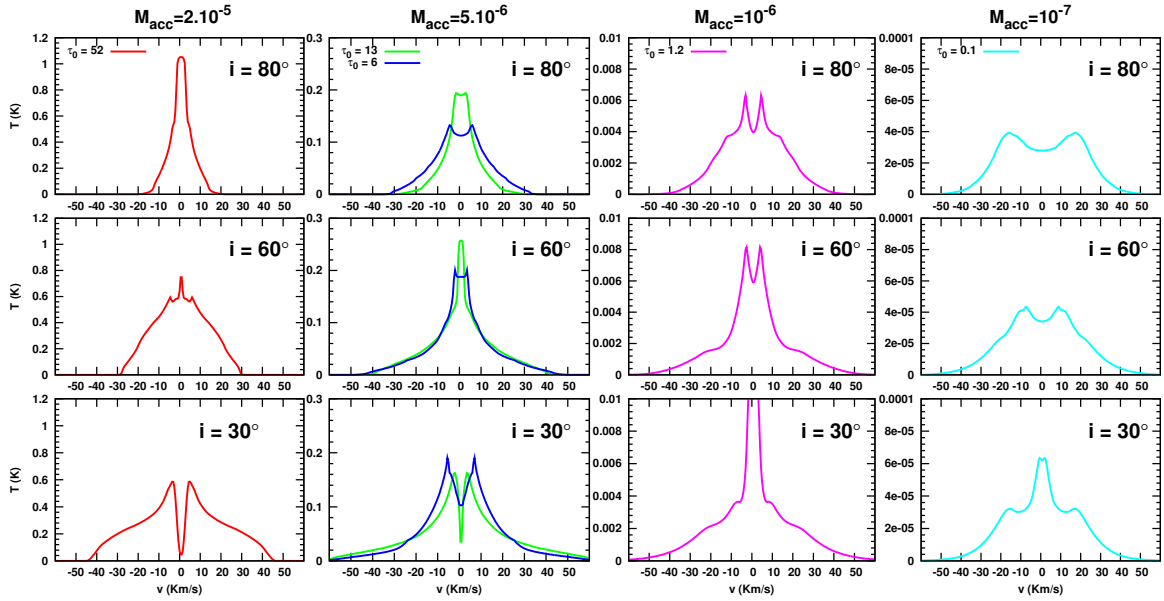


FIGURE 7.25 – *Profils dans la raie* $3_{12} - 2_{21}$ *à* $D = 200$ pc *pour les 5 modèles identifiés par leur valeur de* τ_0 *pour les 3 angles d'inclinaison* $i = 30$, *60 et 80° à* $r_0^{\max} = 25$ UA.

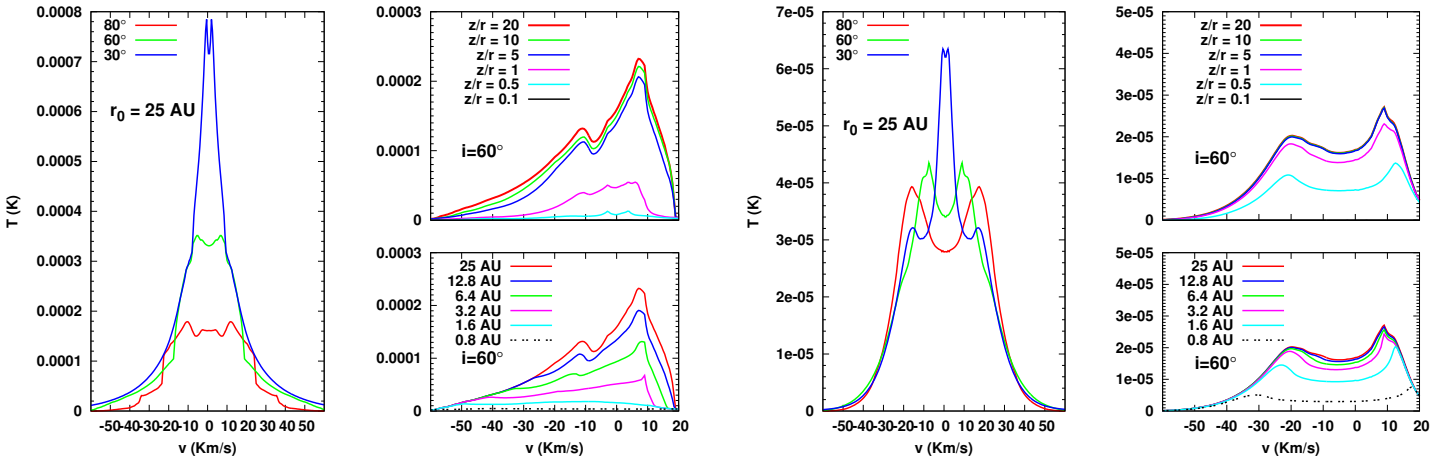


FIGURE 7.26 – *Partie de gauche : Pour la raie à 557* GHz *de* H_2O*, gauche : profils rouge + bleu pour le modèle de classe II à* $r_0^{\max} = 25$ UA *droite : profils pour le seul côté bleu du jet en pour différents* $(z/r)^{\max}$ *en haut et pour différents* $r_0^{\max}$ *en bas à* $i = 60°$*. La distance à la source est fixée à 200* pc*. Les trois figures de la partie de droite sont semblables pour la raie à 1153* GHz*.*

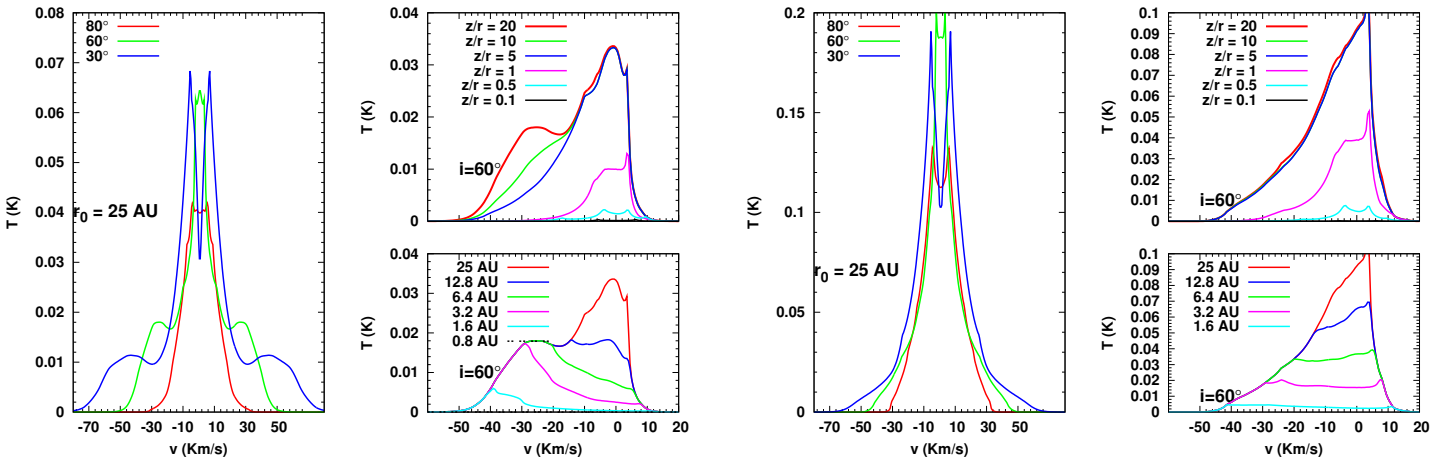


FIGURE 7.27 – *Identique à la Figure 7.26 appliqué au modèle de classe I avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6} M_\odot$ yr^{-1}.

Dans le cas du modèle de classe II, le profil de la raie fondamentale à 557 GHz présente un pic principal à $v \simeq +10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ et un autre pic à $v \simeq -10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ (voir Fig. 7.26). Quelle que soit la vitesse, 90% du flux est émis dans des régions correspondant à $z/r < 5$. Le flux à haute vitesse ($v < -30\,\mathrm{km\,s^{-1}}$) est émis le long des lignes d'écoulement internes $r_0 < 6.4$ UA. Les lignes d'écoulement externes contribuent au flux des deux pics et au flux à basse vitesse et à $v > 0\,\mathrm{km\,s^{-1}}$: 90% du flux est émis par les parties du jet contenues avant $r_0 = 12.8$ UA. Pour la raie excitée à 1153 GHz l'intensité au pic est réduite d'un facteur 10, les ailes sont plus abruptes. 90% du flux est émis dans des régions correspondant à $z/r < 1$ donc très près du disque d'accrétion et pour $r_0 < 3.2$ UA donc près de l'axe du jet. En conséquence, le pic à haute vitesse est décalé à $v \simeq -20\,\mathrm{km\,s^{-1}}$.

Dans le cas du modèle de classe I présenté en Figure 7.27 pour la raie à 557 GHz de H_2O, les profils sommant les deux parties du jet (rouge + bleue) pésentent un pic

principal qui peut être dédoublé à $i = 30°$ mais aussi des renflements au niveaux des ailes, à $v = \pm 50\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ à $i = 30°$ et $v = \pm 30\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ à $i = 60°$. Le renflement à haute vitesse est issu de la contribution des régions du jet situées à $z/r > 5$ mais à $r_0 < 5$ UA. Alors qu'inversement le pic principal à faible vitesse est issu de contributions de régions correspondant à $z/r < 5$ mais $r_0 > 12.8$ UA. Cela tient à la forme en 'V' de la région d'émission visible sur la Figure 7.20, la distribution de l'émission reproduit la distribution de l'abondance en H_2O dans ce jet. La situation est similaire au cas de la raie $3_{13} - 2_{21}$ dans le modèle de *classe 0 standard* avec des ailes larges et un flux issus entièrement de régions à $z/r < 5$, où chaque ligne d'écoulement ajoutée à r_0 croissant ajoute du flux de manière presque uniforme entre 0 km s^{-1} et des vitesses de plus en plus réduites.

II.4-3 Effet de $\dot{M}_{\rm acc}$ et de $M_\star$ sur le flux total et l'intensité au pic

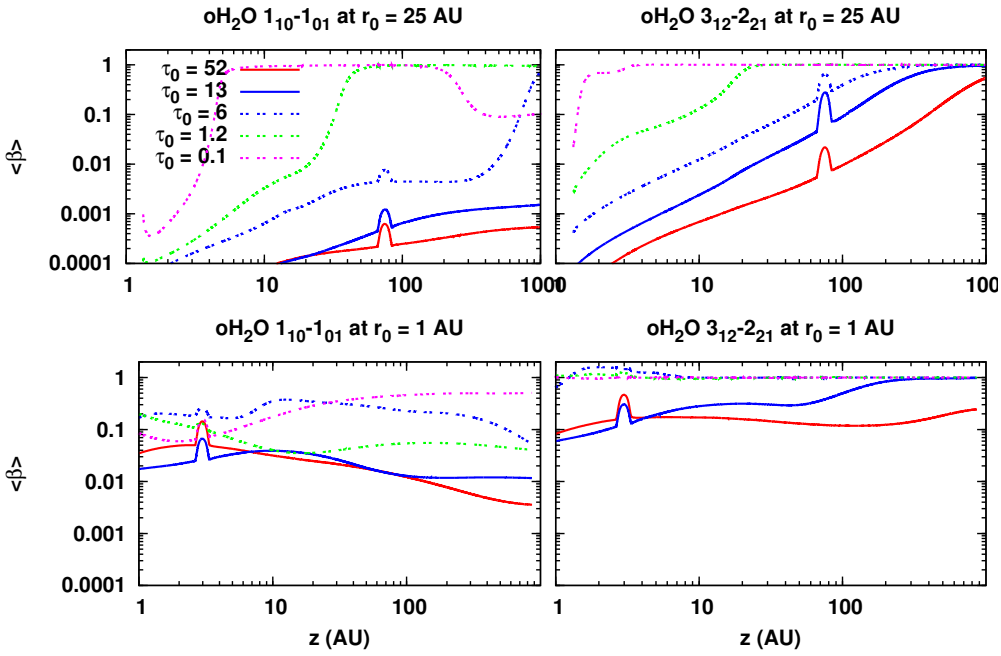


FIGURE 7.28 – *Probabilité d'échappement moyenne* $<\beta>$ *pour la raie à 557* GHz *(à gauche) et la raie à 1153* GHz *de* H_2O *(à droite) et le long de la ligne d'écoulement lancée à* $r_0 = 1$ UA *(en bas) et* $r_0 = 25$ UA *(en haut) pour les différents modèles identifiés par leur valeur de* τ_0.

Quand les collisions dominent les échanges de populations, et si $\beta \sim 1$, la population du niveau rotationnel devient proportionnelle au produit $n_u \times n(X)$, où X est le collisionneur, et donc au carré de la densité du gaz. Inversement quand ce sont les désexcitations radiatives qui dominent, l'émissivité devient proportionnelle à la densité du gaz. Si $\beta \ll 1$ alors l'émissivité est proportionnelle à $B_\nu(T_{\rm ex})$ (ce qui est le cas pour la raie fondamentale, mais les raies plus excitées deviennent optiquement minces plus rapidement que la fondamentale). Sur la Figure 7.28 qui montre la probabilité d'échappement $<\beta>$, on voit que la raie fondamentale de o-H_2O est optiquement épaisse, en particulier sur les lignes d'écoulement externe et à haute altitude dans le jet car le niveau 1_{10} y est d'avantage peuplé. Inversement la raie $3_{12} - 2_{21}$ est optiquement mince pour les différents modèles près de l'axe ou devient optiquement mince dans presque tous les modèles à la fin de la dernière ligne d'écoulement.

Il y a un facteur ~4 au pic entre les cas de classe 0 à $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}$ et $5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$ sur les Figures 7.24 et 7.25. Ce facteur est associé à l'augmentation d'un facteur 4 de la densité. Quand on passe à un objet de classe I ($M_\star = 0.5\,{\rm M}_\odot$) en conservant le même taux d'accrétion, l'intensité au pic diminue d'un facteur 10 quand la densité dans le vent diminue d'un facteur ~ 2 (la densité à la base du jet est $\propto M_\star^{-0.5}$) et que la vitesse augmente d'un facteur 2. Les transitions de H_2O sont beaucoup moins excitées et brillantes pour les objets de classe I. Pour une même masse de l'étoile, lorsque le taux d'accrétion diminue d'un facteur 5 (τ_0 passe à 1.2, ce qui correspond à $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$) le flux est encore divisé par un facteur 10.

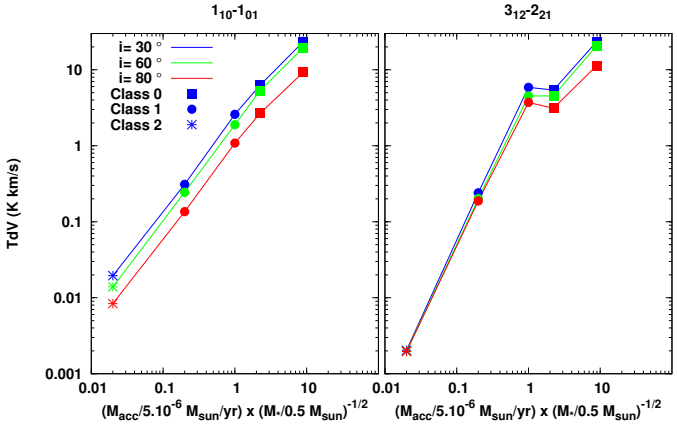


FIGURE 7.29 – *Variation de l'intensité intégrée avec le taux d'accrétion pour les différentes classes et pour* $r_0 = 25\,{\rm UA}$*, pour les transitions* $1_{10}-1_{01}$ *à gauche et* $3_{12}-2_{21}$ *à droite.*

Pour la transition à 557 GHz (Figure 7.29), le Tdv varie linéairement avec le taux d'accrétion, le Tdv est plutôt proportionnel à $n_{\rm H}$. La pente de dépend pas de i, ni de $r_0^{\rm max}$. Pour une transition issue d'un niveau excité (comme la $3_{12}-2_{21}$ à 1153 GHz sur la Figure 7.29) le Tdv varie en $\dot{M}_{\rm acc}^2$ et la pente devient dépendante de l'angle.

Pour la raie $3_{12}-2_{21}$, on observe un plateau dans la courbe du Tdv sur la Figure 7.29 entre les modèles de classe 0 ($M_\star = 0.1\,{\rm M}_\odot$) et de classe 1 extrême ($M_\star = 0.5\,{\rm M}_\odot$) au même taux d'accrétion.

III Comparaison avec les observations H_2O avec Herschel

III.1 Observations dans la raie à 557 GHz

III.1-1 Comparaison Tdv vs $n_{\rm H}(1000\,{\rm UA})$

L'intensité intégrée dans la raie à 557 GHz ramenée à 200 pc en fonction de la densité $n_{\rm H}$ à 1000 UA de l'étoile est montrée sur la Figure 7.30 pour les sources de classe 0 et I observées par Kristensen et al. (2012) et pour les quatre modèles de classes 0 et de classes I. Les barres représentent la variation du flux intégré due aux paramètres $r_0^{\rm max}$ et i. La ligne noire relie les points $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ et $i = 60°$ pour chaque taux d'accrétion. On constate un bon accord entre les points correspondant aux observations et les modèles, en particulier pour les classes 0. La droite reliant les modèles de classe I à celui de *classe 0 standard* a une pente de $n_{\rm H}^{1.1}$, et la pente entre les deux modèles de classe 0 suit $n_{\rm H}^1$.

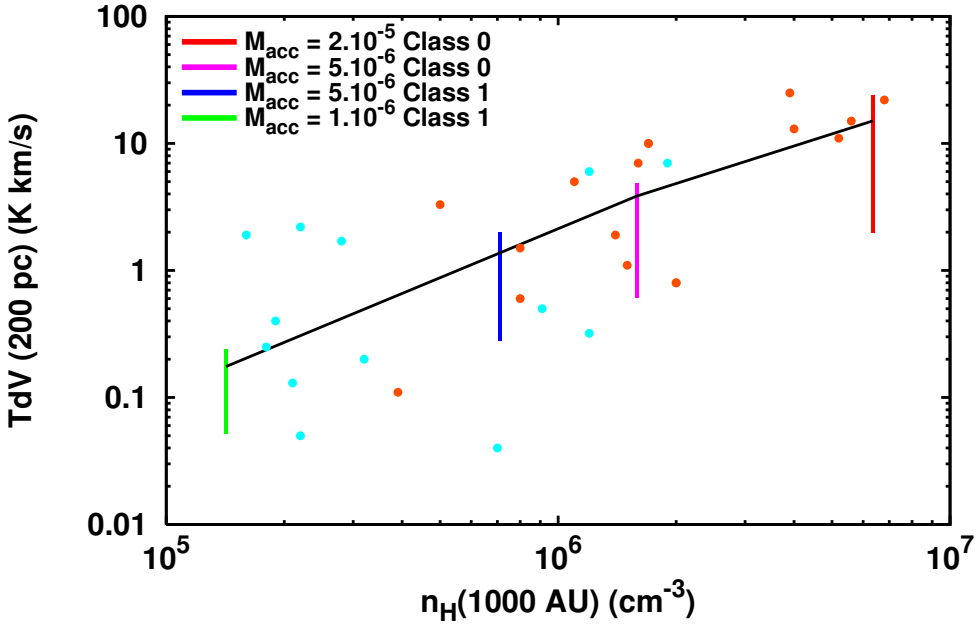


FIGURE 7.30 – *Représentation de l'intensité intégrée ramenée à* $D = 200\,\mathrm{pc}$ *en fonction de la densité* n_H *à 1000* UA *d'après Kristensen et al. (2012), où la densité est calculée comme* $n_0(1000\,\mathrm{UA})$ *où* n_0 *est la densité d'une enveloppe en chute libre avec* $M_{\mathrm{free-fall}} = \dot{M}_{\mathrm{acc}}$ *(Voir Chapitre 3). Les points bleus correspondent aux sources de classe I et les points oranges aux sources de classe 0.*

III.1-2 Comparaison $T\mathrm{d}v$ vs Δv

On effectue une comparaison entre les prédictions et les profils (intensité, largeur de raie) observés pour des objets de classe 0 et I dans la raie à 557 GHz par Kristensen et al. (2012) avec Herschel/HIFI. Chaque modèle correspond à un ensemble de paramètres ($\dot{M}_{\mathrm{acc}}$, r_0^{max}, i, $M_\star$). Pour chaque objet observé on a ensuite cherché dans notre grille de modèles lequel s'ajuste pour reproduire au mieux les profils de raies à 557 GHz y compris le flux total intégré et la largeur de raie. Le lobe de Herschel/HIFI à 557 GHz est de 39″ (Roelfsema et al. 2012) ce qui représente un lobe projeté de 9165 UA à $D = 235\,\mathrm{pc}$.

La liste des objets étudiés est donnée en Table 7.3. Dans cette liste figurent aussi quelques sources catégorisées comme classe I par Kristensen et al. (2012) mais qui sont assez bien reproduites par des modèles de classe 0.

Modèle	$\dot{M}_{\mathrm{acc}}$ ($\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$)	$M_\star$ ($\mathrm{M_\odot}$)	L_{tot} ($\mathrm{L_\odot}$)
Classe 0 standard	5×10^{-6}	0.1	7
Classe 0 extrême	2×10^{-5}	0.1	23
Classe I strandard	10^{-6}	0.5	7
Classe I extrême	5×10^{-6}	0.5	28

◃ La table ci-contre résume et nomme les différents modèles de classe 0 et I mentionnés dans la suite.

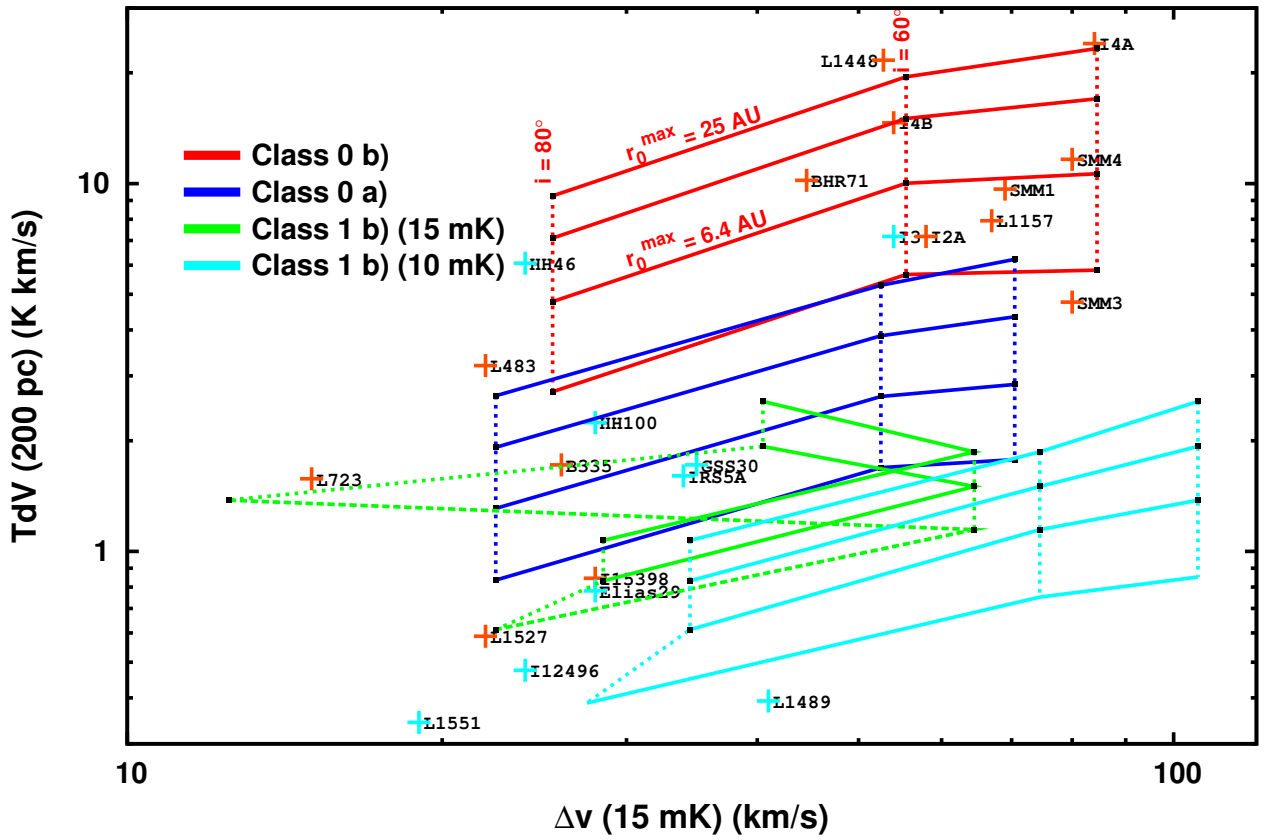


FIGURE 7.31 – *Représentation du* Tdv *de la raie à 557* GHz *ramené à* $D = 200$ pc *en fonction de la largeur mesurée à 15* m*K (pour les deux modèles de classe 0 et le modèle de classe I, voir ci-dessous) ou à 10* m*K (modèle de classe I). Comparaison entre les observations pour les classes 0 (croix oranges) et de classe I (croix bleus) avec les grilles de modèles de classe 0 et I. Chaque modèle synthétique se situe sur un noeud de la grille. Les lignes verticales correspondent à une inclinaison constante :* $i = 80°$, $60°$ *et* $i = 30°$ *de gauche à droite. Les lignes horizontales corespondent à une valeur constante de* $r_0^{\max}$ *: de 25* UA*, 12.8* UA*, 6.4* UA *et 3.2* UA *de haut en bas. Le modèle Class 0 b) désigne le modèle de classe 0 extrême, class 0 a) désigne le modèle de classe 0 standard, Class I b) désigne le modèle de classe I extrême.*

Dans la Figure 7.31, on commence par représenter les différentes sources de la Table 7.3 ainsi que la grille de modèle $(r_0^{\max}, i)$ pour les classe 0 et la classe I dans un graphique traçant l'intensité intégrée dans la raie à 557 GHz en fonction de la largeur de la raie Δv. L'intensité intégrée est ramenée à $D = 200$ pc pour tous les objets observés en supposant une dépendance de Tdv en D^{-2}, les modèles sont eux directement calculé à 200 pc et Δv est mesurée à $T = 15$ mK sur les profils synthétiques de classe 0 et 10 mK pour la classe I. Cette valeur de 15 mK correspond approximativement aux 4-σ auxquels sont mesurés les largeurs de raies par (Kristensen et al. 2012) pour les sources observées (où on a exclu les "bullets" à très haute vitesse dans L1448-MM et BHR71). On choisit Δv plutôt que la FWHM car dans les modèles, cette dernière dépend fortement de la contribution d'une enveloppe et de $r_0^{\max}$ (dans les observations) alors que Δv dépend seulement de i et pas de $r_0^{\max}$ (sauf aux faibles flux), ce qui permet de séparer le rôle de ces deux paramètres.

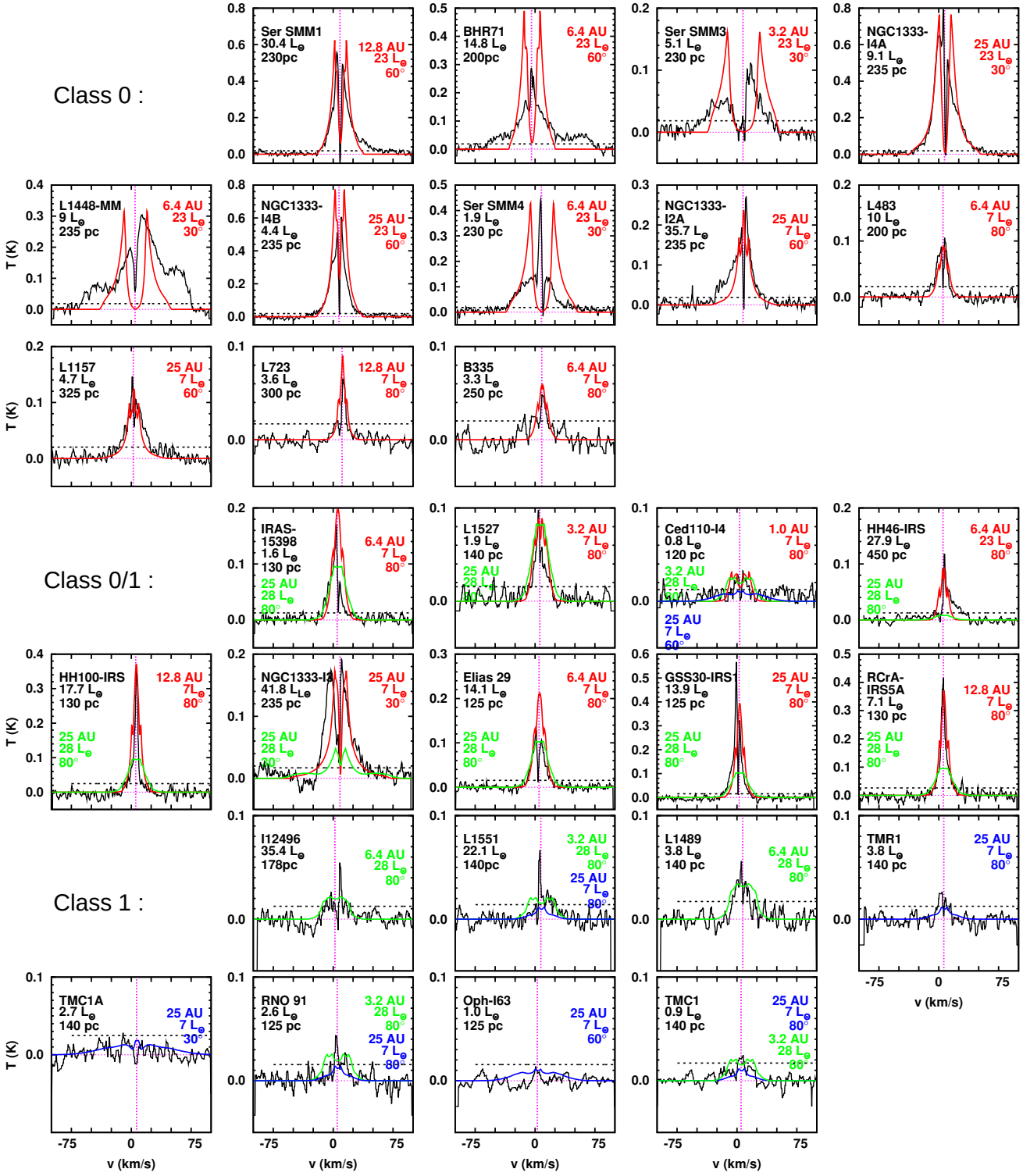


FIGURE 7.32 – *Comparaison des profils dans la raie à 557* GHz *observés par Kristensen et al. (2012) (en noir) avec les modèles de classe 0 (en rouge,* $L = 23\,L_\odot$ *pour* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}$ *et* $7\,L_\odot$ *pour* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot\ {\rm yr}^{-1}$*) ajustant au mieux les observations, modèles alternatifs de classe I forte (*$T{\rm dv}(200{\rm pc}) > 0.5$*,* $L = 28\,L_\odot$ *pour* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot\ {\rm yr}^{-1}$ *, en vert) et modèles de classe I standard (en bleu,* $L = 7\,L_\odot$ *pour* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,M_\odot\ {\rm yr}^{-1}$*). Les profils prédits ont été centrés sur la vitesse* $v_{\rm LSR}$ *de chaque source. Le seuil auquel est mesuré la largeur de la raie dans les observations de la Figure 7.31 est indiqué en pointillés noir sur chaque figure.*

TABLE 7.3 – *Objets dont les profils peuvent être reproduits par des modèles de classe 0 et des modèles de classe I.*

Sources	Observations			Modèles de classe 0			
	d (pc)	L_{bol} ($L_\odot$)	Tdv (K km s^{-1})	L_{tot} ($L_\odot$)	r_0^{max} (UA)	i (°)	$\dot{M}_{acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})
Classe 0							
Ser SMM1	230	30.4	6.62	23	12.8	60	2×10^{-5}
BHR71	200	14.8	7.21	23	6.4	60	2×10^{-5}
Ser SMM3	230	5.1	5.92	23	3.2	30	2×10^{-5}
NGC1333-IRAS 4A	235	9.1	15.02	23	25	30	2×10^{-5}
L1448-MM	235	9	15.68	23	6.4	30	2×10^{-5}
NGC1333-IRAS 4B	235	4.4	10.07	23	25.0	60	2×10^{-5}
SerSMM4	230	1.9	7.72	23	3.2	30	2×10^{-5}
NGC1333-IRAS 2A	235	35.7	4.49	7	25	60	5×10^{-6}
L483	200	10	*1.62*	7	6.4	80	5×10^{-6}
L1157	325	4.7	2.64	7	25	60	5×10^{-6}
L723	300	3.6	0.68	7	12.8	80	5×10^{-6}
B335	250	3.3	1.15	7	6.4	80	5×10^{-6}
L1527	140	1.9	*0.99*	7	3.2	80	5×10^{-6}
I15398	130	1.6	*1.78*	7	6.4	80	5×10^{-6}
Ced110	120	0.8	*0.35*	7	1.0	80	5×10^{-6}
Classe I							
HH46-IRS	450	27.9	1.23	23	6.4	80	2×10^{-5}
HH100-IRS	130	17.7	*1.06*	23	3.2	80	2×10^{-5}
NGC133-IRAS 3	235	41.8	6.22	7	25	30	5×10^{-6}
Elias 29	125	14.1	*2.25*	7	6.4	80	5×10^{-6}
GSS30-IRS1	125	13.9	*3.32*	7	25	80	5×10^{-6}
RCrA–IRS5A	130	7.1	*1.93*	7	12.8	80	5×10^{-6}

Sources	Observations			Modèles de classe I			
	d (pc)	L_{bol} ($L_\odot$)	Tdv (K km s^{-1})	L_{tot} ($L_\odot$)	r_0^{max} (UA)	i (°)	$\dot{M}_{acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})
Classe 0							
L1527	140	1.9	*0.99*	28	25	80	5×10^{-6}
I15398	130	1.6	*1.78*	28	25	80	5×10^{-6}
Ced110	120	0.8	*0.35*	28	3.2	80	5×10^{-6}
Classe I							
IRAS12496	178	35.4	0.58	28	6.4	80	5×10^{-6}
L1551-IRS5	140	22.1	0.66	28	3.2	80	5×10^{-6}
RCrA–IRS5A	130	7.1	*1.93*	28	25	80	5×10^{-6}
L1489	140	3.8	0.87	28	6.4	80	5×10^{-6}
TMR1	140	3.8	*0.36*	7	25	80	10^{-6}
TMC1A	140	2.7	< 0.04	7	25	30	10^{-6}
RNO91	125	2.6	*0.50*	28	3.2	80	5×10^{-6}
Oph-IRS3	125	1.0	*0.09*	7	25	60	10^{-6}
TMC1	140	0.9	0.49	7	25	80	10^{-6}

Notes. Les sources sont triées dans le même ordre que dans la Figure 7.32. La luminosité de modèle $L_{tot} = L_\star + L_{hs}$ est comparée avec la luminosité bolométrique L_{bol} observée par Kristensen et al. (2012, Table 1). Le Tdv donné ici correspond à la composante *broad* observée par Kristensen et al. (2012, Table A.2), sauf quand Tdv est noté en *italique* dans ce cas il correspond à la composante *medium* car le *broad* n'est pas définie. Dans cette table, on utilise la même classification classe I / classe 0 que celle proposée par Kristensen et al. (2012). La première partie de la table compare les observations aux modèles de classe 0 et la seconde aux modèles de classe I. La masse de l'étoile dans les modèles de classe 0 est $M_\star = 0.1\,M_\odot$ et $M_\star = 0.5\,M_\odot$ dans les modèles de classe I.

On a représenté la grille obtenue pour le modèle de *classe I extrême* avec un seuil à 15 mK sur la Figure 7.31 ainsi que celle associée au même modèle mais avec un seuil plus bas à 10 mK. Pour un modèle donné, quand on diminue le seuil, la grille obtenue a tendance à devenir plus régulière (à l'instar des grilles de classe 0), mais aussi à se décaler vers des Δv plus grand. Si le seuil est proche de la hauteur maximale du profil alors Δv devient dépendant de $r_0^{\max}$ de manière non triviale, comme c'est le cas pour un seuil à 15 mK pour le modèle de *classe I extrême* ; ce qui rend la grille non lisible. Le modèle de *classe I standard* a une intensité au pic inférieure à 15 ou 10 mK, ainsi il ne peut pas apparaître sur la Figure 7.31. Le seuil abaissé à 10 mK augmente un peu le Δv par rapport aux valeurs mesurées, mais ne change pas le Tdv.

Cette figure (Fig.7.31)montre :

- que les modèles se situent dans la même région que les observations pour la classe correspondante,
- qu'il existe une certaine dégénérescence dans les prédictions en terme de (Δv,Tdv) car le segment correspondant à $r_0^{\max} = 25$ UA pour le modèle de *classe 0 standard* se superpose à celui correspondant à $r_0^{\max} = 3.2$ UA pour le modèle de *classe 0 extrême*. De même, la grille pour le modèle de *classe I extrême* intersecte celle du modèle de *classe 0 strandard*. Il faut donc faire une comparaison détaillée des profils observés et prédit pour déterminer les meilleurs paramètres (Fig 7.32).

La Figure 7.31 indique aussi que certaines sources classifiées comme classe I sont plus proches de la grille de *classe 0 extrême* (HH46, IRAS 3A). L'ajustement d'autres objets tel que L483, Ser-SMM3, L723, ou HH100 semble plus ambigüe entre les modèles de classe 0 et de classe I.

III.1-3 Ajustement des profils

Sources de classes 0

Les profils observés pour les différents objets (voir Table 7.3) sont comparés avec le(s) profil(s) synthétique(s) ajustant au mieux chaque observation sur la Figure 7.32. Tous les profils sont calculés dans un lobe de 39″ à la distance de chaque source et centrés sur la vitesse de la source v_{LSR}. L'ajustement est réalisé par une méthode des moindres carrés sur les profils en accordant plus de poids aux ailes des raies et en tenant compte de la hauteur maximale ($T_{\max}$) et du flux intégré Tdv. Seuls des ajustements avec les modèles de classe 0 ont été effectués. Sur la figure, les paramètres du modèle sont récapitulés à droite et le taux d'accrétion qui détermine $L_{\rm tot}$.

Ces comparaisons montrent que d'une manière générale le modèle de vent de disque parvient à reproduire les observations de manière satisfaisante, compte tenu de la grille de paramètres clairsemée et du fait que l'on n'utilise qu'une seule solution MHD de vent de disque dont les paramètres ne sont pas spécialement ajustés sur ces objets. On peut effectuer le parallèle entre les Figures 7.31 et 7.32 et on constate qu'elles sont en accords dans une majorité de cas, comme par exemple pour NGC1333 IRAS 4A ou Ser SMM1. Mais pour d'autres objets elle sont moins bien accordées, comme par exemple L483 qui plus est proche du modèle de *classe 0 extrême* avec $r_0^{\max} = 3.2$ UA et $i = 80°$, mais dont le profil est mieux ajusté par le modèle de *classe 0 standard* avec $r_0^{\max} = 6.4$ UA et $i = 80°$ dans la Figure 7.31. L1157 est plus proche du modèle de *classe 0 extrême* avec des faibles $r_0^{\max}$ dans la Figure 7.31, mais est mieux ajusté par le modèle de *classe 0 standard* avec $r_0^{\max} = 25$ UA. Pour L1527 le modèle alternatif de *classe I extrême* avec $r_0^{\max} = 25$ UA ajuste aussi bien les observations sur la Figure 7.32

que le modèle de *classe 0 strandard* à $r_0^{\max} = 3.2$ UA (les deux modèles sont à $i = 80°$), sur la Figure 7.31, L1527 est effectivement plus proche du modèle de *classe I extrême*. La situation est similaire pour IRAS 15398.

Les modèles ne reproduisent pas les excès de flux à très haute vitesses (*bullets*) observés sur les profils de BHR71 ($v_{\rm bullet} > v_{\max}(R_{\rm sub})$) et L1448-MM ($v_{\rm bullet} \simeq v_{\max}(R_{\rm sub})$). Il est possible que ce flux provienne de chocs internes au jet se produisant à très grande vitesse. Il est aussi possible que ce flux soit produit le long de lignes d'écoulement lancées à l'intérieur du rayon de sublimation des poussières et qui ont donc des vitesses plus élevées, lignes d'écoulement qui ne sont pas incluses dans notre modèle.

Sources de classes 0/I

Sur la Figure 7.32 les trois sources de classe 0 Ced110-IRS4, L1527 et IRAS 15398 ont été ajoutées et comparées aux profils de classe I. Les paramètres des modèles sont récapitulés dans la Table 7.3.

Ced110-I4 est la seule source identifiée comme classe 0 qui soit surestimée par tous les modèles de classe 0, même un modèle avec $r_0^{\max} = 1$ UA à $i = 80°$ donne un profil trop large. Ced110-I4 est d'ailleurs hors du cadre de la Figure 7.31. Selon les observations de Lehtinen et al. (2001) et les critères de distinction entre classes 0 et I de André et al. (2000b), Ced110 est à la limite entre une proto-étoile de classe I et 0. On peut considérer cet objet comme une classe I jeune. Le modèle de *classe I extrême* prédit aussi des ailes trop larges pour Ced110-I4. Le modèle de *classe I standard* sous estime le flux dans le profil, quelque soit l'angle d'inclinaison.

Les deux classes I avec un $T\mathrm{dv}(200\,\mathrm{pc}) > 5\,\mathrm{K\,km\,s^{-1}}$ (HH46 et IRAS 3A) ne sont pas reproduites par les modèles de classe I.

Sources de classes I

Pour les quatre classes I avec un $T\mathrm{dv}(200\,\mathrm{pc})$ compris entre 0.5 et 5 $\mathrm{K\,km\,s^{-1}}$, à la fois le modèle de *classe 0 standard* et le modèle de *classe I extrême* parviennent à reproduire le profil observé de manière satisfaisante (voir Fig. 7.32). Dans le cas de Elias 29 le modèle de classe I reproduit bien les observations alors que le modèle de classe 0 prédit un pic qui n'est pas observé. Inversement pour GSS30-IRS, RCrA-IRS5A et HH100-IRS le modèle de classe 0 reproduit mieux les observations en terme d'ailes et de pic.

La comparaison entre les sources de classe I plus faibles avec $T\mathrm{dv}(200\,\mathrm{pc}) < 0.5\,\mathrm{K\,km\,s^{-1}}$ observée par Kristensen et al. (2012) et les modèles de classe I sont aussi présentés sur la Figure 7.32.

On constate que l'ajustement est correct pour IRAS12496, L1551-IRS5 et L1489. Les modèles reproduisent l'aile décalée vers le bleu pour L1527 et IRAS15398 (classe 0) TMC1A ou Oph-I63 sont des exemples de sources où il est difficile de décider compte tenu de la faiblesse du signal par rapport au bruit. Pour TMC1 le modèle de *classe I extrême* donne un profil trop large alors que le modèle de *classe I standard*, même à $r_0^{\max} = 25$ UA sous estime les ailes, néanmoins la forme correspond d'avantage au profil observé.

La forme des profils prédits pour les classes I à $i = 60°$ et 30° possède des ailes très larges avec des pics secondaires (voir Fig. 7.24). Cette forme des raies aux faibles angles

d'inclinaison couplée au bruit sur les observations conduit à ce que les modèles avec $i = 80°$ soit le plus présent sur les ajustements. On pourrait obtenir des profils plus étroits avec $M_\star < 0.5\,M_\star$.

III.2 Observations dans les raies excitées de H_2O

III.2-1 Profils des raies excitées de H_2O pour L1448-MM

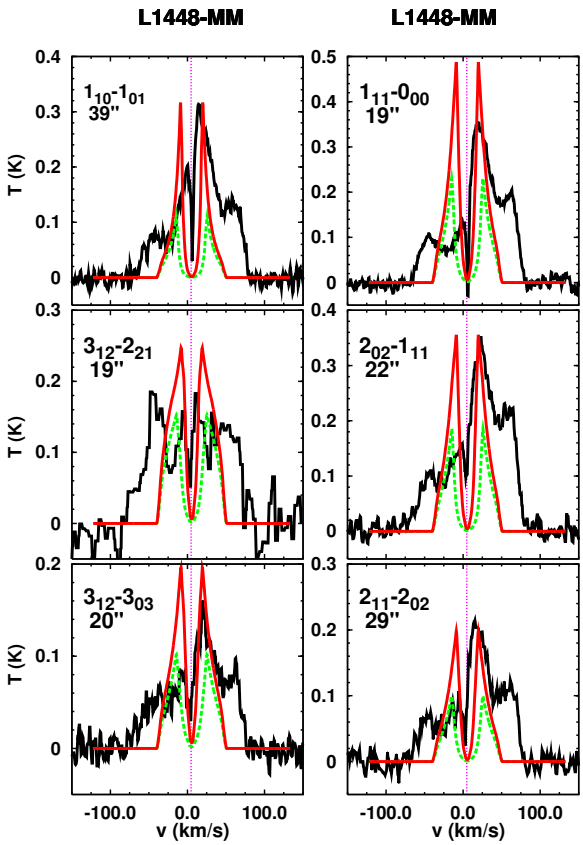


Figure 7.33 – *Comparaison entre le modèle ajustant les observations de L1448-MM : modèle de* ***classe 0 extrême*** *avec* $i = 30°$ *et* $r_0^{\max} = 6.4$ UA *en rouge et* $r_0^{\max} = 3.2$ UA *en vert. Les observations Herschel/HIFI de Kristensen et al. (2011) sont en noir. Les profils ont été calculés en utilisant le lobe correspondant pour chaque raie.*

On complète les comparaisons entre modèles et observations pour L1448-MM en utilisant d'autres raies de H_2O qui ont été observées par Kristensen et al. (2011). La Figure 7.33 présente la comparaison entre cinq raies supplémentaires de H_2O (ortho et para) avec le modèle de *classe 0 extrême* en utilisant deux valeurs de $r_0^{\max}$ différentes. L'ajustement réalisé à 557 GHz pour la Figure 7.32 ($r_0^{\max} = 6.4$ UA) a tenu compte des six raies présentées ici.

L1448 est un objet de classe 0 typique d'une proto-étoile présentant de l'émission à très haute vitesse. Cette émission n'est pas reproduite par le modèle. Par contre la composante centrale large (FWHM $\sim$ 50km s^{-1}) est assez bien reproduite pour toutes les raies. Le côté bleu est mieux reproduit avec $r_0^{\max} = 3.2$ UA. Les intensités intégrées pour chaque raie, observée et prédite, sont données dans la Table 7.4

III.2-2 Profils des raies excitées de H_2O pour IRAS 2A, 4A et 4B

Les observations de NGC1333 IRAS 2A, 4A et 4B réalisées avec Herschel/HIFI par Kristensen et al. (2010) sont comparées aux modèles de classe 0 qui reproduisent la raie à 557 GHz pour deux valeurs de $r_0^{\max}$ 25 UA (rouge) et 6.4 UA (vert) sur la Figure 7.34.

Sur la Figure 7.34 le modèle parvient à reproduire les ailes des profils observés pour IRAS 4B et IRAS 4A, à l'exception de la raie $3_{12} - 2_{21}$ et de la raie $1_{11} - 0_{00}$ pour laquelle les ailes sont un peu surrestimées. Pour IRAS 2A, seule la partie décalée vers

TABLE 7.4 – *Intensité intégrée observée et prédite pour L1448-MM ($r_0^{\max} = 6.4$ UA)*

Raie	E_{up}/k_B^c (K)	Lobe ($''$)	L1448-MM	
			prédictions	observations[a]
$1_{10} - 1_{01}$	34.2	39	17.1	14.4 (15.68[b])
$1_{11} - 0_{00}$	53.4	19	12.0	14.76
$2_{02} - 1_{11}$	100.8	22	12.6	17.59
$2_{11} - 2_{02}$	136.9	29	13.2	9.91
$3_{12} - 2_{21}$	249.4	19	9.0	7.94
$3_{12} - 3_{03}$	249.4	20	6.4	9.91

Références. (*a*) 'broad', n'inclut pas les 'bullets' Kristensen et al. (2011, Table 2) ; (*b*) (Kristensen et al. 2012, tableA2)

Notes. (*c*) $E(0_{00})/k_B = 0$ K

TABLE 7.5 – *Intensité intégrées observée et prédite pour NGC 1333 IRAS 2A, 4A et 4B*

line	IRAS 4B		IRAS 4A		IRAS 2A	
	prédictions	observations[a,b]	prédictions	observations[a,b]	prédictions	observations[a,b]
$1_{10} - 1_{01}$	22.0	10.6[b]	26.4	17.4[b]	6.4	5.2[b]
$1_{11} - 0_{00}$	22.8	14.9	27.0	16.4	6.4	4.5
$2_{02} - 1_{11}$	18.2	18.9	20.8	18.7	2.6	5.5
$2_{11} - 2_{02}$	10.6	10.8	12.0	5.8	2.4	2.2
$3_{12} - 2_{21}$	15.2	17.6	17.0	13.9	3.2	3.1
$3_{12} - 3_{03}$	11.0	-	12.8	-	3.0	2.3

Références. (*a*) Kristensen et al. (2010, table 1) ; (*c*) Kristensen et al. (2011, Table 2)

Notes. (*b*) Ne tiens compte que de la composante large (*broad*)

le rouge du profil est reproduite par les prédictions. L'aile bleue asymétrique est sous estimée.

On peut rappeler que comme notre modèle n'inclut pas la contribution de l'enveloppe on ne s'attend pas à ce que le profil de type P-Cygni inverse , présent à basse vitesse sur certains profils observés, soit reproduit.

La Table 7.5 compare les intensités intégrées observées et prédites par le modèle de classe 0 avec $r_0^{\max} = 25$ UA.

III.3 OBSERVATIONS COMPLÉMENTAIRES

- Pour L1527, l'extension de la zone de lancement $r_0^{\max}$3.2 UA (modèle de classe 0) à 25 UA (modèle de classe I) est compatible avec les observations de Tobin et al. (2010) qui suggèrent un diamètre du disque d'accrétion compris entre $R \sim 40$ UA et 75 UA (Tobin et al. 2008). De plus les observations de L1527 (Tobin et al. 2008) indiquent un angle d'inclinaison de $i = 85°$, qui est proche du paramètre utilisé dans nos ajustements du profil H_2O. Le taux d'accrétion du modèle ($\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}$ M$_\odot$ yr^{-1}) est comparable au taux d'effondrement de l'enveloppe de $\sim 10^{-5}$ (infall) obtenu par modélisation de la SED et des images infrarouges (Tobin et al. 2008), avec [3] $M_\star = 0.2$ M$_\odot$ (observation de rotation képlérienne) (Tobin et al. 2013).

3. $L_{\rm acc}(0.2\,{\rm M}_\odot) = 10\,{\rm L}_\odot > L_{\rm obs} = 2\,{\rm L}_\odot$, mais la luminosité dépend de l'inclinaison i (en cos(i)).

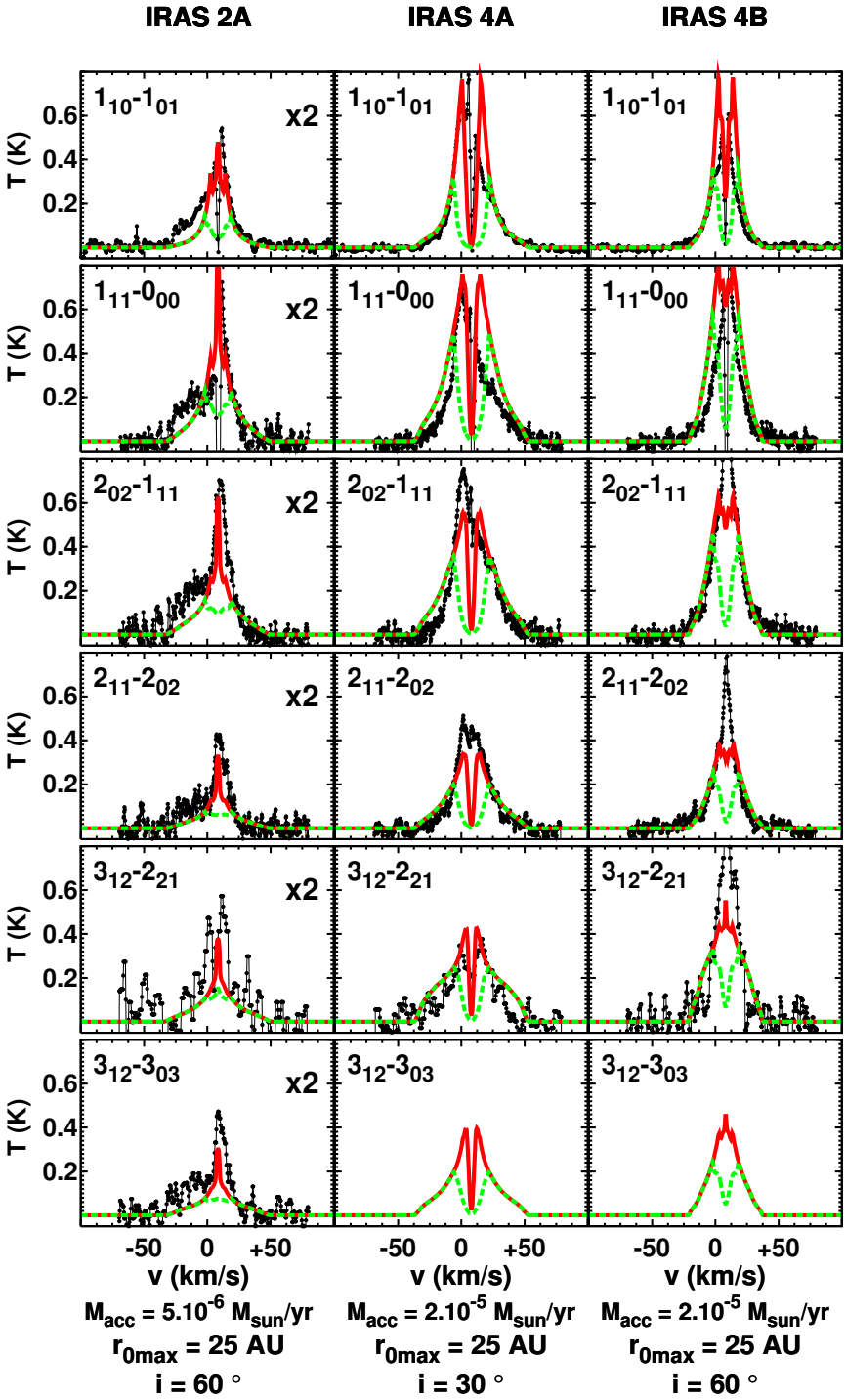


FIGURE 7.34 – *Comparaison entre les observations de NGC 1333 IRAS 2A, 4A et 4B réalisées dans plusieurs raies de* H_2O *avec Herschel/HIFI en noir (Kristensen et al. 2010) et le modèle de classe 0 dont les paramètres sont notés en bas de chaque colonne pour les différents objets. Le profil en rouge est réalisé à* $r_0^{\max} = 25$ UA *et le profil en vert correspond à* $r_0^{\max} = 6.4$ UA.

