



HAL
open science

Chimie à la surface des grains dans les disques protoplanétaires

Laura Reboussin

► **To cite this version:**

Laura Reboussin. Chimie à la surface des grains dans les disques protoplanétaires. Astrophysique [astro-ph]. Université de Bordeaux, 2015. Français. NNT : 2015BORD0164 . tel-01239233

HAL Id: tel-01239233

<https://theses.hal.science/tel-01239233>

Submitted on 7 Dec 2015

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

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

THÈSE PRÉSENTÉE
POUR OBTENIR LE GRADE DE
DOCTEUR DE
L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX

ÉCOLE DOCTORALE : SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR
SPÉCIALITÉ : ASTROPHYSIQUE

Par Laura REBOUSSIN

**CHIMIE À LA SURFACE DES GRAINS
DANS LES DISQUES PROTOPLANÉTAIRES**

Sous la direction de : Stéphane GUILLOTEAU
(co-directrice : Valentine WAKELAM)

Soutenue le 25 Septembre 2015

Membres du jury :

Jean-Marc HURÉ, Professeur, LAB - Bordeaux, Président
Tristan GUILLOT, Directeur de recherches, OCA - Nice, Rapporteur
Franck LE PETIT, Astronome, LERMA - Observatoire de Paris, Rapporteur
Thomas HENNING, Professeur, MPA - Heidelberg, Examineur
Sébastien MARET, Chargé de recherches, IPAG - Grenoble, Examineur
Charlotte VASTEL, Astronome adjoint, IRAP - Toulouse, Examinatrice

Résumé

La formation des planètes a lieu dans les disques protoplanétaires constitués de gaz et de poussières. Si ces dernières ne représentent que 1% de la masse totale du disque, elles jouent un rôle fondamental pour l'évolution chimique des disques en agissant comme catalyseurs pour la formation des molécules. Comprendre cette chimie est essentiel pour remonter aux conditions physiques initiales qui ont permis la naissance des planètes.

Au cours de ma thèse, j'ai étudié la chimie à la surface des grains de poussières et son impact sur l'évolution chimique du nuage moléculaire, condition initiale de la formation du disque, et du disque protoplanétaire. Grâce à des simulations numériques, à l'aide du code de chimie gaz-grain Nautilus, j'ai pu montrer l'importance des réactions de diffusion et des interactions gaz-grain pour les abondances des espèces en phase gazeuse. Les résultats du modèle couplés aux observations ont également mis en évidence les effets de la structure physique (température, densité, A_V) sur la distribution des molécules dans les disques.

Mots-clés : Astrochimie – Disques protoplanétaires – Simulation numérique – Nuage moléculaire – Observations

Abstract

Planetary formation occurs in the protoplanetary disks of gas and dust. Although dust represents only 1% of the total disk mass, it plays a fundamental role in disk chemical evolution since it acts as a catalyst for the formation of molecules. Understanding this chemistry is therefore essential to determine the initial conditions from which planets form.

During my thesis, I studied grain-surface chemistry and its impact on the chemical evolution of molecular cloud, initial condition for disk formation, and protoplanetary disk. Thanks to numerical simulations, using the gas-grain code Nautilus, I showed the importance of diffusion reactions and gas-grain interactions for the abundances of gas-phase species. Model results combined with observations also showed the effects of the physical structure (in temperature, density, A_V) on the molecular distribution in disks.

Keywords : Astrochemistry – Protoplanetary disks – Numerical simulation – Molecular cloud – Observations

Title : Grain surface chemistry in protoplanetary disks

Unité de recherche

Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (LAB – UMR 5804)
2, rue de l'Observatoire
33271 Floirac Cedex FRANCE

Remerciements

Ces trois années de thèse auront été pour moi une riche expérience et je tiens à remercier ceux qui l'ont partagée avec moi.

En premier lieu, un grand merci à mes directeurs de thèse, Stéphane Guilloteau et Valentine Wakelam, pour la confiance qu'ils m'ont accordée. Je leur suis très reconnaissante pour leur grande disponibilité et leur aide précieuse qui m'ont permis d'accomplir ce travail.

Je voudrais remercier Franck Le Petit et Tristan Guillot pour avoir accepté d'évaluer mon travail et d'en être rapporteurs. Je tiens à remercier Jean-Marc Huré d'avoir accepté d'être président du jury ainsi que les autres membres du jury pour avoir assisté à la présentation de ma thèse, Charlotte Vastel, Sébastien Maret et Thomas Henning.

Je souhaite également remercier les autres membres de l'équipe : Anne Dutrey, Emmanuel Di Folco, Franck Hersant, Jessica, Pierre, Liton, Maxime et Benjamin, ainsi que les autres membres du laboratoire pour leur accueil chaleureux.

Merci à mes proches, en particulier David pour son soutien sans limites. Pour finir, je tiens à remercier chaleureusement ma famille et surtout mes parents pour m'avoir soutenue et supportée tout au long du chemin qui m'a mené au doctorat.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	L’Astronomie : de ses origines à nos jours	2
1.2	La formation des étoiles de faible masse	2
1.2.1	La phase pré-stellaire	4
1.2.2	La phase proto-stellaire	4
	La proto-étoile de Classe 0.	4
	La proto-étoile de Classe I.	4
1.2.3	La phase pré-séquence principale	4
	Les étoiles de Classe II.	4
	Les étoiles de Classe III.	5
1.3	Les disques protoplanétaires	5
1.4	Objectifs scientifiques du travail de thèse	5
2	Modélisation de la chimie gaz-grain : Nautilus	9
2.1	Modéliser l’évolution chimique	10
2.2	Réactions en phase gazeuse	10
2.2.1	Dissociation et ionisation par les rayons cosmiques	12
2.2.2	Photodissociation et ionisation par les rayons ultra-violets	13
2.3	Interactions gaz-grain	13
2.3.1	Adsorption des molécules	13
2.3.2	Désorption des molécules	14
	2.3.2.1 Désorption thermique	14
	2.3.2.2 Désorption non thermique	15
2.4	Réactions à la surface des grains	16
2.4.1	Diffusion thermique : “thermal hopping”	16
2.4.2	Diffusion par effet tunnel	17
2.4.3	Diffusion induite par les rayons cosmiques	17
2.5	Chimie de surface dans les nuages moléculaires : étude de deux nouveaux processus de diffusion	19
2.5.1	La formation des molécules organiques complexes	19
2.5.2	Paramètres du modèle	19
2.5.3	La diffusion par effet tunnel	21
2.5.4	La diffusion induite par les rayons cosmiques : CRID	23

2.5.5	Conclusions	26
3	Les disques protoplanétaires	29
3.1	Modèle physique des disques protoplanétaires	30
3.1.1	La distribution verticale de la matière	30
3.1.2	La distribution radiale de la matière	30
3.1.3	La viscosité dans les disques	31
3.1.3.1	L'instabilité magnéto-rotationnelle	31
3.1.3.2	Sources d'ionisation et zone morte	32
3.1.4	Le profil de température	32
3.1.5	Le structure chimique en trois couches	34
3.2	L'évolution des disques et la formation des planètes	35
3.2.1	Le temps de vie d'un disque	35
3.2.2	La formation des planètes	35
3.3	Observation des disques : émission des raies de rotation moléculaire	38
3.3.1	Intensité spécifique et équation de transfert radiatif	38
3.3.2	Population des niveaux : équation de l'équilibre statistique	38
3.3.3	Approximation de l'Equilibre Thermodynamique Local (ETL)	39
3.3.4	Approximation de la probabilité d'échappement	41
3.4	Modélisation des disques protoplanétaires avec le code Nautilus	41
3.4.1	La densité volumique	41
3.4.2	La hauteur d'échelle	42
3.4.3	La densité de surface	42
3.4.4	La température	42
3.4.5	L'extinction visuelle	43
3.4.6	Le flux UV	43
3.4.7	Le "self-shielding" de H ₂ et CO	43
3.4.7.1	Photodissociation de H ₂	43
3.4.7.2	Photodissociation de CO	44
4	Le réservoir de carbone et le rapport CO/H₂ dans les disques protoplanétaires	45
4.1	Comment tracer la masse des disques ?	46
4.1.1	L'émission thermique des poussières	47
4.1.2	L'émission des raies de CO	47
4.2	Modélisation de la chimie des disques	48
4.3	L'abondance de CO dans les disques protoplanétaires	50
4.4	La chimie du carbone dans les disques : importance des réactions à la surface des grains	52
4.4.1	La position dans le disque	54
4.4.2	L'âge du disque	54
4.4.3	La Photodésorption	56
4.4.4	Le taux de désorption induite par les particules du rayonnement cosmique	57

4.5	L'impact des conditions initiales sur la chimie du carbone : le nuage moléculaire	58
4.6	La diffusion sur les surfaces pour expliquer les faibles rapports CO/H ₂ observés	62
5	La chimie de CN : observations et modélisation	65
5.1	Les fenêtres d'observations astronomiques	66
5.2	Observations des disques à différentes longueurs d'onde	67
5.3	La radioastronomie	68
5.3.1	Observer avec un radiotélescope	68
5.3.1.1	Principe de fonctionnement	68
5.3.1.2	La réponse directionnelle de l'antenne	69
5.3.1.3	Le radiotélescope de 30 m de l'IRAM	70
5.4	Environnement et propriétés stellaires : quel impact pour l'évolution des disques protoplanétaires ?	72
	Le nuage du Taureau	72
	Le nuage de Rho Ophiuchi	72
	Echantillons de sources et observations.	72
5.5	Taureau et Rho Ophiuchi : deux régions aux propriétés différentes	75
5.5.1	L'estimateur de Kaplan-Meier	75
5.5.2	Exemple d'utilisation de l'estimateur Kaplan et Meier sur l'échantillon de sources observées dans la région du Taureau.	76
5.6	Quelles sont les causes de ces différences ?	78
5.6.1	Des propriétés stellaires différentes ?	78
5.6.2	Des disques plus petits ?	79
5.6.3	Une chimie différente ?	80
6	Etude de la chimie des molécules azotées dans les disques	85
6.1	Pourquoi étudier ces molécules ?	86
6.2	La chimie des molécules azotées	87
6.2.1	Sensibilité à la température et au champ UV	87
6.2.2	Le rapport CN/HCN	91
6.2.3	Le rapport HCN/HNC	92
6.3	Observations dans trois disques protoplanétaires	93
6.3.1	Echantillon de sources	95
	DM Tau	95
	LkCa 15	95
	MWC 480	95
6.3.2	Comparaison avec le modèle chimique	96
6.4	Conclusions	100
7	Conclusions	103
7.1	Outils d'investigation	104
	La modélisation numérique	104
	L'observation	104

7.2	Sujet d'investigation : la chimie de surface	104
7.2.1	Le nuage moléculaire.	105
7.2.2	Le disque protoplanétaire.	105
	La chimie du carbone.	105
	La chimie de l'azote.	106
A	Publications	107
A.1	Grain-surface reactions in molecular clouds : the effect of cosmic rays and quantum tunnelling	107
A.2	Chemistry in protoplanetary disks : the gas-phase CO/H ₂ ratio and the carbon reservoir	119
A.3	Sensitive survey for ¹³ CO, CN, H ₂ CO, and SO in the disks of T Tauri and Herbig Ae stars	
	II. Stars in ρ Ophiuchi and upper Scorpius	131
	Bibliographie	149

1

Introduction

Sommaire

1.1	L’Astronomie : de ses origines à nos jours	2
1.2	La formation des étoiles de faible masse	2
1.2.1	La phase pré-stellaire	4
1.2.2	La phase proto-stellaire	4
	La proto-étoile de Classe 0.	4
	La proto-étoile de Classe I.	4
1.2.3	La phase pré-séquence principale	4
	Les étoiles de Classe II.	4
	Les étoiles de Classe III.	5
1.3	Les disques protoplanétaires	5
1.4	Objectifs scientifiques du travail de thèse	5

1.1 L’Astronomie : de ses origines à nos jours

L’astronomie est peut-être la plus ancienne des sciences, vieille de plusieurs milliers d’années, son origine remonte au-delà de l’antiquité, comme semble l’indiquer de nombreuses découvertes archéologiques datant de l’âge du bronze et du Néolithique. Si pour les Anciens, astronomie et astrologie étaient étroitement liées, le siècle des Lumières a vu naître le développement de l’astronomie moderne : la distinction était désormais faite.

Dès l’Antiquité, des observateurs avaient remarqué l’existence de points lumineux se déplaçant sur la voûte céleste : les planètes qui signifie “astres errants”. Ces astres étaient supposés en rotation autour de la Terre selon la théorie géocentrique d’Aristote (384-322 av. J.C.) et de Claude Ptolémée (90-168). L’astronome et mathématicien grec Aristarque de Samos (310-230 av. J.C.) fut le premier à proposer un modèle héliocentrique de l’Univers. Cette théorie sera développée plus tard par Copernic (1473-1543). Le développement de la lunette par Galilée (1564-1642) lui permit l’observation des cratères de la Lune, des satellites de Jupiter mais aussi la mise en évidence des phases de Vénus renforçant sa vision Copernicienne de l’Univers. A la même époque, Johannes Kepler (1571-1630), après analyse des nombreuses observations de Tycho Brahe (1546-1601), énonça que les planètes tournent autour du Soleil en suivant des orbites elliptiques. Le XVII^e siècle fut quant à lui marqué par le développement de l’astronomie moderne notamment grâce aux mathématiques. Ainsi, les travaux de mécanique de Newton (1643-1727) lui permettent de découvrir la loi de la gravitation universelle. Kant (1724-1804) et Laplace (1749-1827) ont quant à eux proposé, après avoir remarqué que les orbites des planètes étaient regroupées dans un même plan (plan écliptique), un modèle semblable de formation des planètes au sein d’un disque issu de la contraction d’une nébuleuse.

Plus récemment, Joy (1945) confirma cette théorie nébulaire grâce à la découverte d’une classe d’étoiles jeunes, appelées T Tauri, présentant des raies en émission, de fortes variations de luminosité, et une connexion avec des nébuleuses. Mendoza V. (1966) remarqua un excès infrarouge dû à la présence d’une enveloppe circumstellaire froide. Par la suite, le satellite IRAS (Infrared Astronomical Satellite) permettra l’observation de la distribution spectrale d’énergie de nombreuses étoiles. Les excès infrarouges ainsi observés permettront la classification des étoiles en trois classes (I, II et III) par Lada (1987). Andre et al. (1993), proposeront ultérieurement une classe 0.

1.2 La formation des étoiles de faible masse

Les étoiles se forment par effondrement gravitationnel d’un nuage de gaz et de poussières suite à une perturbation (onde de choc produite par l’explosion d’une supernova par exemple). La formation des étoiles de faible masse ($M_* < 8M_\odot$) se divise en trois principales phases : la phase pré-stellaire, la phase proto-stellaire et la phase pré-séquence principale. La figure 1.1 illustre ces différentes phases. Les objets associés à chacune de ces trois phases sont respectivement, les coeurs pré-stellaires, les proto-étoiles (de Classe 0 et I) et les étoiles pré-séquence principale (de Classe II et III).

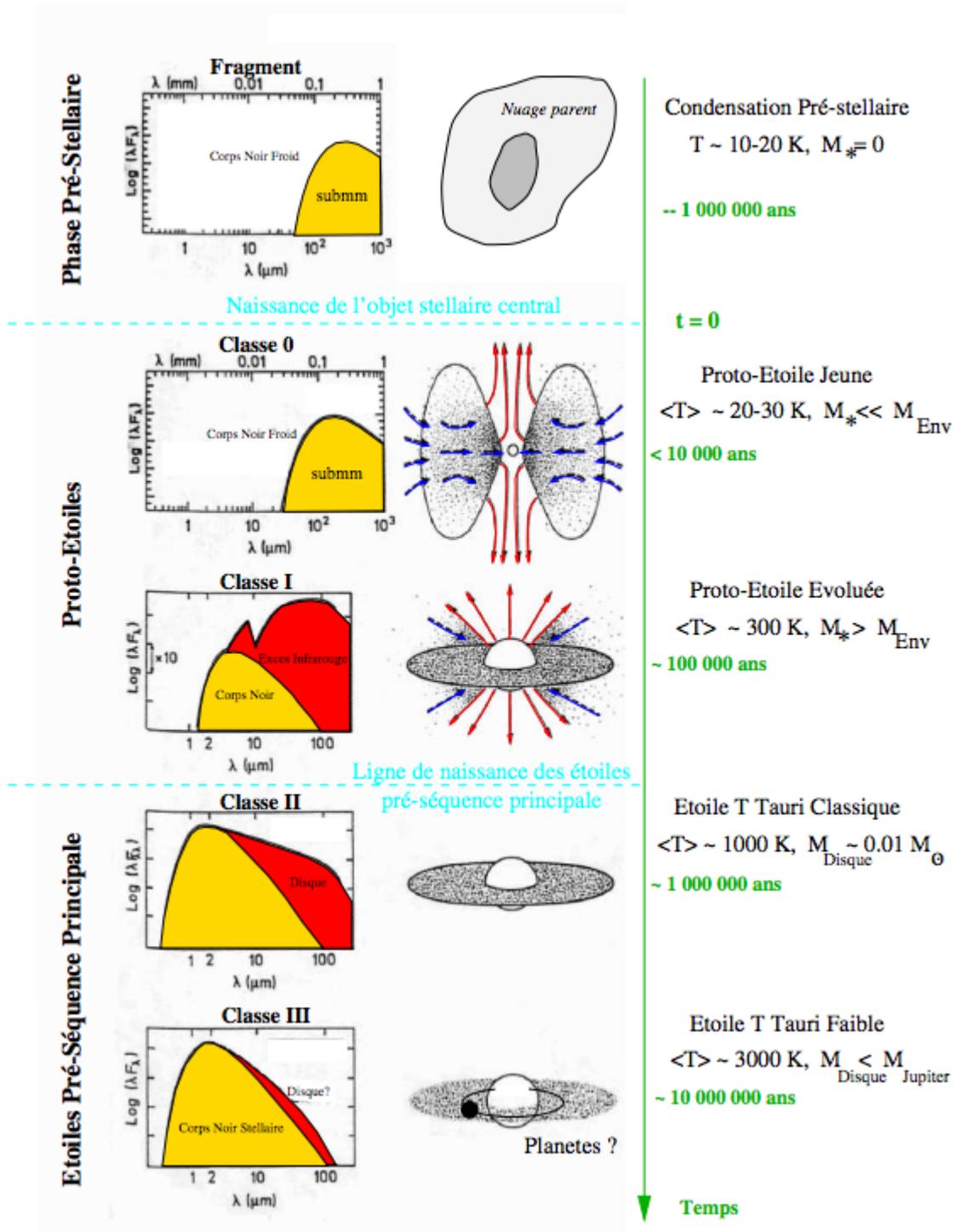


FIGURE 1.1 – Les différentes phases de la formation des étoiles de faible masse (André, 2002). A gauche sont représentées les distributions d'énergie spectrale pour chaque étape. La colonne centrale montre la forme du système. A droite sont indiquées les caractéristiques du système (âge, température, masse).

1.2.1 La phase pré-stellaire

Les étoiles se forment par la fragmentation d'un nuage moléculaire en des coeurs pré-stellaires, qui lorsqu'ils deviennent gravitationnellement instables s'effondrent sur eux-mêmes : la phase pré-stellaire commence. Le premier effondrement gravitationnel est isotherme : l'énergie libérée par la compression du gaz est évacuée sous forme de rayonnement thermique par la poussière. La densité augmente rapidement au centre, lorsqu'elle atteint $\sim 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, un premier coeur, dit "premier coeur de Larson", optiquement épais et en équilibre hydrostatique se forme ($R \sim 5 \text{ UA}$, $T \sim 1000 \text{ K}$ et $M \sim 0.01 M_{\odot}$) (Larson, 1969). Ce premier coeur continue d'accréter de la matière et lorsque sa température atteint $\sim 2000 \text{ K}$, la réaction de dissociation du dihydrogène, très endothermique, entraîne l'effondrement rapide du premier coeur qui aboutit à la formation d'une proto-étoile en équilibre hydrostatique, appelée "second coeur de Larson". Le début de la phase proto-stellaire (à $t = 0$ sur la figure 1.1) est associé à la formation de cette proto-étoile.

1.2.2 La phase proto-stellaire

Les coeurs proto-stellaires résultent de l'effondrement des coeurs pré-stellaires. La phase proto-stellaire est la phase principale d'accrétion pendant laquelle la proto-étoile accrete la matière provenant de son enveloppe en effondrement. On distingue deux classes d'objets pour la phase proto-stellaire : les jeunes proto-étoiles de Classe 0 et les proto-étoiles plus évoluées de Classe I.

La proto-étoile de Classe 0. L'enveloppe est massive ($M_* < M_{\text{env}}$, Andre et al., 1993). L'objet stellaire, âgé d'environ 10^4 ans, accrete efficacement la matière et cette phase d'accrétion s'accompagne d'une éjection de matière sous forme de puissants jets/flots bipolaires (Bachiller, 1996).

La proto-étoile de Classe I. Ces objets sont plus évolués (quelques 10^5 ans), la proto-étoile a déjà accreté une grande partie de la masse qui était contenue dans son enveloppe de sorte que $M_* > M_{\text{env}}$. L'étoile est entourée d'un disque circumstellaire (formé par conservation du moment cinétique lors de l'effondrement) et d'une enveloppe circumstellaire diffuse. Des flots bipolaires sont toujours observables mais ceux-ci sont moins énergétiques et moins collimatés (Bontemps et al., 1996).

1.2.3 La phase pré-séquence principale

Cette phase est également constituée de deux classes d'objets : les étoiles de Classe II et les étoiles de Classe III.

Les étoiles de Classe II. Ces objets sont appelés étoiles de type T Tauri classiques (CTTS pour Classical T Tauri Star) (ou de Herbig si leur masse est comprise entre 2 et $8 M_{\odot}$) et sont

âgés d'environ 10^6 ans. L'étoile a quasiment sa masse finale et son enveloppe est presque entièrement dissipée. Elle est entourée d'un disque massif optiquement épais dit "protoplanétaire" composé de gaz et de poussières, à partir duquel elle accrete un peu de matière.

Les étoiles de Classe III. Ces étoiles T Tauri de faible émission (WTTS pour Weak T Tauri Star) sont âgées de 10^6 à 10^7 ans. Il n'y a plus d'accrétion ou d'éjection de matière et les raies d'émission sont étroites. Ces objets sont entourés d'un disque de débris optiquement mince. La proto-étoile commence à amorcer la fusion de son deutérium lorsque la température centrale atteint 10^6 K. Elle continue de se contracter augmentant encore sa température interne jusqu'à atteindre 10^7 K. A cette température, la réaction de fusion de l'hydrogène commence, donnant naissance à une étoile qui atteint la séquence principale.

1.3 Les disques protoplanétaires

Les disques, dits "protoplanétaires", sont donc issus de la naissance d'une étoile et sont le siège de la formation des planètes. Grâce à l'essor de l'astronomie millimétrique et submillimétrique dans les années 1990, ces disques ont pu être détectés (Beckwith et al., 1990) puis imagés (Dutrey et al., 1994). Il est également possible d'étudier leur structure physique et chimique grâce à l'émission des raies de rotation moléculaire. La molécule la plus abondante, H_2 , étant difficilement observable, d'autres molécules sont utilisées comme traceurs indirects tel que le monoxyde de carbone CO, la molécule la plus abondante après le dihydrogène. Plusieurs molécules ont également été observées dans les disques protoplanétaires : ^{13}CO , $C^{18}O$, CN, HCN, HNC, CS, HCO^+ , C_2H , H_2CO , DCO^+ , N_2H^+ , DCN, H_2O , ou encore HC_3N (Dutrey et al., 1997; van Dishoeck et al., 2003; Dutrey et al., 2007; Qi et al., 2008; Hogerheijde et al., 2011; Öberg et al., 2012; Chapillon et al., 2012a).

Les disques sont composés de gaz et de poussières. Si les grains de poussières ne représentent que 1% de la masse totale du disque, ce sont des composants primordiaux des planètes qui se forment par agglomération de ces derniers. La poussière joue un rôle important pour la chimie du disque en agissant comme un catalyseur pour la formation de molécules. De plus, en absorbant et réémettant le champ UV interstellaire et de l'étoile, elle contrôle également la température du disque et par conséquent sa structure. Les grains de poussières vont donc influencer l'évolution chimique au sein du disque. Mon travail de thèse consiste à étudier cet impact.

1.4 Objectifs scientifiques du travail de thèse

Comprendre l'évolution chimique de la matière dans le disque et notamment les processus qui ont lieu à la surface des grains est essentiel pour contraindre les mécanismes menant à la formation des planètes.

- Quelle est l'importance de la chimie à la surface des grains ?

- Comment la structure du disque (température, densité) influence son évolution chimique ?

Je me suis principalement intéressée à ces questions au cours de ma thèse. Pour y répondre, j'ai modélisé l'évolution chimique dans les nuages moléculaires et les disques protoplanétaires à l'aide du code de chimie gaz-grain Nautilus. J'ai ainsi évalué l'effet des paramètres du modèle sur la répartition des molécules dans le disque et plus particulièrement étudié la chimie à la surface des grains de poussières. J'ai aussi effectué des observations avec le radiotélescope de 30 mètres de l'IRAM situé au Pico Veleta. J'ai ainsi pu observer plusieurs molécules au sein de disques protoplanétaires et comparer ces observations avec les résultats prédits par le modèle.

Organisation du manuscrit

Dans le chapitre 2, je décris dans un premier temps le code de chimie gaz-grain Nautilus et notamment la modélisation des différents processus : en phase gazeuse, à la surface des grains et les interactions gaz-grain. Je présente ensuite ma première principale étude qui porte sur deux processus de diffusion à la surface des grains : diffusion par effet tunnel pour les espèces H, H₂ et O et diffusion induite par les rayons cosmiques, et leur impact sur la chimie des nuages moléculaires et notamment sur la formation des molécules organiques complexes.

Le chapitre 3 présente une description des disques protoplanétaires, notamment leur structure physique, évolution et observation. A la fin de ce chapitre, la paramétrisation utilisée dans le modèle Nautilus pour simuler l'évolution chimique de ces disques est décrite.

Le chapitre 4 présente ma deuxième principale étude : l'évolution chimique du carbone dans les disques protoplanétaires et plus particulièrement le rapport CO/H₂. Les observations ont montré un rapport CO/H₂ dans les disques plus faible que celui observé dans le milieu interstellaire (de l'ordre de 10⁻⁴), suggérant une chimie différente pour le monoxyde de carbone aux fortes densités rencontrées au sein des disques protoplanétaires. La chimie de surface étant beaucoup plus active pour les milieux denses, je me suis intéressée à la diffusion à la surface des grains et à son impact sur la chimie du carbone. J'ai ainsi modélisé l'évolution chimique du carbone en fonction de la température du disque, un paramètre clé qui contrôle le temps de diffusion à la surface des grains et par conséquent l'efficacité des réactions. Les résultats ont montré que la température du disque et principalement celle des grains de poussières joue un rôle fondamental pour la chimie des espèces carbonées.

Dans le chapitre 5, je présente les résultats de ma troisième principale étude qui porte sur la chimie de la molécule CN. Ce travail combine à la fois observations et modélisation. Au cours de ma thèse, j'ai effectué des observations de la région de formation stellaire Rho Ophiuchi avec le radiotélescope de 30 m de l'IRAM. J'ai ainsi pu comparer ces observations avec celles menées précédemment dans le nuage du Taureau, une région de formation stellaire aux propriétés différentes. Le but de ce travail est de montrer l'impact des propriétés stellaires et environnantes sur la composition chimique du disque.

Le chapitre 6 aborde ma dernière principale étude : la chimie des molécules azotées dans les disques protoplanétaires, principalement HCN et son isomère HNC. Ces deux molécules, qui ont été observées dans des sources variées (nuages moléculaires, nuages diffus, PDRs ou encore disques protoplanétaires), sont très sensibles à la température et au champ UV et servent donc de traceurs de leur environnements. J'ai réalisé plusieurs modèles avec différentes conditions initiales afin de tester l'influence des paramètres du disque sur les principaux porteurs d'azote. Ces résultats, confrontés aux observations, ont pour objectif de déterminer certaines propriétés des disques observés.

Enfin, je résume les résultats de mes travaux dans la conclusion au chapitre 7.

2

Modélisation de la chimie gaz-grain : Nautilus

Sommaire

2.1	Modéliser l'évolution chimique	10
2.2	Réactions en phase gazeuse	10
2.2.1	Dissociation et ionisation par les rayons cosmiques	12
2.2.2	Photodissociation et ionisation par les rayons ultra-violets	13
2.3	Interactions gaz-grain	13
2.3.1	Adsorption des molécules	13
2.3.2	Désorption des molécules	14
2.3.2.1	Désorption thermique	14
2.3.2.2	Désorption non thermique	15
2.4	Réactions à la surface des grains	16
2.4.1	Diffusion thermique : "thermal hopping"	16
2.4.2	Diffusion par effet tunnel	17
2.4.3	Diffusion induite par les rayons cosmiques	17
2.5	Chimie de surface dans les nuages moléculaires : étude de deux nouveaux processus de diffusion	19
2.5.1	La formation des molécules organiques complexes	19
2.5.2	Paramètres du modèle	19
2.5.3	La diffusion par effet tunnel	21
2.5.4	La diffusion induite par les rayons cosmiques : CRID	23
2.5.5	Conclusions	26

2.1 Modéliser l'évolution chimique

Le modèle Nautilus simule l'évolution chimique des espèces en phase gazeuse et à la surface des grains qui réagissent entre elles. Le modèle calcule les variations d'abondances de ces espèces en fonction du temps t selon le système d'équations différentielles suivant qui traduit leur formation et destruction :

$$\frac{dn_i(t)}{dt} = \sum_l \sum_j (k_{lj} n_l(t) n_j(t)) - n_i(t) \sum_j (k_{ij} n_j(t)) - k_{\text{ads},i} n_i(t) n_{\text{gr}} + (k_{\text{evap},i} + k_{\text{crd},i}) n_i^s(t), \quad (2.1)$$

$$\frac{dn_i^s(t)}{dt} = \sum_l \sum_j (k_{lj}^s n_l^s(t) n_j^s(t)) - n_i^s(t) \sum_j (k_{ij}^s n_j^s(t)) + k_{\text{ads},i} n_i(t) n_{\text{gr}} - (k_{\text{evap},i} + k_{\text{crd},i}) n_i^s(t), \quad (2.2)$$

où n_i et n_i^s sont les densités (cm^{-3}) de l'espèce i dans le gaz et à la surface du grain. n_{gr} est la densité de grains (cm^{-3}). k_{lj} et k_{ij} sont les constantes de vitesse pour les réactions entre les espèces l et j et les espèces i et j pour la phase gazeuse (k_{ij}^s et k_{ij}^s sont les constantes de vitesse pour les réactions à la surface des grains). $k_{\text{ads},i}$ est le taux d'adsorption de l'espèce i à la surface du grain. $k_{\text{evap},i}$ et $k_{\text{crd},i}$ sont les taux de désorption thermique et non thermique de l'espèce i . Tous ces paramètres seront définis dans les sections qui suivent.

Les espèces réagissent entre elles à travers un réseau de réactions. Le réseau chimique que j'ai utilisé comporte 8624 réactions : 6844 réactions en phase gazeuse et 1780 réactions d'interactions gaz-grain et réactions de surface. Le modèle suit l'évolution chimique de 703 espèces (atomes, radicaux, ions et molécules) : 504 espèces gazeuses et 199 espèces de surfaceⁱ. Ce réseau est disponible sur la base de données KIDA (KInetic Database for Astrochemistry)ⁱⁱ. Nautilus prend en compte en phase gazeuse, les réactions bimoléculaires, les dissociations et l'ionisation induites par les rayons cosmiques, par les photons UV secondaires (induits par l'interaction de H_2 avec les particules du rayonnement cosmique) et le rayonnement UV ambiant. Les différents types de réactions de la phase gazeuse sont listées dans la Table 2.1. Les interactions gaz-grain considérées sont l'adsorption, la désorption thermique et non-thermique. Enfin, à la surface des grains, les réactions de diffusion et de dissociations induites par les photons UV et les photons UV secondaires sont prises en compte (Semenov et al., 2010). Une description détaillée de ces différents processus est présentée dans la suite de ce chapitre.

2.2 Réactions en phase gazeuse

Seules les réactions unimoléculaires (telles que les réactions de dissociation et d'ionisation) et bimoléculaires sont prises en compte dans le modèle, les réactions à trois corps étant inefficaces pour les densités considérées ici (inférieures à 10^8 cm^{-3}). Le bilan d'une réaction pour

i. J'ai effectué une mise à jour du réseau en phase gazeuse au début de ma thèse : 19 espèces gazeuses et 377 réactions en phase gazeuse (chaînes carbonées et azotées) ont été ajoutées au réseau de 2011 basées sur Wakelam et al. (2013) et (Loison et al., 2014a,b).

ii. <http://kida.obs.u-bordeaux1.fr/models/>

TABLE 2.1 – Les différents types de réactions en phase gazeuse.

Photodissociation	$AB + h\nu \rightarrow A + B$
Photoionisation	$A + h\nu \rightarrow A^+ + e^-$
Réactions induites par les rayons cosmiques :	
- dissociation	$AB + CR \rightarrow A + B$
- ionisation	$A + CR \rightarrow A^+ + e^-$
Neutre-neutre	$A + B \rightarrow C + D$
Ion-neutre	$A^+ + B \rightarrow C^+ + D$
Transfert de charge	$A^+ + B \rightarrow A + B^+$
Association radiative	$A + B \rightarrow AB + h\nu$
Recombinaison électronique dissociative	$A^+ + e^- \rightarrow C + D$
Détachement associatif	$A^- + B \rightarrow AB + e^-$

la chimie en phase gazeuse s'écrit alors :



A et B sont les réactifs, C et D sont les produits et ν_A , ν_B , ν_C et ν_D sont les coefficients stoechiométriques de la réaction. La vitesse de la réaction représente le nombre de réactions par unité de temps et de volume et a pour expression :

$$v = -\frac{1}{\nu_A} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{\nu_B} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{\nu_C} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{\nu_D} \frac{d[D]}{dt} \quad (2.4)$$

avec $[i]$ la concentration de l'espèce i . La réaction entre les deux corps est dite "élémentaire" si elle se produit en une seule étape et sa vitesse de réaction s'écrit alors :

$$v = k[A][B] \quad (2.5)$$

avec k la constante de vitesse, qui dépend de la réaction et de la température. Les variations de k en fonction de la température T ont été étudiées expérimentalement pour un grand nombre de réactions chimiques. La constante de vitesse k est ainsi reliée à la température T par la loi empirique :

$$k = \alpha \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (2.6)$$

que l'on appelle loi d'Arrhenius. $R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ est la constante des gaz parfaits. Le terme pré-exponentiel α est déterminé expérimentalement et rend compte de la fréquence des collisions. Toutes les collisions entre les deux espèces A et B ne donnent pas forcément lieu à une réaction. Pour que la collision soit efficace, il faut que les deux réactifs aient une orientation favorable afin que leur nuages électroniques se recouvrent. Ce facteur d'orientation est contenu dans le terme α de la loi d'Arrhenius. E_a est quant à elle l'énergie d'activation de la réaction, c'est-à-dire l'énergie nécessaire pour que la réaction puisse avoir lieu. Seules

les collisions mettant en jeu une énergie cinétique supérieure à la barrière de potentiel de la réaction sont efficaces. Les réactions avec barrière d'activation peuvent être endothermique ou exothermique (voir figure 2.1).

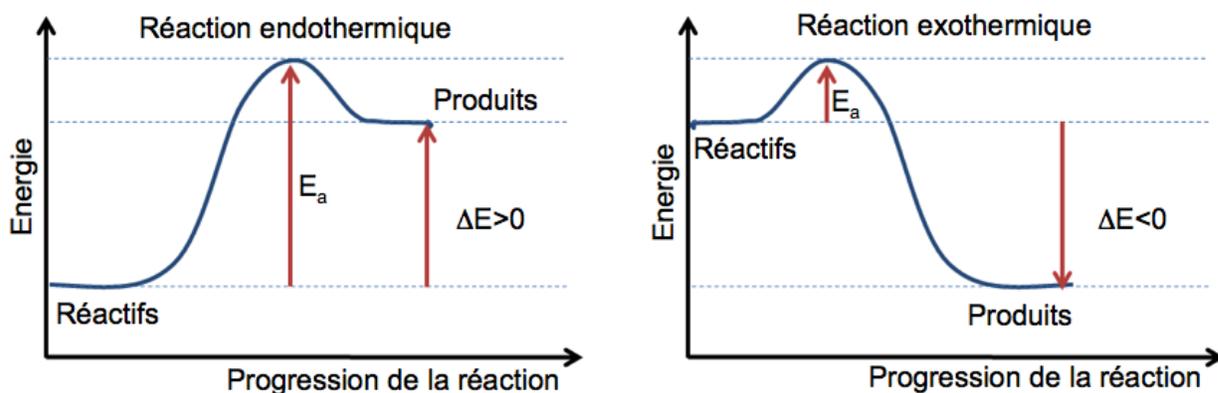


FIGURE 2.1 – Diagrammes énergétique d’une réaction élémentaire avec barrière d’activation. Cette dernière représente la barrière d’énergie à franchir pour que la réaction puisse avoir lieu. La réaction est dite endothermique si l’énergie des produits est supérieure à l’énergie des réactifs (la réaction reçoit de l’énergie) ou exothermique si l’énergie des produits est inférieure à celle des réactifs (la réaction libère de l’énergie). Si toutes les réactions endothermiques possèdent une barrière d’activation, il existe en revanche des réactions exothermiques sans barrière d’activation.

Les expériences ont montré que pour un grand nombre de réactions étudiées, la dépendance de la constante de vitesse k avec la température est correctement paramétrée par l’équation d’Arrhenius. Cependant, certaines réactions présentent un comportement plus complexe pour certaines gammes de température, on utilise alors une loi plus générale appelée loi d’Arrhenius-Kooij :

$$k = \alpha \left(\frac{T}{300} \right)^\beta \exp \left(\frac{-E_a}{RT} \right) \quad (2.7)$$

Nautilus prend également en compte les dissociations et l’ionisation induites par les rayons cosmiques et le rayonnement UV (voir Table 2.1).

2.2.1 Dissociation et ionisation par les rayons cosmiques

Il en existe de deux sortes : les réactions induites par une collision directe et les réactions dues aux photons UV créés par l’excitation collisionnelle de H_2 par les rayons cosmiques (Prasad and Tarafdar, 1983).

Dans les deux cas, le taux de dissociation ou d’ionisation d’une espèce induite par les

particules du rayonnement cosmiqueⁱⁱⁱ a pour expression :

$$k_{\text{CR}} = \alpha \zeta_{\text{CR}} \quad (2.8)$$

où ζ_{CR} est le taux d'ionisation par les rayons cosmiques que nous prenons égal à $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ (Spitzer and Tomasko, 1968) dans le modèle.

2.2.2 Photodissociation et ionisation par les rayons ultra-violets

Le taux d'ionisation ou de photodissociation par interaction avec le champ UV ambiantⁱⁱⁱ s'écrit :

$$k_{\text{UV}} = \alpha \exp(-E_a A_V) \chi \quad (2.9)$$

où A_V est l'extinction visuelle due à la poussière et χ est le rapport du flux UV dans le modèle sur le flux UV interstellaire de Draine (1978).

2.3 Interactions gaz-grain

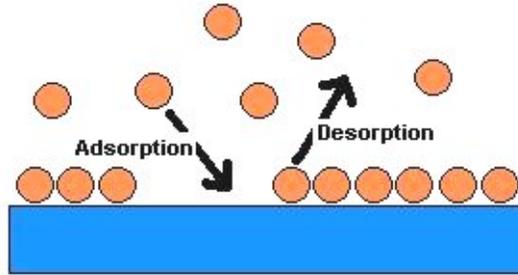


FIGURE 2.2 – Les espèces chimiques de la phase gazeuse peuvent se coller à la surface des grains de poussières (adsorption) et repartir en phase gazeuse (désorption).

2.3.1 Adsorption des molécules

Le taux d'adsorption d'une espèce i représente le nombre de molécules adsorbées par unité de temps et de volume et a pour expression (Hasegawa et al., 1992) :

$$R_{\text{ads}} = \sigma_{\text{gr}} \langle v(i) \rangle n_{\text{gr}} n(i) P_{\text{ads}}, \quad (2.10)$$

où $\sigma_{\text{gr}}(r_{\text{gr}}) = \pi r_{\text{gr}}^2$ est la section efficace géométrique d'un grain supposé sphérique de rayon $r_{\text{gr}} = 0.1 \mu\text{m}$ dans le modèle. $\langle v(i) \rangle$ est la vitesse thermique du gaz, $n(i)$ la densité de l'espèce i en phase gazeuse et n_{gr} la densité des grains (cm^{-3}) :

$$n_{\text{gr}} = \frac{\rho_{\text{d}}}{\rho_{\text{g}}} \times \frac{3m_{\text{H}}n_{\text{H}}}{4\pi r_{\text{gr}}^3 \rho_{\text{gr}}} \quad (2.11)$$

iii. Les taux k_{CR} et k_{UV} sont calculés de la même façon que dans le gaz pour les espèces de surface.

avec $\rho_d = \frac{4}{3}\pi r_{\text{gr}}^3 \times \rho_{\text{gr}} \times n_{\text{gr}}$ la densité globale de la poussière et $\rho_g = m_{\text{H}}n_{\text{H}}$ la densité globale du gaz. Le rapport $\frac{\rho_d}{\rho_g}$ représente la fraction en masse de poussières par rapport au gaz et vaut 10^{-2} dans notre modèle. m_{H} est la masse de l'atome d'hydrogène (en grammes), $n_{\text{H}} = n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2)$ est la densité de noyaux d'hydrogène (cm^{-3}) et ρ_{gr} la densité volumique du grain égale à 3 g.cm^{-3} . P_{ads} est la probabilité de collage de la molécule comprise entre 0 (pas d'adsorption) et 1 (toutes les collisions entre un grain et une espèce neutre de la phase gazeuse résulte en l'adsorption de l'espèce). La probabilité d'adsorption d'une espèce dépend de plusieurs paramètres tels que la composition et la structure des grains ou encore la température du gaz et des grains. Aux faibles températures rencontrées dans le milieu interstellaire, P_{acc} est proche de l'unité (D'Hendecourt et al., 1985), l'énergie cinétique de l'espèce en phase gazeuse étant bien plus faible que son énergie d'adsorption.

Deux types d'adsorption peuvent avoir lieu selon la nature des liaisons entre l'espèce adsorbée et la surface. L'adsorption physique (physisorption) implique des énergies de liaison faibles de type van der Waals de l'ordre de 0.01-0.2 eV. En revanche, l'adsorption chimique (chimisorption) met en jeu des énergies de liaison plus importantes de l'ordre de l'électron-volt. Les sites de chimisorption sont rapidement recouverts d'une couche de glace sur laquelle les espèces vont être physisorbées (Tielens, 2005). Les interactions gaz-grain sont donc dominées par la physisorption, c'est pourquoi seul ce mécanisme d'adsorption est considéré dans notre modèle.

2.3.2 Désorption des molécules

L'agitation thermique du milieu peut entraîner l'évaporation des espèces collées à la surface du grain (désorption thermique). Le retour en phase gazeuse des espèces dépend de la température des grains de poussières T_{gr} . Dans notre modèle on considère que les grains sont couplés au gaz en raison de leur petite taille ($0.1 \mu\text{m}$). Une désorption non thermique peut aussi être induite lorsque le grain est brusquement chauffé par son interaction avec les rayons cosmiques ou en raison de l'exothermicité des réactions de surface.