- Les observations dans les bandes d'absorption des glaces effectuées par Aikawa et al. (2012) indiquent que L1527 et Elias 29 ont une part importante de H_2O dans les manteaux des grains à des distances de l'étoile dans l'enveloppe au delà de $R = 100\,\mathrm{UA}$, mais ne présentent pas de signe de présence de manteaux sur leurs grains à la surface de leur disque d'accrétion. L'absence de manteaux à la surface des grains dans notre modèle est en accord avec ces observations.
- Pour L1157 les observations à haute résolution angulaire de Beltrán et al. (2004) indiquent que la source détectée dans le continuum a une taille de $\sim 75\,\mathrm{UA}$ compatible avec un disque d'accrétion, mais sans qu'une signature de rotation de ce disque n'ait été détectée (Pudritz et al. 1996). Notre $r_0^{\max} = 25\,\mathrm{UA}$ est compatible avec cette taille.
- B335 est une proto-étoile de classe 0 avec un disque de taille $R < 100\,\mathrm{UA}$ observée comme pic compact de poussières par (Harvey et al. 2003) et compatible avec le paramètre $r_0^{\max} = 6.4\,\mathrm{UA}$ du modèle qui ajuste le profil à 557 GHz.
- Le modèle ajustant les profils dans les différentes raies de H_2O de NGC1333 IRAS 2A possède un taux d'accrétion de $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 5.10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\ yr^{-1}}$. C'est un ordre de grandeur en dessous de la valeur du taux d'effondrement de l'enveloppe (infall) suggérée par Brinch et al. (2009). De plus les observations interférométrique de cet objet effectuées par Looney et al. (2003) suggèrent la présence d'un disque d'une taille proche de $R \sim 100\,\mathrm{UA}$ et compatible avec notre $r_0^{\max} = 25\,\mathrm{UA}$. Les observations cinématiques de l'enveloppe en $H^{13}CN$ montrent un mouvement de chute libre sur l'étoile centrale de $M_\star = 0.25\,\mathrm{M_\odot}$ mais pas de rotation (Brinch et al. 2009), $\dot{M}_{\mathrm{ff}}$ est obtenu à partir des mesures de vitesse et des observations de la structure en densité de Jørgensen et al. (2002) (avec une large incertitude sur l'émissivité et sur M_{env}).
  Enfin l'inclinaison déduite des observations en CO du flot bipolaire de Yıldız et al. (2012a) : i entre 15° et 30° ce qui est plus faible que l'angle du modèle $i = 60°$.
- Pour NGC1333 IRAS 4A, l'inclinaison du modèle ($i = 30°$) est en accord avec les observations de Yıldız et al. (2012a).
- Enfin, pour L1448-MM, l'angle d'inclinaison du modèle ($i = 30°$) est proche de l'angle d'inclinaison de 43° suggéré par les observations de mouvements propres des masers H_2O de Hirota et al. (2011). Un pic compact de poussières ($R < 300\,\mathrm{UA}$) est décelé sur les observations interférométriques (Jørgensen et al. 2007).

III.4 Diagrammes d'excitation

Les diagrammes d'excitation obtenus pour H_2O (avec $E/k_B < 1000\,\mathrm{K}$) en utilisant la relation (7.11) et avec un lobe de 20″ pour toutes les raies, avec les deux modèles de classe 0 en utilisant $r_0^{\max} = 25\,\mathrm{UA}$, $i = 60°$ sont représentés sur la Figure 7.35. L'effet de l'angle est faible sur les diagrammes d'excitation. La température d'excitation déduite de la régression linéaire est $T_{\mathrm{ex}} \simeq 200\,\mathrm{K}$, avec $\log(N_u/g_u(E=0)) = 26$ pour le modèle de *classe 0 standard* ; et $T_{\mathrm{ex}} \simeq 200\,\mathrm{K}$ avec $\log(N_u/g_u(E=0)) = 28$ pour le modèle de *classe 0 extrême*. De la même manière, la Figure 7.36 présente les diagrammes d'excitation obtenus pour les deux modèles de classe I. Les régressions linéaires fournissent $T_{\mathrm{ex}} \simeq 150\,\mathrm{K}$ avec $\log(N_u/g_u(E=0)) = 27$ pour le modèle de *classe I extrême* ; et $T_{\mathrm{ex}} \simeq 140\,\mathrm{K}$ avec $\log(N_u/g_u(E=0)) = 24$ pour le modèle de *classe I standard*. La dispersion des points est importante dans chaque cas.

La dispersion des points sur les diagrammes d'excitation de H_2O est une conséquence des conditions d'excitation sous-thermiques mais aussi des variations de la profondeur optique entre les différentes raies. La dispersion diminue avec la densité du jet.

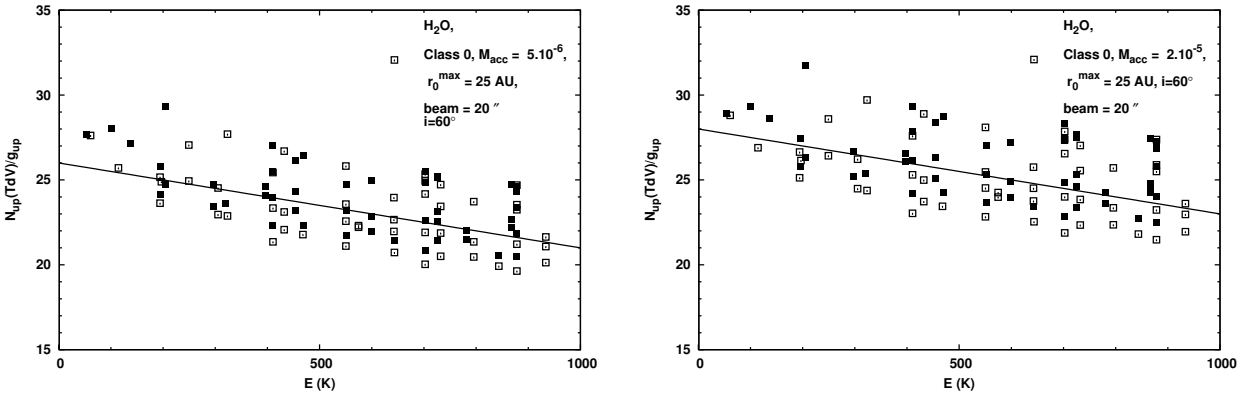


FIGURE 7.35 – *À Gauche : diagramme d'excitation de* H_2O *pour le modèle de classe 0 standard* ($N_u(Tdv)/g_u$ *est tracé en* ln*), le nuage de points est ajusté avec une température d'excitation de* ≃*200* K*, avec log*($N_u/g_u(E=0)$) = 26*. Les carré vide sont les points pour ortho-*H_2O *et les carré plein pour para-*H_2O*. À droite : diagramme d'excitation de* H_2O *pour le modèle de classe 0 extrême. La température d'excitation est* ≃*200* K*, avec log*($N_u/g_u(E=0)$) = 28*.*

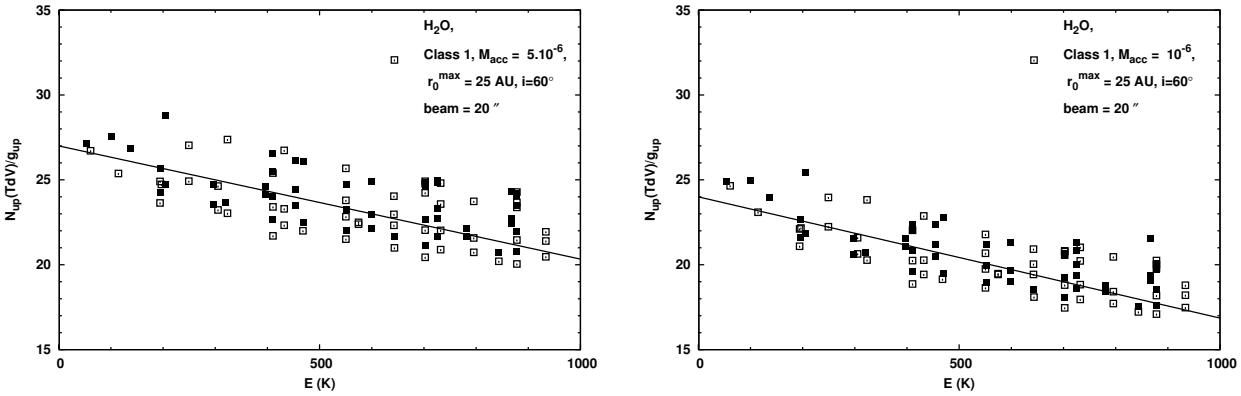


FIGURE 7.36 – *À Gauche : diagramme d'excitation de* H_2O *pour le modèle de classe I extrême* $\tau_0 = 6$*, la droite correspond à* $T_{ex} \simeq 150$ K *et log*($N_u/g_u(E=0)$) = 27*. À droite : diagramme d'excitation de* H_2O *pour le modèle de classe I standard* $\tau_0 = 1.2$*, La température d'excitation est* ≃*140* K*, avec log*($N_u/g_u(E=0)$) = 24*.*

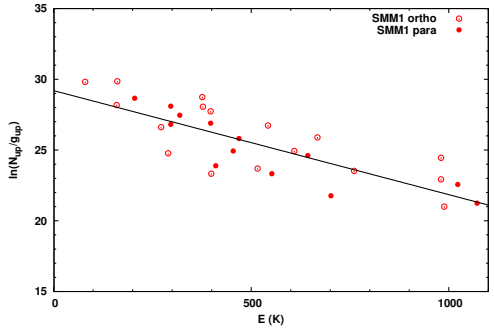


FIGURE 7.37 – *Diagramme d'excitation observé pour Ser SMM1 par Goicoechea et al. (2012), les ronds correspondent à ortho et les disques à para. La température d'excitation déduite de l'ajustement est* 136 ± 27 K*.*

Comparaison avec le diagramme d'excitation des observations H_2O de Serpens SMM1 obtenues avec Herschel/PACS (ramené à un lobe de ∼ 5″) par Goicoechea et al. (2012). Ces observations sont en bon accord avec les prédictions du modèle qui ajuste la raie à 557 GHz.

IV Conclusion

On a mis en place un outil polyvalent et efficace permettant de générer un grand nombre de prédictions dans les raies de H_2O qui permettent d'interpréter directement les observations à l'aide du modèle de vent de disque. Il est aisé, dans les résultats du modèle, d'analyser les profils et de remonter aux conditions d'excitation et de production des différentes raies.

Le bilan des comparaisons effectuées est positif : bien que la solution MHD ne soit pas spécifiquement ajustée sur les différents objets étudiés, le modèle parvient à reproduire un grand nombre de profils observés à la fois dans la raie à 557 GHz et dans les raies excitées de H_2O et pour une large variété d'objets. Le modèle parvient à reproduire les composantes larges observées sur les profils de H_2O.

Il faut aussi tenir compte du fait que le lobe instrumental est très grand devant la taille des jets observés ici et que outre les effets de dilution, il peut intéger la contributions d'autres éléments comme l'enveloppe de gaz, des chocs avec la cavité, ou une contribution du disque qui ne sont pas prises en compte dans le modèle.

La contribution de chocs internes au jet, et de lignes d'écoulement à l'intérieur du rayon de sublimation des poussières pourraient expliquer les *bullet* observés en H_2O pour certains objets comme L1448-MM. Cela reste à être exploré.

Chapitre

8

PRÉDICTIONS SYNTHÉTIQUES DE CO ET COMPARAISONS AUX OBSERVATIONS

SOMMAIRE

I PRÉDICTIONS : INFLUENCE DES PARAMÈTRES 220
I.1 Influence de J_{up} et de la projection de la probabilité d'échappement 220
I.2 Extension de la zone de lancement du vent de disque : effet de r_0^{max} 222
I.2-1 Effet de r_0^{max} sur les profils 224
I.2-2 Effet de r_0^{max} sur le flux total 224
I.3 Angle d'inclinaison : effet de i 225
I.3-1 Effet de i sur les profils 225
I.3-2 Effet de i sur le flux total et sur la largeur de la raie 227
I.4 Effet du taux d'accrétion et de la masse de l'étoile 228
I.4-1 Effet de $\dot{M}_{acc}$ et de $M_\star$ sur les profils 228
I.4-2 Effet de $\dot{M}_{acc}$ et de $M_\star$ sur le flux total 231
II COMPARAISON AVEC LES OBSERVATIONS 231
II.1 Comparaison avec CB26 231
II.2 Comparaison avec les classes 0 de NGC1333 235
II.2-1 Comparaison des profils 235
II.2-2 Comparaison des rapports de raies 235
II.2-3 Comparaison des intensités totales 238
II.3 Comparaison avec les observations Herschel/HIFI dans la raie 10-9 239
II.4 Diagrammes d'excitation 240
III CONCLUSION 242

Résumé : ***Ce chapitre aborde le dernier volet des présentations des prédictions synthétiques dans les raies de CO, et présente aussi les comparaisons avec les observations IRAM et Herschel/HIFI pour des jets de source de classe 0 et I.***

I Prédictions : influence des paramètres

Pour réaliser les prédictions synthétiques dans les raies de CO on utilise les mêmes prescriptions que celles établies dans le cas de H_2O :
- on utilise la composante de probabilité d'échappement asymétrique $\beta(\vec{u})$ dans la direction $\vec{u}$,
- on utilise la même grille de modèles et de paramètres : $r_0^{\max} =$ 25, 12.8, 6.4, 3.2, 1.6, 0.8 UA et $i = 80°$, 60° et 30°,
- les profils sont obtenus après convolution par un lobe gaussien.

Modèle	τ_0	$R_{\rm sub}$ (UA)	$\dot{M}_{\rm acc}$ ($M_\odot$ yr^{-1})	$M_\star$ ($M_\odot$)
classe I standard	1.2	0.27	10^{-6}	0.5
classe I extrême	6.0	0.63	5×10^{-6}	0.5
classe 0 standard	13	0.31	5×10^{-6}	0.1
classe 0 extrême	52	0.64	2×10^{-5}	0.1

Table récapitulative des modèles utilisés dans ce chapitre.

Comme dans les chapitres précédents les cartes de brillance et diagrammes position vitesse ne montrent que le jet décalé vers le bleu. Par contre, les profils somment les contributions du jet décalé vers le bleu et de son symétrique par rapport au plan du disque d'accrétion, décalé vers le rouge. Afin de discuter des effets des paramètres $r_0^{\max}$ et i, on se place dans le cas du modèle de *classe 0 standard*. La table des transitions de CO est donnée en Annexe B.

I.1 Influence de J_{up} et de la projection de la probabilité d'échappement

Les cartes de brillance non convoluées obtenues dans les raies 1-0 à 10-9 de CO sont calculées en utilisant la probabilité d'échappement dépendant de la direction $\beta(\vec{u})$ et sont montrées sur la Figure 8.1. À l'instar des cartes réalisées pour H_2O, elles présentent une asymétrie droite-gauche provoquée par la rotation du jet. Cette asymétrie est beaucoup plus prononcée pour la raie 1-0. La brillance dans la raie 1-0 possède une distribution étendue en z, c'est aussi le cas pour les raies 2-1 à 5-4. Inversement la distribution de brillance dans la raie 10-9 est principalement concentrée à $z < 1000$ UA. Dans les deux cas 1-0 et 10-9 on observe une décroissance de la brillance avec l'éloignement croissant à l'axe du jet.

La Figure 8.2 montre la distribution de l'émissivité dans une coupe 2D du jet pour les transitions 1-0, 4-3 et 10-9. L'émissivité dans la transition 1-0 est plus faible que celle dans les autres transitions, mais elle se répartit sur une zone plus vaste. La plus grande partie du flux dans la raie 10-9 provient d'une région concentrée autour de l'axe du jet et s'étendant jusque $z \simeq 1000$ UA. Dans les parties externes du jet, l'émissivité dans la raie 10-9 chute plus rapidement que dans la raie fondamentale à mesure que z et r augmentent. Pour les raies issues des niveaux à J de plus en plus grand, le flux provient d'une région de plus en plus réduite autour de l'étoile.

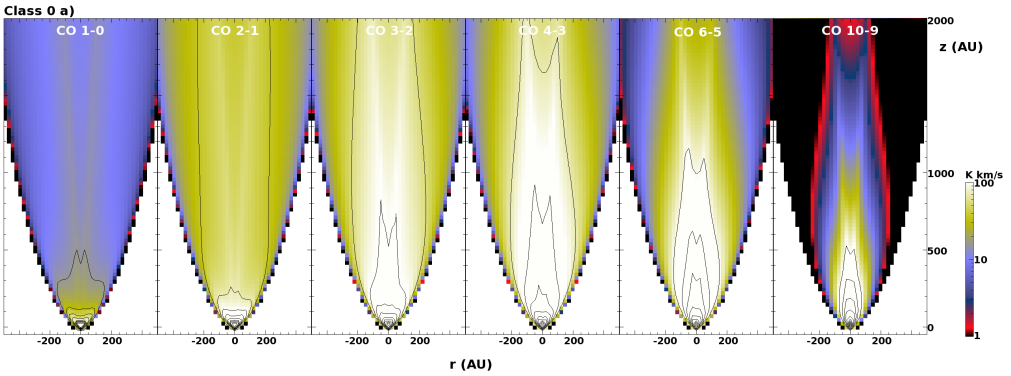


FIGURE 8.1 – *Cartes de brillance dans les raie 1-0, 2-1, 3-2, 4-3, 6-5 et 10-9 de* CO*, représentées sur la même échelle de couleur, pour le modèle de classe 0 standard avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 80°$ *utilisant la probabilité d'échappement le long de la ligne de visée.*

1.0

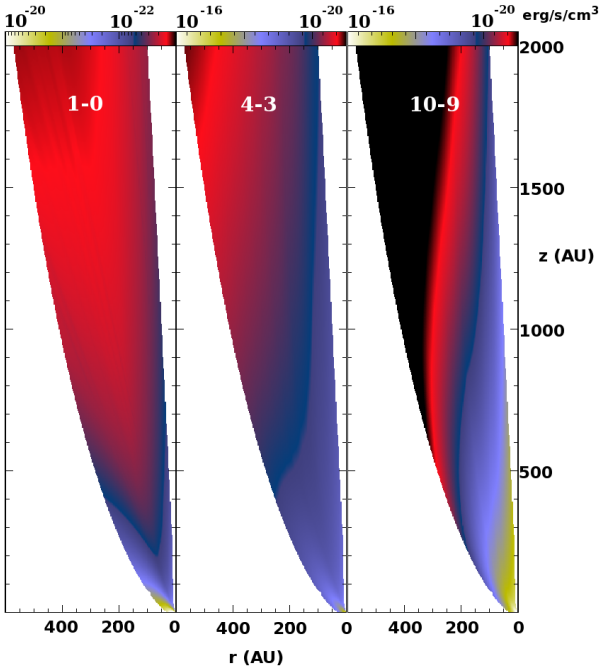


FIGURE 8.2 – *Distribution de l'émissivité multipliée par* $<\beta>$ *dans une coupe poloïdale du jet pour les transitions 1-0, 4-3 et 10-9 de* CO*.*

On a représenté l'évolution des populations des niveaux rotationnels J_u de CO à quatre altitudes différentes (1, 10, 100 et 1000 UA) le long des lignes d'écoulement ancrées à $R_{\rm sub}$ et 9.6 UA pour le modèle de *classe 0 a)* sur la Figure 8.3. En ces mêmes points l'émissivité de la raie issue du niveau J_u est aussi représentée. À $r_0 = R_{\rm sub}$ et à $z = 1$UA, CO est rotationnellement excité : les niveaux à J élevé sont peuplés, le niveau le plus peuplé est proche de $J \simeq 15$. A mesure que z augmente les niveaux à grand J (> 25) sont de moins en moins peuplés (avec une exception à $z = 10\,{\rm UA}$). L'émissivité est maximale pour des J décroîssant de ~ 20 à $\sim$5 quand z augmente pour $r_0 = 9.6\,{\rm UA}$ et $J > 40$ à $J \sim 20$ quand z augmente pour $r_0 = R_{\rm sub}$. À z plus grand, les niveaux à faible

J sont peuplés par cascade depuis les niveaux à J élevé. À $z = 100$ UA, le niveau le plus peuplé est $J = 10$.

Le long de la ligne d'écoulement ancrée à 9.6 UA, le maximum de population rotationnelle se situe autour de $J = 5$, alors que l'émissivité est dominée par les niveaux $J \simeq 20$ à $z = 1AU$ et $J \simeq 5$ à $z = 1000$ UA. Cependant les régions situées à faible r et faible z représentent un faible volume dans le jet. L'effet de volume l'emporte sur la densité de molécules émettrices plus importante à la base du jet. Donc les raies issues de J élevés ont une brillance plus faible que celle à J faible. Néanmoins, pour ce modèle de classe 0, les raies les plus brillantes (en erg s^{-1}) sont celles proches de $J = 5$.

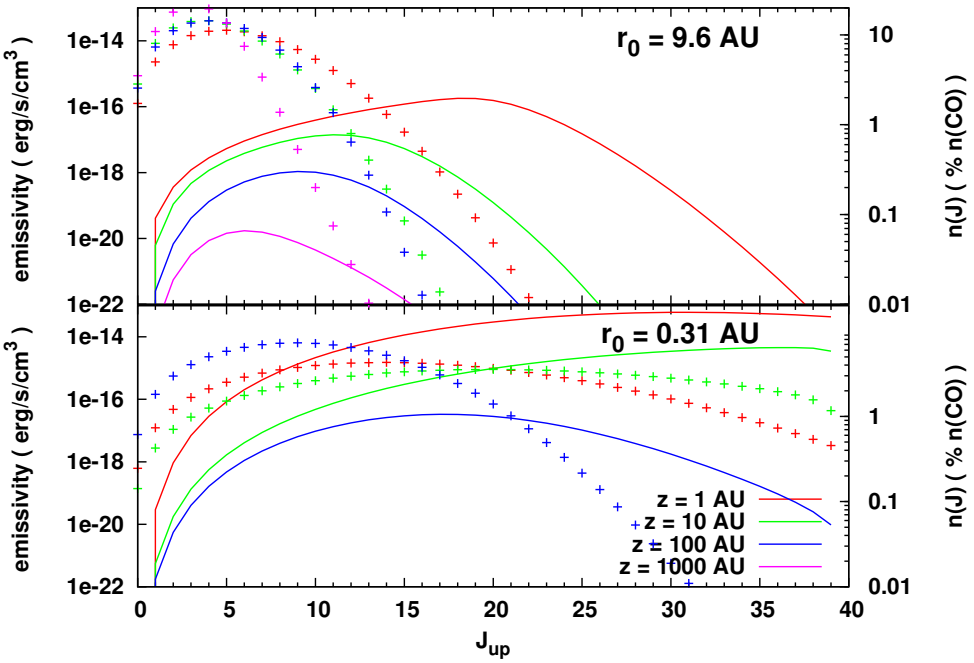


FIGURE 8.3 – *Emissivité (en trait continu, axe de gauche) de la raie $J_u \rightarrow J_l$ et population relatives des niveaux J_u (croix, axe de droite) en fonction de J_u et à 4 altitudes différentes le long de deux lignes d'écoulement ancrées à $r_0 = R_{\rm sub} = 0.31$ UA ($z_{\rm max} = 310$ UA) en bas et $r_0 = 9.6$ UA en haut pour le modèle de classe 0 standard avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}$ M$_\odot$ yr^{-1}.*

Par ailleurs, pour les raies issues des J faibles, le flux dans les profils est dominé par les régions situées à z/r grand alors que pour les transitions à haut J ce sont les régions à z/r faibles ($\lesssim$1, plus proche du plan du disque) qui dominent.

I.2 Extension de la zone de lancement du vent de disque : effet de $r_0^{\rm max}$

Le paramètre $r_0^{\rm max}$ a un effet similaire à celui décrit dans le cas de H_2 et H_2O sur les cartes de brillance et diagrammes position-vitesse de CO, ainsi que sur ses profils.

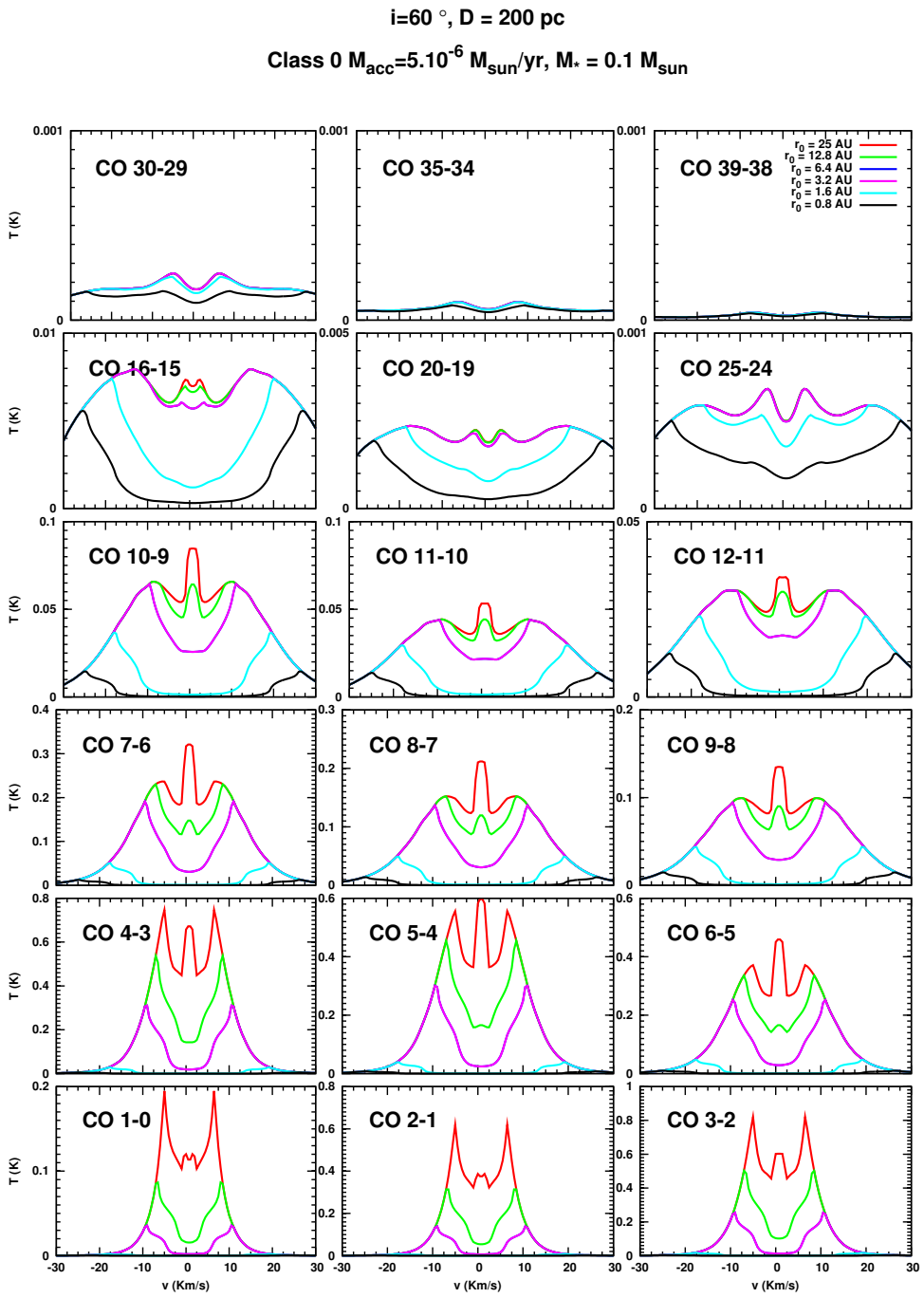


FIGURE 8.4 – *Effet de* $r_0^{\max}$ *sur les profils de CO pour le modèle de classe 0 standard, avec* $i = 60°$ *et* $D = 200$pc. *Tous les profils ont été représentés dans un même lobe de* $20''$.

I.2-1 Effet de $r_0^{\max}$ sur les profils

La Figure 8.4 montre les profils de raies sommant les deux lobes du jet (le lobe bleu et son symétrique par rapport à $v = 0\,\mathrm{km\ s^{-1}}$) pour différentes transitions allant jusqu'à $J = 39$, pour différentes valeurs de $r_0^{\max}$ et pour le modèle de *classe 0 standard*. Les raies les plus intenses dans un même lobe [1] à 20″ (pic $> 0.5\,\mathrm{K}$) vont de la 2-1 à 6-5, la raie la plus intense est la 3-2. L'intensité au pic diminue ensuite quand J_u augmente. Pour les raies issues des niveaux à faible $J \leq 4$ on constate que les lignes d'écoulement internes ($r_0 < 6\,\mathrm{UA}$) ne contribuent pas ou peu au flux, qui est dominé par les parties externes du jet $r_0 > 12\,\mathrm{UA}$. Pour les transitions entre $J = 5$ et $J = 15$ ce sont les régions intermédiaires ($3\,\mathrm{UA} < r_0 < 12\,\mathrm{UA}$) qui dominent le flux émis. Pour les raies à $J > 20$, les régions externes n'émettent plus, seules les régions les plus internes à $r_0 < 3\,\mathrm{UA}$ contribuent au flux. Néanmoins, pour chaque raie, l'ajout de lignes d'écoulement supplémentaires ajoute du flux à des vitesses plus faibles. Les ailes des raies sont dominées par les parties internes du jet et le pic par les parties externes, comme en H_2O.

I.2-2 Effet de $r_0^{\max}$ sur le flux total

L'évolution de l'intensité intégrée en fonction de $r_0^{\max}$ pour la raie 2-1 et la raie 10-9 est représentée sur la Figure 8.5. On peut considérer la raie 2-1 comme l'archétype des raies de CO à faible J, la raie 10-9 est plus représentative des raies à moyen et haut J. Dans le cas de la raie 2-1 l'intensité intégrée est proportionnelle à $r_0^{\max}$, mais ce n'est pas le cas pour la 10-9 et pour les raies issues de J supérieurs. Sur cette figure, on retrouve aussi le fait que chaque ligne d'écoulement lancée à r_0 croissant continue d'ajouter de plus en plus de flux dans la raie 2-1 jusqu'à $r_0^{\max} = 25\,\mathrm{UA}$, alors que dans la raie 10-9 le flux cesse d'augmenter rapidement lorsque $r_0^{\max} > 6\,\mathrm{UA}$.

1. Nous avons choisi de représenter les raies dans un même lobe afin de pouvoir les comparer dans cette première partie du chapitre qui traite des effets des paramètres du modèle, même si cela constitue une approximation grossière d'un point de vue observationnel. Dans la comparaison avec les observations nous utiliserons les lobes observationnels associés à chaque raie.

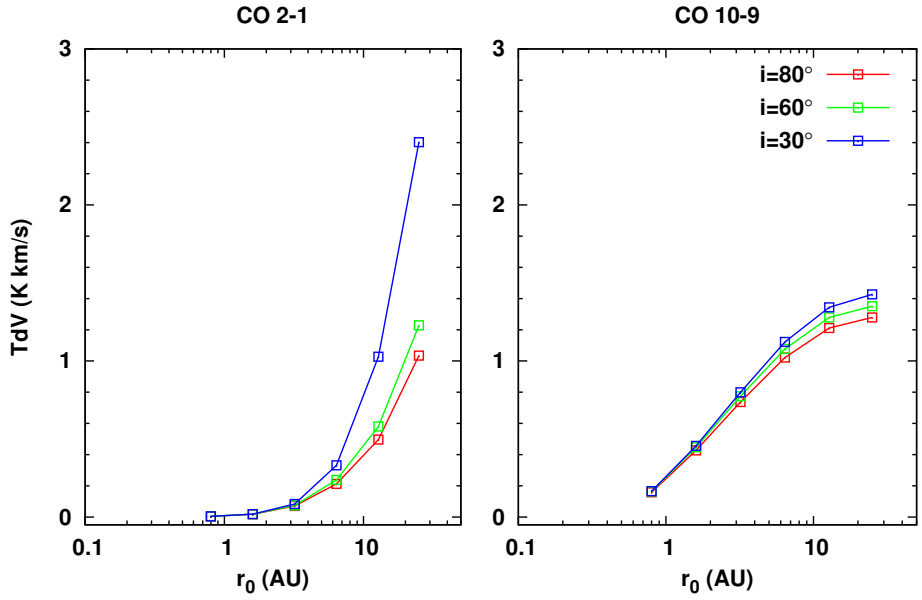


FIGURE 8.5 – *Effet de* $r_0^{\max}$ *sur le flux total pour deux transitions de* CO *et pour les trois angles d'inclinaison. Les intensités sont calculées pour le modèle de classe 0 standard et dans un lobe de* $20''$ *et à* $D = 200$ pc.

I.3 ANGLE D'INCLINAISON : EFFET DE i

Toujours dans le cadre de la figure 8.5, on constate que l'intensité intégrée dans la raie 2-1 possède une plus grande variabilité avec i que l'intensité totale de la raie 10-9, notamment pour les grandes valeurs de $r_0^{\max}$. L'intensité totale dans la raie 2-1 à $i = 30°$ est deux fois plus grande que celle à $i = 60°$ ou $i = 80°$ pour $r_0^{\max} \geq 12.8$ UA. Cet effet est dû à la troncature du jet à i grand (80°) par le lobe d'observation qui correspond à $20'' \times 200\text{pc} = 4000$ UA et qui est plus petit que l'extension de la région d'émission pour cette raie qui s'étend jusque $z > 10^4$ UA. Alors que quelque soit l'angle d'inclinaison, pour la raie 10-9 la région d'émission est toujours comprise dans le lobe choisi.

I.3-1 Effet de i sur les profils

La Figure 8.6 présente les profils des mêmes raies qu'en Figure 8.4 dans le cadre du même modèle avec le même lobe de $20''$ pour trois angles d'inclinaison i différents et avec $r_0^{\max}$ fixé à 25 UA.

Les profils s'élargissent quand i diminue (et quand J augmente). La largeur au pied pour la raie 1-0 est de 20 km s^{-1} à $i = 80°$ et $\simeq 50$ km s^{-1} pour $i = 30°$. Ces largeurs sont comparables à celles obtenues dans les raies fondamentales de H_2O avec le même modèle. Pour la raie 10-9 cette largeur passe à 40 km s^{-1} à $i = 80°$ et ~ 120 km s^{-1} pour $i = 30°$. De plus, à $i = 30°$, les profils des raies issues des niveaux de faible énergie montrent une nette séparation entre les parties décalées vers le bleu et vers le rouge, alors qu'elles se recouvrent de plus en plus aux faibles vitesses à plus haut J. Les profils

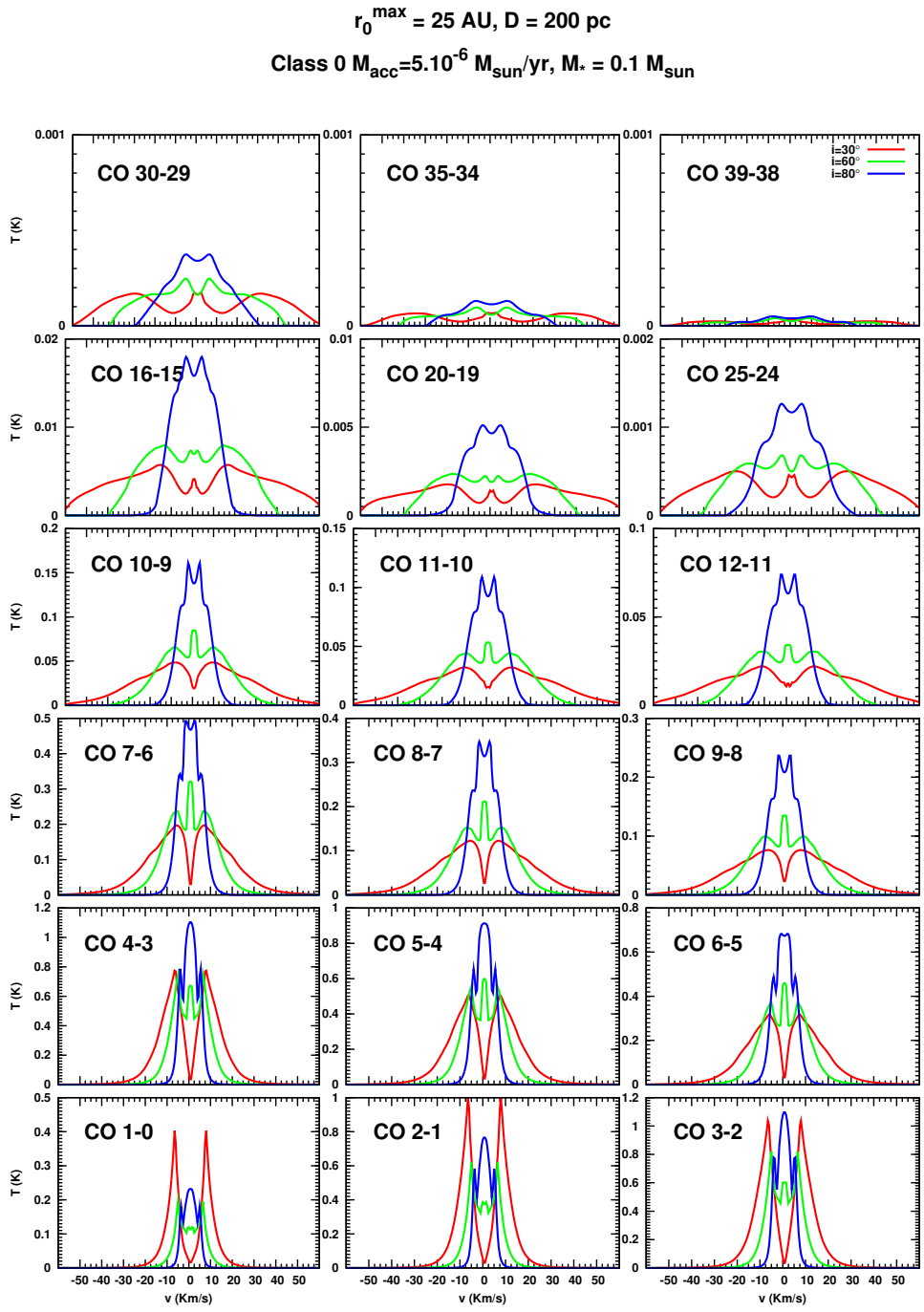


FIGURE 8.6 – *Effet de l'angle d'inclinaison sur les profils de* CO *pour le même modèle et les mêmes profils qu'en Figure 8.4, avec* $r_0^{\max} = 25$ UA.

sont alors dominés par l'émission provenant de zones plus proches du disque où encore en rotation et en expansion, ce qui produit des profils plus centrés vers zéro.

I.3-2 Effet de *i* sur le flux total et sur la largeur de la raie

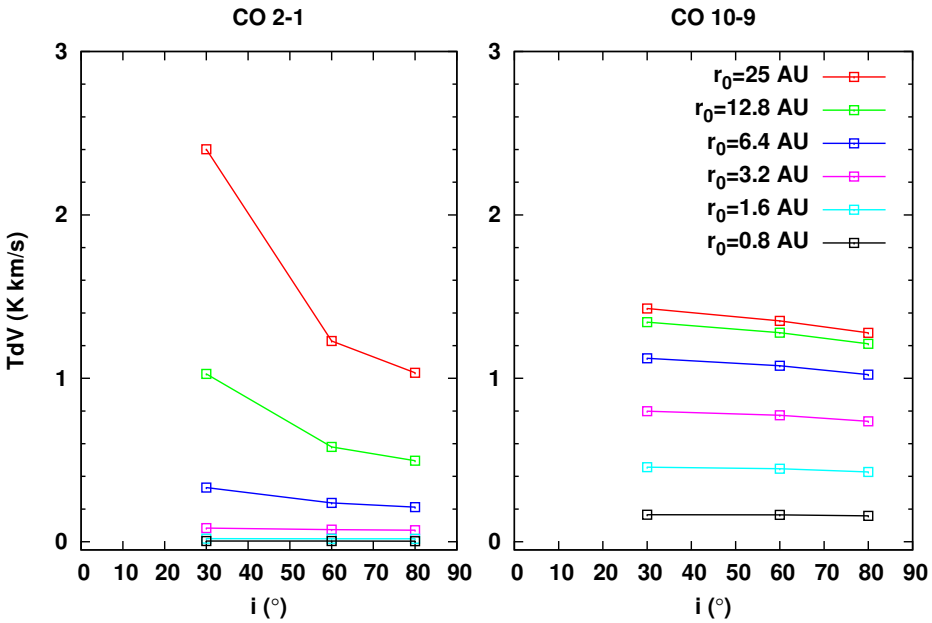


FIGURE 8.7 – *Effet de l'angle d'inclinaison i sur l'intensité intégrée dans les raies 2-1 et 10-9 et pour différentes valeurs de* $r_0^{\max}$*, pour le même modèle qu'en Figure 8.5, dans un lobe de* 20″.

La Figure 8.7 montre l'intensité intégrée dans les raies 2-1 et 10-9 en fonction de l'angle d'inclinaison i et pour les différentes valeurs de $r_0^{\max}$ et complète le propos développé sur la Figure 8.5.

La légère diminution de l'intensité totale en fonction de i dans la raie 10-9, sur la Figure 8.7, est due à la dépendance de la probabilité d'échappement dans l'angle sous lequel le jet est vu. Cet effet de l'angle d'inclinaison ne dépend pas de $r_0^{\max}$. Pour la raie 2-1, la dépendance angulaire de Tdv est dominée par les effets de lobe. Pour la raie 10-9 l'effet de l'anisotropie de $\beta(\vec{u})$ domine.

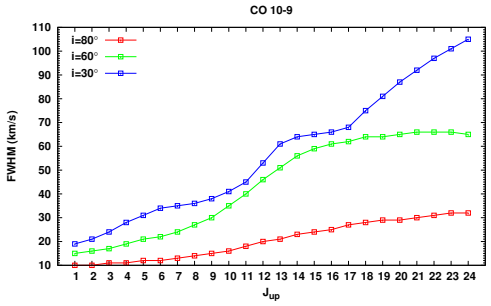


FIGURE 8.8 – *Effet de i sur la largeur à mi hauteur de toutes les raies à $J_u < 25$, pour le même modèle de classe 0 standard avec $r_0^{\max} = 25$ UA et dans un lobe de 20″.*

Les largeurs à mi hauteur de toutes les raies de CO jusqu'à $J_u \leq 24$ pour les trois angles d'inclinaison $i = 30°$, $60°$ et $80°$ sont représentées sur la Figure 8.8.
Les raies s'élargissent quand J_u augmente et quand i diminue. L'élargissement dû à l'inclinaison est plus prononcée pour les hauts J_u. les différents paliers sont provoqués par les formes irrégulières des profils. Les profils sont plus réguliers à $i = 80°$ qu'à $i = 30°$.

I.4 Effet du taux d'accrétion et de la masse de l'étoile

I.4-1 Effet de $\dot{M}_{\rm acc}$ et de $M_\star$ sur les profils

La Figure 8.9 montre les profils dans la raie 1-0 pour les différents modèles de classes 0, I et II. Les raies les plus intenses sont obtenues pour les modèles de classe 0 et avec les plus fort taux d'accrétion. Dans le cas des modèles de classe 0, quand le taux d'accrétion augmente d'un facteur 4, l'intensité au pic augmente d'un facteur 5. Dans le cas des modèles de classe I, l'intensité au pic augmente d'un facteur 3 quand le taux d'accrétion augmente d'un facteur 5. Pour un même taux d'accrétion de 5×10^{-6} $M_\odot$ yr^{-1}, le modèle de classe I prédit une intensité maximale inférieure d'un facteur 3 à celle prédite par le modèle de classe 0.

Les profils s'élargissent (à la base) quand la masse de l'étoile augmente (car les profils sont dominés par les petits r_0 et $v_K \propto M_\star^{0.5}$). À $i = 30°$ les deux parties du profil sont davantage séparées pour les modèles de classe I que de classe 0.

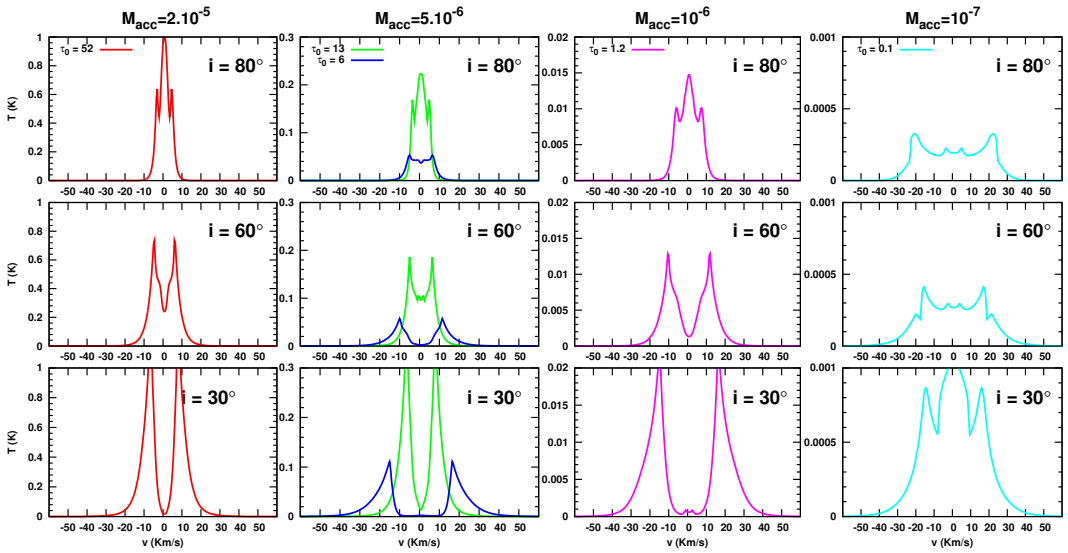


FIGURE 8.9 – *Raie* CO *1-0 pour les différents modèles de classe 0, I et II avec* $r_0^{\max} = 25$ UA, $D = 200$ pc *et dans un lobe de* 20″. *Les modèles sont triés en colonne selon leur taux d'accrétion et en ligne selon les valeurs de i (80° en haut, 60° au milieu et 80° en bas), les modèles sont aussi repérés par leur valeur de* τ_0.

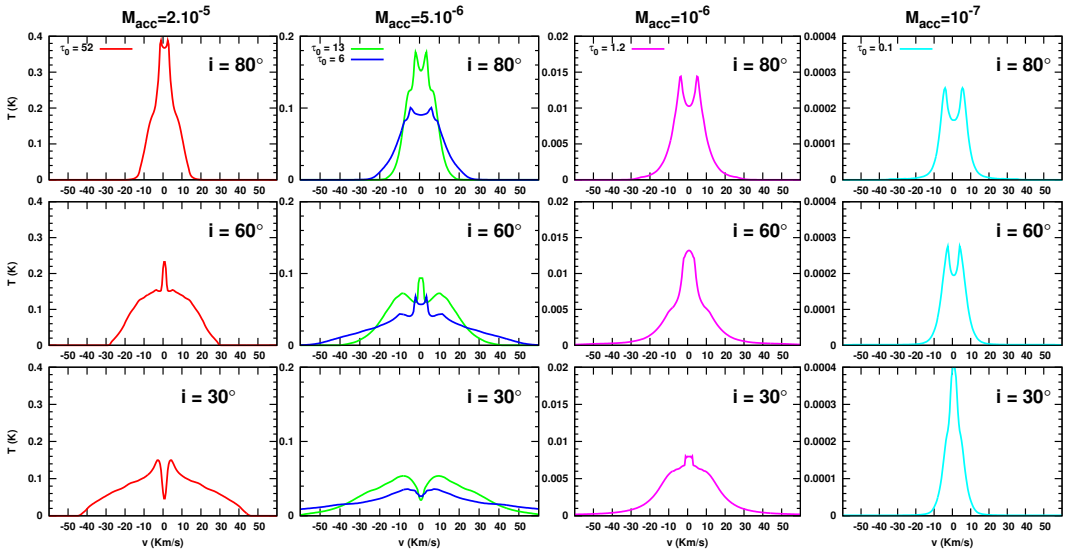


FIGURE 8.10 – *Raie* CO *10-9 pour les différents modèles de classe 0 (gauche), I (centre) et II (droite) avec* $r_0^{\max} = 25$ UA, $D = 200$ pc *et dans un lobe de* 20″.

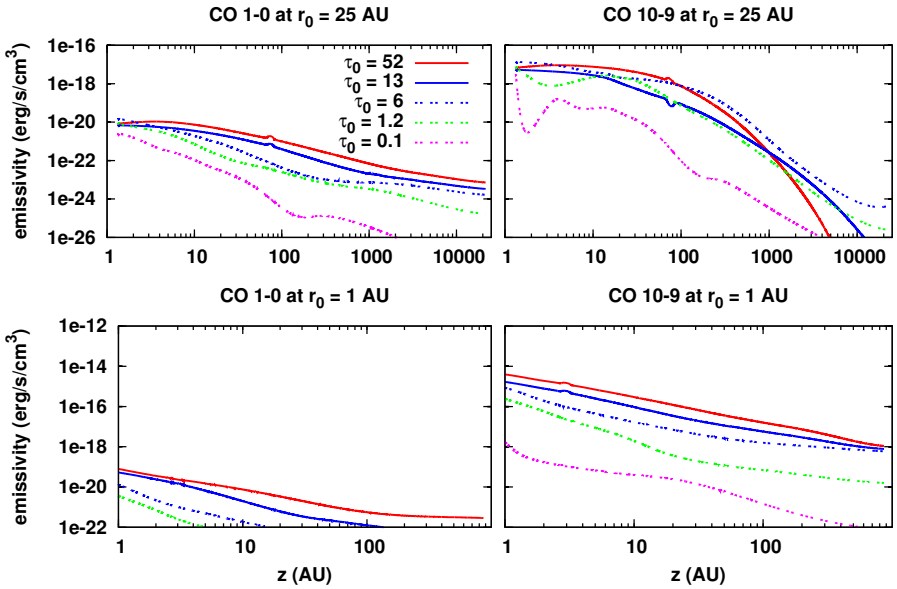


FIGURE 8.11 – *Emissivité (multipliée par* $< \beta >$*) dans la raie 1-0 à gauche et dans la raie 10-9 à droite, le long de la ligne d'écoulement ancrée à* $r_0 = 1$ UA *en bas et de celle ancrée à 25* UA *en haut pour les 5 modèles de classe II, I et 0 repérés par leur valeur de* τ_0.

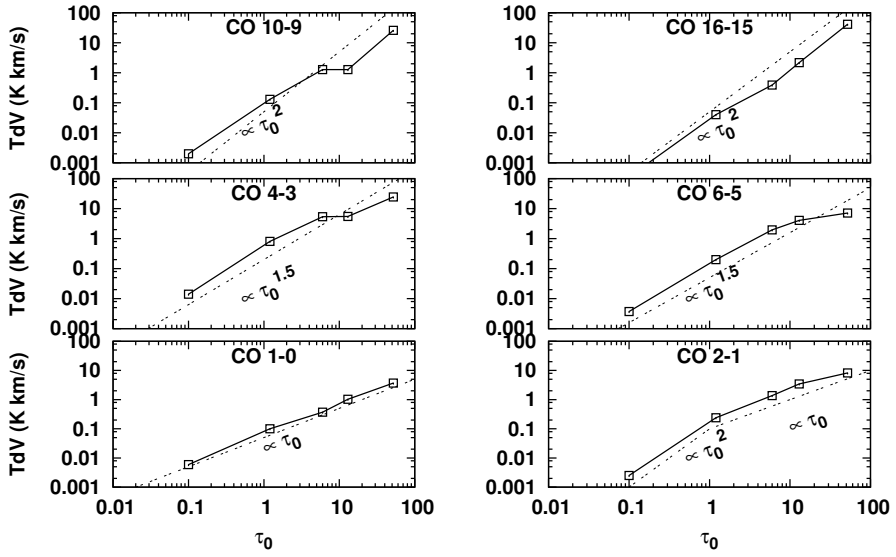


FIGURE 8.12 – *Intensité intégrée dans les raies 1-0, 2-1, 4-3, 6-5, 10-9 et 16-15 en fonction de* τ_0 *représentant les différents taux d'accrétion et classes d'étoiles. Les intensités intégrées ont été calculées avec* $r_0^{\max} = 25$ UA, $i = 80°$, $D = 200$ pc *dans un lobe de 22″, 22″, 11″, 11″, 22″ et 19″ respectivement (lobes Herschel, APEX et JCMT). Les droites en pointillés sont proportionnelles à* τ_0, $\tau_0^{1.5}$ *ou* τ_0^2.

De la même manière que sur la figure 8.9, les profils dans la raie 10-9 pour les différents modèles sont représentés sur la Figure 8.10. L'élargissement subit par la raie entre les cas des classes 0 ($M_\star = 0.1\,\mathrm{M}_\odot$) et I ($M_\star = 0.5\,\mathrm{M}_\odot$) est plus important que précédemment, excepté pour la classe II où l'émissivité provient de régions où $\beta < 1$, proches

du disque, et est peu étendue en z. Enfin, on représente sur la Figure 8.11 l'émissivité le long de deux lignes d'écoulement (1 UA et 25 UA) dans les raies 1-0 et 10-9 de CO pour les cinq modèles de jet. L'émissivité décroît des classes 0 vers la classe II.

I.4-2 Effet de $\dot{M}_{\rm acc}$ et de $M_\star$ sur le flux total

L'intensité intégrée pour quelques raies de CO est représentée sur la Figure 8.12 en fonction du paramètre τ_0 caractérisant la densité du vent ($\tau_0 \propto \dot{M}_{\rm acc} M_\star^{-1/2}$) dans chaque modèle de protoétoile (voir table en début de chapitre). L'intensité intégrée augmente avec τ_0 selon une pente qui dépend de J_u et de τ_0. Il y a quatre ordres de grandeur entre le modèle de classe II et le modèle de classe 0 extrême.

II Comparaison avec les observations

Cette partie est consacrée à la comparaison entre les prédictions synthétiques pour CO et les observations de jet de classe I (comme CB 26) et de classe 0 (NGC 1333 IRAS 2A, 4A et 4B). On effectue aussi les comparaisons dans CO 10-9 pour les mêmes sources que dans le cas de la raie à 557 GHz de H_2O.

II.1 Comparaison avec CB26

La première comparaison est effectuée avec les observations du jet de l'étoile de classe I de faible luminosité CB26 dans la raie CO 2-1 à 1.3 mm faites à l'interféromètre de l'IRAM par Launhardt et al. (2009). CB26 est située à 140 pc. La résolution des observations est de 1.5″. Les observations ont montré la présence d'un disque d'accrétion en rotation képlérienne de 200 UA de rayon et vu par la tranche (Launhardt & Sargent 2001). Aussi le jet est vu presque de côté. On compare les observations à un modèle compatible avec la masse de l'étoile centrale de 0.5 $M_\odot$:

- Classe I avec $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, et un modèle alternatif de classe 0 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$,
- $i = 85°$,
- $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$
- $D = 140\,{\rm pc}$. Les prédictions dans CO 2-1 sont convoluées par un lobe gaussien de 1.5″ pour les dimensions spatiales et 1 km s^{-1} en vitesse.

La Figure 8.13 montre la comparaison entre la carte du jet observée et celle prédite dans la raie 2-1 de CO. Les prédictions ont aussi été réalisées en sommant la carte de brillance calculée pour le jet à $i = 85°$ et la carte de brillance calculée pour le jet symétrique par rapport au plan du disque d'accrétion. Comme le jet est vu de côté il y a peu de superposition entre les deux parties du jet, et on ne tient pas compte de l'absorption de l'un par l'autre.

La morphologie des cartes synthétiques est semblable au jet observé. La partie du jet la plus brillante (en violet) possède même une extension similaire à celle du jet de CB26. La projection totale du jet moléculaire de CB26 est de $\simeq 2000\,{\rm UA}$ est compatible avec les prédictions. Cependant les températures de brillance prédites par le modèle de *classe I extrême* sont inférieures aux observations d'un facteur ~ 4.5. Le modèle de *classe 0 standard* donne des températures de brillance 10 fois plus élevées, mais la forme du jet

obtenu n'est pas compatible avec les observations du point de vue de la morphologie, de la taille et de la largeur de la carte de brillance.

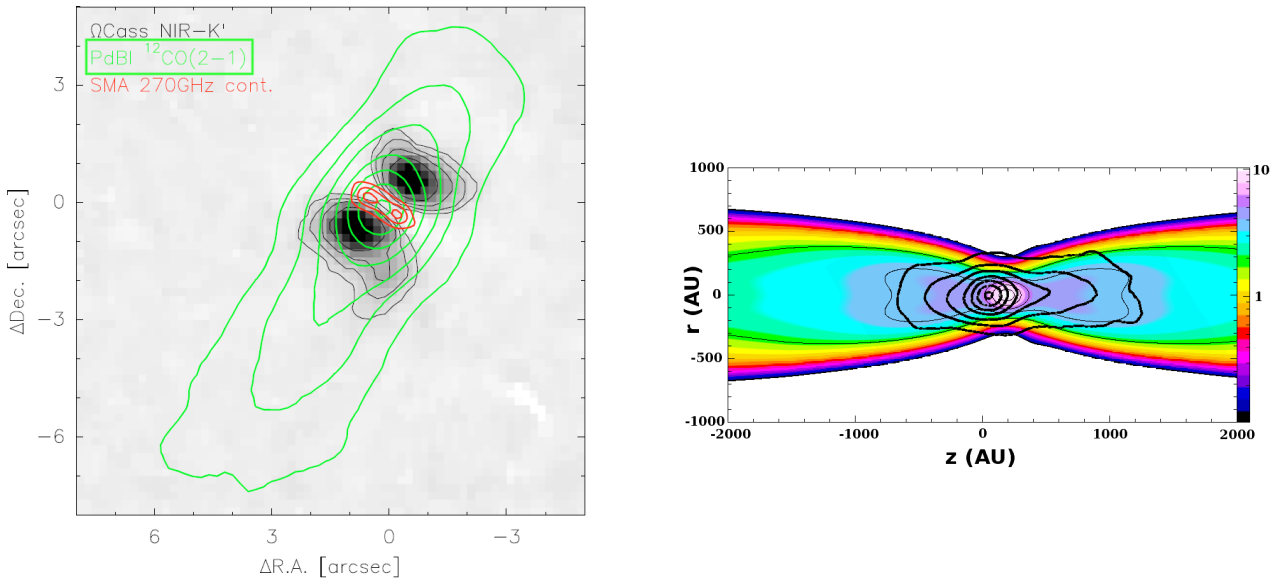


FIGURE 8.13 – ***Gauche*** *: Carte de brillance observée dans la raie 2-1 (contours en vert) par Launhardt et al. (2009). Les contours sont à 4.5, 10, 17, 26...*K km s^{-1}. ***Droite-Haut*** *: Les contours en noir correspondent aux observations mises à l'échelle sur les prédictions. Les cartes synthétiques pour le modèle de classe I standard ont été convoluées par un lobe gaussien de 1.5″.* ***Droite-Bas*** *: Les prédictions ont été réalisées en sommant la carte de brillance du jet incliné à $i = 85°$ et son symétrique par rapport au plan du disque d'accrétion. Les échelles de couleur pour les prédictions sont en* K km s^{-1}*. Les contours sur les prédictions sont à 80%, 60%, 40% et 20% du pic qui est à 5.9 K.*

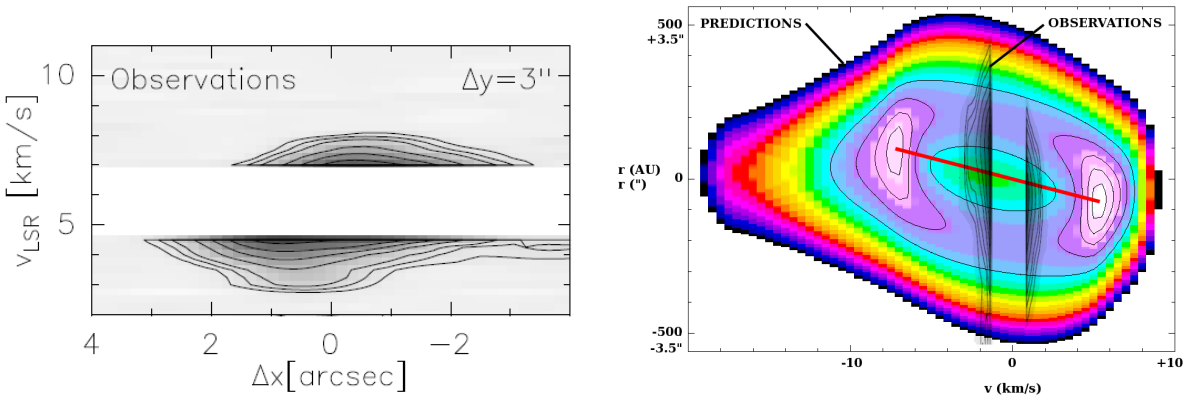


FIGURE 8.14 – ***Gauche*** *: Diagramme position vitesse transverse observé par Launhardt et al. (2009) dans* CO *2-1.* ***Droite*** *: Diagramme position vitesse prédit, et intégré entre $z = 2.3''$ et $z = 3.8''$. Les observations ont été superposées à l'échelle sur les prédictions. La ligne rouge met en évidence la signature de rotation. Les observations et les prédictions ont été centrée à $v = 0$ km s^{-1}. Il y a un facteur 100 entre le maximum (violet-blanc) et le minimum (noir), les contours noirs sont à 90%, 70%, 50%, 40% et 20% du maximum qui vaut 0.6 K.*

Pour les régions situées autour du plan médian à $z = 0$ UA, il y a une possible contamination par le disque sur les observations, correspondant à l'élargissement des contours

qui n'est pas reproduit par le modèle. Il y a aussi un décalage en z entre le pic sur la carte des observations et le pic de la carte synthétique.

Les diagrammes position-vitesse transverses prédits, intégrés entre 2.3″ et 3.8″, sont comparés aux observations sur la Figure 8.14. Le gradient de vitesse transverse prédit par la rotation du jet est compatible avec celui correspondant aux observations. L'extension en r de la zone de brillance maximale (violet) est aussi compatible avec les observations. Cependant le modèle prédit des vitesses trop élevées ($v = -8\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ et $v = +7\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ aux pics contre $v_{obs} = \pm 2\,\mathrm{km\,s^{-1}}$).

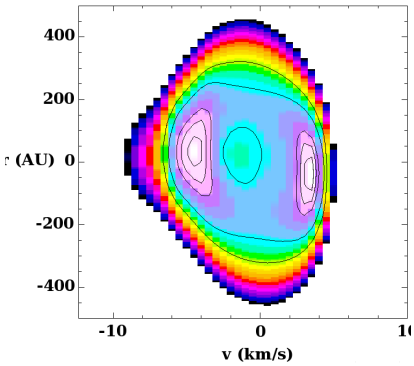


FIGURE 8.15 – *Diagramme PV transverse pour le modèle de classe 0 standard intégré entre $z = 315$ et $z = 525$ UA. Le flux sur les prédictions est normalisé, il y a un facteur 100 entre le maximum (violet-blanc) et le minimum (noir), les contours noirs sont à 90%, 75%, 60%, 45%, 30% et 15% du maximum qui vaut ~6 K.*

Le même type de diagramme obtenu avec le modèle de *classe 0 standard* et représenté sur la Figure 8.15. La signature de rotation prédite est similaire à celle obtenue avec le modèle de classe I, sauf que les pic sont à des vitesses plus faibles ($v = -5\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ et $v = +4\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ car $M_\star$ est cinq fois plus petit) et le diagramme est moins étendu en r.

La Figure 8.16 montre la comparaison entre le diagramme position-vitesse le long de l'axe jet observé et prédit pour le modèle de classe I. Les morphologies, avec deux crêtes de part et d'autre de $v = 0\,\mathrm{km\,s^{-1}}$, sont semblables bien que prédites à trop grande vitesse par le modèle par rapport aux observations. Les pics prédits sont situés à des vitesses de $v = -4\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ et $v = +7\,\mathrm{km\,s^{-1}}$. Le diagramme PV observé s'étend jusque $z \simeq 1000$ UA, là où le diagramme prédit devient plus intense et s'étend ensuite jusque $z \simeq 3000$ UA.

Comme le jet est vu de côté, la comparaison entre les diagrammes symétriques par rapport au disque du jet donnent des résultats similaires. À z proche de 0, il y a une possible contamination par le disque d'accrétion sur les observations qui n'est pas reproduite par le modèle.

Le diagramme PV obtenu avec le modèle de *classe 0 standard* n'est pas compatible avec les observations, car les pics se situent à plus haute altitude en z et à des vitesses similaires au modèle de classe I.

Le profil observé dans la raie 2-1 (lobe 1.47″) intégré sur tout le flot est comparé au profil prédit par le modèle de classe I sur la Figure 8.17. Le flux prédit est 10 fois inférieur au flux observé. Un modèle de classe 0 avec $\dot{M}_{\mathrm{acc}} = 5 \times 10^{-6}\,\mathrm{M_\odot\,yr^{-1}}$ prédirait un profil supérieur aux observations d'un facteur 2.

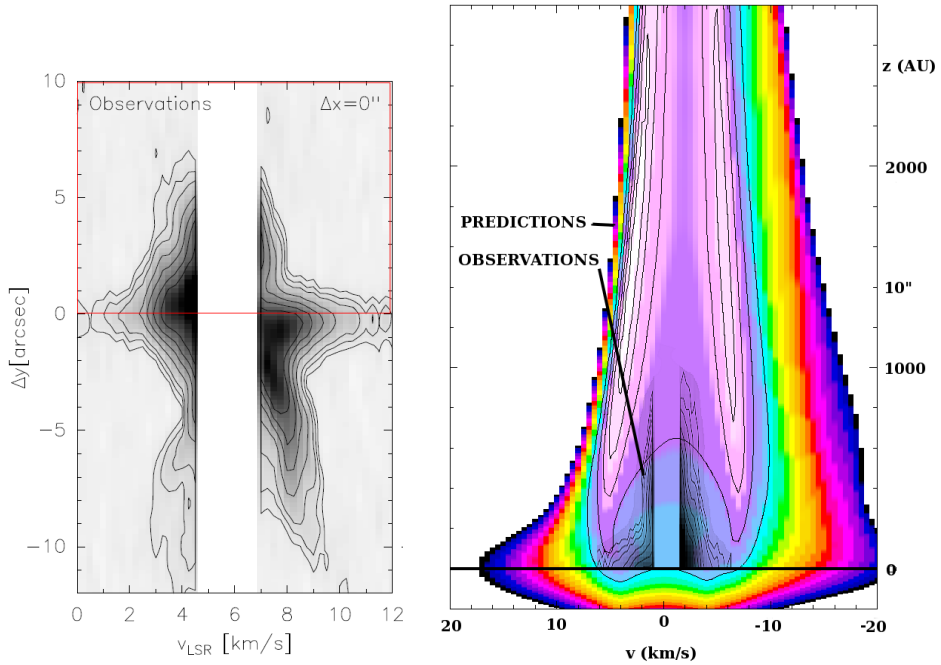


FIGURE 8.16 – ***Gauche*** *: Diagramme position vitesse longitudinal observé pour les deux parties du jet.* ***Droite*** *: Diagramme PV longitudinal prédit (en couleur) pour le lobe bleu (cadre rouge). Les observations ont été mises à l'échelle et superposées aux prédictions. Le flux sur les prédictions est normalisé, il y a un facteur 100 entre le maximum (violet-blanc) et le minimum (noir), les contours noirs sont à 90%, 70%, 50%, 40% et 20% du maximum qui vaut ∼1 K.*

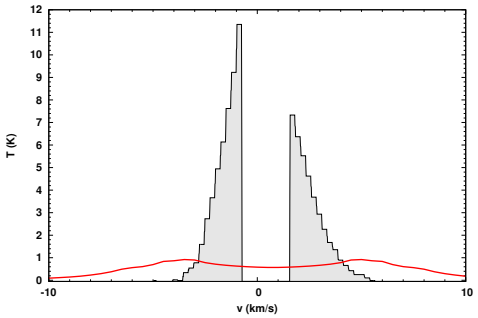


FIGURE 8.17 – *profil observé en gris et profil prédit en rouge sommant les contributions des deux lobes du jet. Le flux observé a été converti en unité de température* K *en appliquant le facteur de 9* K *(*Jy*/beam)*$^{-1}$.

Conclusion

Pour CB26 la comparaison entre le modèle de classe I standard et les observations permet de conclure que :

- le modèle prédit une morphologie en accord avec les observations, que ce soit pour le jet ou pour les diagrammes positions-vitesses,
- la signature de rotation du jet prédite est présente sur les observations,
- mais les vitesses prédites sont trop grandes d'un facteur 3. Il faudrait d'envisager une

autre solution MHD plus lente et plus dense adaptée à CB26. Mais de telles solutions n'ont pas encore été calculées.
- les intensités prédites dans la raie 2-1 sont plus faibles que celles observées.

II.2 Comparaison avec les classes 0 de NGC1333

II.2-1 Comparaison des profils

Un deuxième volet de comparaison entre les prédictions du modèle et les observations concerne les trois protoétoiles de classe 0 déjà abordées au chapitre précédent sur H_2O, NGC1333 IRAS 2A, IRAS 4A et IRAS 4B, qui sont distantes de $D = 235$ pc.

Les profils observés par Yıldız et al. (2010) dans les raies 2-1 (JCMT), 4-3 (JCMT), 6-5 (APEX) et 10-9 (Herschel/HIFI) de CO avec les lobes 22″, 11″, 9″ et 20″, respectivement. sont comparés sur la Figure 8.18 aux profils prédits dans les mêmes lobes pour les mêmes modèles qu'utilisés dans le cas de H_2O.

Les pic à faible vitesse sont complètement sous estimés par les modèles mais on peut supposer l'existence d'une contribution supplémentaire du disque ou de l'enveloppe non reproduite par le modèle, compte tenu de la taille des lobes importante devant les dimensions du jet. Cependant, pour aucun des trois objets, la raie 10-9 n'est correctement reproduite. le modèle prédit des flux trop faibles.

Pour IRAS 4A et IRAS 4B ces modèles sont ceux qui s'ajustent au mieux aux profils de CO, bien que cet ajustement soit moins parfait que dans le cas de H_2O. On constate que pour les raies 2-1, 4-3 et 6-5 le modèle parvient à bien reproduire les ailes des profils (de manière très satisfaisante dans le cas d IRAS 4B pour la raie 4-3, mais le modèle ne fournit pas de bons résultats pour la raie 10-9). Le modèle parvient donc, avec les mêmes paramètres qu'utilisés dans le cas de H_2O, à reproduire à la fois les profils de H_2O et les ailes des profils de CO. IRAS 2A est la seule source des trois qui avait été ajustée par le modèle de classe 0 avec $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$, et ce modèle donne des flux trop faibles en comparaison aux profils observés dans les raies de CO. Les profils CO prédits sont donc ici multipliés par un facteur *ad-hoc* 8. De plus, le paramètre $i = 80°$ ajusterait mieux la largeur des profils CO que le paramètre $i = 60°$ utilisé pour H_2O.

II.2-2 Comparaison des rapports de raies

Les rapports de raie CO 6-5 / H_2O $2_{02} - 1_{11}$ et CO 10-9 / H_2O $2_{02} - 1_{11}$ issus des observations de Kristensen et al. (2010) pour IRAS 2A sont représentés sur la Figure 8.19. Les rapports de raies observés sont comparés avec les prédictions des modèles de *classe 0 standard* avec deux angles i différents et avec les prédictions du modèle de *classe 0 extrême*.

Compte tenu des approximations sur le modèle (solution MHD non adaptée, enveloppe non reproduite, incertitude sur les taux d'accrétion ...), on peut considérer que pour les trois modèles le rapport de raie se retrouve proche des valeurs observées dans les ailes. Mais à faible vitesse ($|v| < 15\,{\rm km\ s}^{-1}$) les rapports observés sont supérieurs aux rapports prédits d'un facteur 3-4.

Dans les trois cas les largeurs à la base des pics, sur les figures suivantes, observés et prédits sont comparables. Sur cette figure on voit que l'angle d'inclinaison influe sur le

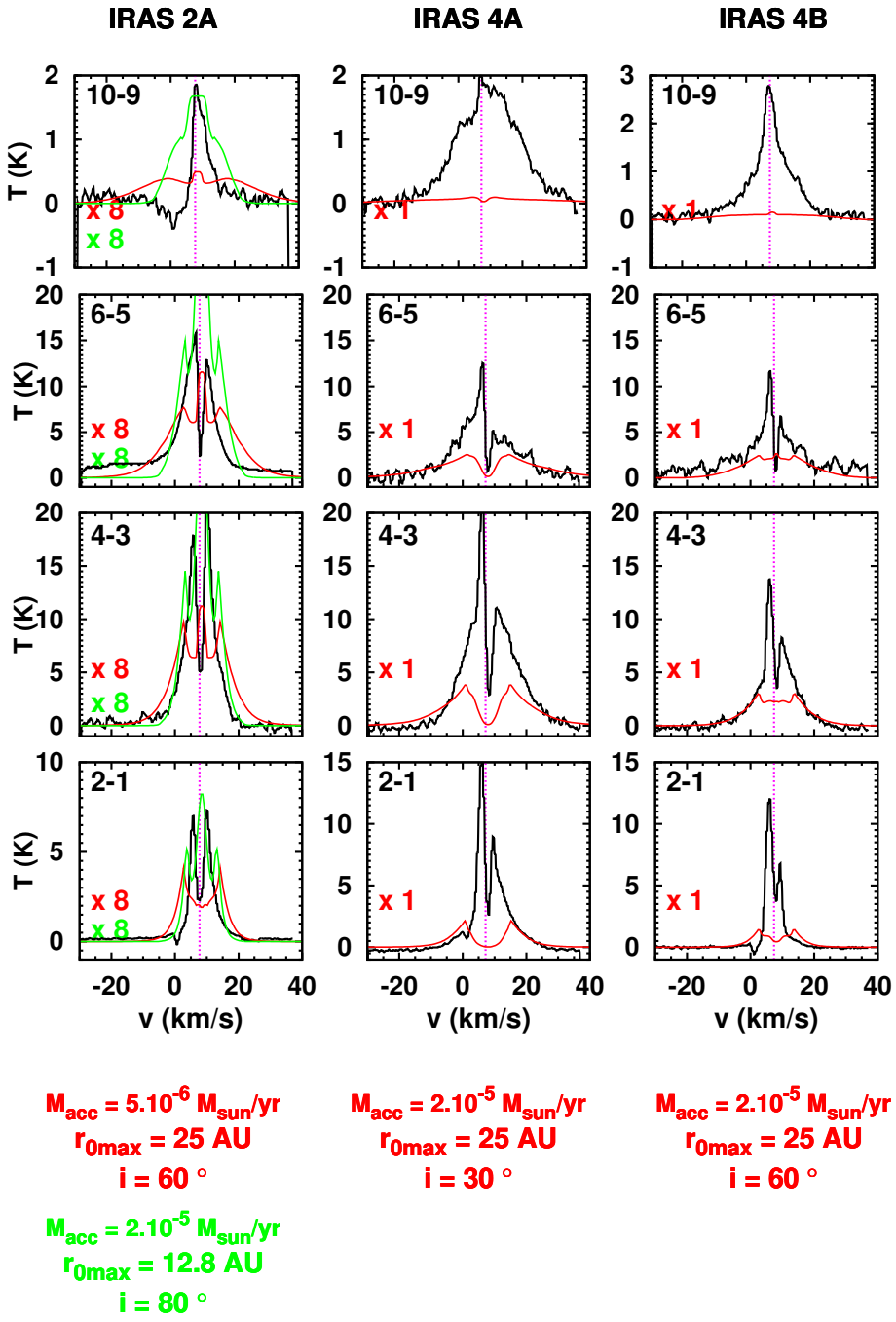


FIGURE 8.18 – *Comparaison des profils observés par Yıldız et al. (2010) dans* CO *2-1 (lobe JCMT de 22″), 4-3 (lobe JCMT de 11″), 6-5 (lobe APEX de 9″) et 10-9 (lobe Herschel de 20″) avec les modèles qui ajustent les observations en* H_2O *pour ces objets (en rouge) et le modèle qui ajuste les profils de* CO *(en vert s'il est différent du précédent). Les profils ont été calés sur la vitesse de la source.*

rapport CO 6-5 / H_2O $2_{02} - 1_{11}$: la valeur du rapport augmente dans les ailes quand i augmente. Mais l'angle i n'a que peu d'effet sur le rapport CO 10-9 / H_2O $2_{02} - 1_{11}$.

La Figure 8.20 compare les rapports de raies CO 10-9 / H_2O $2_{02} - 1_{11}$ pour IRAS 4A et pour IRAS 4B observés avec les rapports prédits par le modèle de *classe 0 b)*. Dans le cas de ces objets le modèle parvient plus difficilement à reproduire les observations.

Enfin, la Figure 8.21 présente la comparaison entre les rapports CO 6-5 / CO 10-9 observés par Yıldız et al. (2010) pour les trois objets IRAS 2A, 4A et 4B avec les prédictions des modèles de *classe 0 standard* et *classe 0 extrême*. Les observations montrent des rapports plutôt constants sur les fenêtres en v où ils ont été observés avec des valeurs proches de $\simeq 4$ pour IRAS 2A, $\simeq 3$ en pour IRAS 4A et $\simeq 2$ pour IRAS 4B. Mais les rapports prédits, varient de manière importante sur ces mêmes intervalles en vitesse, avec des valeurs moyennes supérieures aux rapports observés.

Donc les modèles ont tendance à prédire des raies dans CO 10-9 moins brillantes par rapport à H_2O $2_{02} - 1_{11}$ et CO 6-5 que dans les observations.

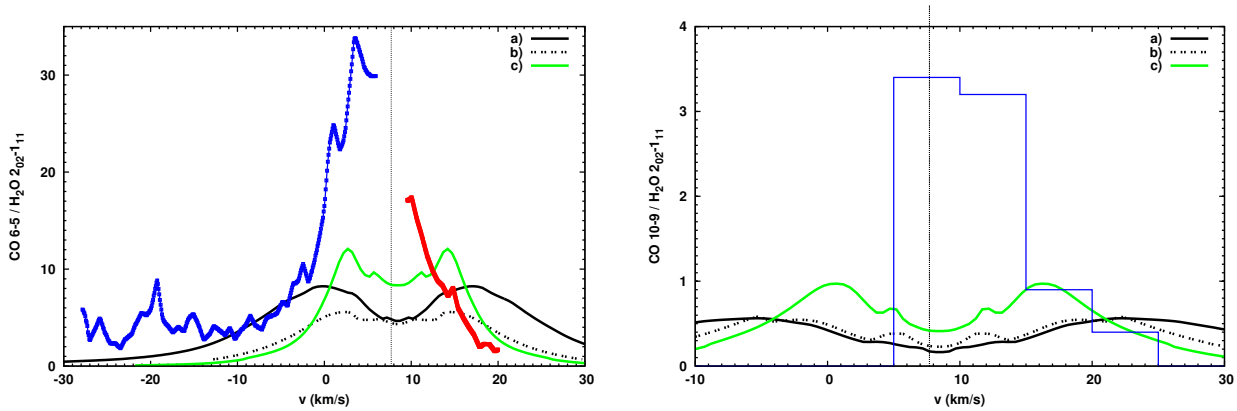


FIGURE 8.19 – *IRAS 2A :* ***Gauche*** *: rapport* CO *6-5* / H_2O $2_{02} - 1_{11}$*, observé par Kristensen et al. (2010) en rouge et bleu. La raie* CO *6-5 a été observée avec APEX-CHAMP*$^+$ *dans un lobe de* $9''$ *et la raie de* H_2O $2_{02} - 1_{11}$ *avec Herschel/HIFI dans un loble de* $22''$*. En noir et en vert les prédictions des modèles :* ***a)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 60°$ *(qui ajuste le mieux les raies de* H_2O*);* ***b)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 2 \times 10^{-5}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 80°$ *(qui ajuste le mieux les raies de* CO*);* ***c)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 80°$ *qui ajuste le mieux ce rapport de raies.* ***Droite*** *: rapport* CO *10-9* / H_2O $2_{02} - 1_{11}$ *observé, dans des intervalles de 5* $\rm km\,s^{-1}$ *et un lobe de* $19''$ *pour* CO *10-9 (histogramme bleu) et prédit pour les mêmes modèles qu'à gauche.*

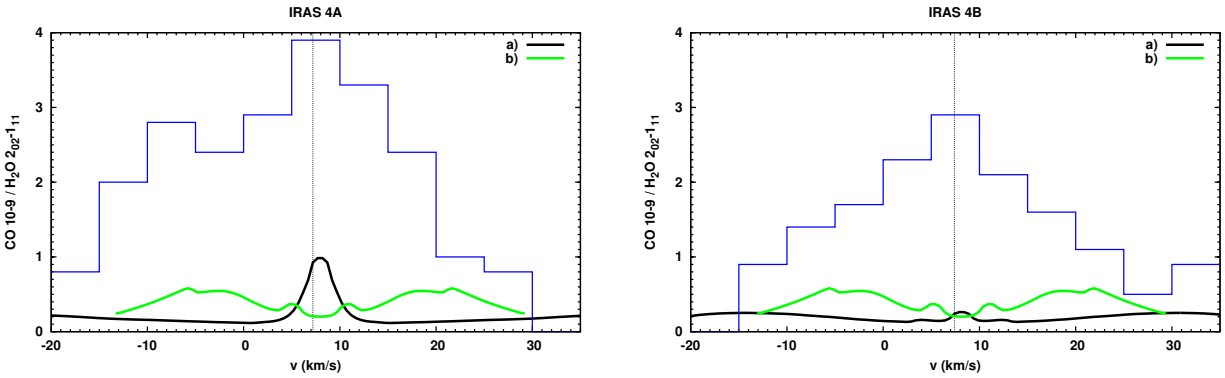


FIGURE 8.20 – ***Gauche*** *IRAS 4A : rapport* CO *10-9* / H_2O $2_{02} - 1_{11}$ *observés en bleu et prédits en noir et vert : Modèle* ***a)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 30°$ *; Modèle* ***b)*** *: avec* $i = 80°$. ***Droite*** *IRAS 4B : rapport* CO *10-9* / H_2O $2_{02} - 1_{11}$ *prédits avec : Modèle* ***a)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 60°$ *; Modèle* ***b)*** *: avec* $i = 80°$.

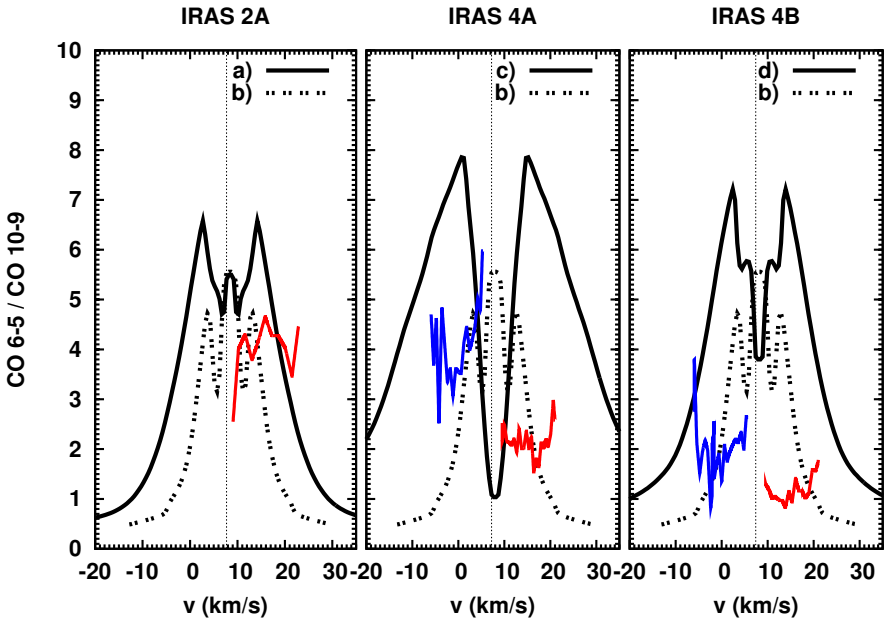


FIGURE 8.21 – *Rapport* CO *6-5* / CO *10-9 observé par Yıldız et al. (2010) en rouge et bleu, les deux raies sont dans un même lobe de* 20″. *En noir les différents modèles : Modèle* ***a)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 60°$ *(modèle qui reproduit le profils* H_2O *à 557* GHz *de IRAS 2A) ; Modèle* ***b)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 80°$ *; Modèle* ***c)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 30°$ *; Modèle* ***d)*** *:* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$, $r_0^{\rm max} = 25\,{\rm UA}$ *et* $i = 60°$ *(modèle qui reproduit les profils à 557* GHz *de* H_2O *pour IRAS 4A et IRAS 4B).*

II.2-3 Comparaison des intensités totales

On compare aussi les intensités intégrées prédites par les modèles indiqués sur la Figure 8.18 pour IRAS 4A et 4B avec les observations réaliées par Yıldız et al. (2012b)

TABLE 8.1 – *Comparaison entre l'intensité intégrée entre* v = −20 *et* +30 km s^{-1} *observée par Yıldız et al. (2012b) pour IRAS 4A et 4B avec l'intensité intégrée prédite par le modèle qui ajuste les profils de la Figure 8.18, respectivement : classe 0 b) avec* $r_0^{\max} = 25$ UA *et* $i = 30°$ *et classe 0 b) avec* $r_0^{\max} = 25$ UA *et* $i = 60°$.

IRAS 4A				IRAS 4B			
Raie	lobe ($''$)	Observations TdV (K km s^{-1})	Prédictions TdV (K km s^{-1})	Raie	lobe ($''$)	Observations TdV (K km s^{-1})	Prédictions TdV (K km s^{-1})
1-0	46	60.1	5.4				
2-1	22	117.1	30.2	2-1	22	54.7	19.2
3-2	15	128.0	59.6	3-2	15	57.0	38.8
4-3	11	220.0	88.2	4-3	11	114.0	59.2
6-5	9	110.5	79.6	6-5	9	52.3	61.1
10-9	20	40.7	4.2	10-9	20	29.7	3.8

au FCRAO pour la raie 1-0 de CO, au JCMT pour les raies 2-1 à 4-3, avec APEX-CHAMP$^+$ pour la raie 6-5 et avec Herschel/HIFI pour la raie 10-9. Ces comparaisons sont regroupées dans la Table 8.1. Les valeurs prédites correspondent au double de l'intensité totale calculée pour le lobe décalé vers le bleu du jet.

Les intensités totales dans les raies 3-2 et 4-3 sont sous estimées par les modèles d'un facteur 2. La raie 10-9 est sous estimée par un facteur ∼10. Ces prédictions, bien que ne reproduisant pas les observations restent cohérentes avec les comparaisons effectuées sur les profils et les rapports de raies.

II.3 Comparaison avec les observations Herschel/HIFI dans la raie 10-9

La Figure 8.22 compare les profils dans la raie 10-9 de CO observés par Yıldız et al. (2013) avec Herschel/HIFI avec les prédictions des différents modèles pour les mêmes objets de classe 0 et I que ceux étudiés pour la raie à 557 GHz de H_2O dans le chapitre précédent (les propriétés de ces objets sont données dans la Table 7.3). Pour chaque objet on a reporté en rouge le profil CO prédit pour le modèle qui ajustait au mieux la raie à 557 GHz de H_2O (voir Figure 7.32). En vert sur la Figure 8.22 on a représenté le modèle qui ajuste le mieux les profils de CO 10-9, quand il est différent du cas de H_2O $1_{10} - 1_{01}$. En général les différences entre les deux modèles sont dans le sens de l'augmentation de $r_0^{\max}$ ou de i. Pour certains objets on a appliqué un facteur multiplicatif aux prédictions de CO 10-9 pour les deux modèles.

Pour environ la moitié des comparaisons, les prédictions parviennent à reproduire les ailes et la largeur des profils observés. Pour ces objets les modèles de vent de disques pourraient expliquer une partie du flux CO observé. Les pics à basse vitesse ne sont pas reproduits, et pourraient provenir de contributions de l'enveloppe ou du disque. Pour les objets avec un flux important comme Ser SMM1 (ou bien que le pic ne soit pas reproduit, les ailes semblent assez bien reproduites par le modèle de *classe 0 extrême*, le même que celui utilisé pour H_2O au chapitre précédent) ou Ser SMM4, les résultats sur les profils obtenus sont moins bons que dans le cas de H_2O. Mais il faut noter une forte contamination possible des raies CO par l'enveloppe et par la cavité du flot moléculaire entraîné par le jet qui émettent moins fortement en H_2O qu'en CO.

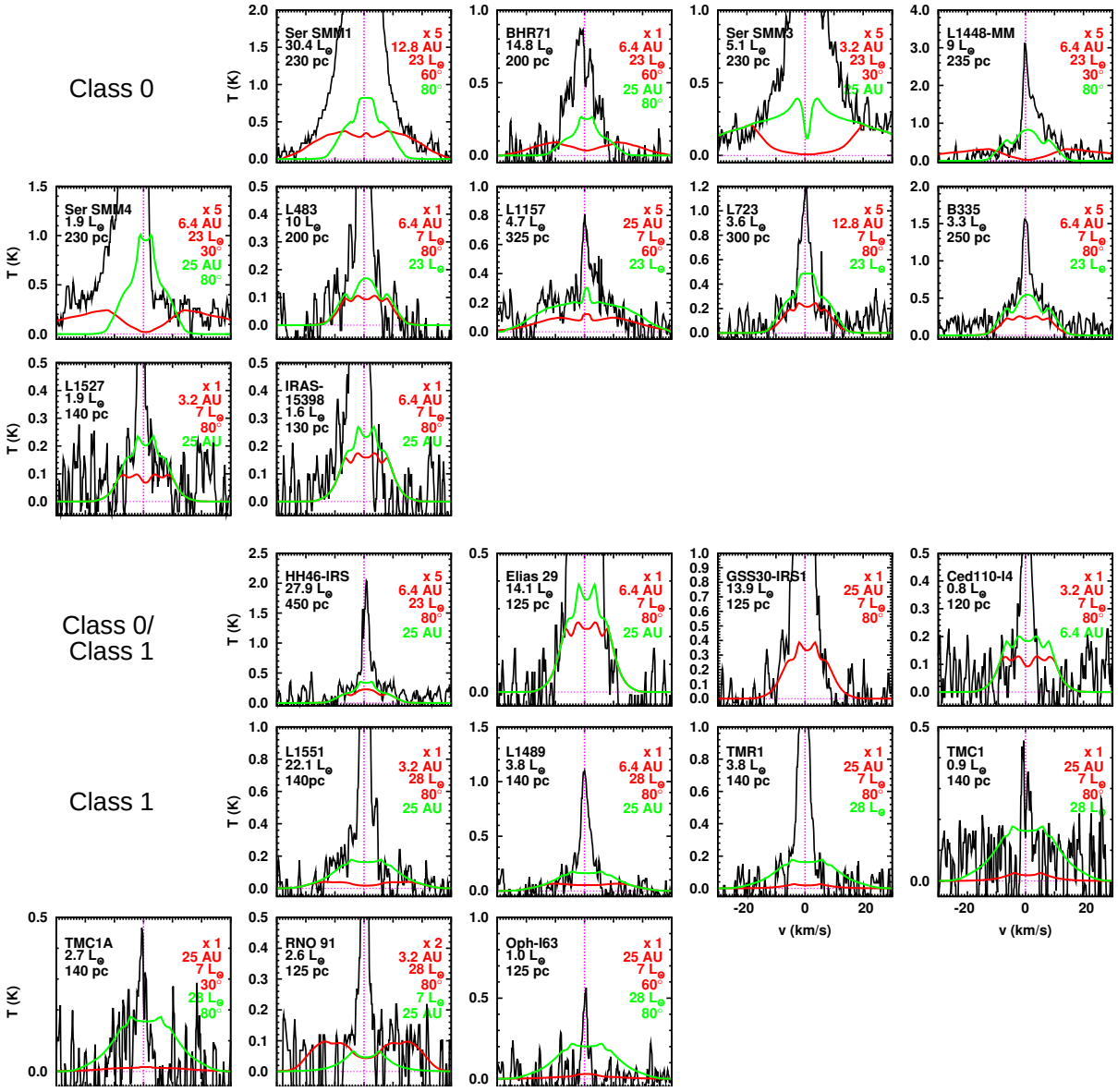


FIGURE 8.22 – *Comparaison entre les profils dans la raie* CO *10-9 pour observés (en noir) par Yıldız et al. (2013) et le modèle ajustant au mieux dans la raie à 557* GHz *de* H_2O *(en rouge). Le modèle ajustant au mieux le profil de* CO *10-9 est tracé en vert si différent du précédent. Tous les profils ont été recentrés sur* $v = 0\,\mathrm{km\,s^{-1}}$*. En haut à droite de chaque panneau sont indiqués : le facteur multiplicatif appliqués aux deux modèles vert et rouge,* $r_0^{\max}$*, i et la luminosité d'accrétion permettant d'identifier le modèle utilisé (pour les classes 0,* $L_{\rm tot} = 23\,L_\odot$ *correspond à* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$ *et* $L_{\rm tot} = 7\,L_\odot$ *à* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$*, et pour les classes I* $L_{\rm tot} = 28\,L_\odot$ *correspond à* $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$ *et* $L_{\rm tot} = 7\,L_\odot$ *à* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$*).*

II.4 Diagrammes d'excitation

Les températures d'excitation rotationnelle obtenues par Yıldız et al. (2013) pour les différents objets présentés en Figure 8.22, sont reportées sur la Figure 8.23 en fonction de $n_{\rm H}(1000\,\mathrm{UA})$. Elles sont comparées aux températures d'excitation obtenues à partir des modèles de classe 0 et I. Les modèles et les températures observées s'alignent sur

la même température moyenne de $T_{\rm rot} = 70\,{\rm K}$. De plus les modèles de classe 0 et I se situent dans les mêmes régions de la figure que les étoiles de même classe.

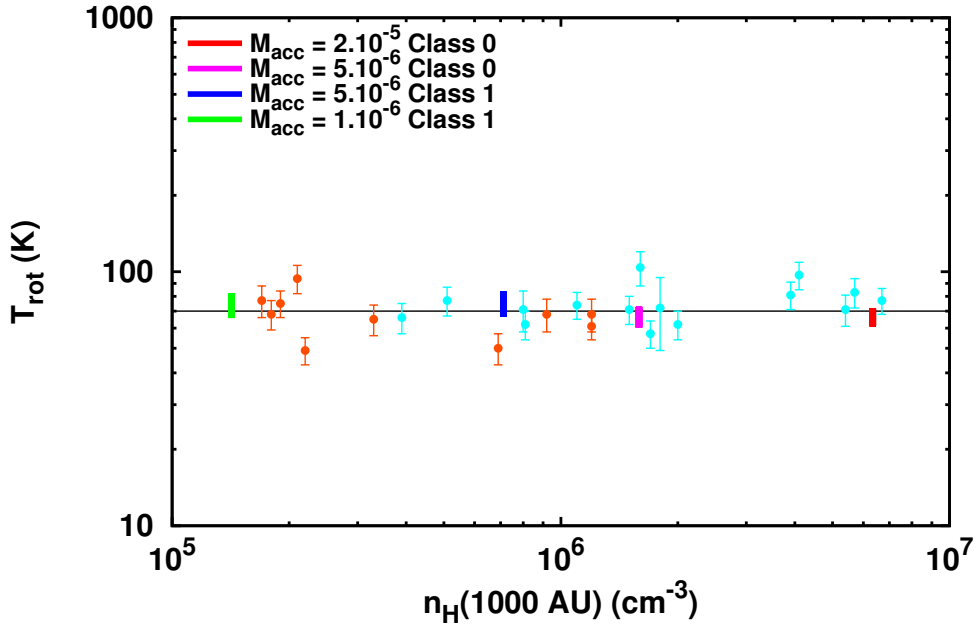


FIGURE 8.23 – *Température rotationnelle déduite des ajustements des diagrammes d'excitation de* CO *avec* $E_u \leq 300\,{\rm K}$ *en fonction de* $n_{\rm H}(1000\,{\rm UA})$. *Les points correspondent aux observations de Yıldız et al. (2013), bleus pour les classes 0 et orange pour les classes I. Les barres verticales correspondent aux modèles pour différentes valeurs de i et de* $r_0^{\rm max}$. *La température moyenne pour les observations est de* $\sim 70\,{\rm K}$ *(ligne horizontale).*

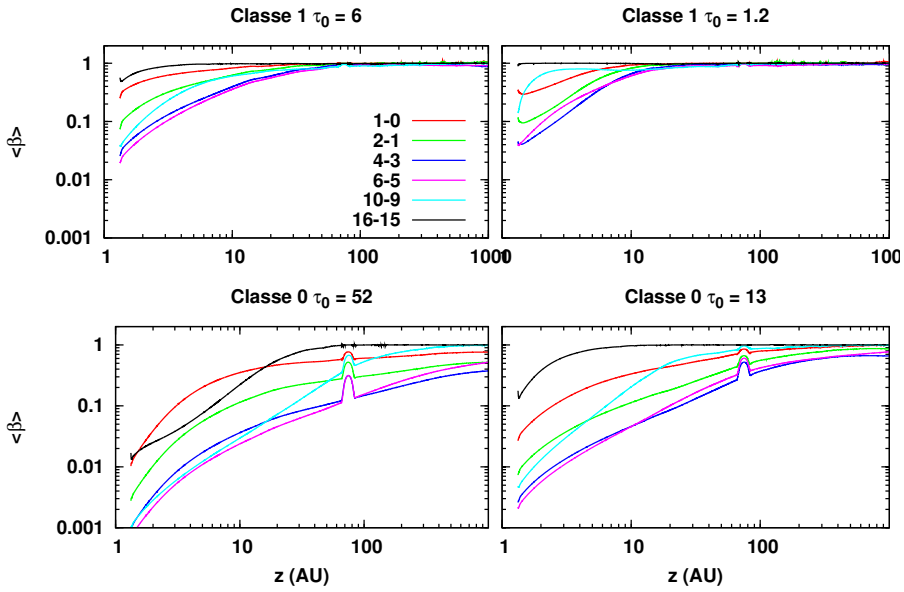


FIGURE 8.24 – *Probabilité d'échappement* $<\beta>$ *pour quelques raies de* CO *le long de la ligne d'écoulement ancrée à* $r_0 = 25\,{\rm UA}$ *pour les différents modèles de classes 0 et I indiqués par leur valeur de* τ_0. *Les raies issues des faibles* $J_u < 10$ *sont optiquement minces pour* $r_0 < 6\,{\rm UA}$ *car se sont les niveaux supérieurs qui sont peuplés.*

III Conclusion

Les prédictions de CO(2-1) sont en accord avec les observations de CB26 sur plusieurs points : la morphologie et le gradient dû à la rotation. Cependant une solution MHD plus dense et plus lente serait préférable.

On a effectué des comparaisons dans la raie 10-9 avec les mêmes modèles qu'utilisés avec H_2O au chapitre précédent. Les mêmes modèles parviennent à reproduire à la fois les observations en H_2O et en CO pour la moitié des objets, et ce en utilisant une grille de paramètres ($\dot{M}_{\rm acc}$, $M_\star$, $r_0^{\rm max}$ et i) plutôt clairsemée et une seule solution MHD qui n'est pas spécialement adaptée à chacun des objets étudiés. Pour quelques objets le changement d'un paramètre comme $r_0^{\rm max}$ ou i permet de retrouver des prédictions de CO en accord avec les observations. Néanmoins, dans un grand nombre de cas, le modèle parvient plus difficilement que dans le cas de H_2O à reproduire les observations pour les objets de classe 0 et I. De manière générale le modèle ne reproduit pas le pic CO à faible vitesse qui doit provenir de l'enveloppe protostellaire. Pour les raies 2-1, 4-3 et 6-5 les ailes sont assez bien reproduites. Les températures rotationnelles déduites des observations et des modèles sont en accord.

Les intensités et brillances prédites dans les différentes raies de CO ne sont pas toujours suffisantes pour reproduire les observations dans les ailes. Alors que dans tous les modèles l'abondance en CO est importante et reste proche de 10^{-4}-10^{-5}. Les raies de CO ont des probabilités d'échappement plus grandes que les raies de H_2O (voir Figure 8.24), mais elles ne présentent pas d'effet maser.

On peut chercher des explications aux insuffisances du modèle, ainsi que des voies d'amélioration du modèle parmi :

– Comme dans le cas de H_2O, le lobe instrumental est large devant les dimensions du jet moléculaire et englobe la contribution de l'enveloppe, du disque et de la cavité qui ne sont pas simulés par le modèle. Ces contributions seront plus importantes en CO qu'en H_2O (dont l'abondance ne devient importante que dans les régions chaudes $T > 300\,\mathrm{K}$ ou fortement choquées $\mathrm{v} > 10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$).
– Explorer les parties du jet à l'intérieur du rayon de sublimation. Si CO y survit elles pourraient être à l'origine de flux plus importants à haute vitesse. De même la contribution de chocs dans le jet ou entre le jet et la cavité pourrait ajouter du flux CO à grande vitesse sur les profils.

Chapitre

Conclusions et perspectives

Sommaire

I Bilan 244
I.1 Prédictions 244
I.2 Comparaison avec les observations 244
II Perspectives 245
II.1 Prédictions pour ALMA 245
II.2 Progrès dans la modélisation 246

On dispose, à l'issue de ce travail, d'un outil performant qui permet de réaliser une grande variété de prédictions de vent de disques directement comparables aux observations à haute résolution angulaire ou spectrale de H_2, H_2O *et* CO. *L'ensemble des comparaisons réalisées avec les observations dans ces différentes molécules sont très prometteuses et ouvrent la voie sur de nouvelles perspectives de développement.*

I Bilan

Pour la première fois, un modèle dynamique de vent de disque permet de faire des prédictions synthétiques dans les raies moléculaires qui soient directement comparables aux observations

I.1 Prédictions

Les abondances des espèces dans le vent de disque sont hors équilibre et dépendent directement des abondances à la surface du disque d'accrétion, qui n'est pas observable directement dans la phase de classe 0 / I. Si le modèle se révêle exact, les observations des abondances dans le jet pourraient permettre d'accéder à l'abondance des espèces à la surface du disque.

Les résultats obtenus sur l'autoécrantage de H_2 confirment sont efficacité. Le rayon de lancement tel que l'abondance de H_2 à la fin de la ligne d'écoulement reste supérieure à la moitié de l'abondance initiale est $r_0(50\%) = 1$ UA pour le modèle de classe II et de classe I ($r_0(50\%) \lesssim 1$ UA dans Panoglou et al. (2012)). Ces mêmes résultats montrent que CO n'est pas forcément préservé dans les jets de classe II et que H_2 est un meilleur traceur pour ces objets.

Dans notre modèle la température du gaz est plus élevée à la base du jet que dans le modèle de Panoglou et al. (2012). Ces régions contribuent au flux mesuré dans les raies excitées de H_2O dans les lobes Herschel. L'augmentation de $T_{\rm gaz}$ est due à l'augmentation de la température des grains d'une part, et au chauffage par H_2O d'autre part. H_2O chauffe le gaz jusque $z/r = 0.9$ ($r_0 = R_{\rm sub}$) à 0.7 ($r_0 = 25$ UA) pour le modèle de classe 0 extrême, $z/r \sim$ 0.5-0.3 pour le modèle de classe 0 standard et de $z/r \sim$ 0.3-0.2 pour le modèle de classe I extrême. Pour les plus faibles densités (modèle de classe I standard et de classe II) H_2O se comporte comme un refroidisseur uniquement. CO joue aussi un rôle plus minoritaire dans le chauffage du gaz à la base du jet.

Dans les prédictions de H_2O et de CO, on a obtenu que $T\mathrm{d}v \propto \tau_0$ aux faibles excitations et $T\mathrm{d}v \propto \tau_0^2$ aux hautes excitations. La mesure du $T\mathrm{d}v$ dans une raie peut contraindre la valeur de τ_0 et par conséquent de $\dot{M}_{\rm acc} \times M_\star^{-1/2}$. À $\dot{M}_{\rm acc}$ et $M_\star$ fixés $r_0^{\rm max}$ influe aussi sur l'intensité de la raie alors que l'inclinaison i influe sur sa largeur.

I.2 Comparaison avec les observations

- On a effectué un grand nombre de comparaisons entre les prédictions du modèle à la fois dans les raies de H_2O et dans celles de CO et les observations réalisées avec Herschel/HIFI dans un grand lobe spatial (quelques 10″ mais avec une bonne résolution spectrale). Le modèle parvient à reproduire les ailes de raie d'un grand nombre de profils observés à la fois dans la raie à 557 GHz et dans les raies excitées de H_2O. Les mêmes modèles parviennent à reproduire à la fois les observations en H_2O et en CO pour une majorité de sources, et ce en utilisant une grille de paramètres ($\dot{M}_{\rm acc}$, $M_\star$, $r_0^{\rm max}$ et i) plutôt clairsemée et une seule solution MHD qui n'est pas spécifiquement adaptée à chacun des objets étudiés. Pour quelques objets le changement d'un paramètre comme $r_0^{\rm max}$ ou i permet de retrouver des prédictions de CO en accord avec les observations.

- Les prédictions du modèle basé sur la solution MHD de vent de disque ajustée sur les observations de DG Tau ont été comparées aux récentes observations à haute résolution angulaire ($\Delta x = 0.12''$), mais basse résolution spectrale ($\delta \mathrm{v} = 75\,\mathrm{km\,s^{-1}}$) réalisées avec VLT/SINFONI. Les prédictions pour $r_0^{\mathrm{min}} = R_{\mathrm{sub}}$ sont en bon accord avec les observations en termes de morphologie du jet, d'intensité et de rapport de raies. Cependant la vitesse prédite par la solution est plus grande d'un facteur ~2-3 que celle observée, à la fois dans la direction poloïdale et en terme de rotation. Une solution MHD plus lente serait préférable.
- Les prédictions de CO(2-1) sont en accord avec les observations de CB26, réalisées au PdBI avec une résolution angulaire de quelques arcsecondes, sur plusieurs points : la morphologie et le gradient dû à la rotation. À nouveau, une solution MHD plus lente serait préférable.

II Perspectives

II.1 Prédictions pour ALMA

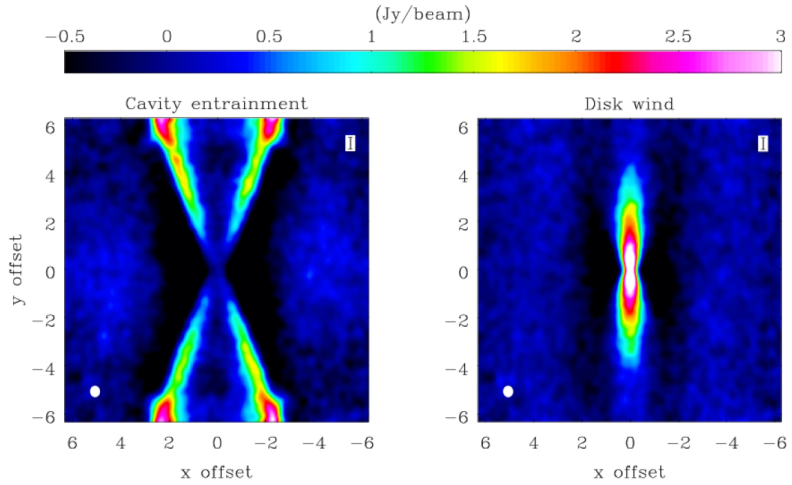


Figure 9.1 – *Prédiction préparée pour un proposal ALMA cycle 1 sur le jet de BHR71, carte en* CO *6-5, à gauche : modèle d'entraînement turbulent, à droite : modèle de vent de disque MHD.*

ALMA offre à la fois une excellente résolution angulaire ($\Delta x \sim 0.1''$) et une excellente résolution spectrale ($\delta \mathrm{v} < 0.1\,\mathrm{km\,s^{-1}}$) sur une large bande couvrant plusieurs raies simultanément, permettant donc de déduire les abondances chimiques des espèces. La perspective de comparer les résultats des prédictions en termes de profils et d'abondance aux futures observations réalisées avec ALMA contituera un test intensif du modèle.

J'ai réalisé des prédictions pour deux proposals ALMA :

- Cycle 0 : *The origin of molecular jets : new clues from CO and SiO in HH212* (PI Claudio Codella, proposal accepté), observation de CO 6-5 et CO 3-2. Ces observations permettront de tester le modèle qui prédit un CO chaud avec $T \geq 300\,\mathrm{K}$ le long du jet chauffé par la diffusion ambipolaire, sans que les chocs n'interviennent.
- Cycle 1 : (proposal accepté) Dans HH212 il s'agit d'observer l'abondance de SiO en phase gazeuse et de la comparer aux prédictions du modèle dans lequel 10% du Si se trouve sous forme de SiO dans les glaces des grains et s'évapore à la base du

jet. L'effet de la photodissociation de SiO pourra être mesuré à partir des abondances mesurées en ^{29}SiO.

- Cycle 1 : *Constraining outflow entrainment mechanisms* (PI Lars Kristensen, proposal rejeté), observation de BHR71 afin d'expliquer l'origine de la composante large (*broad*) observée dans les profils Herschel : par entraînement turbulent du gaz de la cavité par un vent ténu et peu collimaté ou par le modèle de vent de disque, les cartes prédites pour ALMA sont représentées sur la Figure 9.1.

II.2 Progrès dans la modélisation

Du bilan effectué il ressort un certain nombre de progrès réalisables en ce qui concerne la solution MHD en elle-même et le suivi de l'évolution radiative, thermique et chimique le long des lignes d'écoulement qui en résultent :

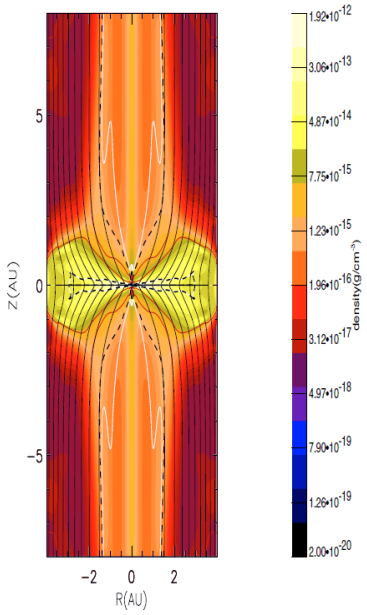


Figure 9.2 – *Simulation MHD d'un vent stellaire collimaté par un vent de disque (Meliani et al. 2006). Les lignes noires indiquent les lignes de champ et la couleur indique la densité du gaz.*

- étendre le traitement LVG développé pour CO et H_2O à d'autres molécules détectées dans les jets de classe 0 qui seront obervées avec ALMA, comme SiO, SO. Tenir compte des éventuelles absorptions du flux émis par un lobe du jet par l'autre pour les raies optiquement épaisses, ou inclure l'effet d'une enveloppe dans les profils pour les classes 0.
- Utiliser une solution MHD plus lente (λ plus faible) : cela permettrait de prédire des vitesses poloïdales et de rotation plus faibles, peut-être en meilleur accord avec les observations de DG Tau et de CB26. Les calculs pour une nouvelle solution MHD sont complexes sont en cours par l'équipe de J. Ferreira. Une solution MHD multifluide permettrait de s'affranchir des limites sur la vitesse de dérive ion-neutre. Une telle solution influerait sur la diffusion ambipolaire et pourrait diminuer la vitesse d'éjection dans les classes II, mais les calculs sont complexes.
- Explorer les lignes d'écoulement à l'intérieur du rayon de sublimation, où les réations de formation en phase gazeuse vont devenir cruciales pour la survie de H_2. Cela suppose d'adapter le code de chimie à un gaz sans poussière et permettra d'explorer la question de la survie des molécules dans ces régions très proches de l'étoile et fortement affectées par le rayonnement UV et X.
- Inclure les processus de désorption (thermique, X, UV, rayons cosmiques) en concurence avec la réadsorption le long des lignes d'écoulement : H_2O pourrait se retrouver sous forme de glace le long des lignes d'écoulement les plus externes, ce qui pourrait éventuellement modifier l'émissivité du jet.
- Inclure les effets du choc dans le jet, le long des lignes d'écoulement, pourrait permettre de continuer les calculs au delà du point de recollimation. On peut envisager de

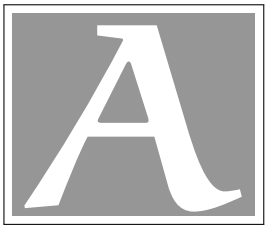
traiter une structure d'éjection multicomposante, ce qui nécessite d'aborder l'interaction du vent de disque avec le vent magnétosphérique (chocs le long de la première ligne d'écoulement, voir Figure 9.2), l'interaction du vent de disque avec le milieu ambiant (bowshocks). Il est possible d'adapter les moyens de prédictions à un modèle non stationnaire (Fig. 9.2) issus des simulations numériques MHD, mais ces simulations posent le problème de la résolution, du temps de calcul et de l'identification des lignes d'écoulement.