2.3.2.1 Désorption thermique

Le taux d'évaporation thermique d'une espèce i représente le nombre d'espèces désorbées par seconde et a pour expression :

$$k_{\text{evap}}(i) = \nu_0(i) \exp\left(-\frac{E_{\text{D}}(i)}{T_{\text{gr}}}\right), \quad (2.12)$$

où $E_{\text{D}}(i)$ est l'énergie d'adsorption de l'espèce i sur le grain, exprimée en Kelvin et $\nu_0(i)$ est la fréquence de vibration de l'espèce i et peut s'écrire :

$$\nu_0(i) = \sqrt{\frac{2n_{\text{s}}E_{\text{D}}(i)}{\pi^2 m(i)}}, \quad (2.13)$$

où n_{s} est la densité de surface totale des sites sur les grains ($\sim 1.5 \times 10^{15}$ sites par cm^2 pour des grains de $0.1 \mu\text{m}$, Hasegawa et al., 1992) et $m(i)$ est la masse de l'espèce adsorbée en grammes.

2.3.2.2 Désorption non thermique

Désorption induite par les particules du rayonnement cosmique.

Dans notre modèle, les grains sont couplés au gaz et ont donc la même température que ce dernier. Cependant, le rayonnement cosmique peut chauffer ponctuellement le grain jusqu'à 70 K (Leger et al., 1985) et induire l'évaporation de certaines espèces. Le taux d'évaporation non thermique d'une espèce i (en s^{-1}) est calculé selon la méthode de Hasegawa and Herbst (1993) :

$$k_{\text{crd}} = f(70 \text{ K})k_{\text{evap}}(i, T_{\text{gr}} = 70 \text{ K}). \quad (2.14)$$

où $k_{\text{evap}}(i, T_{\text{gr}} = 70 \text{ K})$ est le taux de désorption thermique de l'espèce i pour une température de grain de 70 K (équation 2.12). $f(70 \text{ K})$ est la fraction de temps que passe le grain à 70 K, définie comme le rapport du temps de refroidissement via la désorption des molécules ($\sim 10^{-5}$ s) sur la durée entre deux chauffages consécutifs à 70 K. Celle-ci est estimée à $\sim 10^6$ ans par Leger et al. (1985) pour un taux d'ionisation dans le milieu interstellaire de $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$. $f(70 \text{ K})$ s'exprime alors comme :

$$f(70 \text{ K}) = \left(\frac{\zeta_{\text{CR}}}{1.3 \times 10^{-17}} \right) 3.16 \times 10^{-19}. \quad (2.15)$$

Désorption via l'exothermicité des réactions de surface

Pour chaque réaction entre deux espèces à la surface du grain aboutissant à la formation d'un seul produit, l'énergie libérée lors de la formation de la molécule peut conduire à sa désorption. La probabilité de désorption selon la théorie de Rice-Ramsperger-Kessel (RRK) (Holbrook et al., 1996) s'écrit :

$$P = \left[1 - \frac{E_{\text{D}}}{E_{\text{reac}}} \right]^{3N-6}, \quad (2.16)$$

où E_{D} est l'énergie de désorption de la molécule produite, E_{reac} est l'énergie libérée lors de la réaction de formation et N ($N \geq 2$) est le nombre d'atomes que contient la molécule produite lors de la réaction.

La fraction f de réactions pour lesquelles la désorption du produit a lieu est donnée par (Garrod et al., 2007) :

$$f = \frac{\nu P}{\nu_s + \nu P} = \frac{cP}{1 + cP}, \quad (2.17)$$

où $c = \nu/\nu_s$ est le rapport entre l'énergie de liaison de la molécule à la surface et l'énergie dissipée dans le grain. Bien que peu contrainte, la valeur de c varie essentiellement entre 0 (pas de désorption chimique) et ~ 0.1 (grande efficacité de désorption). Cependant, une étude expérimentale (Minissale and Dulieu, 2014) du mécanisme de désorption chimique dans le cas de l'oxygène (étude des réactions $\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2$ et $\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}_3$) a montré que l'efficacité de désorption est très sensible à la couverture de surface et décroît lorsque celle-ci augmente. Nous considérons donc dans notre modèle que seules 1% des espèces formées désorbent chimiquement ($c = 0.01$, Garrod et al., 2007).

2.4 Réactions à la surface des grains

Seul le mécanisme de Langmuir-Hinshelwood est considéré dans notre modèle : une espèce est adsorbée à la surface du grain avant de pouvoir réagir avec une autre espèce adsorbée. La surface du grain de poussières va alors jouer le rôle de catalyseur. Les grains, constitués de silicates amorphes, sont considérés comme des particules sphériques de rayon $0.1 \mu\text{m}$. Lorsqu'une espèce est adsorbée à la surface du grain, elle se trouve sur un site d'adsorption. Pour diffuser vers un site voisin, l'espèce doit passer une barrière de potentiel E_b , exprimée en Kelvin, et définie comme une fraction de E_D pour chaque espèce. Bien qu'incertaine, cette fraction est généralement considérée entre 0.3 (Watson, 1976; Hasegawa et al., 1992) et 0.77 (Ruffle and Herbst, 2000). Nous prenons 0.5 comme valeur par défaut.

Le taux de réaction de surface (en s^{-1}) par diffusion entre une espèce i et une espèce j est le suivant :

$$k_{ij} = \kappa_{ij} (R_{\text{diff},i} + R_{\text{diff},j}) \frac{1}{n_{\text{gr}}} \quad (2.18)$$

où R_{diff} est le taux de diffusion défini comme l'inverse du temps de diffusion t_{diff} et κ_{ij} est la probabilité de réaction entre les deux espèces i et j . Pour une réaction exothermique sans barrière d'activation E_a , cette probabilité vaut 1. Dans le cas d'une réaction avec barrière d'activation (voir figure 2.1), elle a pour expression :

$$\kappa_{ij} = \alpha \exp\left(-\frac{E_a}{T_{\text{gr}}}\right), \quad (2.19)$$

avec α le rapport de branchement de la réaction. Dans certains cas, la diffusion des espèces par effet tunnel peut accroître cette probabilité qui est alors approximée par :

$$\kappa_{ij} = \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2\mu_{ij}E_a}\right), \quad (2.20)$$

où a est l'épaisseur de la barrière ($\sim 1 \text{ \AA}$) et \hbar la constante de Planck réduite. $\mu_{ij} = \frac{m^{(i)}m^{(j)}}{m^{(i)}+m^{(j)}}$ est la masse réduite des espèces i et j . Dans le cas standard, seule la diffusion par effet tunnel de l'hydrogène et du dihydrogène est considérée.

Deux mécanismes de diffusion sont considérés dans notre modèle : la diffusion thermique classique et la diffusion quantique par effet tunnel.

2.4.1 Diffusion thermique : “thermal hopping”

Pour réagir à la surface du grain de poussières, les espèces doivent être mobiles. L'échelle de temps pour une espèce adsorbée i pour diffuser d'un site à un autre site s'écrit :

$$t_{\text{hop}}(i) = \nu_0(i)^{-1} \exp\left(\frac{E_b(i)}{T_{\text{gr}}}\right). \quad (2.21)$$

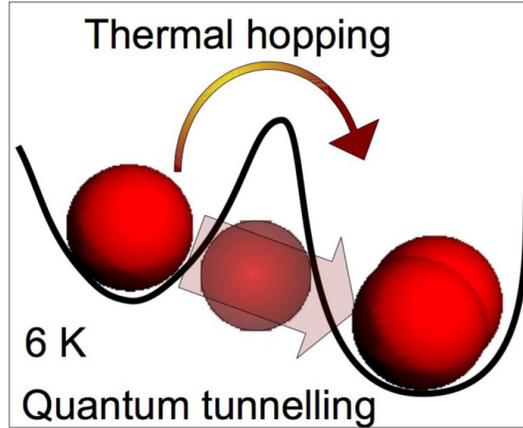


FIGURE 2.3 – Mécanismes de diffusion de surface : une espèce qui diffuse par thermal hopping doit “sauter” par dessus la barrière de potentiel tandis que lors de la diffusion par effet tunnel, l’espèce doit passer à travers la barrière pour rejoindre le site d’adsorption voisin. Crédit : (Minissale et al., 2013).

Le temps de diffusion thermique, qui représente le temps nécessaire pour que l’espèce adsorbée visite le nombre total de sites N_S présents à la surface du grain, a pour expression :

$$t_{\text{diff}}(i) = N_S t_{\text{hop}}(i). \quad (2.22)$$

2.4.2 Diffusion par effet tunnel

La diffusion thermique nécessite une énergie suffisante pour que l’espèce adsorbée puisse passer la barrière de potentiel qui “sépare” deux sites voisins. La diffusion par effet tunnel peut donc s’avérer plus efficace pour certaines espèces, notamment les plus légères comme l’hydrogène atomique et moléculaire (Hasegawa et al., 1992). L’échelle de temps de diffusion par effet tunnel s’écrit :

$$t_{\text{tun}}(i) = \nu_0(i)^{-1} \exp\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(i)E_b(i)}\right). \quad (2.23)$$

De façon analogue à la diffusion thermique, le temps de diffusion quantique est défini comme $t_{\text{diff}}(i) = N_S t_{\text{tun}}(i)$.

La diffusion par effet tunnel pour les espèces H et H₂ est déjà incluse dans Nautilus. Dans le cadre de ma thèse, j’ai étudié son effet couplé à la diffusion par effet tunnel pour l’atome d’oxygène. Les résultats sont présentés dans la section 2.5.3.

2.4.3 Diffusion induite par les rayons cosmiques

Le temps de diffusion des particules à la surface d’un grain de poussières dépend de la température de ce dernier. Plus le grain est chaud, plus la mobilité des espèces à sa surface

est grande (voir équation 2.21). La collision entre les particules du rayonnement cosmique et le grain permet de chauffer celui-ci jusqu'à 70 K pendant la fraction de temps $f(70\text{ K})$ (voir section 2.3.2.2). Ce chauffage stochastique des grains diminue le temps de diffusion des espèces à la surface du grain. L'échelle de temps pour une espèce adsorbée i pour migrer d'un site à un site voisin sur un grain chauffé à 70 K s'écrit :

$$t_{\text{hop}(\text{CR})}(i) = \nu_0(i)^{-1} \exp\left(\frac{E_b(i)}{T_{\text{CR}}}\right), \quad (2.24)$$

où T_{CR} est la température temporaire du grain après chauffage par les rayons cosmiques.

Le taux de réaction de surface, par diffusion induite par les rayons cosmiques, entre une espèce i et une espèce j a pour expression :

$$R_{ij} = f(70\text{ K})\kappa_{ij(70\text{ K})} (R_{\text{diff},i} + R_{\text{diff},j}) N_i N_j n_{\text{gr}}, \quad (2.25)$$

avec $R_{\text{diff}} = (N_S t_{\text{hop}(\text{CR})})^{-1}$ le taux de diffusion pour un grain chauffé à 70 K.

J'ai ajouté ce mécanisme de diffusion thermique "boostée" par les rayons cosmiques (que j'appellerai CRID (pour Cosmic Ray Induced Diffusion) dans la suite de ce chapitre) et étudié son impact sur la chimie dans les nuages moléculaires. Les résultats sont présentés dans la section 2.5.4.

2.5 Chimie de surface dans les nuages moléculaires : étude de deux nouveaux processus de diffusion

2.5.1 La formation des molécules organiques complexes

Les Molécules Organiques Complexes (COMs) ont été détectées dans les régions de formation d'étoiles massives telles que OMC-1 (Blake et al., 1987) ou encore Sgr B2 (Cummins et al., 1986; Nummelin et al., 2000; Belloche et al., 2009). L'un des scénarios invoqués pour expliquer la présence des espèces organiques observées est que les molécules se sont formées sur les grains de poussières. Les espèces radicalaires deviennent mobiles lors du réchauffement dû à la proto-étoile où des températures de l'ordre de 40-50 K sont atteintes (Garrod and Herbst, 2006). A de telles températures, les radicaux les plus lourds peuvent diffuser à la surface des grains et réagir pour former des molécules complexes. Lorsque la température augmente ($T > 80$ K), ces molécules ainsi formées sont évaporées (Herbst and van Dishoeck, 2009).

Cependant, des molécules telles que l'acétaldéhyde (CH_3CHO), le formiate de méthyl (HCOOCH_3), ou encore le diméthyléther (CH_3OCH_3) ont été récemment observées au sein des coeurs denses froids (où la température n'excède pas 12-15 K) L1689B (Bacmann et al., 2012) et B1-b (Cernicharo et al., 2012), ravivant la question de leur formation.

L'abondance des espèces en phase gazeuse reflète généralement celle de leurs analogues sur les surfaces. Une formation plus efficace des COMs à la surface des grains, même dans les milieux froids, peut donc avoir des répercussions sur leurs abondances en phase gazeuse. J'ai donc étudié deux nouveaux mécanismes de diffusion : la diffusion par effet tunnel pour les espèces H, H_2 et O et la diffusion induite par les rayons cosmiques (CRID). Je présente ici les effets de ces deux mécanismes sur l'abondance des espèces dans les nuages moléculaires et plus particulièrement celle des molécules complexes.

2.5.2 Paramètres du modèle

Le réseau chimique utilisé pour cette étude est décrit dans la section 2.1. Des conditions typiques de nuages denses sont considérées : une densité d'atomes d'hydrogène de $2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-3}$, une température de 10 K, une extinction visuelle de 10, et un taux d'ionisation par les particules du rayonnement cosmique de $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$. Les valeurs des différents paramètres du modèle "standard" considérés pour les simulations sont listées dans la Table 2.2. D'autres modèles seront considérés par la suite, pour ceux-ci, les paramètres modifiés par rapport au modèle standard seront indiqués dans le texte. Les abondances initiales utilisées pour cette étude sont quant à elles listées dans la Table 2.3.

Les espèces sont supposées être initialement sous forme atomique, excepté pour l'hydrogène qui est entièrement sous forme moléculaire H_2 . Les huit éléments suivants : C, S, Si, Fe, Na, Mg, P et Cl, dont l'énergie d'ionisation est inférieure à celle de l'atome d'hydrogène (13.6 eV) sont initialement sous une forme ionisée.

TABLE 2.2 – Paramètres du modèle standard.

Nom	Valeur
ζ_{CR}	$1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$
r_{gr}	$0.1 \mu\text{m}$
a	1 \AA
T_{gr}	10 K
T_{CR}	70 K
$f(70 \text{ K})$	3.6×10^{-19}
A_{V}	10
n_{H}	$2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$

TABLE 2.3 – Abondances initiales.

Element	$n(i)/n_{\text{H}}$
H ₂	0.5
He	9×10^{-2} ^a
N	6.2×10^{-5} ^b
O	1.4×10^{-4} ^c
C ⁺	1.7×10^{-4} ^b
S ⁺	8×10^{-9} ^d
Si ⁺	8×10^{-9} ^d
Fe ⁺	3×10^{-9} ^d
Na ⁺	2×10^{-9} ^d
Mg ⁺	7×10^{-9} ^d
P ⁺	2×10^{-10} ^d
Cl ⁺	1×10^{-9} ^d

- ^a. Wakelam and Herbst (2008).
^b. Jenkins (2009).
^c. Hincelin et al. (2011).
^d. “Low metal abundances” (Graedel et al., 1982).

Nous appelons “abondance élémentaire” d’un élément E, le nombre d’éléments E (présents à la fois dans la phase gazeuse et à la surface des grains) divisé par le nombre total de noyaux d’hydrogène. Nous ne prenons pas en compte les éléments contenus sous forme réfractaire (dans le coeur des grains interstellaires). En effet, au sein des nuages moléculaires et des disques protoplanétaires, les éléments sous forme réfractaire n’interviennent pas dans les processus chimiques en phase gazeuse ou à la surface des grains.

L’abondance d’un élément E du milieu interstellaire se mesure par l’observation des raies en absorption du gaz dans les atmosphères stellaires. Or un élément peut se trouver à l’état gazeux mais également à l’état solide. Les abondances mesurées dans le milieu interstellaire sont donc inférieures aux abondances cosmiques (celles observées dans le Soleil). Cet écart est appelé “déplétion”. La mesure de la déplétion est donc importante pour connaître la composition des grains interstellaires.

Jenkins (2009) a étudié en détail ce phénomène de déplétion pour 17 éléments différents. Ces résultats ont montré que tous les éléments observés semblent dépléter en fonction de la densité, excepté l’azote. La déplétion du carbone est quant à elle moins importante que celle de l’oxygène; le rapport C/O augmente donc avec la densité du milieu. Pour reproduire les observations des espèces en phase gazeuse dans les nuages moléculaires, Graedel et al. (1982) ont proposé d’utiliser un facteur de déplétion de 100 sur les abondances atomiques observées dans les nuages diffus pour tous les éléments (sauf He, C, N, et O). Ces abondances élémentaires sont appelées “low metal abundances” et ce sont celles que nous utilisons dans notre modèle.

L'abondance élémentaire de l'hélium est quant à elle supposée égale à 0.09 (Wakelam and Herbst, 2008). Pour l'abondance élémentaire du carbone, nous utilisons la valeur déterminée par Jenkins (2009) dans le nuage diffus ζ Oph de 1.7×10^{-4} . Nous ne considérons pas de déplétion supplémentaire pour le carbone compte tenu des incertitudes sur les mesures et du fait que l'abondance de carbone ne diminue que légèrement avec la densité. Pour l'oxygène, nous considérons dans cette étude un cas "fortement déplété" (Hincelin et al., 2011).

2.5.3 La diffusion par effet tunnel

Dans les modèles, la diffusion par effet tunnel concerne généralement seulement H et H₂, les deux espèces les plus légères (Hasegawa and Herbst, 1993; Cazaux and Tielens, 2004). Cependant, des expériences récentes (Minissale et al., 2013) ont montré que malgré sa masse, l'oxygène pouvait efficacement diffuser par effet tunnel. J'ai donc étudié l'effet de la diffusion par effet tunnel de l'atome d'oxygène (et par conséquent celle des espèces H et H₂, plus légères) sur la chimie dans les nuages moléculaires.

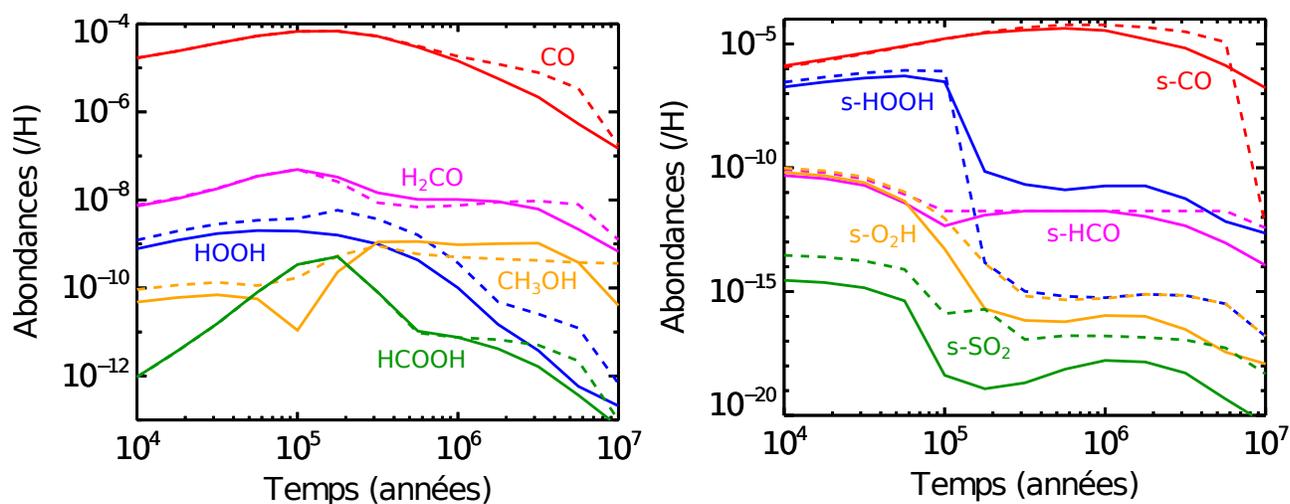


FIGURE 2.4 – Abondances en phase gazeuse et à la surface des grains (les espèces de surface sont désignées par le préfixe *s-* dans ce manuscrit) pour plusieurs espèces représentatives, en fonction du temps. Les résultats obtenus pour la diffusion thermique seule (Modèle A) sont représentés en traits continus tandis que les résultats obtenus en considérant les deux mécanismes de diffusion (Modèle B) sont représentés en traits pointillés.

Sur la figure 2.4 sont représentées les abondances prédites par Nautilus pour deux modèles différents. Dans le Modèle A (traits continus), seule la diffusion thermique est prise en compte tandis que dans le Modèle B (traits pointillés), la diffusion thermique et la diffusion par effet tunnel pour H, H₂, et O sont prises en compte.

La plupart des espèces de la phase gazeuse voient leur abondances augmenter, particulièrement HOOH. La molécule CH₃OH est quant à elle plus largement produite en considérant les

deux mécanismes de diffusion jusqu'à 3×10^5 ans. Entre 3×10^5 et 5×10^6 ans, son abondance est en revanche plus grande en ne considérant que la diffusion thermique. Pour un nuage encore plus âgé, la diffusion par effet tunnel permet de garder une abondance de méthanol relativement constante alors que cette dernière diminue avec le Modèle A. Les espèces à la surface des grains présentent la même sensibilité que leurs analogues en phase gazeuse, exceptée s-HOOH dont l'abondance diminue fortement avec le Modèle B après 10^5 ans. Cette diminution est principalement due à la réaction $s\text{-H} + s\text{-HOOH} \rightarrow s\text{-O}_2\text{H} + s\text{-H}_2$ qui est beaucoup plus efficace lorsque l'effet tunnel est pris en compte. Les espèces plus légères sont également affectées, ainsi la réaction de diffusion entre s-O et s-C étant beaucoup plus efficace avec le Modèle B, l'abondance de CO augmente tout comme celle de s-CO jusqu'à 6×10^6 ans. Pour un nuage plus âgé, l'abondance de CO à la surface des grains diminue car s-CO et s-H réagissent pour former HCO en phase gazeuse et sur les grains. La plupart des réactions impliquant s-H, s-H₂ et s-O sont beaucoup plus efficaces en considérant la diffusion par effet tunnel pour ces espèces ce qui affecte les abondances en phase gazeuse et à la surface des grains pour les espèces légères mais contribue également à former plus efficacement des espèces complexes hydrogénées et oxygénées.

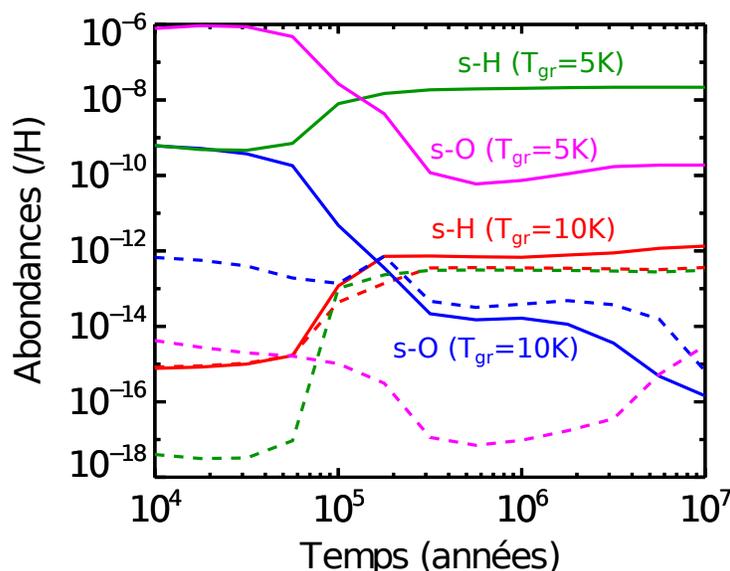


FIGURE 2.5 – Sensibilité du mécanisme de diffusion par effet tunnel à la température du grain. Les abondances de s-H et s-O en fonction du temps sont représentées pour deux températures de grain différentes (5 et 10 K) et pour les modèles A (traits continus) et B (traits pointillés).

Les abondances prédites par le modèle sont sensibles à la température du grain T_{gr} . La figure 2.5 montre la sensibilité de s-H et s-O à ce paramètre pour les deux modèles A et B. Pour une température de grain deux fois plus faible que celle considérée dans le modèle “standard”, l'abondance de ces deux atomes à la surface des grains diminue très fortement lorsque l'on ajoute la diffusion par effet tunnel, jusqu'à 7 ordres de grandeur pour s-H et 5 ordres de

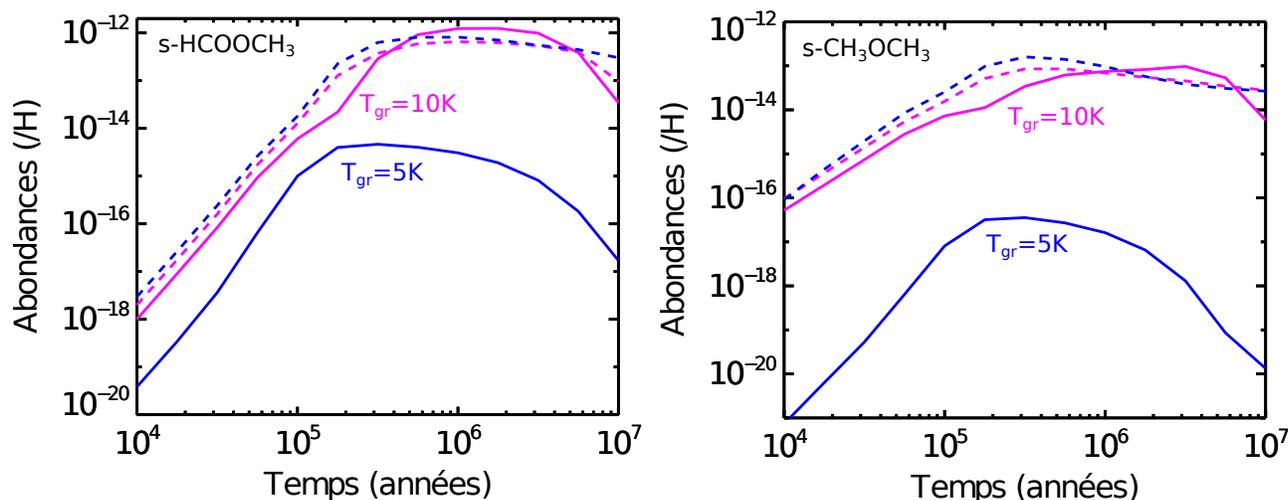


FIGURE 2.6 – Abondances des espèces complexes $s\text{-HCOOCH}_3$ et $s\text{-CH}_3\text{OCH}_3$ en fonction du temps et pour deux valeurs de température du grain : 5 et 10 K. Les résultats sont représentés pour les modèles A (traits continus) et B (traits pointillés).

grandeur pour $s\text{-O}$ à 10^6 ans. Le temps de diffusion classique augmentant lorsque la température du grain diminue (équation 2.21), plus cette température est faible, plus le processus de diffusion par effet tunnel va être important par rapport au processus de diffusion thermique. A faible température, la diffusion par effet tunnel contribue ainsi à une forte augmentation de l’abondance des espèces complexes hydrogénées et oxygénées à la surface des grains de poussières (voir figure 2.6).

2.5.4 La diffusion induite par les rayons cosmiques : CRID

Dans le cadre de ma thèse, j’ai ajouté ce mécanisme de diffusion thermique “boostée” par les rayons cosmiques (voir section 2.4.3) et étudié son impact sur la chimie dans les nuages moléculaires.

L’efficacité du CRID dépend fortement du taux d’extinction du nuage moléculaire. Sur la figure 2.7 sont représentées les abondances prédites par le modèle, sans prendre en compte le CRID (Modèle 1 : traits continus) et avec le CRID (Modèle 2 : traits pointillés), en fonction du temps et pour différentes valeurs de l’extinction visuelle.

Les abondances des espèces les plus complexes en phase gazeuse et à la surface des grains diminuent lorsque l’extinction visuelle diminue car ces espèces sont photodissociées par les photons UV conduisant à une augmentation des plus petits radicaux tels que $s\text{-OH}$. Avec le CRID, les radicaux à la surface du grain sont beaucoup plus mobiles et vont réagir pour former des molécules plus complexes. Pour un faible taux d’extinction, des molécules complexes telles que CH_3CHO , C_2H_n , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, CH_3OCH_3 , CH_3COCH_3 ou encore CH_2OH , se forment plus rapidement à la surface des grains qu’elles ne sont photodissociées. $A_V=3$ semble être la valeur pour laquelle le CRID est le plus efficace. Pour des valeurs plus élevées, la quantité de radicaux

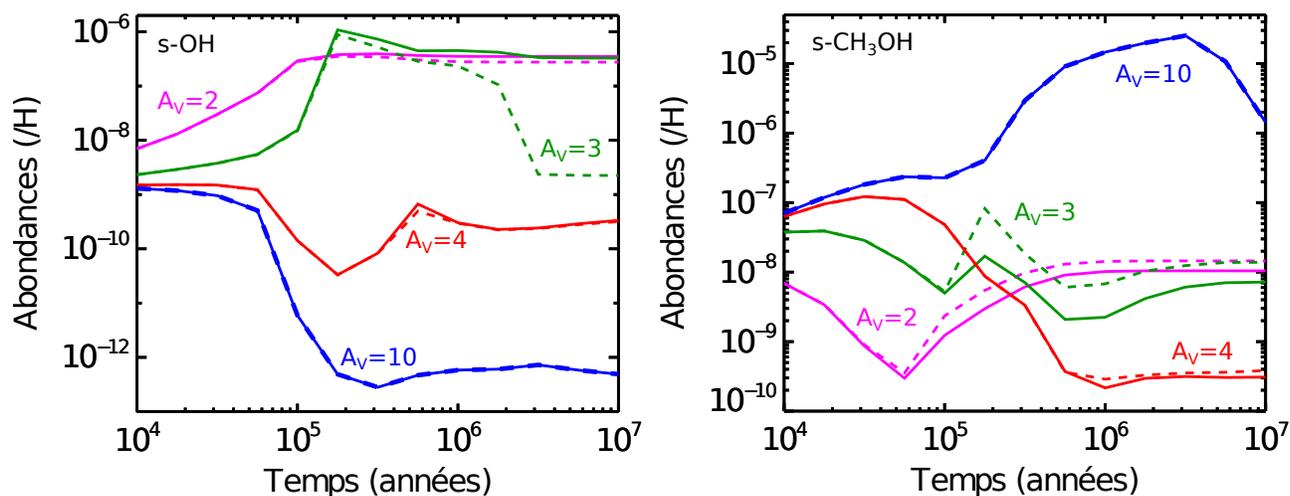


FIGURE 2.7 – Abondances à la surface des grains, pour deux espèces représentatives, en fonction du temps et pour différentes valeurs du taux d’extinction. Les résultats obtenus sans le CRID (Modèle 1) sont représentés en traits continus tandis que les résultats obtenus avec le CRID (Modèle 2) sont représentés en traits pointillés.

produites par photodissociation à la surface des grains n’est pas suffisante tandis que pour les valeurs plus faibles du taux d’extinction, la production de radicaux par photodissociation est si forte que ceux-ci n’ont plus le temps de se recombiner.

Sur la figure 2.8 sont représentées les abondances prédites par le modèle, pour quelques espèces de surface simples et complexes, en fonction du temps et pour un taux d’extinction égale à 3.

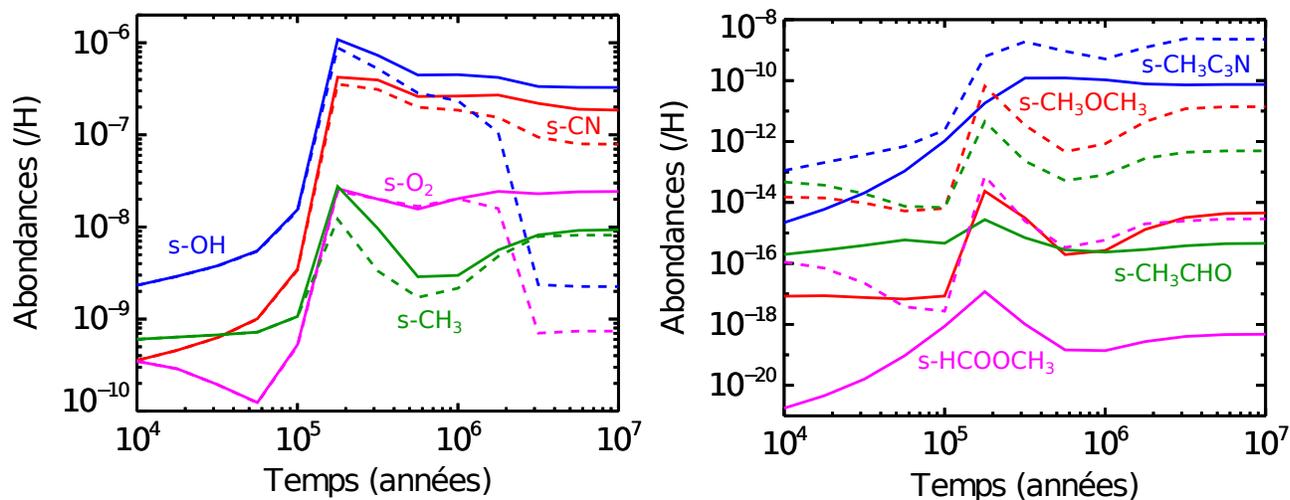


FIGURE 2.8 – Abondances à la surface des grains, d’une sélection de molécules simples et complexes, en fonction du temps et pour $A_V=3$.

Les espèces complexes sont plus abondantes avec le Modèle 2 de plus d’un facteur 10 pour

s-CH₃C₃N jusqu'à plus d'un facteur 1000 pour s-HCOOCH₃ à 10⁷ ans. Les abondances des molécules plus légères, telles que s-OH, s-CN, s-CH₃ et s-O₂, sont quant à elles diminuées de quelques ordres de grandeur. Sur un grain plus chaud, le temps de diffusion pour une espèce adsorbée à la surface étant plus court, les recombinaisons des radicaux pour former des espèces plus complexes sont plus efficaces. Les abondances des espèces en phase gazeuse sont également affectées mais dans une moindre mesure. Ainsi, CH₃OH, CH₃CHO, HCOOCH₃, CH₃CH₂OH, CH₃OCH₃ ou encore CH₃COCH₃ voient leur abondances augmenter d'un facteur ~ 1.5 jusqu'à un facteur ~ 1000 pour les molécules les plus sensibles (CH₃OCH₃).

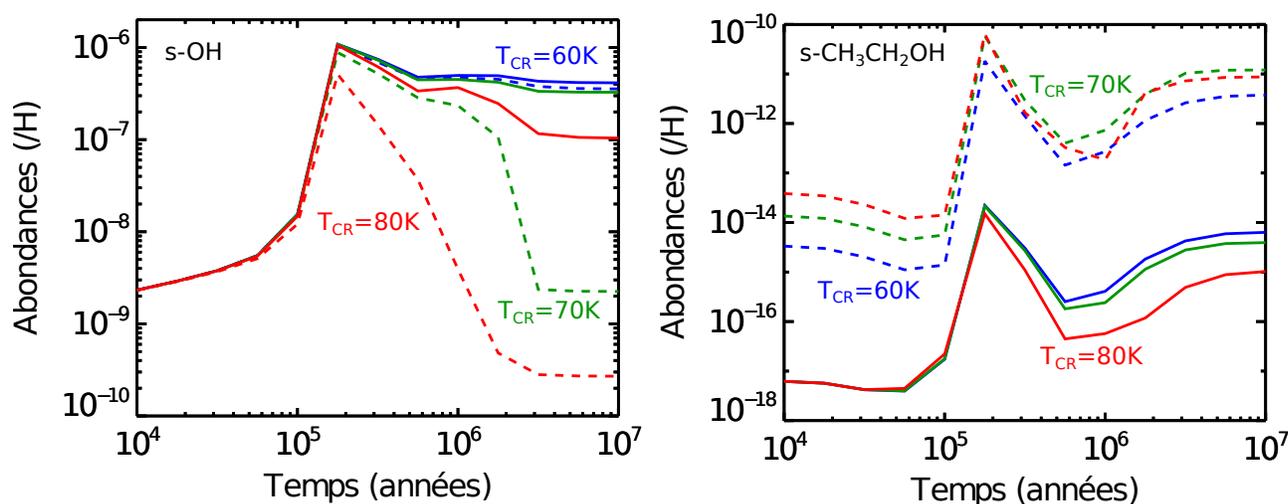


FIGURE 2.9 – Sensibilité à la température temporaire du grain suite au chauffage par les rayons cosmiques. Les abondances des espèces OH et CH₃CH₂OH à la surface des grains en fonction du temps, pour $A_V = 3$ et pour différentes valeurs de T_{CR} , sont représentées pour les modèles 1 (traits continus) et 2 (traits pointillés).

Les abondances prédites par le modèle sont sensibles à la température temporaire du grain après chauffage par les rayons cosmiques (T_{CR}). La figure 2.9 montre la sensibilité de s-OH et s-CH₃CH₂OH à ce paramètre. La valeur de T_{CR} va influencer l'efficacité du CRID mais également celle de la désorption induite par les rayons cosmiques (voir section 2.3.2.2) ce qui explique les différences observées pour le Modèle 1. Pour $T_{CR}=60$ K, le mécanisme est moins efficace, les radicaux présents à la surface du grain sont moins mobiles et leur recombinaison en molécules complexes moins importante. En revanche, l'abondance des radicaux à la surface des grains de poussières diminue plus fortement lorsque $T_{CR}=80$ K en raison d'une recombinaison plus efficace de ces radicaux mais également en raison de leur désorption beaucoup plus importante à de telles températures. A 80 K, l'abondance des espèces complexes augmente entre 10⁴ et 10⁵ ans car la mobilité des espèces radicalaires est plus grande, mais après 10⁵ ans, l'abondance de s-CH₃CH₂OH obtenue avec le Modèle 2 est plus faible à 80 K qu'à 70 K en raison de la désorption plus importante à haute température.

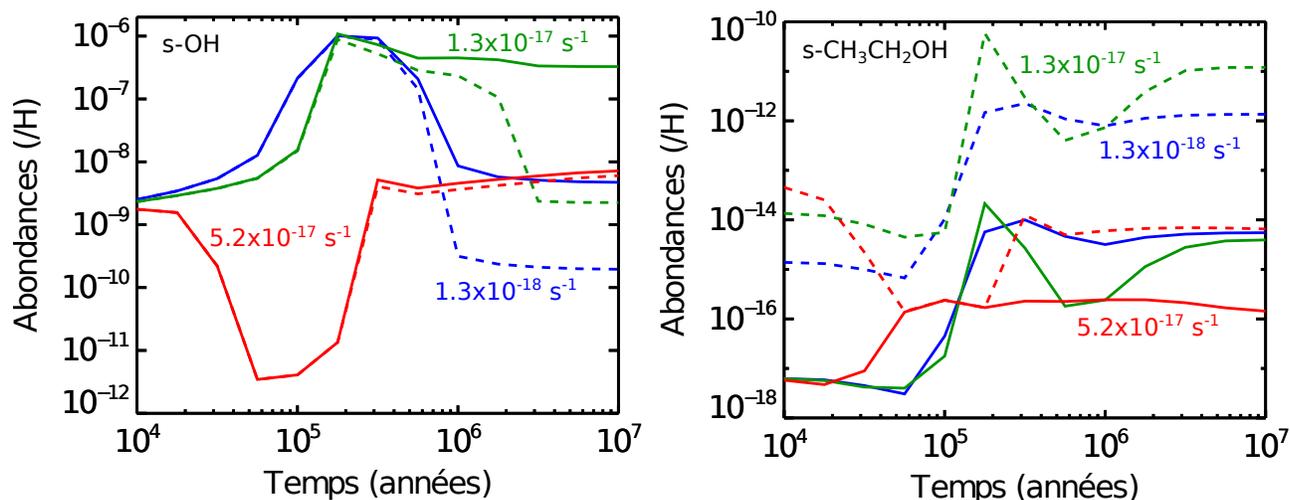


FIGURE 2.10 – Sensibilité au taux d’ionisation par les rayons cosmiques. Les abondances des espèces OH et CH_3CH_2OH à la surface des grains en fonction du temps, pour $A_V = 3$ et pour différentes valeurs de ζ_{CR} , sont représentées pour les modèles 1 (traits continus) et 2 (traits pointillés).

Le mécanisme de diffusion induite par les rayons cosmiques est directement proportionnel au taux d’ionisation par les rayons cosmiques ζ_{CR} . La figure 2.10 montre la sensibilité de $s-OH$ et $s-CH_3CH_2OH$ à ce paramètre. En considérant un taux d’ionisation dix fois plus faible que la valeur standard : $\zeta_{CR} = 1.3 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$ (en bleu sur la figure 2.10), l’effet du CRID est moins important car la fraction de temps $f(70K)$ que passe le grain à 70 K étant plus faible, les radicaux ont moins de temps pour réagir entre eux. En considérant un taux d’ionisation quatre fois plus fort que la valeur standard : $\zeta_{CR} = 5.2 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ (en rouge sur la figure 2.10), le taux d’ionisation est dans ce cas trop fort et entraîne la désorption des espèces en phase gazeuse.

2.5.5 Conclusions

Cette étude porte sur la diffusion des espèces à la surface des grains de poussières et son impact sur la chimie dans les nuages moléculaires. Deux nouveaux processus de diffusion ont été ajoutés au modèle Nautilus.

La diffusion par effet tunnel a été prise en compte pour l’atome d’oxygène (Minissale et al., 2013) en plus de celle des espèces plus légères H et H_2 . L’effet tunnel permet aux espèces de diffuser plus rapidement, notamment à basse température, et permet une formation plus efficace des espèces complexes hydrogénées et oxygénées, telles que $HOOH$ ou CH_3OCH_3 , au sein des nuages denses. Son efficacité est d’autant plus importante pour des températures en dessous de 10 K.

La diffusion induite par les rayons cosmiques est un nouveau processus qui permet d’augmenter la mobilité des radicaux à la surface des grains, et de former des molécules complexes en plus grande quantité. Cependant, ce mécanisme dépend fortement de l’extinction visuelle et n’est efficace que pour $A_V \leq 3$ (pour des grains de $0.1 \mu\text{m}$). Pour de telles valeurs du taux d’extinction, l’abondance des espèces complexes est augmentée de manière significative au profit de celle des radicaux dont l’abondance diminue.

Les espèces les plus affectées (par plus d’un facteur 2) par ces deux mécanismes de diffusion sont listées dans la Table [2.4](#).

Les résultats présentés en section [2.5](#) ont fait l’objet d’un article ([Reboussin et al., 2014](#)) publié dans la revue MNRAS, intitulé “Grain-surface reactions in molecular clouds : the effect of cosmic rays and quantum tunnelling”. Cet article est disponible en annexe [A](#).

Model B (Effet Tunnel) ($A_V=10$)		Model 2 (CRID) ($A_V=3$)	
C_2H_4	s- C_2H_n (n = 4 ; 5)	H_2O	s- C_2H_n (n = 5 ; 6)
CH_2CCH	s- CH_3CH_2OH	OH	s- CH_2OH
CH_3OH	s-CCS	CO_2	s- CH_3CH_2OH
NH_2CHO	s- CH_2CCH	SiO_2	s- CH_2
CH_2CHCN	s- CH_2CHCN	HCOOH	s- H_2CCN
$HCOOCH_3$	s- C_3O	CH_3OH	s- CH_3C_nN (n = 1 ; 3 ; 5 ; 7)
CH_3CH_2OH	s- CH_2	C_2H_n (n= 5 ; 6)	s- CH_3OCH_3
CH_3OCH_3	s- H_2CCO	O_3	s- CH_3OH
O_3	s- CH_3	CH_2OH	s- CH_3NH_2
$HNCO$	s- CH_3OH		s-CN
HC_2O	s-CN		s- CO_2
CH_2OH	s-CO		s-CS
	s- CO_2		s- H_2CO
	s-H		s- H_2CS
	s- H_2CO		s- H_2O
	s- H_2CS		s-HCOOH
	s-HCOOCH ₃		s-HNO
	s-HNCO		s-NH ₂ CHO
	s-HNO		s-NS
	s- C_nH_2 (n=4 ; 5 ; 6 ; 8 ; 9)		s-O
	s-NH		s- O_2H
	s-NH ₂		s- O_3
	s-NH ₂ CHO		s-OCS
	s-NO		s-OH
	s-OH		s-S
	s-SO		s-SO ₂
	s-CS		
	s-HOOH		
	s- H_2S		
	s-NS		
	s- O_2		

TABLE 2.4 – Espèces dont les abondances ($> 10^{-13}$ (/H)) sont affectées de plus d'un facteur 2 par rapport au Modèle A (où seule la diffusion par thermal hopping est considérée) à 10^6 ans. s-X fait référence aux molécules adsorbées à la surface des grains.

3

Les disques protoplanétaires

Sommaire

3.1	Modèle physique des disques protoplanétaires	30
3.1.1	La distribution verticale de la matière	30
3.1.2	La distribution radiale de la matière	30
3.1.3	La viscosité dans les disques	31
3.1.3.1	L'instabilité magnéto-rotationnelle	31
3.1.3.2	Sources d'ionisation et zone morte	32
3.1.4	Le profil de température	32
3.1.5	Le structure chimique en trois couches	34
3.2	L'évolution des disques et la formation des planètes	35
3.2.1	Le temps de vie d'un disque	35
3.2.2	La formation des planètes	35
3.3	Observation des disques : émission des raies de rotation moléculaire	38
3.3.1	Intensité spécifique et équation de transfert radiatif	38
3.3.2	Population des niveaux : équation de l'équilibre statistique	38
3.3.3	Approximation de l'Equilibre Thermodynamique Local (ETL)	39
3.3.4	Approximation de la probabilité d'échappement	41
3.4	Modélisation des disques protoplanétaires avec le code Nautilus	41
3.4.1	La densité volumique	41
3.4.2	La hauteur d'échelle	42
3.4.3	La densité de surface	42
3.4.4	La température	42
3.4.5	L'extinction visuelle	43
3.4.6	Le flux UV	43
3.4.7	Le "self-shielding" de H ₂ et CO	43
3.4.7.1	Photodissociation de H ₂	43
3.4.7.2	Photodissociation de CO	44

3.1 Modèle physique des disques protoplanétaires

3.1.1 La distribution verticale de la matière

La structure verticale est calculée en supposant que le disque est à l'équilibre hydrostatique. L'équilibre entre force de pression et force gravitationnelle s'écrit :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{GM_* z}{r^3} = -\Omega^2 z \quad (3.1)$$

où ρ est la densité volumique, r la distance à l'étoile, et $\Omega = \sqrt{GM_*/r^3}$ est la vitesse angulaire képlérienne, avec G la constante gravitationnelle et M_* la masse de l'étoile ($M_* \gg M_{\text{disque}}$).

En supposant un disque verticalement isotherme et si le gaz obéit à la loi des gaz parfaits :

$$P = \rho c_s^2 \quad (3.2)$$

avec c_s la vitesse du son égale à :

$$c_s = \sqrt{\frac{k_B T}{\mu m_H}} \quad (3.3)$$

où k_B est la constante de Boltzmann, T la température, μ la masse moléculaire moyenne et m_H la masse de l'atome d'hydrogène. L'équation en fonction de ρ s'écrit alors :

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} = -\left(\frac{\Omega}{c_s}\right)^2 \rho z \quad (3.4)$$

Cette équation a pour solution :

$$\rho(z) = \rho_0 \exp\left(-\frac{z^2}{2H^2}\right) \quad (3.5)$$

où ρ_0 est la densité volumique du disque de gaz dans le plan médian et H l'échelle de hauteur du disque qui vaut donc (dans le cas isotherme) :

$$H = \frac{c_s}{\Omega} \quad (3.6)$$

La densité de surface verticale Σ (en g.cm^{-2}) se calcule donc de la façon suivante :

$$\Sigma = \rho_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{z^2}{2H^2}\right) dz = \sqrt{2\pi} \rho_0 H \quad (3.7)$$

3.1.2 La distribution radiale de la matière

Au cours de son évolution, le disque perd de la matière, accrétée par l'étoile. Le taux d'accrétion \dot{M} représente la quantité de matière accrétée par l'objet central par unité de temps et a pour expression :

$$\dot{M}(r) = -2\pi r \Sigma(r) v_r \quad (3.8)$$

où $\Sigma(r)$ est la densité de surface du disque et v_r la vitesse radiale.

En considérant le disque axisymétrique, l'équation de conservation de la masse s'écrit comme :

$$2\pi r \frac{\partial \Sigma}{\partial t} = -\frac{\partial \dot{M}}{\partial r} \quad (3.9)$$

L'équation de conservation du moment angulaire s'écrit :

$$\dot{M} \frac{\partial r v_r}{\partial r} = -2\pi \frac{\partial \tau_{\text{vis}}}{\partial r} \quad (3.10)$$

où τ_{vis} est la contrainte visqueuse définie comme :

$$\tau_{\text{vis}} = \Sigma \nu \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) \quad (3.11)$$

Dans le cas d'un disque képlérien pour lequel $v = (GM/r)^{1/2}$, et en combinant les équations 3.9 et 3.10, on obtient (Pringle, 1981) :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} = \frac{3}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\sqrt{r} \frac{\partial}{\partial r} (\Sigma \nu \sqrt{r}) \right) \quad (3.12)$$

3.1.3 La viscosité dans les disques

Le paramètre ν de l'équation 3.11 représente la viscosité du disque. La viscosité due à la friction des molécules étant beaucoup trop faible aux densités rencontrées dans les disques, elle est généralement associée à la turbulence du gaz, dont la vitesse est subsonique et pour laquelle l'étendue des tourbillons est inférieure à l'échelle de hauteur du disque H . Pour les disques d'accrétion α , la viscosité se définit comme (Shakura and Sunyaev, 1973) :

$$\nu = \alpha c_s H \quad (3.13)$$

où c_s est la vitesse du son (équation 3.3) et α un paramètre adimensionné et inférieur à 1 qui contrôle l'importance des effets visqueux. La valeur d' α se situe entre 10^{-4} et 10^{-2} (Hartmann et al., 1998; Guilloteau et al., 2011).

3.1.3.1 L'instabilité magnéto-rotationnelle

La viscosité turbulente permet donc d'expliquer le transfert de moment angulaire. L'origine de cette turbulence est supposée être l'instabilité magnéto-rotationnelle (Balbus and Hawley, 1991) due au couplage entre un disque et un champ magnétique. Pour un disque traversé par un champ magnétique vertical créé par l'étoile centrale, deux particules ionisées subissent une force de rappel lorsqu'elles se déplacent perpendiculairement aux lignes de champ. Les deux particules fluides (situées à deux rayons différents) en orbite képlérienne vont donc être perturbées radialement. La force de rappel sur la particule la plus proche de l'étoile freine sa rotation réduisant son moment angulaire et la déplaçant vers l'intérieur. Au contraire, la force exercée sur la particule la plus externe accélère sa rotation la dirigeant vers de plus grands rayons. On observe ainsi un transfert de moment angulaire des couches internes vers les couches externes du disque.

3.1.3.2 Sources d'ionisation et zone morte

L'instabilité magnéto-rotationnelle requiert un couplage entre le champ magnétique et le fluide. L'ionisation des particules du disque est donc primordiale pour que l'instabilité magnéto-rotationnelle puisse se développer.

Il existe deux mécanismes d'ionisation dans les disques protoplanétaires : l'ionisation thermique et l'ionisation non-thermique par les rayons X, les rayons cosmiques (le flux de rayons cosmiques peut cependant être fortement réduit par le vent stellaire et/ou le champ magnétique [Cleeves et al., 2013](#), voir section 4.4.4) ou encore le rayonnement par désintégration radioactive des isotopes à courte durée de vie (la principale source de ce rayonnement est l'atome ^{26}Al).

Dans les parties internes proches de l'étoile ($r < 1 \text{ UA}$), la température du disque est assez élevée ($T > 1000 \text{ K}$) pour ioniser thermiquement certains atomes comme les métaux alcalins.

Dans les régions centrales, les rayons X et UV ionisants émis par l'étoile sont absorbés à la surface du disque. Dans les parties externes, la faible densité permet aux sources d'ionisation non-thermiques de pénétrer dans le disque en profondeur et d'ioniser le gaz.

Il existe une région intermédiaire (quelques UA) où le plan du disque est assez froid pour empêcher l'ionisation thermique et où la densité est assez élevée pour protéger cette région des rayons ionisants. Cette région est appelée zone morte car le très faible taux d'ionisation du gaz ne permet pas à l'instabilité magnéto-rotationnelle de se développer ([Gammie, 1996](#)). On estime qu'elle s'étend sur 10-20 UA, selon le modèle de disque considéré. Le transport de moment angulaire ne s'y effectue donc pas et la matière présente dans cette zone n'est plus accrétée.

3.1.4 Le profil de température

Selon le processus par lequel les disques sont chauffés, ceux-ci se classent en deux familles :

- les **disques actifs** chauffés par la dissipation d'énergie visqueuse. Cet effet n'est dominant que dans les parties internes du disque ($r \approx 10 \text{ UA}$) ;
- les **disques passifs** pour lesquels la surface est directement chauffée par le rayonnement de l'étoile centrale tandis que l'intérieur est chauffé par l'émission de la couche de surface.

Pour un disque qui émet comme un corps noir, sa température se calcule en considérant l'équilibre entre l'énergie reçue $F_{\text{reçu}}$ et celle ré-émise $F_{\text{émis}}$:

$$\begin{cases} F_{\text{reçu}} = 2\theta \frac{L_*}{4\pi r^2} \\ F_{\text{émis}} = 2\sigma T_d^4 \end{cases} \quad (3.14)$$

Le facteur 2 prend en compte les deux côtés du disque. θ est l'angle sous lequel le disque reçoit la radiation stellaire, L_* est la luminosité de l'étoile et σ est la constante de Stefan-Boltzmann.

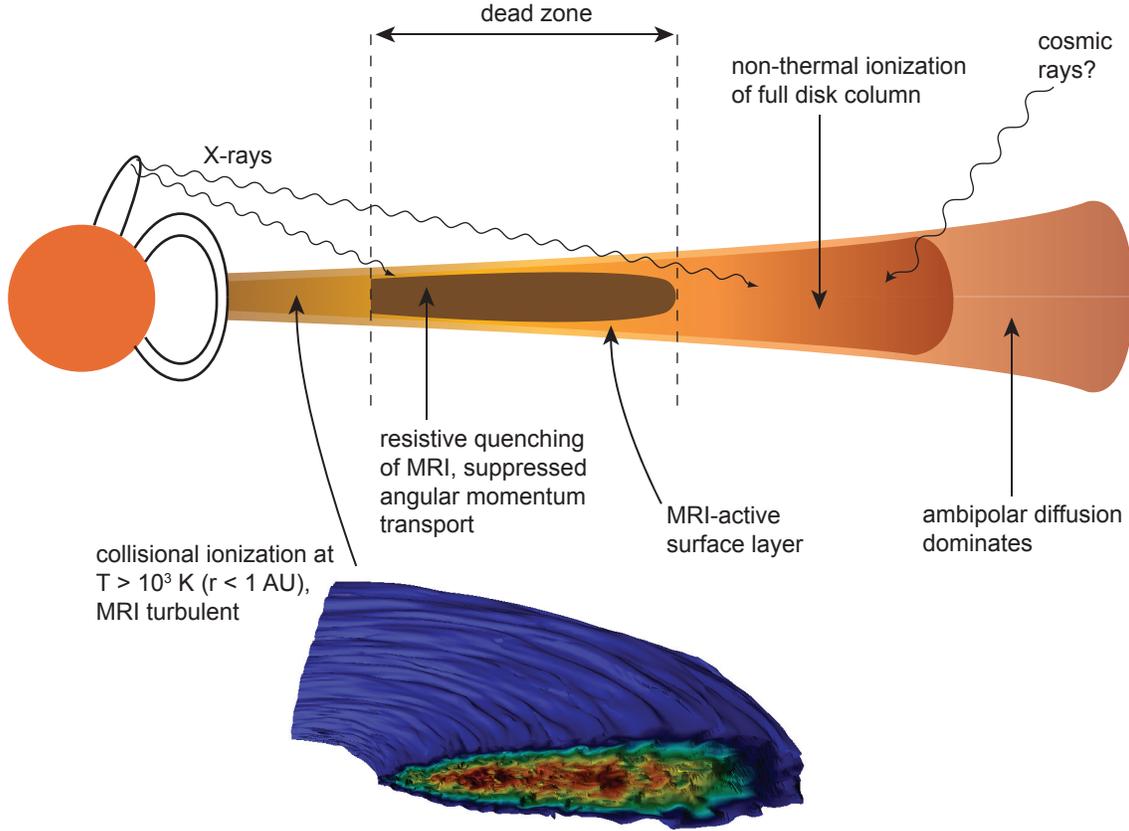


FIGURE 3.1 – Schéma de la structure d'un disque protoplanétaire vu par la tranche (Armitage, 2011). La zone morte, en marron, est située à $r \sim 1$ UA. Dans cette zone, l'instabilité magnéto-rotationnelle ne peut pas se développer car les rayons X et rayons cosmiques ne peuvent pas pénétrer en profondeur en raison de la forte densité.

A l'équilibre thermique, la température du disque T_d a alors pour expression :

$$T_d = \left(\frac{L_*}{4\pi\sigma} \right)^{1/4} \theta^{1/4} r^{-1/2} \quad (3.15)$$

Dans le cas d'un disque plat, celui-ci est irradié selon l'angle d'incidence $\theta \sim R_*/r$ (avec R_* le rayon de l'étoile), la température du disque est alors proportionnelle à $r^{-3/4}$ (Adams and Shu, 1986). Cependant, selon une représentation plus réaliste, les disques possèdent une structure évasée (Kenyon and Hartmann, 1987) qui leur permettent d'intercepter les photons de l'étoile même à grande distance. Géométriquement, l'angle sous lequel un disque évasé intercepte le rayonnement incident va dépendre de l'échelle de hauteur du disque (plus le disque est évasé, plus la surface qui reçoit les rayons incidents est abrupte). Cet angle s'écrit comme (Chiang and Goldreich, 1997) :

$$\theta \sim \frac{dH_s}{dr} - \frac{H_s}{r} \quad (3.16)$$

où H_s est la hauteur dans le disque où les photons stellaires ont absorbés. Dans le cas d'un disque à l'équilibre thermique et optiquement épais ($H_s \geq H$), la température dans les parties externes est alors proportionnelle à $r^{-0.5}$.

3.1.5 Le structure chimique en trois couches

La figure 3.2 présente la structure chimique d'un disque protoplanétaire. Le disque est chauffé par le champ interstellaire et le rayonnement UV de l'étoile centrale. Sa structure évasée lui permet d'intercepter les photons de l'étoile même à grande distance. Le disque est également soumis aux rayons cosmiques et aux rayons X. Le disque protoplanétaire est modélisé par trois couches distinctes. La couche externe est directement illuminée par le rayonnement UV de l'étoile et le champ interstellaire. Cette couche est donc très chaude et constituée principalement d'atomes et d'ions car dominée par les réactions de photodissociation et d'ionisation. Le rayonnement UV est rapidement absorbé par les grains de poussières et ne peut donc pas pénétrer profondément dans le disque. En dessous, se situe la couche moléculaire chaude dans laquelle le rayonnement UV est déjà suffisamment atténué pour que les molécules ne soient plus photodissociées mais la température est toujours assez élevée pour que les molécules restent en phase gazeuse. Enfin, la troisième couche se situe dans le plan du disque. La température est suffisamment froide pour que les molécules puissent se coller à la surface des grains. La position exacte de ces couches dépend de la structure physique du disque et est différente pour chaque molécule.

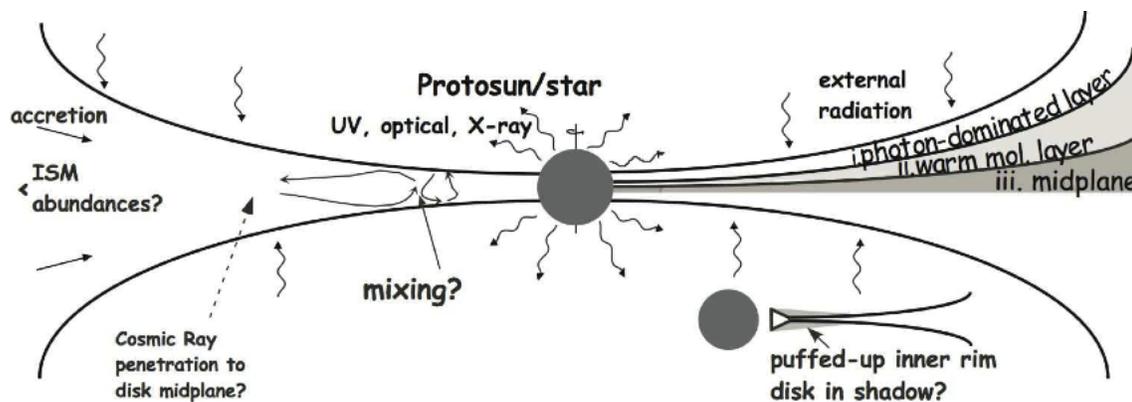


FIGURE 3.2 – Schéma de la structure chimique d'un disque protoplanétaire (Bergin et al., 2007). Verticalement le disque est divisé en trois couches : une couche externe dominée par les photodissociations, une couche moléculaire chaude et le plan du disque froid où les molécules sont collées sur les grains.

3.2 L'évolution des disques et la formation des planètes

3.2.1 Le temps de vie d'un disque

L'évolution temporelle des disques est cruciale pour comprendre la formation des planètes qui a lieu alors que le disque n'est pas encore entièrement dissipé. Le temps de vie des disques est d'environ quelques millions d'années. L'étude de leur évolution s'appuie sur des observations d'amas d'étoiles d'âges différents. Globalement, le flux infrarouge mesuré (signe de la présence d'un disque) diminue avec l'âge. Les disques de transition étant très peu observés, les disques sont supposés se dissiper très rapidement ($\sim 10^5$ ans, [Simon and Prato, 1995](#); [Wolk and Walter, 1996](#)). La viscosité ne permet pas à elle seule d'expliquer cette dispersion si rapide de la matière. Un autre processus entre en jeu. La principale hypothèse est la photo-évaporation. Le rayonnement de l'étoile centrale permet de dissocier les molécules de dihydrogène et de fournir de l'énergie au gaz ce qui va lui permettre de s'évaporer. Cette photo-évaporation ne peut pas avoir lieu trop proche de l'étoile car l'énergie fournie au gaz par les photons n'est pas suffisante pour compenser la force de gravitation exercée par l'étoile. La photo-évaporation est donc seulement efficace pour les rayons $r > r_g$ ([Begelman et al., 1983](#)) : r_g est appelé "rayon gravitationnel" et correspond au rayon pour lequel la vitesse du son est égale à la vitesse de rotation képlérienne ($r_g = GM_*/c_s^2$). Le disque va alors se creuser jusqu'à séparer le disque en deux (autour de $r = r_g$) empêchant l'acheminement de matière dans les parties internes. Suite à la formation de ce vide, les parties externes se dispersent très rapidement (voir figure 3.3).

3.2.2 La formation des planètes

Les disques protoplanétaires sont le siège de la formation des planètes. Ces disques sont constitués principalement d'hydrogène et d'hélium dont l'abondance en masse est, respectivement, de 73% et 25%. Les 2% restants de la masse totale se répartissent entre les éléments plus lourds tels que l'oxygène, le carbone, l'azote, le silicium, le magnésium ou encore le soufre. Tous ces éléments constituent les matériaux de base des planètes.

Les disques sont composés à 99% de gaz et à 1% de poussières. Les grains de poussières se forment dans les éjections des étoiles en fin de vie, par condensation du gaz en expansion, et viennent ensuite enrichir le milieu interstellaire. Lors de la formation d'une étoile, le nuage moléculaire en effondrement contient également de la poussière, celle-ci est ensuite incorporée dans le disque qui se forme autour de la proto-étoile. Les poussières sont constituées d'un mélange de silicates et de carbones et sont entourées d'un manteau de glaces d'eau. Leur taille varie de ~ 100 Å jusqu'à quelques micromètres. Ce sont ces poussières qui en s'agglomérant vont former des grains de plus en plus gros jusqu'à former des planètes.

Des grains de poussières aux planètes

Sous l'action de la force gravitationnelle exercée par l'étoile, les grains de poussières oscillent de part et d'autre du plan équatorial. La force de frottement exercée par le gaz freine le

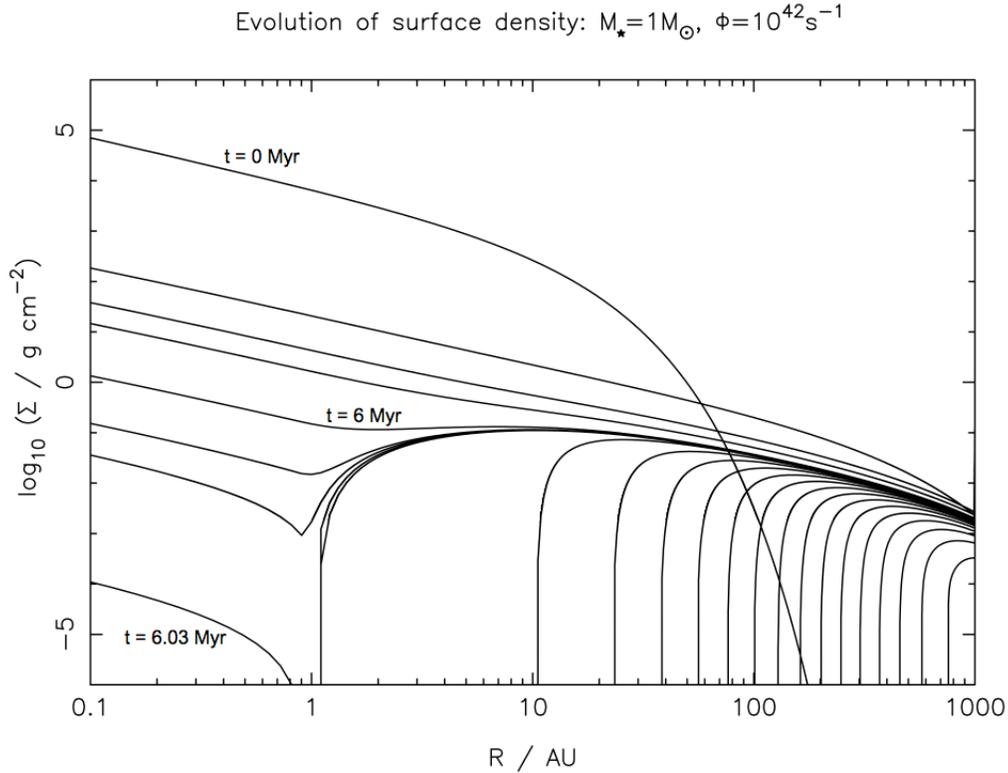


FIGURE 3.3 – Evolution de la densité de surface en fonction du temps pour une modélisation incluant la dissipation du disque par évolution visqueuse et photo-évaporation. Les résultats obtenus pour $t = 0, 2, 4, 5.9, 6, 6.01, 6.02, \dots, 6.18$ Ma sont représentés, à $t = 6.20$ Ma le disque est totalement dissipé (Alexander et al., 2006).

mouvement des grains qui finissent par sédimenter dans le plan médian. Dans le disque, les molécules de gaz sont soumises d'une part à la force gravitationnelle et d'autre part le gaz exerce une force de pression. L'équation du mouvement du gaz dans la direction radiale s'écrit :

$$\Omega^2 = \frac{1}{\rho r} \frac{\partial P}{\partial r} + \Omega_K^2 \quad (3.17)$$

Comme la pression diminue avec la distance au centre, le mouvement du gaz est dit sub-képlérien. Les grains, en raison de leur faible densité, exercent une force de pression négligeable mais sont néanmoins soumis à la forte force de frottement exercée par le gaz. Le mouvement du gaz étant sub-képlérien, les grains de tailles différentes (plus ou moins couplés avec le gaz) se placent sur des orbites différentes. Les plus petits grains sont fortement freinés par le gaz et vont acquérir la même vitesse orbitale que ce dernier. En revanche, les plus gros grains sont peu couplés avec le gaz et se déplacent sur une orbite képlérienne. Ces différences de vitesses relatives provoquent de nombreuses collisions entre les grains qui vont ainsi pouvoir s'agglomérer et grandir pour former des objets jusqu'à des tailles de l'ordre du kilomètre : les planétésimaux.

Les planétésimaux exercent les uns sur les autres des forces de gravité importantes. Deux mécanismes différents de croissance des planétésimaux ont été suggérés (voir figure 3.4). Le premier, développé par [Safronov \(1972\)](#), considère que la croissance s’effectue de façon ordonnée. Tous les planétésimaux grossissent à la même vitesse. Cependant, ce mécanisme est trop long pour former les planètes (~ 100 millions d’années). Le second mécanisme ([Greenberg et al., 1978](#)) considère que la croissance se produit par effet “boule de neige”. Le planétésimal le plus massif est l’unique corps qui grandit en attirant tous les autres planétésimaux plus légers qui gravitent autour de lui. Ce mécanisme permet la formation des planètes telluriques en des temps raisonnables. Pour la formation des planètes géantes, le modèle dit du “coeur solide” est le plus communément admis. Il suppose qu’un coeur planétaire solide se forme d’abord de la même manière que les planètes terrestres. Une fois que ce coeur est suffisamment massif, il capture du gaz à sa surface pour former l’atmosphère de la planète.



FIGURE 3.4 – Schéma de la croissance des planétésimaux : à gauche, la croissance ordonnée et à droite, la croissance par effet “boule de neige”. Crédit : [Sébastien Charnoz](#)

Une fois que les planètes se sont formées et que le gaz s’est dissipé, il ne reste plus qu’un disque de débris (objet de type Classe III, voir figure 1.1) constitué des matériaux non utilisés pour former les planètes.

3.3 Observation des disques : émission des raies de rotation moléculaire

3.3.1 Intensité spécifique et équation de transfert radiatif

L'intensité spécifique I_ν ($\text{W.m}^{-2}.\text{Hz}^{-1}.\text{sr}^{-1}$) représente la quantité d'énergie émise par la source observée par unité de surface, de fréquence et d'angle solide. Si le rayon lumineux se propage dans le vide, son intensité se conserve tout au long de son trajet. Cependant, des interactions peuvent survenir entre le rayon lumineux et la matière environnante modifiant son intensité. Celle-ci peut-être atténuée ou amplifiée (perte ou création de photons). Cette variation d'intensité, le long d'un trajet de distance l , est donnée par l'équation de transfert radiatif :

$$\frac{dI_\nu}{dl} = -\kappa_\nu I_\nu + \epsilon_\nu \quad (3.18)$$

où κ_ν est le coefficient d'absorption (atténuation du rayonnement) et ϵ_ν est le coefficient d'émission volumique (amplification du rayonnement).

Cette équation est souvent réécrite, en utilisant la fonction source $S_\nu = \epsilon_\nu/\kappa_\nu$, sous la forme :

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu + S_\nu \quad (3.19)$$

où $\tau_\nu = \int \kappa_\nu dl$ est l'épaisseur optique le long d'un trajet dl .

L'état d'excitation (population des niveaux d'énergie) d'une molécule dépend de la densité et de la température du milieu. Dans la suite de cette partie nous considèrerons la transition entre deux niveaux l (niveau inférieur) et u (niveau supérieur).

Trois processus interviennent dans la formation des raies spectrales : l'absorption, l'émission stimulée (ou induite) et l'émission spontanée, auxquels un coefficient d'Einstein (respectivement B_{lu} , B_{ul} et A_{ul}), qui représente la probabilité que le processus considéré se produise, est associé. Le coefficient d'absorption κ_ν est la combinaison linéaire des processus d'absorption et d'émission stimulée et a pour expression :

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu\Phi_\nu}{4\pi}(B_{ul}n_u - B_{lu}n_l) \quad (3.20)$$

où Φ_ν est le profil de raie, tel que $\Phi_{\nu_0} \sim c/(\nu_0\Delta\nu)$, $\Delta\nu$ étant la largeur à mi-hauteur de la raie et ν_0 sa fréquence centrale. n_l et n_u sont les populations des niveaux inférieur et supérieur de la transition. h est la constante de Planck.

3.3.2 Population des niveaux : équation de l'équilibre statistique

Le bilan des transferts de population entre l et u , compte tenu des transferts radiatifs et collisionnels, s'écrit :

$$n_l \sum_{l=1}^{N_{lev}} (B_{lu}J + C_{lu}) = n_u \sum_{l=1}^{N_{lev}} (B_{ul}J + A_{ul} + C_{ul}) \quad (3.21)$$

J est le champ de rayonnement interne du milieu (en absence de rayonnement externe). Le membre de gauche correspond aux termes peuplant le niveau u (absorption et excitation collisionnelle) tandis que le membre de droite correspond aux termes le dépeuplant (émission stimulée, émission spontanée et désexcitation collisionnelle). Nous avons donc un système d'équations couplées et il est nécessaire de faire une approximation pour pouvoir résoudre ce problème.

3.3.3 Approximation de l'Equilibre Thermodynamique Local (ETL)

L'équation de transfert radiatif (3.19), dans le cas où la fonction source est constante le long de la ligne de visée, s'écrit après intégration :

$$I_\nu(\tau) = I_\nu(0)e^{-\tau} + S_\nu(1 - e^{-\tau}) \quad (3.22)$$

En l'absence de source de rayonnement $I_\nu(0)$ derrière le milieu observé et si ce dernier est à l'équilibre thermodynamique local, la fonction source est égale à la fonction de Planck B_ν :

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (3.23)$$

L'intensité spécifique I_ν a donc pour expression :

$$I_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} (1 - e^{-\tau}) \quad (3.24)$$

Aux longueurs d'ondes millimétriques, l'inégalité $h\nu \ll k_B T$ (approximation de Rayleigh-Jeans) est vérifiée. La fonction de Planck (3.23) se simplifie comme :

$$B_\nu(T) \approx \frac{2\nu^2 k_B T}{c^2} \quad (3.25)$$

Par analogie, on exprime l'intensité spécifique en température de brillance T_b (exprimée en Kelvins) :

$$T_b = \frac{c^2}{2k_B \nu^2} I_\nu = (1 - e^{-\tau}) \frac{h\nu}{k_B} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (3.26)$$

A l'équilibre thermodynamique local, les niveaux d'énergie sont peuplés selon la distribution de Boltzmann :

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} e^{-h\nu/k_B T} \quad (3.27)$$

où g_l et g_u sont les dégénérescences des niveaux d'énergie E_l et E_u .

La densité sommée sur tous les niveaux d'énergie est :

$$N = N_u Z g_u e^{-E_u/k_B T} \quad (3.28)$$

où Z est la fonction de partition définie comme :

$$Z = \sum_i g_i e^{-E_i/k_B T} \quad (3.29)$$

Les relations entre les coefficients d'Einstein à l'ETL sont :

$$g_l B_{lu} = g_u B_{ul} \quad (3.30)$$

$$A_{ul} = B_{ul} \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} \quad (3.31)$$

Le coefficient d'absorption κ_ν donné par l'équation 3.20 se réécrit alors, en utilisant les équations 3.27 et 3.30 :

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} \Phi_\nu n_u B_{ul} [e^{h\nu/k_B T} - 1] \quad (3.32)$$

L'épaisseur optique τ_ν est l'intégrale de κ_ν le long de la ligne de visée, tandis que la densité de colonne N (en cm^{-2}) d'une espèce est l'intégrale de sa densité le long de la ligne de visée. τ_ν s'écrit alors à partir de l'équation 3.20 :

$$\tau_\nu = \frac{h}{\Delta\nu} N_u B_{ul} (e^{h\nu/k_B T} - 1) \quad (3.33)$$

En utilisant la loi de Boltzmann (équation 3.27), la température de brillance donnée par l'équation 3.26 peut donc s'écrire en fonction de τ_ν :

$$T_b = \frac{hc^3 N_u A_{ul}}{8\pi k_B \nu^2 \Delta\nu} \left(\frac{1 - e^{-\tau_\nu}}{\tau_\nu} \right) \quad (3.34)$$

L'intensité d'une raie intégrée sur la vitesse étant $W = \int T_b \Delta\nu$, on peut donc en déduire, à partir des équations 3.33 et 3.28, la densité de colonne totale d'une espèce :

$$N = \frac{Z}{g_u} \frac{8\pi k_B \nu^2 W}{hc^3 A_{ul}} \left(\frac{\tau_\nu}{1 - e^{-\tau_\nu}} \right) e^{E_u/k_B T} \quad (3.35)$$

Dans le cas optiquement mince ($\tau_\nu \ll 1$), on a $\tau_\nu/(1 - e^{-\tau_\nu}) = 1$, et il existe donc une relation directe entre l'intensité intégrée W et la densité de colonne N de la molécule observée.

Densité critique

La densité critique n_{cr} est la densité pour laquelle un équilibre entre les phénomènes radiatifs et collisionnels apparaît. Dans un premier cas où la densité du milieu est très faible ($n \ll n_{\text{cr}}$), les phénomènes radiatifs sont prépondérants par rapport aux phénomènes collisionnels : les molécules sont en équilibre thermodynamique local avec la radiation. Les interactions avec les photons thermalisent les molécules : la température d'excitation des molécules est donc égale à la température de radiation. Dans un deuxième cas, si la densité du milieu est très forte ($n \gg n_{\text{cr}}$), les phénomènes collisionnels sont prépondérants par rapport aux phénomènes radiatifs : les molécules sont en équilibre thermodynamique local avec le milieu. Les collisions thermalisent le milieu : la température d'excitation des molécules est donc égale à la température cinétique. Pour ces deux cas, la population des niveaux se distribue selon la loi de Boltzmann. En revanche, dans le troisième cas où $n \sim n_{\text{cr}}$, le milieu n'est pas à l'ETL et il est nécessaire de modéliser les populations des niveaux en utilisant une autre approximation.

3.3.4 Approximation de la probabilité d'échappement

Une méthode permettant de découpler les équations de transfert radiatif de celles des populations des niveaux est celle dite de la probabilité d'échappement (Sobolev, 1960). L'idée consiste à introduire un facteur multiplicatif qui décrit la probabilité pour un photon de s'échapper du milieu après avoir été généré. Dans le cas où la source est opaque à sa propre radiation, J (le champ de rayonnement interne du milieu) approche la valeur de la fonction source S . Si on considère β , la probabilité pour un photon de s'échapper, on a alors $J = S(1 - \beta)$. Le découplage est dû au fait que β ne dépend pas du champ de rayonnement, en revanche, il dépend de la géométrie de la source et de l'épaisseur optique :

$$\beta = \frac{1 - e^{-\tau}}{\tau} \quad (3.36)$$

En remplaçant J et $S = A_{ul}n_u/(B_{lu}n_l - B_{ul}n_u)$ dans l'équation 3.21 et en utilisant l'équation 3.31, on obtient l'équation de population :

$$n_u \sum_{l=1}^{N_{lev}} (C_{ul} - \beta A_{ul}) = \sum_{l=1}^{N_{lev}} n_l C_{lu} \quad (3.37)$$

qui ne dépend plus de l'intensité de la radiation.

3.4 Modélisation des disques protoplanétaires avec le code Nautilus

Dans cette section, je présente la structure physique du disque utilisée dans Nautilus. Le disque possède une géométrie cylindrique et axisymétrique par rapport au plan. Les différentes grandeurs physiques sont donc définies en fonction de (r, z) , où r est le rayon, et z l'altitude dans le disque. Les différents paramètres décrivant le disque sont décrits dans cette partie.

3.4.1 La densité volumique

La structure verticale en densité est obtenue par intégration de l'équation d'équilibre hydrostatique dépendant de la température en z :

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial z} = - \left[\left(\frac{GM_* z}{r^3} \right) \left(\frac{\mu m_H}{k_B T} \right) + \frac{\partial \ln T}{\partial z} \right] \quad (3.38)$$

où G est la constante gravitationnelle, M_* est la masse de l'étoile centrale, $\mu = 2.4$ est la masse moléculaire moyenne par atome d'hydrogène de masse m_H et k_B est la constante de Boltzmann.

3.4.2 La hauteur d'échelle

Sous l'hypothèse de l'équilibre hydrostatique vertical, la hauteur d'échelle H qui dépend de la température en z a pour expression :

$$H(r, z) = \sqrt{\frac{k_B T(r, z) r^3}{\mu m_H G M_*}} \quad (3.39)$$

3.4.3 La densité de surface

Nous utilisons une loi de puissance selon le rayon pour exprimer la variation radiale de la densité surfacique :

$$\Sigma(r) = \Sigma_{100} \left(\frac{r}{100 \text{ UA}} \right)^{-1.5} \quad (3.40)$$

avec $\Sigma_{100} = 0.8 \text{ g.cm}^{-2}$. La densité de colonne d'hydrogène N_H à 100 UA est alors donnée par $\Sigma_{100}/\mu m_H \approx 4 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$.

Ce modèle est compatible avec les observations et les prédictions théoriques pour les disques d'accrétion visqueux de type α .

3.4.4 La température

Le profil vertical de température est défini de la manière suivante ([Williams and Best, 2014](#)) :

$$T(r, z \geq z_q) = T_{\text{atm}} \quad (3.41)$$

$$T(r, z < z_q) = T_{\text{plan}} + (T_{\text{atm}} - T_{\text{plan}}) \left[\sin \left(\frac{\pi z}{2z_q} \right) \right]^{2\delta} \quad (3.42)$$

où δ est la pente du profil de température que nous prenons égale à 2 dans notre modèle et $z_q = 4H$ est la hauteur du disque à laquelle la couche atmosphérique est atteinte.

T_{plan} et T_{atm} sont, respectivement, la température dans le plan du disque et la température atmosphérique (la température à $z \geq 4H$). Elles s'expriment avec une loi de puissance du rayon :

$$T_{\text{plan}}(r) = T_{\text{plan},0} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{-q} \quad (3.43)$$

$$T_{\text{atm}}(r) = T_{\text{atm},0} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{-q} \quad (3.44)$$

avec $T_{\text{plan},0}$ et $T_{\text{atm},0}$ les températures au rayon de référence r_0 . L'exposant q , qui exprime la variation radiale de la température, est égale à 0.55 dans notre modèle.

3.4.5 L’extinction visuelle

L’extinction visuelle A_V est reliée à la densité de colonne d’hydrogène. Pour des grains de rayon $0.1 \mu\text{m}$, elle s’exprime de la façon suivante (Wagenblast and Hartquist, 1989) :

$$A_V = \left(\frac{\rho_d/\rho_g}{10^{-2}} \right) 1.6 \times 10^{-21} N_H \quad (3.45)$$

où N_H est la densité de colonne d’hydrogène et le rapport ρ_d/ρ_g est la fraction en masse de poussières par rapport au gaz (voir section 2.3.1) que nous considérons constante et égale à 10^{-2} partout dans le disque.

3.4.6 Le flux UV

Pour les disques entourant les étoiles T Tauri, il est généralement admis que le rapport entre flux UV stellaire et le flux UV interstellaire de Draine (Draine, 1978) est de $\sim 10^4$ (Herbig and Goodrich, 1986) à 100 UA de rayon. Le flux UV de l’étoile est donc supposé être un champ de Draine auquel est appliqué un facteur d’échelle χ et dilué par un facteur $1/r^2$. Dans notre modèle, on utilise :

$$\chi = \text{UV}_{100} \left(\frac{\sqrt{r^2 + (4H)^2}}{100 \text{ UA}} \right)^{-2} . \quad (3.46)$$

Seule l’extinction verticale de ce champ UV est considérée. L’extinction radiale est assumée très efficace de sorte que la grande majorité des photons UV vus par le disque sont diffusés par les grains à haute altitude. On suppose que la moitié du champ UV stellaire est diffusé à la surface du disque, l’autre moitié étant diffusée vers l’extérieur.

3.4.7 Le “self-shielding” de H_2 et CO

3.4.7.1 Photodissociation de H_2

Le rayonnement UV de l’étoile contribue à photodissocier le dihydrogène. Dans les couches les plus profondes du disque, le flux UV s’atténue et la photodissociation diminue, ce qui permet à l’hydrogène moléculaire de s’auto-écranter. Le taux de photodissociation de H_2 a pour expression (Lee et al., 1996) :

$$R_{\text{H}_2} = \chi R_0(\text{H}_2) f_{\text{H}_2, \text{H}_2}(N_{\text{H}_2}) \quad (3.47)$$

où χ est le rapport du flux UV dans le modèle sur le flux de Draine (voir équation 3.46), $R_0(\text{H}_2) = 2.54 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ est le taux de photodissociation de H_2 sans atténuation, et $f_{\text{H}_2, \text{H}_2}(N_{\text{H}_2})$ est le facteur d’auto-écranterage de H_2 qui dépend de la densité de colonne de H_2 .

3.4.7.2 Photodissociation de CO

La molécule CO est particulièrement sensible au champ UV de l'étoile. De la même façon que H₂, CO peut s'auto-écranter lorsque la photodissociation diminue. Elle est également écrantée par les poussières et par la molécule de H₂. Le taux de photodissociation de CO a pour expression (Lee et al., 1996) :

$$R_{\text{CO}} = \chi R_0(\text{CO}) f_{\text{CO,grains}}(A_V) f_{\text{CO,CO}}(N_{\text{CO}}) f_{\text{CO,H}_2}(N_{\text{H}_2}) \quad (3.48)$$

où $R_0(\text{CO}) = 1.03 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ est le taux de photodissociation de CO sans atténuation, $f_{\text{CO,grains}}$ est le facteur d'atténuation du champ UV par les poussières, $f_{\text{CO,CO}}$ est le facteur d'auto-écranage de CO qui dépend de la densité de colonne de CO, et $f_{\text{CO,H}_2}$ est le facteur d'atténuation du champ UV par H₂ qui dépend de la densité de colonne de H₂.

4

Le réservoir de carbone et le rapport CO/H₂ dans les disques protoplanétaires

Sommaire

4.1	Comment tracer la masse des disques ?	46
4.1.1	L'émission thermique des poussières	47
4.1.2	L'émission des raies de CO	47
4.2	Modélisation de la chimie des disques	48
4.3	L'abondance de CO dans les disques protoplanétaires	50
4.4	La chimie du carbone dans les disques : importance des réactions à la surface des grains	52
4.4.1	La position dans le disque	54
4.4.2	L'âge du disque	54
4.4.3	La Photodésorption	56
4.4.4	Le taux de désorption induite par les particules du rayonnement cosmique	57
4.5	L'impact des conditions initiales sur la chimie du carbone : le nuage moléculaire	58
4.6	La diffusion sur les surfaces pour expliquer les faibles rapports CO/H₂ observés	62

4.1 Comment tracer la masse des disques ?

L'un des paramètres clés pour déterminer si les planètes peuvent se former au sein d'un disque est la masse de ce dernier. L'observation de notre Système Solaire permet de contraindre certains paramètres du disque protoplanétaire initial et notamment la distribution de matière. Pour cela, un modèle, dit *Nébuleuse Solaire de Masse Minimale* (MMSN pour *Minimum Mass Solar Nebula*) a été construit par Hayashi (1981) en considérant que la position actuelle des planètes correspond à celle où elles se sont formées (la migration n'est donc pas prise en compte) et sous l'hypothèse que le disque protoplanétaire avait une composition proche de la composition actuelle du Soleil. En évaluant la masse d'éléments lourds présente aujourd'hui dans les planètes de notre Système Solaire, et en faisant l'hypothèse que le rapport solides/volatiles est identique à celui du Soleil, on obtient alors une masse minimale de matière nécessaire pour la formation des planètes (voir Figure 4.1). Hayashi (1981) estime une masse minimum d'environ 0.02 masse solaire.