- Étendre notre étude au cas des proto-étoiles plus massives où les modèles de vents de disque MHD pourraient constituer un moyen efficace de sonder l'intérieur de l'enveloppe. Dans ce cas il faudrait inclure le pompage des niveaux rotationnels par le champ de rayonnement de l'étoile.

Annexes

Annexe

CHIMIE



SOMMAIRE

I ABONDANCES CHIMIQUES INITIALES . . . 252
II RÉSEAU DE RÉACTIONS CHIMIQUES . . . 254
II.1 Réactions chimiques, généralités . . . 254
II.2 Loi d'Arrhenius . . . 255
II.3 Réactions en phase gazeuse . . . 256
II.4 Photoréactions . . . 256
II.5 Temps caractéristiques . . . 257
III LE RÉSEAU CHIMIQUE . . . 257
IV DÉTAILS SUR LA CHIMIE DE H_2 . . . 263
IV.1 Détail sur la photodissociation de H_2 . . . 263
IV.2 Formation de H_2 . . . 264
IV.3 Rapport ortho-para . . . 265
V EFFET PHOTO-ÉLECTRIQUE SUR LES GRAINS . . . 266
VI STRUCTURE CHIMIQUE DANS LE VENT DE DISQUE . . . 267
VII TEMPÉRATURE ET SPECTRE INFRAROUGE LOCAL DES POUSSIÈRES . . . 270

Résumé : ***Dans cette annexe nous présentons les abondances fractionnelles initiales des 134 espèces chimiques, le réseau des ~1500 réactions chimiques, le calcul du temps caractéristiques des réactions et nous donnons enfin les abondances de quelques espèces le long des lignes d'écoulement ; en complément des résultats présentés dans le chapitre 3.***

I Abondances chimiques initiales

La liste suivante donne les abondances chimiques initiales utilisées lors de l'initialisation de tous les modèles effectués. L'espèce $C_{54}H_{18}$ représente les PAH et l'espèce G représente les grains.

specie	n(X)/nH	formation enthalpy (kCal/mol)
-	-	-
H	1.001D-05	51.63
H2	5.000D-01	0.00
He	1.000D-01	0.00
C	1.00D-15	169.98
CH	1.00D-15	141.60
CH2	1.00D-15	93.90
CH3	1.00D-15	34.80
CH4	1.00D-15	-15.97
O	1.240D-04	58.98
O2	1.00D-15	0.00
OH	1.00D-15	9.25
H2O	1.00D-15	-57.10
CO	1.00D-15	-27.20
CO2	1.00D-15	-93.96
C2	1.00D-15	198.20
C2H	1.00D-15	113.30
C2H2	1.00D-15	56.32
C3	1.00D-15	194.00
C3H	1.00D-15	177.00
C3H2	1.00D-15	114.00
CH3OH	1.00D-15	-99.99
H2CO	1.00D-15	-99.99
HCO2H	1.00D-15	-99.99
N	6.390D-05	112.53
NH	1.00D-15	90.00
NH2	1.00D-15	46.20
NH3	1.00D-15	-9.29
CN	1.00D-15	103.20
HCN	1.00D-15	32.39
HNC	1.00D-15	48.00
N2	1.00D-15	0.00
NO	1.00D-15	21.46
S	1.00D-15	65.60
SH	1.00D-15	32.60
H2S	1.00D-15	-4.23
CS	1.00D-15	63.00
SO	1.00D-15	1.20
SO2	1.00D-15	-70.30
OCS	1.00D-15	-34.00
Si	1.00D-15	106.70
SiH	1.00D-15	89.69
SiH2	1.00D-15	69.14
SiH3	1.00D-15	48.54
SiH4	1.00D-15	11.00
SiO	1.00D-15	-24.30
SiO2	1.00D-15	-73.00
Mg	1.00D-15	35.00
Fe	1.00D-15	98.70
C54H18	1.00D-15	-99.99
G	4.052D-11	-99.99
H2O*	1.031D-04	
CO*	8.270D-06	
CO2*	1.340D-05	
CH4*	1.550D-06	
NH3*	1.556D-05	
CH3OH*	1.860D-05	
H2CO*	6.200D-06	
HCO2H*	7.240D-06	
OCS*	2.070D-07	
H2S*	3.720D-06	
SiO*	1.800D-06	
O**	1.390D-04	
Si**	3.190D-05	
Mg**	3.700D-05	
Fe**	3.230D-05	
C**	1.630D-04	
H+	1.00D-15	365.20
H2+	1.00D-15	355.70
H3+	1.00D-15	265.00
He+	1.00D-15	567.00
C+	8.270D-05	429.70
CH+	1.00D-15	387.00
CH2+	1.00D-15	331.00
CH3+	1.00D-15	262.00
CH4+	1.00D-15	272.00
CH5+	1.00D-15	216.00
O+	1.00D-15	373.00
O2+	1.00D-15	278.40
OH+	1.00D-15	309.31
H2O+	1.00D-15	233.70
H3O+	1.00D-15	143.00
CO+	1.00D-15	295.97
HCO+	1.00D-15	197.30
HCO2+	1.00D-15	141.00
C2+	1.00D-15	476.00
C2H+	1.00D-15	404.00
C2H2+	1.00D-15	317.50
C2H3+	1.00D-15	267.90
C3+	1.00D-15	479.00
C3H+	1.00D-15	381.00
C3H2+	1.00D-15	330.00
C3H3+	1.00D-15	282.00
N+	1.00D-15	447.69
NH+	1.00D-15	401.10

NH2+	1.00D-15	302.70	SO+	1.00D-15	239.20
NH3+	1.00D-15	224.90	HSO+	1.00D-15	210.00
NH4+	1.00D-15	151.00	HSO2+	1.00D-15	143.00
CN+	1.00D-15	429.30	HOCS+	1.00D-15	181.00
C2N+	1.00D-15	410.00	Si+	1.00D-15	295.00
HCN+	1.00D-15	346.00	SiH+	1.00D-15	271.82
H2CN+	1.00D-15	226.00	SiH2+	1.00D-15	276.36
H2NC+	1.00D-15	265.00	SiH3+	1.00D-15	237.32
N2+	1.00D-15	359.29	SiH4+	1.00D-15	279.90
N2H+	1.00D-15	247.50	SiH5+	1.00D-15	219.38
NO+	1.00D-15	235.33	SiO+	1.00D-15	239.52
HNO+	1.00D-15	256.80	SiOH+	1.00D-15	-99.99
S+	1.470D-05	304.00	Fe+	1.501D-08	280.24
SH+	1.00D-15	271.80	C54H18+	1.00D-15	-99.99
H2S+	1.00D-15	237.00	G+	2.673D-12	-99.99
H3S+	1.00D-15	190.00	C54H18-	1.003D-06	-99.99
CS+	1.00D-15	324.00	G-	2.864D-12	-99.99
HCS+	1.00D-15	243.00			

Les Figures A.1, A.2 et A.3 présentent les conditions initiales en abondances de H_2O, CO et SiO ainsi que la température du gaz et des grains, et la densité du gaz.

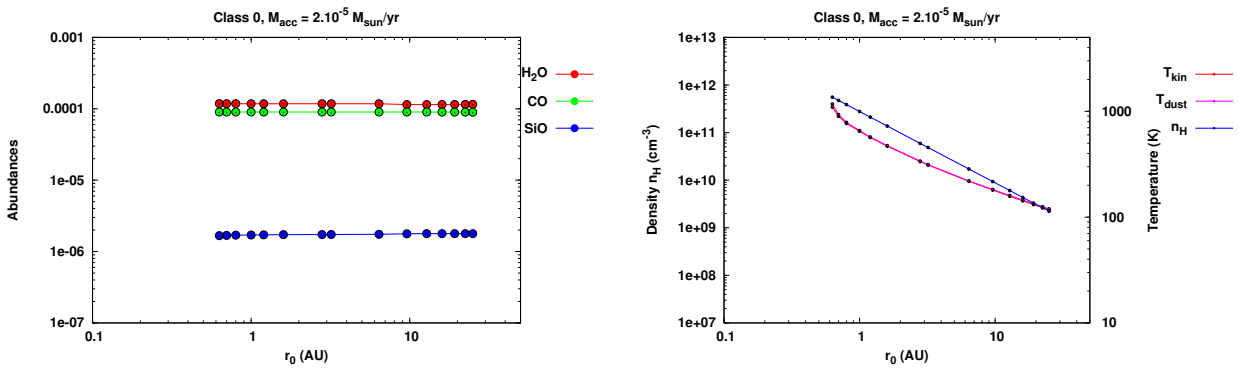


FIGURE A.1 – Gauche *: abondance initiale en* H_2O*,* CO *et* SiO *pour chaque ligne d'écoulement du modèle de classe 0 avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 2 \times 10^{-5}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$. Droite *: température du gaz, des grains et densité* $n_{\rm H}$ *au départ des lignes d'écoulement pour le même modèle.*

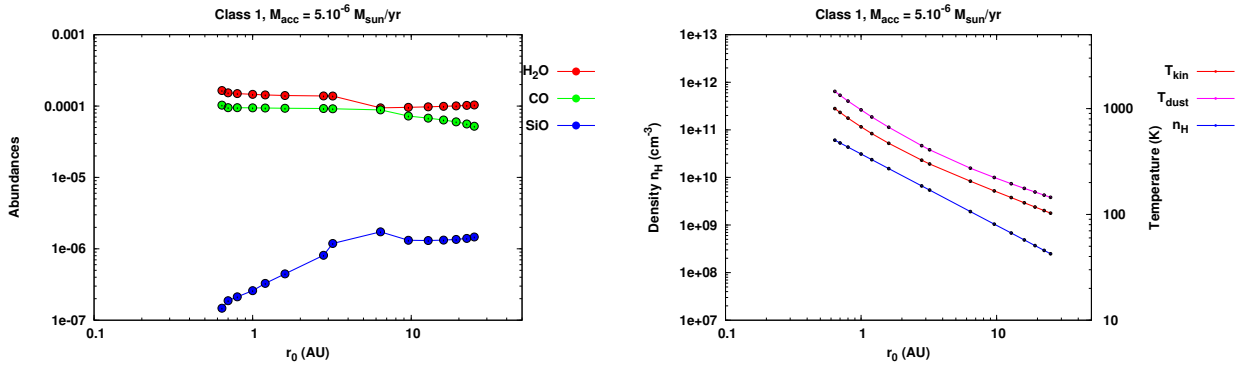


FIGURE A.2 – Gauche *: abondance initiale en* H_2O, CO *et* SiO *pour chaque ligne d'écoulement du modèle de classe I avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$. Droite *: température du gaz, des grains et densité* $n_{\rm H}$ *au départ des lignes d'écoulement pour le même modèle.*

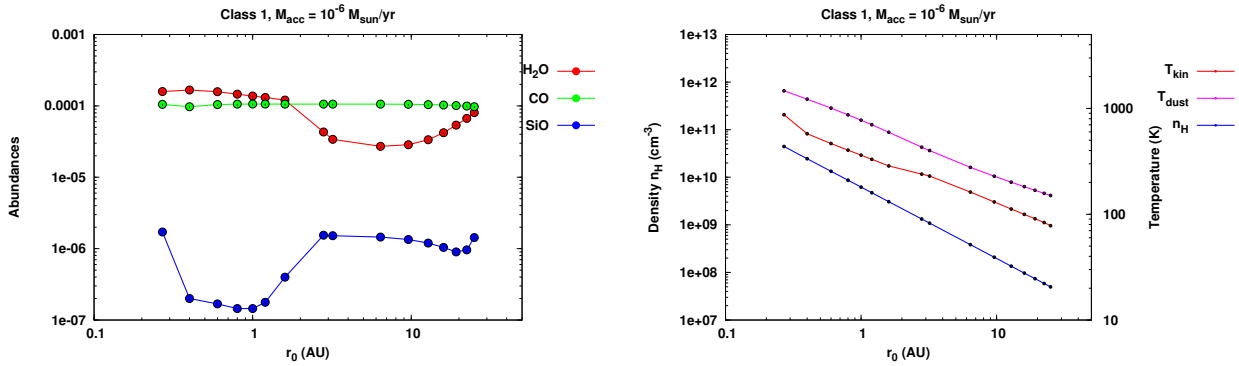


FIGURE A.3 – Gauche *: abondance initiale en* H_2O, CO *et* SiO *pour chaque ligne d'écoulement du modèle de classe I avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$. Droite *: température du gaz, des grains et densité* $n_{\rm H}$ *au départ des lignes d'écoulement pour le même modèle.*

II RÉSEAU DE RÉACTIONS CHIMIQUES

II.1 RÉACTIONS CHIMIQUES, GÉNÉRALITÉS

Une réaction (i) entre deux espèces A et B :

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} \;\rightarrow\; \mathrm{P}_1 + \mathrm{P}_2 + \mathrm{P}_3 + \mathrm{P}_4$$

possède un taux de formation des produits u_i exprimé en $\mathrm{cm}^{-3}\ \mathrm{s}^{-1}$ qui dépend des abondances (en cm^{-3}) des deux réactants :

$$u_i = k_i n(\mathrm{A}) n(\mathrm{B}) = k n_{\rm H}^2 x(\mathrm{A}) x(\mathrm{B}) \tag{A.1}$$

où k_i est la *vitesse de la réaction* (i) exprimée en $\mathrm{cm}^3\ \mathrm{s}^{-1}$. $x(\mathrm{A}) = n(\mathrm{A})/n_{\rm H}$ est l'abondance fractionnelle de l'espèce chimique A. Ainsi le taux de réaction dépend de $n_{\rm H}$ au carré qui décroit à mesure que l'on s'éloigne de l'étoile. L'auto-similarité du vent de

disque impose $n_{\rm H}^2 \propto \dot{M}_{\rm acc}^2 r_0^{-3}$, et donc une décroissance globale des taux de réaction chimique au travers du vent de disque. Le coefficient de réaction k est donné par la loi d'Arrhenius modifiée et exprime la vitesse de réaction en fonction de la température T.

Le réseau chimique est limité par les espèces chimiques qui y sont incluses, l'absence d'une espèce pouvant inhiber une voie de formation d'une autre espèce ou sa présence pouvant altérer d'autres processus chimiques. Par ailleurs, il reste des incertitudes autour de beaucoup de vitesses de réactions pour lesquelles des études théoriques et expérimentales seraient nécessaires.

II.2 Loi d'Arrhenius

La vitesse de réaction k_i est donné par la loi d'Arrhenius modifiée :

$$k_i = \gamma \left(\frac{T_{\rm eff}}{300\,{\rm K}} \right)^{\alpha} \times e^{\frac{-\beta}{T_{\rm eff}}} \tag{A.2}$$

où γ, α et β sont des paramètres caractérisant la réaction (i). La loi d'Arrhenius est une approximation de la vitesse de réaction qui tient compte de sa dépendance dans la température et de la barrière d'activation [1] ou de l'endothermicité [2] de la réaction. La température effective est $T_{\rm eff}$, α est un paramètre sans dimension, γ est en cm^3 s^{-1}, avec β en K. La température effective est donnée par (Pineau des Forêts et al. 1986) :

$$\begin{aligned} T_{\rm eff} &= T_s + T_r \\ \text{avec } T_r &= \frac{m_{\rm A} T_{\rm A} + m_{\rm B} T_{\rm B}}{m_{\rm A} m_{\rm B}} \text{ et } T_s = \frac{\mu_{\rm AB}}{3k_{\rm B}} {\rm v}_{\rm AB}^2 \end{aligned} \tag{A.3}$$

où ${\rm v}_{\rm AB} = {\rm v}(A) - {\rm v}(B)$ est la vitesse de dérive [3] entre les deux espèces A et B. Si les deux réactants appartiennent au même fluide alors $T_{\rm eff} = T_r$. L'exponetielle dans l'expression du coefficient de réaction entre les ions et les molécules est définie comme étant (Pineau des Forêts et al. 1986) :

$$f(\beta) = \max\left(\frac{\beta - 3T_s}{T_r}, \frac{\beta}{T_{\rm eff}} \right)$$

Pour les réactions entre les grains et les espèces du gaz, le taux de réaction fait intervenir les sections efficace géométrique des grains. Dans le cas où l'espèce A réagit avec une espèce à la surface du grain la température effective devient :

$$\begin{aligned} T_{\rm eff}^d &= T_s^d + T_r^d \\ \text{avec } T_r^d &= T_{\rm A} \text{ et } T_s^d = \frac{m_{\rm A}}{3k_{\rm B} {\rm v}_{in}^2} \end{aligned} \tag{A.4}$$

La composante T_s provient des collisions inélastiques entre les différents fluides.

1. L'énergie d'activation, introduite par Arrhenius, est la quantité d'énergie nécessaire pour initier la réaction chimique, elle correspond à l'énergie minimum du système pour que la réaction se produise. Elle peut être apportée sous forme d'énergie cinétique.

2. Par opposition à une réaction exothermique, une réaction endothermique est accompagnée d'une absorption de chaleur.

3. la vitesse de dérive entre les espèces ionisées et les espèces neutres est ${\rm v}_{in}$ calculée par la relation (2.26).

II.3 Réactions en phase gazeuse

Les réactions en phase gazeuse se déclinent en plusieurs catégories :
- **Réactions ions-neutres** (ex : $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H - 4640\,K.$)
- **Réactions neutres-neutres** (ex : $O + H_2 \rightarrow OH + H - 2980\,K.$)
- **Recombinaisons**
  - **Recombinaison dissociative** : (ex : $HCO^+ + e- \rightarrow CO + H$) si l'ion est une molécule alors elle est dissociée en même temps.
  - **Recombinaison radiative** : (ex : $C^+ + e^- \rightarrow C$+photon)
- **Échanges de charge** (ex : $H^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + H$).
- **Associations radiatives** (ex : $C^+ + H_2 \rightarrow CH_2^+$+photon)
- **Dissociations collisionnelles** (ex : $H_2 + H \rightarrow H + H + H$)
- **Ionisations collisionnelles** (ex : $H_2 + H^+ \rightarrow H_2^+ + H^+ + e^-$).

Les **Processus avec les PAH et les grains** : ces processus, que les grains et PAH soient chargés ou neutres, sont implémentés commes les autres réactions. L'équilibre de charge des grains et des PAHs est traité d'après Flower & Pineau des Forêts (2003) (ce qui comprend par exemple la capture d'un électron par un grain ou un PAH, l'effet photoélectrique, ou le détachement électronique comme par exemple : $PAH^- + H \rightarrow$PAH+H$+ e^-$).

Les processus avec les grains comprennent :
+ **L'adsorption** : une espèce en phase gazeuses se colle sur les manteaux de glace des grains.
+ **La désorption** : une espèce du manteau de glace est éjectée suite à une collision entre le grain et une espèce gazeuse ou par absorption d'un photon UV ou encore par chauffage du manteau.
+ **L'érosion des noyaux des grains**
+ **La formation de H_2 à la surface des grains**

II.4 Photoréactions

Ces réactions, jouent un rôle important dans la structure thermique et chimique du vent de disque et en particulier dans les régions les plus proches de l'étoile. Les trois sources de photons UV : issus de l'étoile et du choc d'accrétion, issus du rayonnement X et les photons secondaires sont pris en compte dans les processus d'ionisation et de destruction de nombreuses espèces chimiques. Les processus de photoréaction sont :
- **Photodissociation** : SiO : SiO+photon$\rightarrow$ Si + O.
- **Photoionisation** : C+photon$\rightarrow$ $C^+ + e^-$.

Le cas particulier de H_2 et de CO est traité plus en détail en section VI.1 (page 61).

Les rayons X et les rayons cosmiques peuvent aussi induire d'autres types de réaction avec le gaz :
- **Impact électronique** : les photoélectrons éjectés par les atomes lourds après absorption d'un photon X ou d'un rayon cosmique peuvent ioniser une espèce du gaz par collision
- **Photons secondaires** : ils peuvent produire des photodissociations (ex : H_2O+photon secondaire $\rightarrow$ OH + H) et des photoionisations (ex : O_2+photon secondaire $\rightarrow$ $O_2{}^+ + e^-$)

II.5 Temps caractéristiques

Pour bien comprendre l'établissement de l'état chimique dans le vent de disque, il est utile de comparer les temps caractéristiques des réactions chimiques et des processus avec les grains amenant à la formation et à la destruction d'une espèce avec le temps de trajet du gaz le long des lignes d'écoulement (le temps dynamique). Dans le cas du calcul des conditions initiales, ce temps caractéristique est comparé au temps d'évolution. Si le temps caractéristique d'une réaction est inférieur au temps dynamique alors la réaction se produit effectivement et influe sur l'évolution chimique du gaz, par contre si le temps caractéristique d'une réaction est supérieur au temps dynamique, alors la réaction n'a effectivement pas le temps de se produire, elle n'a pas le temps de provoquer de changement dans l'abondance de l'espèce A.

Soit une réaction (i) impliquant la formation l'espèce A, avec le taux de réaction $u_{i,\mathrm{A}}$. Et soit j_A la réaction inverse impliquant la destruction de l'espèce A, avec le taux de réaction $u_{j,\mathrm{A}}$ le temps caractéristique associé à la réaction nette est noté $t_{i,\mathrm{A}}$ et il est déterminé par :

$$t_{i,\mathrm{A}} = N_\mathrm{A} \frac{n(\mathrm{A})}{u_{i,\mathrm{A}} - u_{j,\mathrm{A}}} \tag{A.5}$$

Le nombre N_A est le nombre de particules de l'espèce A (sans dimension) produites au cour d'une réaction (i). Le temps caractéristique est inversement proportionel au taux de réaction : plus la réaction est efficace plus son temps caractéristique associé est court.

Le temps dynamique correspond à la durée $t_\mathrm{dyn}(z)$ nécessaire à une particule fluide de gaz pour avancer sur la ligne d'écoulement jusqu'à l'altitude z. Ce temps est sommé à chaque pas d'intégration k où le gaz franchi la distance $\delta z(k)$ à la vitesse moyenne $v(k)$:

$$t_\mathrm{dyn}(z) = \sum_{\substack{k \\ z(k)<z}} \frac{\delta z(k)}{v(k)} \tag{A.6}$$

III Le réseau chimique

Les colonnes correspondent à :
– R1, R2 sont les deux réactants de la réaction,
– P1, P2, P3, P4 est la liste des produits de la réaction,
– γ en $\mathrm{cm}^{-3}\ \mathrm{s}^{-1}$, β et α sont les coefficients de la loi d'Ahrrenius
avec quelques exceptions pour les photo-réactions :

$$k = \gamma \chi e^{-\beta} A_V$$

avec γ en s^{-1} et β sans dimension. Dans cette expression χ est le rapport entre le flux UV local et le flux de Draine à 1000 Å. Pour la formation de H_2 :

$$k = \gamma \left(\frac{T}{300\,\mathrm{K}}\right)^\alpha \times \frac{n_\mathrm{H}}{n(\mathrm{H})}$$

```
!R1     R2      P1      P2      P3      P4      gamma    alpha    beta
!-------------------------------------------------------------------------
 H      +H      =H+     H       ELECTR          1.70D-13  0.50 158000.0
 H      +H      =H+     H       ELECTR          3.00D-13  0.50 149000.0
 H      +ELECTR =H+     ELECTR  ELECTR          9.20D-10  0.5  157890.0
 H      +H+     =H+     H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
 H      +He+    =He+    H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
 H      +S+     =S+     H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
 H      +Fe+    =Fe+    H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
 He     +H      =He+    H       ELECTR          8.63D-14  0.43 285000.0
 He     +H+     =H+     He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
 He     +He+    =He+    He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
 He     +S+     =S+     He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
```

He	+Fe+	=Fe+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
C	+ELECTR	=C+	ELECTR	ELECTR		3.40D-09	0.5	131000.0
O	+ELECTR	=O+	ELECTR	ELECTR		1.79D-09	0.5	158000.0
H	+CRP	=H+	ELECTR			5.20D-01	0.00	0.0
He	+CRP	=He+	ELECTR			4.30D-01	0.00	0.0
C	+CRP	=C+	ELECTR			1.80D+00	0.00	0.0
O	+CRP	=O+	ELECTR			2.80D+00	0.00	0.0
N	+CRP	=N+	ELECTR			2.10D+00	0.00	0.0
H+	+ELECTR	=H	PHOTON			2.90D-12	-.74	0.0
He+	+ELECTR	=He	PHOTON			4.50D-12	-.67	0.0
C+	+ELECTR	=C	PHOTON			4.40D-12	-.61	0.0
O+	+ELECTR	=O	PHOTON			3.40D-12	-.64	0.0
Fe+	+ELECTR	=Fe	PHOTON			3.70D-12	-.65	0.0
N+	ELECTR	=N	PHOTON			3.80D-12	-0.62	0.0
S+	+ELECTR	=S	PHOTON			3.90D-12	-.63	0.0
Si+	ELECTR	=Si	PHOTON			4.90D-12	-0.60	0.0
H+	+O	=O+	H			6.00D-10	0.00	227.0
O+	+H	=H+	O			6.00D-10	0.00	0.0
H+	+Fe	=Fe+	H			7.40D-09	0.00	0.0
H+	+S	=S+	H			1.30D-09	0.00	0.0
H+	Si	=Si+	H			9.90D-10	0.00	0.0
He+	Si	=Si+	He			3.30E-09	0.00	0.0
C+	+S	=S+	C			1.50D-09	0.00	0.0
S+	+Fe	=Fe+	S			1.80D-10	0.00	0.0
C+	+Fe	=Fe+	C			2.60D-09	0.00	0.0
C+	Si	=Si+	C			2.10D-09	0.00	0.0
S+	Si	=Si+	S			1.60D-09	0.00	0.0
C	+PHOTON	=C+	ELECTR			2.20D-10	0.00	2.96
Fe	PHOTON	=Fe+	ELECTR			2.80D-10	0.00	1.9
S	PHOTON	=S+	ELECTR			1.20D-09	0.00	2.6
Si	+PHOTON	=Si+	ELECTR			9.65D-10	0.00	2.37
SiO	+PHOTON	=Si	O			1.00D-8	0.00	2.21
CO	PHOTON	=C	O			2.00D-10	0.00	6.0
H	+H	=H2				8.14D-17	0.5	0.0
H	+H3+	=H3+	H+	ELECTR		1.30D-13	0.5	157890.0
H	+H3O+	=H3O+	H+	ELECTR		1.30D-13	0.5	157890.0
H	+H3S+	=H3S+	H+	ELECTR		1.30D-13	0.5	157890.0
H	+HCO+	=HCO+	H+	ELECTR		1.30D-13	0.5	157890.0
H	+NH3+	=NH3+	H+	ELECTR		1.30D-13	0.5	157890.0
H	+NH4+	=NH4+	H+	ELECTR		1.30D-13	0.5	157890.0
H	+SiOH+	=SiOH+	H+	ELECTR		1.30D-13	0.5	157890.0
H	+O2+	=O2+	H+	ELECTR		1.30D-13	0.5	157890.0
He	+H3+	=H3+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
He	+H3O+	=H3O+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
He	+H3S+	=H3S+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
He	+HCO+	=HCO+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
He	+NH3+	=NH3+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
He	+NH4+	=NH4+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
He	+SiOH+	=SiOH+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
He	+O2+	=O2+	He+	ELECTR		1.10D-13	0.5	285328.0
H2	+ELECTR	=H2+	ELECTR	ELECTR		1.40D-09	0.5	179160.0
H2	+PHOTON	=H	H			4.20D-11	0.0	6.5
H2	+H+	=H+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+H3+	=H3+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+He+	=He+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+H3O+	=H3O+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+H3S+	=H3S+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+HCO+	=HCO+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+Fe+	=Fe+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+NH3+	=NH3+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+NH4+	=NH4+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+S+	=S+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+SiOH+	=SiOH+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+O2+	=O2+	H2+	ELECTR		1.10D-13	0.5	179160.0
H2	+ELECTR	=ELECTR	H	H		2.00D-09	0.5	116300.0
H2	+H	=H	H	H		1.00D-10	0.0	52000.0
H2	+He	=He	H	H		1.00D-11	0.0	52000.0
H2	+H2	=H2	H	H		1.25D-11	0.0	52000.0
H2	+H+	=H+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+H3+	=H3+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+He+	=He+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+H3O+	=H3O+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+H3S+	=H3S+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+HCO+	=HCO+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+Fe+	=Fe+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+NH3+	=NH3+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+NH4+	=NH4+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+S+	=S+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+SiOH+	=SiOH+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
H2	+O2+	=O2+	H	H		3.00D-11	0.5	52000.0
C54H18	+ELECTR	=C54H18-	PHOTON			1.00D-07	0.00	0.0
C54H18+	+ELECTR	=C54H18	PHOTON			3.30D-06	-.50	0.0
C54H18+	+C54H18-	=C54H18	C54H18			3.00D-09	-.50	0.0
C54H18-	+H+	=C54H18	H			7.50D-08	-.50	0.0
C54H18-	+H3+	=C54H18	H2	H		2.20D-08	-.50	0.0
C54H18-	+H3+	=C54H18	H	H	H	2.20D-08	-.50	0.0
C54H18-	+He+	=C54H18	He			3.80D-08	-.50	0.0
C54H18-	+C+	=C54H18	C			2.20D-08	-.50	0.0
C54H18-	+H3O+	=C54H18	H2O	H		1.70D-08	-.50	0.0
C54H18-	+H3S+	=C54H18	H2S	H		1.30D-08	-.50	0.0
C54H18-	+NH4+	=C54H18	NH3	H		1.80D-08	-.50	0.0
C54H18-	+HCO+	=C54H18	CO	H		1.40D-08	-.50	0.0
C54H18-	+HCS+	=C54H18	CS	H		1.10D-08	-.50	0.0
C54H18-	+Si+	=C54H18	Si			1.40D-08	-.50	0.0
C54H18-	+Fe+	=C54H18	Fe			1.00D-08	-.50	0.0
C54H18-	+S+	=C54H18	S			1.30D-08	-.50	0.0
C54H18	+H+	=C54H18+	H			4.40D-09	0.00	0.0
C54H18	+H3+	=C54H18+	H2	H		1.30D-09	0.00	0.0
C54H18	+H3+	=C54H18+	H	H	H	1.30D-09	0.00	0.0
C54H18	+He+	=C54H18+	He			2.20D-09	0.00	0.0
C54H18	+C+	=C54H18+	C			1.30D-09	0.00	0.0
C54H18	+H3O+	=C54H18+	H2O	H		1.00D-09	0.00	0.0
C54H18	+H3S+	=C54H18+	H2S	H		7.40D-10	0.00	0.0
C54H18	+NH4+	=C54H18+	NH3	H		1.00D-09	0.00	0.0
C54H18	+HCO+	=C54H18+	CO	H		8.20D-10	0.00	0.0
C54H18	+HCS+	=C54H18+	CS	H		6.50D-10	0.00	0.0
C54H18	+Si+	=C54H18+	Si			8.30D-10	0.00	0.0
C54H18	+Fe+	=C54H18+	Fe			5.90D-10	0.00	0.0
C54H18	+S+	=C54H18+	S			7.80D-10	0.00	0.0
C54H18-	+H	=C54H18	H	ELECTR		3.30D-09	0.00	5500.0
C54H18-	+C	=C54H18	C	ELECTR		9.60D-10	0.00	5500.0
C54H18-	+CH	=C54H18	CH	ELECTR		9.60D-10	0.00	5500.0
C54H18-	+O	=C54H18	O	ELECTR		8.30D-10	0.00	5500.0
C54H18-	+OH	=C54H18	OH	ELECTR		8.30D-10	0.00	5500.0
C54H18	+SECPHO	=C54H18+	ELECTR			2.00D+04	0.00	140000.0
C54H18-	+SECPHO	=C54H18	ELECTR			2.00D+04	0.00	140000.0
GRAIN	+ELECTR	=GRAIN-	PHOTON			6.900D-5	0.50	0.0
GRAIN-	+H+	=GRAIN	H			1.60D-06	0.50	0.0
GRAIN-	+H3+	=GRAIN	H2	H		4.61D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+H3+	=GRAIN	H	H	H	4.61D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+He+	=GRAIN	He			8.00D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+C+	=GRAIN	C			4.61D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+H3O+	=GRAIN	H2O	H		3.66D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+H3S+	=GRAIN	H2S	H		2.70D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+NH4+	=GRAIN	NH3	H		3.76D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+HCO+	=GRAIN	CO	H		2.96D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+HCS+	=GRAIN	CS	H		2.38D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+Si+	=GRAIN	Si			3.01D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+Fe+	=GRAIN	Fe			2.13D-07	0.50	0.0
GRAIN-	+S+	=GRAIN	S			2.82D-07	0.50	0.0
GRAIN	+H+	=GRAIN+	H			1.60D-06	0.50	0.0
GRAIN	+H3+	=GRAIN+	H2	H		4.61D-07	0.50	0.0
GRAIN	+H3+	=GRAIN+	H	H	H	4.61D-07	0.50	0.0
GRAIN	+He+	=GRAIN+	He			8.00D-07	0.50	0.0
GRAIN	+C+	=GRAIN+	C			4.61D-07	0.50	0.0
GRAIN	+H3O+	=GRAIN+	H2O	H		3.66D-07	0.50	0.0
GRAIN	+H3S+	=GRAIN+	H2S	H		2.70D-07	0.50	0.0
GRAIN	+NH4+	=GRAIN+	NH3	H		3.76D-07	0.50	0.0
GRAIN	+HCO+	=GRAIN+	CO	H		2.96D-07	0.50	0.0
GRAIN	+HCS+	=GRAIN+	CS	H		2.38D-07	0.50	0.0
GRAIN	+Si+	=GRAIN+	Si			3.01D-07	0.50	0.0
GRAIN	+Fe+	=GRAIN+	Fe			2.13D-07	0.50	0.0
GRAIN	+S+	=GRAIN+	S			2.82D-07	0.50	0.0
GRAIN+	+ELECTR	=GRAIN	PHOTON			6.900D-5	0.50	0.0
GRAIN	+SECPHO	=GRAIN+	ELECTR			0.63D+08	0.00	140000.0
GRAIN-	+SECPHO	=GRAIN	ELECTR			0.41D+09	0.00	140000.0
H2	+CRP	=H+	H	ELECTR		4.00D-02	0.00	0.0
H2	+CRP	=H	H			0.50D+00	0.00	0.0
H2	+CRP	=H2+	ELECTR			9.60D-01	0.00	0.0
CO	+CRP	=CO+	ELECTR			2.30D+00	0.00	0.0
C	+SECPHO	=C+	ELECTR			1.02D+03	0.00	140000.0
CH	+SECPHO	=C	H			1.46D+03	0.00	140000.0
CH4	+SECPHO	=CH3	H			4.68D+03	0.00	140000.0
CH+	+SECPHO	=C	H+			3.52D+02	0.00	140000.0
OH	+SECPHO	=O	H			1.02D+03	0.00	140000.0
H2O	+SECPHO	=OH	H			1.94D+03	0.00	140000.0
O2	+SECPHO	=O2+	ELECTR			2.34D+02	0.00	140000.0
O2	+SECPHO	=O	O			1.50D+03	0.00	140000.0
CO2	+SECPHO	=CO	O			3.42D+03	0.00	140000.0
C2	+SECPHO	=C	C			4.74D+02	0.00	140000.0
C2H	+SECPHO	=C2	H			8.16D+03	0.00	140000.0
C2H2	+SECPHO	=C2H	H			1.03D+04	0.00	140000.0
C2H2	+SECPHO	=C2H2+	ELECTR			2.62D+03	0.00	140000.0
C3	+SECPHO	=C2	C			2.24D+03	0.00	140000.0
C3H	+SECPHO	=C3	H			8.16D+03	0.00	140000.0
C3H2	+SECPHO	=C3H	H			8.16D+03	0.00	140000.0
CO	+SECPHO	=C	O			2.80D+01	0.00	140000.0
O	+H2	=OH	H			1.55D-13	2.80	2980.0
CO	+H	=OH	C			1.10D-10	0.50	77700.0
O2	+H	=OH	O			1.63D-09	-.90	8750.0
OH	+H	=O	H2			7.00D-14	2.80	1950.0
OH	+H2	=H2O	H			9.54D-13	2.00	1490.0
H2O	+H	=OH	H2			5.24D-12	1.90	9265.0
C	+H2	=CH	H			1.16D-09	0.50	14100.0
C	+H	=CH	PHOTON			1.00D-17	0.00	0.0
CH	+H2	=CH2	H			2.38D-10	0.00	1760.0
CH2	+H2	=CH3	H			5.18D-11	0.17	6400.0
CH3	+H2	=CH4	H			3.00D-10	0.00	5460.0
C2	+H2	=C2H	H			1.60D-10	0.00	1419.0
C2H	+H2	=C2H2	H			1.14D-11	0.00	950.0
CH	+H	=C	H2			1.16D-09	0.50	2200.0
CH2	+H	=CH	H2			4.70D-10	0.00	370.0
CH3	+H	=CH2	H2			5.18D-11	0.17	5600.0
CH4	+H	=CH3	H2			3.00D-10	0.00	6560.0
O2	+C	=CO	O			3.30D-11	0.50	0.0
OH	+CO	=CO2	H			4.40D-13	-1.15	390.0
OH	+C	=CO	H			3.10D-11	-.36	0.0
OH	+O	=O2	H			3.10D-11	-.36	0.0
CH	+O	=HCO+	ELECTR			2.40D-14	0.50	0.0
CH	+O	=CO	H			9.50D-11	0.50	0.0
CH2	+O	=CO	H	H		2.00D-11	0.50	0.0
CH3	+O	=CO	H2	H		1.80D-10	0.50	0.0
C2	+O	=CO	C			5.00D-11	0.50	0.0
C2H	+O	=CO	CH			1.00D-10	0.00	250.0

```
C3      +O      =CO      C2                    5.00D-11  0.50      0.0
C3H     +O      =C2H     CO                    5.00D-11  0.50      0.0
C3H2    +O      =C2H2    CO                    5.00D-11  0.50      0.0
C+      +H      =CH+     PHOTON                7.00D-17  0.00      0.0
C+      +H2     =CH2+    PHOTON                5.00D-16  0.00      0.0
C+      +H2     =CH+     H                     1.50D-10  0.00   4640.0
CH+     +H      =C+      H2                    1.50D-10  0.00      0.0
CH+     +H2     =CH2+    H                     1.20D-09  0.00      0.0
CH2+    +H      =CH+     H2                    1.20D-09  0.00   2700.0
CH2+    +H2     =CH3+    H                     7.00D-10  0.00      0.0
CH3+    +H      =CH2+    H2                    7.00D-10  0.00  10560.0
CH3+    +H2     =CH5+    PHOTON                6.00D-15  0.00      0.0
CH3+    +H2     =CH4+    H                     2.00D-10  0.00  32500.0
CH4+    +H      =CH3+    H2                    2.00D-10  0.00      0.0
CH4+    +H2     =CH5+    H                     4.00D-11  0.00      0.0
CH5+    +H      =CH4+    H2                    4.00D-11  0.00   2200.0
H2+     +ELECTR =H       H                     1.60D-08  -.43      0.0
H3+      ELECTR =H       H       H             5.10d-08  -.52      0.0
H3+      ELECTR =H2      H                     1.70d-08  -.52      0.0
CH+     +ELECTR =C       H                     1.50D-07  -.42      0.0
CH2+    +ELECTR =C       H2                    1.25D-07  -.50      0.0
CH2+    +ELECTR =CH      H                     1.25D-07  -.50      0.0
CH3+    +ELECTR =CH2     H                     1.75D-07  -.50      0.0
CH3+    +ELECTR =CH      H2                    1.75D-07  -.50      0.0
CH4+    +ELECTR =CH3     H                     3.00D-07  -.50
CH4+    +ELECTR =CH2     H       H             3.00D-07  -.50
CH5+    +ELECTR =CH      H2      H2            8.75D-08  -.30      0.0
CH5+    +ELECTR =CH2     H2      H             8.75D-08  -.30      0.0
CH5+    +ELECTR =CH3     H2                    8.75D-08  -.30      0.0
CH5+    +ELECTR =CH4     H                     8.75D-08  -.30      0.0
H+      +H2     =H2+     H                     6.40D-10  0.00  21300.0
H2+     +H      =H+      H2                    6.40D-10  0.00      0.0
H2+     +H2     =H3+     H                     2.10D-09  0.00      0.0
H3+     +H      =H2+     H2                    2.10D-09  0.00  20000.0
H+      +OH     =OH+     H                     2.10D-09  0.00      0.0
H+      +O2     =O2+     H                     1.20D-09  0.00      0.0
H+      +H2O    =H2O+    H                     8.20D-09  0.00      0.0
H+      +CH     =CH+     H                     1.90D-09  0.00      0.0
H+      +CH2    =CH+     H2                    1.40D-09  0.00      0.0
H+      +CH2    =CH2+    H                     1.40D-09  0.00      0.0
H+      +CH3    =CH3+    H                     3.40D-09  0.00      0.0
H+      +CH4    =CH3+    H2                    2.28D-09  0.00      0.0
H+      +CH4    =CH4+    H                     1.52D-09  0.00      0.0
H+      +CO2    =HCO+    O                     4.20D-09  0.00      0.0
H2+     +C      =CH+     H                     2.40D-09  0.00      0.0
H2+     +O      =OH+     H                     1.50D-09  0.00      0.0
H2+     +CO     =HCO+    H                     2.16D-09  0.00      0.0
H2+     +CO     =CO+     H2                    6.44D-10  0.00      0.0
H2+     +OH     =OH+     H2                    7.60D-10  0.00      0.0
H2+     +H2O    =H2O+    H2                    3.90D-09  0.00      0.0
H2+     +H2O    =H3O+    H                     3.40D-09  0.00      0.0
H2+     +CH     =CH+     H2                    7.10D-10  0.00      0.0
H2+     +CH     =CH2+    H                     7.10D-10  0.00      0.0
H2+     +CH2    =CH3+    H                     1.00D-09  0.00      0.0
H2+     +CH2    =CH2+    H2                    1.00D-09  0.00      0.0
H3+     +O      =OH+     H2                    8.00D-10  0.00      0.0
H3+     +OH     =H2O+    H2                    1.30D-09  0.00      0.0
H3+     +CO     =HCO+    H2                    1.70D-09  0.00      0.0
H3+     +CO2    =HCO2+   H2                    2.00D-09  0.00      0.0
H3+     +H2O    =H3O+    H2                    4.30D-09  0.00      0.0
H3+     +C      =CH+     H2                    2.00D-09  0.00      0.0
H3+     +CH     =CH2+    H2                    1.20D-09  0.00      0.0
H3+     +CH2    =CH3+    H2                    1.70D-09  0.00      0.0
H3+     +CH3    =CH4+    H2                    2.10D-09  0.00      0.0
H3+     +CH4    =CH5+    H2                    1.90D-09  0.00      0.0
He+     +H2     =H+      H       He            1.10D-13  -.24      0.0
He+     +OH     =OH+     He                    5.50D-10  0.00      0.0
He+     +OH     =O+      H       He            5.50D-10  0.00      0.0
He+     +H2O    =OH+     H       He            2.30D-10  -.94      0.0
He+     +H2O    =H2O+    He                    4.86D-11  -.94      0.0
He+     +H2O    =H+      OH      He            1.64D-10  -.94      0.0
He+     +CO     =C+      O       He            1.50D-09  0.00      0.0
He+     +O2     =O+      O       He            1.00D-09  0.00      0.0
He+     +CO2    =CO+     O       He            7.70D-10  0.00      0.0
He+     +CO2    =O+      CO      He            1.80D-10  0.00      0.0
He+     +CO2    =C+      O2      He            4.00D-11  0.00      0.0
He+     +CH     =C+      H       He            1.10D-09  0.00      0.0
He+     +CH2    =C+      H2      He            7.50D-10  0.00      0.0
He+     +CH2    =CH+     H       He            7.50D-10  0.00      0.0
He+     +CH3    =CH+     H2      He            9.00D-10  0.00      0.0
He+     +CH3    =CH2+    H       He            9.00D-10  0.00      0.0
He+     +CH4    =H+      CH3     He            4.00D-10  0.00      0.0
He+     +CH4    =CH+     H2      H       He    2.56D-10  0.00      0.0
He+     +CH4    =CH2+    H2      He            8.48D-10  0.00      0.0
He+     +CH4    =CH3+    H       He            8.00D-11  0.00      0.0
He+     +CH4    =CH4+    He                    1.60D-11  0.00      0.0
C+      +OH     =CO+     H                     8.00D-10  0.00      0.0
C+      +OH     =H+      CO                    8.00D-10  0.00      0.0
C+      +H2O    =HCO+    H                     2.43D-09  -.63      0.0
C+      +O2     =O+      CO                    5.15D-10  0.00      0.0
C+      +O2     =CO+     O                     3.15D-10  0.00      0.0
C+      +CO2    =CO+     CO                    1.10D-09  0.00      0.0
C+      +CH     =C2+     H                     3.80D-10  0.00      0.0
C+      +CH     =CH+     C                     3.80D-10  0.00      0.0
C+      +CH2    =CH2+    C                     5.20D-10  0.00      0.0
C+      +CH2    =C2H+    H                     5.20D-10  0.00      0.0
C+      +CH4    =C2H2+   H2                    3.25D-10  0.00      0.0
C+      +CH4    =C2H3+   H                     9.75D-10  0.00      0.0
O+      +H2     =OH+     H                     1.20D-09  0.00      0.0
O2+     +C      =CO+     O                     5.20D-11  0.00      0.0
O2+     +C      =C+      O2                    5.20D-11  0.00      0.0
OH+     +H2     =H2O+    H                     1.01D-09  0.00      0.0
H2O+    +H2     =H3O+    H                     8.30D-10  0.00      0.0
H3O+    +H      =H2O+    H2                    6.10D-10  0.00  20500.0
H3O+    +C      =HCO+    H2                    1.00D-11  0.00      0.0
H3O+    +CH     =CH2+    H2O                   6.80D-10  0.00      0.0
H3O+    +CH2    =CH3+    H2O                   9.40D-10  0.00      0.0
O2+     +ELECTR =O       O                     1.95D-07  -.70      0.0
OH+     +ELECTR =O       H                     3.75D-08  -.50      0.0
H2O+    +ELECTR =OH      H                     3.15D-07  -.50      0.0
H3O+    +ELECTR =OH      H2                    8.45D-07  -.50      0.0
H3O+    +ELECTR =H2O     H                     4.55D-07  -.50      0.0
CH3+    +O      =HCO+    H2                    3.10D-10  0.00      0.0
CH3+    +O      =H3+     CO                    1.30D-11  0.00      0.0
CH5+    +O      =H3O+    CH2                   2.16D-10  0.00      0.0
CH5+    +CO     =HCO+    CH4                   9.90D-10  0.00      0.0
CH5+    +H2O    =H3O+    CH4                   3.70D-09  0.00      0.0
CO+     +H2     =HCO+    H                     1.30D-09  0.00      0.0
CO+     +H      =H+      CO                    7.50D-10  0.00      0.0
HCO+    +H      =CO+     H2                    1.30D-09  0.00  24500.0
HCO+    +C      =CH+     CO                    1.10D-09  0.00      0.0
HCO+    +CH     =CH2+    CO                    6.30D-10  0.00      0.0
HCO+    +CH2    =CH3+    CO                    8.60D-10  0.00      0.0
HCO+    +CH3    =CH4+    CO                    1.40D-09  0.00   9060.0
HCO+    +CH4    =CH5+    CO                    9.90D-10  0.00   4920.0
HCO+    +H2O    =H3O+    CO                    2.50D-09  0.00      0.0
HCO+    +O2     =HCO2+   O                     1.00D-09  0.00   1450.0
HCO2+   +O      =HCO+    O2                    1.00D-09  0.00      0.0
HCO+    +OH     =HCO2+   H                     1.00D-09  0.00      0.0
HCO2+   +H      =HCO+    OH                    1.00D-09  0.00   7500.0
HCO2+   +CO     =HCO+    CO2                   1.00D-09  0.00      0.0
HCO+    +CO2    =HCO2+   CO                    1.00D-09  0.00   5000.0
HCO2+   +CH4    =CH5+    CO2                   7.80D-10  0.00      0.0
CO+     +ELECTR =C       O                     1.00D-07  -.46      0.0
HCO+    +ELECTR =CO      H                     2.40D-07  -.69      0.0
HCO2+   +ELECTR =CO2     H                     2.24D-07  -.50      0.0
HCO2+   +ELECTR =CO      OH                    1.16D-07  -.50      0.0
C2+     +H2     =C2H+    H                     1.40D-09  0.00      0.0
C2+     +H2     =H+      C2H                   1.50D-09  0.00   1260.0
C2H+    +H2     =C2H2+   H                     1.70D-09  0.00      0.0
C2H2+   +H2     =C2H3+   H                     5.00D-10  0.00    800.0
C2+     +ELECTR =C       C                     3.00D-07  -.50      0.0
C2H+    +ELECTR =C2      H                     1.35D-07  -.50      0.0
C2H+    +ELECTR =CH      C                     1.35D-07  -.50      0.0
C2H2+   +ELECTR =C2H     H                     1.50D-07  -.50      0.0
C2H2+   +ELECTR =CH      CH                    1.50D-07  -.50      0.0
C2H3+   +ELECTR =C2H     H2                    1.35D-07  -.50      0.0
C2H3+   +ELECTR =CH2     CH                    1.35D-07  -.50      0.0
C2H3+   +ELECTR =C2H2    H                     3.00D-08  -.50      0.0
C3+     +H2     =C3H+    H                     3.00D-10  0.00      0.0
C3H+    +H2     =C3H2+   H                     1.00D-09  0.00    500.0
C3H+    +H2     =C3H3+   PHOTON                3.00D-13  -1.0      0.0
C3H2+   +H2     =C3H3+   H                     1.00D-10  0.00   2000.0
C3+     +ELECTR =C2      C                     3.00D-07  -.50      0.0
C3H+    +ELECTR =C2      CH                    1.50D-07  -.50      0.0
C3H+    +ELECTR =C2H     C                     1.50D-07  -.50      0.0
C3H2+   +ELECTR =C3H     H                     1.50D-07  -.50      0.0
C3H2+   +ELECTR =C2H     CH                    1.50D-07  -.50      0.0
C3H3+   +ELECTR =C3H2    H                     1.50D-07  -.50      0.0
C3H3+   +ELECTR =C2H2    CH                    1.50D-07  -.50      0.0
H+      +C2     =C2+     H                     3.10D-09  0.00      0.0
H+      +C2H    =C2+     H2                    1.50D-09  0.00      0.0
H+      +C2H    =C2H+    H                     1.50D-09  0.00      0.0
H+      +C2H2   =C2H+    H2                    2.00D-09  0.00      0.0
H+      +C2H2   =C2H2+   H                     2.00D-09  0.00      0.0
H+      +C3H    =C3+     H2                    2.00D-09  0.00      0.0
H+      +C3H    =C3H+    H                     2.00D-09  0.00      0.0
H+      +C3H2   =C3H+    H2                    2.00D-09  0.00      0.0
H+      +C3H2   =C3H2+   H                     2.00D-09  0.00      0.0
He+     +C2H    =C+      CH      He            5.10D-10  0.00      0.0
He+     +C2H    =CH+     C       He            5.10D-10  0.00      0.0
He+     +C2H    =C2+     H       He            5.10D-10  0.00      0.0
He+     +C2H2   =CH+     CH      He            7.70D-10  0.00      0.0
He+     +C2H2   =C2+     H2      He            1.61D-09  0.00      0.0
He+     +C2H2   =C2H+    H       He            8.75D-10  0.00      0.0
He+     +C2H2   =C2H2+   He                    2.45D-10  0.00      0.0
He+     +C3H    =C3+     H       He            2.00D-09  0.00      0.0
He+     +C3H2   =C3H+    H       He            1.00D-09  0.00      0.0
He+     +C3H2   =C3+     H2      He            1.00D-09  0.00      0.0
H3+     +C2H    =C2H2+   H2                    1.70D-09  0.00      0.0
H3+     +C2H2   =C2H3+   H2                    2.90D-09  0.00      0.0
H3+     +C3H    =C3H2+   H2                    2.00D-09  0.00      0.0
H3+     +C3H2   =C3H3+   H2                    2.00D-09  0.00      0.0
C+      +C2H    =C3+     H                     1.00D-09  0.00      0.0
C+      +C2H2   =C3H+    H                     2.20D-09  0.00      0.0
HCO+    +C2H    =C2H2+   CO                    7.80D-10  0.00      0.0
HCO+    +C2H2   =C2H3+   CO                    1.36D-09  0.00      0.0
HCO+    +C3H    =C3H2+   CO                    1.40D-09  0.00      0.0
HCO+    +C3H2   =C3H3+   CO                    1.40D-09  0.00      0.0
H3O+    +C2H    =C2H2+   H2O                   2.20D-10  0.00   4100.0
H3O+    +C2H2   =C2H3+   H2O                   1.00D-09  0.00   7330.0
H3O+    +C3H    =C3H2+   H2O                   2.00D-09  0.00      0.0
H3O+    +C3H2   =C3H3+   H2O                   3.00D-09  0.00      0.0
C2H2+   +H2O    =H3O+    C2H                   2.20D-10  0.00      0.0
```