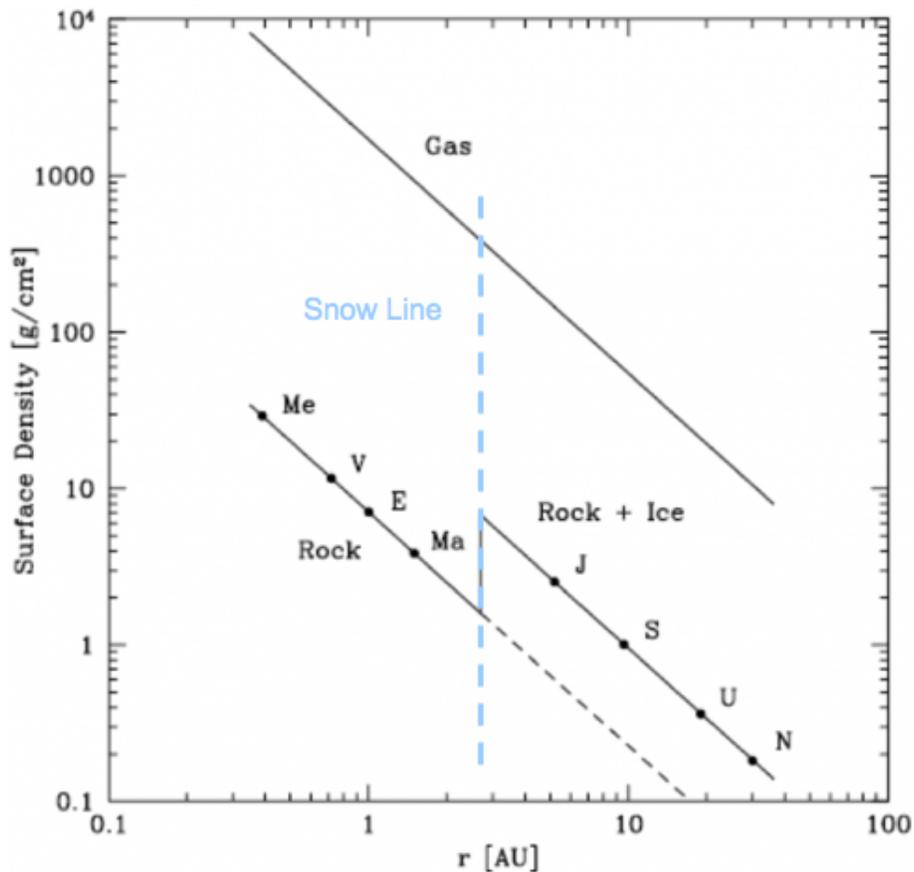


FIGURE 4.1 – Profil de densité radiale de la Nébuleuse Solaire de Masse Minimale (MMSN). On observe un saut de densité aux alentours de 3 UA en raison de la “ligne des glaces”, définie comme la distance au delà de laquelle les molécules les plus volatiles, telles que H₂O, CO₂, CH₄ ou NH₃, se condensent sur les grains. Crédit : [Observatoire de Paris](#)

Pour savoir si les disques protoplanétaires en dehors de notre Système Solaire peuvent être le siège de la formation de planètes, il est donc primordial de déterminer leur masse. H₂, le constituant majeur du gaz contenu dans les disques (environ 80 % de la masse) est très difficilement détectable car cette molécule ne possède pas de moment dipolaire. D'autres méthodes sont donc utilisées pour estimer cette masse.

4.1.1 L'émission thermique des poussières

L'une de ces méthodes repose sur l'émission thermique des grains de poussières. L'émission des petits grains de poussières étant optiquement mince pour les longueurs d'onde de l'ordre du mm, on peut alors remonter à la quantité de grains N (Hildebrand, 1983) :

$$F_\nu = N \frac{\sigma}{D^2} Q(\nu) B_\nu(T_{\text{gr}}) \quad (4.1)$$

où F_ν est la densité de flux. σ est la section efficace des grains, D la distance de l'objet observé, $Q(\nu)$ l'émissivité des grains et $B_\nu(T_{\text{gr}})$ la fonction de Planck.

En considérant une densité de grains ρ , la masse de la poussière définie comme $M_{\text{gr}} = Nv\rho$ (avec v le volume d'un grain de rayon r_{gr}), s'écrit alors (Hildebrand, 1983) :

$$M_{\text{gr}} = \frac{F_\nu D^2}{B_\nu(T_{\text{gr}})} \frac{4r_{\text{gr}}}{3Q(\nu)} \rho \quad (4.2)$$

En supposant que le rapport entre la masse du gaz et celle des poussières ($M_{\text{g}}/M_{\text{gr}}$) est égale à 100 (similaire à la valeur mesurée dans le milieu interstellaire), on détermine donc la masse du gaz comme :

$$M_{\text{g}} = \frac{F_\nu D^2}{B_\nu(T_{\text{gr}})} \frac{4r_{\text{gr}}}{3Q(\nu)} \rho \frac{M_{\text{g}}}{M_{\text{gr}}} \quad (4.3)$$

Cependant, l'estimation de la masse des disques protoplanétaires à l'aide de l'équation 4.3 souffre de plusieurs incertitudes. En effet, la taille des grains et par conséquent leur émissivité et température n'est pas la même pour tous les grains et est très incertaine. Pour s'affranchir de cette limite, une deuxième méthode consiste donc à utiliser l'émission des raies de rotation moléculaire.

4.1.2 L'émission des raies de CO

De la même façon que pour la poussière, l'émission de raies de rotation moléculaire optiquement mince permet de déterminer le nombre de molécules. Néanmoins, cette méthode requiert une très bonne connaissance de la structure du disque (notamment la température d'excitation de la molécule T_{ex}) et de la distribution spatiale des molécules. CO et ses isotopes sont très souvent utilisés comme traceurs du gaz, d'une part parce que ce sont des molécules facilement observables et d'autre part parce que la chimie de CO est supposée bien connue. Si l'émission de ¹²CO, l'un des isotopes les plus abondants, est optiquement épaisse, l'émission d'autres isotopes comme celle de C¹⁸O est optiquement fine et permet de sonder le disque

en profondeur. Dans ce cas, le flux de l'émission intégré S de la molécule X s'estime comme (Dutrey et al., 1997) :

$$S = \frac{B_\nu(T_{\text{ex}})}{D^2} \kappa x(X) M_g \quad (4.4)$$

où κ est le coefficient d'absorption de la molécule et $x(X)$ est l'abondance de la molécule X par rapport à H₂.

Cette méthode nécessite donc de bien connaître la valeur de $x(X)$. Pour la molécule CO, le rapport CO/H₂ des disques a longtemps été supposé égale à 10^{-4} : sa valeur dans le milieu interstellaire. Cependant des observations ont évalué un rapport CO/H₂ plus faible que cette valeur "attendue" car mesurée dans le milieu interstellaire diffus. Cette déplétion de CO est observée dans de nombreux disques : DM Tau et GG Tau (Dutrey et al., 1997) ou encore plus récemment dans TW Hya (Favre et al., 2013). Cependant, elle ne peut être expliquée seulement par la photodissociation de CO dans les couches de surface et son collage sur les grains dans le plan du disque. Les densités rencontrées au sein des disques protoplanétaires étant beaucoup plus importantes que celles des milieux diffus, il est fort probable que l'évolution chimique de CO ne soit pas la même pour ces deux environnements. En effet, en raison des fortes densités, CO évolue selon une chimie plus complexe. Une chimie de surface très active est notamment responsable de sa destruction et le carbone se retrouve ainsi piégé sur les grains de poussières sous diverses formes.

J'ai donc utilisé le modèle gaz-grain Nautilus pour étudier l'impact de la chimie de surface sur l'évolution du carbone au sein des disques protoplanétaires.

4.2 Modélisation de la chimie des disques

Le modèle Nautilus calcule les abondances des espèces en phase gazeuse et à la surface des grains en fonction du temps. Le modèle est présenté en détail dans le chapitre 2. Le réseau chimique considéré pour ce travail est quant à lui décrit dans la section 2.1. Pour obtenir la composition chimique initiale du disque, l'évolution chimique du nuage parent est simulée pendant 10^6 ans. Des conditions typiques de nuage dense sont considérées : une densité de noyaux d'hydrogène de $2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$, une température du gaz égale à celle des grains (10 K), une extinction visuelle de 10, et un taux d'ionisation par les particules du rayonnement cosmique de $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$. Un rapport C/O = 0.5 est utilisé. Les abondances élémentaires sont listées dans la Table 4.1 (voir section 2.5.2).

Deux valeurs d'abondances sont utilisées pour l'oxygène :

- 3.3×10^{-4} : un cas de faible déplétion, qui utilise la valeur déterminée par (Jenkins, 2009) dans le nuage diffus ζ Oph ;
- 1.4×10^{-4} : un cas de forte déplétion.

Les rapports C/O correspondant à ces deux abondances sont, respectivement, 0.5 et 1.2.

La structure physique du disque considérée pour ce travail est celle décrite dans la section 3.4. Je considère $UV_{100} = 410$ pour le flux UV à 100 UA de rayon (voir section 3.4.6) ; re-

Espèce	Abondance	
H ₂	0.5	
He	9×10^{-2}	<i>a</i>
N	6.2×10^{-5}	<i>b</i>
O	3.3×10^{-4}	<i>c</i> (C/O=0.5)
	1.4×10^{-4}	<i>c</i> (C/O=1.2)
C ⁺	1.7×10^{-4}	<i>b</i>
S ⁺	8×10^{-9}	<i>d</i>
Si ⁺	8×10^{-9}	<i>d</i>
Fe ⁺	3×10^{-9}	<i>d</i>
Na ⁺	2×10^{-9}	<i>d</i>
Mg ⁺	7×10^{-9}	<i>d</i>
P ⁺	2×10^{-10}	<i>d</i>
Cl ⁺	1×10^{-9}	<i>d</i>

- a.* Voir [Wakelam and Herbst \(2008\)](#).
- b.* [Jenkins \(2009\)](#).
- c.* Voir [Hincelin et al. \(2011\)](#).
- d.* “Low metal abundances” ([Graedel et al., 1982](#)).

TABLE 4.1 – Abondances initiales ($/n_{\text{H}}$) utilisées dans notre modèle.

présentatif d’une étoile T Tauri de faible masse telle que DM Tau. La température du grain est un paramètre très important qui contrôle le temps de diffusion des espèces à la surface du grain et par conséquent l’efficacité des réactions de surface. Plus le grain est chaud, plus les espèces présentes à sa surface vont diffuser rapidement (voir équation 2.21). J’ai donc étudié la chimie du carbone en fonction de la température du disque, celle-ci est un paramètre variable qui évolue selon l’équation 3.42 (définie dans la section 3.4.4). J’ai créé une grille de modèles en faisant varier les valeurs de $T_{\text{plan},0}$ et $T_{\text{atm},0}$ (équations 3.43 et 3.44). Ainsi, la température dans le plan du disque $T_{\text{plan}}(r)$ varie entre 4 et 52 K, tandis que la température dans la couche externe varie entre 17 et 95 K (pour $r = 300$ UA). Je considère également différents modèles décrits dans la Table 4.2. Le Modèle 1 est le modèle nominal. Dans le Modèle 2, un plus fort gradient de température est considéré en augmentant la valeur de $T_{\text{atm},0}$. Dans le Modèle 3, la température des grains est différente de celle du gaz ($T_{\text{gaz}} > T_{\text{gr}}$) : le profil de température du gaz est le même que celui du Modèle 2 (fort gradient) tandis que le profil de température des grains est le même que celui du Modèle 1 (faible gradient).

La figure 4.2 présente les profils de température et d’extinction visuelle pour six modèles. Selon le profil de température considéré, les échelles de hauteur du disque sont différentes (équation 3.39). Du modèle le plus froid au modèle le plus chaud sur la figure 4.2, les échelles de hauteur à 300 UA de rayon sont, respectivement, 29, 62, et 88 UA.

TABLE 4.2 – Description des modèles

	$T_{\text{gaz}} = T_{\text{gr}}$
Modèle 1	Faible gradient de température défini comme : $T_{\text{atm},0} = T_{\text{plan},0} + 300 \text{ K}^a$
	$T_{\text{gaz}} = T_{\text{gr}}$
Modèle 2	Fort gradient de température défini comme : $T_{\text{atm},0} = T_{\text{plan},0} + 1000 \text{ K}^a$
	$T_{\text{gaz}} > T_{\text{gr}}$
Modèle 3	Profil de température des grains semblable au Modèle 1. Profil de température du gaz semblable au Modèle 2.

a. pour $r = 1 \text{ UA}$

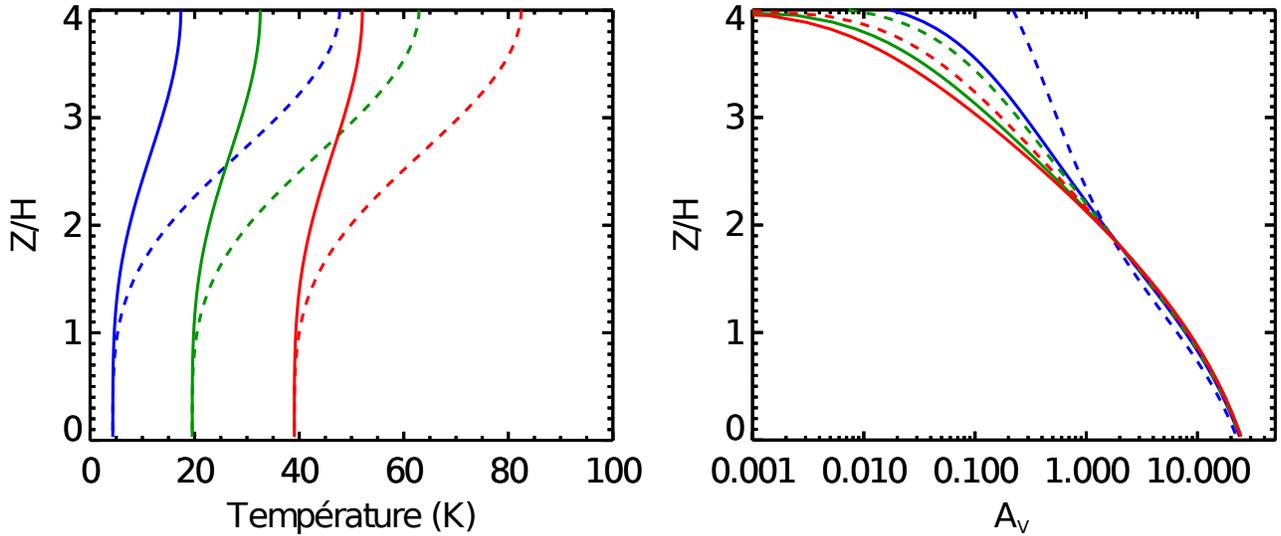


FIGURE 4.2 – Exemples de profils de température et d’extinction visuelle pour les modèles 1 (traits continus) et 2 (traits pointillés) (voir table 4.2). Pour chacun de ces deux modèles, les profils verticaux sont représentés pour trois valeurs de température du plan (T_{plan}) à 300 UA : $\sim 4 \text{ K}$ (en bleu), $\sim 20 \text{ K}$ (en vert), et $\sim 40 \text{ K}$ (en rouge).

4.3 L’abondance de CO dans les disques protoplanétaires

Sur la figure 4.3 sont représentés les profils verticaux d’abondance de CO pour les six profils de température visibles sur la figure 4.2. Dans la couche externe, l’abondance de CO est principalement affectée par la photodissociation. En raison des différentes échelles de hauteur du disque selon la température, l’extinction visuelle à $Z/H=4$ varie selon les modèles (voir figure 4.2). Dans la couche de photodissociation, CO est plus efficacement photodissociée dans

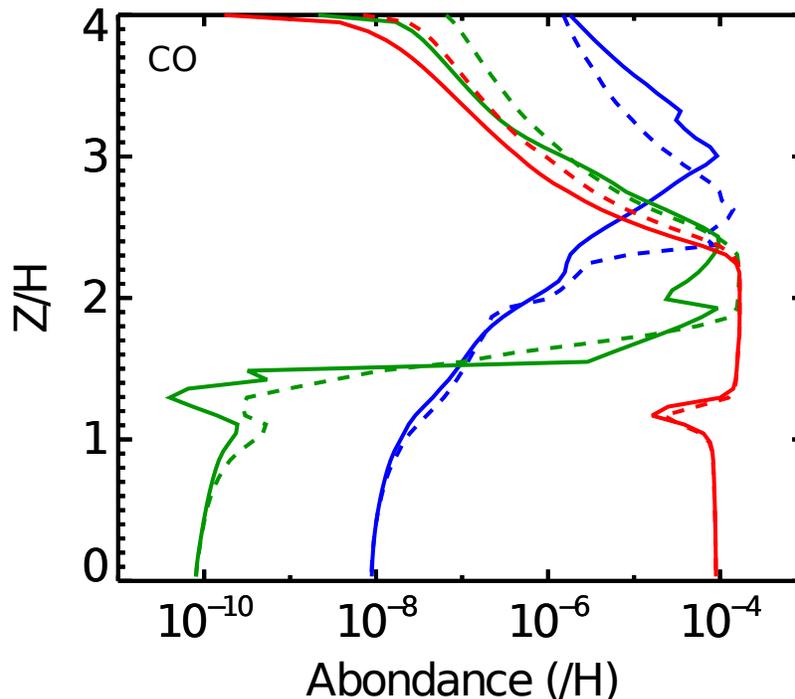


FIGURE 4.3 – Profils verticaux d’abondance de CO en phase gazeuse pour trois profils de température différents (représentés sur la figure 4.2) et pour les modèles 1 et 2. Ces résultats sont obtenus à 300 UA de rayon et pour un disque âgé de 10^6 ans.

le cas de modèles plus chauds (en rouge et vert) car l’extinction visuelle est plus faible.

L’abondance la plus grande est atteinte dans la couche moléculaire dont la hauteur et l’épaisseur diffèrent selon le modèle. Pour le modèle le plus froid avec un fort gradient de température (ligne bleue pointillée), CO atteint la valeur maximale de $\sim 10^{-4}$ à une échelle de hauteur plus petite que dans le cas du modèle le plus froid à faible gradient de température (ligne bleue continue). Cela est dû au fait que la température de désorption de CO est atteinte à plus basse altitude dans le cas du modèle 2 (à fort gradient de température, voir figure 4.2).

Dans le plan du disque, la plus grande abondance de CO est obtenue avec le modèle pour lequel la température du plan est la plus élevée ~ 40 K (en rouge), et donc pour lequel la désorption de CO est la plus efficace. Pour de telles températures, la déplétion de CO est même très faible. Néanmoins, la désorption n’est pas l’unique processus contrôlant l’abondance de CO en phase gazeuse. Ainsi, son abondance dans le plan est plus élevée avec le modèle pour lequel $T_{\text{plan}} \sim 4$ K qu’avec le modèle à ~ 20 K dans le plan. En effet, aux alentours de 15-20 K, s-CO diffuse à la surface du grain pour former des molécules plus complexes telles que s-CO₂, s-H₂CO, et s-CH₃OH. En revanche, pour des températures trop faibles (< 9 K), la diffusion des espèces à la surface du grain est beaucoup moins efficace et s-CO n’est donc plus détruit sur les grains.

Les profils d’abondance de CO obtenus pour les différents modèles nous montrent à quel point CO est sensible à la température du disque mais également, dans une moindre mesure, au

gradient de température. Lorsque $T_{\text{plan}} > 20$ K, ce gradient n’affecte que très peu la distribution de CO car sa température de désorption est de toute façon atteinte dans la couche moléculaire quelque soit le gradient considéré.

Pour les modèles représentés sur la figure 4.3, seuls les plus chauds (en rouge) atteignent la valeur $\text{CO}/\text{H}_2 \sim 10^{-4}$. Pour les autres modèles, plus froids, ce rapport est beaucoup plus faible pour deux raisons principales :

- la couche moléculaire, dans laquelle CO est le plus efficacement formée, est beaucoup moins large ;
- la déplétion de CO, en raison de son adsorption et des réactions à la surface du grain, est très importante dans le plan du disque.

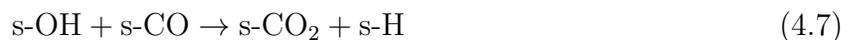
L’abondance de la molécule CO dépend donc fortement du profil de température et de la chimie à la surface des grains. Un rapport $\text{CO}/\text{H}_2 \sim 10^{-4}$ n’est atteint que dans le cas de disques chauds avec nos modèles. Les abondances initiales de O et C⁺ étant, respectivement, 3.3×10^{-4} et 1.7×10^{-4} (voir Table 4.1) : quels sont donc les principaux porteurs de carbone dans le cas de disques “froids” ($T_{\text{plan}} < 30$ K) ?

4.4 La chimie du carbone dans les disques : importance des réactions à la surface des grains

Dans cette section, j’étudie l’évolution chimique des molécules carbonées en fonction de la température du disque. Je me suis restreinte à l’étude des molécules les plus abondantes au sein des disques protoplanétaires, c’est-à-dire celles dont l’abondance (par rapport au nombre total de protons) est $\geq 10^{-11}$. Comme pour les précédents chapitres, pour chaque molécule X, s-X fait référence aux molécules adsorbées à la surface des grains, et X aux molécules de la phase gazeuse.

La figure 4.4 représente les abondances et les densités de colonne de certaines molécules carbonées en phase gazeuse et à la surface des grains en fonction de la température dans le plan du disque T_{plan} . Les profils de température correspondants sont présentés dans la section 4.2.

Pour le Modèle 1, et pour T_{plan} compris entre 5 et ~ 15 K, s-CO est le principal porteur de carbone. Pour des températures plus élevées, son abondance décroît car la molécule est convertie en d’autres espèces telles que s-CH₄. La photodissociation de CO par les photons UV secondaires en phase gazeuse et à la surface du grain contribue à alimenter le milieu en carbone atomique qui va réagir à la surface des grains pour former s-CH₄. Au dessus de 15 K dans le plan du disque, s-CO₂ devient la molécule carbonée la plus abondante. Les principales réactions responsables de sa formation sont :



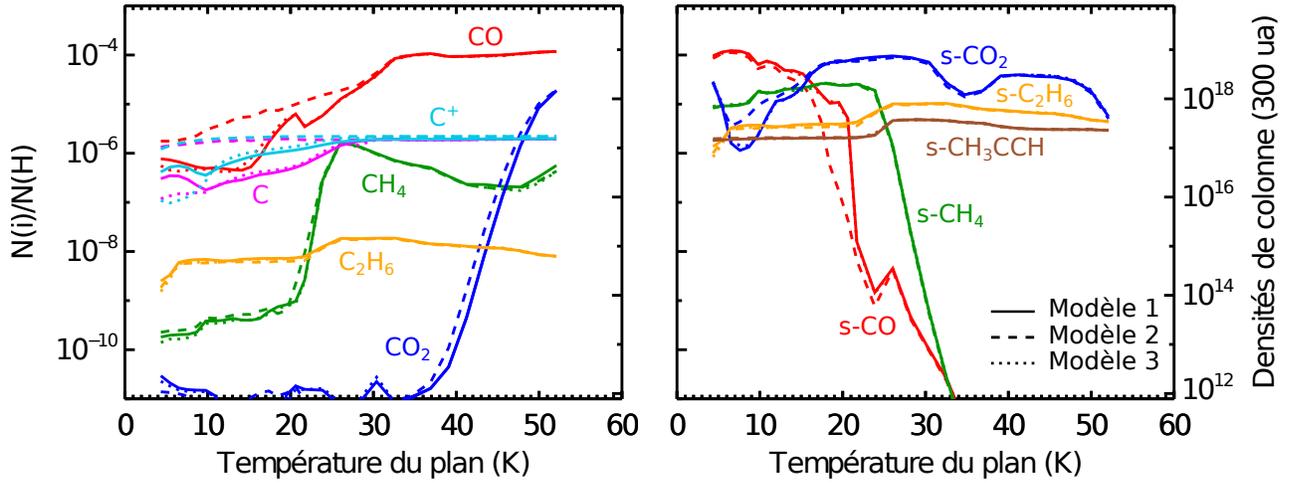


FIGURE 4.4 – Abondances et densités de colonne (cm^{-2}) en phase gazeuse et à la surface des grains, pour les espèces carbonées parmi les plus abondantes, en fonction de la température dans le plan du disque (T_{plan}). Les résultats sont représentés pour les trois modèles décrits dans la table 4.2 et pour un rayon de 300 UA.

La réaction 4.6, sans barrière d’activation, et la réaction 4.7, dont l’énergie d’activation est de 80 K, contribuent à former s-CO₂ efficacement. Malgré une forte énergie d’activation (1000 K), la réaction 4.5 est la principale voie de formation de s-CO₂ dans le modèle. La température du grain permet d’augmenter la mobilité des espèces à sa surface, les réactions par diffusion sont donc plus efficaces et l’abondance de s-CO₂ augmente. Si la température du grain est assez élevée pour former abondamment s-CO₂, elle est en revanche trop faible pour permettre son évaporation dans la phase gazeuse. Pour des températures dans le plan encore plus élevées (>30 K), la désorption de CO devient suffisamment efficace pour que la molécule devienne le principal réservoir de carbone.

Pour des températures comprises entre 10 et 20 K, s-CH₃OH et s-H₂CO sont également efficacement formées par les réactions suivantes :



En revanche, leurs abondances diminuent fortement lorsque la température augmente car s-H, s-HCO, s-O, et s-CH₂ désorbent facilement au dessus de 20 K.

Dans le cas du Modèle 3, pour lequel $T_{\text{gaz}} > T_{\text{grain}}$, les abondances calculées sont très similaires à celles obtenues avec le Modèle 1 (les courbes se superposent sur la figure 4.4). La température du grain apparaît donc comme le paramètre le plus important pour l’évolution chimique des espèces étudiées ici. Quant au gradient de température, pour T_{plan} compris entre 25 et 50 K, son influence sur les abondances des molécules est très faible, à la fois dans la phase

gazeuse et à la surface des grains. Pour des températures inférieures à 25 K, les abondances de CO, C, et C⁺ sont plus élevées avec le Modèle 2 en raison de la désorption de s-CO (la température dans la couche moléculaire étant plus élevée avec le modèle à fort gradient, voir figure 4.2).

4.4.1 La position dans le disque

Les résultats présentés jusqu'ici ont été obtenus à $r = 300$ UA. A $r = 100$ UA, les principaux porteurs de carbone sont représentés sur la figure 4.6. A 100 UA de rayon, pour un profil de température donné, la densité (voir figure 4.5), l'extinction visuelle et le flux UV sont plus élevés qu'à 300 UA de rayon. Le temps de conversion d'une espèce étant inversement proportionnel à la densité, plus celle-ci est élevée, plus la conversion de CO en s-CH₄ se fait rapidement. Les réservoirs de carbone sont donc s-CH₄ et s-CO pour $T_{\text{plan}} \leq 17$ K, s-CO₂ entre 17 et 34 K, et CO à plus forte température.

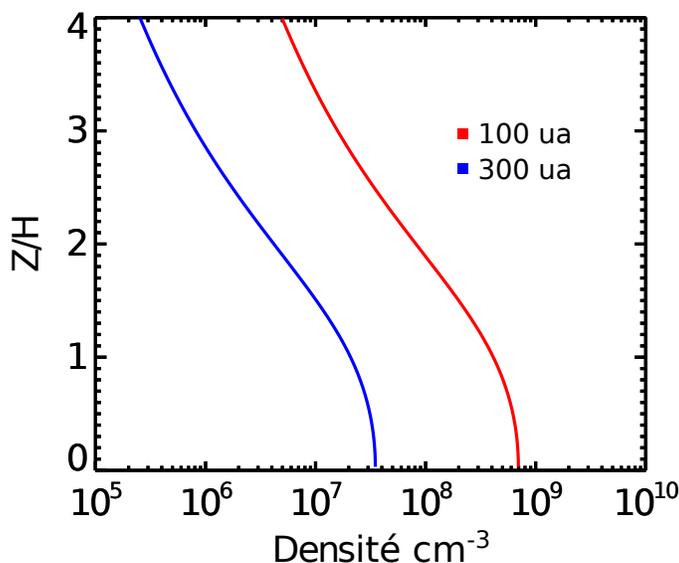


FIGURE 4.5 – Comparaison des densités rencontrées dans des disques à 100 et 300 UA de rayon.

4.4.2 L'âge du disque

Le processus de conversion de s-CO en molécules plus complexes requiert un certain temps pour se produire. La figure 4.7 représente l'abondance de s-CO, s-CO₂, et s-CH₄ en fonction du temps. L'abondance de s-CO diminue fortement à partir de 10⁵ ans car la molécule diffuse à la surface du grain pour former d'autres molécules telles que s-CO₂ et s-CH₄. Le temps de conversion pour la formation de s-CH₄ est plus long que celui pour la formation de s-CO₂. Ainsi, s-CH₄ atteint une abondance maximale à 10⁷ ans alors que s-CO₂ est la molécule carbonée

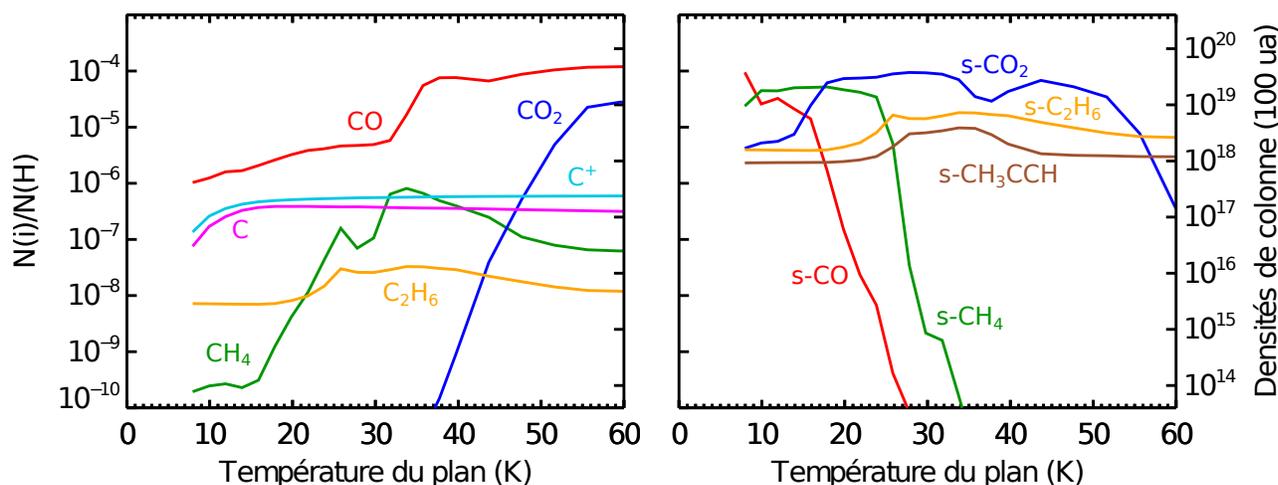


FIGURE 4.6 – Abondances et densités de colonne (cm^{-2}) en phase gazeuse et à la surface des grains, pour les espèces carbonées parmi les plus abondantes, en fonction de la température dans le plan du disque (T_{plan}). Les résultats sont représentés pour le modèle 1 et pour un rayon de 100 UA.

la plus abondante à 10^6 ans. Les réservoirs de carbone seront donc modifiés dans le cas d'un disque plus âgé.

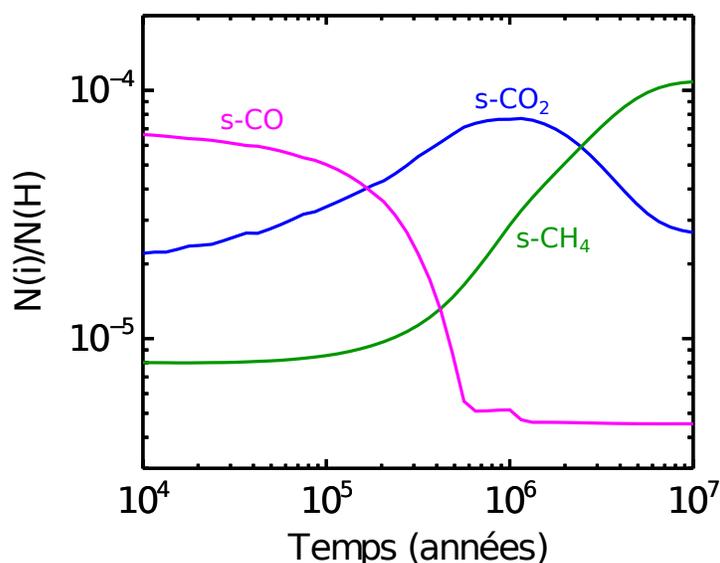


FIGURE 4.7 – Abondances de $s\text{-CO}$, $s\text{-CO}_2$, et $s\text{-CH}_4$ en fonction du temps. Les résultats sont représentés pour le modèle 1 et pour $T_{\text{plan}} = 20$ K à 300 UA.

Sur la figure 4.8 sont représentées les abondances et densités de colonne des principaux porteurs de carbone en fonction de la température dans le plan du disque pour deux âges de disque différents : 1 et 5 millions d'années. En raison de son temps de formation plus long,

ce n'est que lorsque le disque est âgé de 5 millions d'années que s-CH₄ devient le réservoir de carbone entre 10 et 20 K. Pour un disque de cet âge, on remarque également que s-CO₂ est plus abondant que CO entre 32 et 40 K. Il s'agit là encore d'un effet de densité, en raison de l'échelle de hauteur hydrostatique, les disques chauds sont plus larges (verticalement) que les disques froids (voir équation 3.39) pour un rayon donné et sont par conséquent moins denses. Le temps de conversion de s-CO en s-CO₂ est donc plus long à température plus élevée. Dans notre modèle, celui-ci varie ainsi de 6×10^5 ans à 25 K à 2×10^6 ans à 35 K.

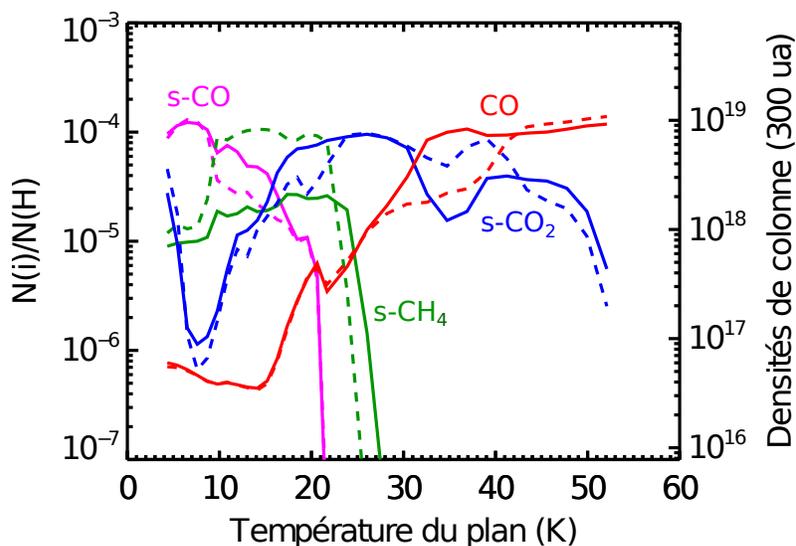


FIGURE 4.8 – Impact de l'âge du disque sur la chimie des réservoirs de carbone. Les résultats obtenus pour un disque âgé de 1 millions d'années sont représentés en traits continus tandis que les résultats obtenus pour un disque âgé de 5 millions d'années sont représentés en traits pointillés.

4.4.3 La Photodésorption

La photodésorption n'est pas prise en compte dans les résultats du modèle présentés jusqu'ici. Les taux de photodésorption sont déterminés expérimentalement et leur valeurs varient très fortement d'une expérience à l'autre. Avec des expériences similaires, Öberg et al. (2007) ont calculé un taux de photodésorption pour la glace de CO de 2.7×10^{-3} molécules photon⁻¹, tandis que Muñoz Caro et al. (2010) reportent un taux plus grand de : 3.5×10^{-2} molécules photon⁻¹. De plus, des expériences récentes ont montré que l'efficacité de désorption dépend fortement du spectre UV (Fayolle et al., 2011). Ainsi, le taux de photodésorption induite par les photons Lyman-alpha (121.6 nm) s'est avéré être plus faible que le taux de photodésorption induite par les photons de longueur d'onde comprise entre 140 et 170 nm pour la molécule CO (Chen et al., 2014).

J'ai testé les effets de la photodésorption sur les résultats du modèle pour des disques à 100 et 300 UA de rayon. Dans les disques, la photodésorption peut être induite par : (1) l'interaction

avec le champ UV ambiant provenant de l'étoile centrale et du milieu interstellaire ; et (2) les photons UV secondaires générés par l'interaction entre les rayons cosmiques et l'hydrogène moléculaire. Les taux de réaction se calculent comme (Öberg et al., 2007) :

$$k_{\text{UV}} = \frac{Y_{\text{PD}}}{n_s} I_{\text{ISM-FUV}} \chi e^{-2A_V} \quad (4.12)$$

$$k_{\text{CR}} = \frac{Y_{\text{PD}}}{n_s} I_{\text{CR-FUV}} \quad (4.13)$$

où n_s est la densité de surface totale de sites sur le grain (voir section 2.3.2.1). $I_{\text{ISM-FUV}} \sim 10^8$ photons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ est le flux UV interstellaire de Draine (Draine, 1978), $I_{\text{CR-FUV}} \sim 10^4$ photons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ est le flux UV généré par les rayons cosmiques. χ est le facteur d'échelle appliqué au champ de Draine (voir équation 3.46) et A_V est l'extinction visuelle. Y_{PD} est le taux de photodésorption. Un taux de photodésorption d'une valeur de 10^{-3} molécules photon^{-1} est considéré pour toutes les espèces exceptées CH₃OH, H₂O, CO₂, N₂, et CO pour lesquelles le formalisme de Öberg et al. (2009a,b,c) est pris en compte. Le taux de photodésorption de CO dépend de la température et a pour expression entre 15 et 27 K (il est égal à 2.7×10^{-3} molécules photon^{-1} pour toute autre température) :

$$Y_{\text{PD}} = 2.7 \times 10^{-3} - (T - 15) \times 1.7 \times 10^{-4} \quad (4.14)$$

Avec le mécanisme de photodésorption, les réservoirs de carbone restent inchangés quelque soit le rayon. L'abondance de CO en phase gazeuse est seulement affecté à 300 UA de rayon pour T_{plan} compris entre 4 et 15 K, elle augmente d'un facteur cinq par rapport au modèle 1. Néanmoins, s-CO reste le principal porteur de carbone. Pour les deux rayons, seules les molécules plus complexes, telles que C₂H₆ et CH₃CCH, sont efficacement photodésorbées et voient leurs abondances augmenter de plus d'un facteur 10.

4.4.4 Le taux de désorption induite par les particules du rayonnement cosmique

Jusqu'ici, j'ai considéré un taux d'ionisation par les particules du rayonnement cosmique semblable à celui du milieu interstellaire : $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$. Cependant, dans le cas des disques protoplanétaires, ce taux pourrait être fortement réduit, notamment en présence de vents stellaires et/ou de champs magnétiques (Cleeves et al., 2013). En effet, les rayons cosmiques sont repoussés d'une part par une "T-Tauriosphère" entourant la jeune étoile T Tauri (analogue à l'héliosphère de notre système solaire, voir figure 4.9) et d'autre part par un effet de miroir magnétique (figure 4.10). La source principale d'ionisation des disques proviendrait ainsi de la désintégration radioactive des isotopes à courte durée de vie, majoritairement ²⁶Al, avec un taux d'ionisation de $(7-10) \times 10^{-19} \text{ s}^{-1}$ (Umebayashi and Nakano, 2009).

Les rayons cosmiques jouent un rôle primordial pour la chimie de surface et les interactions gaz-grains dans notre modèle. Il sont notamment responsables de : (1) la désorption

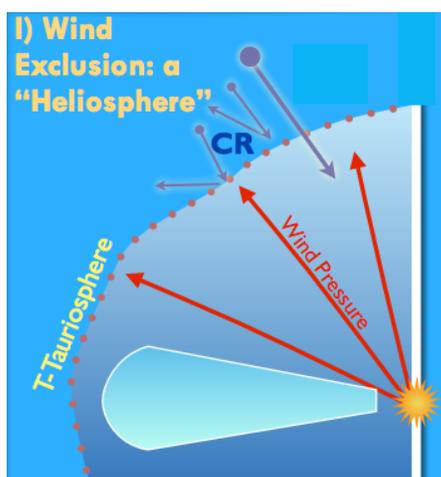


FIGURE 4.9 – Exclusion des rayons cosmiques par le vent stellaire : formation d’une “T-Tauriosphère” (Cleeves et al., 2013).

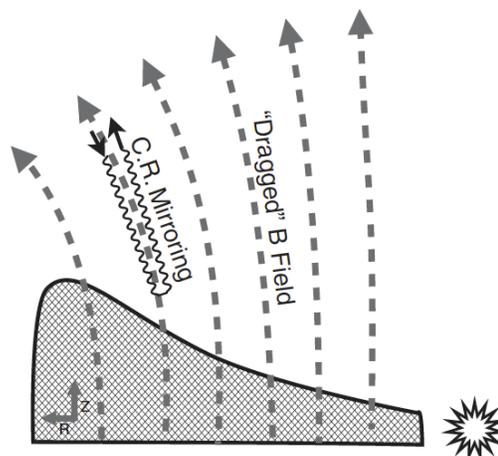


FIGURE 4.10 – Exclusion des rayons cosmiques par effet miroir magnétique. Les particules chargées se déplaçant dans un champ inhomogène rebroussement chemin lorsque le champ magnétique augmente (Cleeves et al., 2013).

non-thermique par impact avec un grain de poussières (voir section 2.3.2.2); et (2) la photodissociation sur les surfaces par les photons UV secondaires (voir section 2.2.1).

J’ai donc étudié l’impact d’un taux d’ionisation par les rayons cosmiques dix fois plus faible ($1.3 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$) sur les abondances des principaux réservoirs de carbone (figure 4.11). La molécule de CO est seulement affectée entre 20 et 35 K. Pour un taux de désorption plus faible, l’abondance de s-CO augmente car elle est moins photodissociée par les photons UV induits par les rayons cosmiques. Il y a donc moins de carbone atomique libre pour favoriser la formation de s-CH₄. En phase gazeuse, la photodissociation par les photons UV secondaires induits par l’interaction entre les rayons cosmiques et le dihydrogène est aussi moins efficace et entraîne une augmentation de l’abondance de CH₄ à 300 UA de rayon. A 100 UA, le flux UV étant plus élevé, la photodissociation directe est le processus dominant. CH₄ se comporte donc comme son homologue à la surface des grains et voit ainsi son abondance diminuer.