C2H3+	+H2O	=H3O+	C2H2		1.11D-09	0.00	0.0
C3H+	+H2O	=HCO+	C2H2		2.48D-10	0.00	0.0
C3H+	+H2O	=C2H3+	CO		2.02D-10	0.00	0.0
H3+	+Fe	=Fe+	H2	H	4.90D-09	0.00	0.0
HCO+	+Fe	=Fe+	CO	H	1.90D-09	0.00	0.0
H3O+	+Fe	=Fe+	H2O	H	3.10D-09	0.00	0.0
O2+	+Fe	=Fe+	O2		1.10D-09	0.00	0.0
CN	+SECPHO	=C	N		2.12D+04	0.00	140000.0
HCN	+SECPHO	=CN	H		6.23D+03	0.00	140000.0
HNC	+SECPHO	=CN	H		6.23D+03	0.00	140000.0
NH2	+SECPHO	=NH	H		1.60D+02	0.00	140000.0
NH2	+SECPHO	=NH2+	ELECTR		1.30D+03	0.00	140000.0
NH3	+SECPHO	=NH2	H		2.63D+03	0.00	140000.0
NH3	+SECPHO	=NH	H2		1.08D+03	0.00	140000.0
NH3	+SECPHO	=NH3+	ELECTR		1.15D+03	0.00	140000.0
NO	+SECPHO	=N	O		9.64D+02	0.00	140000.0
NO	+SECPHO	=NO+	ELECTR		9.88D+02	0.00	140000.0
N	H2	=NH	H		8.66D-10	0.50	14600.0
NH	H2	=NH2	H		5.25D-12	0.79	6700.0
NH2	H2	=NH3	H		6.22D-11	0.50	6300.0
CN	H2	=HCN	H		3.53D-13	3.31	756.0
NH	H	=N	H2		8.66D-10	0.50	2400.0
NH2	H	=NH	H2		5.25D-12	0.79	2200.0
NH3	H	=NH2	H2		6.22D-11	0.50	5700.0
NH	O	=OH	N		2.90D-11	0.50	0.0
NH2	O	=NH	OH		3.50D-12	0.50	0.0
NH3	O	=NH2	OH		2.50D-12	0.00	3020.0
CN	O	=CO	N		1.80D-11	0.50	50.0
NH3	OH	=NH2	H2O		2.30D-12	0.00	800.0
NH	C	=CN	H		1.10D-10	0.50	0.0
CH	N	=CN	H		2.10D-11	0.00	0.0
CN	N	=N2	C		7.30D-10	0.00	4500.0
NH	N	=N2	H		5.00D-11	0.50	0.0
OH	N	=NO	H		5.30D-11	0.00	50.0
O2	N	=NO	O		3.30D-12	1.00	3150.0
NO	C	=CN	O		1.10D-10	0.50	0.0
NO	N	=N2	O		3.40D-11	0.00	50.0
NO	O	=O2	N		7.50D-13	1.00	16000.0
HNC	H	=HCN	H		1.00D-10	0.50	200.0
HNC	O	=CO	NH		2.00D-10	0.50	200.0
HNC	OH	=H2O	CN		2.00D-10	0.50	200.0
HNC	O2	=CO2	NH		2.00D-11	0.50	2000.0
NH2	C	=HNC	H		2.00D-11	0.50	0.0
CH2	N	=HCN	H		2.00D-11	0.50	0.0
CH3	N	=HCN	H2		2.00D-11	0.50	0.0
CH5+	HNC	=C2H3+	NH3		1.00D-09	0.00	0.0
CH5+	HCN	=C2H3+	NH3		1.00D-09	0.00	5120.0
N+	H2	=NH+	H		8.40D-10	0.00	168.5
NH+	H2	=NH2+	H		1.27D-09	0.00	0.0
NH+	H2	=H3+	N		2.25D-10	0.00	0.0
NH2+	H2	=NH3+	H		2.70D-10	0.00	0.0
NH3+	H2	=NH4+	H		2.40D-12	0.00	0.0
NH+	H	=N+	H2		6.52D-10	0.00	0.0
NH2+	H	=NH+	H2		1.27D-09	0.00	24000.0
NH3+	H	=NH2+	H2		2.25D-10	0.00	12800.0
NH4+	H	=NH3+	H2		1.00D-09	0.00	11000.0
CN+	H2	=HCN+	H		1.00D-09	0.00	0.0
HCN+	H	=CN+	H2		1.00D-09	0.00	15800.0
HCN+	H2	=H2CN+	H		9.80D-10	0.00	0.0
H2CN+	H	=HCN+	H2		9.80D-10	0.00	34400.0
N2+	H2	=N2H+	H		2.00D-09	0.24	0.0
N2H+	H	=N2+	H2		2.10D-09	0.00	30300.0
N2H+	H2	=H3+	N2		1.80D-09	0.00	8300.0
H+	HNC	=H+	HCN		1.00D-09	0.00	0.0
H+	HCN	=H+	HNC		1.00D-09	0.00	7850.0
H+	NH	=NH+	H		2.10D-09	0.00	0.0
H+	NH2	=NH2+	H		2.90D-09	0.00	0.0
H+	NH3	=NH3+	H		5.20D-09	0.00	0.0
H+	CN	=CN+	H		2.10D-09	0.00	6150.0
H+	HCN	=HCN+	H		1.10D-08	0.00	0.0
H+	NO	=NO+	H		1.90D-09	0.00	0.0
He+	NH	=N+	H	He	1.10D-09	0.00	0.0
He+	NH2	=NH+	H	He	8.00D-10	0.00	0.0
He+	NH2	=N+	H2	He	8.00D-10	0.00	0.0
He+	NH3	=NH3+	He		2.64D-10	0.00	0.0
He+	NH3	=NH2+	H	He	1.76D-09	0.00	0.0
He+	NH3	=NH+	H2	He	1.76D-10	0.00	0.0
He+	CN	=C+	N	He	8.80D-10	0.00	0.0
He+	CN	=N+	C	He	8.80D-10	0.00	0.0
He+	HCN	=CN+	H	He	1.46D-09	0.00	0.0
He+	HCN	=CH+	N	He	6.20D-10	0.00	0.0
He+	HCN	=C+	NH	He	7.75D-10	0.00	0.0
He+	HCN	=N+	CH	He	2.48D-10	0.00	0.0
He+	HNC	=CN+	H	He	1.55D-09	0.00	0.0
He+	HNC	=C+	NH	He	1.55D-09	0.00	0.0
He+	N2	=N+	N	He	7.92D-10	0.00	0.0
He+	N2	=N2+	He		4.08D-10	0.00	0.0
He+	NO	=N+	O	He	1.38D-09	0.00	0.0
He+	NO	=O+	N	He	2.24D-10	0.00	0.0
H3+	NH	=NH2+	H2		1.30D-09	0.00	0.0
H3+	NH2	=NH3+	H2		1.80D-09	0.00	0.0
H3+	NH3	=NH4+	H2		9.10D-09	0.00	0.0
H3+	N	=NH2+	H		4.50D-10	0.00	0.0
H3+	CN	=HCN+	H2		1.00D-09	0.00	0.0
H3+	CN	=H2CN+	H		1.00D-09	0.00	0.0
H3+	HCN	=H2CN+	H2		9.50D-09	0.00	0.0
H3+	HNC	=H2CN+	H2		9.50D-09	0.00	0.0
H3+	N2	=N2H+	H2		1.30D-09	0.00	0.0
H3+	NO	=HNO+	H2		1.10D-09	0.00	0.0
H3O+	NH3	=NH4+	H2O		2.20D-09	0.00	0.0
H3O+	CN	=H2CN+	OH		4.50D-09	0.00	0.0
H3O+	HCN	=H2CN+	H2O		4.50D-09	0.00	0.0
H2CN+	H2O	=H3O+	HCN		4.50D-09	0.00	2460.0
H3O+	HNC	=H2CN+	H2O		4.50D-09	0.00	0.0
H2CN+	H2O	=H3O+	HNC		4.50D-09	0.00	10300.0
HCO+	NH	=NH2+	CO		6.40D-10	0.00	0.0
NH2+	CO	=HCO+	NH		6.40D-10	0.00	6100.0
HCO+	NH2	=NH3+	CO		8.90D-10	0.00	0.0
HCO+	NH3	=NH4+	CO		1.90D-09	0.00	0.0
HCO+	HCN	=H2CN+	CO		3.70D-09	0.00	0.0
HCO+	HNC	=H2CN+	CO		3.70D-09	0.00	0.0
HCO2+	NO	=HNO+	CO2		1.00D-10	0.00	0.0
C+	NH	=CN+	H		7.80D-10	0.00	0.0
C+	NH2	=HCN+	H		1.10D-09	0.00	0.0
C+	NH3	=NH3+	C		5.29D-10	0.00	0.0
C+	NH3	=H2NC+	H		7.80D-10	0.00	0.0
C+	NH3	=H2CN+	H		7.80D-10	0.00	0.0
C+	NH3	=HCN+	H2		2.08D-10	0.00	0.0
C+	HCN	=C2N+	H		3.40D-09	0.00	0.0
C+	HNC	=C2N+	H		3.40D-09	0.00	0.0
C+	NO	=NO+	C		3.40D-09	0.00	0.0
C+	NO	=N+	CO		9.02D-10	0.00	0.0
N+	CO	=C+	NO		9.02D-10	0.00	15400.0
O2+	N	=NO+	O		7.84D-11	0.00	0.0
O2+	NH3	=NH3+	O2		2.00D-09	0.00	0.0
O2+	NO	=NO+	O2		4.40D-10	0.00	0.0
CH2+	N	=HCN+	H		9.40D-10	0.00	0.0
C2H+	N	=C2N+	H		8.30D-10	0.00	0.0
CH3+	N	=HCN+	H2		6.70D-11	0.00	0.0
CH3+	N	=H2CN+	H		6.70D-11	0.00	0.0
C2H2+	N	=CH+	HCN		2.50D-11	0.00	0.0
C2H2+	N	=CH+	HNC		2.50D-11	0.00	2600.0
C2H2+	N	=C2N+	H2		2.25D-10	0.00	0.0
N+	O2	=O2+	N		2.81D-10	0.00	0.0
N+	O2	=NO+	O		2.37D-10	0.00	0.0
N+	O2	=O+	NO		3.30D-11	0.00	0.0
N+	CO	=CO+	N		8.25D-10	0.00	0.0
N+	CO	=NO+	C		1.46D-10	0.00	0.0
N+	NO	=NO+	N		4.51D-10	0.00	0.0
N+	NO	=N2+	O		7.95D-11	0.00	0.0
NH3+	H2O	=NH4+	OH		2.50D-10	0.00	0.0
NH4+	OH	=NH3+	H2O		2.50D-10	0.00	3400.0
N2H+	O	=OH+	N2		1.40D-10	0.00	3400.0
N2H+	H2O	=H3O+	N2		2.60D-09	0.00	0.0
N2H+	CO	=HCO+	N2		8.80D-10	0.00	0.0
HCO+	N2	=N2H+	CO		8.80D-10	0.00	11200.0
N2H+	CO2	=HCO2+	N2		1.40D-09	0.00	0.0
HCO2+	N2	=N2H+	CO2		1.40D-09	0.00	6400.0
N2H+	NH3	=NH4+	N2		2.30D-09	0.00	0.0
NH4+	N2	=N2H+	NH3		2.30D-09	0.00	44000.0
N2H+	NO	=HNO+	N2		3.40D-10	0.00	0.0
C2N+	NH3	=N2H+	C2H2		1.90D-10	0.00	0.0
C2N+	NH3	=H2CN+	HCN		1.70D-09	0.00	0.0
HNO+	C	=CH+	NO		1.00D-09	0.00	0.0
HNO+	CO	=HCO+	NO		1.00D-10	0.00	0.0
HNO+	CO2	=HCO2+	NO		1.00D-10	0.00	0.0
HNO+	OH	=H2O+	NO		6.20D-10	0.00	0.0
HNO+	H2O	=H3O+	NO		2.30D-09	0.00	0.0
NO+	Fe	=Fe+	NO		1.00D-09	0.00	0.0
NH+	ELECTR	=N	H		2.00D-07	-0.50	0.0
NH2+	ELECTR	=NH	H		1.50D-07	-0.50	0.0
NH2+	ELECTR	=N	H	H	1.50D-07	-0.50	0.0
NH3+	ELECTR	=NH2	H		3.00D-07	-0.50	0.0
NH4+	ELECTR	=NH2	H2		7.60D-07	-0.50	0.0
NH4+	ELECTR	=NH3	H		7.60D-07	-0.50	0.0
CN+	ELECTR	=C	N		1.80D-07	-0.50	0.0
C2N+	ELECTR	=C2	N		1.00D-07	-0.50	0.0
C2N+	ELECTR	=CN	C		2.00D-07	-0.50	0.0
HCN+	ELECTR	=CN	H		1.50D-07	-0.50	0.0
HCN+	ELECTR	=CH	N		1.50D-07	-0.50	0.0
N2+	ELECTR	=N	N		3.60D-08	-0.42	0.0
N2H+	ELECTR	=N2	H		1.70D-07	-1.00	0.0
H2CN+	ELECTR	=HCN	H		1.75D-07	-0.50	0.0
H2CN+	ELECTR	=HNC	H		1.75D-07	-0.50	0.0
H2NC+	ELECTR	=HNC	H		1.75D-07	-0.50	0.0
H2NC+	ELECTR	=NH2	C		1.75D-07	-0.50	0.0
NO+	ELECTR	=N	O		4.30D-07	-0.37	0.0
HNO+	ELECTR	=NO	H		3.00D-07	-0.50	0.0
SO	+SECPHO	=S	O		9.64D+02	0.00	140000.0
CS	+SECPHO	=S	C		2.12D+04	0.00	140000.0
SH	+SECPHO	=S	H		1.46D+03	0.00	140000.0
OCS	+SECPHO	=CO	S		1.07D+04	0.00	140000.0
H2S	+SECPHO	=S	H2		1.03D+04	0.00	140000.0
H2S	+SECPHO	=H2S+	ELECTR		3.39D+03	0.00	140000.0
SO2	+SECPHO	=SO	O		1.77D+03	0.00	140000.0
S	+H2	=SH	H		1.04D-10	.132	9620.0
SH	+H2	=H2S	H		6.41D-12	.087	8050.0
SH	+H	=S	H2		2.50D-11	0.00	0.0
H2S	+H	=SH	H2		1.29D-11	0.00	860.0
SO	+H	=OH	S		5.90D-10	-.31	11100.0
SO2	+H	=SO	OH		9.25D-09	-.74	14700.0
OCS	+H	=SH	CO		1.70D-11	0.00	2000.0
SH	+O	=SO	H		1.60D-10	0.00	100.0
SH	+O	=OH	S		1.70D-11	0.67	950.0

```
H2S  +O   =SH   OH              1.40D-11  0.00   1920.0
H2S  +OH  =SH   H2O             6.30D-12  0.00     80.0
CS   +O   =CO   S               2.70D-10  0.00    760.0
CS   +OH  =OCS  H               1.55D-13  1.12    800.0
S    +O2  =SO   O               5.19D-12  0.00    265.0
SO   +O   =S    O2              6.60D-13  0.00   2760.0
SO   +O2  =SO2  O               1.40D-12  0.00   2820.0
SO   +OH  =SO2  H               1.96D-10  -.17      0.0
SO   +N   =NO   S               1.73D-11  0.50    750.0
SO   +C   =CO   S               7.20D-11  0.00      0.0
SO   +C   =CS   O               1.70D-10  0.00      0.0
SO2  +O   =SO   O2              9.27D-11  -.46   9140.0
OCS  +O   =SO   CO              2.60D-11  0.00   2250.0
CH   +S   =CS   H               1.10D-12  0.00      0.0
CH   +S   =SH   C               1.73D-11  0.50   4000.0
OH   +S   =SO   H               1.00D-10  0.00    100.0
SH   +C   =CS   H               2.00D-11  0.00      0.0
SH   +C   =CH   S               1.20D-11  0.58   5880.0
SH   +CO  =OCS  H               5.95D-14  1.12   8330.0
S+   +H2  =SH+  H               2.20D-10  0.00   9860.0
SH+  +H2  =H2S+ H               1.90D-10  0.00   8500.0
SH+  +H2  =H3S+ PHOTON          1.00D-15  0.00      0.0
H2S+ +H2  =H3S+ H               1.40D-11  0.00   2300.0
CS+  +H2  =HCS+ H               4.80D-10  0.00      0.0
SH+  +H   =S+   H2              1.10D-10  0.00      0.0
H2S+ +H   =SH+  H2              2.00D-10  0.00      0.0
H3S+ +H   =H2S+ H2              6.00D-11  0.00      0.0
SO+  +H   =S+   OH              6.10D-10  0.00  11385.0
H+   +SH  =SH+  H               1.60D-09  0.00      0.0
H+   +SH  =S+   H2              1.60D-09  0.00      0.0
H+   +H2S =H2S+ H               7.60D-09  0.00      0.0
H+   +CS  =CS+  H               4.90D-09  0.00      0.0
H+   +SO  =SO+  H               3.20D-09  0.00      0.0
H+   +OCS =SH+  CO              5.90D-09  0.00      0.0
H3+  +S   =SH+  H2              2.60D-09  0.00      0.0
H3+  +SH  =H2S+ H2              1.90D-09  0.00      0.0
H3+  +H2S =H3S+ H2              3.70D-09  0.00      0.0
H3+  +CS  =HCS+ H2              2.90D-09  0.00      0.0
H3+  +SO  =HSO+ H2              1.90D-09  0.00      0.0
H3+  +SO2 =HSO2+ H2             1.30D-09  0.00      0.0
H3+  +OCS =HOCS+ H2             1.90D-09  0.00      0.0
He+  +SH  =S+   H       He      1.70D-09  0.00      0.0
He+  +H2S =S+   H2      He      3.60D-09  0.00      0.0
He+  +H2S =SH+  H       He      4.80D-10  0.00      0.0
He+  +H2S =H2S+ He              3.10D-10  0.00      0.0
He+  +CS  =C+   S       He      1.30D-09  0.00      0.0
He+  +CS  =S+   C       He      1.30D-09  0.00      0.0
He+  +SO  =O+   S       He      8.30D-10  0.00      0.0
He+  +SO  =S+   O       He      8.30D-10  0.00      0.0
He+  +OCS =CS+  O       He      7.60D-10  0.00      0.0
He+  +OCS =S+   CO      He      7.60D-10  0.00      0.0
He+  +OCS =CO+  S       He      7.60D-10  0.00      0.0
He+  +OCS =O+   CS      He      7.60D-11  0.00      0.0
He+  +SO2 =S+   O2      He      8.60D-10  0.00      0.0
He+  +SO2 =SO+  O       He      3.44D-09  0.00      0.0
C+   +SH  =CS+  H               1.10D-09  0.00      0.0
C+   +H2S =HCS+ H               1.28D-09  0.00      0.0
C+   +H2S =H2S+ C               4.25D-10  0.00      0.0
C+   +CS  =CS+  C               1.60D-09  0.00    700.0
C+   +SO  =S+   CO              2.60D-10  0.00      0.0
C+   +SO  =CS+  O               2.60D-10  0.00      0.0
C+   +SO  =SO+  C               2.60D-10  0.00      0.0
C+   +SO  =CO+  S               2.60D-10  0.00      0.0
C+   +OCS =CS+  CO              1.60D-09  0.00      0.0
C+   +SO2 =SO+  CO              2.30D-09  0.00      0.0
CH+  +S   =S+   CH              4.70D-10  0.00      0.0
CH+  +S   =SH+  C               4.70D-10  0.00      0.0
CH+  +S   =CS+  H               4.70D-10  0.00      0.0
CH+  +SO  =OH+  CS              1.00D-09  0.00      0.0
CH+  +SO  =SH+  CO              1.00D-09  0.00      0.0
CH3+ +S   =HCS+ H2              1.40D-09  0.00      0.0
CH3+ +SO  =HOCS+ H2             9.50D-10  0.00      0.0
CH5+ +S   =SH+  CH4             1.30D-09  0.00      0.0
H3O+ +S   =SH+  H2O             3.20D-10  0.00   4930.0
H3O+ +H2S =H3S+ H2O             1.90D-09  0.00      0.0
HCO+ +S   =SH+  CO              3.30D-10  0.00      0.0
HCO+ +SH  =H2S+ CO              8.20D-10  0.00      0.0
HCO+ +CS  =HCS+ CO              1.20D-09  0.00      0.0
HCO+ +SO  =HSO+ CO              7.50D-10  0.00      0.0
HCO+ +H2S =H3S+ CO              1.60D-09  0.00      0.0
HCO+ +OCS =HOCS+ CO             1.10D-09  0.00      0.0
O2+  +S   =SO+  O               5.40D-10  0.00      0.0
O2+  +S   =S+   O2              5.40D-10  0.00      0.0
O2+  +H2S =H2S+ O2              1.40D-09  0.00      0.0
S+   +CH  =CS+  H               6.20D-10  0.00      0.0
S+   +CH2 =HCS+ H               1.00D-11  0.00      0.0
S+   +OH  =SO+  H               6.10D-10  0.00      0.0
S+   +OH  =SH+  O               2.90D-10  0.00   8820.0
S+   +SH  =SH+  S               9.70D-10  0.00    350.0
S+   +NO  =NO+  S               3.20D-10  0.00      0.0
S+   +NH3 =NH3+ S               1.60D-09  0.00      0.0
S+   +O2  =SO+  O               2.30D-11  0.00      0.0
NH3+ +H2S =NH4+ SH              6.00D-10  0.00      0.0
HNO+ +S   =SH+  NO              1.10D-09  0.00      0.0
N2H+ +S   =SH+  N2              1.10D-09  0.00      0.0
SH+  +O   =SO+  H               2.90D-10  0.00      0.0
SH+  +O   =S+   OH              2.90D-10  0.00      0.0
SH+  +S   =S+   SH              9.70D-10  0.00      0.0
SH+  +C   =CS+  H               9.90D-10  0.00      0.0
SH+  +CH  =CH2+ S               5.80D-10  0.00      0.0
SH+  +OH  =H2S+ O               3.10D-10  0.00   7500.0
SH+  +OH  =H2O+ S               4.30D-10  0.00   9200.0
SH+  +H2O =H3O+ S               6.30D-10  0.00      0.0
SH+  +H2S =H2S+ SH              5.00D-10  0.00   1000.0
SH+  +H2S =H3S+ S               5.00D-10  0.00      0.0
SH+  +NO  =NO+  SH              3.30D-10  0.00      0.0
SH+  +NH3 =NH3+ SH              5.25D-10  0.00      0.0
SH+  +NH3 =NH4+ S               9.75D-10  0.00      0.0
H2S+ +O   =SH+  OH              3.10D-10  0.00      0.0
H2S+ +O   =SO+  H2              3.10D-10  0.00      0.0
H2S+ +C   =HCS+ H               1.00D-09  0.00      0.0
H2S+ +S   =S+   H2S             1.10D-09  0.00      0.0
H2S+ +SH  =SH+  H2S             5.00D-10  0.00      0.0
H2S+ +NO  =NO+  H2S             3.70D-10  0.00      0.0
H2S+ +H2O =H3O+ SH              8.10D-10  0.00      0.0
H2S+ +NH3 =NH4+ SH              1.36D-09  0.00      0.0
H2S+ +NH3 =NH3+ H2S             3.40D-10  0.00      0.0
H3S+ +NH3 =NH4+ H2S             1.90D-09  0.00      0.0
H3S+ +HCN =H2CN+ H2S            1.90D-09  0.00      0.0
HCS+ +O   =HCO+ S               1.00D-09  0.00      0.0
SO+  +NH3 =NH3+ SO              1.30D-09  0.00      0.0
SH+  +Fe  =Fe+  SH              1.60D-09  0.00      0.0
SO+  +Fe  =Fe+  SO              1.60D-09  0.00      0.0
H2S+ +Fe  =Fe+  H2S             1.80D-09  0.00      0.0
SH+  +ELECTR =S   H             2.00D-07  -.50      0.0
H2S+ +ELECTR =SH  H             1.50D-07  -.50      0.0
H2S+ +ELECTR =S   H       H     1.50D-07  -.50      0.0
H2S+ +ELECTR =H2S PHOTON        1.10D-10  -.70      0.0
H3S+ +ELECTR =H2S H             3.00D-07  -.50      0.0
H3S+ +ELECTR =SH  H2            1.00D-07  -.50      0.0
CS+  +ELECTR =C   S             2.00D-07  -.50      0.0
HCS+ +ELECTR =CS  H             7.00D-07  -.50      0.0
SO+  +ELECTR =S   O             2.00D-07  -.50      0.0
HSO+ +ELECTR =SO  H             2.00D-07  -.50      0.0
HSO2+  ELECTR =SO  H       O    1.00E-07  -.50      0.0
HSO2+  ELECTR =SO  OH           1.00E-07  -.50      0.0
HOCS+ +ELECTR =OH  CS           2.00D-07  -.50      0.0
HOCS+ +ELECTR =OCS H            2.00D-07  -.50      0.0
Si   +SECPHO =Si+ ELECTR        3.00D+03  0.00 140000.0
SiO  +SECPHO =Si  O             3.00D+03  0.00 140000.0
SiO2 +SECPHO =SiO O             3.00D+03  0.00 140000.0
SiH  +SECPHO =Si  H             1.46D+03  0.00 140000.0
SiH4 +SECPHO =SiH3 H            4.68D+03  0.00 140000.0
SiH4 H       =SiH3 H2           2.60D-11  0.00   1400.0
SiH3 H       =SiH2 H2           2.00D-11  0.00      0.0
SiH2 H       =SiH  H2           2.00D-11  0.00      0.0
SiH  H       =Si   H2           2.00D-11  0.00      0.0
SiH2 O2      =SiO  H2O          7.50D-12  0.00      0.0
SiH  O2      =SiO  OH           1.70D-10  0.00      0.0
SiH2 O       =SiO  H       H    5.00D-11  0.50      0.0
SiH  O       =SiO  H            4.00D-11  0.50      0.0
Si   O2      =SiO  O            1.72D-10 -0.53     17.0
Si   OH      =SiO  H            1.72D-10 -0.53     17.0
SiO  OH      =SiO2 H            1.00D-12 -0.70      0.0
Si+  H2      =SiH2+ PHOTON      3.00D-18  0.00      0.0
SiH+ H2      =SiH3+ PHOTON      3.00D-17 -1.00      0.0
SiH3+ H2     =SiH5+ PHOTON      1.00D-18 -0.50      0.0
Si+  H2      =SiH+  H           1.50D-10  0.00  14310.0
SiH+ H2      =SiH2+ H           1.20D-09  0.00  28250.0
SiH2+ H2     =SiH3+ H           7.00D-10  0.00   6335.0
SiH3+ H2     =SiH4+ H           2.00D-10  0.00  47390.0
SiH4+ H2     =SiH5+ H           1.00D-09  0.00      0.0
SiH+ H       =Si+   H2          1.90D-09  0.00      0.0
SiH2+ H      =SiH+  H2          1.20D-09  0.00      0.0
SiH3+ H      =SiH2+ H2          7.00D-10  0.00      0.0
SiH4+ H      =SiH3+ H2          2.00D-10  0.00      0.0
SiH5+ H      =SiH4+ H2          4.00D-11  0.00   4470.0
SiO+ H2      =SiOH+ H           3.20D-10  0.00      0.0
H+   SiH     =SiH+  H           1.70E-09  0.00      0.0
H+   SiH     =Si+   H2          1.70E-09  0.00      0.0
H+   SiH2    =SiH2+ H           1.50E-09  0.00      0.0
H+   SiH2    =SiH+  H2          1.50E-09  0.00      0.0
H+   SiH3    =SiH3+ H           1.50E-09  0.00      0.0
H+   SiH3    =SiH2+ H2          1.50E-09  0.00      0.0
H+   SiH4    =SiH4+ H           1.50E-09  0.00      0.0
H+   SiH4    =SiH3+ H2          1.50E-09  0.00      0.0
H+   SiO     =SiO+  H           3.30E-09  0.00      0.0
He+  SiH     =Si+   H       He  1.80E-09  0.00      0.0
He+  SiH2    =SiH+  H       He  1.00E-09  0.00      0.0
He+  SiH2    =Si+   H2      He  1.00E-09  0.00      0.0
He+  SiH3    =SiH2+ H       He  1.00E-09  0.00      0.0
He+  SiH3    =SiH+  H2      He  1.00E-09  0.00      0.0
He+  SiH4    =SiH3+ H       He  1.00E-09  0.00      0.0
He+  SiH4    =SiH2+ H2      He  1.00E-09  0.00      0.0
He+  SiO     =Si+   O       He  8.60E-10  0.00      0.0
He+  SiO     =O+    Si      He  8.60E-10  0.00      0.0
He+  SiO2    =SiO+  O       He  5.00E-10  0.00      0.0
He+  SiO2    =Si+   O2      He  5.00E-10  0.00      0.0
C+   SiH2    =SiH2+ C           1.00E-09  0.00      0.0
C+   SiH3    =SiH3+ C           1.00E-09  0.00      0.0
C+   SiO     =Si+   CO          5.40E-10  0.00      0.0
C+   SiO2    =SiO+  CO          1.00E-09 -0.60      0.0
S+   SiH     =SiH+  S           4.20E-10  0.00      0.0
H3+  Si      =SiH+  H2          2.00E-09  0.00      0.0
```

H3+	SiH	=SiH2+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
H3+	Si	=SiH2+	H		1.70E-09	0.00	0.0
H3+	SiH2	=SiH3+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
H3+	SiH3	=SiH4+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
H3+	SiH4	=SiH5+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
H3+	SiO	=SiOH+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
H3O+	Si	=SiH+	H2O		1.80E-09	0.00	0.0
H3O+	SiH	=SiH2+	H2O		9.70E-10	0.00	0.0
H3O+	SiH2	=SiH3+	H2O		2.00E-09	0.00	0.0
H3O+	SiO	=SiOH+	H2O		2.00E-09	0.00	0.0
HCO+	Si	=SiH+	CO		1.60E-09	0.00	0.0
HCO+	SiH	=SiH2+	CO		8.70E-10	0.00	0.0
HCO+	SiH2	=SiH3+	CO		2.00E-09	0.00	0.0
HCO+	SiH4	=SiH5+	CO		1.40E-09	0.00	0.0
HCO+	SiO	=SiOH+	CO		7.90E-10	0.00	0.0
Si+	OH	=SiO+	H		6.30E-10	0.00	0.0
Si+	H2O	=SiOH+	H		2.30E-10	-0.60	0.0
Si+	O2	=SiO+	O		1.00E-13	0.00	0.0
SiH+	O	=SiO+	H		4.00E-10	0.00	0.0
SiH+	NH3	=NH4+	Si		1.00E-09	0.00	0.0
SiH+	H2O	=H3O+	Si		8.00E-10	0.00	0.0
SiH2+	O	=SiOH+	H		6.30E-10	0.00	0.0
SiH2+	O2	=SiOH+	OH		2.40E-11	0.00	0.0
SiH3+	O	=SiOH+	H2		2.00E-10	0.00	0.0
SiH4+	H2O	=H3O+	SiH3		2.00E-09	0.00	0.0
SiH4+	CO	=HCO+	SiH3		1.00E-09	0.00	0.0
SiH5+	H2O	=H3O+	SiH4		2.00E-09	0.00	0.0
SiH+	ELECTR	=Si	H		2.00E-07	-0.50	0.0
SiH2+	ELECTR	=Si	H	H	2.00E-07	-0.50	0.0
SiH2+	ELECTR	=SiH	H		1.50E-07	-0.50	0.0
SiH2+	ELECTR	=Si	H2		1.50E-07	-0.50	0.0
SiH3+	ELECTR	=SiH2	H		1.50E-07	-0.50	0.0
SiH3+	ELECTR	=SiH	H2		1.50E-07	-0.50	0.0
SiH4+	ELECTR	=SiH3	H		1.50E-07	-0.50	0.0
SiH4+	ELECTR	=SiH2	H2		1.50E-07	-0.50	0.0
SiH5+	ELECTR	=SiH4	H		1.50E-07	-0.50	0.0
SiH5+	ELECTR	=SiH3	H2		1.50E-07	-0.50	0.0
SiO+	ELECTR	=Si	O		2.00E-07	-0.50	0.0
SiOH+	ELECTR	=SiO	H		1.50E-07	-0.50	0.0
SiOH+	ELECTR	=Si	OH		1.50E-07	-0.50	0.0
Mg**	+He	=GRAIN	He	Mg	1.221D-2	73.0	41.187
Fe**	+He	=GRAIN	He	Fe	1.151D-2	73.0	40.976
Si**	+He	=GRAIN	He	Si	1.224D-2	73.0	42.175
C**	+He	=GRAIN	He	C	1.224D-2	73.0	42.175
O**	+He	=GRAIN	He	O	5.348D-2	73.0	36.030
Mg**	+C	=GRAIN	C	Mg	2.935D-2	48.0	36.740
Fe**	+C	=GRAIN	C	Fe	2.386D-2	47.0	42.794
Si**	+C	=GRAIN	C	Si	2.698D-2	48.0	36.502
C**	+C	=GRAIN	C	C	2.698D-2	48.0	36.502
O**	+C	=GRAIN	C	O	1.054D-1	48.0	30.812
Mg**	+N	=GRAIN	N	Mg	2.935D-2	48.0	36.740
Fe**	+N	=GRAIN	N	Fe	2.386D-2	47.0	42.794
Si**	+N	=GRAIN	N	Si	2.698D-2	48.0	36.502
C**	+N	=GRAIN	N	C	2.698D-2	48.0	36.502
O**	+N	=GRAIN	N	O	1.054D-1	48.0	30.812
Mg**	+O	=GRAIN	O	Mg	2.884D-2	48.0	30.238
Fe**	+O	=GRAIN	O	Fe	4.116D-2	44.0	59.438
Si**	+O	=GRAIN	O	Si	3.373D-2	47.0	37.810
C**	+O	=GRAIN	O	C	3.373D-2	47.0	37.810
O**	+O	=GRAIN	O	O	1.006D-1	47.0	31.588
Mg**	+H2O	=GRAIN	H2O	Mg	2.884D-2	48.0	30.238
Fe**	+H2O	=GRAIN	H2O	Fe	4.116D-2	44.0	59.438
Si**	+H2O	=GRAIN	H2O	Si	3.373D-2	47.0	37.810
C**	+H2O	=GRAIN	H2O	C	3.373D-2	47.0	37.810
O**	+H2O	=GRAIN	H2O	O	1.006D-1	47.0	31.588
Mg**	+N2	=GRAIN	N2	Mg	2.093D-2	48.0	27.730
Fe**	+N2	=GRAIN	N2	Fe	4.324D-2	47.0	42.335
Si**	+N2	=GRAIN	N2	Si	2.217D-2	47.0	28.013
C**	+N2	=GRAIN	N2	C	2.217D-2	47.0	28.013
O**	+N2	=GRAIN	N2	O	1.149D-1	46.0	46.018
Mg**	+CO	=GRAIN	CO	Mg	2.093D-2	48.0	27.730
Fe**	+CO	=GRAIN	CO	Fe	4.324D-2	47.0	42.335
Si**	+CO	=GRAIN	CO	Si	2.217D-2	47.0	28.013
C**	+CO	=GRAIN	CO	C	2.217D-2	47.0	28.013
O**	+CO	=GRAIN	CO	O	1.149D-1	46.0	46.018
Mg**	+O2	=GRAIN	O2	Mg	2.093D-2	48.0	27.730
Fe**	+O2	=GRAIN	O2	Fe	4.324D-2	47.0	42.335
Si**	+O2	=GRAIN	O2	Si	2.217D-2	47.0	28.013
C**	+O2	=GRAIN	O2	C	2.217D-2	47.0	28.013
O**	+O2	=GRAIN	O2	O	1.149D-1	46.0	46.018
CH4*	+H	=CH4	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	2000.0
CH4*	+H2	=CH4	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	2000.0
CH4*	+He	=CH4	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	2000.0
H2O*	+H	=H2O	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	6000.0
H2O*	+H2	=H2O	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	6000.0
H2O*	+He	=H2O	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	6000.0
SiO*	+H	=SiO	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	6000.0
SiO*	+H2	=SiO	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	6000.0
SiO*	+He	=SiO	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	6000.0
CO*	+H	=CO	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	1900.0
CO*	+H2	=CO	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	1900.0
CO*	+He	=CO	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	1900.0
CO2*	+H	=CO2	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	3100.0
CO2*	+H2	=CO2	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	3100.0
CO2*	+He	=CO2	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	3100.0
NH3*	+H	=NH3	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	3600.0
NH3*	+H2	=NH3	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	3600.0
NH3*	+He	=NH3	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	3600.0
CH3OH*	+H	=CH3OH	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	6000.0
CH3OH*	+H2	=CH3OH	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	6000.0
CH3OH*	+He	=CH3OH	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	6000.0
H2CO*	+H	=H2CO	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	6000.0
H2CO*	+H2	=H2CO	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	6000.0
H2CO*	+He	=H2CO	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	6000.0
HCO2H*	+H	=HCO2H	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	6000.0
HCO2H*	+H2	=HCO2H	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	6000.0
HCO2H*	+He	=HCO2H	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	6000.0
OCS*	+H	=OCS	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	6000.0
OCS*	+H2	=OCS	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	6000.0
OCS*	+He	=OCS	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	6000.0
H2S*	+H	=H2S	H	GRAIN	4.00D-05	0.00	6000.0
H2S*	+H2	=H2S	H2	GRAIN	1.00D-04	0.00	6000.0
H2S*	+He	=H2S	He	GRAIN	8.00D-04	0.00	6000.0
CH4*	+CRP	=CH4	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
H2O*	+CRP	=H2O	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
CO*	+CRP	=CO	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
CO2*	+CRP	=CO2	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
NH3*	+CRP	=NH3	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
CH3OH*	+CRP	=CH3OH	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
H2CO*	+CRP	=H2CO	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
HCO2H*	+CRP	=HCO2H	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
OCS*	+CRP	=OCS	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
H2S*	+CRP	=H2S	GRAIN		7.00D+01	0.00	0.0
O2	PHOTON	=O	O		7.90E-10	0.00	1.8
O2	PHOTON	=O2+	ELECTR		7.70E-11	0.00	3.7
OH	PHOTON	=O	H		4.20E-10	0.00	1.7
OH	PHOTON	=OH+	ELECTR		1.60E-12	0.00	3.1
H2O	PHOTON	=OH	H		8.00E-10	0.00	1.7
H2O	PHOTON	=H2O+	ELECTR		3.30E-11	0.00	3.9
CH	PHOTON	=C	H		9.50E-10	0.00	1.1
CH	PHOTON	=CH+	ELECTR		7.60E-10	0.00	2.8
CH2	PHOTON	=CH	H		7.20E-10	0.00	1.7
CH2	PHOTON	=CH2+	ELECTR		3.00E-10	0.00	2.3
CH3	PHOTON	=CH2	H		5.00E-10	0.00	1.9
CH3	PHOTON	=CH3+	ELECTR		1.00E-10	0.00	2.1
CH4	PHOTON	=CH2	H2		1.20E-09	0.00	2.1
CH4	PHOTON	=CH4+	ELECTR		6.80E-12	0.00	4.0
C2	PHOTON	=C	C		2.30E-10	0.00	2.1
C2	PHOTON	=C2+	ELECTR		4.10E-10	0.00	3.5
C2H	PHOTON	=C2	H		5.10E-10	0.00	1.9
C2H	PHOTON	=C2H+	ELECTR		1.00E-11	0.00	2.0
C2H2	PHOTON	=C2H	H		3.20E-09	0.00	1.8
C2H2	PHOTON	=C2H2+	ELECTR		3.30E-10	0.00	3.1
C3	PHOTON	=C2	C		3.80E-09	0.00	1.8
C3H	PHOTON	=C3	H		1.00E-09	0.00	1.7
C3H2	PHOTON	=C3H	H		1.90E-09	0.00	1.8
CO2	PHOTON	=CO	O		8.70E-10	0.00	2.5
H2+	PHOTON	=H+	H		5.70E-10	0.00	1.9
H3+	PHOTON	=H2+	H		5.00E-13	0.00	2.3
H3+	PHOTON	=H+	H2		5.00E-13	0.00	1.8
CH+	PHOTON	=H+	C		3.20E-10	0.00	2.5
CH+	PHOTON	=C+	H		2.00E-12	0.00	3.0
CH2+	PHOTON	=CH+	H		1.70E-09	0.00	1.7
CH3+	PHOTON	=CH2+	H		1.00E-09	0.00	1.7
CH3+	PHOTON	=CH+	H2		1.00E-09	0.00	1.7
CH4+	PHOTON	=CH3+	H		1.00E-09	0.00	1.7
CH4+	PHOTON	=CH2+	H2		1.00E-09	0.00	1.7
CH5+	PHOTON	=CH4+	H		1.00E-09	0.00	1.7
CH5+	PHOTON	=CH3+	H2		1.00E-09	0.00	1.7
C2+	PHOTON	=C	C+		1.00E-11	0.00	1.7
O2+	PHOTON	=O	O+		1.00E-11	0.00	1.7
OH+	PHOTON	=O+	H		1.10E-11	0.00	2.8
H2O+	PHOTON	=OH+	H		3.00E-10	0.00	2.0
H2O+	PHOTON	=H+	OH		1.00E-10	0.00	2.0
H2O+	PHOTON	=H2+	O		1.00E-10	0.00	2.0
H3O+	PHOTON	=H2O+	H		1.50E-11	0.00	2.0
H3O+	PHOTON	=H2+	OH		5.00E-11	0.00	2.0
H3O+	PHOTON	=H2O	H+		5.00E-11	0.00	2.0
CO+	PHOTON	=C+	O		3.00E-11	0.00	3.0
HCO+	PHOTON	=CO+	H		7.80E-12	0.00	3.0
HCO2+	PHOTON	=H+	CO2		3.00E-10	0.00	3.0
C2H+	PHOTON	=C2+	H		1.00E-10	0.00	2.0
C2H2+	PHOTON	=C2+	H2		1.00E-10	0.00	2.0
C2H3+	PHOTON	=C2H+	H2		1.00E-10	0.00	3.0
C3+	PHOTON	=C2+	C		1.00E-10	0.00	3.0
C3H+	PHOTON	=C3+	H		1.00E-10	0.00	3.0
C3H2+	PHOTON	=C3+	H2		1.00E-10	0.00	3.0
C3H3+	PHOTON	=C3H+	H2		1.00E-10	0.00	3.0
N2	PHOTON	=N	N		2.30E-10	0.00	3.8
NH	PHOTON	=N	H		5.00E-10	0.00	2.0
NH	PHOTON	=NH+	ELECTR		1.00E-11	0.00	2.0
NH2	PHOTON	=NH	H		7.40E-10	0.00	1.6
NH2	PHOTON	=NH2+	ELECTR		1.73E-10	0.00	2.6
NH3	PHOTON	=NH2	H		1.10E-09	0.00	1.8
NH3	PHOTON	=NH3+	ELECTR		2.80E-10	0.00	2.7
CN	PHOTON	=C	N		3.00E-10	0.00	3.1
HCN	PHOTON	=CN	H		1.50E-09	0.00	2.1
HNC	PHOTON	=CN	H		1.50E-09	0.00	2.1
NO	PHOTON	=N	O		4.70E-10	0.00	1.7
NO	PHOTON	=NO+	ELECTR		2.60E-10	0.00	2.3
NH+	PHOTON	=N+	H		5.40E-11	0.00	1.4
NH2+	PHOTON	=N+	H2		1.00E-10	0.00	2.0
NH3+	PHOTON	=NH+	H2		1.00E-10	0.00	2.0
NH4+	PHOTON	=NH3+	H		1.00E-10	0.00	2.0

CN+	PHOTON =C+	N	1.00E-10	0.00	2.0
C2N+	PHOTON =C+	CN	1.00E-10	0.00	2.0
HCN+	PHOTON =CN+	H	1.00E-10	0.00	2.0
N2+	PHOTON =N+	N	1.00E-10	0.00	2.0
N2H+	PHOTON =H+	N2	1.00E-10	0.00	2.0
NO+	PHOTON =N+	O	1.00E-10	0.00	2.0
HNO+	PHOTON =NO+	H	1.00E-10	0.00	2.0
SH	PHOTON =S	H	9.70E-10	0.00	1.4
H2S	PHOTON =H2S+	ELECTR	7.10E-10	0.00	2.7
H2S	PHOTON =SH	H	3.10E-09	0.00	1.9
CS	PHOTON =C	S	9.70E-10	0.00	2.0
SO	PHOTON =S	O	3.70E-09	0.00	1.9
SO2	PHOTON =SO	O	1.90E-09	0.00	1.9
OCS	PHOTON =S	CO	3.70E-09	0.00	1.7
SH+	PHOTON =S+	H	2.50E-10	0.00	1.8
CS+	PHOTON =C+	S	1.00E-10	0.00	2.0
HCS+	PHOTON =CS+	H	1.00E-10	0.00	2.0
H2S+	PHOTON =SH+	H	1.00E-10	0.00	2.0
H3S+	PHOTON =H2S+	H	1.00E-10	0.00	2.0
SO+	PHOTON =S+	O	1.00E-10	0.00	2.0

HSO+	PHOTON =SO+	H	1.00E-10	0.00	2.0
HSO2+	PHOTON =HSO+	O	1.00E-10	0.00	2.0
HOCS+	PHOTON =CS+	OH	1.00E-10	0.00	2.0
SiO	+PHOTON =SiO+	ELECTR	5.00D-11	0.00	2.55
SiO2	+PHOTON =SiO	O	2.00D-10	0.00	2.55
SiH	+PHOTON =Si	H	1.50D-09	0.00	2.55
SiH2	+PHOTON =SiH	H	1.50D-09	0.00	2.55
SiH3	+PHOTON =SiH2	H	1.50D-09	0.00	2.55
SiH4	+PHOTON =SiH2	H2	1.50D-09	0.00	2.55
SiO+	+PHOTON =Si+	O	1.50D-11	0.00	2.55
SiH+	+PHOTON =Si+	H	1.00D-09	0.00	2.55
SiH2+	+PHOTON =SiH+	H	1.00D-09	0.00	2.55
SiH3+	+PHOTON =SiH2+	H	1.00D-09	0.00	2.55
SiH4+	+PHOTON =SiH3+	H	1.00D-09	0.00	2.55
SiH5+	+PHOTON =SiH4+	H	1.00D-09	0.00	2.55
SiOH+	+PHOTON =SiO+	H	1.50D-11	0.00	2.55
H2CN+	+PHOTON =HCN+	H	2.00E-10	0.00	2.0
H2NC+	+PHOTON =HCN+	H	1.00E-10	0.00	2.0
H2CO	+PHOTON =CO	H2	5.00E-10	0.00	1.74
H2CO	+PHOTON =CO	H H	5.00E-10	0.00	1.74

IV Détails sur la chimie de H_2

IV.1 Détail sur la photodissociation de H_2

En complément de la discussion sur la photodissociation de H_2 au Chapitre 3, on représente sur la Figure A.4 les temps de formation et de photodissociation de H_2 pour plusieurs r_0 croissant, ce qui met en évidence la variation importante des vitesses des réactions avec r_0. La Figure A.5 donne l'abondance finale de H_2 pour les diffrérents modèles présentés.

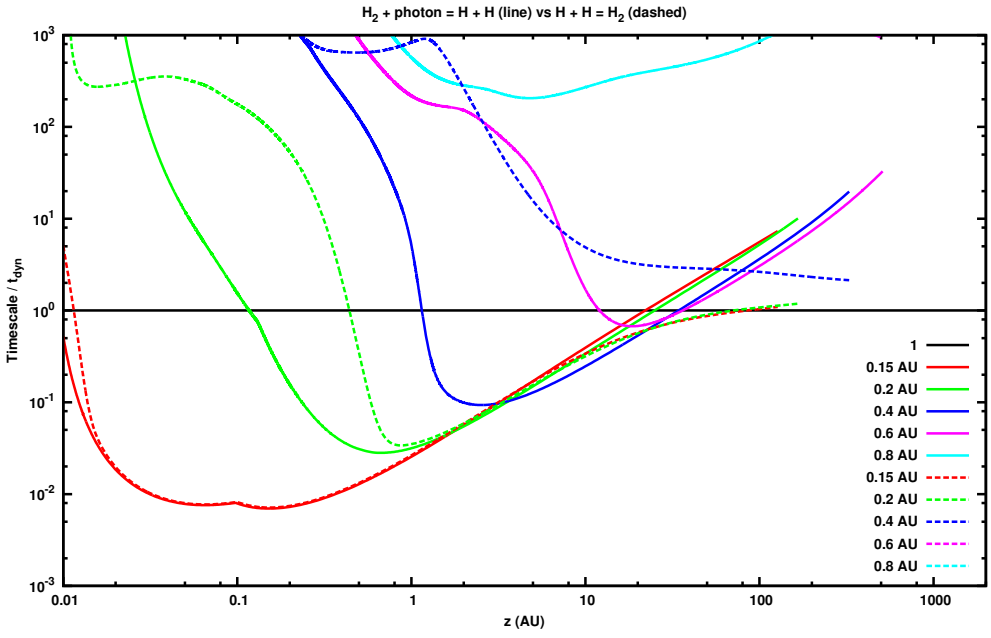


Figure A.4 – *Rapport entre le temps caractéristique de formation (en poitillé) et de photodissociation (en trait plein) de* H_2 *sur le temps dynamique pour les premières lignes d'écoulement du modèle de classe II.*

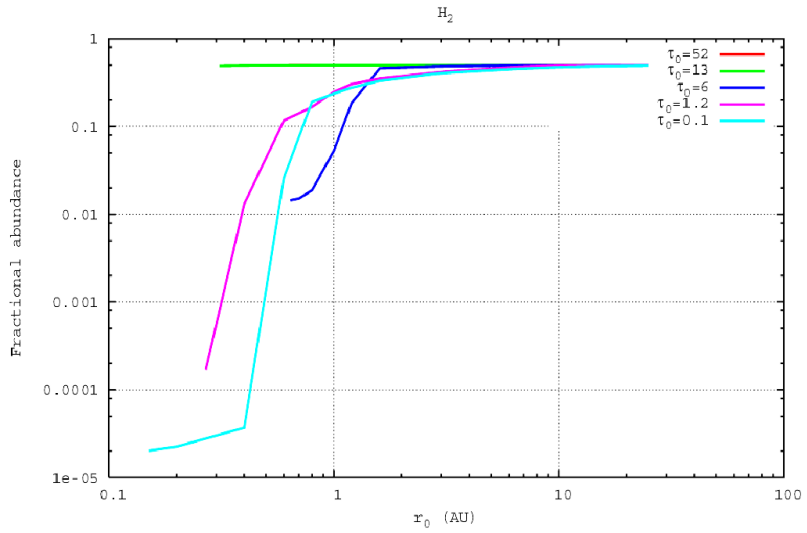


FIGURE A.5 – *Abondance de* H_2 *en fonction de* r_0 *le long de la droite* $z/r = 21$ *dans le jet correspondant à l'abondance de* H_2 *au point de recollimation et pour les différents modèles ici indiqués par leur valeur de* τ_0.

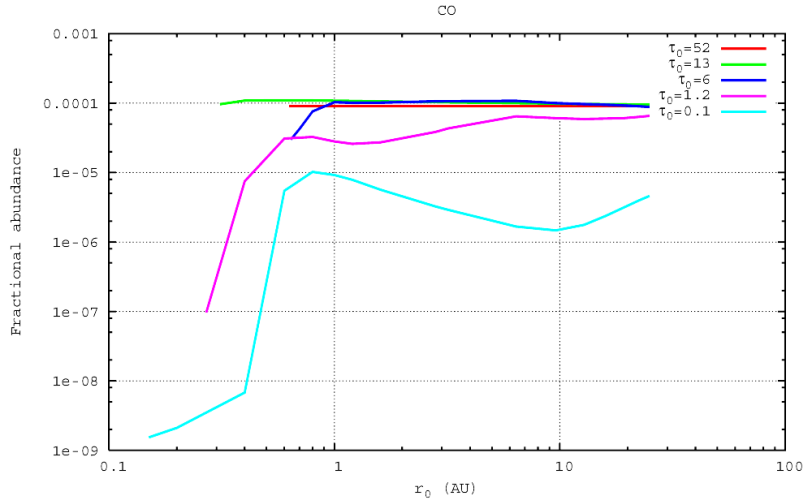


FIGURE A.6 – *Identique à la Figure A.5 pour l'abondance finale de* CO

IV.2 FORMATION DE H_2

La formation de H_2 en voie gazeuse par des réactions à trois corps ne devient efficace qu'à de très hautes densités qui ne sont pas accessibles dans le vent de disque au delà du rayon de sublimation. Dans le vent de dique poussiéreux ($r_0 > R_{sub}$) H_2 se forme presque exclusivement à la surface des grains. Dans ce cas, les grains agissent comme catalyseur de la réaction. Un atome d'hydrogène est physisorbé temporairement à la surface du grain et y migre. Si la température n'est pas trop élevée alors cet atome a le temps de rencontrer un autre atome d'hydrogène lui aussi physisorbé et de former une

liaison covalente avec. L'énergie de la liaison permet à la molécule de H_2 nouvellement formée d'être éjectée en phase gazeuse.

Le taux de formation de H_2 sur les grains est adapté de Tielens & Hollenbach (1985) et fait intervenir le coefficient de collage S à la surface du grain. Ce coefficient représente la probabilité qu'a un atome d'hydrogène d'être adsorbé à la surface du grain pour former une molécule de H_2. Le taux de formation de H_2 par unité de volume et de temps est donné par :

$$u = k n_d n(\mathrm{H}) \tag{A.7}$$

Le coefficient est donné par :

$$k = v\sigma S$$

où $\sigma = \pi \bar{a}^2$ est la section efficace géométrique moyennée sur la distribution en taille des grains et v est la vitesse effective donnée par la relation (A.8) :

$$\mathrm{v} = \sqrt{\frac{8 k_\mathrm{B} T_{\mathrm{eff}}^d}{\pi m_{\mathrm{H}_2}}} \tag{A.8}$$

On suppose que chaque atome H adsorbé sur les grains conduit à la formation d'une molécule H_2. Le coefficient de collage que l'on utilise est celui de Hollenbach & McKee (1979) :

$$S = \left(1 + 0.04\sqrt{T_{\mathrm{eff}}^d + T_d} - 0.002 T_{\mathrm{eff}}^d + 8\times 10^{-6} (T_{\mathrm{eff}}^d)^2\right)^{-1} \tag{A.9}$$

Le long des lignes d'écoulement pour des classes II et classe I typiques S vaut $\sim 10^{-2}$ et ~ 0.5 pour une classe 0.

La formation de chaque molécule de H_2 libère une énergie égale à son enthalpie de formation $\Delta E_{\mathrm{H}_2} = 4.48\,\mathrm{eV}$, cette énergie se répartie sous trois formes :
– énergie interne de la nouvelle molécule,
– chauffage du grain,
– énergie cinétique de la molécule.
Mais la distribution de l'énergie entre ces trois formes est mal connue. Le modèle suit la prescription adoptée par Flower & Pineau des Forêts (2003) : un tiers de l'énergie est répartie sur chacune des trois formes.

Une énergie valant $E_{\mathrm{int}} = \Delta E_{\mathrm{H}_2}/3 = 1.49\,\mathrm{eV}$ est distribuée dans tous les niveaux d'énergie de H_2 de manière à ce que chaque niveau de H_2 suive une distribution proportionnelle à une bolztmanienne correspondant à une température de 17 249 K.

IV.3 Rapport ortho-para

Les états para correspondent à des valeurs paires de J, et les états ortho correspondent à des valeurs impaires de J. Les deux formes ortho et para se comportent comme deux espèces distinctes. Le rapport ortho-para [4] est :

$$\frac{n(o-\mathrm{H}_2)}{n(p-\mathrm{H}_2)} = \frac{\sum_{v,i} n(v, 2i+1)}{\sum_{v,i} n(v, 2i)}$$

4. On calcule aussi le rapport ortho-para pour H_2O, en tenant compte des poids statistiques de ses niveaux.

Le rapport ortho-para est initialisé à sa valeur statitique 3, mais il peut évoluer au long des lignes d'écoulement en fonction des réactions de collision et augmente avec la température. Le rapport ortho/para est < 0.01 à $T = 25\,\mathrm{K}$ et tend vers 3 (rapport des dégénérescences) à haute température ($= 2.9$ à $T = 200\,\mathrm{K}$) (Wilgenbus et al. 2000).

V Effet photo-électrique sur les grains

Le rendement avec lequel un photon UV parvient à éjecter hors du grain un électron est (Weingartner & Draine 2001)

$$Y_{\mathrm{PE}} = \min\left[y_0(E') \times \gamma_e(h\nu), 1\right] \times f_e \quad (e^-/h\nu)$$

où y_0 est le nombre d'électrons produits par photon ayant assez d'énergie pour arriver à la surface, E' est l'énergie initiale de l'électron après absorption du photon. Elle dépend donc des phénomènes décrits précédemment. f_e est la fraction de ces électrons qui parviennent effectivement à s'échapper dans la phase gazeuse. Enfin γ_e est un terme de rendement dépendant de la géométie du grain et de la profondeur de pénétration du photon dans le grain (Draine 1978).

Le taux de chauffage par effet photoélectrique par grain de taille a est :

$$H(a,q) = \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} \sigma_{\mathrm{abs}}(a) Y_{\mathrm{PE}} \pi\omega B_\nu(T) Z(a, IP) \mathrm{d}\nu \tag{A.10}$$

où H est le taux de chauffage par grain qui ne tient pas compte de $C(a,q)$, le taux de refroidissement induit par recombinaison des particules chargées (ions et électrons) sur les grains proportionnel à $n_e n_{\mathrm{H}}$. Z est la fonction de partition en énergie des électrons émis. Le taux total est la somme de ce taux sur la distribution de grain pour toutes les tailles de grain a et pour toutes les charges q.