4.5 L’impact des conditions initiales sur la chimie du carbone : le nuage moléculaire

Avant de s’effondrer pour former une étoile puis un disque protoplanétaire, la matière évolue au sein d’un nuage moléculaire que l’on appelle nuage parent. La composition d’un disque protoplanétaire va donc dépendre de la composition chimique du nuage moléculaire parent. En effet, la chimie n’a pas le temps d’atteindre un état stationnaire avant que le nuage ne s’effondre pour former le disque. Dans cette section, j’étudie l’impact des conditions initiales

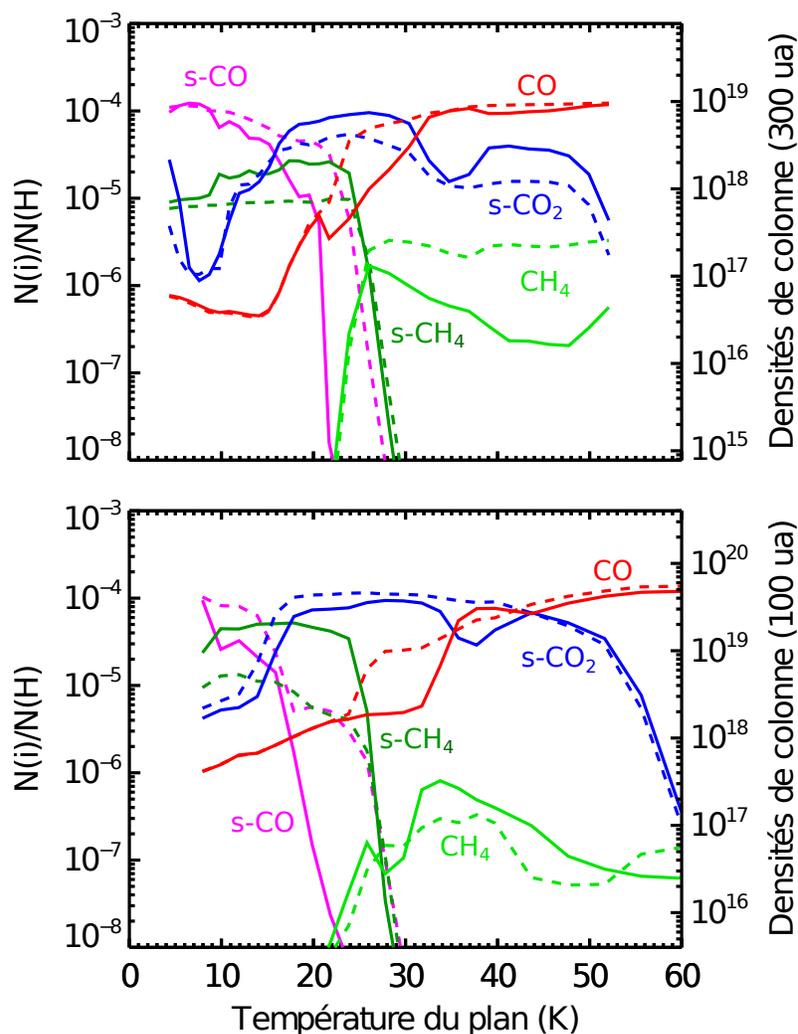


FIGURE 4.11 – Sensibilité au taux d’ionisation par les particules du rayonnement cosmique. Les résultats sont présentés pour deux rayons du disque : 300 UA et 100 UA et pour différents taux d’ionisation par les rayons cosmiques : $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ (traits continus) et $1.3 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$ (traits pointillés).

du nuage pour la chimie du carbone dans les disques.

Les molécules carbonées étudiées dans ce chapitre sont plutôt insensibles aux conditions initiales. La densité de noyaux d’hydrogène ou encore le rapport C/O du nuage parent (0.5 ou 1.2, voir Table 4.1) n’ont que très peu d’impact sur l’évolution chimique de ces molécules dans le disque. Dans les deux cas, les réservoirs de carbone restent inchangés. En revanche, ceux-ci sont affectés dans le cas d’un nuage plus âgé.

La durée de vie du nuage moléculaire parent et son impact sur les réservoirs de carbone dans le disque

La durée de vie des nuages moléculaires est toujours matière à débat. Les études indiquent des valeurs de quelques millions d'années (Hartmann et al., 2001; Ballesteros-Paredes and Hartmann, 2007) à 10 millions d'années (Mouschovias et al., 2006). Une durée de quelques millions d'années a été suggérée par Ballesteros-Paredes and Hartmann (2007) pour expliquer le fait que peu de nuages moléculaires vides d'étoiles sont observés. La formation des étoiles doit donc avoir lieu peu de temps après celle du nuage. Si les calculs de Hollenbach et al. (1971) ont montré que la conversion de l'hydrogène en hydrogène moléculaire en un million d'années n'était pas assez efficace pour expliquer les fortes abondances de H₂, Glover and Mac Low (2007) ont suggéré que la turbulence pouvait réduire ce temps de conversion (< 1-2 millions d'années). Une autre étude sur la faible abondance de DCO⁺ observée dans les nuages (Pagani et al., 2011) donne un âge limite supérieur de 6 millions d'années. Enfin, plus récemment, Brünken et al. (2014) ont étudié le rapport ortho/para de H₂D⁺ et déterminé un âge d'environ un millions d'années.

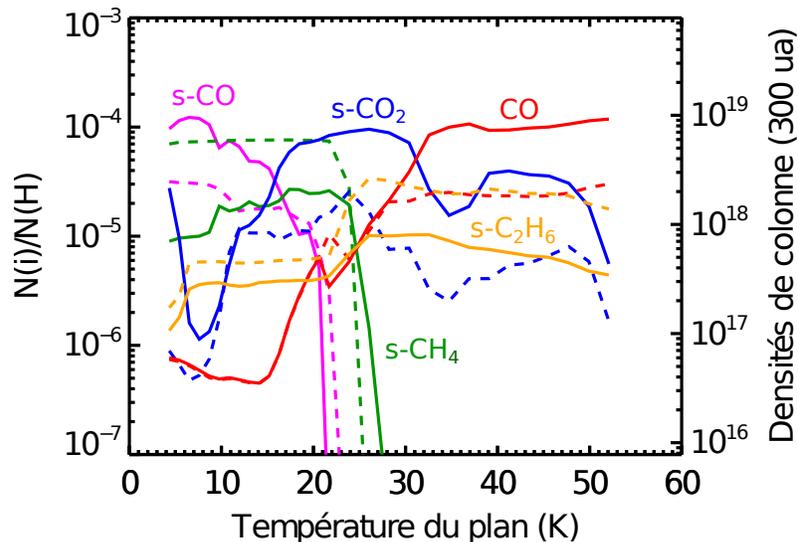


FIGURE 4.12 – *Impact de l'âge du nuage moléculaire parent sur la chimie du carbone dans les disques. Les résultats obtenus pour un nuage de 1 millions d'années sont représentés en traits continus tandis que les résultats obtenus pour un nuage âgé de 10 millions d'années sont représentés en traits pointillés.*

Dans cette section, j'étudie la sensibilité du modèle à l'âge du nuage moléculaire. Sur la figure 4.12 sont représentées les abondances des espèces les plus sensibles à ce paramètre pour deux âges différents : 1 et 10 millions d'années. Les abondances au sein du nuage aux états finaux (10^6 et 10^7 ans) pour les espèces carbonées étudiées dans ce chapitre sont listées dans la Table 4.3.

Espèces	Abondances ^a (/n _H)	
	10 ⁶ ans	10 ⁷ ans
CO	2.4(-05)	2.9(-07)
CH ₄	1.5(-07)	6.5(-07)
CO ₂	3.3(-08)	9.2(-11)
C	3.1(-08)	5.4(-08)
C ⁺	4.2(-09)	1.2(-13)
C ₂ H ₆	6.2(-09)	1.2(-08)
H ₂ CO	9.8(-09)	1.6(-09)
CH ₃ OH	7.1(-10)	6.2(-11)
s-CO	7.2(-05)	1.9(-07)
s-CH ₄	8.5(-06)	9.2(-05)
s-CO ₂	1.6(-06)	3.9(-09)
s-C ₂ H ₆	3.4(-06)	6.4(-06)
s-H ₂ CO	2.8(-05)	1.0(-06)
s-CH ₃ OH	9.7(-06)	2.5(-06)
s-CH ₃ CCH	2.4(-06)	4.6(-06)

a. a(b) se lit a×10^b

TABLE 4.3 – Abondances dans le nuage à l’instant final pour deux âges différents.

Pour un nuage plus âgé, les réservoirs de carbone se trouvent modifiés. Pour des températures dans le plan du disque inférieures à 9 K, ce n’est plus s-CO le principal porteur de carbone mais s-CH₄. Les abondances de ces deux espèces dans le nuage sont en effet modifiées avec l’âge (voir Table 4.3). Pour un nuage âgé de 10 millions d’années, s-CO est d’une part hydrogénée pour former s-H₂CO et s-CH₃OH et d’autre part photodissociée par les photons UV secondaires. Le carbone atomique ainsi libéré permet une formation efficace de s-CH₄ qui devient un réservoir de carbone dans le nuage. Pour des températures plus élevées dans le disque (entre 22 et 30 K), l’abondance de s-CO₂ est plus faible en considérant un nuage plus âgé. En effet, s-CO₂ se forme majoritairement à partir de s-CO (voir réactions 4.5, 4.6, et 4.7) dont l’abondance est déjà faible au sein du nuage. Dans ce cas, s-C₂H₆ devient un réservoir de carbone. Il est également intéressant de remarquer que le rapport s-CH₄/s-CO est élevé pour $T_{\text{plan}} < 22$ K. Par exemple, à 15 K, ce rapport est égal à ~ 5 et est supérieur aux valeurs obtenues dans les glaces des comètes (Bockelée-Morvan et al., 2004) pour lesquelles s-CO est beaucoup plus abondant que s-CH₄. Ceci semble indiquer que notre Système Solaire proviendrait donc d’un nuage moléculaire plutôt jeune.

4.6 La diffusion sur les surfaces pour expliquer les faibles rapports CO/H₂ observés

La molécule CO est donc très sensible à la température des grains de poussières et sa diffusion à leurs surfaces est responsable de la conversion de CO en d'autres molécules, telles que s-CH₄ et s-CO₂. Ce processus de conversion empêche ainsi la désorption de CO pour des disques dont la température du plan est inférieure à 30 K.

J'ai également comparé les rapports CO/H₂ obtenus avec notre modèle avec ceux obtenus dans le cas d'une simple prédiction pour la chimie de CO (Williams and Best, 2014) : CO est photodissociée dans les parties externes du disque et se colle sur les grains dans le plan où $T < 20$ K (mais ne réagit pas). Les résultats sont représentés sur la figure 4.13. Si le simple collage de CO sur les grains ("freeze-out") n'est pas suffisant pour expliquer la déplétion de CO, le mécanisme de diffusion de surface est en revanche responsable des faibles rapports CO/H₂ observés dans les disques. Les différences entre les deux prédictions chimiques pour CO (collage seul et collage + diffusion) deviennent ainsi très importantes dans le cas de disques entre 20 et 30 K.

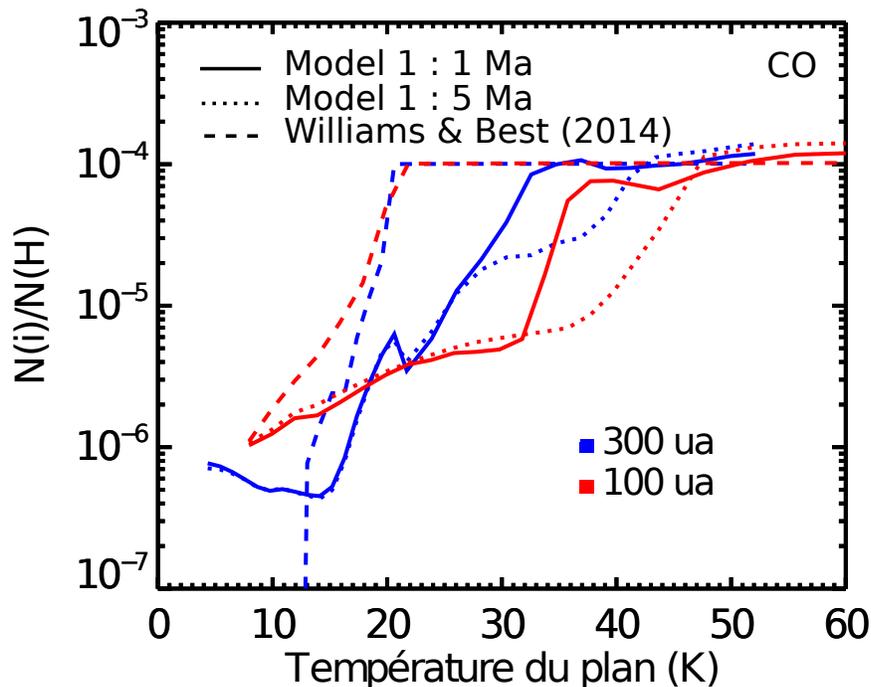


FIGURE 4.13 – Abondances de CO pour différentes prédictions chimiques. Dans le modèle de (Williams and Best, 2014), seul le collage de la molécule est considéré tandis que dans notre modèle, la molécule peut diffuser après son adsorption à la surface du grain de poussières.

La déplétion est en revanche plus faible pour les disques plus jeunes, la conversion de CO étant un processus qui dépend du temps. Pour des disques plus chauds ($T_{\text{plan}} > 30$ K), le

rapport CO/H₂ atteint sa valeur maximale en accord avec les observations du disque entourant l'étoile AB Aur.

Pour les disques plus froids, la déplétion de CO est prédite pour une large gamme de paramètres (pour différents âges de disques, taux d'ionisation par les rayons cosmiques, rayons ou encore pour différentes efficacités de désorption) et n'est pas très sensible aux conditions initiales (le rapport C/O du nuage parent, sa densité). La déplétion de CO est même prédite pour des disques très chauds (pour une température de plan d'au moins 50 K) dans le cas des disques provenant de l'effondrement de nuages moléculaires âgés de 10 millions d'années.

Si ce mécanisme de conversion apparaît assez "robuste" puisqu'il est observé pour de nombreuses conditions, des études plus détaillées sont nécessaires. En effet, dans notre modèle, nous avons seulement considéré des grains homogènes de 0.1 μm . Les grains de poussières au sein des disques protoplanétaires sont cependant de différentes tailles et peuvent grossir par agglomération. Des grains plus gros réduisent les interactions gaz-grains et pourraient donc avoir un impact sur la chimie du carbone. Cependant, dans le cadre de cette étude, seule la diffusion par thermal hopping est considérée. La diffusion par effet tunnel (décrite en section 2.4.2) peut donc accroître encore plus le mécanisme de conversion de CO, d'autant plus que l'effet tunnel est particulièrement efficace pour les espèces légères comme l'hydrogène, une espèce qui intervient dans deux réactions de conversion de CO en s-CO₂ (réactions 4.6 et 4.7) parmi les plus efficaces.

Les résultats présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'un article ([Reboussin et al., 2015b](#)) publié dans la revue A&A, intitulé "Chemistry in protoplanetary disk : the gas-phase CO/H₂ ratio and the carbon reservoir". Cet article est disponible en annexe [A](#).

5

La chimie de CN : observations et modélisation

Sommaire

5.1	Les fenêtres d'observations astronomiques	66
5.2	Observations des disques à différentes longueurs d'onde	67
5.3	La radioastronomie	68
5.3.1	Observer avec un radiotélescope	68
5.3.1.1	Principe de fonctionnement	68
5.3.1.2	La réponse directionnelle de l'antenne	69
5.3.1.3	Le radiotélescope de 30 m de l'IRAM	70
5.4	Environnement et propriétés stellaires : quel impact pour l'évolution des disques protoplanétaires ?	72
	Le nuage du Taureau	72
	Le nuage de Rho Ophiuchi	72
	Echantillons de sources et observations.	72
5.5	Taureau et Rho Ophiuchi : deux régions aux propriétés différentes	75
5.5.1	L'estimateur de Kaplan-Meier	75
5.5.2	Exemple d'utilisation de l'estimateur Kaplan et Meier sur l'échantillon de sources observées dans la région du Taureau.	76
5.6	Quelles sont les causes de ces différences ?	78
5.6.1	Des propriétés stellaires différentes ?	78
5.6.2	Des disques plus petits ?	79
5.6.3	Une chimie différente ?	80

5.1 Les fenêtres d'observations astronomiques

Le spectre électromagnétique représente la répartition des ondes électromagnétiques qui sont caractérisées par leur longueur d'onde. L'atmosphère terrestre étant opaque à certains intervalles de longueur d'ondes, ce n'est que dans certaines fenêtres que les photons parviennent à traverser l'atmosphère et à nous parvenir (figure 5.1).

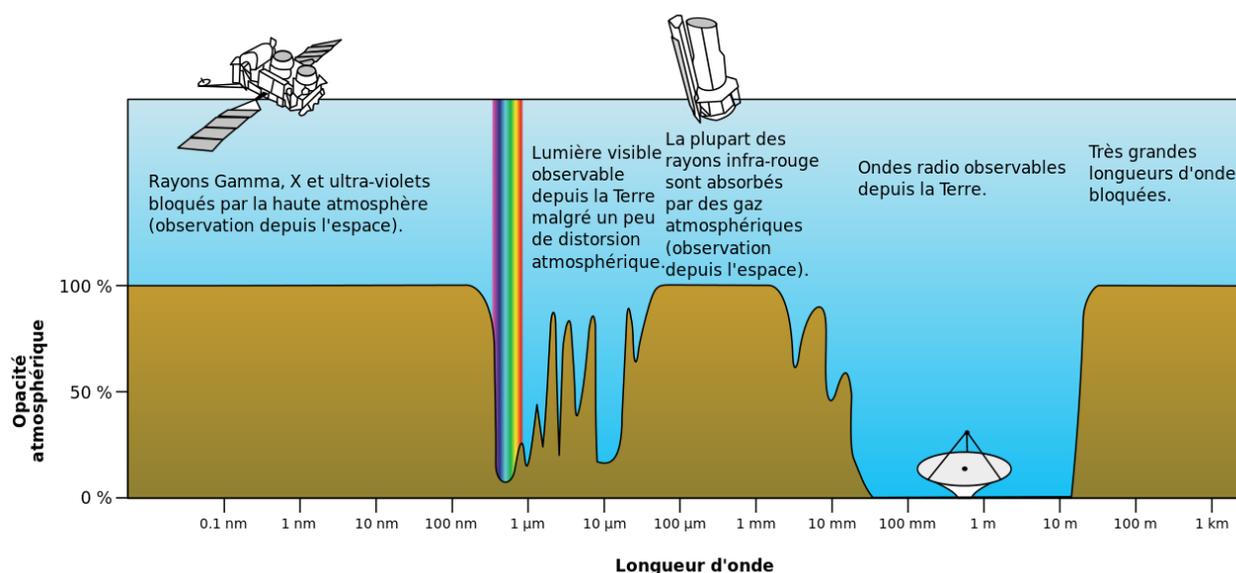


FIGURE 5.1 – Absorption atmosphérique du spectre électromagnétique. Crédit : [Wikipédia](#)

Pour palier à l'absorption atmosphérique, différentes techniques d'observations peuvent être utilisées.

Lorsque l'opacité est trop importante, il est d'usage d'observer directement depuis l'espace afin de s'affranchir de toutes contraintes liées à l'atmosphère. On peut citer comme exemple le télescope spatial *Herschel*; lancé en 2009, il est à ce jour le plus grand télescope jamais mis dans l'espace avec un miroir de 3.5 m de diamètre. Il opère dans le domaine infrarouge et submillimétrique lui permettant l'étude des grains de poussières froids présents dans les régions de formation d'étoiles.

Pour les observations depuis la Terre, une solution est de construire des observatoires dans des régions situées à très hautes altitudes et très sèches. L'un des plus beaux exemples est l'interféromètre ALMA (Atacama Large Millimeter/Submillimeter Array) constitué de 66 antennes implantées à 5000 m d'altitude dans le désert d'Atacama au Chili (voir figure 5.2). Inauguré en 2013, ALMA est dédié à l'étude de l'Univers froid et opère entre 0.4 et 3.6 mm de longueur d'onde, avec une résolution spatiale et angulaire inégalées.



FIGURE 5.2 – Vue aérienne de l’interféromètre ALMA. Crédit : ESO

5.2 Observations des disques à différentes longueurs d’onde

Des observations multi-longueurs d’onde sont nécessaires pour sonder les différentes régions des disques. Les observations en lumière diffusée en visible et proche infrarouge nous apportent des informations uniques sur la structure et les propriétés des grains de poussières (taille, forme) des disques. La figure 5.3 montre les images obtenues par le télescope spatial *Hubble* du disque HH30 observé par la tranche (Burrows et al., 1996). De telles observations nous permettent de connaître l’extension radiale des disques : quelques centaines d’unités astronomiques, mais nous renseignent également sur leur structure verticale. Le disque apparaît ainsi géométriquement fin et évasé et deux jets perpendiculaires au plan du disque sont observés. Cependant, les disques étant optiquement épais dans le domaine visible et infrarouge, les observations en lumière diffusée ne permettent de sonder que la géométrie de surface du disque qui ne contient qu’une faible fraction de la masse du disque.

Pour sonder le disque sur toute son épaisseur, les observations dans le domaine millimétrique sont nécessaires. A ces longueurs d’onde, les régions externes (> 50 UA) plus froides sont observables et l’émission optiquement mince de la poussière nous permet de déduire la masse du disque (voir section 4.1.1). Ces régions se caractérisent également par les molécules qu’elles contiennent dont les raies rotationnelles peuvent être détectées par les radiotélescopes et interféromètres millimétriques.

Dans le cadre de ma thèse, je m’intéresse au domaine millimétrique pour lequel l’observation des molécules nous fournit des informations précieuses pouvant être comparées aux modèles chimiques.

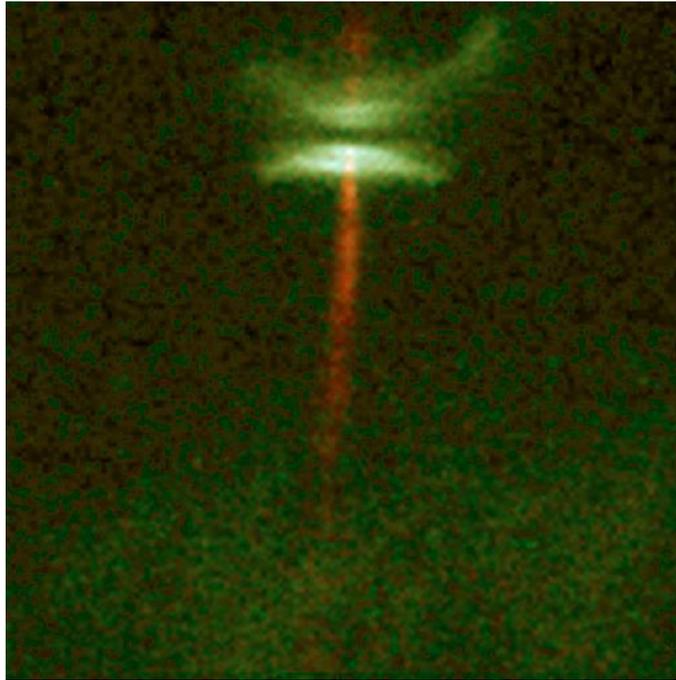


FIGURE 5.3 – Image en lumière diffusée (HST) du disque entourant l'étoile *T Tauri HH30*. Le disque est vu par la tranche avec ses 2 jets. Crédit : [NASA](#)

5.3 La radioastronomie

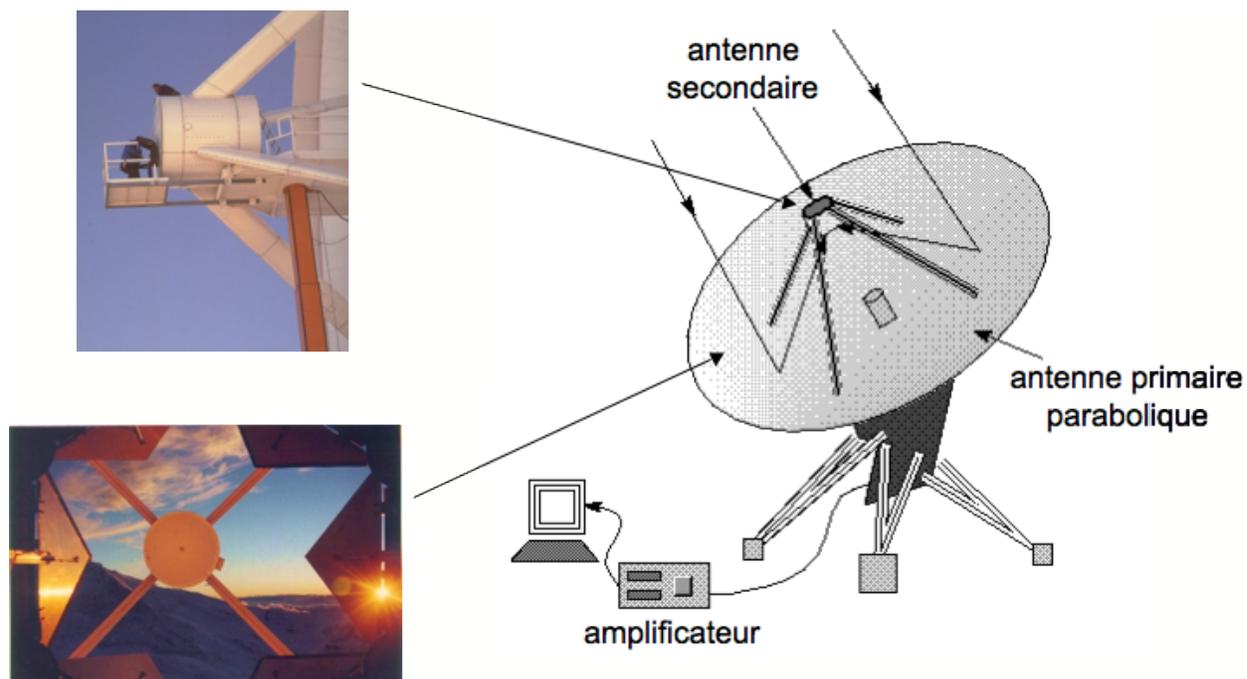
Karl Jansky, en 1933, fut le premier à détecter un signal radio provenant d'une source fixe émise du centre Galactique. Mais ce n'est qu'à la fin de la seconde guerre mondiale que la radioastronomie prend son essor grâce aux travaux sur les radars.

Les sources radio sont caractérisées par des objets à faible rayonnement énergétique et à basse fréquence. Les ondes radio s'étendent environ de 30 GHz ($\lambda=1$ cm) à 300 GHz ($\lambda=1$ mm). Pour les fréquences plus élevées, l'atmosphère absorbe le rayonnement et les observations doivent se faire sur un point haut et sec (ALMA, voir section 5.1).

5.3.1 Observer avec un radiotélescope

5.3.1.1 Principe de fonctionnement

Le principe de fonctionnement d'un radiotélescope à une antenne (single dish) est illustré sur la figure 5.4. Les ondes radio provenant de la source observée atteignent la surface collectrice du télescope de forme parabolique, appelée antenne primaire. Ces rayons lumineux sont ensuite réfléchis vers l'antenne secondaire qui va à son tour réfléchir le rayonnement vers le foyer où est placé un récepteur. Les ondes électromagnétiques sont converties en signal électrique qui est acheminé vers le centre de contrôle afin d'être traité et analysé.

FIGURE 5.4 – *Principe de fonctionnement d'un radiotélescope.*

Deux critères sont essentiels pour les observations avec un radiotélescope :

- **la taille de l'antenne** : plus sa surface collectrice est grande, plus l'énergie reçue de la source sera importante
- **le pouvoir de résolution** qui correspond à la capacité de séparer deux sources très proches l'une de l'autre

5.3.1.2 La réponse directionnelle de l'antenne

L'une des fonctions principales d'un radiotélescope est de déterminer la direction de la source d'émission. L'énergie reçue par l'antenne est en effet répartie de façon anisotrope, certaines directions étant privilégiées : ce sont les lobes de rayonnement. La réponse directionnelle est définie par le diagramme de rayonnement qui contient plusieurs lobes : principal et secondaires (voir Figure 5.5). Le flux intégré par l'antenne est la somme des flux reçus dans chacun des lobes. L'efficacité du lobe principal (B_{eff} pour "beam efficiency") permet de quantifier le signal contenu dans le lobe principal par rapport au flux total. Un autre paramètre permet de définir la réponse d'une antenne au signal reçu, il s'agit du facteur F_{eff} (pour "forward efficiency") qui quantifie la fraction de flux provenant de l'avant de l'antenne. La température de brillance du lobe principal (T_{MB} pour "main beam brightness temperature") s'obtient alors à partir de la température d'antenne T_A :

$$T_{\text{MB}} = T_A \frac{F_{\text{eff}}}{B_{\text{eff}}} \quad (5.1)$$

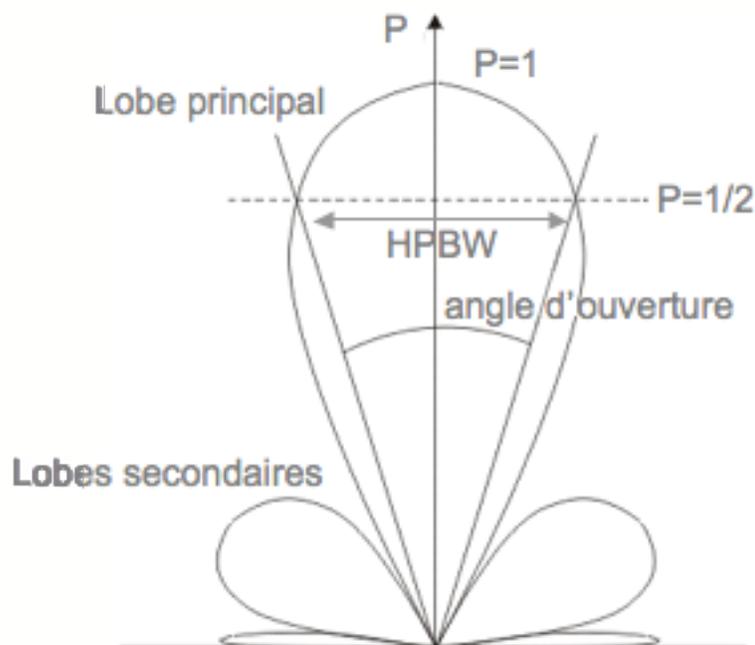


FIGURE 5.5 – Diagramme de rayonnement d'une antenne.

La surface collectrice et le pouvoir de résolution

La résolution de l'antenne est quant à elle directement liée à la taille du lobe principal. La résolution spatiale du télescope se définit comme le diamètre angulaire du lobe principal où la puissance est égale à la moitié de la puissance maximale (HPBW pour "Half Power Beam Width"). Avec la formule théorique du pouvoir séparateur (critère de Rayleigh), cette résolution, exprimée par un angle θ , s'écrit :

$$\theta = 1.22 \times \frac{\lambda}{D} \quad (5.2)$$

où θ est l'angle de résolution en radians. En radioastronomie, θ s'exprime généralement en arcsecondes (1 radian $\sim 2.1 \times 10^6$ arcsecondes). Le coefficient 1.22 dépend de l'uniformité de la surface.

En astronomie, plus l'instrument est capable de collecter de radiations, plus il sera sensible. La surface collectrice doit donc être la plus grande possible afin d'obtenir une meilleure résolution. Pour une longueur d'onde donnée, le pouvoir de résolution d'un télescope ne dépend donc que de sa taille. Par exemple, le radiotélescope de l'IRAM (voir section 5.3.1.3) de 30 m de diamètre permet d'observer avec une résolution de 25" à la longueur d'onde de 3 mm.

5.3.1.3 Le radiotélescope de 30 m de l'IRAM

Le radiotélescope de 30 m de l'IRAM (Institut de Radioastronomie Millimétrique) (voir figure 5.6) fut construit entre 1980 et 1984. Situé à 2850 m d'altitude sur le mont Pico Veleta



FIGURE 5.6 – *Radiotélescope de 30 m de l'IRAM. Crédit : IRAM*

dans la Sierra Nevada espagnole, il s'agit du plus grand télescope dédié aux ondes millimétriques. Il permet l'observation du ciel dans le domaine de fréquence 80-352 GHz (entre 0.8 et 3 mm de longueur d'onde). Il est constitué d'une antenne primaire de 30 m de diamètre, offrant une surface collectrice de 700 m², permettant la détection de sources faibles.

J'ai eu l'occasion d'effectuer deux fois des observations au radiotélescope de l'IRAM. Au cours de ces deux observations, j'ai utilisé le récepteur hétérodyne EMIR (Eight Mixer Receiver) opérant dans les fenêtres atmosphériques : 0.9, 1.3, 2 et 3 mm (voir Table 5.1).

Récepteur	Bande spectrale (GHz)	Polarisation	Largeur Spectrale (GHz)
E090	83-117	H/V	16
E150	124-184	H/V	16
E230	202-274	H/V	16
E330	277-350	H/V	16

TABLE 5.1 – *Caractéristiques techniques des récepteurs hétérodynes EMIR.*

Je présente dans la suite de ce chapitre les résultats d'observations que j'ai effectué à l'été 2013 dans la région de formation stellaire Rho Ophiuchi. Je me restreint ici à l'étude de la molécule CN. En effet, celle-ci ayant été observée précédemment dans la région du Taureau (Guilloteau et al., 2013), une comparaison observationnelle de ces deux régions intrinsèquement différentes permet d'évaluer l'influence de l'environnement sur la chimie des disques protoplanétaires.

5.4 Environnement et propriétés stellaires : quel impact pour l'évolution des disques protoplanétaires ?

Comme nous l'avons vu précédemment, les disques protoplanétaires sont issus de la naissance d'une étoile. Nous avons vu également, notamment au chapitre 4, que les propriétés des disques sont très importantes pour l'évolution chimique, notamment celle de CO dont l'évolution diffère avec la température du disque. Les propriétés intrinsèques du disque dépendent aussi des propriétés de l'étoile centrale qui leur a donné naissance. Différentes propriétés stellaires, telles que la masse, l'âge ou encore la densité de l'étoile vont donc affecter l'évolution du disque qui les entourent. Les étoiles de types Herbig sont par exemple plus chaudes que les étoiles T Tauri et il en résultent une chimie différente pour les disques. De plus, le processus de photoévaporation (voir section 3.2.1), peut s'avérer plus important dans les régions de fortes densités stellaires en raison d'une quantité d'UV plus importante. L'évolution d'un disque dans ces régions sera donc probablement différente de l'évolution d'un disque isolé. La chimie peut donc différer d'une région à l'autre. Le but de cette étude est d'étudier la chimie de deux régions de formation stellaire différentes : la région du Taureau et celle de ρ Ophiuchi.

Le nuage du Taureau est situé à 140 pc (Loinard et al., 2005) et est l'une des régions de formation d'étoiles la plus proche de nous. Il s'agit d'une région de faible densité stellaire, 0.3 étoiles/pc² (Lada et al., 1993), les disques y sont donc très peu perturbés par le milieu environnant (jets, outflows).

Le nuage de Rho Ophiuchi est quant à lui situé à 120 pc (Loinard et al., 2008). Si, comme pour le nuage du Taureau, il s'agit d'une région de formation d'étoiles de faible masse, la densité stellaire y est en revanche plus forte (50 étoiles/pc², Lada et al., 1993).

Nuage	Aire (pc ²)	Densité stellaire (nombre/pc ²)	Masse du gaz (M_{\odot})	Formation stellaire
Taureau	300	0.3	10 ⁴	isolée
ρ Ophiuchi	2	50	600	cluster

TABLE 5.2 – Propriétés des nuages du Taureau et de Rho Ophiuchi (Lada et al., 1993).

Echantillons de sources et observations. Dans la Table 5.3 sont listées les sources précédemment observées (Guilloteau et al., 2013) dans la région du Taureau et celles que j'ai observées dans la région de Rho Ophiuchi. Les flux d'émission de CN sont également indiqués. Les spectres d'observations de Rho Ophiuchi sont présentés en Annexe A tandis que ceux obtenus pour la région du Taureau sont disponibles dans l'article de (Guilloteau et al., 2013).

Taureau							
n°	Source	Type Spectral	Flux (CN) Jy.km/s	n°	Source	Type Spectral	Flux (CN) Jy.km/s
1	FN Tau	M5	<0.38	23	CI Tau	K7	2.70 ± 0.18
2	CY Tau	M1.5	1.98 ± 0.15	24	AA Tau	K7	0.74 ± 0.10
3	BP Tau	K7	<0.59	25	DN Tau	M0	1.54 ± 0.17
4	DE Tau	M1	<0.39	26	DO Tau	M0	0.84 ± 0.20
5	RY Tau	K1	3.91 ± 0.86	27	HV Tau C	K6	1.22 ± 0.20
6	T Tau	K0	18.6 ± 0.31	28	LkCa 15	K5	7.50 ± 0.83
7	Haro 6-5B	K5	0.61 ± 0.13	29	Haro 6-33	M0	0.91 ± 0.17
8	FT Tau	C	0.63 ± 0.12	30	GO Tau	M0	5.47 ± 0.18
9	DG Tau-B	C	1.33 ± 0.15	31	DQ Tau	M0	<0.34
10	DG Tau	K6	6.62 ± 0.16	32	DR Tau	K5	<0.75
11	Haro 6-10	K5	11.1 ± 0.22	33	DS Tau	K5	<0.28
12	IQ Tau	M0.5	2.28 ± 0.21	34	UY Aur	M0	<0.69
13	LkHa 358	K8	<0.27	35	GM Aur	K7	1.23 ± 0.15
14	HH 30	M0	<0.41	36	AB Aur	B9	0.42 ± 0.13
15	HL Tau	K7	0.81 ± 0.13	37	SU Aur	G2	<0.27
16	HK Tau	M0.5	1.33 ± 0.22	38	MWC 480	A2	3.58 ± 0.23
17	Haro 6-13	M0	0.30 ± 0.08	39	CIDA 8	M3.5	<0.26
18	GG Tau	K7	3.20 ± 0.34	40	CIDA 11	M3.5	<0.23
19	UZ Tau E	M1	1.21 ± 0.19	41	RW Aur	K3	<0.60
20	04302+2247	-	1.53 ± 0.24	42	MWC 758	A3	<0.86
21	DL Tau	K7	1.82 ± 0.15	43	CQ Tau	A8/F2	<0.28
22	DM Tau	M1	5.90 ± 0.34	44	-	-	-
Rho Ophiuchi							
1	SR 4	K5	<1.15	12	IRS 41	K7	1.63 ± 0.32
2	GSS 26	M0	2.20 ± 0.32	13	CRBR 85	-	2.50 ± 0.50
3	EL 20	M0	<1.53	14	YLW 16c	M1	<0.99 ± 0.36
4	LFAM 1	-	<0.80	15	IRS 49	M0	<1.27
5	DoAr 24E	-	<0.98	16	DoAr 33	K4	<1.12
6	DoAr 25	K5	<1.05	17	WSB 52	K5	<1.15
7	EL 24	K6	<0.98	18	IRS 51	-	<2.66
8	EL 27	M0	<0.43	19	Flying Saucer	M1	3.37 ± 0.51
9	WL 18	K7	<2.20	20	WSB 60	M4	<0.94
10	SR 24S	K2	<2.25	21	SR 13	-	<0.97
11	SR 21	G3	<0.86	22	DoAr 44	K3	<0.52

TABLE 5.3 – Sources observées et flux d'émission de CN pour les régions du Taureau et de Rho Ophiuchi.

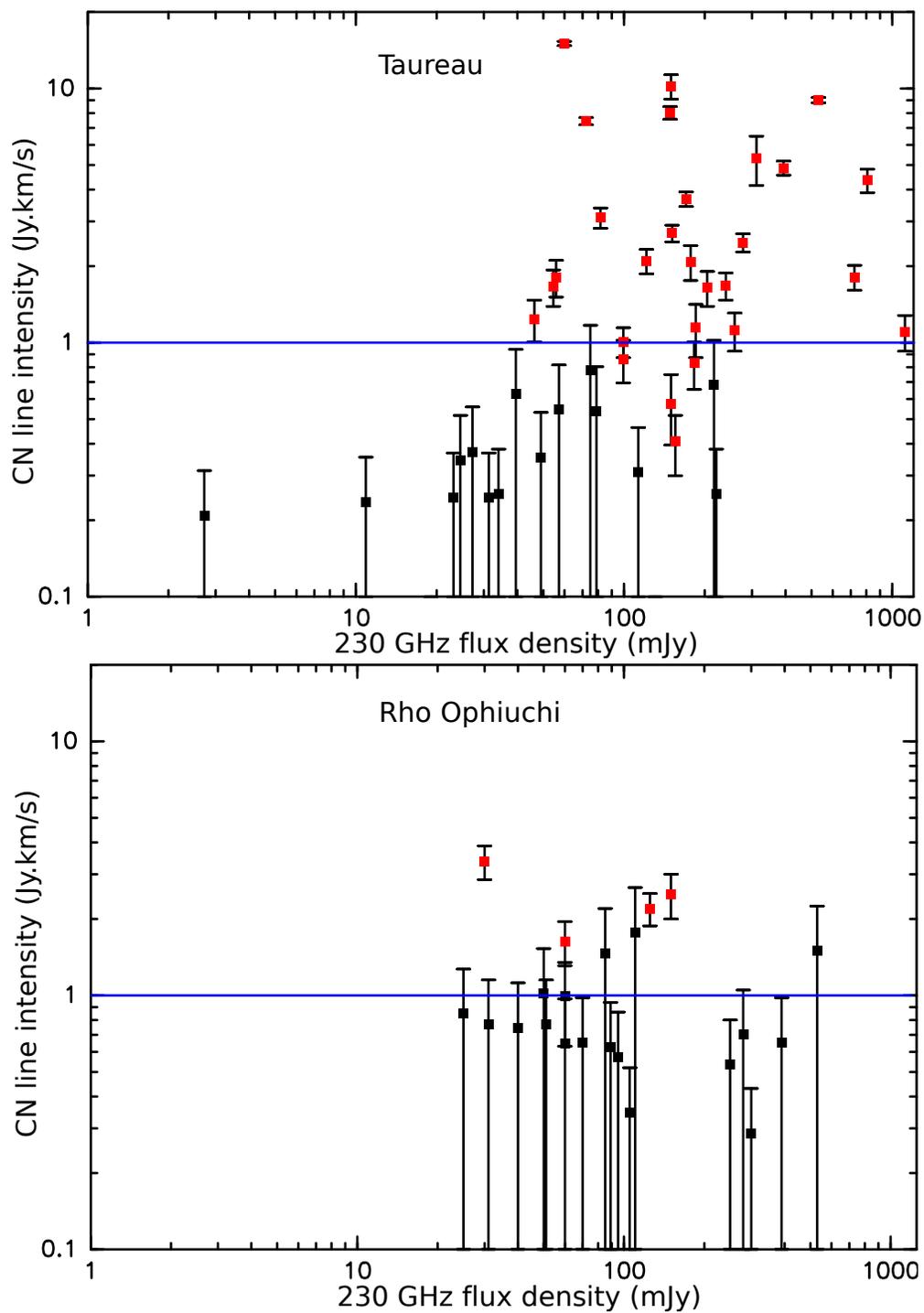


FIGURE 5.7 – Intensité des raies de CN en fonction du flux continuum à 1.3 mm. Les sources où CN est détectée sont représentées en rouge.

5.5 Taureau et Rho Ophiuchi : deux régions aux propriétés différentes

La chimie au sein de la région Rho Ophiuchi apparaît très différente de celle du Taureau (voir figure 5.7). CN est détectée dans très peu de sources (4 sources sur 22 ; 3 détections seulement proviennent réellement d'un disque : GSS 26, CRBR 85 et Flying Saucer) alors que cette même molécule est observée dans plus de la moitié ($\sim 65\%$) des sources de l'échantillon du Taureau.

5.5.1 L'estimateur de Kaplan-Meier

Les "analyses de survie" ont été initialement développées à des fins médicales pour estimer la fonction de survie des patients et ainsi évaluer l'efficacité d'un traitement. [Feigelson and Nelson \(1985\)](#) ont appliqué cette méthode à l'astrophysique. L'estimateur de Kaplan-Meier permet de construire la distribution de la fonction de survie. Son application astrophysique est très utile car il permet le traitement de données soumises à une censure, c'est-à-dire dont l'on ne connaît qu'une limite inférieure ou supérieure. Dans le cas de nos observations astronomiques, la limite est supérieure. Cette limite se définit le plus souvent à 3σ , c'est-à-dire que la détection a $\sim 99\%$ de chances de ne pas être due au bruit, en deçà, la détection est censurée.

Pour nos deux échantillons (Taureau et Rho Ophiuchi), j'ai donc utilisé l'estimateur de Kaplan-Meier afin de retrouver la fonction de distribution de flux de l'émission de CN.

La méthode Kaplan et Meier s'appuie sur le calcul des probabilités conditionnelles. Considérons n observations de valeurs distinctes v_j , alors $\forall j \in [1, n]$ on a :

$$p_j = P(V > v_j | V > v_{j-1}) = \frac{P([V > v_j] \text{ et } [V > v_{j-1}])}{P(V > v_{j-1})} = \frac{P(V > v_j)}{P(V > v_{j-1})} \quad (5.3)$$

La fonction de survie $S(v)$ s'écrit dans le cas de valeurs non distinctes v_i :

$$S(v) = P(V > v | V > v_i) \times P(V > v_i | V > v_{i-1}) \times \dots \times P(V > 0) \quad (5.4)$$

Un estimateur du premier membre de droite $P(V > v | V > v_i)$ vaut 1, l'estimateur de $S(v)$ a donc pour expression :

$$\hat{S}_n(v) = \prod_{j=1}^i \hat{p}_j \quad (5.5)$$

Considérons le cas où les valeurs v_i ne sont pas distinctes (on a par exemple deux fois la même valeur dans un échantillon donné). Notons n' le nombre de valeurs distinctes ($n' < n$) et $v'_{i, i \in [1, n']}$ ces valeurs, rangées par ordre croissant. Soient n_i le nombre de valeurs v_j supérieures ou égales à v'_i , d_i le nombre de valeurs v_j détectées égales à v'_i et c_i le nombre de valeurs v_j censurées égales à v'_i . On peut donc réécrire l'estimateur de Kaplan et Meier comme :

$$\hat{S}_n(v) = \begin{cases} 1 & \text{si } v < v'_1, \\ \prod_{j=1}^i \frac{n_j - d_j}{n_j} & \text{si } i \in [1, n'] \text{ et } v \in [v'_i, v'_{i+1}[. \end{cases} \quad (5.6)$$

5.5.2 Exemple d'utilisation de l'estimateur Kaplan et Meier sur l'échantillon de sources observées dans la région du Taureau.

Les sources observées dans l'échantillon du Taureau sont listées dans la Table 5.4 par ordre croissant de flux. Pour les sources où CN est détectée (en gras), les valeurs sont non censurées. Le calcul de la fonction de distribution par l'estimateur Kaplan et Meier est détaillé dans la Table 5.5.

n°	Source	Flux Jy.km/s	n°	Source	Flux Jy.km/s
1	CIDA 11	<0.23	23	Haro 6-33	0.91
2	CIDA 8	<0.26	24	UZ Tau E	1.21
3	SU Aur	<0.27	25	HV Tau C	1.22
4	LkHa 358	<0.27	26	GM Aur	1.23
5	DS Tau	<0.28	27	DG Tau B	1.33
6	CQ Tau	<0.28	28	HK Tau	1.33
7	Haro 6-13	0.3	29	04302+2247	1.53
8	DQ Tau	<0.34	30	DN Tau	1.54
9	FN Tau	<0.38	31	DL Tau	1.82
10	DE Tau	<0.39	32	CY Tau	1.98
11	HH 30	<0.41	33	IQ Tau	2.28
12	AB Aur	0.42	34	CI Tau	2.7
13	BP Tau	<0.59	35	GG Tau	3.2
14	RW Aur	<0.6	36	MWC 480	3.58
15	Haro 6-5B	0.61	37	RY Tau	3.91
16	FT Tau	0.63	38	GO Tau	5.47
17	UY Aur	<0.69	39	DM Tau	5.90
18	AA Tau	0.74	40	DG Tau	6.62
19	DR Tau	<0.75	41	LkCa 15	7.5
20	HL Tau	0.81	42	Haro 6-10	11.05
21	DO Tau	0.84	43	T Tau	18.62
22	MWC 758	<0.86	-	-	-

TABLE 5.4 – Sources observées dans la région du Taureau classées par ordre croissant de flux (CN). Les sources pour lesquelles la molécule est détectée sont indiquées en gras.

L'estimateur de Kaplan et Meier permet ainsi d'estimer le nombre de sources dont le flux est supérieur (ou inférieur) à une certaine valeur. Son utilisation requiert un échantillon aléatoire comme seule condition. Les sources observées dans notre échantillon se trouvant à différentes distances de l'observateur, cette condition est bien remplie.

J'ai réalisé un travail similaire pour les sources observées dans la région de Rho Ophiuchi où la majorité des détections étaient censurées. Pour les deux échantillons, les résultats sont représentés sur la figure 5.8. Les distributions montrent la probabilité qu'une source donnée

v^L	x'_j	n_j	d_j	$\frac{n_j-d_j}{n_j}$	\hat{S}
18.62	0	43	1	0.9767	1
11.05	7.570	42	1	0.9762	0.9767
7.50	11.12	41	1	0.9756	0.9535
6.62	12.00	40	1	0.9750	0.9302
5.90	12.72	39	1	0.9744	0.9069
5.47	13.15	38	1	0.9737	0.8837
3.91	14.71	37	1	0.9730	0.8605
3.58	15.04	36	1	0.9722	0.8372
3.20	15.42	35	1	0.9714	0.8140
2.70	15.92	34	1	0.9706	0.7907
2.28	16.34	33	1	0.9700	0.7674
1.98	16.64	32	1	0.9688	0.7444
1.82	16.80	31	1	0.9677	0.7212
1.54	17.08	30	1	0.9667	0.6979
1.53	17.09	29	1	0.9655	0.6747
1.33	17.29	28	2	0.9286	0.6514
1.23	17.39	26	1	0.9615	0.6049
1.22	17.40	25	1	0.9600	0.5816
1.21	17.41	24	1	0.9583	0.5583
0.91	17.71	23	1	0.9565	0.5350
0.84	17.78	21	1	0.9524	0.5118
0.81	17.81	20	1	0.9500	0.4874
0.74	17.88	18	1	0.9444	0.4630
0.63	17.99	16	1	0.9375	0.4373
0.61	18.01	15	1	0.9333	0.4100
0.42	18.20	12	1	0.9167	0.3826
0.30	18.32	7	1	0.8571	0.3507

TABLE 5.5 – Méthode de calcul de la fonction de distribution de CN en utilisant l'estimateur Kaplan-Meier. v' correspond à l'échantillon de valeurs v censurées par la gauche et v^L sa conversion en valeurs censurées par la droite.

ait un flux de CN supérieur à la valeur en abscisse. Si les différences entre les deux régions étaient déjà clairement visible sur la figure 5.7, l'estimateur de Kaplan et Meier permet une comparaison quantitative. Ainsi dans la région du Taureau, la valeur médiane est ~ 0.8 Jy.km/s tandis que celle-ci est deux fois plus faible dans la région de Rho Ophiuchi. De plus, seulement 20% des sources observées dans Rho Ophiuchi ont un flux supérieur à 1 Jy.km/s contre 40% dans le nuage du Taureau.

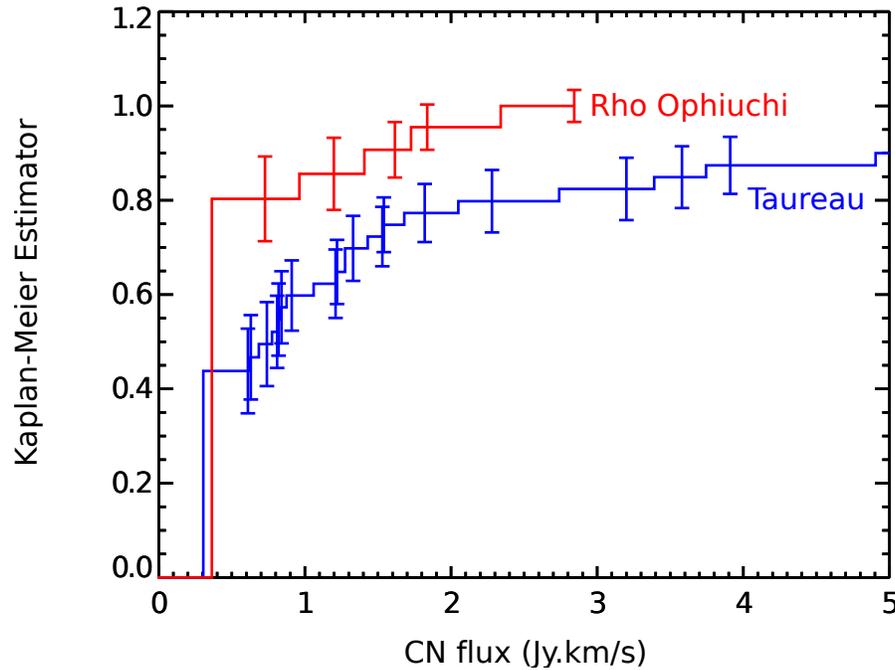


FIGURE 5.8 – *Distribution en flux de l'émission de CN au sein de la région du Taureau (en bleu) et de celle de Rho Ophiuchi (en rouge), obtenue avec l'estimateur de Kaplan et Meier.*

5.6 Quelles sont les causes de ces différences ?

Le taux de détection de CN est bien plus élevé dans la région du Taureau que dans celle de Rho Ophiuchi. De plus, peu de sources brillantes sont observées au sein de cette dernière contrairement au nuage du Taureau. Dans cette section sont discutées plusieurs hypothèses qui pourraient expliquer de telles différences.

5.6.1 Des propriétés stellaires différentes ?

Contrairement aux observations du nuage du Taureau pour lequel un large type spectral d'étoiles avait été observé (entre M5 et A1), les observations du nuage Rho Ophiuchi se concentrent principalement sur les étoiles de type M4-K4 avec très peu d'étoiles chaudes (voir Table 5.3). On pourrait donc penser que la différence observée serait le fruit de ces différences spectrales. Cependant, ce n'est pas le cas comme on peut le voir sur la figure 5.9 qui représente le flux de CN (pour les sources de la région du Taureau) en fonction du type spectral de la source (Guilloteau et al., 2013). CN est principalement détectée dans les sources de types spectraux compris entre M3 et K5 qui correspondent aux types spectraux de la grande majorité des étoiles contenues dans notre échantillon Rho Ophiuchi.

La différence observée en CN n'est donc pas due à des propriétés stellaires différentes. Il est nécessaire d'étudier d'autres hypothèses.

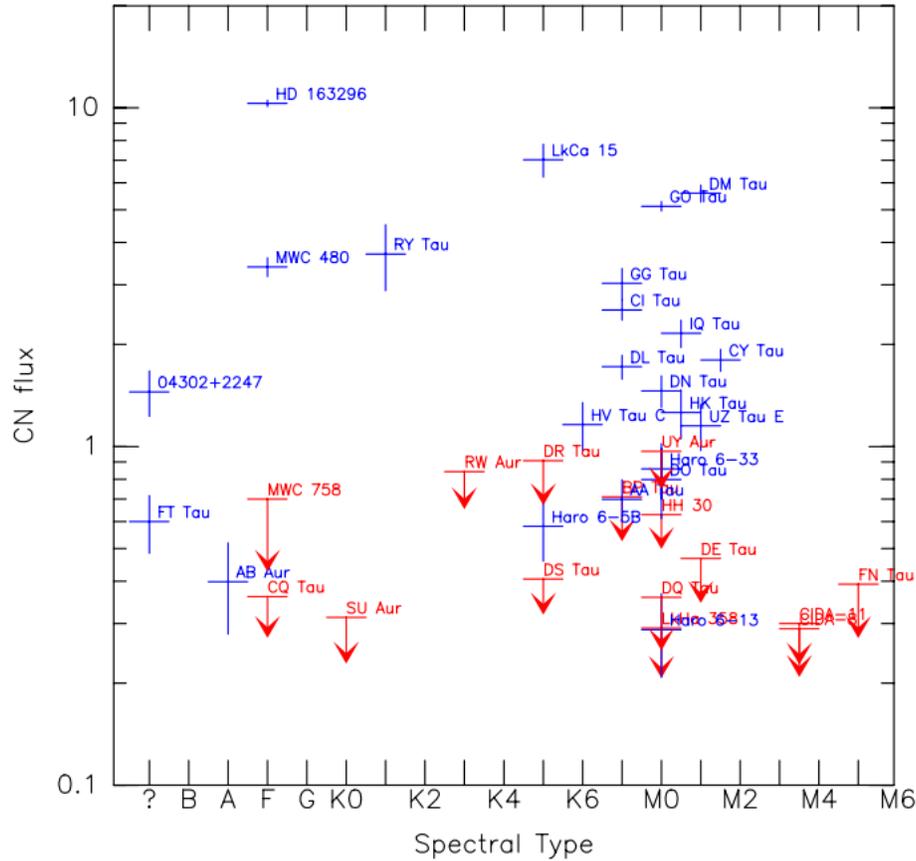


FIGURE 5.9 – Corrélation entre le flux de CN et le type spectral de la source (Taureau) dans laquelle la molécule a été observée. Les sources indiquées en bleues sont celles dans lesquelles CN est détectée et celles en rouge sont celles pour lesquelles seule une limite supérieure est disponible. Figure extraite de [Guilloteau et al. \(2013\)](#).

5.6.2 Des disques plus petits ?

D'après [Guilloteau and Dutrey \(1998\)](#), si l'on considère la température constante dans le disque ($q = 0$), le flux intégré s'écrit :

$$S = \frac{B_\nu(T_0)\pi R_{\text{out}}^2 \cos i}{D^2} \rho \Delta v \quad (5.7)$$

où D est la distance de la région observée, Δv la largeur de raie ([Beckwith and Sargent, 1993](#)), i l'inclinaison et ρ un facteur qui prend en compte la dépendance à l'opacité.

Dans le cas optiquement épais, ρ est égal à 1. En revanche, dans le cas optiquement mince, ρ est proportionnel à l'opacité, c'est-à-dire au nombre total de molécules (densité de surface). [Guilloteau et al. \(2013\)](#) ont utilisé l'émission des raies de CN pour déterminer le rayon externe des disques. Dans leur échantillon, l'opacité est essentiellement constante et assez faible (~ 0.3).

Sous l’hypothèse apportée par les modèles chimiques (Chapillon et al., 2012b) que la densité de surface de CN ne dépend que très peu des propriétés du disque, l’équation 5.7 peut être utilisée pour déterminer le rayon externe des disques observés. A partir de cette équation, si on suppose une opacité (et donc une densité de surface) constante pour tous les disques, le flux observé est donc proportionnel au rayon externe du disque ($S \propto R_{\text{out}}^2$). Dans le nuage du Taureau, les rayons externes ainsi dérivés sont en moyenne compris entre 300 et 600 UA (voir Table 5 de Guilloteau et al., 2013). La même méthode a été appliquée à l’échantillon des sources de Rho Ophiuchi. Le rayon externe de GSS 26 et Flying Saucer est mesuré entre 500 et 600 UA, tandis que trois autres sources (WL 18, SR 24S et IRS 51) présentent une limite supérieure à 3σ autour de 500 UA. Les autres disques sont plus petits que 300 UA. Les tailles de disques ainsi dérivées sont beaucoup plus petites dans le cas de Rho Ophiuchi. Le faible flux de CN observé dans cette région pourrait donc s’expliquer par la présence de disque plus petits. En effet, les sources y étant plus jeunes, les disques ont moins de temps pour se disperser par effets visqueux.

5.6.3 Une chimie différente ?

Les propriétés différentes des disques au sein des deux régions étudiées ici peuvent cependant affecter la chimie du CN et invalider l’hypothèse selon laquelle les densités de colonne de la molécule seraient similaires. Par exemple, Rho Ophiuchi étant plus jeune, les étoiles en son sein y sont plus brillantes. A partir des diagrammes d’évolution stellaire, un facteur 2-3 en luminosité est attendu pour des étoiles entre 1 et 3 millions d’années. Pour un même rayon, un facteur $(2-3)^{1/4} = 1.2-1.3$ (voir équation 3.15) est attendue en terme de température du disque. De plus, les disques protoplanétaires n’étant pas à l’équilibre chimique, l’âge du disque est un paramètre très important qui va pouvoir influencer la chimie (voir section 4.4.2).

J’ai donc étudié la chimie du CN dans les disques protoplanétaires à l’aide du modèle gaz-grain Nautilus décrit dans le chapitre 2, j’ai plus particulièrement étudié l’impact de la température des disques sur la chimie du CN et les effets de l’âge de ces disques. Le réseau chimique utilisé pour cette étude est celui décrit dans la section 2.1. Comme dans le cas de l’étude du carbone (voir chapitre 4), la température du disque est un paramètre libre et diffère d’un modèle à l’autre. Les paramètres du nuage moléculaire parent sont les mêmes que ceux décrits dans la section 4.2. Un rapport C/O=0.5 est considéré ici.

Sur la figure 5.10 sont représentées les densités de colonne de CN en fonction de la température dans le plan du disque pour des disques d’âges différents. Globalement, la densité de colonne de CN diminue lorsque la température augmente jusqu’à quelques 10^{11} cm^{-2} pour un disque âgé de 5 millions d’années et dont le plan est plus chaud que 40 K. Au chapitre 4, nous avons vu que la chimie du monoxyde de carbone dépend énormément des réactions qui ont lieu à la surface du grain. Dans le cas du CN, les réactions de surface jouent également un rôle primordial dans son évolution. A haute température, les réactions à la surface des grains sont beaucoup plus efficaces contribuant à convertir les molécules les plus simples en molécules plus complexes. CN est particulièrement sensible à ce mécanisme et sa destruction sur les grains est

très importante à haute température (voir figure 5.11). Ce processus de conversion nécessitant un certain temps pour se produire, la dépendance en température est plus importante pour les disques plus âgés.

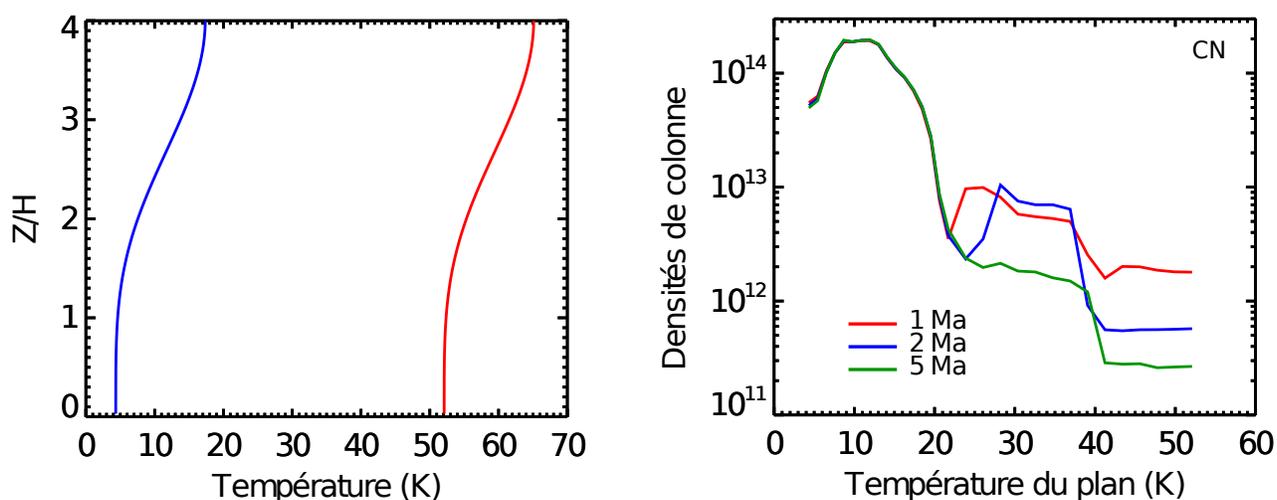


FIGURE 5.10 – Profils de température à 300 UA (les deux cas extrêmes) et les densités de colonne (cm^{-2}) de CN correspondantes en fonction de la température dans le plan du disque pour des disques âgés de 1, 2, et 5 millions d'années.

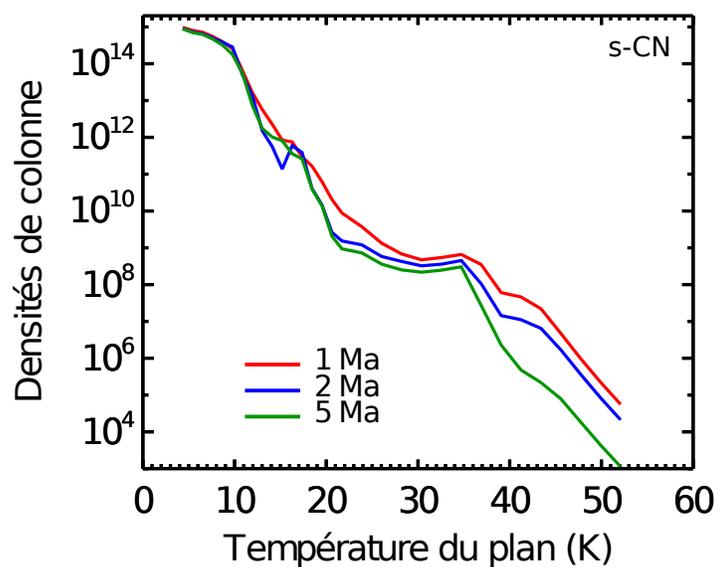


FIGURE 5.11 – Densités de colonne (cm^{-2}) de s-CN en fonction de la température dans le plan du disque pour des disques de différents âges.

Sur la figure 5.10, la décroissance de CN n'est pas monotone avec la température et un pic d'abondance est observé entre ~ 25 et 40 K. Le processus de désorption est responsable de ce comportement. En effet, comme le montre la figure 5.12, sur laquelle sont représentés les profils verticaux d'abondances de CN pour trois températures de plan différentes (23, 35 et 41 K), les abondances diffèrent fortement entre les trois modèles dans le plan du disque (entre 0 et 1 échelles de hauteur). Pour $T_{\text{plan}} = 41$ K, la destruction de CN par diffusion à la surface des grains est très efficace et empêche une désorption efficace de CN car celle-ci est piégée sous diverses formes, telles que s-HCN, s-OCN et s-CCN, avant d'avoir eu le temps de s'évaporer. L'abondance de CN en phase gazeuse est donc la plus faible pour ce modèle (10^{-12}). En revanche, on remarque que ce processus n'est pas linéaire et que l'abondance de CN est plus de dix fois plus faible dans le cas du modèle où la température est la plus faible comparé au modèle à 35 K. En effet, si à 35 K dans le plan, la diffusion est plus efficace qu'à 23 K, c'est aussi le cas pour la désorption. CN est donc plus abondante à 35 K car plus efficacement désorbée ; pour de telles température, la désorption est capable de compenser la diffusion.

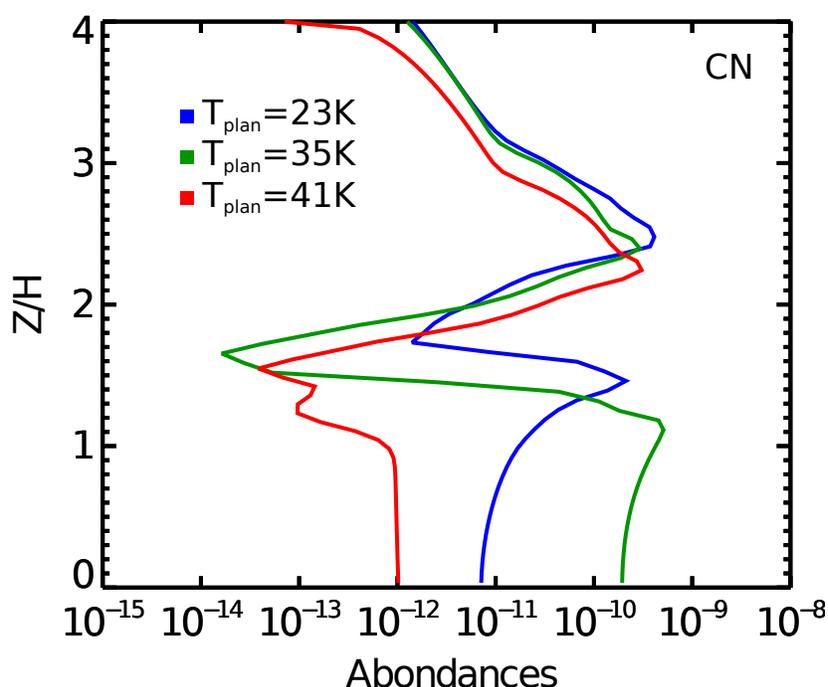


FIGURE 5.12 – Profils verticaux d'abondances de CN en phase gazeuse pour trois différentes structures en température : 23, 35 et 41 K dans le plan du disque et pour un disque âgé de 1 millions d'années.

On peut voir sur la figure 5.12 que CN est majoritairement formée dans la couche moléculaire (entre 2 et 3 échelles de hauteur) et dans le plan (entre 0 et 1 échelles de hauteur) dans le cas où la température y avoisine les 30-35 K. Dans ces régions, la forte abondance de CN est principalement due à son évaporation des surfaces et à la réaction entre C et NO dans le gaz. Les faibles abondances rencontrées entre ~ 1.5 et 2 échelles de hauteur et dans le plan du

disque pour $T_{\text{plan}} = 23$ et 41 K sont quant à elles le résultat de trois réactions principales :



Dans la phase gazeuse, ce sont les réactions avec les atomes O et N qui contribuent à détruire CN le plus efficacement.

Les résultats présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'un article ([Reboussin et al., 2015a](#)) publié dans la revue *A&A*, intitulé "Sensitive survey for ^{13}CO , CN, H_2CO , and SO in the disks of T Tauri and Herbig Ae stars. II. Stars in ρ Ophiuchi and upper Scorpius". Cet article est disponible en annexe [A](#).

6

Etude de la chimie des molécules azotées dans les disques

Sommaire

6.1	Pourquoi étudier ces molécules ?	86
6.2	La chimie des molécules azotées	87
6.2.1	Sensibilité à la température et au champ UV	87
6.2.2	Le rapport CN/HCN	91
6.2.3	Le rapport HCN/HNC	92
6.3	Observations dans trois disques protoplanétaires	93
6.3.1	Echantillon de sources	95
	DM Tau	95
	LkCa 15	95
	MWC 480	95
6.3.2	Comparaison avec le modèle chimique	96
6.4	Conclusions	100

6.1 Pourquoi étudier ces molécules ?

Les molécules azotées, notamment l'acide cyanhydrique (HCN), sont très importantes pour l'étude de la chimie prébiotique. En effet, la polymérisation de HCN peut conduire à la formation de la molécule d'adénine (voir figure 6.1) qui est une base purique constituant du vivant (on la retrouve notamment dans l'ADN et l'ARN). La synthèse d'adénine à partir de l'acide cyanhydrique dans l'atmosphère primitive de la Terre est très incertaine (Shapiro, 1995). Une origine extraterrestre est plutôt privilégiée. Les molécules biologiques, telles que l'adénine, auraient été formées dans des environnements extraterrestres et apportées sur Terre par les comètes ou les météorites (Chyba and Sagan, 1992).

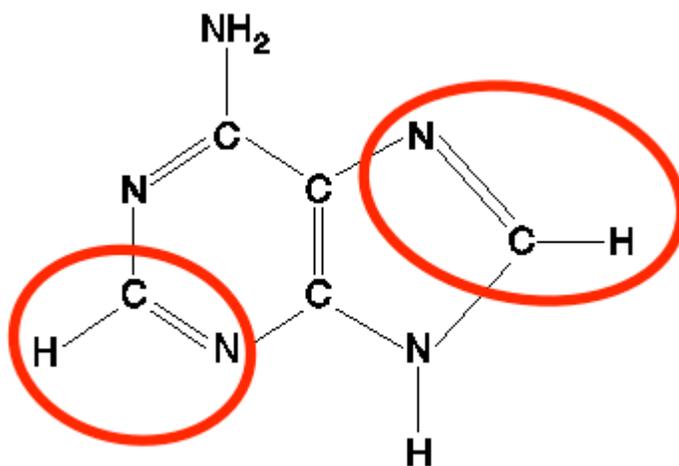


FIGURE 6.1 – La molécule d'adénine $C_5H_5N_5$: un pentamère de HCN.

HCN, ainsi que son isomère HNC, ont d'ailleurs été observées dans des sources variées : les nuages moléculaires (Turner et al., 1997), les nuages diffus (Liszt and Lucas, 2001) ou encore les Régions de PhotoDissociation (PDRs, Fuente et al., 1993). Dans toutes ces régions, leurs abondances varient fortement et semblent très sensibles à la température et au champ UV. HCN et HNC (ainsi que CN, le produit de leur photodissociation notamment) sont donc souvent utilisées comme traceurs de leur environnement. Pascucci et al. (2009) ont ainsi observé que HCN est beaucoup plus abondante dans les disques entourant les étoiles de type solaire ($K1 \rightarrow M5$) que les étoiles froides ($M5 \rightarrow M8$). De plus, si dans les régions faiblement irradiées comme les nuages moléculaires, les abondances de HCN et HNC sont similaires, le rapport HCN/HNC observé augmente cependant avec la température et le champ UV. L'observation de ces molécules organiques est donc un outil précieux pour comprendre la physique et la chimie des disques protoplanétaires. Ces derniers ont une géométrie fine et évasée qui en font des environnements fortement irradiés où HCN et CN sont aisément détectables (Chapillon et al., 2012b; Guilloteau et al., 2013). HNC n'a en revanche été détectée que dans trois disques : DM Tau (Dutrey et al., 1997, Iram/30m), et plus récemment dans les disques TW Hya et HD 163296 (Graninger et al., 2015, SMA).

Dans ce chapitre, j'étudie la chimie des molécules azotées HCN, HNC et CN, et notamment le rapport HCN/HNC. Les résultats des modèles sont aussi comparés aux observations de trois disques : DM Tau, LkCa 15 et MWC 480 dans lesquels HCN, HNC et CN ont été observées avec le radiotélescope du 30 m.

6.2 La chimie des molécules azotées

6.2.1 Sensibilité à la température et au champ UV

Les observations de CN, HCN et HNC montrent que ces molécules sont particulièrement sensibles à la température du milieu et le flux UV. J'ai donc étudié l'évolution chimique des molécules azotées parmi les plus abondantes au sein des disques protoplanétaires en fonction de ces deux paramètres à l'aide du modèle chimique Nautilus. Les abondances initiales utilisées pour cette étude sont les mêmes que celles indiquées dans la Table 4.1. Un rapport C/O=0.5 est considéré ici. Sur la figure 6.2 sont représentées les densités de colonne des molécules en fonction du champ UV pour une température constante (profil de température de DM Tau; voir figure 6.12), tandis que sur la figure 6.3 sont représentées les densités de colonne des molécules en fonction de la température dans le plan du disque pour un champ UV constant ($G_0 = 205$).

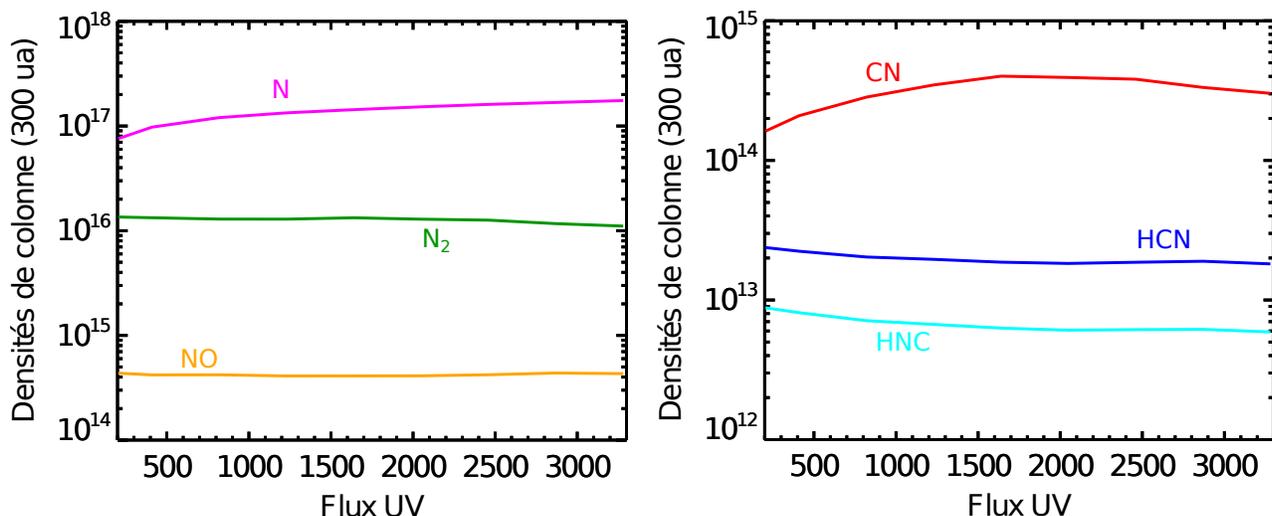


FIGURE 6.2 – Densités de colonne (cm^{-2}) des molécules azotées en fonction du champ UV pour une température constante (profil de température de DM Tau; voir figure 6.12).

Les variations des densités de colonne avec le flux UV sont plutôt faibles : l'azote atomique, dont la densité de colonne augmente d'un facteur ~ 2.5 entre $G_0 = 205$ et $G_0 = 3280$, est la molécule la plus affectée. On remarque également que l'espèce azotée majoritaire dans le disque dépend de la température. Pour un profil de température identique à celui de DM Tau, N est

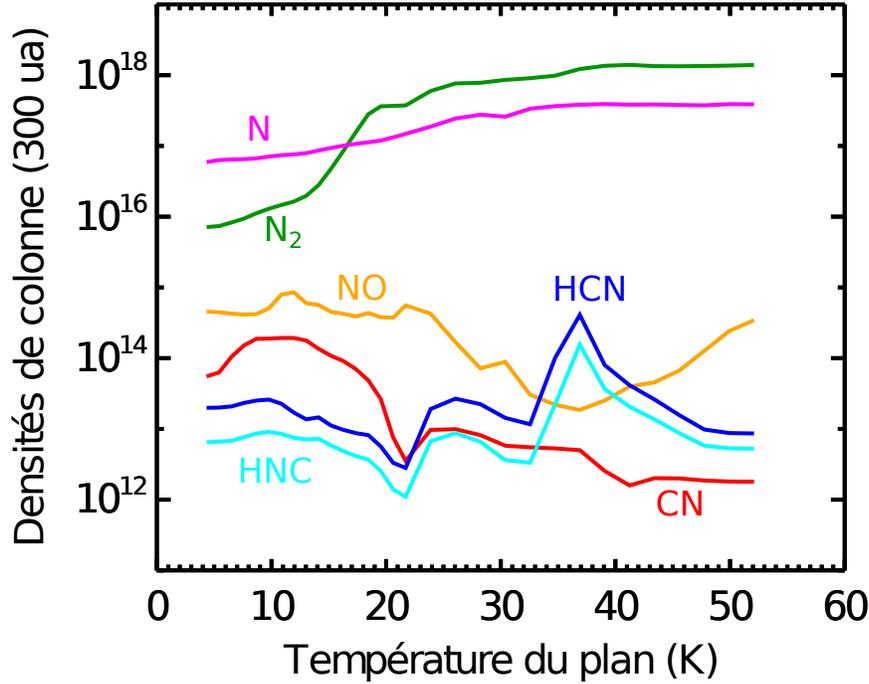


FIGURE 6.3 – Densités de colonne (cm^{-2}) des molécules azotées en fonction de la température dans le plan du disque pour un champ UV constant ($G_0 = 205$).

l'espèce azotée majoritaire et est ~ 10 fois plus abondante que N_2 quelque soit la valeur de G_0 . En revanche, lorsque la température augmente, la densité de colonne de N_2 augmente et elle devient l'espèce azotée majoritaire pour les disques pour lesquels $T_{\text{plan}} > 18\text{K}$. Ce comportement est principalement le résultat de deux réactions beaucoup plus efficace à haute température :



NO est ainsi efficacement détruit par ces deux réactions et sa réaction avec N , qui désorbe facilement au dessus de 20K dans le plan, accroît la formation de N_2 .

Les densités de colonne des principaux porteurs d'azote N , N_2 et NO ne variant que très peu avec le flux UV (figure 6.2), celles de CN , HCN et HNC évoluent par conséquent de la même manière. La température des grains étant faible (10K), CN est abondante dans la phase gazeuse (voir Figure 5.10) et n'est que très peu détruite par les réactions de diffusion sur les grains. Sa densité de colonne est donc élevée (au dessus de 10^{14}cm^{-2}) et dépend principalement de celles de NO et N . En effet, CN est majoritairement formée dans la phase gazeuse par les réactions impliquant NO et N :



A plus haute température, en revanche, CN va être efficacement détruite par les réactions à la surface des grains (voir section 5.6.3). La molécule devient alors moins abondante que HCN

et HNC pour les disques chauds ($T_{\text{plan}} > 30$ K). De plus, pour de telles températures, HCN et HNC désorbent efficacement.

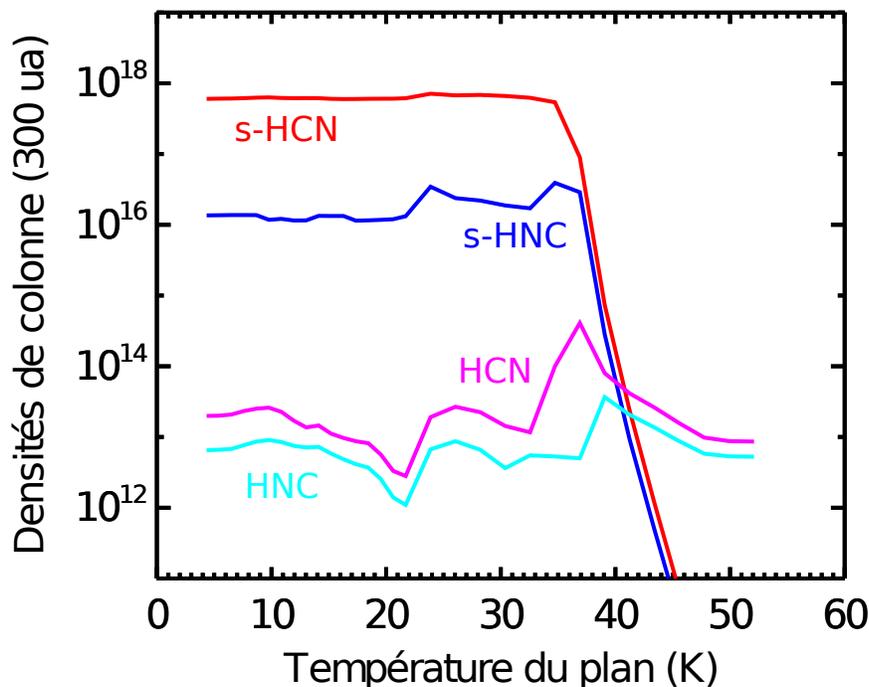


FIGURE 6.4 – Densités de colonne (cm^{-2}) de HCN et HNC dans la phase gazeuse et à la surface des grains en fonction de la température dans le plan du disque.

HCN est plus abondante que HNC car son analogue sur les grains l'est également (voir figure 6.4). En effet, contrairement à s-HNC, s-HCN est formée par les réactions de diffusion entre s-CN et l'hydrogène atomique et moléculaire, les deux espèces les plus légères et les plus mobiles. Si s-HCN et s-HNC peuvent être formées par les réactions de diffusion sur les grains, elles ne sont en revanche détruite que par la photodissociation et ne peuvent pas diffuser contrairement à s-CN. C'est pourquoi HCN et HNC sont présentes majoritairement à la surface des grains même pour des températures entre 20 et 30 K où la diffusion joue un rôle prépondérant. Aux alentours de 37 K, les densités de colonne de s-HCN et s-HNC chutent fortement car les molécules désorbent. Une fois dans la phase gazeuse, différents types de réactions interviennent dans l'évolution chimique de HCN et HNC. Les principales réactions sont listées dans la Table 6.1.

Si HNC est plus efficacement formée par la recombinaison électronique dissociative de HCNH^+ que HCN, elle est en revanche beaucoup plus efficacement détruite par les réactions avec les ions tandis que HCN est plus efficacement formée par les réactions neutre-neutre. Il en résulte un rapport HCN/HNC toujours supérieur à 1. Comme on peut le voir sur la figure 6.5, qui représente les abondances de HCN et HNC pour plusieurs profils de température et d'extinction visuelle illustrés sur la figure 6.6, ces réactions sont beaucoup plus efficace à haute température et affectent les abondances drastiquement. Cette figure illustre l'importance du

Num	Réaction	α	β	γ
1	$\text{H} + \text{H}_2\text{CN} \rightarrow \text{HCN} + \text{H}_2$	6.0e-11	0	0
2	$\text{H} + \text{CCN} \rightarrow \text{C} + \text{HCN}$	2e-10	0.17	0
3	$\text{HCNH}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{HCN} + \text{H}$	9.38e-8	-0.65	0
4	$\text{HCNH}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{HNC} + \text{H}$	9.38e-8	-0.65	0
5	$\text{C}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{H} + \text{CNC}^+$	1.0	1.28e-9	6.61
6	$\text{C}^+ + \text{HNC} \rightarrow \text{H} + \text{CNC}^+$	0.5	1.34e-9	6.5
7	$\text{C}^+ + \text{HNC} \rightarrow \text{H} + \text{C}_2\text{N}^+$	0.5	1.34e-9	6.5
8	$\text{H}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{HNC}^+ + \text{H}$	1	3.77e-9	6.61

TABLE 6.1 – Réactions clés pour l'évolution chimique de HCN et HNC dans la phase gazeuse. Le taux de réaction K pour les réactions neutre-neutre (réactions 1 et 2), les réactions de recombinaison des ions avec un électron (réactions 3 et 4) et les réactions ion-molécule (réactions 5 à 8) se calcule comme : $K = \alpha \left(\frac{T}{300}\right)^\beta e^{-\frac{\gamma}{T}}$.

profil de température qui gouverne l'extinction visuelle dans le disque. En effet, lorsque la température augmente, les disques étant plus étendus verticalement (pour un rayon donné), la densité y est faible et par conséquent l'extinction visuelle aussi, permettant au champ UV de pénétrer plus facilement dans le disque. Dans la couche externe, les abondances de HCN et HNC sont ainsi diminuées de plus de 9 ordres de grandeur pour $T_{\text{plan}} = 9 \rightarrow 37$ K.

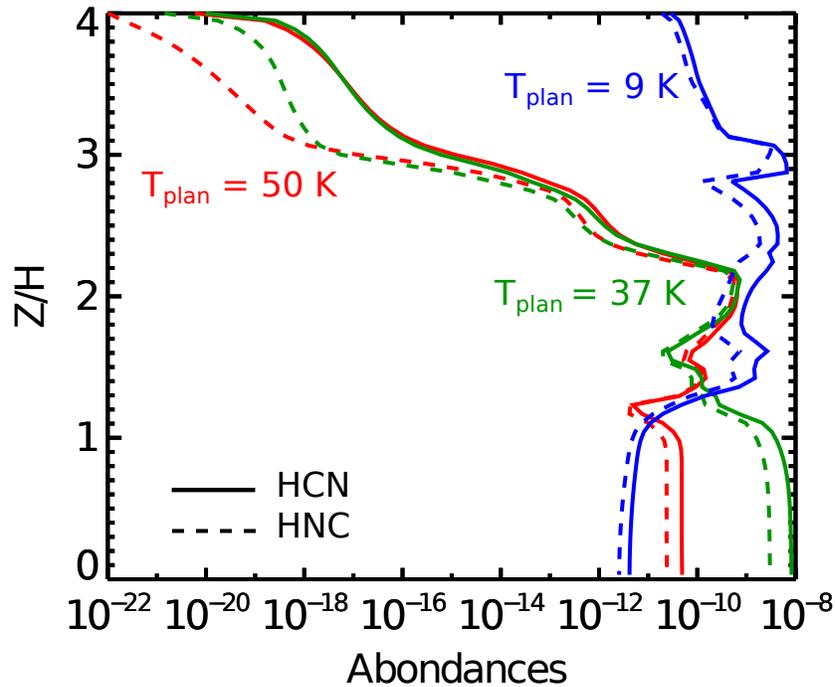


FIGURE 6.5 – Profils verticaux d'abondances de HCN et HNC pour les trois différents profils de température et d'extinction visuelle représentés sur la figure 6.6.