VI Structure chimique dans le vent de disque

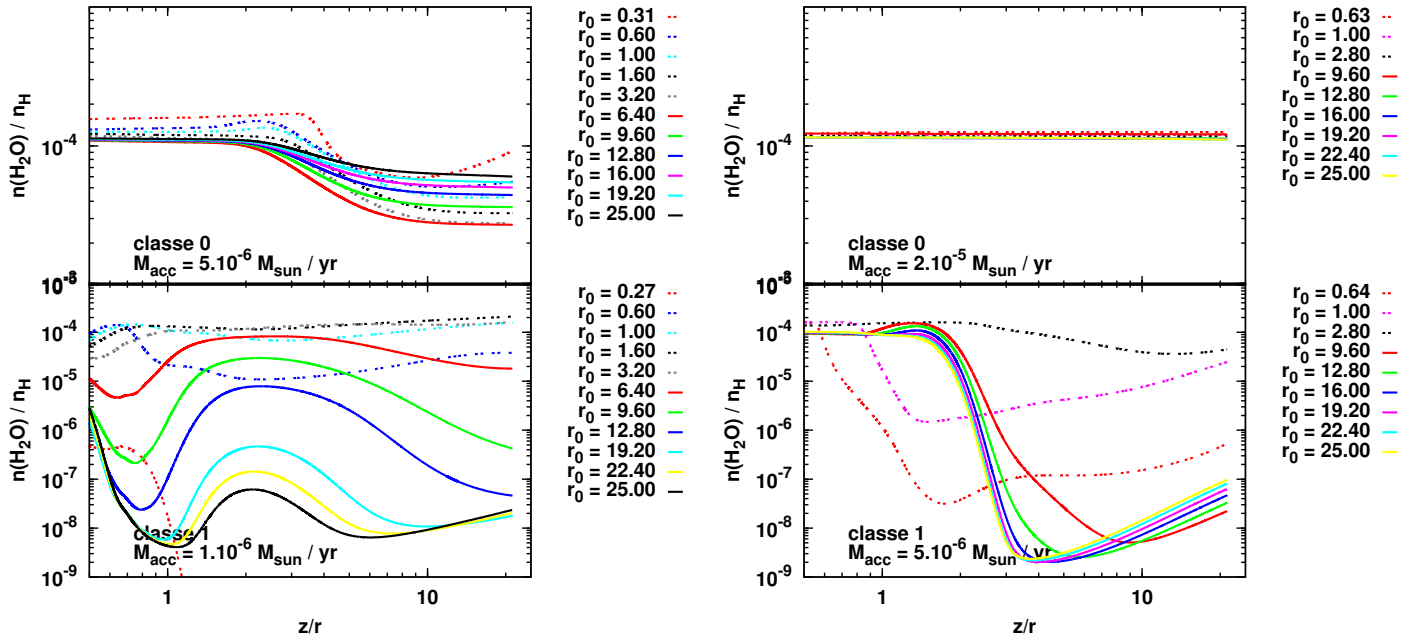


Figure A.7 – *Abondance en* H_2O *le long de quelques lignes d'écoulement pour deux modèles de classe 0 (*$\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}$ *et* $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*) et pour deux modèles de classe I (*$\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}$ *et* $\dot{M}_{\rm acc} = 1\times10^{-6}\,M_\odot\,{\rm yr}^{-1}$*).*

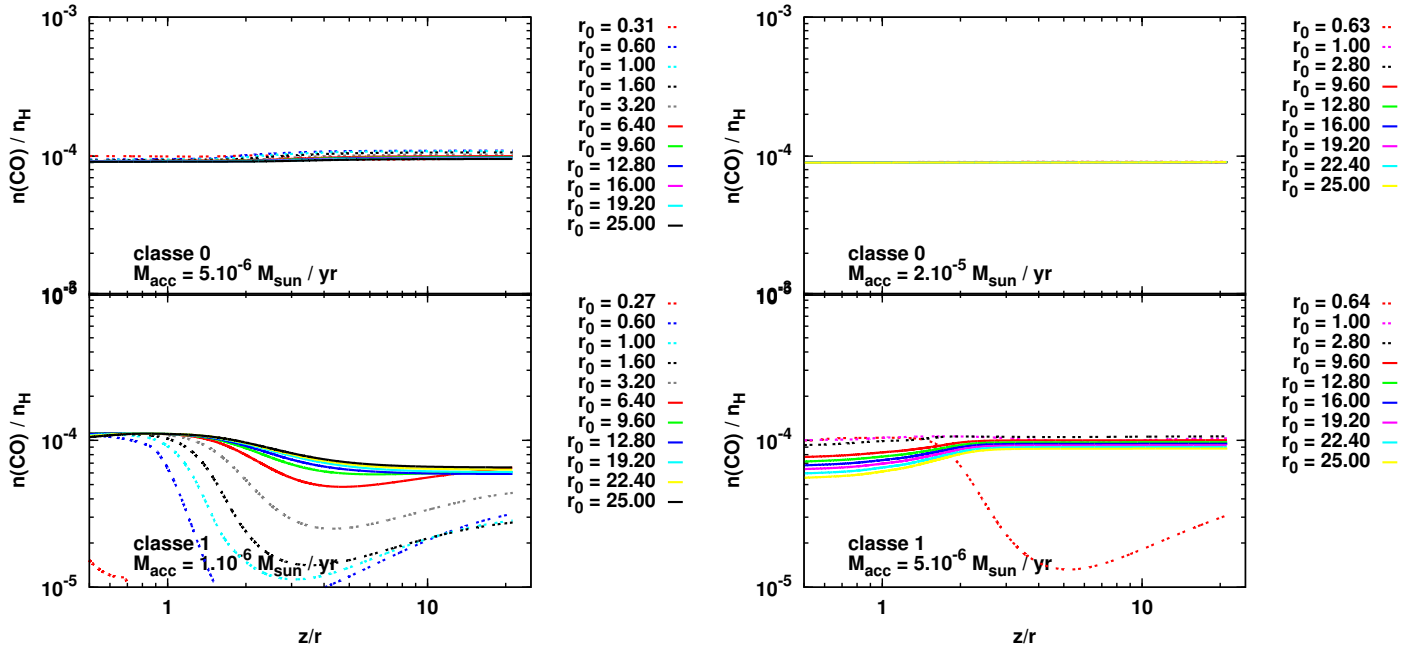


Figure A.8 – *Abondance en* CO *le long des mêmes lignes d'écoulement qu'en Figure A.7 et pour les mêmes modèles*

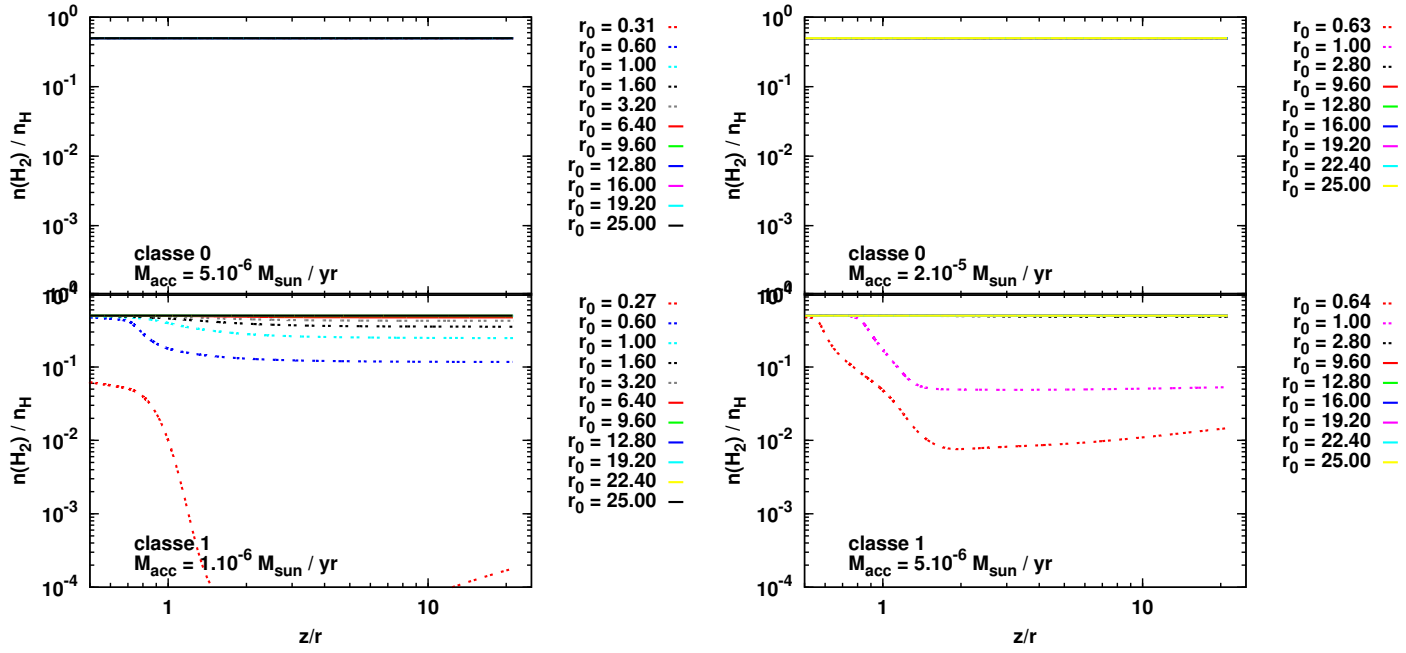


FIGURE A.9 – *Abondance en* H_2 *le long des mêmes lignes d'écoulement qu'en Figure A.7 et pour les mêmes modèles*

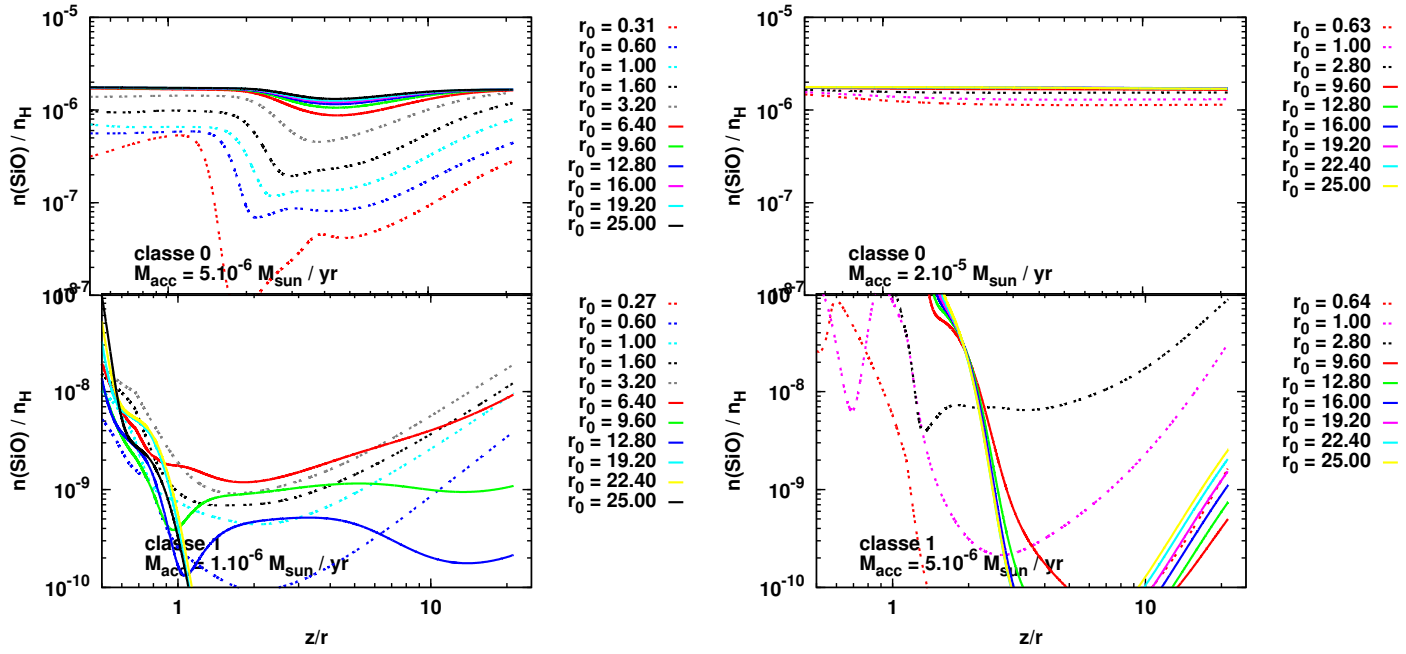


FIGURE A.10 – *Abondance en* SiO *le long des mêmes lignes d'écoulement qu'en Figure A.7 et pour les mêmes modèles*

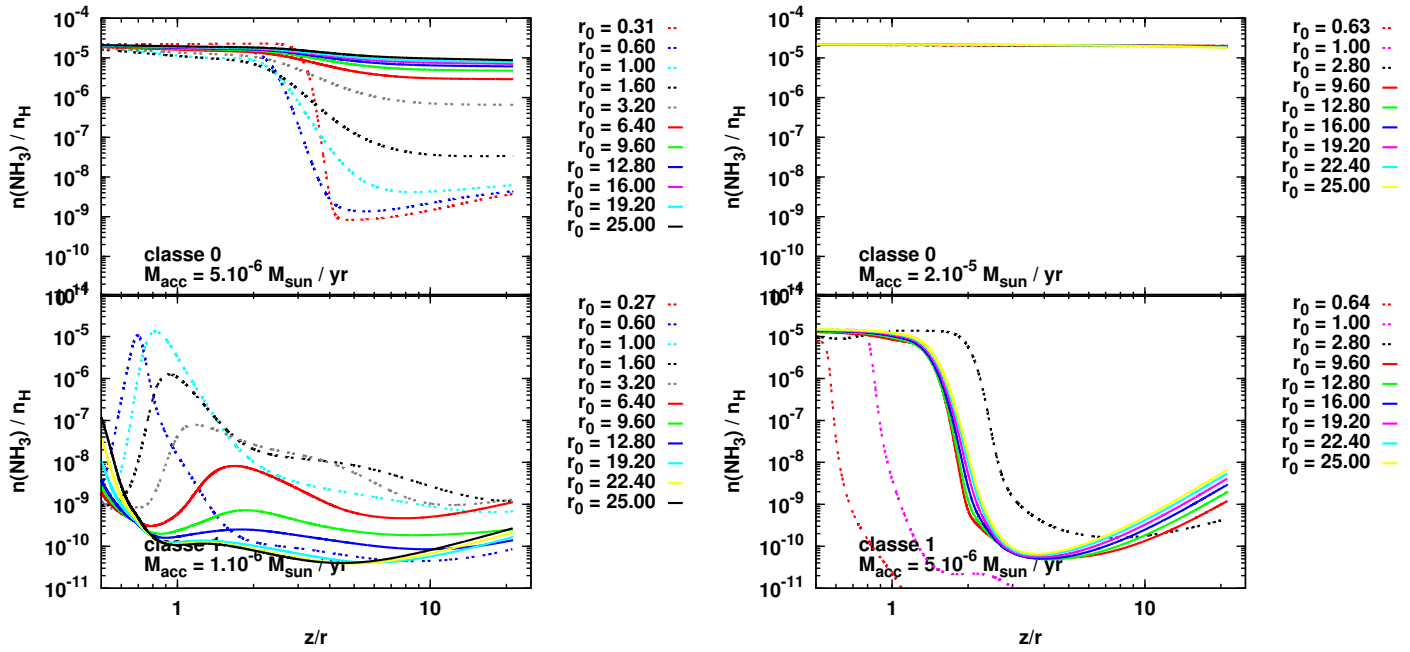


FIGURE A.11 – *Abondance en* NH_3 *le long des mêmes lignes d'écoulement qu'en Figure A.7 et pour les mêmes modèles*

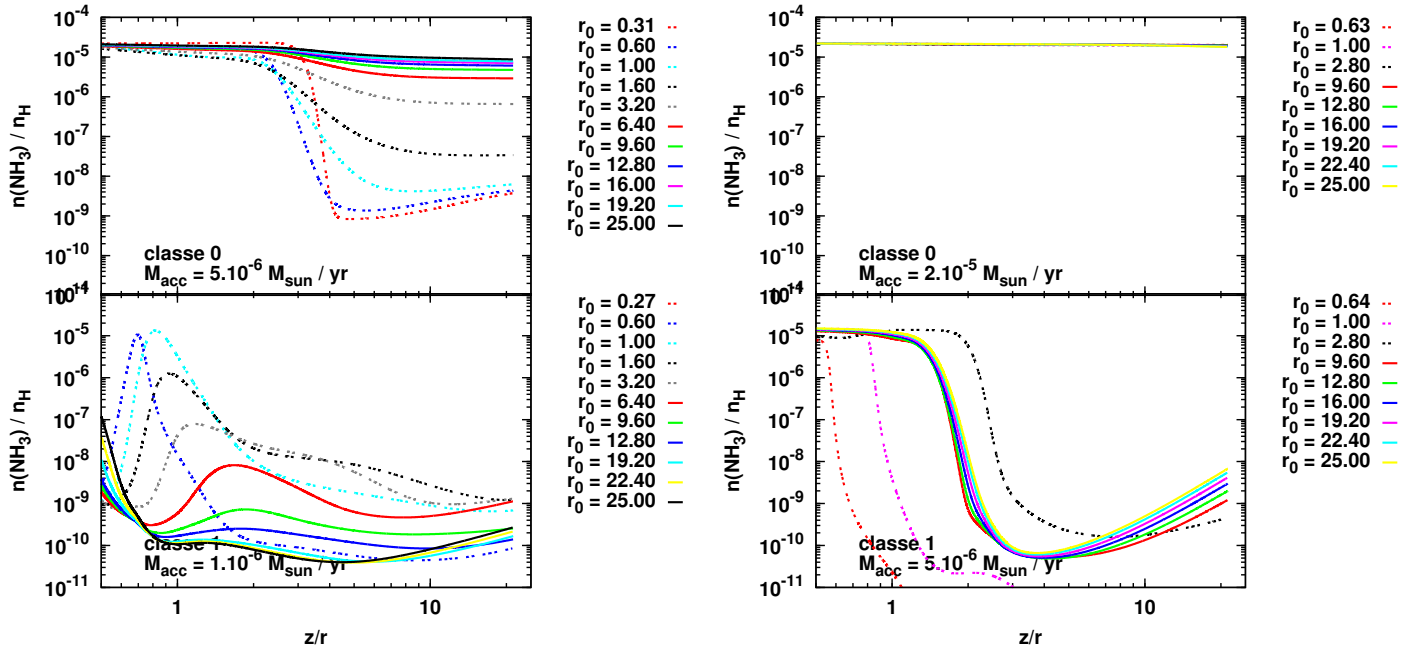


FIGURE A.12 – *Abondance en* CH_4 *le long des mêmes lignes d'écoulement qu'en Figure A.7 et pour les mêmes modèles*

VII Température et spectre infrarouge local des poussières

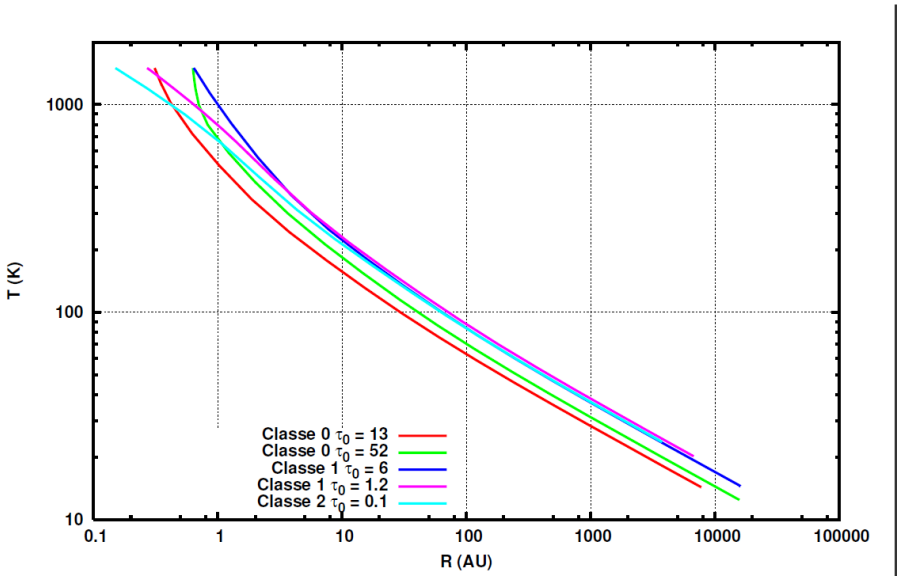


Figure A.13 – *Profils de température des poussières calculés par DUSTY pour les différentes distribution utilisées dans les modèles présentés. Les modèles sont nommés par leur valeur de* τ_0.

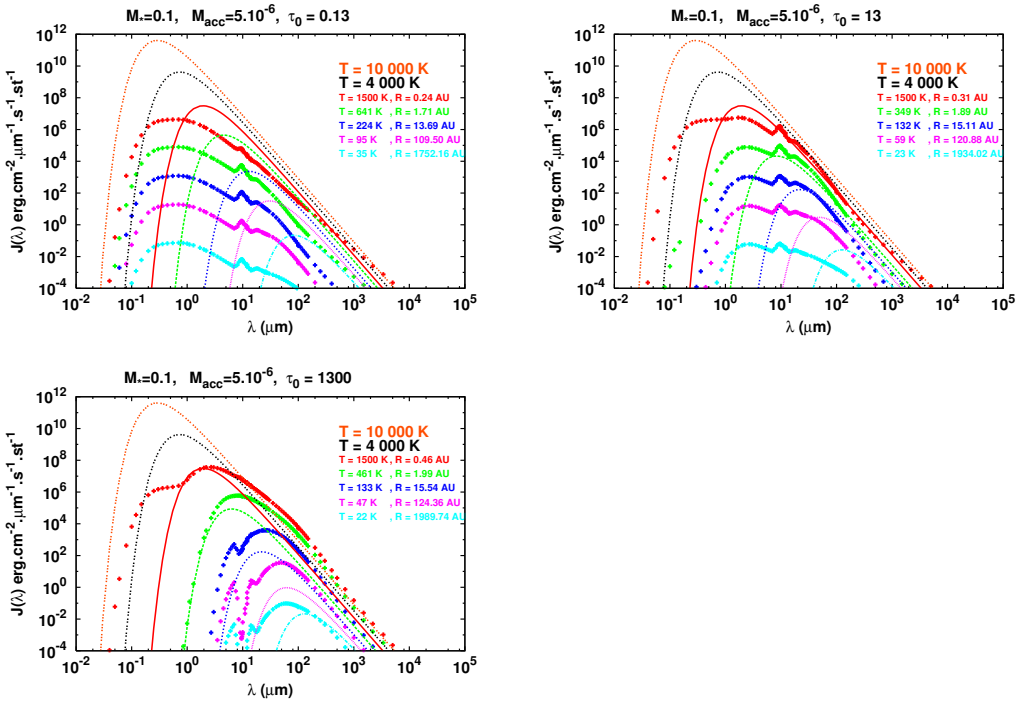


Figure A.14 – *Spectre infrarouge local des poussières pour le modèle de classe 0 avec* $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}, {\rm M}_\odot\ {\rm yr}^{-1}$ *pour différentes valeurs de* τ_0 *que l'on fait varier ici comme un paramètre : en haut à gauche* $\tau_0 = 0.13$ *(distribution de poussières optiquement minces), en haut à droite* $\tau_0 = 13$*, la valeur utilisée dans le modèle de classe 0 standard présenté, et en bas à gauche* $\tau_0 = 1300$ *(distribution de poussières optiquement épaisse).*

Annexe

B

Transitions de H_2, H_2O et CO et densités critiques

Sommaire

I Transitions de H_2 . . . 272
II Transitions de H_2O . . . 273
II.1 Niveaux vibrationnels de H_2O, modes normaux . . . 274
III Transitions de CO . . . 274
III.1 Liste des transitions . . . 274
III.2 Niveaux vibrationnels de CO . . . 275
III.2-1 Oscillateur Anharmonique . . . 275
III.2-2 Rotation-vibration . . . 275
III.2-3 Fonction de partition vibrationnelle . . . 276
III.2-4 Fonction de partition totale . . . 276
IV Densité critique rotationnelle avec para-H_2 et ortho-H_2 pour CO . . . 276
V Densité critique rotationnelles avec H pour CO . . . 277
VI Densité critique vibrationnelle de H pour CO . . . 278
VII Densité critique vibrationnelle pour CO avec H_2 . . . 279
VIII Densité critique avec para-H_2 et ortho-H_2 pour H_2O . . . 279

Les Tables suivantes récapitulent les différentes transitions rotationnelles de H_2O et CO, ainsi que les densités critiques de collisionneurs H et H_2 pour CO et H_2O (voir sectionII.4).

TABLE B.1 – *Premières transitions de* H_2. *Les transitions étudiées au Chapitre 6 sont en grisé.*

Transition	ν (THz)	λ (μm)	E_u/k_B (K)	E_l/k_B (K)	A_{ul} (10^{-3} s^{-1})
0-0S(0)	10.6	28.22	509.9	0.0	2.9×10^{-11}
0-0S(1)	17.6	17.03	1015.2	170.5	4.8×10^{-10}
0-0S(2)	24.4	12.28	1681.7	509.9	2.8×10^{-9}
0-0S(3)	31.0	9.67	2503.9	1015.2	9.9×10^{-9}
0-0S(4)	37.4	8.03	3474.4	1681.7	2.6×10^{-8}
0-0S(5)	43.4	6.91	4586.4	2503.9	5.9×10^{-8}
1-0S(0)	134.9	2.22	6471.6	0.0	2.5×10^{-7}
1-0S(1)	141.3	2.12	6951.6	170.5	3.5×10^{-7}

Notes. Les transitions de H_2 sont nommées selon la notation v_u-v_lS(J_l) où S désigne les transitions à $\Delta J = -2$.

I TRANSITIONS DE H_2

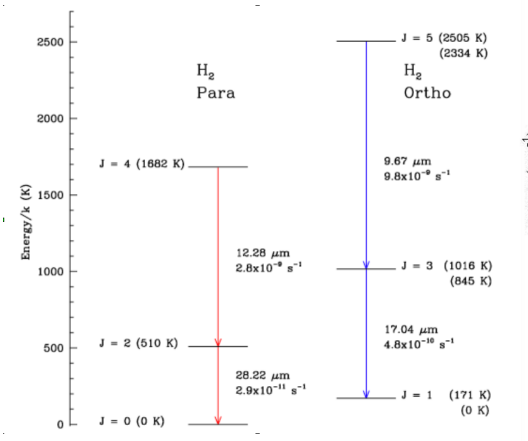


FIGURE B.1 – *Premiers niveaux rotationnels de* H_2.

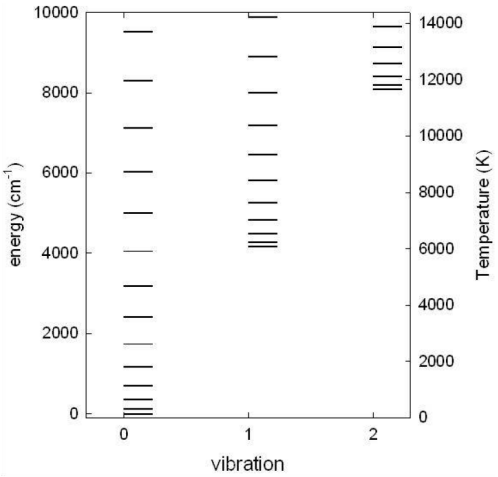


FIGURE B.2 – *Niveaux (v, J) de* H_2 *(*$1\,\mathrm{cm}^{-1} = 1.429\,\mathrm{K}$*).*

Le modèle inclut 318 niveaux ro-vibrationnels de H_2 ($v \leq 14$ et $J \leq 30$) allant jusqu'à une énergie de $\simeq 57\,000$ K avec $\sim$ 1900 transitions radiatives à $\Delta v = 0$, $\Delta J = -2$ et $\Delta v \neq 0$, $\Delta J = 0, \pm 2$. Les taux de désexcitation collisionnelle de H_2 par H_2, H et He sont déterminés par des calculs semi-classiques.

II Transitions de H_2O

Transition ORTHO	ν (GHz)	λ (μm)	E_u/k_B (K)	E_l/k_B (K)	A_{ul} (10^{-3} s^{-1})	Lobe (Beam) ($''$)
$1_{10} - 1_{01}$	556.94	538.5	60.96	34.24	3.458	39[a]
$2_{12} - 1_{01}$	1669.90	179.5	114.38	34.24	55.93	13[a]
$2_{21} - 1_{10}$	2773.98	108.1	194.10	60.96	256.4	
$2_{21} - 2_{12}$	1661.0	180.5	194.10	114.38	30.58	13[a]
$3_{03} - 2_{21}$	1716.77	175.6	196.77	114.38	50.48	13[a]
$3_{12} - 2_{21}$	1153.13	260.0	249.44	194.10	2.634	19[a]
$3_{12} - 3_{03}$	1097.37	273.2	249.44	196.77	16.48	20[a]
$5_{14} - 5_{05}$	2221.70	134.9	574.74	468.11	75.8	

Transition PARA	ν (GHz)	λ (μm)	E_u/k_B (K)	E_l/k_B (K)	A_{ul} (10^{-3} s^{-1})	Lobe (Beam) ($''$)
$1_{11} - 0_{00}$	1113.34	269.27	53.4	0.0	18.0	19[a]
$2_{02} - 1_{11}$	987.93	303.46	100.8	53.4	5.8	22[a]
$2_{11} - 2_{02}$	752.03	398.64	136.9	100.8	7.1	29[a]

[a] : Lobe pour les observations Herschel/HIFI (Roelfsema et al. 2012; Kristensen et al. 2011).

La liste suivante donne les niveaux rotationnels de H_2O.

```
!---------------------------------------------
!--     ortho H2O energy levels in degree K --
!--  v1 = 0  v2 = 0  v3 = 0                 --
!--Nup  J  Ka   Kc  weight  Evj(K)           --
!---------------------------------------------
    1  1   0   1    3.00    34.235317
    2  1   1   0    3.00    60.964462
    3  2   1   2    5.00   114.379395
    4  2   2   1    5.00   194.096481
    5  3   0   3    7.00   196.772644
    6  3   1   2    7.00   249.438705
    7  3   2   1    7.00   305.250580
    8  4   1   4    9.00   323.497467
    9  3   3   0    7.00   410.660248
   10  4   2   3    9.00   432.161255
   11  5   0   5   11.00   468.110565
   12  4   3   2    9.00   550.365295
   13  5   1   4   11.00   574.739502
   14  5   2   3   11.00   642.439575
   15  6   1   6   13.00   643.506653
   16  4   4   1    9.00   702.289368
   17  5   3   2   11.00   732.078796
   18  6   2   5   13.00   795.528870
   19  7   0   7   15.00   843.487183
   20  5   4   1   11.00   878.158875
   21  6   3   4   13.00   933.750549
   22  7   1   6   15.00  1013.22321
   23  5   5   0   11.00  1067.69934
   24  8   1   8   17.00  1070.70129
   25  6   4   3   13.00  1088.77563
   26  7   2   5   15.00  1125.73132
   27  7   3   4   15.00  1211.98267
   28  8   2   7   17.00  1274.20154
   29  6   5   2   13.00  1278.51587
   30  9   0   9   19.00  1323.93823
   31  7   4   3   15.00  1339.86401
   32  8   3   6   17.00  1447.59961
   33  6   6   1   13.00  1503.62939
   34  7   5   2   15.00  1524.89124
   35  9   1   8   19.00  1552.57971
   36 10   1  10   21.00  1603.61438
   37  8   4   5   17.00  1615.35303
   38  9   2   7   19.00  1729.32471
   39  7   6   1   15.00  1749.86060
   40  8   5   4   17.00  1805.93396
   41  9   3   6   19.00  1845.86401
   42 10   2   9   21.00  1861.28064
   43 11   0  11   23.00  1909.44580
   44  9   4   5   19.00  1957.10657
   45  7   7   0   15.00  2006.85864
!---------------------------------------------
```

```
!--     para H2O energy levels in degree K  --
!--  v1 = 0  v2 = 0  v3 = 0                 --
!-- Id  J   Ka  Kc  weight    Evj(K)        --
!---------------------------------------------
    1  0   0   0    1.00     0.0000000
    2  1   1   1    3.00    53.432892
    3  2   0   2    5.00   100.846649
    4  2   1   1    5.00   136.939120
    5  2   2   0    5.00   195.912630
    6  3   1   3    7.00   204.710264
    7  3   2   2    7.00   296.826481
    8  4   0   4    9.00   319.489491
    9  4   1   3    9.00   396.385135
   10  3   3   1    7.00   410.373565
   11  4   2   2    9.00   454.343596
   12  5   1   5   11.00   469.948701
   13  4   3   1    9.00   552.272579
   14  5   2   4   11.00   598.841126
   15  6   0   6   13.00   642.707050
   16  4   4   0    9.00   702.327412
   17  5   3   3   11.00   725.109260
   18  6   1   5   13.00   781.132798
   19  7   1   7   15.00   843.826241
   20  6   2   4   13.00   867.270496
   21  5   4   2   11.00   877.832644
   22  6   3   3   13.00   951.836527
   23  7   2   6   15.00  1020.984284
   24  5   5   1   11.00  1067.694613
   25  8   0   8   17.00  1070.558777
   26  6   4   2   13.00  1090.294065
   27  7   3   5   15.00  1175.059616
   28  8   1   7   17.00  1270.302572
   29  6   5   1   13.00  1278.564607
   30  9   1   9   19.00  1323.998071
   31  7   4   4   15.00  1334.837897
   32  8   2   6   17.00  1414.213306
   33  6   6   0   13.00  1503.629930
   34  8   3   5   17.00  1510.966896
   35  7   5   3   15.00  1524.619513
   36  9   2   8   19.00  1554.458454
   37 10   0  10   21.00  1603.588942
   38  8   4   4   17.00  1628.398582
   39  7   6   2   15.00  1749.853709
   40  9   3   7   19.00  1749.913425
   41  8   5   3   17.00  1807.005436
   42 10   1   9   21.00  1860.394540
   43 11   1  11   23.00  1909.456706
   44  9   4   6   19.00  1929.265146
   45  7   7   1   15.00  2006.858477
```

II.1 Niveaux vibrationnels de H_2O, modes normaux

A la différence d'une molécule diatomique, une molécule polyatomique comme H_2O possède plusieurs modes de vivration, (3 degrés de liberté pour H_2O : élongations symétriques et asymétriques des liaison O-H, déformation de l'angle formé par la molécule) chacun de ces modes est un mode normal qui peut être approché par un modèle d'oscillateur. Chaque mode normal possède un nombre quantique de vibration associé. Le mode total résultant correspond à la multiplication des trois oscillateurs. Les rotations et vibrations modifient les distances internucléaires et influent donc aussi sur la valeur du moment dipolaire.

III Transitions de CO

III.1 Liste des transitions

Transition	ν (GHz)	λ (mm)	E_u/k_B (K)	E_l/k_B (K)	A_{ul} (10^{-3} s^{-1})
1-0	115.3	2.60	5.535	0.000	7.20×10^{-8}
2-1	230.6	1.30	16.604	5.535	6.91×10^{-7}
3-2	345.9	8.68×10^{-1}	33.207	16.604	2.49×10^{-6}
4-3	461.2	6.51×10^{-1}	55.344	33.207	6.12×10^{-6}
5-4	576.5	5.21×10^{-1}	83.013	55.344	1.22×10^{-5}
6-5	691.8	4.34×10^{-1}	116.214	83.013	2.13×10^{-5}
7-6	807.0	3.72×10^{-1}	154.945	116.214	3.42×10^{-5}
8-7	922.2	3.26×10^{-1}	199.204	154.945	5.13×10^{-5}
9-8	1037.3	2.89×10^{-1}	248.991	199.204	7.33×10^{-5}
10-9	1152.5	2.61×10^{-1}	304.303	248.991	1.00×10^{-4}
11-10	1267.5	2.37×10^{-1}	365.138	304.303	1.33×10^{-4}
12-11	1382.6	2.17×10^{-1}	431.494	365.138	1.73×10^{-4}
13-12	1497.5	2.01×10^{-1}	503.368	431.494	2.20×10^{-4}
14-13	1612.5	1.86×10^{-1}	580.758	503.368	2.73×10^{-4}
15-14	1727.3	1.74×10^{-1}	663.659	580.758	3.35×10^{-4}
16-15	1842.1	1.63×10^{-1}	752.071	663.659	4.05×10^{-4}
17-16	1956.8	1.53×10^{-1}	845.988	752.071	4.82×10^{-4}
18-17	2071.5	1.45×10^{-1}	945.408	845.988	5.69×10^{-4}
19-18	2186.0	1.37×10^{-1}	1050.326	945.408	6.65×10^{-4}
20-19	2300.5	1.31×10^{-1}	1160.738	1050.326	7.69×10^{-4}
21-20	2414.9	1.24×10^{-1}	1276.641	1160.738	8.83×10^{-4}
22-21	2529.2	1.19×10^{-1}	1398.030	1276.641	1.00×10^{-3}
23-22	2643.4	1.14×10^{-1}	1524.900	1398.030	1.13×10^{-3}
24-23	2757.5	1.09×10^{-1}	1657.247	1524.900	1.28×10^{-3}
25-24	2871.5	1.05×10^{-1}	1795.065	1657.247	1.43×10^{-3}
26-25	2985.4	1.01×10^{-1}	1938.349	1795.065	1.59×10^{-3}
27-26	3099.2	9.69×10^{-2}	2087.093	1938.349	1.76×10^{-3}
28-27	3212.9	9.35×10^{-2}	2241.293	2087.093	1.94×10^{-3}
29-28	3326.4	9.03×10^{-2}	2400.941	2241.293	2.12×10^{-3}
30-29	3439.8	8.73×10^{-2}	2566.033	2400.941	2.32×10^{-3}

Suite de la table précédente

Transition	ν (GHz)	λ (mm)	E_u/k_B (K)	E_l/k_B (K)	A_{ul} (10^{-3} s^{-1})
31-30	3553.1	8.45×10^{-2}	2736.561	2566.033	2.52×10^{-3}
32-31	3666.2	8.19×10^{-2}	2912.518	2736.561	2.73×10^{-3}
33-32	3779.2	7.95×10^{-2}	3093.900	2912.518	2.95×10^{-3}
34-33	3892.0	7.72×10^{-2}	3280.697	3093.900	3.17×10^{-3}
35-34	4004.8	7.50×10^{-2}	3472.904	3280.697	3.40×10^{-3}
36-35	4117.3	7.29×10^{-2}	3670.513	3472.904	3.63×10^{-3}
37-36	4229.7	7.10×10^{-2}	3873.516	3670.513	3.87×10^{-3}
38-37	4341.9	6.92×10^{-2}	4081.906	3873.516	4.12×10^{-3}
39-38	4454.0	6.74×10^{-2}	4295.674	4081.906	4.36×10^{-3}

III.2 Niveaux vibrationnels de CO

III.2-1 Oscillateur Anharmonique

Dans les molécules, les états vibrationnels (quantifiés par v) correspondent aux déformations des liaisons internucléaires. Le cas de CO est très simple, les états vibrationnels correspondent à la vibration de l'unique liaison C-O (1 seul degré de liberté). Ces états vibrationnels peuvent être approchés par un modèle d'oscillateur anharmonique.

Un oscillateur harmonique est associé à un potentiel parabolique $V(r) = f \times (r - r_e)^2$, où $r_e = 0.112$ nm est la distance internucléaire d'équilibre. Les niveaux d'énergie sont tous espacés par la même différence d'énergie. Les états propres correpondent aux énergies quantifiées par v :

$$E(v) = \nu_{\rm v}\left({\rm v} + \frac{1}{2}\right)$$

où $\nu_{\rm v}$ est la constante de vibration de la liaison $\nu_{\rm v} = \frac{h^2 c}{2\pi k_B}\sqrt{\frac{k}{\mu}} = 3\,122$ K. Pour les faibles nombres v, la position la plus probable est située autour de la position d'équilibre. En tenant compte des corrections anharmoniques pour les états de vibration, le potentiel devient $V(r) = f \times (r - r_e)^2 + g \times (r - r_e)^3$ avec $g \ll f$. Les niveaux d'énergie se développent sous la forme :

$$E(v) = h\nu_{\rm v}\left({\rm v} + \frac{1}{2}\right) + h\nu_{\rm v}x_e\left({\rm v} + \frac{1}{2}\right)^2 + h\nu_{\rm v}y_e\left({\rm v} + \frac{1}{2}\right)^3 + ...$$

où x_e, y_e sont des constantes de corrections anaharmoniques, sans dimension. Pour CO $\nu x_e = 1944$ K, et l'énergie du point zéro ${\rm v} = 0$ associée devient $E = hc\left(\frac{\nu}{2} + \frac{\nu x_e}{4} + \frac{\nu y_e}{9}\right)$. Des transitions à $\delta{\rm v} = \pm 2, 3...$ sont possibles mais se produisent avec des probabilités de plus en plus faibles.

III.2-2 Rotation-vibration

En supposant que la vibration et la rotation de la molécule sont indépendantes, on peut simplement superposer les niveaux rotationnels sur les niveaux vibrationels. Mais en pratique, rotation et vibration ne sont pas indépendantes. En effet, la rotation de la molécule, modifie la distance internucléaire, ce qui fait varier la fréquence de vibration.

Réciproquement, la vibration de la liaison modifie le moment d'inertie de la molécule, et donc ses constantes de rotation. $B_{\rm rot}$ est remplacée par B_v qui dépend de l'état de vibration :

$$B_v = B_{\rm rot} + a_e(v + \frac{1}{2})$$

Pour CO, $a_e = 2 \times 10^{-2}$ K, de même pour la constante de distortion cenrifuge. Les constantes rotationnelles dépendent donc de l'état d'excitation vibrationnel de la molécule.

III.2-3 Fonction de partition vibrationnelle

Pour une molécule diatomique comme CO la fonction de partition vibrationnelle est définie en fonction de l'énergie du niveau vibrationnel par :

$$f_{vib}(T) = \sum_{v=0}^{\infty} e^{-\left(v+\frac{1}{2}\right)\frac{h\nu}{k_B T}} \tag{B.1}$$

Pour CO le degré de dégénérescence des niveaux vibrationnels est 1. La température caractéristique de vibration de CO est $T_{vib} = \frac{h\nu}{k_B} = 3122.5$ K.

La série géométrique B.1 exprimant $f_{vib}(T)$ peut se transformer en :

$$f_{vib}(T) = e^{-\frac{h\nu}{2k_B T}} \left(\frac{1}{1 - e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}} \right)$$

Cette expression ne tient pas compte de l'énergie du point zéro $v = 0$ qui n'est pas nulle, on décalle donc l'échelle des énergies pour se placer à $E(v = 0) = 0$, ce qui donne pour la fonction de partition :

$$f_{vib}(T) = \frac{1}{1 - e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}} \tag{B.2}$$

III.2-4 Fonction de partition totale

L'énergie totale se répartit selon les états excités vibrationnels et rotationnels. La molécule peut accroître ces énergies de façon presque indépendante, la fonction de partition totale pour CO s'écrivant dans ce cas comme :

$$f(T) = f_{vib}(T) \times f_{rot}(T) \tag{B.3}$$

IV Densité critique rotationnelle avec para-H_2 et ortho-H_2 pour CO

Pour les transitions rotationnelles pures, les densités données en annexes de Gusdorf (2009) pour T entre 10 et 300 K varient de 10^2 à 10^6 cm^3 pour des partenaires de collisions comme H et H_2.

TABLE B.2 – DENSITÉS CRITIQUES EN cm^3 POUR LES NIVEAUX ROTATIONNELS DE $^{12}C^{16}O$ POUR LES PREMIERS NIVEAUX DE CO $J \leq 20$.

	ortho-H_2			para-H_2		
J_u	n_{crit}(300 K)	n_{crit}(1000 K)	n_{crit}(3000 K)	n_{crit}(300 K)	n_{crit}(1000 K)	n_{crit}(3000 K)
1	2×10^3	1.9×10^3	1.7×10^3	2.1×10^3	2.1×10^3	1.9×10^3
2	6×10^3	5.1×10^3	4.4×10^3	6.5×10^3	5.7×10^3	5×10^3
3	1.5×10^4	1.2×10^4	1×10^4	1.6×10^4	1.3×10^4	1.1×10^4
4	2.9×10^4	2.3×10^4	2.2×10^4	3.2×10^4	2.6×10^4	2.8×10^4
5	5.2×10^4	4.1×10^4	4.1×10^4	5.7×10^4	4.5×10^4	4.8×10^4
6	8.2×10^4	6.4×10^4	6.1×10^4	9.2×10^4	7.1×10^4	7.4×10^4
7	1.2×10^5	9.7×10^4	1×10^5	1.4×10^5	1×10^5	9.5×10^4
8	1.8×10^5	1.4×10^5	1.3×10^5	1.9×10^5	1.4×10^5	1.3×10^5
9	2.4×10^5	1.9×10^5	1.8×10^5	2.7×10^5	2×10^5	1.7×10^5
10	3.3×10^5	2.5×10^5	2.2×10^5	3.5×10^5	2.6×10^5	2.2×10^5
11	4.3×10^5	3.1×10^5	2.6×10^5	4.6×10^5	3.3×10^5	2.8×10^5
12	5.5×10^5	4×10^5	3.3×10^5	5.8×10^5	4.2×10^5	3.5×10^5
13	6.6×10^5	5×10^5	4.6×10^5	6.8×10^5	5.1×10^5	4.3×10^5
14	8×10^5	6×10^5	5.5×10^5	8.4×10^5	6.3×10^5	5.2×10^5
15	1×10^6	7.4×10^5	6.5×10^5	1×10^6	7.6×10^5	6.2×10^5
20	2.1×10^6	1.5×10^6	1.2×10^6	2.1×10^6	1.6×10^6	1.3×10^6

V DENSITÉ CRITIQUE ROTATIONNELLES AVEC H POUR CO

la Table B.3 liste les densités critiques de H pour CO calculées à partir des coefficients de désexcitation collisionnelle de Balakrishnan et al. (2002) calculés jusque $J = 17$. Dans la pratique on utilise la masse réduite entre H et H_2 : $C_{ul}(H) = 0.67C_{ul}(H_2)$ (voir Table B.3).

TABLE B.3 – DENSITÉS CRITIQUES EN cm^3 POUR LES NIVEAUX ROTATIONNELS DE $^{12}C^{16}O$

J_u	n_{crit}(300 K)	n_{crit}(1000 K)	n_{crit}(3000 K)
1	2.9×10^2	3.1×10^2	4.1×10^2
2	1.7×10^3	1.5×10^3	1.7×10^3
3	4.8×10^3	4.2×10^3	4.5×10^3
4	1.0×10^4	9.0×10^3	9.5×10^3
5	1.9×10^4	1.7×10^4	1.7×10^4
6	3.2×10^4	2.9×10^4	3.8×10^4
7	5.1×10^4	4.3×10^4	4.4×10^4
8	7.6×10^4	6.4×10^4	6.5×10^4
9	1.1×10^5	9.6×10^4	1.1×10^5
10	1.5×10^5	1.2×10^5	1.2×10^5
11	2.0×10^5	1.6×10^5	1.6×10^5
12	2.7×10^5	2.1×10^5	2.1×10^5
13	3.5×10^5	2.7×10^5	2.7×10^5
14	4.5×10^5	3.4×10^5	3.3×10^5
15	5.9×10^5	4.3×10^5	4.2×10^5

VI Densité critique vibrationnelle de H pour CO

Pour estimer les densités critiques pour les niveaux vibrationnels de CO, on fait la même approximation que Najita et al. (1996), c'est à dire que l'on suppose que les niveaux rotationnels purs sont à l'ETL, hypothèse ici raisonnable compte tenu des densités critiques tabulées en annexe. Alors pour un niveau v on peut écrire :

$$\frac{n_{\mathrm{v}J}}{n_v} = \frac{2J+1}{Z_{rot}(T)} e^{\frac{-J(J+1)B_{\mathrm{v}}}{T}}$$

où $n_{\mathrm{v}} = \sum_J n_{\mathrm{v}J}$ et $Z_{rot}(T) = \sum_J (2J+1)e^{-E_J/T} \approx T/B_{\mathrm{v}}$ est la fonction de partition rotationnelle. Les densités critiques pour les désexcitations collisionnelles entre deux niveaux vibrationnels, sont déterminées à partir de la somme les coefficients $A(\mathrm{v}'J'\mathrm{v}J)$ sur tous les J', pour les transitions des branches R et P. Les coefficients $A(\mathrm{v}'J'\mathrm{v}J)$ sont pondérés par les populations à l'ETL des niveaux J'. On définit un coefficient effectif de désexcitation radiative $A^\star_{\mathrm{v}'\mathrm{v}}$:

$$A^\star_{\mathrm{v}'\mathrm{v}} = \sum_{J'} \left(\frac{2J'+1}{T/B_{\mathrm{v}}} \exp\left(\frac{-J'(J'+1)B_{\mathrm{v}}}{T} \right) \right) \left(A(v'J', v'J'-1) + A(v'J', v'J'+1) \right) \tag{B.4}$$

Le calcul est fait à partir de la base de données pour CO de Chandra et al. (1996).

On déduit à partir des $A^\star_{v'v}$ les densités critiques pour H pour la transition $(\mathrm{v}'=1, \mathrm{v}=0)$ en utilisant comme taux de désexcitation celui de Glassgold et al. (2004) : $K(1-0,H) = 7.88\times10^{-13}T^{0.5}e^{1208/T}$ en $\mathrm{cm}^3.\mathrm{s}^{-1}$. Dans ce cas :

$$n_{crit}(H)_{\mathrm{v}'\mathrm{v}} = \frac{A^\star_{\mathrm{v}'\mathrm{v}}}{K(\mathrm{v}'\mathrm{v},H)} \tag{B.5}$$

Les densités critiques correspondant à la transition vibrationnelle 1-0 sont récapitulées dans la table B.4, on reporte la valeur de $K(1-0,H)$ de Glassgold et al. (2004). Pour le calcul de $n_{crit}(H)_{2-0}$ on utilise le rapport entre $k(2-0)/k(1-0)$ donné par Glassgold et al. (2004), qui est compris entre 0.2 et 0.4 (on prend la moyenne géométrique 0.28).

On peut comparer les résultats ici présentés avec ceux de Najita et al. (1996) qui utilise comme taux de collision :

$$k(1-0,H) = 7.5710^{-15} \quad cm^3 s^{-1} \frac{T}{1-e^{T_{vib}/T}} \tag{B.6}$$

ce qui donne une valeur de la densité critique pour le partenaire de collisions H : $n_{crit}(\mathrm{H}) \approx 10^{12}-10^{13}$ cm^{-3}, valable sur un intervalle de température variant entre 2000 K et 5000 K, et calculée avec une valeur fixée de $A^\star = A^\star(2000\,\mathrm{K})$.

Si on se place à $T = 2000$ K, alors $k(1-0,H)(2000\,\mathrm{K}) = 1.916\,10^{-11}$ cm^3 s^{-1}, ce qui correspond à $A^\star(2000\,\mathrm{K}) \approx 192$ s^{-1}, et donne bien en retour $n_{crit}(H)(2000\,\mathrm{K}) = 10^{13}$ et $n_{crit}(H)(5000\,\mathrm{K}) \approx 10^{12}$. La différence de valeur entre le $A^\star(2000\,\mathrm{K})$ calculée et approximée par Najita et al. (1996) et ceux déterminés ici explique les différences observées entre les densités critiques.

Des résultats obtenus ici on peut déduire que dans les conditions du vent de disque, et même pour des taux d'accrétion importants, les populations vibrationnelles seront sous-critiques et donc hors ETL. D'après les densités critiques obtenues, on ne s'attend pas à ce que le niveau $\mathrm{v}=1$ soit significativement peuplé pour $r_0 > R_{\mathrm{sub}}$ dans notre modèle.

TABLE B.4 – DENSITÉS CRITIQUES POUR LES NIVEAUX VIBRATIONNELS DE $^{12}C^{16}O$

T (K)	$A^{\star}_{1-0}$	$A^{\star}_{2-0}$	$k(1-0,H)$	$n_{crit}(H)_{1-0}$	$n_{crit}(H)_{2-0}$
200	1.8×10^{1}	3.5×10^{1}	2.6×10^{-14}	6.8×10^{14}	4.8×10^{15}
300	1.8×10^{1}	3.4×10^{1}	2.4×10^{-13}	7.2×10^{13}	5.0×10^{14}
500	1.7×10^{1}	3.3×10^{1}	1.6×10^{-12}	1.1×10^{13}	7.6×10^{13}
1000	1.6×10^{1}	3.2×10^{1}	7.4×10^{-12}	2.2×10^{12}	1.5×10^{13}
2000	1.5×10^{1}	3.0×10^{1}	1.9×10^{-11}	7.6×10^{11}	5.6×10^{12}
3000	1.5×10^{1}	2.9×10^{1}	2.8×10^{-11}	5.1×10^{11}	3.6×10^{12}
4000	1.4×10^{1}	2.8×10^{1}	3.7×10^{-11}	3.8×10^{11}	2.7×10^{12}
5000	1.4×10^{1}	2.7×10^{1}	4.4×10^{-11}	3.1×10^{11}	2.2×10^{12}

Estimation des densités critiques en (cm^{-3}) pour les transitions vibrationnelles 1-0 et 2-0 de CO en supposant que les niveaux rotationnels sont tous à l'ETL. Le partenaire de collision est H. Les nombres entre parenthèses sont des puissances de 10. Les coefficients $A^{\star}$ sont exprimés en s^{-1}, les densités critiques sont exprimées en cm^{-3} et les taux de collision k sont exprimés en $\mathrm{cm^3\ s^{-1}}$.

VII DENSITÉ CRITIQUE VIBRATIONNELLE POUR CO AVEC H_2

Le rapport $K(1-0,H)/K(1-0,H_2)$ est compris entre 100 et 20 (Najita et al. 1996; Glassgold et al. 2004), ce qui augmente les valeurs de la table B.4 dans le cas de H_2 d'un à deux ordres de grandeur. Ce rapport entre les taux indique aussi que H peut rester le partenaire dominant de désexcitation même quand le gaz devient de plus en plus moléculaire. Il faudrait un rapport $n(\mathrm{H_2})/n(\mathrm{H})$ de 20 à 100 pour compenser ce phénomène.

VIII DENSITÉ CRITIQUE AVEC PARA-H_2 ET ORTHO-H_2 POUR H_2O

TABLE B.5 – DENSITÉS CRITIQUES POUR LES NIVEAUX ROTATIONNELS DE ORTHO-$H_2^{16}O$

	ortho-H_2		para-H_2	
J_u	n_{crit}(100 K)	n_{crit}(1000 K)	n_{crit}(100 K)	n_{crit}(1000 K)
2	2.3×10^{8}	2.3×10^{8}	9.6×10^{8}	2.5×10^{8}
3	1.9×10^{8}	1.6×10^{8}	7.6×10^{8}	1.7×10^{8}
4	5.3×10^{8}	2.9×10^{8}	1.0×10^{9}	3.5×10^{8}
5	5.4×10^{8}	2.9×10^{8}	8.1×10^{8}	3.2×10^{8}
6	1.1×10^{9}	4.5×10^{8}	8.0×10^{8}	4.5×10^{8}
7	1.2×10^{9}	4.9×10^{8}	5.1×10^{8}	4.6×10^{8}
8	1.5×10^{9}	5.6×10^{8}	5.7×10^{8}	5.2×10^{8}
9	1.3×10^{9}	5.5×10^{8}	5.0×10^{8}	4.9×10^{8}
10	1.1×10^{10}	3.0×10^{9}	2.5×10^{9}	2.6×10^{9}

Densités critiques $n_{\mathrm{crit}}(o\mathrm{H_2})$ et $n_{\mathrm{crit}}(p\mathrm{H_2})$ pour les premiers niveaux de CO.