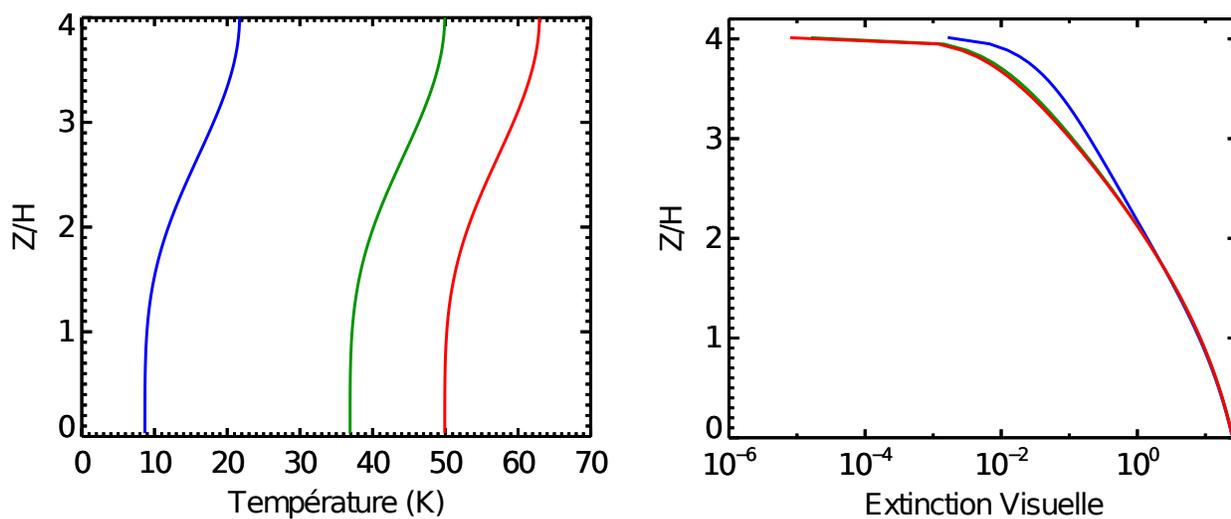


FIGURE 6.6 – Profils verticaux de température et d’extinction visuelle.

6.2.2 Le rapport CN/HCN

Le rapport CN/HCN est représenté sur la figure 6.7 en fonction du champ UV (pour une température constante) et en fonction de la température dans le plan du disque (pour un champ UV constant).

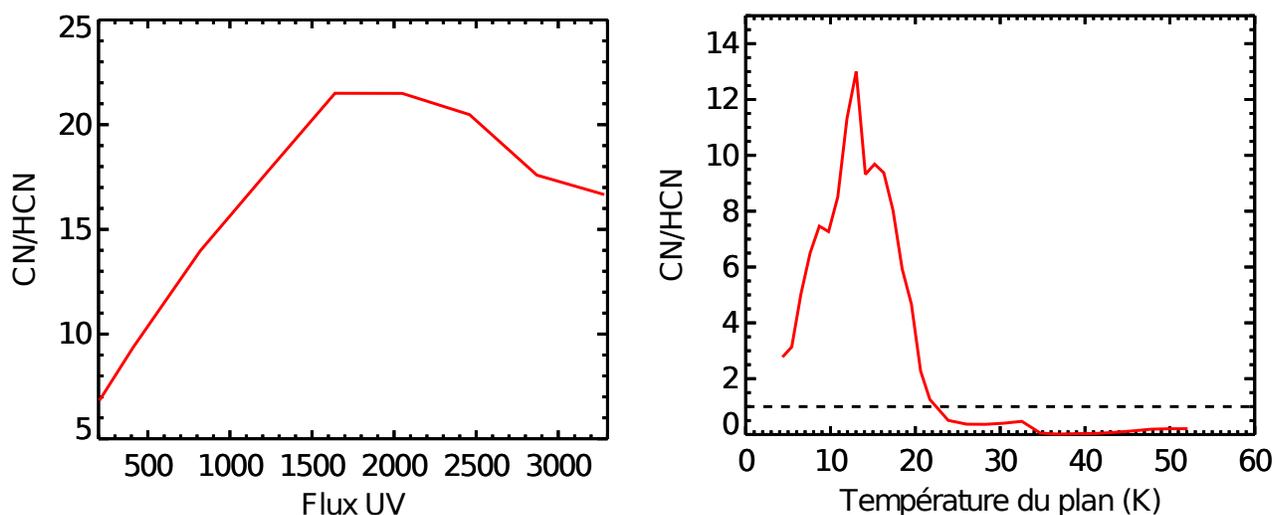


FIGURE 6.7 – Rapport CN/HCN dans les disques en fonction du flux UV et de la température.

Le rapport CN/HCN est en partie déterminé par la quantité d’UV illuminant le disque. Il est supérieur à 1 pour tout G_0 et augmente avec le flux UV. Ce comportement est dû d’une part au fait que CN n’est principalement détruite (dans la phase gazeuse) que par les réactions neutre-neutre (majoritairement avec O et N) alors que HCN réagit avec H^+ et C^+ dont les abondances augmentent avec le champ UV. Si à faible température, le rapport

CN/HCN se comporte comme dans les PDRs et est régulé par le flux UV, ce n'est plus le cas lorsque la température augmente. En effet, la diffusion de surface joue un rôle particulièrement important pour la chimie de CN (voir section 5.6.3) et contribue à détruire CN. Le rapport CN/HCN est ainsi largement supérieur à 1 pour les disques pour lesquels $T_{\text{plan}} < 20\text{K}$, CN étant majoritairement présente dans la phase gazeuse. Pour les disques plus chauds, ce rapport devient inférieur à 1 car CN, contrairement à HCN, est très efficacement détruite par la diffusion à la surface des grains. La destruction de CN par diffusion à haute température est donc plus efficace que la destruction de HCN par le champ UV (ceci reste valable même en considérant un champ UV plus fort).

6.2.3 Le rapport HCN/HNC

Le rapport HCN/HNC est représenté sur la figure 6.8 en fonction du champ UV (pour une température constante) et en fonction de la température dans le plan du disque (pour un champ UV constant).

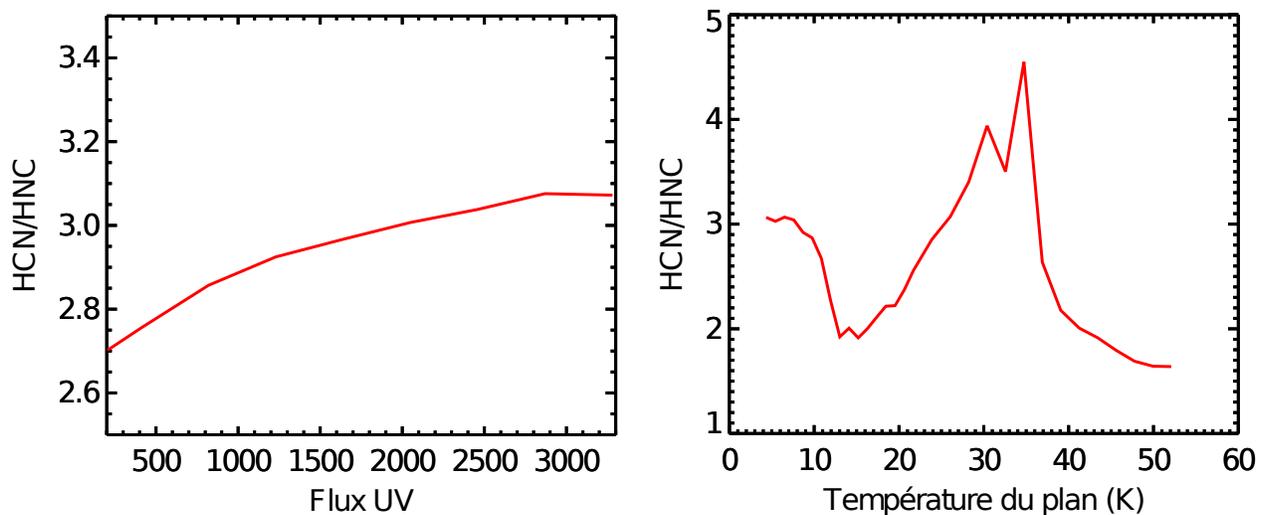


FIGURE 6.8 – Rapport HCN/HNC dans les disques en fonction du flux UV et de la température.

Le rapport HCN/HNC est dans les deux cas toujours prédit supérieur à 1, HNC étant moins efficacement formé sur les grains et plus efficacement détruit dans la phase gazeuse que HCN (voir section 6.2.1). Le rapport HCN/HNC atteint sa valeur maximale entre ~ 25 et 35 K . En effet, à ces températures, la formation de s-HCN est très efficace et le rapport s-HCN/s-HNC qui en résulte est alors très grand (~ 40). Au dessus de 40 K dans le plan, HCN et HNC sont en grande partie en phase gazeuse pour laquelle leur évolution est beaucoup plus similaire. Néanmoins HNC étant plus efficacement détruit, le rapport HCN/HNC reste supérieur à 1. A température constante, le rapport HCN/HNC augmente avec le flux UV mais cette variation reste assez faible. Cela s'explique par le fait que HCN et HNC ont une section efficace de photodissociation semblable (voir figure 6.9). Les réactions de photodissociation

détruisent donc HCN et HNC avec une efficacité similaire. Les variations observées ici sont donc principalement dues aux réactions de HCN et HNC avec l'hydrogène et le carbone ionisés.

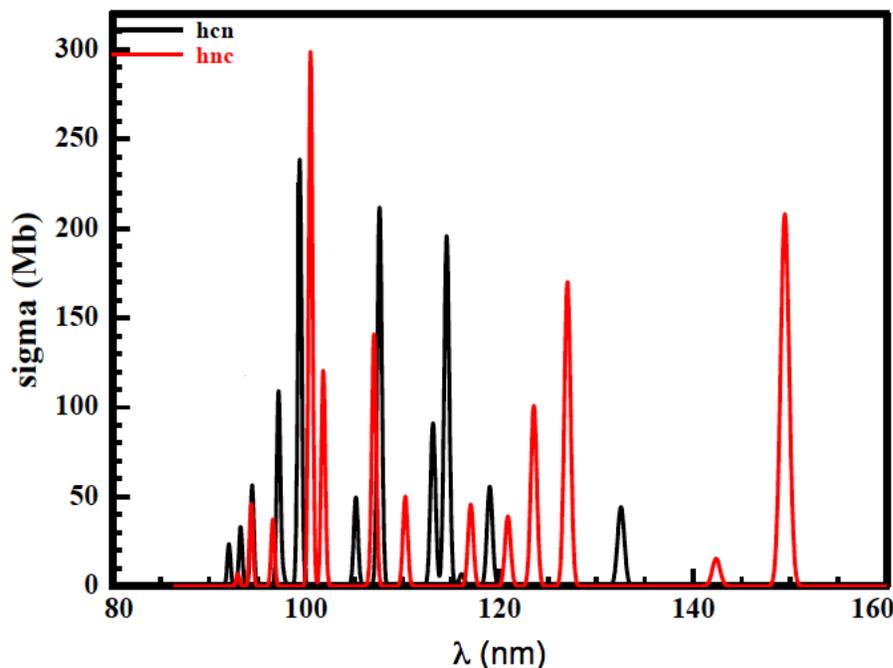


FIGURE 6.9 – Spectres d'absorption pour HCN et HNC ($1 \text{ Mb} = 10^{-18} \text{ cm}^{-2}$). Pour un flux constant entre 95 et 200 nm (permet de sonder toutes les transitions depuis l'état fondamental), les taux de dissociation ainsi calculés sont très similaires.

6.3 Observations dans trois disques protoplanétaires

Nous avons vu précédemment que la molécule CN est aisément détectée dans les disques protoplanétaires et notre étude montre que son abondance est très sensible à son environnement : température et taille du disque. Je reporte ici les résultats d'observations effectuées en août 2011 avec le radiotélescope de 30 m au cours desquelles HCN et HNC ont été observée dans LkCa 15, DM Tau, et MWC 480 (observations non publiées à ce jour). Les spectres sont affichés sur la figure 6.10 tandis que les valeurs des densités de colonne sont indiquées dans la Table 6.2. Si la molécule HCN avait déjà été détectée dans ces trois disques auparavant (Chapillon et al., 2012b), HNC n'était, en revanche, observée seulement dans DM Tau (Dutrey et al., 1997, Iram/30m), et plus récemment dans les disques TW Hya et HD 163296 (Graninger et al., 2015, SMA).

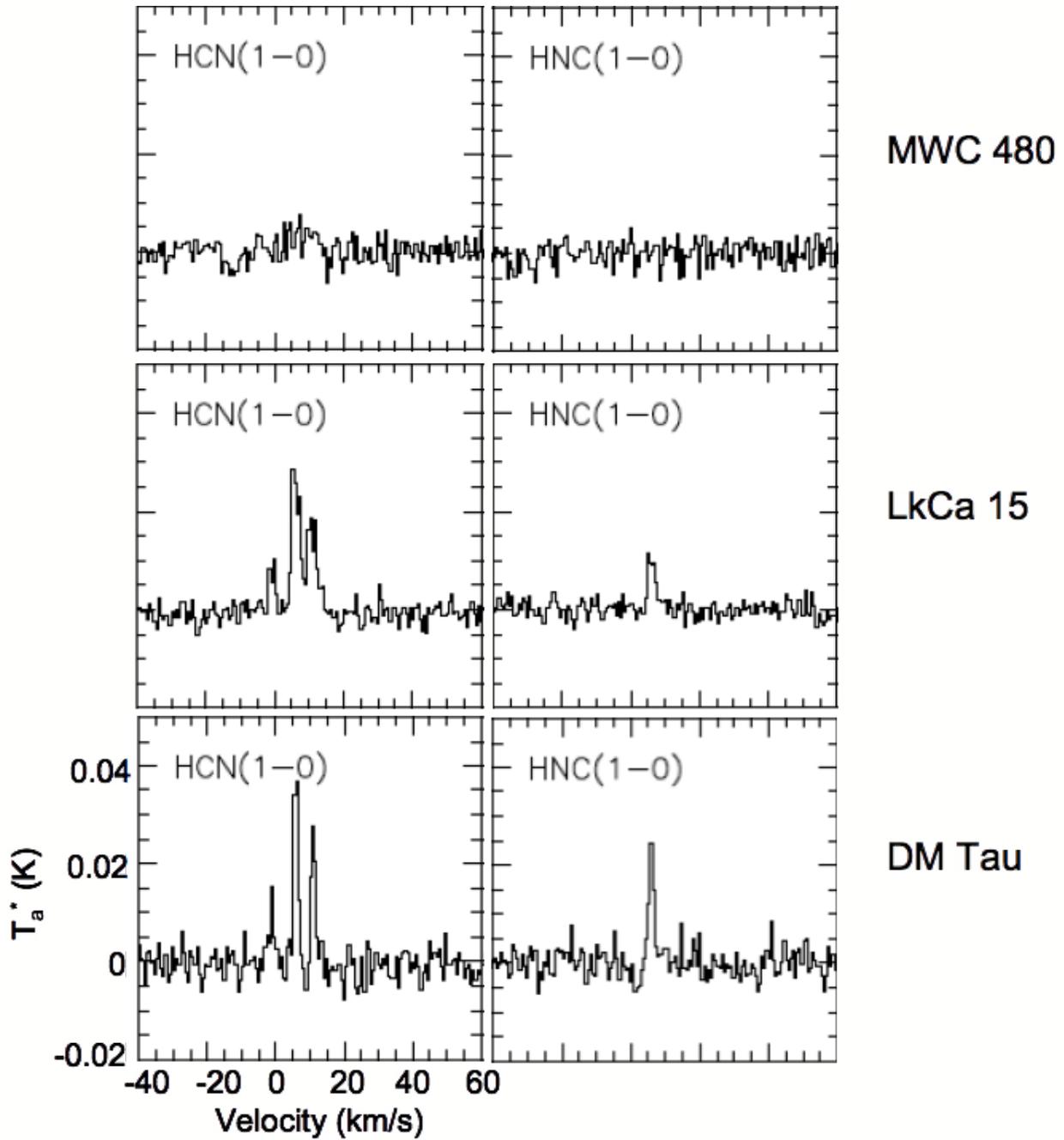


FIGURE 6.10 – Spectre des molécules HCN et HNC observées dans les disques DM Tau , LkCa 15 , et MWC 480 avec le radiotélescope de 30 m (IRAM).

Source	$\Sigma_{300} (\times 10^{12} \text{ cm}^{-2})$		
	HCN	HNC	CN
DM Tau	2.3 ± 0.2	1.05 ± 0.08	35 ± 9
LkCa 15	7.7 ± 0.1	1.5 ± 0.1	58 ± 5
MWC 480	1.0 ± 0.2	≤ 0.42	10.4 ± 0.9

TABLE 6.2 – Densités de surface dérivées des observations (IRAM/30m).

6.3.1 Echantillon de sources

Cette étude porte sur trois sources situées dans le nuage du Taureau : DM Tau, LkCa 15 et MWC 480.

DM Tau est une étoile T Tauri de masse $0.5 M_{\odot}$ entourée d'un disque en rotation Képlérienne (Guilloteau and Dutrey, 1994). Des observations de cette source en ^{12}CO , ^{13}CO et C^{18}O (Dartois et al., 2003) ont également montré l'existence d'un gradient vertical de température.

LkCa 15 est une étoile T Tauri de masse $1 M_{\odot}$ entourée d'un disque avec une cavité interne (Piétu et al., 2006) d'environ 50 UA de rayon dans le continuum. A partir des données de CO et ses isotopes, Piétu et al. (2007) n'ont en revanche trouvé aucune évidence d'un gradient de température vertical (voir Figure 6.11).

MWC 480 est une étoile de Herbig Ae de masse $1.8 M_{\odot}$ entourée d'un disque Képlérien (Simon et al., 2000). Comme pour DM Tau, l'étude de CO montre un gradient vertical de température.

	DM tau	LkCa 15	MWC 480
type spectral	M1	K5	A4
masse stellaire (M_{\odot})	0.53	1.01	1.83
température effective (K)	3720	4350	8460
luminosité stellaire (L_{\odot})	0.25	0.74	11.5
âge (Ma)	5	3-5	7
G_0	410	2550	8500

TABLE 6.3 – Paramètres de l'échantillon de sources.

Ces trois sources ont des disques étendus ($r > 500$ UA) observés en CO et couvrent une large gamme du spectre de masse (0.5 - $1.8 M_{\odot}$). Elles permettent donc une étude d'environnements différents (intensité du champ UV, température ; voir Table 6.3) et par conséquent d'une chimie différente.

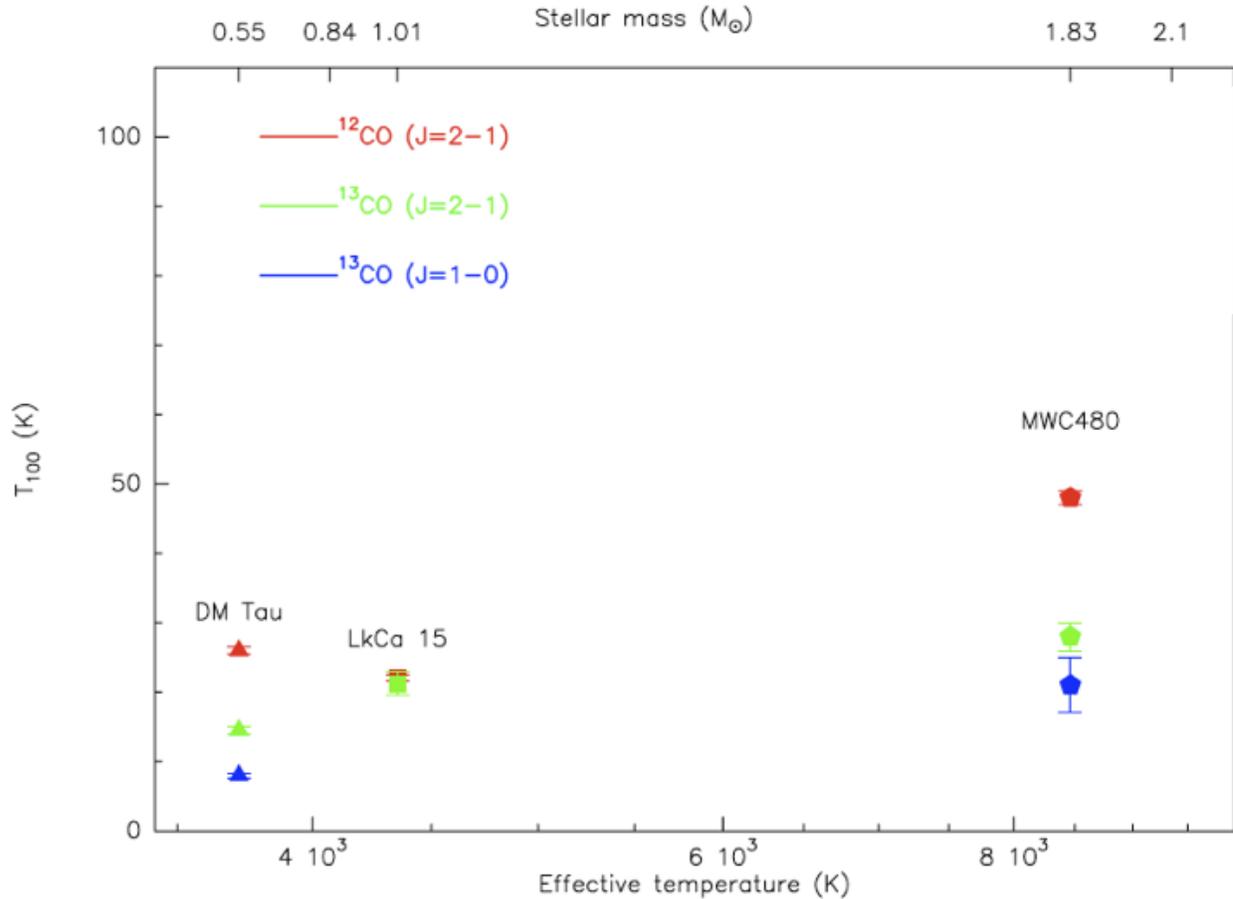


FIGURE 6.11 – Températures dérivées des isotopes de CO en fonction de la température effective de l'étoile centrale. Adaptée de Piétu et al. (2007).

6.3.2 Comparaison avec le modèle chimique

Avec Nautilus, j'ai modélisé l'évolution chimique des espèces azotées dans les trois disques protoplanétaires étudiés ici. Les différents processus chimiques inclus dans le modèle sont décrits dans le chapitre 2 tandis que la structure physique est décrite dans le chapitre 3. La structure en température est quant à elle basée sur l'étude de Dartois et al. (2003). Le plan du disque est froid, en accord avec la température déduite des observations de $^{13}\text{CO} (1-0)$, avec une température égale à 10 K pour les deux disques T Tauri : DM Tau et LkCa 15 et une température de 20 K pour le disque entourant l'étoile Herbig Ae MWC 480. La couche moléculaire est plus chaude, en accord avec les observations de $^{12}\text{CO} (2-1)$, avec une température égale à 12.7 K pour LkCa 15, 17.3 K pour DM Tau, et 27.7 K pour MWC 480 à 300 unités astronomiques de l'étoile. Les profils de température sont représentés sur la figure 6.12 ainsi que les profils de densité et d'extinction visuelle correspondants.

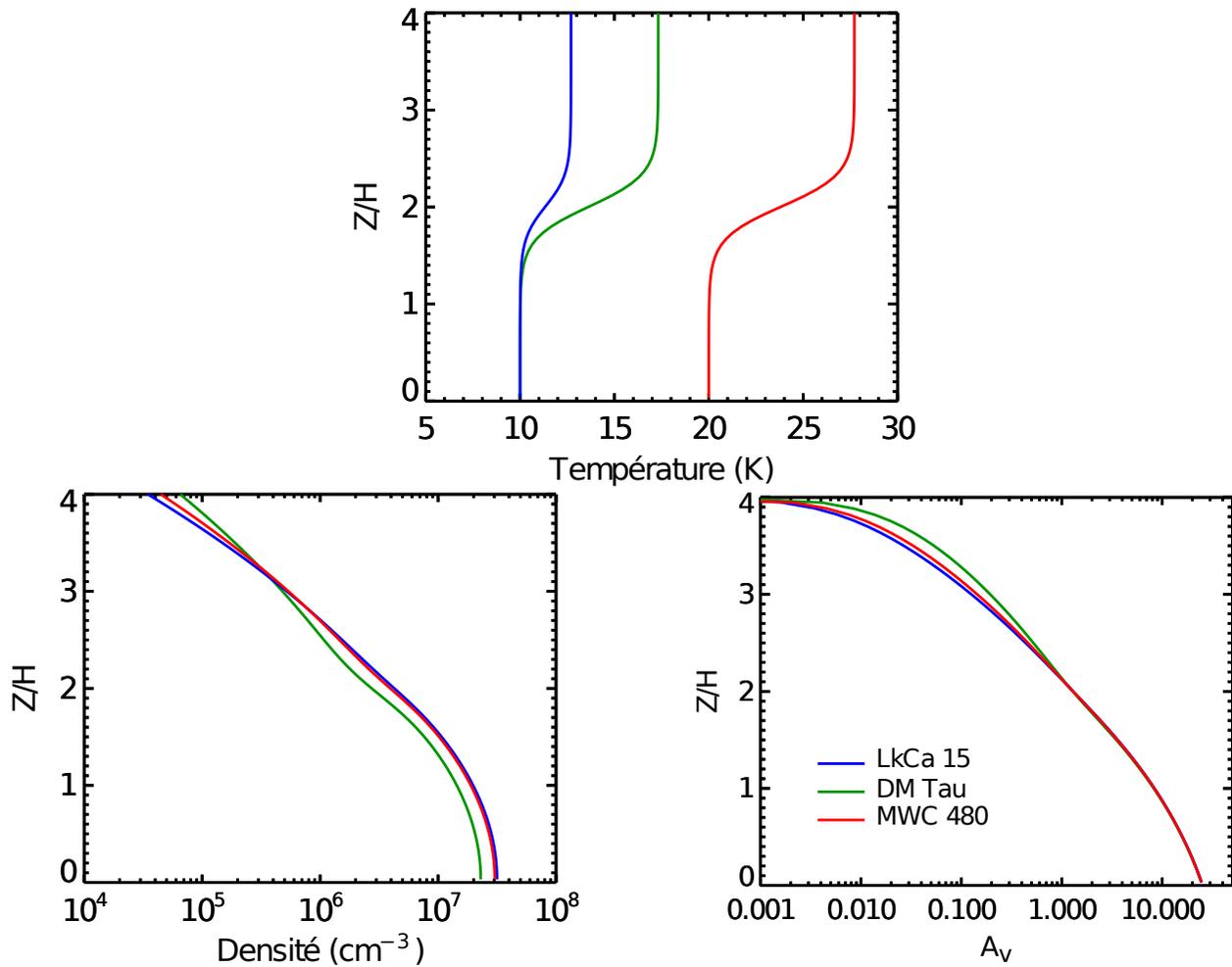


FIGURE 6.12 – Profils verticaux de température, densité et extinction visuelle des trois disques protoplanétaires : DM Tau, LkCa 15 et MWC 480, à 300 UA.

Les densités de colonne et abondances des molécules ont été calculées pour deux différents modèles et comparées aux observations (voir Table 6.4 et Table 6.5). Le Modèle A étant considéré comme le modèle nominal, pour le Modèle B, la température est augmentée d'un facteur 2. Les résultats sont obtenus pour des disques âgés de 1 million d'années et pour un rayon de 300 UA.

CN étant détruite par les réactions neutre-neutre et HCN par les réactions ion-molécule, le rapport CN/HCN est souvent utilisé comme traceur du champ UV. Son augmentation avec le flux UV est d'ailleurs observé dans les nuages moléculaires et PDRs. L'observation de PDRs (Fuente et al., 1993) montre par exemple que le rapport des abondances entre CN et HCN augmente d'un facteur ~ 10 lorsque l'extinction visuelle diminue ($A_V=10 \rightarrow 6$ mag). Au contraire, le rapport HCN/HNC augmente avec le champ UV et la température. Dans le milieu interstellaire, les abondances de HCN et HNC sont très similaires aux environs de 10 K, mais le rapport HCN/HNC augmente également avec la température (Jin et al., 2015). Cependant,

TABLE 6.4 – Observations versus modèles.

Source	Molécule	$\Sigma_{300} (\times 10^{12} \text{ cm}^{-2})$		
		Observations	Modèle A	Modèle B
DM Tau	CN	35±9	160	6.9
	HCN	2.3±0.2	24	2.9
	HNC	1.05±0.08	8.8	1.4
LkCa 15	CN	58±5	79	62
	HCN	7.7±0.1	18	8.3
	HNC	1.5±0.1	6.3	3.7
MWC 480	CN	10.4±0.9	30	20
	HCN	1.0±0.2	7.5	3.1
	HNC	≤0.42	2.5	1.3

TABLE 6.5 – Rapports de densités de colonne à 300 UA.

Source	Modèle	HCN/HNC	CN/HCN	Observations	
				HCN/HNC	CN/HCN
DM Tau	A	2.7	6.8	2.2	15.2
	B	2.6	9.0		
LkCa 15	A	2.8	4.3	5.1	7.5
	B	5.1	15.4		
MWC 480	A	3.0	4.0	> 2.4	10.4
	B	3.4	9.0		

dans les disques protoplanétaires, son évolution apparaît ici plus complexe.

Les rapports HCN/HNC et CN/HCN observés et modélisés sont listés dans la Table 6.5. On remarque que le rapport CN/HCN observé est plus faible pour le disque entourant l'étoile de Herbig MWC 480 (CN/HCN = 10.4) que celui entourant l'étoile T Tauri DM Tau (CN/HCN = 15.2) pour lequel le champ UV est pourtant ~ 20 fois plus faible (voir Table 6.3). Les différences peuvent s'expliquer par le fait que pour les fortes densités rencontrées dans les disques, la chimie de surface joue un rôle important. Dans MWC 480, plus chaud, la molécule CN est ainsi moins abondante (3 fois moins abondante que dans DM Tau selon les observations). En revanche, les différences observées entre les deux étoiles T Tauri ne sont a priori pas la conséquence d'une chimie de surface différente, la température du plan étant le même pour les deux disques (10 K). En revanche, entre 2 et 4 échelles de hauteur, LkCa 15 est plus froid que DM Tau (voir figure 6.12), HCN est par conséquent moins efficacement détruit et le rapport CN/HCN y est plus faible. En revanche, nos modèles prédisent un rapport CN/HCN maximal pour les disques à champ UV intermédiaire (figure 6.7) et une diminution du rapport pour les disques fortement irradiés tels que MWC 480, en opposition aux observations. De plus, si les rapports

HCN/HNC prédits par les modèles sont plutôt en bon accord avec les observations, le rapport CN/HCN est prédit trop faible. Cette sous-estimation du rapport est principalement due au fait que HCN est trop produit par nos modèles, ce qui est le cas de HNC et CN également. Le fait d'augmenter la température d'un facteur 2 (Modèle B) permet d'obtenir un bien meilleur accord aux observations pour la plupart des molécules (excepté CN dans DM Tau). La diffusion à la surface des grains "boostée" par l'augmentation de la température du grain est un processus efficace pour piéger CN sur les grains tandis que dans la phase gazeuse, une augmentation de la température induit une chimie beaucoup plus active pour HCN et HNC qui sont ainsi détruites plus efficacement.

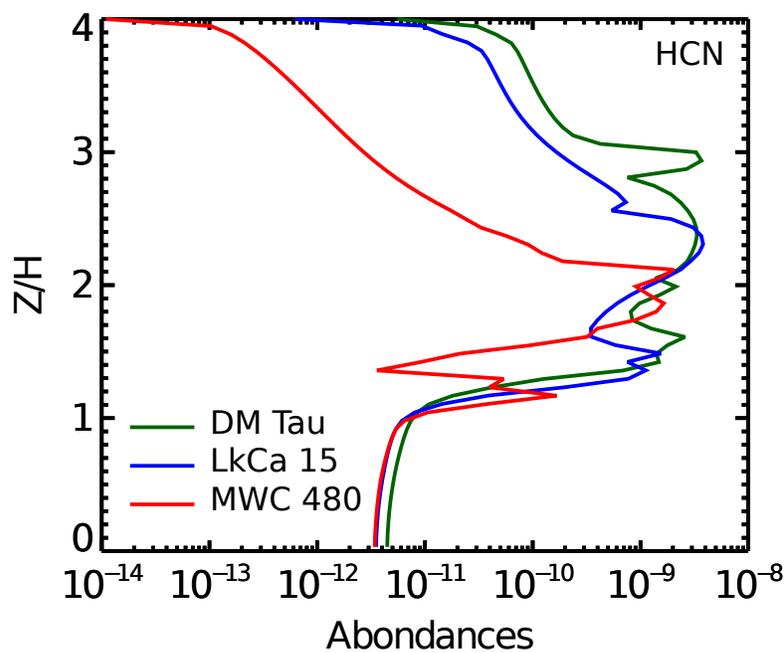


FIGURE 6.13 – Profils verticaux d'abondances de HCN dans les trois disques protoplanétaires : DM Tau, LkCa 15 et MWC 480.

MWC 480 est le disque pour lequel les abondances, observées et prédites, sont les plus faibles. Ceci est la conséquence de son champ UV beaucoup plus fort qui permet la photodissociation des molécules beaucoup plus profondément dans le disque (voir figure 6.13). La couche moléculaire est ainsi beaucoup moins étendue dans ce disque comparé aux deux disques T Tauri. Néanmoins, comme on peut le voir sur la figure 6.13, qui représente les profils d'abondances de HCN pour les trois disques, seul un flux UV très fort ($G_0 = 8500$ pour MWC 480) permet une destruction des molécules assez importante. Bien que le flux UV de LkCa 15 soit ~ 6 fois plus élevé que celui de DM Tau, les profils d'abondances sont assez similaires. Or des valeurs de G_0 de l'ordre de 8500 sont typiques des étoiles Herbig et ne sont pas si élevées dans le cas des étoiles T Tauri. Cependant, des grains plus gros peuvent également contribuer à une diminution de l'abondance des molécules. En effet, les gros grains sont peu couplés avec le gaz et peuvent sédimenter dans le plan permettant au champ UV de pénétrer plus profondément

dans le disque. Les modèles chimiques (Chapillon et al., 2012b) montrent d'ailleurs que le rapport CN/HCN augmente avec la taille des grains (voir figure 6.14).

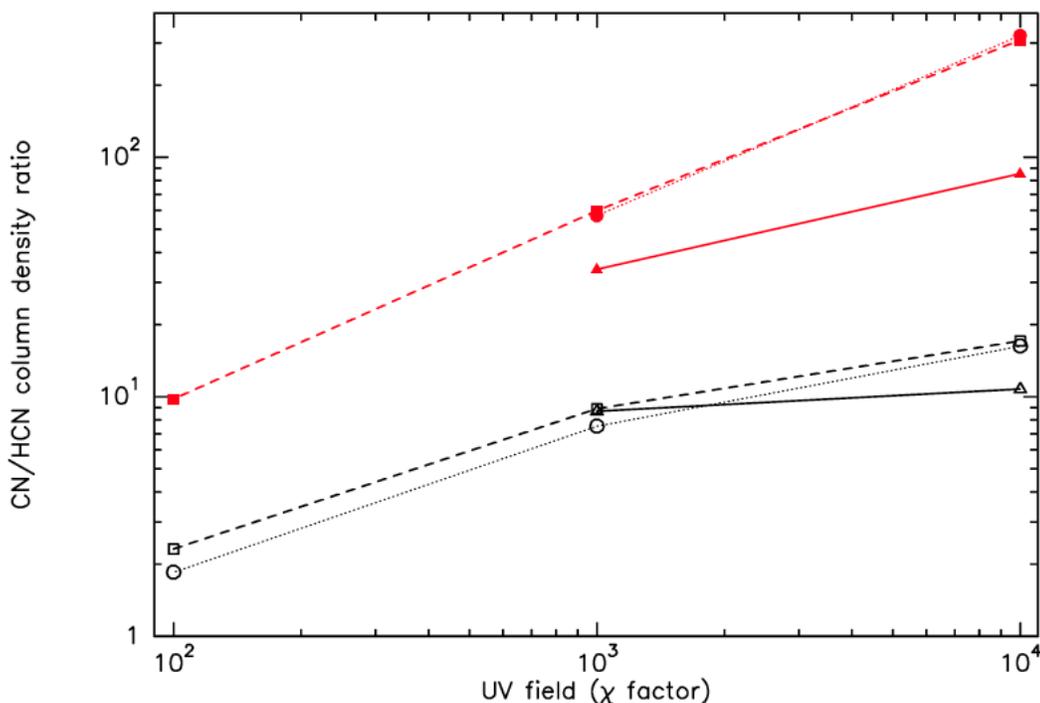


FIGURE 6.14 – Rapport des densités de colonne CN/HCN en fonction du champ UV à $r = 97$ UA (triangles), 304 UA (carrés), et 602 UA (cercles) pour un modèle avec des petits grains ($0.3 \mu\text{m}$ en noir) et avec des gros grains (0.1mm en rouge). Figure extraite de Chapillon et al. (2012b).

6.4 Conclusions

Les molécules azotées sont principalement sensibles à deux paramètres : le flux UV et la température. Ces deux paramètres sont étroitement liés, en effet le profil de température du disque détermine les profils de densité et d'extinction visuelle qui gouvernent la quantité d'UV pénétrant le disque. Si l'abondance de CN dans la phase gazeuse est principalement affectée par la diffusion à la surface des grains et par conséquent la température des grains de poussières, HCN et HNC ne diffuse pas et sont particulièrement affectées par la quantité d'hydrogène et de carbone (sous forme atomique et ionisée) présente dans la phase gazeuse. Ces deux molécules sont donc sensibles au champ UV interstellaire et de l'étoile centrale qui permet de photodissocier H_2 et CO et ioniser l'hydrogène et le carbone atomique. Les réactions clés pour la chimie des molécules azotées dans la phase gazeuse sont illustrées sur le schéma 6.15.

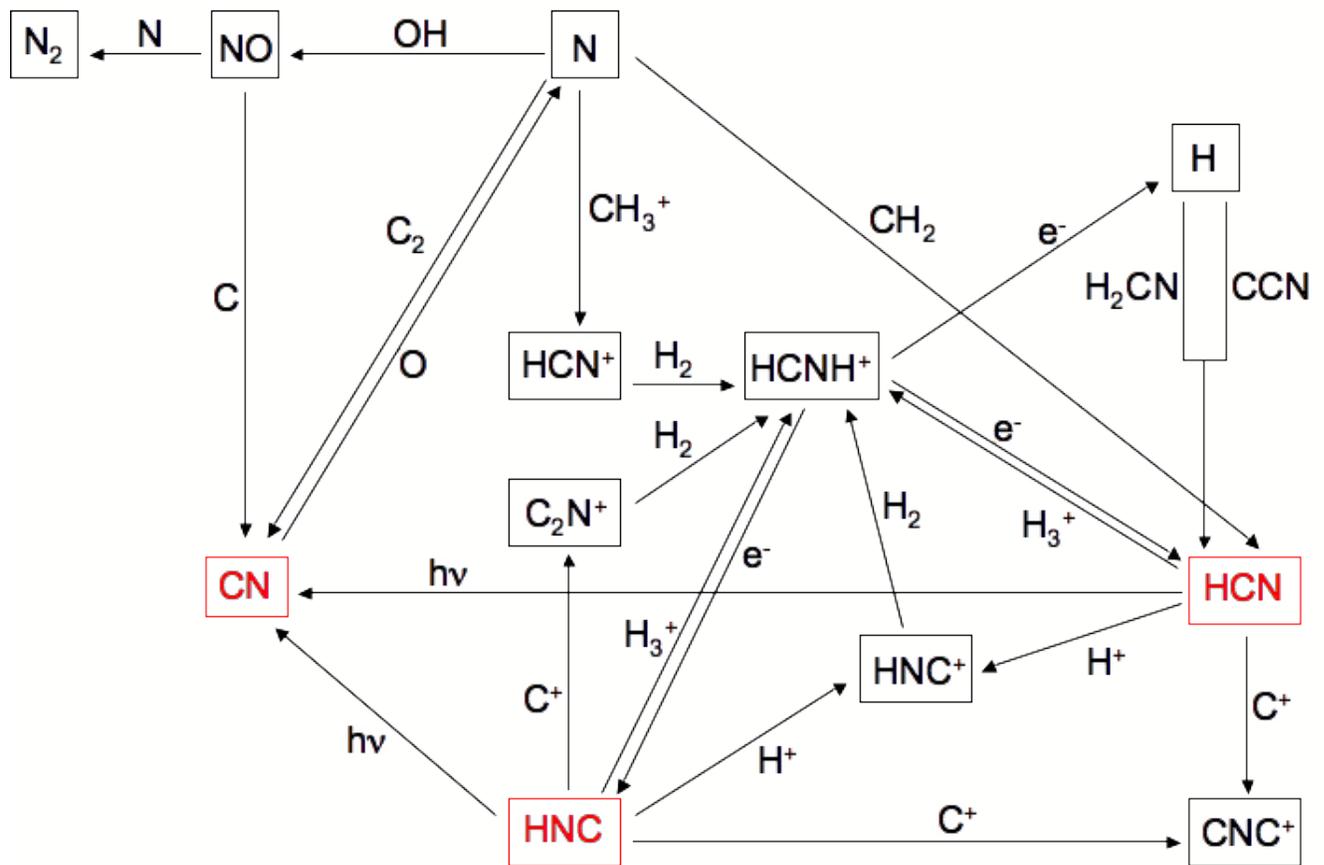


FIGURE 6.15 – Les principales réactions pour la chimie de CN, HCN et HNC en phase gazeuse dans les disques protoplanétaires. Adapté de *Pineau des Forets et al. (1990)*.

7

Conclusions

Sommaire

7.1 Outils d'investigation	104
La modélisation numérique	104
L'observation	104
7.2 Sujet d'investigation : la chimie de surface	104
7.2.1 Le nuage moléculaire.	105
7.2.2 Le disque protoplanétaire.	105
La chimie du carbone.	105
La chimie de l'azote.	106

Au cours de ma thèse, je me suis intéressée à l'étude de la chimie à la surface des grains de poussières et à son impact sur la chimie des nuages moléculaires et plus particulièrement des disques protoplanétaires. Pour comprendre le mécanisme de formation planétaire, il est important de connaître les conditions initiales qui règnent au sein des disques, berceaux des planètes. Déterminer comment évoluent les molécules en fonction des conditions physiques du milieu est donc essentiel. Pour cette étude, j'ai utilisé deux principaux outils : la modélisation numérique et l'observation.

7.1 Outils d'investigation

La modélisation numérique a été mon principal outil d'investigation. Le code de chimie gaz-grain Nautilus m'a ainsi permis d'étudier les principales réactions qui gouvernent l'évolution chimique des disques, que ce soient les réactions à la surface des grains ou les interactions entre les grains et les espèces de la phase gazeuse. Les modèles ont notamment mis en avant la relation étroite entre chimie et modèle physique du disque. L'évolution de la température, de la densité ou encore du taux d'extinction au sein du disque sont autant de paramètres primordiaux à prendre en compte pour la modélisation chimique. La modélisation de la structure du disque est donc importante pour caractériser les processus chimiques et physiques qui interviennent dans les disques et qui sont à l'origine des structures observées.