TABLE B.6 – DENSITÉS CRITIQUES POUR LES NIVEAUX ROTATIONNELS DE PARA-$H_2^{16}O$

	ortho-H_2		para-H_2	
J_u	$n_{\rm crit}$(100 K)	$n_{\rm crit}$(1000 K)	$n_{\rm crit}$(100 K)	$n_{\rm crit}$(1000 K)
2	8.6×10^{7}	9.4×10^{7}	3.9×10^{8}	1.0×10^{8}
3	3.3×10^{8}	2.4×10^{8}	1.0×10^{9}	2.6×10^{8}
4	3.5×10^{8}	2.3×10^{8}	8.6×10^{0}	2.5×10^{8}
5	7.9×10^{8}	3.6×10^{8}	9.7×10^{8}	5.2×10^{8}
6	8.1×10^{9}	3.8×10^{8}	6.8×10^{8}	6.4×10^{8}
7	1.6×10^{9}	5.5×10^{8}	5.7×10^{8}	1.2×10^{9}
8	9.7×10^{8}	4.3×10^{8}	4.0×10^{8}	1.4×10^{9}
9	2.3×10^{9}	7.9×10^{8}	6.9×10^{8}	2.2×10^{9}
10	1.4×10^{10}	4.1×10^{9}	3.2×10^{9}	1.1×10^{10}

Densités critiques $n_{\rm crit}(o\mathrm{H_2})$ et $n_{\rm crit}(p\mathrm{H_2})$ pour les premiers niveaux de CO.

Les densités critique associées aux états vibrationnels de H_2O sont très supérieures aux densités que l'on rencontre dans le vent de disque.

Annexe

Codes de calcul

Sommaire

I Code MAMOJ (MAgnetohydrodynamic MOlecular Jet) 282
II Détails des modèles effectués et conditions initiales 283
III Code JetMap 286
IV Ajustement de profils 287

Cette annexe donne quelques détails relatifs aux calculs numériques.

I Code MAMOJ (MAgnetohydrodynamic MOlecular Jet)

Le code MAMOJ (pour MAgnetohydrodynamic MOlecular Jet) calcule l'état thermochimique du gaz et les émissivités dans les raies moléculaires de long d'une seule ligne d'écoulement. Il calcule l'état initial (conditions initiales chimiques) au point magnéto-sonique de la ligne d'écoulement. Il implémente donc la physique détaillée dans les chapitres 2, 3, 4, 5.

La méthode adoptée pour réaliser les séries de lignes d'écoulement présentées ici est conçue pour retracer l'évolution de la matière dans le disque et pour tenir compte de la dépendance des lignes d'écoulement dans le contenu en H_2 et de CO des lignes d'écoulement internes :

Etape 0 : Établissement d'une discrétisation en r_0. Calcul du profil en température et du rayonnement local des poussières grâces à DUSTY avec itération pour déterminer $R_{\rm sub}$ et τ_0 de manière cohérente.

Etape 1 : À partir des conditions initiales élémentaires de Flower & Pineau des Forêts (2003), l'état chimique et thermique initial est calculé au point magnéto-sonique à un rayon $r_0(i)$ de 50 ou 100 UA en faisant évoluer la matière durant $\sim 10^5$ ans au même point. ceci vise à nous rapporcher des conditions dans l'enveloppe de la proto-étoile. L'écrantage du rayonnement stellaire est très fort.

Etape 2 : À partir de l'état initial calculé précédemment un nouvel état initial, au point magnéto-sonique lent toujours, est calculé à $r_0(i-1)$ (on commence ici par la dernière ligne d'écoulement à 25 UA). De manière récursive, l'état initial $i-1$ est calculé à partir des résultats de l'état i, jusqu'à ce que l'on arrive à $r_0(1) = R_{\rm sub}$. Le temps imparti à cet état initial est calculé en supposant que l'accrétion est sonique avec une vitesse radiale égale à 10 fois la vitesse képlérienne à r_0. On s'assure que ce temps est suffisant pour que l'équilibre chimique puisse s'installer.

Etape 3 : En progressant maintenant par r_0 croissant à partir du rayon de sublimation l'état de la matière est calculé le long de chaque ligne d'écoulement. Les conditions initiales sont celles décrites à l'étape 2. L'écrantage de H_2 et CO nécessite de calculer les lignes d'écoulement séquentiellement les unes après les autres. Pour diminuer le temps de calcul les transitions et populations rotationnelles de CO et H_2O ne sont pas calculés à cette étape.

Etape 4 : Une fois que toutes les lignes d'écoulements ont été calculée, le code calcule nouvelle fois mais de manière parallèle sur toutes les lignes d'écoulement pour calculer le transfert radiatif relatif à CO et H_2O.

Les étapes 3 et 4 sont réalisées telles quelles pour des raison de réduction du temps de calcul. Il est possible de réaliser l'étape, 4 en même temps que la 3. Mais le temps de calcul total pour une série de ligne d'écoulement peut diminuer de 30 à 40% en séparant ses deux étapes et en parallélisant le calcul des populations et des émissivités en r_0. L'établissement d'une discrétisation acceptable en r_0 peut nécessiter quelques aller-retours entre les étapes 3 et 2. Des scripts permettant d'automatiser tout le processus ont été écrit.

Données d'entrée

Les données d'entrée du code MAMOJ sont :

- La solution MHD de vent de disque.
- Les sources contenant :
  - les énergies et degénérescence des niveaux de H_2, CO et H_2O,

  - les coefficients d'émission spontanée A_{ul}
  - les taux de désexcitation collisionnelle pour chaque partenaire de collision.
- Il est aussi possible de donner la répartition des populations de CO et H_2O au point de départ des lignes d'écoulement. On les suppose initialement à l'ETL par défaut.
- Les sorties de DUSTY contenant la température des poussières en fonction de R et l'émissivité infrarouge des poussières en fonction de λ et R.
- Le réseau des réactions chimiques.
- Les abondances initiales des espèces à la base du jet, la vitesse de dérive ions-neutres initiale et la température du gaz initiale.
- Deux fichiers de paramétrisation :
  - un premier (*wind.in*) contenant les paramètre relatif à la physique du vent de disque,
  - un second relatif à la physique et chimie du gaz moléculaire.
- Le répertoire de sortie.

Une compression des données de sortie au fomat binaire est envisagée pour réduire les temps d'accès disque et le volume des données produites sans perte d'information.

II Détails des modèles effectués et conditions initiales

Les tables suivantes présentent les conditions initiales en température, densité, vitesse de dérive ions-neutres et abondances de H_2O, CO et SiO à la base des lignes d'écoulement pour les différents modèles listées en Table 3.4 et obtenus en appliquant la méthode de calcul en 5 étapes décrites précédemment.

Le temps de calcul total pour réaliser un modèle de classe 0 est de $\sim$ 80 heures, le temps de calcul des prédictions synthétiques pour 6 raies de H_2O est $\sim$ 1 heure. La classe 2 est plus rapide, le temps de calcul MAMOJ est de $\sim$ 10 heures et le temps de calcul de 6 raies de H_2O est de $\sim$ 5 minutes.

TABLE C.1 – *Conditions initiales pour les modèles de classe 0, voir Table 3.4*

Classe 0, $\tau_0 = 52$, $\dot{M}_{\rm acc} = 2\times10^{-5}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
	r_0 (AU)	V_{in} (cm s^{-1})	T_n (K)	$T_{\rm dust}$ (K)	$n_{\rm H}$ (cm^{-3})	$x({\rm H_2O})$	$x({\rm CO})$	$x({\rm SiO})$
01	0.63	68.57	1098.1	1173.0	5.55×10^{11}	1.18×10^{-4}	9.02×10^{-5}	1.67×10^{-6}
02	0.7	75.58	898.01	930.83	4.74×10^{11}	1.18×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.68×10^{-6}
03	0.8	79.91	769.25	786.43	3.88×10^{11}	1.18×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.70×10^{-6}
04	1	81.76	649.29	658.33	2.77×10^{11}	1.18×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.71×10^{-6}
05	1.2	83.58	566.09	571.96	2.11×10^{11}	1.18×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.72×10^{-6}
06	1.6	81.45	469.29	473.26	1.37×10^{11}	1.18×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.72×10^{-6}
07	2.8	75.93	335.50	338.16	5.92×10^{10}	1.18×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.73×10^{-6}
08	3.2	77.55	310.74	313.18	4.85×10^{10}	1.18×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.74×10^{-6}
09	6.4	69.74	218.59	220.34	1.71×10^{10}	1.18×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.74×10^{-6}
10	9.6	70.01	180.38	182.55	9.33×10^{9}	1.15×10^{-4}	9.01×10^{-5}	1.77×10^{-6}
11	12.8	73.07	157.60	160.11	6.06×10^{9}	1.15×10^{-4}	9.00×10^{-5}	1.78×10^{-6}
12	16	71.41	142.67	145.15	4.33×10^{9}	1.15×10^{-4}	9.00×10^{-5}	1.78×10^{-6}
13	19.2	69.70	131.72	134.18	3.30×10^{9}	1.15×10^{-4}	9.00×10^{-5}	1.78×10^{-6}
14	22.4	68.21	123.11	125.56	2.61×10^{9}	1.15×10^{-4}	8.99×10^{-5}	1.78×10^{-6}
15	25.0	67.23	117.33	119.75	2.22×10^{9}	1.16×10^{-4}	8.97×10^{-5}	1.78×10^{-6}

Classe 0, $\tau_0 = 13$, $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
	r_0 (AU)	V_{in} (cm s^{-1})	T_n (K)	$T_{\rm dust}$ (K)	$n_{\rm H}$ (cm^{-3})	$x({\rm H_2O})$	$x({\rm CO})$	$x({\rm SiO})$
01	0.31	426.73	1275.8	1469.7	4.02×10^{11}	1.50×10^{-4}	1.01×10^{-4}	3.95×10^{-7}
02	0.4	408.99	980.04	1054.2	2.74×10^{11}	1.28×10^{-4}	9.41×10^{-5}	5.55×10^{-7}
03	0.6	408.88	704.23	737.65	1.49×10^{11}	1.26×10^{-4}	9.37×10^{-5}	7.36×10^{-7}
04	0.8	387.34	574.95	600.14	9.70×10^{10}	1.24×10^{-4}	9.32×10^{-5}	9.00×10^{-7}
05	1.0	377.57	491.67	512.69	6.94×10^{10}	1.23×10^{-4}	9.28×10^{-5}	1.04×10^{-6}
06	1.2	360.80	438.36	457.25	5.28×10^{10}	1.22×10^{-4}	9.25×10^{-5}	1.19×10^{-6}
07	1.6	347.44	366.68	382.28	3.43×10^{10}	1.21×10^{-4}	9.21×10^{-5}	1.42×10^{-6}
08	2.8	326.33	270.03	281.34	1.48×10^{10}	1.20×10^{-4}	9.18×10^{-5}	1.57×10^{-6}
09	3.2	317.16	251.94	262.43	1.21×10^{10}	1.20×10^{-4}	9.16×10^{-5}	1.67×10^{-6}
10	6.4	315.96	180.55	189.42	4.29×10^{9}	1.11×10^{-4}	9.15×10^{-5}	1.77×10^{-6}
11	9.6	318.99	150.09	158.50	2.33×10^{9}	1.12×10^{-4}	9.14×10^{-5}	1.77×10^{-6}
12	12.8	310.91	132.03	140.07	1.52×10^{9}	1.12×10^{-4}	9.12×10^{-5}	1.77×10^{-6}
13	16	301.71	119.71	127.44	1.08×10^{9}	1.13×10^{-4}	9.11×10^{-5}	1.78×10^{-6}
14	19.2	292.91	110.75	118.25	8.25×10^{8}	1.13×10^{-4}	9.09×10^{-5}	1.78×10^{-6}
15	22.4	285.11	103.71	111.00	6.55×10^{8}	1.14×10^{-4}	9.08×10^{-5}	1.78×10^{-6}
16	25	278.41	99.01	106.11	5.55×10^{8}	1.15×10^{-4}	9.06×10^{-5}	1.79×10^{-6}

TABLE C.2 – *Conditions initiales pour les modèles de classe I,voir Table 3.4*

Classe I, $\tau_0 = 6$, $\dot{M}_{\rm acc} = 5 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
	r_0 (AU)	V_{in} (cm s^{-1})	T_n (K)	$T_{\rm dust}$ (K)	$n_{\rm H}$ (cm^{-3})	$x(H_2O)$	$x(CO)$	$x(SiO)$
01	0.64	3181.6	999.96	1454.9	6.06×10^{10}	1.65×10^{-4}	1.03×10^{-4}	1.47×10^{-6}
02	0.7	3310.4	921.05	1335.9	5.30×10^{10}	1.53×10^{-4}	9.50×10^{-5}	1.88×10^{-7}
03	0.8	3367.6	813.16	1178.4	4.34×10^{10}	1.50×10^{-4}	9.48×10^{-5}	2.12×10^{-7}
04	1	3399.3	672.09	972.20	3.11×10^{10}	1.46×10^{-4}	9.49×10^{-5}	2.59×10^{-7}
05	1.2	3411.2	580.28	833.25	2.36×10^{10}	1.43×10^{-4}	9.38×10^{-5}	3.27×10^{-7}
06	1.6	3295.8	470.37	666.70	1.53×10^{10}	1.41×10^{-4}	9.31×10^{-5}	4.45×10^{-7}
07	2.8	3033.6	325.65	446.49	6.63×10^{9}	1.39×10^{-4}	9.23×10^{-5}	8.12×10^{-7}
08	3.2	2819.8	299.74	407.87	5.42×10^{9}	1.38×10^{-4}	9.17×10^{-5}	1.19×10^{-6}
09	6.4	3006.6	206.02	273.29	1.92×10^{9}	9.45×10^{-5}	8.83×10^{-5}	1.73×10^{-6}
10	9.6	3005.7	166.76	223.24	1.04×10^{9}	9.59×10^{-5}	7.26×10^{-5}	1.32×10^{-6}
11	12.8	2927.6	144.18	195.16	6.78×10^{8}	9.76×10^{-5}	6.77×10^{-5}	1.31×10^{-6}
12	16	2859.1	128.76	176.21	4.85×10^{8}	9.91×10^{-5}	6.38×10^{-5}	1.33×10^{-6}
13	19.2	2796.4	117.55	162.80	3.69×10^{8}	1.01×10^{-4}	6.01×10^{-5}	1.35×10^{-6}
14	22.4	2739.6	108.69	152.27	2.93×10^{8}	1.02×10^{-4}	5.61×10^{-5}	1.40×10^{-6}
15	25	2690.2	102.69	145.18	2.48×10^{8}	1.03×10^{-4}	5.22×10^{-5}	1.46×10^{-6}

Classe I, $\tau_0 = 1.2$, $\dot{M}_{\rm acc} = 1 \times 10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
	r_0 (AU)	V_{in} (cm s^{-1})	T_n (K)	$T_{\rm dust}$ (K)	$n_{\rm H}$ (cm^{-3})	$x(H_2O)$	$x(CO)$	$x(SiO)$
01	0.27	1464.4	872.61	1468.5	4.43×10^{10}	1.59×10^{-4}	1.05×10^{-4}	1.71×10^{-6}
02	0.4	11 068	576.34	1224.4	2.45×10^{10}	1.67×10^{-4}	9.72×10^{-5}	2.00×10^{-7}
03	0.6	12 104	465.68	1006.8	1.34×10^{10}	1.58×10^{-4}	1.04×10^{-4}	1.68×10^{-7}
04	0.8	11 084	403.77	870.28	8.68×10^{9}	1.46×10^{-4}	1.06×10^{-4}	1.45×10^{-7}
05	1	10 466	361.95	775.02	6.21×10^{9}	1.37×10^{-4}	1.06×10^{-4}	1.45×10^{-7}
06	1.2	9966.6	330.59	701.68	4.72×10^{9}	1.31×10^{-4}	1.06×10^{-4}	1.77×10^{-7}
07	1.6	8330.7	286.09	595.68	3.07×10^{9}	1.21×10^{-4}	1.06×10^{-4}	3.98×10^{-7}
08	2.8	4847.2	239.56	430.11	1.33×10^{9}	4.31×10^{-5}	1.06×10^{-4}	1.54×10^{-6}
09	3.2	4631.3	229.70	399.89	1.08×10^{9}	3.40×10^{-5}	1.06×10^{-4}	1.52×10^{-6}
10	6.4	4029.9	161.91	277.41	3.84×10^{8}	2.71×10^{-5}	1.06×10^{-4}	1.45×10^{-6}
11	9.6	3854.3	130.60	228.80	2.09×10^{8}	2.86×10^{-5}	1.05×10^{-4}	1.34×10^{-6}
12	12.8	3833.0	112.05	200.95	1.36×10^{8}	3.36×10^{-5}	1.04×10^{-4}	1.20×10^{-6}
13	16	3949.2	99.692	182.33	9.70×10^{7}	4.21×10^{-5}	1.03×10^{-4}	1.04×10^{-6}
14	19.2	4355.0	90.716	168.39	7.38×10^{7}	5.37×10^{-5}	1.01×10^{-4}	9.00×10^{-7}
15	22.4	5090.0	83.467	157.57	5.86×10^{7}	6.68×10^{-5}	9.93×10^{-5}	9.61×10^{-7}
16	25	5659.8	78.024	150.49	4.97×10^{7}	8.04×10^{-5}	9.72×10^{-5}	1.43×10^{-6}

TABLE C.3 – *Conditions initiales pour les modèles de classe I,voir Table 3.4*

Classe II, $\tau_0 = 0.12$, $\dot{M}_{\rm acc} = 1 \times 10^{-7}\,{\rm M}_\odot\,{\rm yr}^{-1}$								
	r_0 (AU)	V_{in} (cm s^{-1})	T_n (K)	$T_{\rm dust}$ (K)	$n_{\rm H}$ (cm^{-3})	$x(H_2O)$	$x(CO)$	$x(SiO)$
01	0.15	1669.1	282.77	1413.4	1.0692×10^{10}	7.319×10^{-9}	1.635×10^{-5}	5.361×10^{-10}
02	0.2	27 907	546.77	1266.0	6.9432×10^{9}	9.120×10^{-5}	1.076×10^{-4}	1.507×10^{-6}
03	0.4	13 792	396.26	954.24	2.4545×10^{9}	9.493×10^{-5}	1.110×10^{-4}	1.340×10^{-6}
04	0.6	38 738	361.89	794.30	1.3362×10^{9}	5.590×10^{-5}	1.073×10^{-4}	1.530×10^{-6}
05	0.8	34 440	343.53	692.90	8.6784×10^{8}	3.559×10^{-5}	1.057×10^{-4}	1.591×10^{-6}
06	1	31 215	330.37	620.49	6.2108×10^{8}	2.466×10^{-5}	1.053×10^{-4}	1.619×10^{-6}
07	1.2	28 786	319.55	562.72	4.7244×10^{8}	1.809×10^{-5}	1.051×10^{-4}	1.636×10^{-6}
08	1.6	25 472	301.58	482.31	3.0684×10^{8}	1.103×10^{-5}	1.050×10^{-4}	1.656×10^{-6}
09	2.8	20 751	256.32	359.94	1.3254×10^{8}	4.102×10^{-6}	1.050×10^{-4}	1.682×10^{-6}
10	3.2	20 007	241.52	335.88	1.0850×10^{8}	3.274×10^{-6}	1.050×10^{-4}	1.687×10^{-6}
11	6.4	18 569	151.58	241.95	3.8360×10^{7}	2.063×10^{-6}	1.053×10^{-4}	1.706×10^{-6}
12	9.6	18 229	111.87	202.51	2.0880×10^{7}	2.011×10^{-6}	1.054×10^{-4}	1.710×10^{-6}
13	12.8	17 874	91.551	179.16	1.3562×10^{7}	1.962×10^{-6}	1.055×10^{-4}	1.710×10^{-6}
14	16	17 516	79.275	163.09	9.7042×10^{6}	1.917×10^{-6}	1.055×10^{-4}	1.709×10^{-6}
15	19.2	17 154	71.032	151.30	7.3822×10^{6}	1.880×10^{-6}	1.055×10^{-4}	1.707×10^{-6}
16	22.4	16 762	65.158	141.99	5.8597×10^{6}	1.823×10^{-6}	1.055×10^{-4}	1.679×10^{-6}
17	25	16 064	76.827	135.72	4.9684×10^{6}	1.030×10^{-4}	8.985×10^{-4}	1.800×10^{-6}

III CODE JETMAP

Ce code adapté de (Cabrit & Bertout 1986) et développé durant ce travail de thèse permet de calculer une grande diversité de prédictions synthétiques pour H_2, CO H_2O (para et ortho) sous forme de cartes de brillance, de diagrammes PV longitudinaux et transverses, de profils, des diagrammes d'excitation, des cartes de densité de colonne, de flux total intégré, ainsi que des coupes dans le jet de n'importe quelle grandeur fournie par MAMOJ (abondance, température, ionisation, vitesse...).

Paramètres d'initialisation

Le code utilise les fichiers produits par MAMOJ contenant les émissivités (en erg s^{-1} cm^{-3} sr^{-1}), les abondances des espèces, le champ de vitesse tenant compte de la dérive ions-neutre. Le programme se base sur les mêmes fichiers d'entré que MAMOJ pour obtenir les données relatives aux raies et aux niveaux rotationnels sélectionnés.

Les paramètres sont :
- Type d'intégration : tenir compte de la probabilité d'échappement $\beta(\vec{u})$ ou de $<\beta>$, ou faire une carte 2D
- Fichiers sources de MAMOJ
- Dossier où placer les résultats
- Dossier contenant les fichiers calculés par MAMOJ, chaque ligne d'écoulement est numérotée

- L'angle d'inclinaison i
- La valeur initiale de $x_{min} = (z/r)_{min}$ et la valeur maximale $x_{\rm max} = (z/r)_{\rm max}$
- La taille d'un canal en vitesse δv
- Les bornes en $z_{\rm sky}$ $z_{\rm min}$ et $z_{\rm max}$ sur la carte (en UA),
- Les valeurs z_1 et z_2 entre lesquelles intégrer le PV transverse (en UA),
- Les valeurs r_1 et r_2 entre lesquelles intégrer le PV longitudinal (en UA),
- La valeur $z_{\rm profil}$ jusqu'à laquelle intégrer les profils de raie (à partir de $z = 0$.
- La molécule et les options permettant de calculer les cartes à partir soit :
  - des émissivités calculées par MAMOJ et des probabilités d'échappement ou au contraire en imposant $\beta = 1$,
  - où en supposant que les émissivités suivent l'ETL($T_{\rm kin}$, $n_{\rm H}$) en chaque point de la ligne d'écoulement en se basant sur les abondances uniquement.
- Choisir le type de lobe : gaussien ou une simple fonction porte,
- La liste des raies à calculer,
- La liste des lignes d'écoulement à inclure : définie le $r_0^{\rm max}$ et le $r_0^{\rm min}$ du vent de disque poussiéreux,

À partir des PVs calculés il est possible de recalculer très rapidement différents profils en spécifiant la distance à l'objet et la résolution, ce qui permet d'obtenir le Tdv ou le flux intégré associé à ces profils ainsi que la largeur de raie à un certain seuil.

Une amélioration intéressante sera de sauvegarder directement le cube de données brut pour accélérer le traitement et la réalisation des prédictions ou les lire dans d'autres applications (GILDAS...).

IV Ajustement de profils

On a développé une méthode d'ajustement des profils basée sur la méthode des moindres carrés modifiée pour accorder un poids statistique plus grand aux ailes de raies et sous-estimer les erreurs sur le pic des profils. Cette méthode peut aussi utiliser comme *a priori* les comparaisons faites entre les intensités intégrées et les largeurs des profils.

Bibliographie

Aggarwal, K. M., Berrington, K. A., Burke, P. G., Kingston, A. E., & Pathak, A., Electron collision cross sections at low energies for all transitions between the n=1, 2, 3, 4 and 5 levels of atomic hydrogen. 1991, Journal of Physics B Atomic Molecular Physics, 24, 1385 (Cité page 94.)

Agra-Amboage, V., Dougados, C., Cabrit, S., & Reunanen, J., Sub-arcsecond [Fe ii] spectro-imaging of the DG Tauri jet. Periodic bubbles and a dusty disk wind ? 2011, A&A, 532, A59 (Cité pages 8, 154, 167 et 171.)

Agra-Amboage, V., Dougados, C., Cabrit, S., & Reunanen, J., Sub-arcsecond H_2 spectro-imaging of the DG Tauri jet. 2013, A&A, submitted (Cité pages 8, 161, 171, 172, 173, 174 et 175.)

Aikawa, Y., Kamuro, D., Sakon, I., et al., AKARI observations of ice absorption bands towards edge-on young stellar objects. 2012, A&A, 538, A57 (Cité page 215.)

Anders, E. & Grevesse, N., Abundances of the elements - Meteoritic and solar. 1989, Geochim. Cosmochim. Acta, 53, 197 (Cité page 52.)

André, P., The Earliest Stages of Star Formation : Protostars and Dense Cores. 2001, in ESA Special Publication, Vol. 460, The Promise of the Herschel Space Observatory, ed. G. L. Pilbratt, J. Cernicharo, A. M. Heras, T. Prusti, & R. Harris, 169 (Cité page 5.)

André, P. & Montmerle, T., From T Tauri stars to protostars : Circumstellar material and young stellar objects in the rho Ophiuchi cloud. 1994, ApJ, 420, 837 (Cité pages 4, 6.)

André, P., Ward-Thompson, D., & Barsony, M., From Prestellar Cores to Protostars : the Initial Conditions of Star Formation. 2000a, Protostars and Planets IV, 59 (Cité page 5.)

André, P., Ward-Thompson, D., & Barsony, M., From Prestellar Cores to Protostars : the Initial Conditions of Star Formation. 2000b, Protostars and Planets IV, 59 (Cité pages 4, 7 et 211.)

Antoniucci, S., Nisini, B., Giannini, T., & Lorenzetti, D., Accretion and ejection properties of embedded protostars : the case of HH26, HH34, and HH46 IRS. 2008, A&A, 479, 503 (Cité pages 7, 13.)

Bacciotti, F., Mundt, R., Ray, T. P., et al., Hubble Space Telescope STIS Spectroscopy of the Optical Outflow from DG Tauri : Structure and Kinematics on Subarcsecond Scales. 2000, ApJ, 537, L49 (Cité page 171.)

Bacciotti, F., Ray, T. P., Mundt, R., Eislöffel, J., & Solf, J., Hubble Space Telescope/STIS Spectroscopy of the Optical Outflow from DG Tauri : Indications for

Rotation in the Initial Jet Channel. 2002, ApJ, 576, 222 (Cité pages 12, 21, 22 et 171.)

Bachiller, R. & Cernicharo, J., Extremely high-velocity emission from molecular jets in NGC 6334 I and NGC 1333 (HH 7-11). 1990, A&A, 239, 276 (Cité page 13.)

Bai, X.-N. & Stone, J. M., Local Study of Accretion Disks with a Strong Vertical Magnetic Field : Magnetorotational Instability and Disk Outflow. 2013a, ApJ, 767, 30 (Cité page 12.)

Bai, X.-N. & Stone, J. M., Wind-driven Accretion in Protoplanetary Disks. I. Suppression of the Magnetorotational Instability and Launching of the Magnetocentrifugal Wind. 2013b, ApJ, 769, 76 (Cité page 12.)

Bakes, E. L. O. & Tielens, A. G. G. M., The photoelectric heating mechanism for very small graphitic grains and polycyclic aromatic hydrocarbons. 1994, ApJ, 427, 822 (Cité page 96.)

Balakrishnan, N., Yan, M., & Dalgarno, A., Quantum-Mechanical Study of Rotational and Vibrational Transitions in CO Induced by H Atoms. 2002, ApJ, 568, 443 (Cité page 277.)

Balbus, S. A. & Hawley, J. F., A powerful local shear instability in weakly magnetized disks. I - Linear analysis. II - Nonlinear evolution. 1991a, ApJ, 376, 214 (Cité page 12.)

Balbus, S. A. & Hawley, J. F., A powerful local shear instability in weakly magnetized disks. I - Linear analysis. II - Nonlinear evolution. 1991b, ApJ, 376, 214 (Cité page 17.)

Barber, R. J., Tennyson, J., Harris, G. J., & Tolchenov, R. N., A high-accuracy computed water line list. 2006, MNRAS, 368, 1087 (Cité page 110.)

Beck, T. L., McGregor, P. J., Takami, M., & Pyo, T.-S., Spatially Resolved Molecular Hydrogen Emission in the Inner 200 AU Environments of Classical T Tauri Stars. 2008, ApJ, 676, 472 (Cité pages 13, 171.)

Bell, K. L., Berrington, K. A., & Thomas, M. R. J., Electron impact excitation of the ground-state ˆ3P fine-structure levels in atomic oxygen. 1998, MNRAS, 293, L83 (Cité page 93.)

Beltrán, M. T., Gueth, F., Guilloteau, S., & Dutrey, A., L1157 : Interaction of the molecular outflow with the Class 0 environment. 2004, A&A, 416, 631 (Cité page 215.)

Bergin, E. A. & Tafalla, M., Cold Dark Clouds : The Initial Conditions for Star Formation. 2007, ARA&A, 45, 339 (Cité page 4.)

Bertout, C., An efficient method for computing spectral line profiles in stellar envelopes. 1984, ApJ, 285, 269 (Cité page 125.)

Biham, O., Furman, I., Pirronello, V., & Vidali, G., Master Equation for Hydrogen Recombination on Grain Surfaces. 2001, ApJ, 553, 595 (Cité page 56.)

Blandford, R. D. & Payne, D. G., Hydromagnetic flows from accretion discs and the production of radio jets. 1982, MNRAS, 199, 883 (Cité pages 10, 16 et 20.)

Bontemps, S., André, P., Terebey, S., & Cabrit, S., Evolution of outflow activity around low-mass embedded young stellar objects. 1996, A&A, 311, 858 (Cité page 6.)

Bouvier, J., Alencar, S. H. P., Harries, T. J., Johns-Krull, C. M., & Romanova, M. M., Magnetospheric Accretion in Classical T Tauri Stars. 2007, Protostars and Planets V, 479 (Cité page 38.)

Bouvier, J. & Appenzeller, I., eds. 2007, IAU Symposium, Vol. 243, Star-Disk Interaction in Young Stars (IAU S243) (Cité page 38.)

Bouvier, J., Chelli, A., Allain, S., et al., Magnetospheric accretion onto the T Tauri star AA Tauri. I. Constraints from multisite spectrophotometric monitoring. 1999, A&A, 349, 619 (Cité page 38.)

Bouvier, J., Covino, E., Kovo, O., et al., COYOTES II : SPOT properties and the origin of photometric period variations in T Tauri stars. 1995, A&A, 299, 89 (Cité page 38.)

Brauer, F., Dullemond, C. P., & Henning, T., Coagulation, fragmentation and radial motion of solid particles in protoplanetary disks. 2008, A&A, 480, 859 (Cité page 44.)

Brinch, C., Crapsi, A., Jørgensen, J. K., Hogerheijde, M. R., & Hill, T., A deeply embedded young protoplanetary disk around L1489 IRS observed by the Submillimeter Array. 2007, A&A, 475, 915 (Cité page 9.)

Brinch, C., Jørgensen, J. K., & Hogerheijde, M. R., The kinematics of NGC 1333-IRAS2A - a true Class 0 protostar. 2009, A&A, 502, 199 (Cité page 215.)

Bringa, E. M. & Johnson, R. E., A New Model for Cosmic-Ray Ion Erosion of Volatiles from Grains in the Interstellar Medium. 2004, ApJ, 603, 159 (Cité page 54.)

Brown, P. N., Byrne, G. D., & Hindmarsh, A. C., VODE : A Variable Coefficient ODE Solver. 1989, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 10, 1038 (Cité page 84.)

Cabrit, S., Constraints on accretion-ejection structures in young stars. 2002, in EAS Publications Series, Vol. 3, EAS Publications Series, ed. J. Bouvier & J.-P. Zahn, 147–182 (Cité page 20.)

Cabrit, S., Jets from Young Stars : The Need for MHD Collimation and Acceleration Processes. 2007a, in Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag, Vol. 723, Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag, ed. J. Ferreira, C. Dougados, & E. Whelan, 21 (Cité page 10.)

Cabrit, S., The accretion-ejection connexion in T Tauri stars : jet models vs. observations. 2007b, in IAU Symposium, Vol. 243, IAU Symposium, ed. J. Bouvier & I. Appenzeller, 203–214 (Cité pages 10, 12.)

Cabrit, S. & Bertout, C., CO line formation in bipolar flows. I - Accelerated outflows. 1986, ApJ, 307, 313 (Cité page 286.)

Cabrit, S., Codella, C., Gueth, F., et al., PdBI sub-arcsecond study of the SiO microjet in HH212. Origin and collimation of class 0 jets. 2007, A&A, 468, L29 (Cité page 7.)

Cabrit, S., Edwards, S., Strom, S. E., & Strom, K. M., Forbidden-line emission and infrared excesses in T Tauri stars - Evidence for accretion-driven mass loss ? 1990, ApJ, 354, 687 (Cité page 10.)

Casse, F. & Ferreira, J., Magnetized accretion-ejection structures. IV. Magnetically-driven jets from resistive, viscous, Keplerian discs. 2000a, A&A, 353, 1115 (Cité pages 13, 14.)

Casse, F. & Ferreira, J., Magnetized accretion-ejection structures. V. Effects of entropy generation inside the disc. 2000b, A&A, 361, 1178 (Cité pages 15, 18 et 19.)

Casse, F. & Ferreira, J., Magnetized accretion-ejection structures. V. Effects of entropy generation inside the disc. 2000c, A&A, 361, 1178 (Cité pages 17, 20 et 23.)

Cernicharo, J. & Reipurth, B., Herbig-Haro Jets, CO Flows, and CO Bullets : The Case of HH 111. 1996, ApJ, 460, L57 (Cité page 13.)

Chandler, C. J. & Richer, J. S., Subarcsecond Imaging of SiO in the HH 211 Protostellar Jet. 2001, ApJ, 555, 139 (Cité page 7.)

Chandra, S., Maheshwari, V. U., & Sharma, A. K., Einstein A-coefficients for vib-rotational transitions in CO. 1996, A&AS, 117, 557 (Cité pages 108, 110 et 278.)

Cheung, A. C., Cudaback, D. D., Rank, D. M., et al., Observations of Microwave Emission from the 1.35-cm Line of Interstellar Water Vapor. 1969, in Bulletin of the American Astronomical Society, Vol. 1, Bulletin of the American Astronomical Society, 236 (Cité page 108.)

Choi, M., Tatematsu, K., & Kang, M., Kinematics of the Ammonia Disk Around the Protostar NGC 1333 IRAS 4A2. 2010, ApJ, 723, L34 (Cité page 9.)

Claussen, M. J., Marvel, K. B., Wootten, A., & Wilking, B. A., Distribution and Motion of the Water Masers near IRAS 05413-0104. 1998, ApJ, 507, L79 (Cité page 13.)

Coffey, D., Bacciotti, F., Woitas, J., Ray, T. P., & Eislöffel, J., Rotation of Jets from Young Stars : New Clues from the Hubble Space Telescope Imaging Spectrograph. 2004, ApJ, 604, 758 (Cité page 22.)

Commerçon, B., Hennebelle, P., Audit, E., Chabrier, G., & Teyssier, R., Protostellar collapse : radiative and magnetic feedbacks on small-scale fragmentation. 2010, A&A, 510, L3 (Cité page 79.)

Dalgarno, A., Yan, M., & Liu, W., Electron Energy Deposition in a Gas Mixture of Atomic and Molecular Hydrogen and Helium. 1999, ApJS, 125, 237 (Cité pages 42, 43, 44, 94 et 95.)

Daniel, F., Dubernet, M.-L., & Grosjean, A., Rotational excitation of 45 levels of ortho/para-H_2O by excited ortho/para-H_2 from 5 K to 1500 K : state-to-state, effective, and thermalized rate coefficients. 2011, A&A, 536, A76 (Cité pages 88, 90.)

Dapp, W. B. & Basu, S., Averting the magnetic braking catastrophe on small scales : disk formation due to Ohmic dissipation. 2010, A&A, 521, L56 (Cité page 9.)

Davis, C. J., Ray, T. P., Desroches, L., & Aspin, C., Near-infrared echelle spectroscopy of Class I protostars : molecular hydrogen emission-line (MHEL) regions revealed. 2001, MNRAS, 326, 524 (Cité pages 7, 13.)

Davis, C. J., Whelan, E., Ray, T. P., & Chrysostomou, A., Near-IR echelle spectroscopy of Class I protostars : Mapping Forbidden Emission-Line (FEL) regions in [FeII]. 2003, A&A, 397, 693 (Cité page 171.)

D'Hendecourt, L. B., Allamandola, L. J., Baas, F., & Greenberg, J. M., Interstellar grain explosions - Molecule cycling between gas and dust. 1982, A&A, 109, L12 (Cité page 54.)

Dionatos, O., Nisini, B., Garcia Lopez, R., et al., Atomic Jets from Class 0 Sources Detected by Spitzer : The Case of L1448-C. 2009, ApJ, 692, 1 (Cité page 7.)

Dougados, C., Cabrit, S., Lavalley, C., & Ménard, F., T Tauri stars microjets resolved by adaptive optics. 2000, A&A, 357, L61 (Cité pages 8, 171.)

Draine, B. T., Photoelectric heating of interstellar gas. 1978, ApJS, 36, 595 (Cité pages 39, 96 et 266.)

Draine, B. T., Interstellar shock waves with magnetic precursors. 1980, ApJ, 241, 1021 (Cité page 29.)

Draine, B. T. & Bertoldi, F., Structure of Stationary Photodissociation Fronts. 1996, ApJ, 468, 269 (Cité page 62.)

Draine, B. T. & Lee, H. M., Optical properties of interstellar graphite and silicate grains. 1984, ApJ, 285, 89 (Cité pages 44, 45.)

Draine, B. T. & Malhotra, S., On graphite and the 2175 A extinction profile. 1993, ApJ, 414, 632 (Cité page 44.)

Dubernet, M.-L., Daniel, F., Grosjean, A., & Lin, C. Y., Rotational excitation of ortho-H{2}O by para-H{2} (j{2} = 0, 2, 4, 6, 8) at high temperature. 2009, A&A, 497, 911 (Cité pages 88, 90 et 111.)

Dufton, P. L. & Kingston, A. E., Effective collision strengths for SI II. 1991, MNRAS, 248, 827 (Cité page 93.)

Eislöffel, J. & Mundt, R., Imaging and Kinematic Studies of Young Stellar Object Jets in Taurus. 1998, AJ, 115, 1554 (Cité page 171.)

Enoch, M. L., Corder, S., Duchêne, G., et al., Disk and Envelope Structure in Class 0 Protostars. II. High-resolution Millimeter Mapping of the Serpens Sample. 2011, ApJS, 195, 21 (Cité page 9.)

Evans, II, N. J., Dunham, M. M., Jørgensen, J. K., et al., The Spitzer c2d Legacy Results : Star-Formation Rates and Efficiencies ; Evolution and Lifetimes. 2009, ApJS, 181, 321 (Cité page 4.)

Fayolle, E. C., Bertin, M., Romanzin, C., et al., CO Ice Photodesorption : A Wavelength-dependent Study. 2011a, ApJ, 739, L36 (Cité pages 54, 55.)

Fayolle, E. C., Öberg, K. I., Cuppen, H. M., Visser, R., & Linnartz, H., Laboratory H_2O :CO_2 ice desorption data : entrapment dependencies and its parameterization with an extended three-phase model. 2011b, A&A, 529, A74 (Cité page 56.)

Fayolle, E. C., Öberg, K. I., Cuppen, H. M., Visser, R., & Linnartz, H., Laboratory H_2O :CO_2 ice desorption : entrapment and its parameterization with an extended three-phase model. 2012, in EAS Publications Series, Vol. 58, EAS Publications Series, 327–331 (Cité pages 54, 55.)

Federman, S. R. & Shipsey, E. J., The 1D-3P transition in atomic oxygen induced by collisions with atomic hydrogen. 1983, ApJ, 269, 791 (Cité page 93.)

Ferreira, J., Magnetically-driven jets from Keplerian accretion discs. 1997a, A&A, 319, 340 (Cité pages 10, 17 et 20.)

Ferreira, J., Magnetically-driven jets from Keplerian accretion discs. 1997b, A&A, 319, 340 (Cité pages 10, 11.)

Ferreira, J., Dougados, C., & Cabrit, S., Which jet launching mechanism(s) in T Tauri stars ? 2006, A&A, 453, 785 (Cité pages 10, 13, 21 et 22.)

Ferreira, J., Pelletier, G., & Appl, S., Reconnection X-winds : spin-down of low-mass protostars. 2000, MNRAS, 312, 387 (Cité page 11.)

Flower, D. R., Atomic and molecular processes in interstellar shocks. 1989, Journal of Physics B Atomic Molecular Physics, 22, 2319 (Cité page 91.)

Flower, D. R. & Pineau des Forêts, G., Grain / Mantle Erosion in Magnetohydrodynamic Shocks. 1994, MNRAS, 268, 724 (Cité page 54.)

Flower, D. R. & Pineau des Forêts, G., The influence of grains on the propagation and structure of C-type shock waves in interstellar molecular clouds. 2003, MNRAS, 343, 390 (Cité pages 51, 52, 256, 265 et 282.)

Flower, D. R. & Pineau des Forêts, G., Excitation and emission of H2, CO and H2O molecules in interstellar shock waves. 2010, MNRAS, 406, 1745 (Cité page 111.)

Flower, D. R., Pineau des Forêts, G., & Hartquist, T. W., Theoretical studies of interstellar molecular shocks. I - General formulation and effects of the ion-molecule chemistry. 1985, MNRAS, 216, 775 (Cité page 99.)

Fraser, H. J., Bisschop, S. E., Pontoppidan, K. M., van Broekhuizen, F., & van Dishoeck, E., CO Chemisorbed on Bare Grain Surfaces : the Potential for Heterogeneous Chemistry. 2005, in IAU Symposium, Vol. 235, IAU Symposium, 31P (Cité page 53.)

Fraser, H. J., Collings, M. P., McCoustra, M. R. S., & Williams, D. A., Thermal desorption of water ice in the interstellar medium. 2001, MNRAS, 327, 1165 (Cité pages 53, 54 et 56.)

Fuchs, G. W., Acharyya, K., Bisschop, S. E., et al., Laboratory experiments on interstellar ice analogs : The sticking and desorption of small physisorbed molecules. 2006, in NASA LAW 2006, ed. P. F. Weck, V. H. S. Kwong, & F. Salama, 73 (Cité page 53.)

Furuya, R. S., Kitamura, Y., Wootten, A., Claussen, M. J., & Kawabe, R., Multi-epoch water maser survey towards low-mass YSOs. 2002, in IAU Symposium, Vol. 206, Cosmic Masers : From Proto-Stars to Black Holes, ed. V. Migenes & M. J. Reid, 35 (Cité page 7.)

Garcia, P. J. V., Ferreira, J., Cabrit, S., & Binette, L., Atomic T Tauri disk winds heated by ambipolar diffusion. I. Thermal structure. 2001a, A&A, 377, 589 (Cité pages 29, 98.)

Garcia, P. J. V., Ferreira, J., Cabrit, S., & Binette, L., Atomic T Tauri disk winds heated by ambipolar diffusion. I. Thermal structure. 2001b, A&A, 377, 589 (Cité pages 37, 99.)

Gibb, E. L., Whittet, D. C. B., Schutte, W. A., et al., An Inventory of Interstellar Ices toward the Embedded Protostar W33A. 2000, ApJ, 536, 347 (Cité page 52.)

Glassgold, A. E., Najita, J., & Igea, J., X-Ray Ionization of Protoplanetary Disks. 1997, ApJ, 480, 344 (Cité pages 13, 43.)

Glassgold, A. E., Najita, J., & Igea, J., Heating Protoplanetary Disk Atmospheres. 2004, ApJ, 615, 972 (Cité pages 278, 279.)

Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., Karska, A., et al., The complete far-infrared and sub-millimeter spectrum of the Class 0 protostar Serpens SMM1 obtained with Herschel. Characterizing UV-irradiated shocks heating and chemistry. 2012, A&A, 548, A77 (Cité page 216.)

Gredel, R., Lepp, S., & Dalgarno, A., The C/CO ratio in dense interstellar clouds. 1987, ApJ, 323, L137 (Cité pages 44, 56.)

Gredel, R., Lepp, S., Dalgarno, A., & Herbst, E., Cosmic-ray-induced photodissociation and photoionization rates of interstellar molecules. 1989, ApJ, 347, 289 (Cité pages 42, 44 et 56.)

Green, S., Maluendes, S., & McLean, A. D., Improved collisional excitation rates for interstellar water. 1993, ApJS, 85, 181 (Cité page 90.)

Güdel, M., X-rays from young stars : A summary of highlights from the XMM-Newton Extended Survey of the Taurus Molecular Cloud (XEST). 2008, Astronomische Nachrichten, 329, 218 (Cité page 42.)

Gueth, F. & Guilloteau, S., The jet-driven molecular outflow of HH 211. 1999, A&A, 343, 571 (Cité pages 6, 7 et 13.)

Gullbring, E., Calvet, N., Muzerolle, J., & Hartmann, L., The Structure and Emission of the Accretion Shock in T Tauri Stars. II. The Ultraviolet-Continuum Emission. 2000, ApJ, 544, 927 (Cité page 38.)

Gullbring, E., Hartmann, L., Briceno, C., & Calvet, N., Disk Accretion Rates for T Tauri Stars. 1998, ApJ, 492, 323 (Cité page 20.)

Gusdorf, A. 2009, PhD thesis, Université Paris 11, Institut d'astrophysique Spatiale (IAS) (Cité page 276.)

Gusdorf, A., Cabrit, S., Flower, D. R., & Pineau des Forêts, G., SiO line emission from C-type shock waves : interstellar jets and outflows. 2008, A&A, 482, 809 (Cité page 115.)

Hartigan, P., Edwards, S., & Ghandour, L., Disk Accretion and Mass Loss from Young Stars. 1995, ApJ, 452, 736 (Cité pages 7, 10 et 20.)

Harvey, D. W. A., Wilner, D. J., Myers, P. C., Tafalla, M., & Mardones, D., Inner Structure of Protostellar Collapse Candidate B335 Derived from Millimeter-Wave Interferometry. 2003, ApJ, 583, 809 (Cité page 215.)

Hasegawa, T. I. & Herbst, E., New gas-grain chemical models of quiescent dense interstellar clouds - The effects of H2 tunnelling reactions and cosmic ray induced desorption. 1993a, MNRAS, 261, 83 (Cité page 56.)

Hasegawa, T. I. & Herbst, E., Three-Phase Chemical Models of Dense Interstellar Clouds - Gas Dust Particle Mantles and Dust Particle Surfaces. 1993b, MNRAS, 263, 589 (Cité page 56.)

Hasegawa, T. I., Herbst, E., & Leung, C. M., Models of gas-grain chemistry in dense interstellar clouds with complex organic molecules. 1992, ApJS, 82, 167 (Cité page 56.)

Hawley, J. F. & Balbus, S. A., A Powerful Local Shear Instability in Weakly Magnetized Disks. II. Nonlinear Evolution. 1991, ApJ, 376, 223 (Cité page 17.)

Henke, B. L., Gullikson, E. M., & Davis, J. C., X-Ray Interactions : Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at E = 50-30,000 eV, Z = 1-92. 1993, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 54, 181 (Cité page 43.)

Hennebelle, P., Whitworth, A. P., Gladwin, P. P., & André, P., Protostellar collapse induced by compression. 2003, MNRAS, 340, 870 (Cité page 4.)

Herbst, E. & Cuppen, H. M., Interstellar Chemistry Special Feature : Monte Carlo studies of surface chemistry and nonthermal desorption involving interstellar grains. 2006, Proceedings of the National Academy of Science, 103, 12257 (Cité pages 54, 55.)

Hildebrand, F. B. 1956, Introduction to numerical analysis (Cité page 125.)

Hincelin, U. 2012, PhD thesis, Université Sciences et Technologies - Bordeaux 1 (Cité page 79.)

Hincelin, U., Wakelam, V., Hersant, F., et al., Oxygen depletion in dense molecular clouds : a clue to a low O_2 abundance ? 2011, A&A, 530, A61 (Cité page 79.)

Hirota, T., Honma, M., Imai, H., et al., Astrometry of H_2O Masers in Nearby Star-Forming Regions with VERA. IV. L 1448 C. 2011, PASJ, 63, 1 (Cité page 215.)

Hollenbach, D. & McKee, C. F., Molecule formation and infrared emission in fast interstellar shocks. I Physical processes. 1979, ApJS, 41, 555 (Cité page 265.)

Hummer, D. G. & Rybicki, G. B., A unified treatment of escape probabilities in static and moving media. I - Plane geometry. 1982, ApJ, 254, 767 (Cité pages 115, 129.)

Isaacson, A. D., Truhlar, D. G., Scanlon, K., & Overend, J., Tests of approximation schemes for vibrational energy levels and partition functions for triatomics - H2O and SO2. 1981, J. Chem. Phys., 75, 3017 (Cité page 110.)

Ivezic, Z. & Elitzur, M., Self-similarity and scaling behaviour of infrared emission from radiatively heated dust - I. Theory. 1997, MNRAS, 287, 799 (Cité pages 47, 122.)

Ivezic, Z., Nenkova, M., & Elitzur, M., User Manual for DUSTY. 1999, ArXiv Astrophysics e-prints (Cité pages 47, 121.)

Johns-Krull, C. M., Valenti, J. A., & Linsky, J. L., An IUE Atlas of Pre-Main-Sequence Stars. II. Far-Ultraviolet Accretion Diagnostics in T Tauri Stars. 2000, ApJ, 539, 815 (Cité page 38.)

Joos, M. 2012, PhD thesis, Université Paris 6, LERMA - Laboratoire d'Etude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique (Cité page 5.)

Joos, M., Hennebelle, P., & Ciardi, A., Protostellar disk formation and transport of angular momentum during magnetized core collapse. 2012, A&A, 543, A128 (Cité page 9.)

Jørgensen, J. K., Bourke, T. L., Myers, P. C., et al., PROSAC : A Submillimeter Array Survey of Low-Mass Protostars. I. Overview of Program : Envelopes, Disks, Outflows, and Hot Cores. 2007, ApJ, 659, 479 (Cité page 215.)

Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F., Physical structure and CO abundance of low-mass protostellar envelopes. 2002, A&A, 389, 908 (Cité page 215.)

Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., Visser, R., et al., PROSAC : a submillimeter array survey of low-mass protostars. II. The mass evolution of envelopes, disks, and stars from the Class 0 through I stages. 2009, A&A, 507, 861 (Cité page 9.)

Kepner, J., Hartigan, P., Yang, C., & Strom, S., Hubble Space Telescope Images of the Subarcsecond Jet in DG Tauri. 1993, ApJ, 415, L119 (Cité page 171.)

Kristensen, L. E., van Dishoeck, E. F., Bergin, E. A., et al., Water in star-forming regions with Herschel (WISH). II. Evolution of 557 GHz 1_{10}-1_{01} emission in low-mass protostars. 2012, A&A, 542, A8 (Cité pages 188, 189, 205, 206, 207, 208, 209, 211 et 213.)

Kristensen, L. E., van Dishoeck, E. F., Tafalla, M., et al., Water in low-mass star-forming regions with Herschel (WISH-LM). High-velocity H_2O bullets in L1448-MM observed with HIFI. 2011, A&A, 531, L1+ (Cité pages 212, 213 et 273.)

Kristensen, L. E., Visser, R., van Dishoeck, E. F., et al., Water in low-mass star-forming regions with Herschel . HIFI spectroscopy of NGC 1333. 2010, A&A, 521, L30 (Cité pages 212, 213, 214, 235 et 237.)

Laor, A. & Draine, B. T., Spectroscopic constraints on the properties of dust in active galactic nuclei. 1993, ApJ, 402, 441 (Cité page 44.)

Larson, R. B., Numerical calculations of the dynamics of collapsing proto-star. 1969, MNRAS, 145, 271 (Cité page 4.)

Larson, R. B., Turbulence and star formation in molecular clouds. 1981, MNRAS, 194, 809 (Cité page 4.)

Launhardt, R., Pavlyuchenkov, Y., Gueth, F., et al., Rotating molecular outflows : the young T Tauri star in CB 26. 2009, A&A, 494, 147 (Cité pages 13, 231 et 232.)

Launhardt, R. & Sargent, A. I., A Young Protoplanetary Disk in the Bok Globule CB 26 ? 2001, ApJ, 562, L173 (Cité page 231.)

Lavalley, C., Cabrit, S., Dougados, C., Ferruit, P., & Bacon, R., Sub-arcsecond morphology and kinematics of the DG Tauri jet in the [O I]λ6300 line. 1997, A&A, 327, 671 (Cité page 171.)

Lavalley-Fouquet, C., Cabrit, S., & Dougados, C., DG Tau : A shocking jet. 2000, A&A, 356, L41 (Cité page 171.)

Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R., The cooling of astrophysical media by H_2. 1999, MNRAS, 305, 802 (Cité page 89.)

Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., Flower, D. R., & Cabrit, S., New determinations of the critical velocities of C-type shock waves in dense molecular clouds : application to the outflow source in Orion. 2002, MNRAS, 332, 985 (Cité page 100.)

Lee, C.-F., A Rotating Disk in the HH 111 Protostellar System. 2011, ApJ, 741, 62 (Cité page 10.)

Lee, C.-F., Ho, P. T. P., Bourke, T. L., et al., SiO Shocks of the Protostellar Jet HH 212 : A Search for Jet Rotation. 2008, ApJ, 685, 1026 (Cité page 13.)

Lee, C.-F., Ho, P. T. P., Palau, A., et al., Submillimeter Arcsecond-Resolution Mapping of the Highly Collimated Protostellar Jet HH 211. 2007, ApJ, 670, 1188 (Cité page 13.)

Lee, H.-H., Herbst, E., Pineau des Forêts, G., Roueff, E., & Le Bourlot, J., Photodissociation of H_2_ and CO and time dependent chemistry in inhomogeneous interstellar clouds. 1996, A&A, 311, 690 (Cité page 62.)

Leger, A., Jura, M., & Omont, A., Desorption from interstellar grains. 1985, A&A, 144, 147 (Cité pages 54, 55.)

Lehtinen, K., Haikala, L. K., Mattila, K., & Lemke, D., A far infrared view of low mass star formation in the Cederblad 110 nebula of Chamaeleon I. 2001, A&A, 367, 311 (Cité page 211.)

Lennon, D. J., Dufton, P. L., Hibbert, A., & Kingston, A. E., C II emission lines formed in optically thin plasmas. 1985, ApJ, 294, 200 (Cité page 93.)

Lommen, D., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Crapsi, A., SMA observations of young disks : separating envelope, disk, and stellar masses in class I YSOs. 2008, A&A, 481, 141 (Cité page 10.)

Looney, L. W., Mundy, L. G., & Welch, W. J., Envelope Emission in Young Stellar Systems : A Subarcsecond Survey of Circumstellar Structure. 2003, ApJ, 592, 255 (Cité page 215.)

Mathis, J. S., Rumpl, W., & Nordsieck, K. H., The size distribution of interstellar grains. 1977, ApJ, 217, 425 (Cité pages 44, 45.)

Matt, S. & Pudritz, R. E., Accretion-powered Stellar Winds as a Solution to the Stellar Angular Momentum Problem. 2005, ApJ, 632, L135 (Cité page 11.)

Maury, A. 2009, PhD thesis, Université Paris 6, CEA, SAp - Service d'Astrophysique (Cité pages 4, 5.)

McCaughrean, M. J., Rayner, J. T., & Zinnecker, H., Discovery of a molecular hydrogen jet near IC 348. 1994, ApJ, 436, L189 (Cité page 6.)

Meliani, Z., Casse, F., & Sauty, C., Two-component magnetohydrodynamical outflows around young stellar objects. Interplay between stellar magnetospheric winds and disc-driven jets. 2006, A&A, 460, 1 (Cité page 246.)

Monteiro, T. S. & Flower, D. R., Excitation of O I and C I forbidden-line fine structure transitions by He and H2 - A neglected selection rule. 1987, MNRAS, 228, 101 (Cité page 93.)

Morrison, R. & McCammon, D., Interstellar photoelectric absorption cross sections, 0.03-10 keV. 1983, ApJ, 270, 119 (Cité page 41.)

Motte, F. & André, P., Wide-field (Sub)millimeter Continuum Surveys of Protoclusters : Clues to the Origin of the IMF. 2001, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 243, From Darkness to Light : Origin and Evolution of Young Stellar Clusters, ed. T. Montmerle & P. André, 301 (Cité page 4.)

Muñoz Caro, G. M. & Schutte, W. A., UV-photoprocessing of interstellar ice analogs : New infrared spectroscopic results. 2003, A&A, 412, 121 (Cité pages 54, 55.)

Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G., The Cologne Database for Molecular Spectroscopy, CDMS. 2001, A&A, 370, L49 (Cité pages 107, 109.)

Muzerolle, J., D'Alessio, P., Calvet, N., & Hartmann, L., Magnetospheres and Disk Accretion in Herbig Ae/Be Stars. 2004, ApJ, 617, 406 (Cité page 38.)

Muzerolle, J., Hartmann, L., & Calvet, N., A Brgamma Probe of Disk Accretion in T Tauri Stars and Embedded Young Stellar Objects. 1998, AJ, 116, 2965 (Cité page 171.)

Muzerolle, J., Luhman, K. L., Briceño, C., Hartmann, L., & Calvet, N., Measuring Accretion in Young Substellar Objects : Approaching the Planetary Mass Regime. 2005, ApJ, 625, 906 (Cité page 38.)

Myers, P. C. & Gammie, C. F., On the Turbulent Velocity Dispersion in Molecular Clouds. 1999, ApJ, 522, L141 (Cité page 7.)

Myers, P. C. & Ladd, E. F., Bolometric temperatures of young stellar objects. 1993, ApJ, 413, L47 (Cité page 4.)

Najita, J., Bergin, E. A., & Ullom, J. N., X-Ray Desorption of Molecules from Grains in Protoplanetary Disks. 2001, ApJ, 561, 880 (Cité pages 54, 55.)

Najita, J., Carr, J. S., Glassgold, A. E., Shu, F. H., & Tokunaga, A. T., Kinematic Diagnostics of Disks around Young Stars : CO Overtone Emission from WL 16 and 1548C27. 1996, ApJ, 462, 919 (Cité pages 278, 279.)

Nakano, T., Star Formation in Magnetic Clouds. 1998, ApJ, 494, 587 (Cité page 4.)

Nayak, S. K., Rao, B. K., Khanna, S. N., & Jena, P., Atomic and electronic structure of neutral and charged Si_nO_m clusters. 1998, J. Chem. Phys., 109, 1245 (Cité page 96.)

Nenkova, M., Ivezic, Z., & Elitzur, M., DUSTY : A Publicly Available Code for Continuum Radiative Transfer in Astrophysical Environments. 1999, LPI Contributions, 969, 20 (Cité page 47.)

Neufeld, D. A. & Kaufman, M. J., Radiative Cooling of Warm Molecular Gas. 1993, ApJ, 418, 263 (Cité pages 51, 90, 91, 92 et 124.)

Neufeld, D. A. & Melnick, G. J., H2O line emission from shocked gas. 1987, ApJ, 322, 266 (Cité page 90.)

Öberg, K. I., Linnartz, H., Visser, R., & van Dishoeck, E. F., Photodesorption of Ices. II. H_2O and D_2O. 2009a, ApJ, 693, 1209 (Cité pages 54, 58.)

Öberg, K. I., van Dishoeck, E. F., & Linnartz, H., Photodesorption of ices I : CO, N_2, and CO_2. 2009b, A&A, 496, 281 (Cité pages 54, 55.)

Osterbrock, D. E., On Ambipolar Diffusion in H I Regions. 1961, ApJ, 134, 270 (Cité page 29.)

Panoglou, D., Cabrit, S., Pineau des Forêts, G., et al., Molecule survival in magnetized protostellar disk winds. I. Chemical model and first results. 2012, A&A, 538, A2 (Cité pages 13, 14, 29, 42, 46, 51, 62, 63, 67, 69, 70, 84, 88, 99, 101 et 244.)

Pequignot, D., Populations of the O I metastable levels. 1990a, A&A, 231, 499 (Cité page 93.)

Pequignot, D., Populations of the O I metastable levels. 1990b, A&A, 231, 499 (Cité page 93.)

Pequignot, D., (Erratum) Populations of the O I metastable levels. 1996, A&A, 313, 1026 (Cité page 93.)

Pequignot, D. & Aldrovandi, S. M. V., Effective collision strengths for the forbidden emission lines of neutral carbon, nitrogen and oxygen. 1976, A&A, 50, 141 (Cité page 93.)

Pesenti, N., Dougados, C., Cabrit, S., et al., Predicted rotation signatures in MHD disc winds and comparison to DG Tau observations. 2004, A&A, 416, L9 (Cité pages 12, 21.)

Pineau des Forêts, G., Flower, D. R., Hartquist, T. W., & Dalgarno, A., Theoretical studies of interstellar molecular shocks. III - The formation of CH(+) in diffuse clouds. 1986, MNRAS, 220, 801 (Cité page 255.)

Pinto, C. & Galli, D., Three-fluid plasmas in star formation. II. Momentum transfer rate coefficients. 2008, A&A, 484, 17 (Cité pages 29, 30.)

Podio, L., Kamp, I., Codella, C., et al., Water Vapor in the Protoplanetary Disk of DG Tau. 2013, ApJ, 766, L5 (Cité page 202.)

Pudritz, R. E., Dynamo action in turbulent accretion discs around black holes. I - The fluctuations. II - The mean magnetic field. 1981, MNRAS, 195, 881 (Cité page 16.)

Pudritz, R. E., Wilson, C. D., Carlstrom, J. E., et al., Accretions Disks Around Class O Protostars : The Case of VLA 1623. 1996, ApJ, 470, L123 (Cité page 215.)

Pyo, T.-S., Kobayashi, N., Hayashi, M., et al., Adaptive Optics Spectroscopy of the [Fe II] Outflow from DG Tauri. 2003, ApJ, 590, 340 (Cité pages 171, 172.)

Quinet, P., Le Dourneuf, M., & Zeippen, C. J., Atomic data from the IRON Project. XIX. Radiative transition probabilities for forbidden lines in Fe II. 1996, A&AS, 120, 361 (Cité page 93.)

Raga, A. & Cabrit, S., Molecular outflows entrained by jet bowshocks. 1993, A&A, 278, 267 (Cité page 13.)

Rapp, D. & Englander-Golden, P., Total Cross Sections for Ionization and Attachment in Gases by Electron Impact. I. Positive Ionization. 1965, J. Chem. Phys., 43, 1464 (Cité page 94.)

Rawlings, J. M. C., Drew, J. E., & Barlow, M. J., Excited Hydrogen and the Formation of Molecular Hydrogen via Associative Ionization - Part One - Physical Processes and Outflows from Young Stellar Objects. 1993, MNRAS, 265, 968 (Cité page 13.)

Ray, T., Dougados, C., Bacciotti, F., Eislöffel, J., & Chrysostomou, A., Toward Resolving the Outflow Engine : An Observational Perspective. 2007, Protostars and Planets V, 231 (Cité pages 10, 13.)

Reipurth, B., Hartigan, P., Heathcote, S., Morse, J. A., & Bally, J., Hubble Space Telescope Images of the HH 111 Jet. 1997, AJ, 114, 757 (Cité page 8.)

Roberge, W. G., Jones, D., Lepp, S., & Dalgarno, A., Interstellar photodissociation and photoionization rates. 1991, ApJS, 77, 287 (Cité page 52.)

Roelfsema, P. R., Helmich, F. P., Teyssier, D., et al., In-orbit performance of Herschel-HIFI. 2012, A&A, 537, A17 (Cité pages 206, 273.)

Romanova, M. M., Ustyugova, G. V., Koldoba, A. V., & Lovelace, R. V. E., Three-dimensional Simulations of Disk Accretion to an Inclined Dipole. II. Hot Spots and Variability. 2004, ApJ, 610, 920 (Cité page 38.)

Roueff, E. & Le Bourlot, J., Excitation of forbidden C I fine structure transitions by protons. 1990, A&A, 236, 515 (Cité page 93.)

Safier, P. N., Centrifugally driven winds from protostellar disks. I - Wind model and thermal structure. 1993, ApJ, 408, 115 (Cité pages 13, 44 et 99.)

Sandford, S. A. & Allamandola, L. J., The condensation and vaporization behavior of H2O :CO ices and implications for interstellar grains and cometary activity. 1988, Icarus, 76, 201 (Cité page 53.)

Sandford, S. A. & Allamandola, L. J., Condensation and vaporization studies of CH3OH and NH3 ices : Major implications for astrochemistry. 1993, ApJ, 417, 815 (Cité page 56.)

Sauty, C., Stellar Wind Models. 2007, in Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag, Vol. 723, Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag, ed. J. Ferreira, C. Dougados, & E. Whelan, 209 (Cité page 11.)

Sauty, C., Trussoni, E., & Tsinganos, K., Nonradial and nonpolytropic astrophysical outflows. V. Acceleration and collimation of self-similar winds. 2002, A&A, 389, 1068 (Cité page 11.)

Savage, B. D. & Sembach, K. R., Interstellar Abundances from Absorption-Line Observations with the Hubble Space Telescope. 1996, ARA&A, 34, 279 (Cité page 52.)

Schinke, R., Engel, V., Buck, U., Meyer, H., & Diercksen, G. H. F., Rate constants for rotational transitions of CO scattered by para-hydrogen. 1985, ApJ, 299, 939 (Cité page 90.)

Schmitt, W., Henning, T., & Mucha, R., Dust evolution in protoplanetary accretion disks. 1997, A&A, 325, 569 (Cité page 44.)

Schroder, K., Staemmler, V., Smith, M. D., Flower, D. R., & Jaquet, R., Excitation of the fine-structure transitions of C in collisions with ortho- and para-H_2. 1991, Journal of Physics B Atomic Molecular Physics, 24, 2487 (Cité page 93.)

Shakura, N. I. & Sunyaev, R. A., Black holes in binary systems. Observational appearance. 1973, A&A, 24, 337 (Cité page 12.)

Shang, H., Glassgold, A. E., Shu, F. H., & Lizano, S., Heating and Ionization of X-Winds. 2002, ApJ, 564, 853 (Cité pages 42, 43.)

Shu, F. H., Self-similar collapse of isothermal spheres and star formation. 1977, ApJ, 214, 488 (Cité page 48.)

Shu, F. H., Adams, F. C., & Lizano, S., Star formation in molecular clouds - Observation and theory. 1987, ARA&A, 25, 23 (Cité page 4.)

Shu, F. H., Lizano, S., Galli, D., Cai, M. J., & Mohanty, S., The Challenge of Sub-Keplerian Rotation for Disk Winds. 2008, ApJ, 682, L121 (Cité page 17.)

Shu, F. H., Najita, J., Ostriker, E. C., & Shang, H., Magnetocentrifugally Driven Flows from Young Stars and Disks. V. Asymptotic Collimation into Jets. 1995, ApJ, 455, L155 (Cité page 11.)

Sobolev, V. V., The Diffusion of Radiation in a Medium of Finite Optical Thickness. 1957, Soviet Ast., 1, 332 (Cité pages 114, 115.)

Sofia, U. J. & Meyer, D. M., Interstellar Abundance Standards Revisited. 2001, ApJ, 554, L221 (Cité page 52.)

Solf, J. & Boehm, K. H., High-resolution long-slit spectral imaging of the mass outflows in the immediate vicinity of DG Tauri. 1993, ApJ, 410, L31 (Cité page 171.)

Staemmler, V. & Flower, D. R., Excitation of the C($2p^{2.}$ ^3P_j) fine structure states in collisions with He($1s^2$ $^1S_0$). 1991, Journal of Physics B Atomic Molecular Physics, 24, 2343 (Cité page 93.)

Surdej, J., Contribution to spectral line formation in moving stellar envelopes - Radiation field and statistical equilibrium equations. 1977, A&A, 60, 303 (Cité pages 115, 116 et 119.)

Takakuwa, S., Saito, M., Lim, J., et al., A Keplerian Circumbinary Disk around the Protostellar System L1551 NE. 2012, ApJ, 754, 52 (Cité page 10.)

Takami, M., Chrysostomou, A., Ray, T. P., et al., Detection of a warm molecular wind in DG Tauri. 2004, A&A, 416, 213 (Cité pages 13, 154, 161, 171, 172 et 175.)

Tassis, K. & Mouschovias, T. C., Magnetically Controlled Spasmodic Accretion during Star Formation. I. Formulation of the Problem and Method of Solution. 2005, ApJ, 618, 769 (Cité page 9.)

Taylor, S. D. & Raga, A. C., Molecular Mixing Layers in Stellar Outflows. 1995, Ap&SS, 233, 139 (Cité page 13.)

Tennyson, J., Zobov, N. F., Williamson, R., Polyansky, O. L., & Bernath, P. F., Experimental Energy Levels of the Water Molecule. 2001, Journal of Physical and Chemical Reference Data, 30, 735 (Cité page 109.)

Terebey, S., Shu, F. H., & Cassen, P., The collapse of the cores of slowly rotating isothermal clouds. 1984, ApJ, 286, 529 (Cité page 9.)

Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D., Photodissociation regions. I - Basic model. II - A model for the Orion photodissociation region. 1985, ApJ, 291, 722 (Cité pages 94, 265.)

Tobin, J. J., Hartmann, L., Calvet, N., & D'Alessio, P., Constraining the Envelope Structure of L1527 IRS : Infrared Scattered Light Modeling. 2008, ApJ, 679, 1364 (Cité page 213.)

Tobin, J. J., Hartmann, L., Chiang, H.-F., et al., Modeling the Resolved Disk around the Class 0 Protostar L1527. 2013, ApJ, 771, 48 (Cité pages 9, 213.)

Tobin, J. J., Hartmann, L., & Loinard, L., The Inner Envelope and Disk of L1527 Revealed : Gemini L'-band-scattered Light Imaging. 2010, ApJ, 722, L12 (Cité page 213.)

Tomida, K., Tomisaka, K., Matsumoto, T., et al., Radiation Magnetohydrodynamic Simulations of Protostellar Collapse : Protostellar Core Formation. 2013, ApJ, 763, 6 (Cité page 9.)

van Dishoeck, E. F. & Black, J. H., The photodissociation and chemistry of interstellar CO. 1988, ApJ, 334, 771 (Cité page 51.)

Vidler, M. & Tennyson, J., Accurate partition function and thermodynamic data for water. 2000, J. Chem. Phys., 113, 9766 (Cité page 110.)

Viscuso, P. J. & Chernoff, D. F., CO cooling rates - Revised calculations. 1988, ApJ, 327, 364 (Cité page 90.)

Voit, G. M., X-ray irradiation of interstellar grains in active galaxies - Evaporation and infrared spectra. 1991, ApJ, 379, 122 (Cité page 54.)

Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R., Silicon chemistry in PDRs. 1999, A&A, 342, 542 (Cité pages 54, 55.)

Wardle, M. & Koenigl, A., The structure of protostellar accretion disks and the origin of bipolar flows. 1993, ApJ, 410, 218 (Cité page 17.)

Weingartner, J. C. & Draine, B. T., Photoelectric Emission from Interstellar Dust : Grain Charging and Gas Heating. 2001, ApJS, 134, 263 (Cité pages 96, 266.)

Westley, M. S., Baragiola, R. A., Johnson, R. E., & Baratta, G. A., Photodesorption from low-temperature water ice in interstellar and circumsolar grains. 1995, Nature, 373, 405 (Cité pages 54, 55 et 58.)

Wilgenbus, D., Cabrit, S., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R., The ortho :para-H_2 ratio in C- and J-type shocks. 2000, A&A, 356, 1010 (Cité page 266.)

Woitas, J., Bacciotti, F., Ray, T. P., et al., Jet rotation : Launching region, angular momentum balance and magnetic properties in the bipolar outflow from RW Aur. 2005, A&A, 432, 149 (Cité page 22.)

Wolk, S., The Evolution of Disks, Protostars and the Young Cluster IRAS 20050+2730. 2005, in Chandra Proposal, 1899 (Cité page 42.)

Yang, B., Stancil, P. C., Balakrishnan, N., & Forrey, R. C., Rotational Quenching of CO due to H_2 Collisions. 2010, ApJ, 718, 1062 (Cité pages 88, 91, 111 et 113.)

Yıldız, U. A., Kristensen, L. E., van Dishoeck, E. F., et al., APEX-CHAMP$^+$ high-J CO observations of low-mass young stellar objects. III. NGC 1333 IRAS 4A/4B envelope, outflow, and ultraviolet heating. 2012a, A&A, 542, A86 (Cité page 215.)

Yıldız, U. A., Kristensen, L. E., van Dishoeck, E. F., et al., APEX-CHAMP$^+$ high-J CO observations of low-mass young stellar objects. III. NGC 1333 IRAS 4A/4B envelope, outflow, and ultraviolet heating. 2012b, A&A, 542, A86 (Cité pages 238, 239.)

Yıldız, U. A., Kristensen, L. E., van Dishoeck, E. F., et al., High-J CO survey of low-mass protostars observed with Herschel-HIFI. 2013, ArXiv e-prints (Cité pages 239, 240 et 241.)

Yıldız, U. A., van Dishoeck, E. F., Kristensen, L. E., et al., Herschel/HIFI observations of high-J CO lines in the NGC 1333 low-mass star-forming region. 2010, A&A, 521, L40 (Cité pages 182, 235, 236, 237 et 238.)

Zanni, C. & Ferreira, J., MHD simulations of accretion onto a dipolar magnetosphere. II. Magnetospheric ejections and stellar spin-down. 2013, A&A, 550, A99 (Cité page 11.)

Zinnecker, H., Observations of young stellar objects (YSO). 2002, in Physics of Star Formation in Galaxies, ed. F. Palla, H. Zinnecker, A. Maeder, & G. Meynet, 135–225 (Cité page 8.)

Table des matières

Sommaire ix

1 De la formation stellaire aux modèles de vent de disques 3
I Les étapes de la formation stellaire et le phénomène d'éjection . . 4
II Problèmes ouverts 9
III Objectifs de cette thèse 13

2 Modele Magnétohydrodynamique de vent de disque 15
I Le modèle de vent de disque MHD 16
II Aspects multifluides 26

3 Processus radiatifs, chimie, photodissociation, grains et conditions initiales 35
I Champ de rayonnement stellaire, UV et X 37
II Propriétés des poussières 44
III Température des poussières 46
IV Processus chimiques 51
V Conditions initiales : abondances des espèces à la surface du disque d'accrétion 52
VI Composition chimique dans le vent de disque 61
VII Conclusion 77

4 Chauffage et refroidissement dans le modèle de vent de disque MHD 83
I Système d'équations résolues 84
II Termes de chauffage et de refroidissement 88
III Conclusion 101

5 Traitement détaillé des niveaux rotationnels moléculaires de CO et H_2O 103
I Niveaux d'énergie 105
II Peuplement des niveaux à l'ETL 109
III Formalisme de la probabilité d'échappement 114
IV Intensité locale J_{ul} dans l'approximation LVG 119
V Gradient de vitesse 3D dans la solution MHD 124
VI Résultats 130
VII Conclusion 147

6 Prédictions synthétiques de H_2 et comparaisons aux observations 153
I Prédictions synthétiques 154
II Prédictions, influence des paramètres libres 162
III Comparaison avec le jet moléculaire de DG Tau 171

IV Conclusion 175

7 Prédictions synthétiques de H_2O et comparaisons aux observations 177
I Prédictions dans le cas optiquement épais 179
II Prédictions et influence des paramètres libres 183
III Comparaison avec les observations H_2O avec Herschel 205
IV Conclusion 217

8 Prédictions synthétiques de CO et comparaisons aux observations 219
I Prédictions : influence des paramètres 220
II Comparaison avec les observations 231
III Conclusion 242

9 Conclusions et perspectives 243
I Bilan 244
II Perspectives 245

A Chimie 251
I Abondances chimiques initiales 252
II Réseau de réactions chimiques 254
III Le réseau chimique 257
IV Détails sur la chimie de H_2 263
V Effet photo-électrique sur les grains 266
VI Structure chimique dans le vent de disque 267
VII Température et spectre infrarouge local des poussières 270

B Transitions de H_2, H_2O et CO et densités critiques 271
I Transitions de H_2 272
II Transitions de H_2O 273
III Transitions de CO 274
IV Densité critique rotationnelle avec para-H_2 et ortho-H_2 pour CO . 276
V Densité critique rotationnelles avec H pour CO 277
VI Densité critique vibrationnelle de H pour CO 278
VII Densité critique vibrationnelle pour CO avec H_2 279
VIII Densité critique avec para-H_2 et ortho-H_2 pour H_2O 279

C Codes de calcul 281
I Code MAMOJ (MAgnetohydrodynamic MOlecular Jet) 282
II Détails des modèles effectués et conditions initiales 283
III Code JetMap 286
IV Ajustement de profils 287

Bibliographie 289

Bibliographie 289

Table des matières 305

Liste des figures 307

Index 312

INDEX 312

NOMENCLATURE 317

LISTE DES FIGURES

1.1 Séquence évolutive de la formation des étoiles de faible masse. 5
1.2 Jet moléculaire et flot moléculaire de HH211 6
1.3 Critère de distinction entre classes 0 et classes I. 7
1.4 Jets moléculaires, évolution 8
1.5 Largeur du jet 10
1.6 Les trois composantes du système d'accrétion éjection 11
1.7 Signature de rotation observée dans DG Tau 12

2.1 Géométrie du modèle de vent de disque MHD 16
2.2 Schéma d'une structure d'accrétion-éjection 17
2.3 Schéma d'une structure ligne d'écoulement I 19
2.4 Corrélation entre masse accrétée et masse éjectée 20
2.5 Ajustement du paramètre λ de la solution MHD sur les observations de DG Tau. 21
2.6 Comparaison entre le moment cinétique spécifique prédit pour les modèles de vent de disque et les observations de jets d'étoiles T Tauri 22
2.7 Géométrie globale de la solution MHD de vent de disque. 23
2.8 Variables physiques prescrites par la solution MHD dimensionnalisée pour une classe II. 24
2.9 Vitesse de dérive pour les modèle de classe 0, classe I 31

3.1 Colonnes d'accrétion sur l'étoile 38
3.2 Flux UV atténué classe 0 40
3.3 Flux UV atténué classe 1 40
3.4 Flux UV atténué classe 2 41
3.5 Extinction visuelle 41
3.6 ζ_X dans le jet, tous modèles, 2D 44
3.7 Densités de l'enveloppe pour le modèle DUSTY 48
3.8 Comparaison de la température des poussières avec DUSTY et Panoglou 2012. 50
3.9 Comparaison de la température du gaz avec DUSTY et Panoglou 2012. 51
3.10 Temps caractéristiques d'évaporation des glaces des grains, classe 0. . . 58
3.11 Etablissement des conditions chimiques initiales pour le modèle de référence de classe 0. 60
3.12 Abondances et températures initiales pour le modèle de classe 0 de référence 61
3.13 Abondances et températures initiales pour le modèle de classe II de référence 61
3.14 Détermination de la densité de colonne dans le jet 63

3.15 Impact de la discrétisation en r_0 pour une classe II. 66
3.16 Abondance H_2 le long des lignes d'écoulement 66
3.17 Temps caractéristiques pour une classe I à 1 AU. 67
3.18 Temps caractéristiques pour une classe II à 1 AU. 67
3.19 Temps caractéristiques pour une classe II à 0.2 AU. 68
3.20 Abondance CO le long des lignes d'écoulement 69
3.21 Temps caractéristiques de formation et de desxtruction de CO pour une classe I à 1 UA. 70
3.22 Temps caractéristiques de formation et de destruction de CO pour une classe II à 1 UA. 71
3.23 Densité de colonne de H_2 le long des lignes d'écoulement 71
3.24 Densité de colonne de CO le long des lignes d'écoulement 72
3.25 Température du gaz dans le jet, tous modèles, 2D 72
3.26 $T_{\rm kin}$ le long de la ligne d'écoulement à $r_0 = 1$ UA pour les 5 modèles. . 73
3.27 Fraction d'ionisationle long des lignes d'écoulement à 1 et 25 UA. . . . 73
3.28 $x(\mathrm{CO})$ du gaz dans le jet, tous modèles, 2D 75
3.29 $x(\mathrm{H_2O})$ du gaz dans le jet, tous modèles, 2D 75
3.30 Abondance de H_2O le long des lignes d'écoulement à 1 et 25 UA. . . . 76
3.31 Temps caractéristique de formation/destruction de H_2O, classe I. 77
3.32 $x(\mathrm{OH})$ du gaz dans le jet, tous modèles, 2D 78
3.33 $x(\mathrm{SiO})$ du gaz dans le jet, tous modèles, 2D 78
3.34 $x(\mathrm{NH_3})$ du gaz dans le jet, tous modèles, 2D 79

4.1 Chauffage et refroidissement pour le modèle de classe 0 de référence à 1 AU. 92
4.2 Chauffage et refroidissement pour le modèle de classe 0 de référence à 12.8 AU. 93
4.3 Rendement du processus de chauffage par les X 95
4.4 Termes de chauffage dû au rayonnement I 97
4.5 Termes de chauffage dû au rayonnement II 98
4.6 Termes de chauffage dû au rayonnement III 99

5.1 Spectre électromagnétique 106
5.2 Niveaux de CO 107
5.3 Niveaux de H_2O 109
5.4 Spectre atténué de l'étoile 120
5.5 Spectre local des poussières pour le modèle standard de classe 0. 122
5.6 Spectre local des poussières pour le modèle standard de classe 0. 123
5.7 Gradient de vitesse : Détermination de la vitesse en un autre point . . . 126
5.8 Vitesses dans la solution MHD 127
5.9 Gradient de vitesse 127
5.10 Probabilité d'échappement symétrique et moyenne 129
5.11 Probabilité d'échappement dépendant de la direction 131
5.12 Effet du pompage infrarouge sur les température d'excitation de H_2O. . 132
5.13 Effet du pompage infrarouge sur les température d'excitation de H_2O. . 132
5.14 Effet du pompage infrarouge sur les température d'excitation de H_2O, II. 134
5.15 Effet du pompage infrarouge sur les température d'excitation de H_2O, II. 134
5.16 Effet du pompage infrarouge sur les température d'excitation de CO. . . 135
5.17 Effet du pompage infrarouge sur les température d'excitation de CO. . . 135
5.18 Effet du pompage infrarouge sur les populations rotationelles de H_2O . 137

5.19 Effet du pompage infrarouge sur les probabilités d'échappement de H_2O 138
5.20 Effet du pompage infrarouge sur les émissivités de H_2O. 138
5.21 Effet du pompage infrarouge sur les émissivités de H_2O. 139
5.22 Population rotationnelle de CO, classe 0 et I 140
5.23 Population rotationnelle comparée à la distribution à l'ETL 141
5.24 Population rotationnelle de ortho-H_2O, classe 0 et I 142
5.25 Densité critique et température d'excitation de CO, classe 0 et I 143
5.26 Température d'excitation de CO, plusieurs raies, classe 0 et I 145
5.27 Densité critique et température d'excitation de H_2O, classe 0 et I 146
5.28 Emissivités dans un volume des raies de CO 148
5.29 Emissivités dans un volume des raies de H_2O 149

6.1 Projection du jet 156
6.2 Vue en coupe poloïdale du jet. 157
6.3 Vue en coupe poloïdale du jet, densité n_H. 158
6.4 Cube de données 159
6.5 Composantes du champ de vitesse dans le jet. 163
6.6 Forme du jet, lignes d'écoulement a différents r_0 164
6.7 Emissivité dans le jet pour la classe II dans les raies de H_2 165
6.8 Emissivité dans le jet pour la classe I dans les raies de H_2 165
6.9 Profils de H_2 1-0S1 PV-longitudinal. 166
6.10 Carte de brillance de H_2 0-0S(5) en fonction de l'inclinaison. 167
6.11 Diagramme PV de H_2 168
6.12 PV perpendiculaire de H_2 0-0S(5) et 1-0S(1) en fonction de l'inclinaison 169
6.13 Emissivité de H_2 0-0S5 et 1-0S1 pour les 5 modèles, à 1 et 25 AU. . . . 170
6.14 Jet atomique de DG Tau FeII 171
6.15 Diagrammes PV, comparaison avec DG Tau 172
6.16 Diagrammes PV pour différents rayons internes 173
6.17 Comparaison des vitesses prédites avec les observations DG Tau 174
6.18 Comparaison avec les observations dans la raie 1-0S1 pour DG Tau. . . 174
6.19 Comparaison avec les observations dans la raie 1-0S1 pour DG Tau, coupe à r=0. 175
6.20 Composantes de la vitesse barycentrique du fluide et de vitesse la vitesse de dérive. 176

7.1 Carte d'émissivité de o-H_2O $1_{10} - 1_{01}$, influence de la projection de β. . 184
7.2 Profils β symétrique sur assymétrique pour les trois angles d'inclinaison. 185
7.3 Profils β symétrique sur assymétrique pour les trois angles d'inclinaison II 185
7.4 Inclinaison et Lobe instrumental 185
7.5 PV en fonction de r_0^{max} pour o-H_2O 557 GHz. 187
7.6 Emissivité de H_2O le long des lignes d'écoulement. 187
7.7 Effet de r_0^{max} sur o-H_2O 557 GHz. 188
7.8 Effet de r_0^{max} sur o-H_2O 1153 GHz et 1097 GHz. 189
7.9 Effet de r_0^{max} sur p-H_2O 1113 GHz et 752 GHz. 189
7.10 Carte 2D de l'émissivité dans les raies de o-H_2O. 190
7.11 Profils de H_2O en fonction de z/r 191
7.12 Effet de r_0^{max} sur le TdV de o-H_2O 191
7.13 Effet de l'angle d'inclinaison sur les cartes de H_2O 193
7.14 Effet de l'angle d'inclinaison sur le PV de H_2O à 557 GHz 193
7.15 Effet de l'angle d'inclinaison sur H_2O 557 GHz et double profil. 194

7.16 Effet de l'angle d'inclinaison sur H_2O 1153 GHz et 1113 GHz 195
7.17 Effet de i sur la fwhm de o-H_2O 196
7.18 Effet du taux d'accrétion sur les raies de H_2O : cartes de brillance. . . . 197
7.19 Diagramme PV pour les différents taux d'accrétion. 198
7.20 Variation de l'émissivité dans la raie à 557 GHz avec $\dot{M}_{\rm acc}$ et $M_\star$ 199
7.21 Variation de l'émissivité dans la raie à 557 GHz avec $\dot{M}_{\rm acc}$ et $M_\star$ 199
7.22 Emissivité de H_2O à 1 UA pour les 5 modèles de jets, ici identifiés par leur valeur de τ_0. 200
7.23 Emissivité de H_2O et CO à 25 UA pour les 5 modèles de jets identifié par leur valeur de τ_0. 201
7.24 Spectres pour les 5 modèles à 557 GHz à $r_0^{\rm max} = 25$ UA pour les 3 angles. 202
7.25 Spectres pour les 5 modèles à 1153 GHz à $r_0^{\rm max} = 25$ UA pour les 3 angles. 202
7.26 Détails i et $r_0^{\rm max}$ pour le modèle de classe II $\dot{M}_{\rm acc} = 1\times10^{-7}\,{\rm M_\odot\ yr^{-1}}$. 203
7.27 Détails i et $r_0^{\rm max}$ pour le modèle de classe I $\dot{M}_{\rm acc} = 5\times10^{-6}\,{\rm M_\odot\ yr^{-1}}$ . . 203
7.28 Probabilité d'échappement pour H_2O pour les différents taux d'accrétion 204
7.29 Variation du $T{\rm d}V$ avec le taux d'accrétion à 557 GHz 205
7.30 TdV à 200 pc en fonction de nH à 1000 AU dans la raie à 557 GHz . . . 206
7.31 Comparaison du TdV ramené à 200 pc en fonction de la largeur de raie à 15 mK entre les observations et les modèles 207
7.32 Comparaison des profils observés et prédits dans la raie à 557 GHz pour les classes 0 et I. 208
7.33 Comparaison L1448-MM dans plusieurs raies. 212
7.34 Comparaison avec NGC1333. 214
7.35 Diagramme d'excitation de H_2O classe 0 216
7.36 Diagramme d'excitation de H_2O classe I 216
7.37 Diagramme d'excitation pour SMM1 216

8.1 Carte de brillance dans les raies 1-0 à 10-9 de CO. 221
8.2 Distribution de l'émissivité dans les raies de CO dans un jet de classe 0 221
8.3 Emissivité et population des niveaux rotationnels de CO 222
8.4 Effet de $r_0^{\rm max}$ sur les profils de CO 223
8.5 Effet de $r_0^{\rm max}$ sur l'intensité intégrée dans deux raies de CO 225
8.6 Effet de l'angle d'inclinaison sur les profils de CO 226
8.7 Effet de l'angle d'inclinaison sur l'intensité intégrée dans deux raies de CO 227
8.8 Effet de i sur la largeur à mi hauteur pour les transitions $J_u < 25$. 228
8.9 Raie CO 1-0 pour les différents modèles. 229
8.10 Raie CO 10-9 pour les différents modèles. 229
8.11 Emissivité de CO 1-0 et 10-9 pour les 5 modèles, à 1 et 25 AU. 230
8.12 Intensité intégrées de CO en fonction du taux d'accrétion. 230
8.13 Comparaison des cartes de brillances prédites et observée pour CB26 dans la raie CO 2-1 232
8.14 CB 26 Comparaison des PV transverses 232
8.15 CB 26 PV transverse pour un modèle de classe 0 233
8.16 CB 26 Comparaison des PV longitudinaux 234
8.17 CB 26 Comparaison des profils 234
8.18 NGC1333 comparaison aux observations dans les raies 2-1, 4-3, 6-5 et 10-9 236
8.19 Rapport de raie CO/H_2O pour IRAS 2A 237

8.20 Rapport de raie CO/H_2O pour IRAS 4A et 4B 238
8.21 Rapport CO 6-5 / 10-9 pour NGC1333 238
8.22 Comparaison avec les observations dans la raie 10-9 240
8.23 Température de rotation 241
8.24 Probabilité d'échappement dans les raies de CO 241

9.1 Proposal ALMA BHR71 CO 6-5 245
9.2 Vent de disque et vent stellaire 246

A.1 Abondances et températures initiales pour le modèle de classe 0 253
A.2 Abondances et températures initiales pour le modèle de classe I de référence 254
A.3 Abondances et températures initiales pour le modèle de classe I 254
A.4 Formation - destruction de H_2 263
A.5 Abondance finale de H_2 264
A.6 Abondance finale de CO 264
A.7 Abondance de H_2O dans les jets de classe 0 et I 267
A.8 Abondance de CO dans les jets de classe 0 et I 267
A.9 Abondance de H_2 dans les jets de classe 0 et I 268
A.10 Abondance de SiO dans les jets de classe 0 et I 268
A.11 Abondance de NH_3 dans les jets de classe 0 et I 269
A.12 Abondance de CH_4 dans les jets de classe 0 et I 269
A.13 Profil de température des poussières pour les différents modèles 270
A.14 Spectre IR local des poussières en fonction de τ_0 270

B.1 Premiers niveaux rotationnels de H_2 272
B.2 Premiers niveaux ro-vibrationnels de H_2 272

Index

Symbols

CO
- Abondance, 68
- Carte 2D, 73
- Carte de brillance, 214
- Densité de colonne, 69
- Destruction, 68
- Diagrammes d'excitation, 234
- Emissivité, 216
- Facteur d'écrantage, 61
- Formation, 68
- Intensité intégrée, 218, 221, 224
- Profil de raies, 218, 219
- Profils 1-0, 222
- Profils 10-9, 222
- Profils de raies, 231, 235
- Température d'excitation, 129, 234

H_2
- Abondance, 65
- Carte de brillance 0-0S(5), 163
- Carte de brillance 1-0S(1), 163, 170
- Densité de colonne, 62, 69
- Destruction, 66
- Diagramme position-vitesse 0-0S(5), 165
- Diagramme position-vitesse 1-0S(1), 165, 168
- Facteur d'écrantage, 61
- Formation, 66
- Prédictions synthétiques, 158

H_2
- Densité de colonne, 62

H_2O
- Bullets, 202
- Carte 2D, 73, 193
- Carte de brillance, 179, 187, 193
- Diagramme d'excitation, 210
- Diagramme position-vitesse, 182, 187, 193
- Emissivité, 133
- Intensité intégrée, 180, 186, 190, 199
- Populations rotationnelles, 133
- Prédictions synthétiques, 178
- Probabilité d'échappement, 181
- Profils $1_{10} - 1_{01}$, 183, 189
- Profils $1_{11} - 0_{00}$, 184, 189
- Profils $3_{12} - 2_{21}$, 184, 189
- Profils z/r, 185
- Profils de raies, 179, 183, 188, 198, 203, 207, 210
- TdV vs dv, 201
- Température d'excitation, 129, 210

Éjection magnétosphérique, 10

Équilibre statistique, 111

A

Abondance sur la ligne de visée, 63

Abondances élémentaires initiales, 51

Abondances chimique, 69

Adsorption, 52

Approximation de Sobolev, 112

Approximation LVG, 111

Aspects multifluides, 26

Auto-similarité, 16

Axisymétrique, 16

B

Balance détaillée, 111

Brillance de surface, 156

C

Carte 2D, 71, 153
- Abondance de CO, 73
- Abondance de NH_3, 76
- Abondance de OH, 76
- Abondance de SiO, 76
- Abondance de H_2O, 73
- Abondances chimiques, 73
- Ionisation, 72
- Température, 71

Carte de brillance, 156, 175, 214

Champ magnétique, 9, 17

Chauffage

Chimie, 97
Diffusion ambipolaire, 96
Effet Ohm, 96
Effet photoélectrique sur les grains, 93
MHD, 32, 96
Rayons cosmiques, 92
Rayons X, 92
Thermalisation avec les grains, 92
Chimie
Energie résiduelle, 98
Classe 0, 6
Classe I, 7
Classe II, 8, 167
Classe III, 8
CMB, 117
Coefficient d'émission, 109
Coefficient d'absorption, 109
Coeur dense, 4
Collimation (jet), 10
Collisions, 28
Électrons-neutres, 29
Grains-neutres, 29
Ions-neutres, 28
PAHs-neutres, 29
Conditions initiales, 58
Conservation
Energie, 85, 86
Masse, 84
Nombre de particules, 83, 84
Convolution, 157
Corps noir, 109, 117
Cube de données, 154, 155

D

Dérivée lagrangienne, 82
Désorption
Chimie explosive, 53
Directe par les X et rayons cosmiques, 53
Erosion des manteaux des grains, 52, 53
Induite par les rayons cosmiques, 53
Induite par les X, 53, 55
Photodésorption, 53, 54
Thermique, 53, 55
Dead zone, 12
Densité
Chute libre, 46
critique, 86
DUSTY, 47
Vent de disque, 47
Densité critique, 109, 110, 270, 273
vibrationnelle, 272, 273
Densité de colonne, 62, 64
Ancienne approximation, 62
Nouvelle évaluation, 62
DG Tau, 8, 10
Diagramme d'excitation, 176
Diagramme position vitesse, 176
Longitudinal, 156
Transverse, 156
Discrétisation en r_0, 64
Disque d'accrétion, 9, 11, 17
Disque d'acrrétion
épaisseur, 22
Disque protoplanétaire, 12
Distribution de poussières, 46
Draine
unité, 38
DUSTY, 46
Corps noirs, 46
Enveloppe, 46
Opacité totale, 48

E

Effet maser, 133
Effet photoélectrique sur les grains, 93, 260
Efficacité d'accrétion, 20
Electrons
Primaires, 92
Secondaires, 92
Enthalpie, 98
Enthalpie de réaction, 98
Enveloppe de poussières, 46
Equations MHD, 17
Conservation de l'énergie, 18
Conservation de la masse, 18
Conservation de la quantité de mouvement, 18
Induction, 18
Loi d'Ohm, 18
PFD, 28
Equilibre radiatif, 45
ETL, 106

F

Fonction de partition, 107
Rotationnelle, 107
Totale, 270

Vibrationnelle, 270
Fonction de Planck, 109
Fonction source, 109
Force de friction, 28
Formalisme de la probabilité d'échappement, 111
Fréquence de collision, 28
FWHM, 202

G

Gaussienne, 157
Gaz-grain
Adsorption, 52, 250
Désorption, 52, 250
Erosion, 250
Formation de H_2, 250
Gradient de vitesse, 115, 122
moyen, 123, 124

H

HH111, 7
HH211, 7
HH212, 7
Hors équilibre, 87

I

IMF, 4
Moment d'inertie, 104
Infrarouge
Étoile, 117
Poussières, 118
Intensité
Spécifique, 156, 174
TdV, 174
Intensité intégrée, 157, 176, 218, 221, 224
Intensité locale, 117
Intensité spécifique moyenne, 116

J

Jet
Collimation, 10
Jet atomique, 6, 167
jet moléculaire, 6
JetMap, 280

L

Lagrangien, 82
Largeur de raie, 202, 222
Liste des modèles, 26
Lobe gaussien, 176
Loi d'Ohm généralisée, 32, 96
LVG, approximation, 88

M

Magnétocentrifuge, 19, 167
MAMOJ, 276
MHD, 16, 27, 167
Modèles
Table des r_0, 80
Moment cinétique, 11
Moment dipolaire
CO, 88
H_2O, 88
MRI, 12
MRN, Distribution, 46, 94
Multifluide, 27

N

Niveau rotationnel
Constante de distorsion centrifuge, 105
Constante de rotation, 104
Energie, 104

O

Objets
Classe 0, 46
Classe I, 46
Classe II, 46
Observations H_2
DG Tau, 167
Observations H_2O
1097 GHz, 207
1113 GHz, 207
1153 GHz, 207
557 GHz, 201, 206, 207
752 GHz, 207
988 GHz, 207
B335, 203
BHR71, 203
Ced110, 203, 210
Classes 0, 201
Classes I, 206
Elias 29, 203
GSS30-IRS1, 203
HH100-IRS, 203
HH46-IRS, 203
I15398, 203, 210
IRAS12496, 210
L1157, 203
L1448-MM, 203, 207
L1489, 210
L1527, 203, 210
L1551-IRS5, 210

L483, 203
L723, 203
NGC1333-IRAS 2A, 203, 207
NGC1333-IRAS 3, 203
NGC1333-IRAS 4A, 203, 207
NGC1333-IRAS 4B, 203, 207
Oph-IRS3, 210
RCrA–IRS5A, 203, 210
RNO91, 210
Ser SMM1, 203
Ser SMM3, 203
SerSMM4, 203
TMC1, 210
TMC1A, 210
TMR1, 210
Observations CO
B335, 235
CB 26, 225
Ced110, 235
Classes 0, 235
Classes I, 235
Elias 29, 235
GSS30-IRS1, 235
HH46-IRS, 235
I15398, 235
IRAS12496, 235
L1157, 235
L1448-MM, 235
L1489, 235
L1527, 235
L1551-IRS5, 235
L483, 235
L723, 235
NGC1333-IRAS 2A, 229
NGC1333-IRAS 4A, 229
NGC1333-IRAS 4B, 229
Oph-IRS3, 235
RCrA–IRS5A, 235
RNO91, 235
Ser SMM1, 235
Ser SMM3, 235
SerSMM4, 235
TMC1, 235
TMC1A, 235
TMR1, 235
Oscillateur anharmonique, 269
Oscillateur harmonique, 269

P

P Cygni, 178, 208
PAH, 51, 94
Paramètre de turbulence, 22
Paramètres libres, 20
Peuplement des niveaux, 111
Photon secondaire, 55, 250
Photosphère des poussières, 48
Planck, 109
Pompage infrarouge, 118
Poussières, 43
Infrarouge, 264
Propriétés géométrique, 43
Propriétés optiques, 44
Température, 45, 46, 264
Pré-séquence principale, 8
Pré-stellaire, 4
Prédictions synthétiques, 280
Carte de brillance, 156, 175, 214
Diagramme d'excitation, 176
Diagramme position vitesse, 156, 176
Intensité intégrée, 157, 176, 218, 221, 224
Profils de raies, 157, 176, 218, 219, 222
PV longitudinal, 156, 227
PV transverse, 156, 227
Rapport de raies, 158, 229
Probabilité d'échappement, 112, 115, 174
isotrope, 124
moyennée exacte, 125
symétrique, 124
vers l'observateur, 125
Profil de raies, 157, 176, 218, 219, 222
Profil intégré, 176
Profondeur optique, 114
Profondeur optique de Sobolev, 88
Proto-stellaire, 4

R

Réaction chimique, 248
Association radiative, 250
Dissociation collisionnelle, 250
Echange de charges, 250
Formation de H_2, 250
Impact électronique, 250
Ionisation collisionnelle, 250
Phase gazeuse, 250
Photodissociation, 250
Photodissociation de CO, 61
Photodissociation de H_2, 60, 257
Photoionisation, 250

Photon secondaire, 250
Photoréaction, 250
Processus avec les PAHs et les grains, 250
Réaction induite par les X, 250
Réaction ion-neutre, 250
Réaction neutre-neutre, 250
Recombinaison dissociative, 250
Recombinaison radiative, 250
Temps caractéristique, 251
Réponse instrumentale, 157
Raie interdite, 167
Rayleigh-Jeans, approximation, 175
Rayon de Sublimation, 45
Rayon de sublimation, 45
Rayonnement X
Dissociation, 43
Electrons primaires, 41
Flux, 41
Ionisation, 43
Rayons cosmique, 41
Ionisation, 43
Refroidissement
CO, 88
H_2O, 88
^{13}CO, 89
Adiabatique, 85
Atomique, 91
Chimie, 97
Moléculaire, 87
Net, 89
Thermalisation avec les grains, 92
Rotateur rigide, 104
Rotation des jets, 12

S

SED, 6
Solution MHD, 16
Champ de vitesse, 158
Sources
DG Tau, 167
Stationnaire, 16
Structure d'accrétion-éjection magnétique, 17

T

Taux d'ionisation par les X, 43
Température
Poussières, 45, 46, 49
Température de brillance, 174
Température intégrée, 176
Temps
Caractéristique de réaction, 68, 69, 251
Dynamique, 251
Temps caractéristique, 251
Terme de
Chauffage, 85, 86
Refroidissement, 85, 86
Théorème
Leibnitz, 82
Reynolds, 82
Transfert de rayonnement, 46
Turbulence, 12, 17, 18, 22

U

Unités de Draine, 38

V

Vent de disque, 10
Vent stellaire, 10
Vitesse
Électrons, 32
Íons, 32
Ńeutres, 32
Centroïde, 169
Vitesse de dérive, 28, 30
Ions-électrons, 30
Ions-neutres, 30, 31
Vitesse radiale, 155

X

X-wind, 10

Z

Zone morte, 12

Nomenclature

α_m	Paramètre de turbulence MHD
UA	Unité astronomique, 1 AU = 1.496×10^{13} cm
$\beta(\vec{u})$	Probabilité d'échappement vers l'observateur (assymétrique)
$\beta(\vec{u})$	probabilité d'échappement asymétrique (dépend de la direction)
β_s	Probabilité d'échappement isotrope ou symétrique
β_{ul}	Probabilité d'échappement du photon dans la raie $u \rightarrow l$.
χ	Rapport du flux UV dans le modèle sur le Flux de Draine
ϵ	Rapport d'aspect du disque d'accrétion
Γ	Terme de chauffage en erg cm^{-3} s^{-1}
$\Gamma_{\rm drag}$	Terme de chauffage par diffusion ambipolaire
Γ_Ω	Terme de chauffage par effet Ohm
$\Gamma_{\rm MHD}$	Terme de chauffage MHD
$L_{\rm acc}$	Luminosité d'accrétion
Λ	Terme de refroidissement en erg cm^{-3} s^{-1}
λ	Solution de vent de disque : paramètre de bras de levier magnétique
$\Lambda_{\rm net}({\rm CO})$	Terme de refroidissement net par CO calculé sur le bilan des collisions
$\Lambda_{\rm net}({\rm H_2O})$	Terme de refroidissement net par H_2O calculé sur le bilan des collisions
$\Lambda_{\rm H_2}$	Terme de refroidissement par H_2
$L_\star$	Luminosité de l'étoile
$\dot{M}_{\rm acc}$	Taux d'accrétion
$\mathcal{N}_{\rm H}$	Densité de colonne de noyaux d'hydrogène
$\mathcal{N}_X$	Densité de colonne de l'espèce X
$\mathcal{N}_{\rm H_2}$	Densité de colonne de H_2
$M_\star$	Masse de l'étoile
$\mu_{\rm CO}$	0.110 Debyes, moment dipolaire de CO
$\mu_{\rm H_2O}$	1.855 Debyes, moment dipolaire de H_2O
$n_{\rm H}$	Densité numérique de noyaux d'hydrogènes en cm^{-3}
$R_{\rm sub}$	Rayon de sublimation des poussières
$R_{\rm sub}$	Rayon de sublimation
σ_B	Constante de Stefan-Boltzman
σ_B	Constante de Stefan-Boltzmann (7.566×10^{-15} erg cm^{-3} K^{-4})
τ_0	Opacité totale (paramètre DUSTY)
$T_{\rm hs}$	Température des choc d'accrétion (10 000 K)
ξ	Efficacité d'accrétion, paramètre libre de la solution de vent de disque
$\zeta_{\rm CR}$	taux d'ionisation total par les rayons cosmiques
ζ_X	taux d'ionisation total par les X
A_{ul}	Probabilité d'émission radiative (s^{-1}) depuis le niveau u vers le niveau l
$B_\nu(T)$	Fonction de Planck
C_{lu}	Probabilité d'excitation collisionnelle $l \rightarrow u$
C_{ul}	Probabilité de désexcitation collisionnelle $u \rightarrow l$
F_ν	Flux de rayonnement non atténué de l'étoile
$F_{{\rm hs},\nu}(R)$	Flux non atténué issus des choc d'accrétion sur l'étoile, à la distance R
$F_{{\rm hs},\nu}(R,\theta)$	Flux non atténué issus de l'étoile, à la distance R sous un angle θ
$g_{\rm hs}$	Fraction de la surface de l'étoile couverte par le choc d'accrétion
$L_{\rm bol}$	Luminosité bolométrique
$L_{\rm sub}$	Luminosité millimétrique
$n(X)$	Densité de l'espèce X
$n_{\rm crit}$	Densité critique

n_d Densité numérique de grains en cm^{-3}

Q_ν Efficacité d'aborsption des poussières à la fréquence ν

Q_{abs} Efficacité d'absorption des poussières

Q_{em} Efficacité d'émission des poussières

r_0 Rayon d'ancrage des lignes d'écoulement

$T_{\rm bol}$ Température bolométrique

T_d Température des poussières (dust)

T_g, $T_{\rm kin}$, T_n Température du gaz, température cinétique, température des neutres

ul Pour une transition u désigne le niveau supérieur (départ) et l le niveau inférieur (arrivée). Dans le cas d'un transition radiative, $E_u > E_l$.

$x(X)$ Abondance fractionnelle de l'espèce X

APEX Atacama Pathfinder EXperiment

CMB Cosmologic Microwave Background, fond diffus cosmologique

CMB Cosmologic Microwave Background

erg par eV $1.602 \times 10^{-12}\,\mathrm{erg\,eV^{-1}}$

ETL Équilibre Thermodynamique Local

FCRAO Five College Radio Astronomy Observatory (14 m)

FWHM Full Width at Half Maximum, Largeur à mi-hauteur

HIFI Heterodyne Instrument for the Far-Infrared

IAP Institut d'Astrophysique de Paris

IAS Institut d'Astrophysique de Spatiale

IMF Initial Mass Function

IRAM Institut de Radio-Astronomie Millimétrique

JCMT James Clerk Maxwell Telescope

K par $\mathrm{cm^{-1}}$ $1\,\mathrm{cm^{-1}} = 1.42879\,\mathrm{K}$

LAB Laboratoire d'Astrophysique de Grenoble

LERMA Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique

LSR Local standard of rest, Centre local des vitesses

LVG Large Velocity Gradient : formalisme de la probabilité d'échappement

MAES Magnetized Accretion Ejection Structures (SMAE)

MHD Magnétohydrodynamique

MRI Magneto Rotational Instability

MRN Mathis, Rumpl and Nordsieck

PAH Polycyclic aromatic hydrocarbon (Hydrocarbure Aromatique Polycyclique)

PDR Photon Dominated Regions

PMS Pre Main Sequence (star)

PV Diagramme Position Vitesse

SED Spectral Energy Distribution

SMAE Structures Magnétisées d'Accrétion Éjection (MAES)

TTS T-Tauri Star

WTTS Weak T-Tauri Star

XDR X-ray Dominated region

YSO Young Stellar Object : proto-étoile ou étoile jeune.

ZAMS Zero Age Main Sequence

Yvart Walter ;Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie, spécialité Astrophysique ; Imprimée à l'Observatoire de Paris ; à Paris/Meudon, le 6 novembre 2013. Ce document a été préparé à l'aide du logiciel de composition typographique LaTeX 2εdont le style de ce document est basé sur le style original de J. Chiquet. Les figures ont été préparées à l'aide du logiciel graphique Gnuplot et du logiciel astronomique GILDAS/GREG (181 figures). La bibliographie a été effectuée avec l'aide de ADS, NASA's Astrophysics Data System (244 entrées bibliographiques).

Université Pierre et Marie Curie

LERMA
Observatoire de Paris

Walter Yvart

Signatures moléculaires dans les vents de disque MHD des proto-étoiles de faible masse

Titre

Signatures moléculaires dans les vents de disque MHD des proto-étoiles de faible masse

Résumé

Le phénomène de jet apparaît couplé à l'accrétion, son rôle et son impact dans le contexte de la formation stellaire et planétaire restent des questions majeures. Nous explorons la possibilité que les jets moléculaires soient issus de vents de disque magnétocentrifuges contenant des grains, et possibilité qu'ils puissent expliquer les composantes larges observées dans les raies H_2O avec Herschel/HIFI, ainsi que les observations à haute résolution au VLT. Notre modèle inclut : 1) Une solution MHD auto-similaire de vent de disque. 2) Une chimie ionisée hors équilibre le long des lignes d'écoulement. 3) Un chauffage dominé par la diffusion ambipolaire et une irradiation du gaz par les rayonnements X et UV de l'étoile. 4) Un auto-écrantage de H_2 et de CO calculé globalement. 5) Les niveaux ro-vibrationnels et le transfert radiatif associé de H_2, CO et H_2O calculés hors équilibre. 6) Le pompage infrarouge des niveaux de CO et H_2O par les poussières. 7) La projection de la probabilité d'échappement des photons non-isotrope sur la ligne de visée. Pour la première fois, un modèle dynamique de vent de disque permet de faire des prédictions synthétiques dans les raies moléculaires qui sont directement comparables aux observations de proto-étoiles. Nous proposons un outil puissant ouvert aux observations avec ALMA et le VTL.

Mots-clés

Vent de disque, molécules, formation stellaire, jets, grains, H_2O, transfert radiatif, Prédictions synthétiques

Title

MHD Disk wind molecular signatures from young low mass stellar objects

Abstract

The origin of protostellar jets, and their role in extracting angular momentum from the accreting system, remain major open questions in star formation research. We explore the possibility that molecular jets may trace dusty magneto-hydrodynamic (MHD) centrifugal disk winds, the possibility they explain the broad component observed with Herschel in H_2O lines and the high angular resolution observations of molecular jets. Our model includes : 1) A self-similar MHD-solution that fits the atomic observations of DG Tau. 2) A non-equilibrium thermo-chemical and ionization gas evolution along streamlines with a network of 134 species. 3) Heating by ambipolar diffusion, irradiation by coronal X-rays and far UV photons from the accretion shock. 4) Non-local self-shielding of H_2 and CO. 5) Non equilibrium integration of 40 rovibrational levels of H_2, 40 rotational levels of CO, and 80 rotational levels of H_2O under the escape probability formalism. 6) water and CO IR-pumping by the dust radiation field and dust thermal profile both calculated using DUSTY. 7) Projection of the anisotropic escape probability along observer's direction. In this unprecedented work, for the first time a dynamical disk wind model is able to make synthetic predictions in molecular lines of Class 0 to class 2 jet for comparison with observations. We build a powerful tool that could be used with ALMA and VLT observations.

Keywords

Disk winds, molecules, star formation, jets, dusts, H_2O, radiative transfert, synthetic predictions