L'observation a été mon second outil d'investigation. Dans le cadre de ma thèse, j'exploite des observations dans le domaine millimétrique pour lequel les raies de rotation moléculaire peuvent être détectées. Ces observations nous fournissent des informations à comparer aux résultats prédits par les modèles chimiques dans le but d'en contraindre les paramètres. Pour déterminer les conditions physiques (température, densité, ionisation), l'observation de molécules "traceurs" est essentielle. Certaines molécules tracent ainsi les conditions d'ionisation comme HCO^+ tandis que d'autres, telles que HCN et HNC, vont tracer les conditions d'irradiation. Si les observations nous donnent accès aux abondances des molécules présentes dans la phase gazeuse, ces abondances sont extrêmement sensibles aux réactions qui ont lieu à la surface des grains.

7.2 Sujet d'investigation : la chimie de surface

Mon travail de thèse porte donc principalement sur la chimie à la surface des grains de poussières et son impact sur l'abondance des espèces de la phase gazeuse. J'ai dans un premier temps étudié les processus de diffusion de surface au sein du nuage moléculaire : condition initiale de la formation d'un disque, avant de m'intéresser aux disques. Dans cette partie, je résume les principaux résultats obtenus.

7.2.1 Le nuage moléculaire.

Le mécanisme de formation des molécules organiques complexes (COMs) est encore sujet à débat. Dans l'un des scénarios invoqués (suite à leur observation dans les coeurs chauds des régions de formation stellaire), les COMs se formeraient par recombinaison des radicaux sur les grains aux alentours de 40-50 K et seraient évaporées en phase gazeuse à plus haute température. Néanmoins, l'observation récente de ces molécules dans des coeurs prestellaires froids ravive la question de leur formation. Mon premier travail aborde ce problème et découle d'une question : une diffusion plus efficace à la surface des grains peut-elle expliquer les abondances des COMs observées dans les milieux froids ? Pour répondre à cette question, j'ai étudié deux mécanismes de diffusion : la diffusion par effet tunnel pour les espèces H, H₂ et O et la diffusion induite suite au chauffage stochastique du grain par les rayons cosmiques (CRID). La diffusion par effet tunnel s'avère être un processus efficace pour former des espèces complexes hydrogénées et oxygénées même à faible température. Quant au CRID, il permet d'augmenter la mobilité des radicaux à la surface des grains et leur recombinaison permet la formation de molécules complexes en importante quantité. Ce processus n'est cependant efficace que pour des faibles A_V (≤ 3), pour lesquels la photodissociation est importante.

Si ces deux mécanismes permettent une meilleure formation des COMs sur les grains, leurs abondances en phase gazeuse n'est pas suffisante pour reproduire les observations.

7.2.2 Le disque protoplanétaire.

Après l'étude des nuages moléculaires, je me suis intéressée aux disques protoplanétaires, sièges de la formation des planètes. Au sein de ces disques, les poussières ne sont pas seulement des catalyseurs pour la formation des molécules, elles contrôlent également la structure du disque. En absorbant et réémettant le champ UV, elles gouvernent la structure en température et l'efficacité de pénétration des photons UV et par conséquent l'extinction visuelle. J'ai donc étudié l'action des paramètres physiques du disque sur son évolution chimique. J'ai dans un premier temps étudié la chimie du carbone puis dans un second temps celle de l'azote.

La chimie du carbone. Des observations ont évalué un rapport CO/H₂ dans les disques plus faible que la valeur canonique de 10^{-4} mesurée dans le milieu interstellaire. Cette déplétion ne peut être expliquée par les seuls processus de photodissociation et de collage de CO sur les grains. Comment expliquer la déplétion de CO observée dans les disques protoplanétaires ? Pour répondre à cette question, j'ai modélisé la chimie du carbone en fonction de la température du disque. En effet, aux fortes densités rencontrées au sein des disques, la chimie de surface y est plus active. L'un des paramètres clés pour cette chimie de surface est la température du grain puisqu'elle contrôle le temps de diffusion des espèces et par conséquent l'efficacité des réactions de diffusion. Les résultats ont montré que CO et les molécules carbonées sont très sensibles à la structure en température et principalement celle des grains. En raison d'une diffusion active, CO se retrouve piégée sous d'autres formes carbonées à la surface du grain empêchant ainsi son retour en phase gazeuse. La forme sous laquelle CO se transforme à la surface du grain va dépendre de la température de ce dernier. Aux faibles températures (< 15

K dans le plan), CO se colle sur les grains et reste principalement immobile et ne désorbe pas. s-CO est donc le principal réservoir de carbone. Lorsque la température augmente, la diffusivité augmente également et s-CO réagit pour former s-CO₂. Entre 15 et 30 K, la température du grain est assez élevée pour former efficacement s-CO₂ mais est en revanche trop faible pour permettre sa désorption. s-CO₂ est donc le principal porteur de carbone pour des disques dont la température dans le plan est comprise entre 15 et 30 K. Au dessus de cette température, CO désorbe et devient la molécule carbonée la plus abondante. La forme sous laquelle se retrouve piégée CO dépend également de la densité et de l'âge du disque. En effet, la conversion de s-CO en s-CH₄ est plus longue que la conversion de s-CO en s-CO₂. De plus, le temps de conversion d'une espèce étant inversement proportionnel à la densité, s-CH₄ devient donc un réservoir de carbone entre ~ 10 et 17 K dans le plan pour les disques âgés (5 millions d'années) et plus denses (10^8 - 10^9 cm⁻³).

Cette étude a montré que la molécule CO est très sensible à la température des grains de poussières et que le processus de diffusion sur les surfaces, responsable de la conversion de CO en d'autres molécules dont l'énergie de désorption est plus grande, permet d'expliquer les faibles rapports CO/H₂ observés dans de nombreux disques protoplanétaires.

La chimie de l'azote. Les molécules azotées, telles que CN et HCN, ont été détectées dans de nombreux disques protoplanétaires. Ces molécules sont sensibles au milieu qui les entourent, notamment le champ UV et la température, et sont donc souvent utilisées comme traceurs de leur environnement. CN est ainsi fortement observée dans les disques au sein du nuage du Taureau alors que ceux issus de la région Rho Ophiuchi présentent un déficit en CN. Ces deux régions de formation stellaire étant intrinsèquement différentes, une étude de sensibilité de la molécule CN à certains paramètres du modèle est donc utile pour savoir quelles sont les causes de ces différences. Les modèles chimiques suggèrent que ces différences pourraient être dues d'une part à la présence de disque plus petits dans Rho Ophiuchi, une région plus dense et plus jeune que celle du Taureau, et d'autre part à des disques plus chauds. La température des grains joue en effet un rôle important pour la destruction de CN. Contrairement à CN, dont l'évolution est principalement gouvernée par la chimie de surface et la température des grains, les isomères HCN et HNC sont particulièrement sensibles au champ UV et à l'extinction dans le disque. La mesure observationnelle de la densité de colonne de ces molécules, couplée aux abondances prédites par les modèles, peut donc s'avérer très utile pour remonter aux conditions physiques des disques.

Ces résultats soulignent à quel point il est nécessaire de mieux contraindre les paramètres des objets observés. La très haute résolution spatiale et angulaire des observations ALMA devraient permettre de contraindre avec plus de précision les propriétés des disques et ainsi limiter l'espace des paramètres des modèles.

A

Publications

A.1 Grain-surface reactions in molecular clouds : the effect of cosmic rays and quantum tunnelling

Article publié en 2014 :
disponible dans la revue MNRAS
[Reboussin et al. \(2014\)](#)



Grain-surface reactions in molecular clouds: the effect of cosmic rays and quantum tunnelling

L. Reboussin,^{1,2}★ V. Wakelam,^{1,2} S. Guilloteau^{1,2} and F. Hersant^{1,2}

¹Univ. Bordeaux, LAB, UMR 5804, F-33270 Floirac, France

²CNRS, LAB, UMR 5804, F-33270 Floirac, France

Accepted 2014 March 6. Received 2014 February 21; in original form 2013 December 23

ABSTRACT

Grain-surface reactions play an essential role in interstellar chemistry, since dust grain catalyzes reactions at its surface allowing for the formation of molecules. We used a chemical model in which both gas-phase and grain-surface reactions occur and studied particularly the diffusion mechanisms on the surface of the grains. Surface reactions can occur via thermal hopping when species cross over a potential barrier or via quantum tunnelling when species cross through this barrier. We show that the thermal diffusion (hopping) can be much more efficient after a cosmic ray particle collides with a dust grain, heating it to a peak temperature of 70 K. We present here the results of numerical simulations after including the quantum tunnelling mechanism for species H, H₂, and O and considering the effect of cosmic ray particle collision on the surface reactions. As a consequence, the gas-phase and grain-surface abundances are affected and we show that more complex molecules can be formed in molecular clouds.

Key words: astrochemistry – diffusion – ISM: clouds – cosmic rays – ISM: molecules.

1 INTRODUCTION

Complex organic molecules (COMs) have been detected in warm star-forming regions such as OMC-1 (Blake et al. 1987) and Sgr B2 (Cummins, Linke & Thaddeus 1986; Nummelin et al. 2000; Belloche et al. 2009) and are usually associated with warm gas-phase and surface chemistries. COMs are expected to be formed at the surface of the grains during the warm-up phase of star formation when the temperature is about 40–50 K (Garrod & Herbst 2006). Under such conditions, heavy radicals can move at the surface of the grains and react without being evaporated. When the temperature gets above 80 K, the COMs are then evaporated in the gas-phase (Herbst & van Dishoeck 2009). Recently, acetaldehyde (CH₃CHO), dimethyl ether (CH₃OCH₃), methyl formate (HCOOCH₃), methanol (CH₃OH) and formaldehyde (H₂CO) have also been observed in the cold pre-stellar cores L1689B (Bacmann et al. 2012) and B1-b (Cernicharo et al. 2012). These detections have revived the question of the formation of these species and their presence in the gas-phase with abundances (relative to the total hydrogen) between 10⁻¹² to more than 10⁻⁹. Vasyunin & Herbst (2013) proposed that these complex species are formed at low temperature via gas-phase reactions between precursors, such as CH₃O, formed on the grain surface and released through reactive desorption.

At temperature typical of dark clouds or pre-stellar cores (10 K and below), the direct thermal evaporation is only efficient for H

and H₂. Similarly, the diffusion of the species at the surface of the grains, through thermal hopping, is only efficient for atomic hydrogen, so that hydrogen-rich saturated species, such as H₂O, CH₄, and NH₃, are the main constituents of the ices. Current chemical models take into account a number of processes to desorb back into the gas-phase species from the surface. The first one is the desorption induced by stochastic cosmic ray heating (Hasegawa & Herbst 1993). This process is however only efficient for simple molecules. Another process was introduced by Garrod, Wakelam & Herbst (2007) in which the chemical energy released by exothermic surface reactions contributes to desorb the products. Considering the lack of experimental data on it, the efficiency of the process is not well constrained. Shen et al. (2004) proposed that mantle explosions could be induced by exothermic radical recombination reactions. They concluded that the energy stored by those free radicals being larger than the energy deposits by cosmic rays, the chemical desorption is the dominant non-thermal desorption mechanism in dark clouds. Another desorption mechanism was considered by Willacy, Williams & Duley (1994) in which the energy released by H₂ formation at the surface of the grains leads to local heating and desorb species back into the gas-phase. However, only weakly bound species (with binding energies less than or equal to that of CO) can be evaporated during this process (Duley & Williams 1993). Recent experimental studies by Öberg, van Dishoeck & Linartz (2009a), Öberg et al. (2009b) showed the efficiency of the photodesorption processes. The importance of this mechanism has been underlined by Hollenbach et al. (2009) for the desorption of water at A_V lower than 10 while many observational studies of pre-stellar cores (Caselli et al. 2012; Mottram et al. 2013) invoke

* E-mail: laura.reboussin@obs.u-bordeaux1.fr

photodesorption by secondary cosmic ray photons to explain H₂O gas-phase abundances.

Whatever the desorption mechanism included in the models, the gas-phase abundances reflect the surface abundances. The formation of species at the surface of the grains depends on the diffusion rate of the precursors. This diffusion can be thermal when species migrate from one site to another one by thermal hopping or non-thermal when species cross through a potential barrier by quantum tunnelling. Diffusion at the surface of the grains could be faster if tunnelling effects are included or if the temperature of the grains is higher.

In this paper, we revisit the efficiency of tunnelling diffusion based on recent experimental studies of oxygen diffusion (Minissale et al. 2013). We also study the effect of cosmic ray impacts which cause a stochastic heating of the dust particles (Léger, Jura & Omont 1985) allowing for surface radicals to diffuse quickly and react to form more complex species. We report here the effect of these two mechanisms on molecular abundances and more specially those of COMs. Note that we do not distinguish between the different layers of ices in our model. As a consequence, we do not take into account diffusion through the bulk of the ice or any differentiation between the surface and the bulk, which can be an important aspect of surface chemistry as shown by Fayolle et al. (2011).

The paper is organized as follows. In Section 2, we describe the chemical gas–grain model Nautilus and more particularly the grain-surface reactions. Models predictions are presented in Section 3, while comparisons with observations in two dark clouds (TMC-1 (CP) and L134N) are shown in Section 4. We present our conclusions about this work in the last section.

2 THE CHEMICAL MODEL: NAUTILUS

We used the Nautilus chemical model described in Hasegawa, Herbst & Leung (1992) and Semenov et al. (2010) in which the abundance of each species is obtained by solving rate equations for gas-phase and grain-surface chemistries. The kinetic equations describing the formation and destruction of molecules are

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{l,m} k_{lm}^i n_l n_m - n_i \sum_{i \neq l} k_l n_l + k_i^{\text{des}} n_i^s - k_i^{\text{ads}} n_i, \quad (1)$$

$$\frac{dn_i^s}{dt} = \sum_{l,m} k_{lm}^{i,s} n_l n_m^s - n_i^s \sum_{i \neq l} k_l^s n_l^s - k_i^{\text{des}} n_i^s + k_i^{\text{ads}} n_i, \quad (2)$$

where n_i and n_i^s are, respectively, the gas-phase and surface concentrations of species i , k_{lm}^i and $k_{lm}^{i,s}$ are the gas-phase and surface reaction rates, and k_i^{des} and k_i^{ads} are the desorption and adsorption rates.

2.1 Gas-phase chemistry

The gas-phase bimolecular reaction rates are given by the modified Arrhenius equation as a function of temperature T (in Kelvin)

$$k(T) = \alpha \left(\frac{T}{300} \right)^\beta \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right), \quad (3)$$

where α is the value of the reaction rate, β characterizes the temperature dependence of the rate, and γ is the activation barrier (in Kelvin) for exothermic and endothermic reactions with activation energies.

Ionization and dissociation rates by (1) direct impact of cosmic ray particles, (2) secondary UV photons induced by cosmic ray/H₂

interactions, and (3) interstellar FUV photons are also calculated by the model according the following equations (Wakelam et al. 2012):

$$k_{\text{CR}} = A_i \zeta_{\text{CR}}, \quad (4)$$

$$k_{\text{FUV}} = A \exp(-CA_V) \chi, \quad (5)$$

where ζ_{CR} is the cosmic ray ionization rate (typically $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$), A_V is the visual extinction, χ the FUV flux, A_i and A are parameters which represent the rate coefficients and $\exp(-CA_V)$ takes into account the continuum attenuation from the dust. α , β , γ , A_i , A , and C are taken from networks (see Section 3).

2.2 Gas–grain interactions

Gas-phase species can be adsorbed on the grain surface. The rate of adsorption is given by

$$k_{\text{ads}}(i) = \sigma_d \langle v(i) \rangle n(i) n_d, \quad (6)$$

where σ_d is the cross-section of the grain, $\langle v(i) \rangle$ is the thermal velocity of the species i , $n(i)$ its density and n_d the number density of grains.

An adsorbed species can desorb back into the gas-phase. The desorption can be thermal and the corresponding rate is calculated as

$$k_{\text{des}}(i) = \nu_0(i) \exp\left(-\frac{E_D(i)}{T_g}\right), \quad (7)$$

where $E_D(i)$ is the desorption energy of the species i (in Kelvin), T_g is the grain temperature assumed to be 10 K, and $\nu_0(i)$ is the characteristic vibration frequency for the adsorbed species given by

$$\nu_0(i) = \sqrt{\frac{2n_s E_D(i)}{\pi^2 m(i)}}, \quad (8)$$

where n_s is the surface density of sites ($\sim 1.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) and $m(i)$ the mass of the adsorbed species i .

The gas and dust temperatures are assumed to be the same here, but the grain temperature can be warmer after a grain has been hit by cosmic rays. According to Léger et al. (1985), a cosmic ray particle (only iron nucleus are considered here) deposits 0.4 MeV on average into dust particles of radius 0.1 μm , impulsively heating them to a peak temperature of 70 K. The rate coefficient for non-thermal desorption is given by (Hasegawa & Herbst 1993):

$$k_{\text{CR}} = f(70 \text{ K}) k_{\text{des}}(i, 70 \text{ K}), \quad (9)$$

where $f(70 \text{ K})$ is the fraction of the time spent by grains at 70 K, defined as the ratio of the time-scale for cooling via desorption of volatiles ($\sim 10^{-5} \text{ s}$) to the time interval between successive heating to 70 K, which is estimated to be 10^6 yr for a cosmic ray ionization rate of $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ (Léger et al. 1985). Then, we have

$$f(70 \text{ K}) = \left(\frac{\zeta_{\text{CR}}}{1.3 \times 10^{-17} (\text{s}^{-1})} \right) 3.16 \times 10^{-19}. \quad (10)$$

In addition to the two desorption mechanisms (thermal desorption and cosmic ray desorption) previously mentioned, a non-thermal desorption mechanism via exothermic surface reactions is included in the model. The energy released for each exothermic reaction contributes to desorb the products into the gas-phase. Rice-Ramsperger-Kassel theory (Holbrook, Pilling & Robertson 1996) is used to obtain the probability of desorption given by

$$P = \left[1 - \frac{E_D}{E_{\text{reac}}} \right]^{3N-6}, \quad (11)$$

where E_D is the desorption energy of the product molecule, E_{react} is the energy of formation released, and N ($N \geq 2$) is the number of atoms in the product molecule.

To determine the fraction of reactions f for which desorption occurs, we model the competition between the rate of desorption and the rate of energy lost to the grain (Garrod et al. 2007):

$$f = \frac{vP}{v_s + vP} = \frac{cP}{1 + cP}, \quad (12)$$

where $c = v/v_s = 0.01$ is the ratio of the surface molecule bond-frequency to the frequency at which energy is lost (see Garrod et al. 2006 for discussion of the value).

2.3 Grain-surface reactions

We only consider Langmuir–Hinshelwood formation mechanism: a species is adsorbed on the surface of an interstellar grain before reacting with another adsorbed reactant. The dust grain is then acting as a third body in chemical reactions. Because of the low grain temperature expected in molecular clouds, we only consider physisorption (by van der Waals force). We assume a sticking probability of 1.0 for neutral atoms that hit the grain. The dust grains, made of amorphous olivine, are assumed to be spherical particles with a radius of $0.1 \mu\text{m}$, a density of 3 g cm^{-3} , and we use a dust-to-gas mass ratio of 0.01.

Photodissociation by cosmic-ray-induced UV field and UV photons rates on grain surfaces are calculated according to the same equations as seen in Section 2.1 for gas-phase chemistry.

The surface reaction rate R_{ij} between species i and j due to diffusion can be expressed as

$$R_{ij} = \kappa_{ij}(R_{\text{diff},i} + R_{\text{diff},j})N_i N_j n_d, \quad (13)$$

where N_i and N_j are, respectively, the mean number of molecules of species i and j on a grain, R_{diff} is the diffusion rate defined as the inverse of the diffusion time t_{diff} and κ_{ij} is the probability for the reaction to occur. For a reaction without activation energy, the probability for the reaction to happen is unity. For a reaction with activation energy E_a , the probability is given by

$$\kappa_{ij} = \alpha \exp\left(-\frac{E_a}{T_g}\right). \quad (14)$$

Two diffusion mechanisms are included in the model: diffusion by thermal hopping when species cross over a potential barrier and diffusion by quantum tunnelling when species cross through the potential barrier.

2.3.1 Diffusion by thermal hopping

In order to react, the adsorbed species requires mobility. The time-scale for an adsorbed species to migrate from one site to another one via thermal hopping is given by the equation

$$t_{\text{hop}} = v_0^{-1} \exp\left(\frac{E_b}{T_g}\right), \quad (15)$$

where v_0^{-1} is from equation (8) and E_b is the energy barrier (in kelvin) between two adjacent sites, which is a fraction of the binding energy E_D . Different values have been assigned to E_b in previous models: from $0.3 E_D$ (Watson 1976; Tielens & Allamandola 1987; Hasegawa et al. 1992) to $0.77 E_D$ (Ruffle & Herbst 2000). In our work, we adopt the estimate of Garrod & Herbst (2006) in which E_b is taken as half of the binding energy.

The diffusion time, which is the time for an adsorbed species to scan the entire surface of the grain, is given by

$$t_{\text{diff}} = N_s t_{\text{hop}}, \quad (16)$$

where $N_s = 10^6$ is the total number of surface sites on a $0.1 \mu\text{m}$ grain.

2.3.2 Diffusion by quantum tunnelling

The diffusion via thermal hopping requires sufficient energy to overcome the energy barrier between two adjacent sites. Barrier penetration by quantum tunnelling can then be more effective for some species, particularly the lighter ones. The time-scale t_q for species to migrate to an adjacent surface site through a rectangular barrier via quantum tunnelling (Hasegawa et al. 1992) is

$$t_q = v_0^{-1} \exp\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mE_b}\right), \quad (17)$$

where a is the barrier thickness estimated to be 1 \AA .

Diffusion by quantum tunnelling depends on the particle mass: tunnelling reaction involving a species with a lighter mass is faster than with a heavier mass. For $E_b = 225 \text{ K}$, the quantum diffusion time for an H atom over an entire grain obtained from equation (17) is $\sim 1.3 \times 10^{-4} \text{ s}$, whereas the thermal hopping diffusion time obtained from equation (15) is $\sim 1.7 \times 10^3 \text{ s}$. For H_2 , considering $E_b = 250 \text{ K}$, equations (17) and (15) give, respectively, the values $\sim 3.5 \times 10^{-3}$ and $\sim 2.8 \times 10^4 \text{ s}$.

Therefore, because of their low mass and high mobility, we considered surface migration by quantum tunnelling for light species H and H_2 . Quantum tunnelling for heavier species is only considered for O here, since Minissale et al. (2013) presented that, despite its high mass, quantum diffusion may be efficient for oxygen. Their experiments, performed on physisorbed O atoms via the study of O_3 formation, showed that oxygen atoms diffusion is governed by quantum tunnelling up to 20 K . Furthermore, Goumans & Andersson (2010) also studied theoretically the $\text{O} + \text{CO}$ reaction and showed that tunnelling strongly increases the reaction rates at low temperature ($10\text{--}20 \text{ K}$).

2.4 Cosmic-ray-induced diffusion (CRID) rate

Diffusion on dust particles strongly depends on surface temperature. A higher grain temperature leads to a higher mobility of species on the surface. When a cosmic ray particle collides with a dust grain, it deposits its energy, heating the grain to a peak temperature of 70 K (Léger et al. 1985). The dust grain temperature is then no longer 10 K but seven times warmer during the fraction of the time $f(70 \text{ K})$. It is the effect of this stochastic heating on the diffusion that we are studying in this paper. This heating increases the mobility of radicals on the surface of the grain and species will be able to quickly scan the surface since the time-scale for species to migrate to an adjacent site will be much faster

$$t_{\text{hop(CR)}} = v_0^{-1} \exp\left(\frac{E_b}{T_{\text{CR}}}\right), \quad (18)$$

where T_{CR} is the temporary peak temperature of the grain after heating.

Therefore, the recombination of radicals on the surface of the grain will be more efficient. The surface reaction rate R_{CR} between

Table 1. Elemental abundances.

Element	Abundance (/H)
H ₂	0.5
He	$9 \times 10^{-2}{}^a$
N	$6.2 \times 10^{-5}{}^b$
O	$1.4 \times 10^{-4}{}^c$
C ⁺	$1.7 \times 10^{-4}{}^b$
S ⁺	$8 \times 10^{-9}{}^d$
Si ⁺	$8 \times 10^{-9}{}^d$
Fe ⁺	$3 \times 10^{-9}{}^d$
Na ⁺	$2 \times 10^{-9}{}^d$
Mg ⁺	$7 \times 10^{-9}{}^d$
P ⁺	$2 \times 10^{-10}{}^d$
Cl ⁺	$1 \times 10^{-9}{}^d$

^aSee discussion in Wakelam & Herbst (2008).

^bJenkins (2009).

^cSee discussion in Hincelin et al. (2011).

^dLow metal-elemental abundances (Graedel, Langer & Frerking 1982).

species i and j due to the diffusivity by cosmic rays is then given by

$$R_{\text{CR}} = f(70\text{K})\kappa_{ij(70\text{K})}(R_{\text{diff},i} + R_{\text{diff},j})N_iN_jn_d, \quad (19)$$

where $R_{\text{diff}} = (N_S t_{\text{hop}(\text{CR})})^{-1}$ is the diffusion rate for a grain temperature of 70 K.

3 RESULTS OF THE NUMERICAL SIMULATIONS

The chemical network used for this work contains 8624 reactions: 6844 are gas-phase reactions and 1780 are grain-surface and gas-grain interactions. The model follows the chemistry of 703 species (atoms, radicals, ions, and molecules): 504 are gas-phase species and 199 are species on grains. The surface network is based on Garrod et al. (2007) whereas the gas-phase network is based on kida.uva.2011 and that we have updated based on Loison et al. (2012) and Wakelam et al. (2013). The full network will be available on the KIDA [KInetic Database for Astrochemistry, Wakelam et al. (2012)] website.¹

For the simulations, we consider a typical dense cloud as our nominal cloud: gas density of $n = n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2) = 2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$, temperature of 10 K, visual extinction of 10, cosmic ray ionization rate of $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ and the elemental abundances as listed in Table 1. We run different models as described in Table 2. In the following sections, we present the results obtained considering the new mechanisms. We first show the computed abundances after including in the model the quantum tunnelling diffusion for H, H₂, and O (see Section 2.3.2). Secondly, we study the effects of cosmic ray on the diffusion rates (see Section 2.4) and its sensitivity to the visual extinction, the dust temperature, and the cosmic ray ionization rate.

3.1 The effects of quantum tunnelling

We consider a first model which only takes into account the diffusion via thermal hopping (hereafter Model A) and a second model in

¹ <http://kida.obs.u-bordeaux1.fr/models>

Table 2. Models description.

Model A	Thermal hopping C/O = 1.2
Model B	Thermal hopping Quantum tunnelling C/O = 1.2
Model C	Thermal hopping CRID C/O = 1.2
Model D	Thermal hopping Quantum tunnelling CRID C/O = 1.2
Model E	Thermal hopping C/O = 0.7
Model F	Thermal hopping Quantum tunnelling C/O = 0.7
Model G	Thermal hopping Quantum tunnelling: second method C/O = 1.2

which diffusion via quantum tunnelling for H, H₂, and O has been added (hereafter Model B). In this last one, the effect described in Section 2.4 (CRID) is not included. The physical parameters are the ones of our nominal cloud. Fig. 1 shows the computed gas-phase abundances for a selection of complex molecules as a function of time (black lines for Model A and grey lines for Model B). These species were chosen because they present particular sensitivity to the studied process. We can see that the abundances of HCOOCH₃, CH₃OCH₃, and CH₃OH exhibit similar sensitivities to the studied effect. The quantum tunnelling first produces larger abundances for these three species before 3×10^5 yr. Their abundances are then smaller by a factor of ~ 5 until about 5×10^6 yr. After this time, the tunnelling prevents their abundances from dropping as it happens in Model A. As a consequence, these molecular abundances are larger by a factor of ~ 10 after 10^7 yr in Model B compared to Model A. The other molecules, HCOOH, HOOH, CH₃CHO, and H₂CO, are mostly increased, in particular HOOH. They present an increase by a factor of 3–10 after 10^7 yr. The corresponding species at the surface of the grains present similar sensitivities to the tunnelling effect. Considering H, H₂, and O quantum tunnelling diffusion enhances the formation of oxygen-bearing and hydrogen-bearing species, suggesting that quantum tunnelling may be able to improve formation of more complex species in cold regions.

Simpler species are also affected by the quantum tunnelling mechanism. Fig. 2 (top) represents the computed grain-surface abundances for a selection of such species as a function of time. Species abundances are heavily enhanced with Model B, up to a factor of ~ 1000 for s-H₂CS. Only s-HOOH sees its abundance decreasing after 10^5 yr due to the fact that the reaction s-H + s-HOOH \rightarrow s-O₂H + s-H₂ is much more effective (its reaction rate is 10^5 times higher) when we take into account the tunnel effect. H₂CS, HS, O₂H, and SO₂ gas-phase abundances are enhanced with Model B but much less than their analogous surface species. As we can see on Fig. 2 (bottom), CO abundance is affected as well. The diffusion reaction between s-O and s-C being 1000 times more efficient with Model B, its abundance increases like that of s-CO until 6×10^6 yr. After this time, s-CO abundance decreases because of

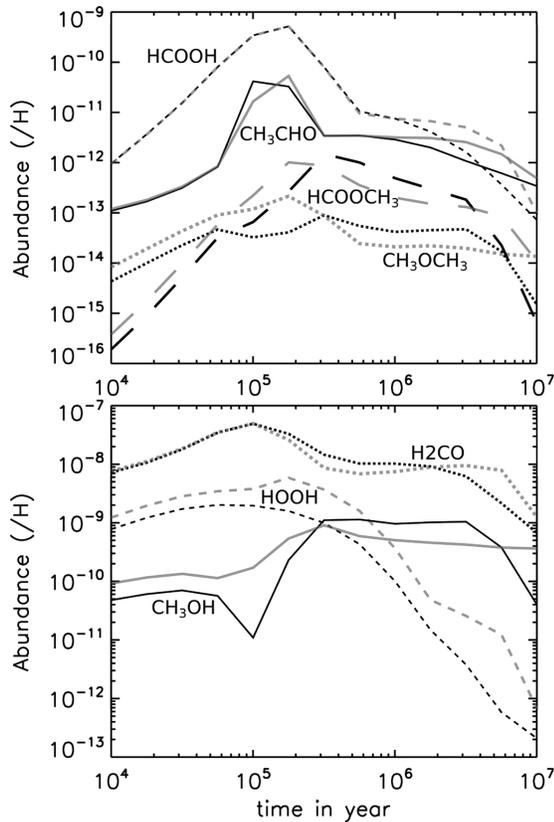


Figure 1. Gas-phase abundances of a selection of species relative to the total hydrogen as a function of time. Black lines represent the results obtained with Model A (without diffusion by tunnelling) and grey lines those obtained with Model B (including diffusion by tunnelling for species H, H₂, and O).

the fact that s-CO and s-H recombine efficiently to form HCO and s-HCO. Most of the reactions with s-H, s-H₂, and s-O are much more effective with Model B (with a reaction rate 10–10⁵ times higher) which affects both grain-surface and gas-phase abundances.

3.1.1 Sensitivity to the visual extinction, the C/O elemental ratio, and the dust temperature

To see the effect of the cloud visual extinction on the importance of quantum tunnelling, we run our models A and B with visual extinctions between 2 and 5. Our results show that the importance of tunnelling versus thermal hopping does not depend much on the visual extinction. The effect of photodissociation process as a function of the visual extinction is much more important than the quantum tunnelling mechanism itself, meaning that the formation of species enhanced by tunnelling effect does not prevent for the decrease in complex molecular abundances at low A_V .

In the simulations presented up to now, we have used a C/O elemental ratio of 1.2. Since this parameter is not well known, we also run our models with a higher elemental abundance for the oxygen (2.4×10^{-4} (H)). With this ratio of 0.7, our general conclusions of the paper are not changed. In both cases (smaller A_V or C/O), the factor of difference between abundances computed with or without diffusion by tunnelling effect is almost the same whatever the model parameters.

We also studied the effect of dust temperature on the importance of quantum tunnelling mechanism versus thermal hopping. In that

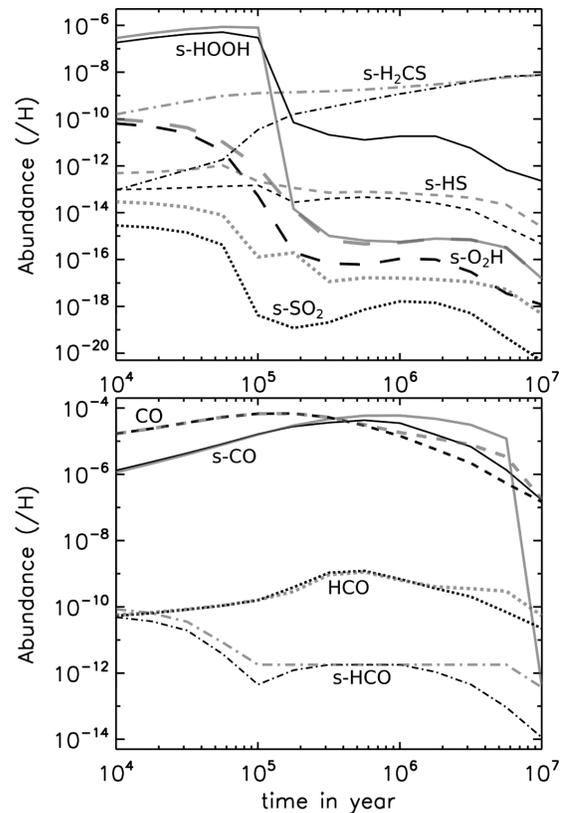


Figure 2. Species abundances as a function of time (s – refers for surface species). Results obtained with Model A are shown in black lines while those obtained with Model B are shown in grey lines.

case, there is a direct effect of this parameter since the rate of the classical diffusion increases with the temperature (see equation 15). Fig. 3 shows the computed abundances of a selection of species for different grain temperatures. We can see that tunnel effect is much more important when the dust temperature is lower. H and O abundances decrease more when the dust temperature is lower, whereas those of more complex species increase more strongly. The lower the temperature, the more diffusion via quantum tunnelling predominates over diffusion via thermal hopping. At lower temperature, quantum tunnelling will have a very strong effect for the formation of complex species.

3.1.2 The tunnel effect: an alternative method

The diffusion time by quantum tunnelling being sensitive to small uncertainties, especially the barrier thickness a , which is poorly constrained, quantum mechanical theoretical studies have been made by Hollenbach & Salpeter (1970) using delocalized wavefunctions. They showed that the time-scale to migrate to an adjacent potential well by quantum tunnelling is given by the Heisenberg uncertainty principle

$$t_{q,2} = \frac{4\hbar}{\Delta E_b}, \quad (20)$$

where ΔE_b is the gap between the energy bands corresponding to the fundamental and first excited state (Ricca, Pisani & Garrone 1969). Values of ΔE_b found in the literature are listed in Table 3.

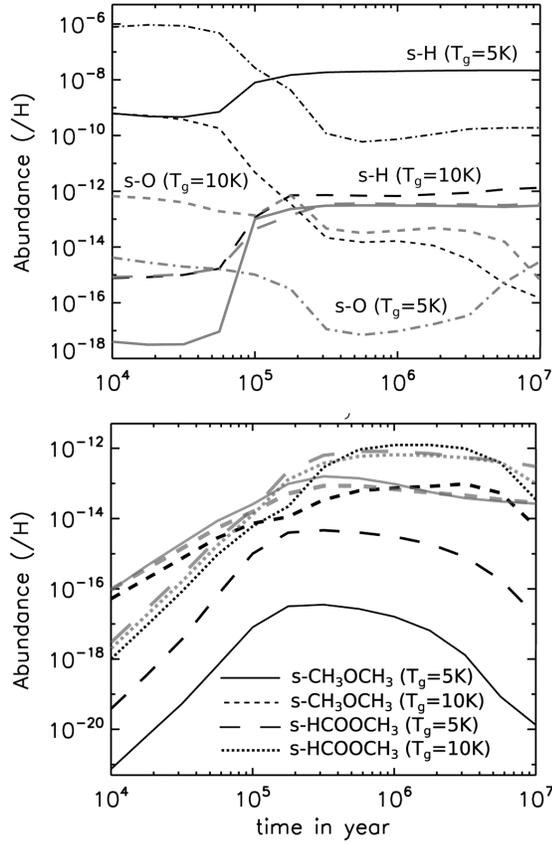


Figure 3. Grain-surface abundances as a function of time for two different grain temperatures (5 and 10 K). Results obtained with Model A are shown in black lines while those obtained with Model B are shown in grey lines.

Table 3. Bandwidths and diffusion times for surface states of adsorbed atoms.

Atom/surface	ΔE_b (K)	$N_S t_{q,2}$ (s)	$N_S t_q$ (s)
H/H ₂ O	30	10^{-6}	1.3×10^{-4}
H ₂ /H ₂ O	7	4.4×10^{-6}	3.5×10^{-3}
O/H ₂ O	7.5×10^{-4}	4.1×10^{-2}	10^8

Notes. ΔE_b from Watson (1976).

Diffusion time is much faster by using the equation (20), it is increased by a factor 100 and 1000 for H and H₂, respectively, and even by a factor of 10^{10} for O compared to the one obtained with equation (17). The consequences on the abundances concern mostly the O-bearing and H-bearing species. As we can see in Fig. 4, the oxygen is much more consumed with this alternative method for the calculation of the diffusion time, since its abundance decreases by a factor of $\sim 10^6$ after 10^7 yr. As a consequence, abundances of O₂H, HOOH, O₃, HNCO, HC₂O, s-HC₂O, s-CCO, s-CO₂, s-HNCO, s-O₂H, s-O₃, s-OCN, and s-SO₂ are increased by a factor of ~ 10 . However, more complex species are not affected. This formalism for the time-scale of diffusion on the surface is much more efficient than the one presented in Section 2.3.2. This method however strongly depends on experimental support for the value of ΔE_b and no new experiment has been conducted since the 1970s. In addition, there are inconsistencies in the literature between Watson (1976) and Hollenbach & Salpeter (1970). Considering the possible

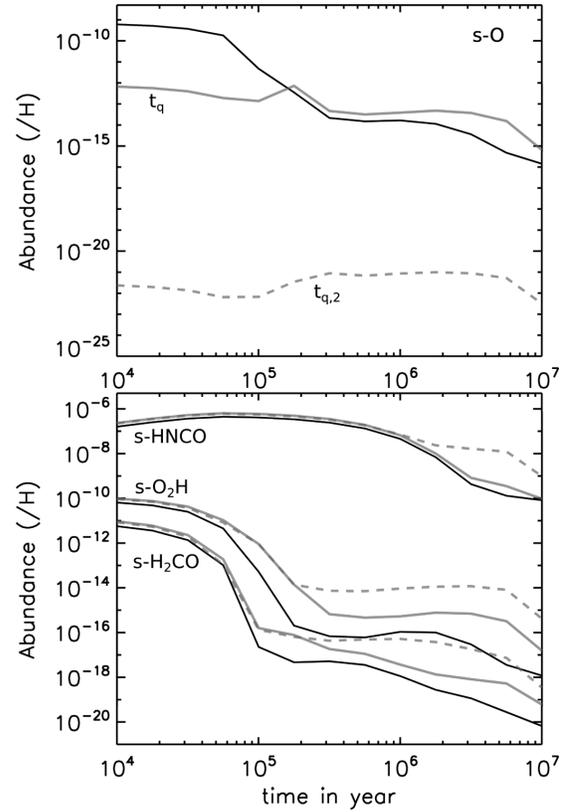


Figure 4. Abundances of some species as a function of time using the two different methods for the calculation of the diffusion time by quantum tunnelling. Solid black lines represent the results obtained with Model A (without diffusion by tunnelling), solid grey lines those obtained with Model B (diffusion by tunnelling using equation 17) and dashed grey lines those obtained with Model G (diffusion by tunnelling using the equation 20).

effect of this mechanism, new experimental studies could improve strongly our view of the interstellar chemical modelling.

3.2 The effects of CRID

In order to study the effect of cosmic ray impact on surface species diffusion, we considered two models. In the first one, we consider that the species diffuse and react at 10 K only (Model A previously described) whereas in the second model, we add the diffusion of species due to stochastic cosmic ray heating as described in Section 2.4 (hereafter Model C). In both cases, we have not included any tunnelling effects for diffusion in the models. We first run the two models for the physical parameters of our nominal cloud. For these conditions, we found no effect of the CRID.

3.2.1 Sensitivity to visual extinction

We then run our models A and C for different visual extinctions (2, 3, 4, and 10) and found that the efficiency of CRID depends strongly on the visual extinction. It appears, as shown in Fig. 5 for three representative examples, that this mechanism has a stronger impact on the molecular abundances when the visual extinction is equal or below 3. Considering Model A, complex species abundances (in the gas-phase and at the surface of the grains) are decreased when the visual extinction is smaller since they are photodissociated by

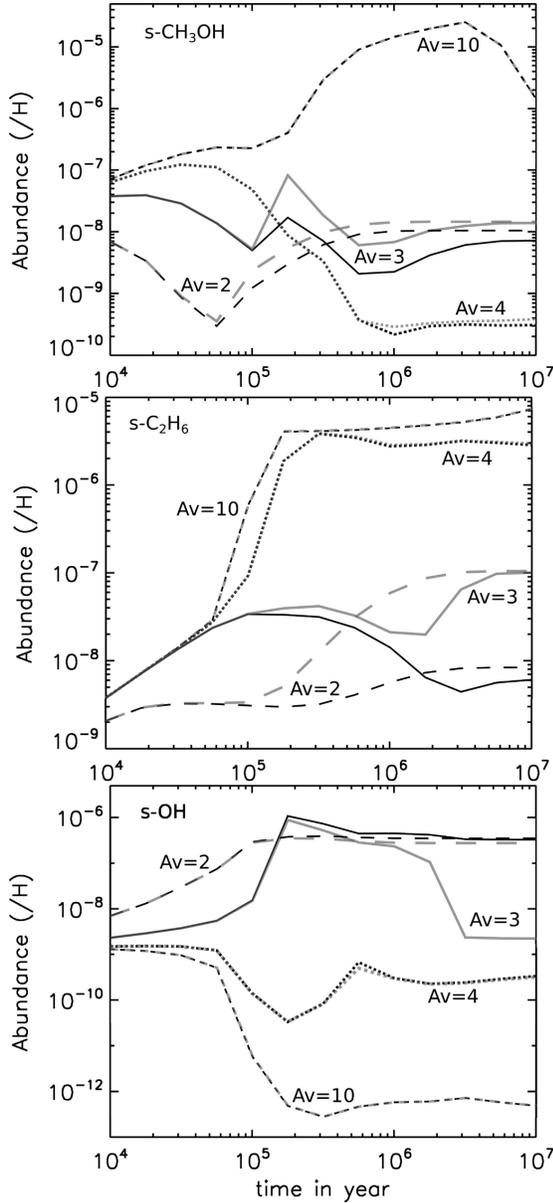


Figure 5. Surface species abundances of a selection of molecules as a function of time computed for different visual extinctions. The results obtained with Model A are represented by black lines and grey lines represent those obtained with Model C. For $A_V = 10$, the curves are superimposed.

UV photons in the gas and on the grains whereas abundances of small radicals such as $s\text{-OH}$ are increased. With CRID in Model C, the radicals at the surface of the grains are much more mobile and react to form complex molecules. In that case, even at low A_V , complex molecules such as $s\text{-CH}_3\text{CHO}$, $s\text{-C}_2\text{H}_n$, $s\text{-CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, $s\text{-CH}_3\text{OCH}_3$, $s\text{-CH}_3\text{COCH}_3$, $s\text{-CH}_2\text{OH}$, and $s\text{-HCOOCH}_3$ can be formed on the surface faster than they are photodissociated. A visual extinction of 3 seems to be the value for which the mechanism is the most efficient. Above this value, the amount of radicals at the surface of the grains produced by photodissociation (by cosmic-ray-induced UV photons) is not large enough and below this value, it is so strong that radicals do not have enough time to recombine sufficiently on the surface of the grain.

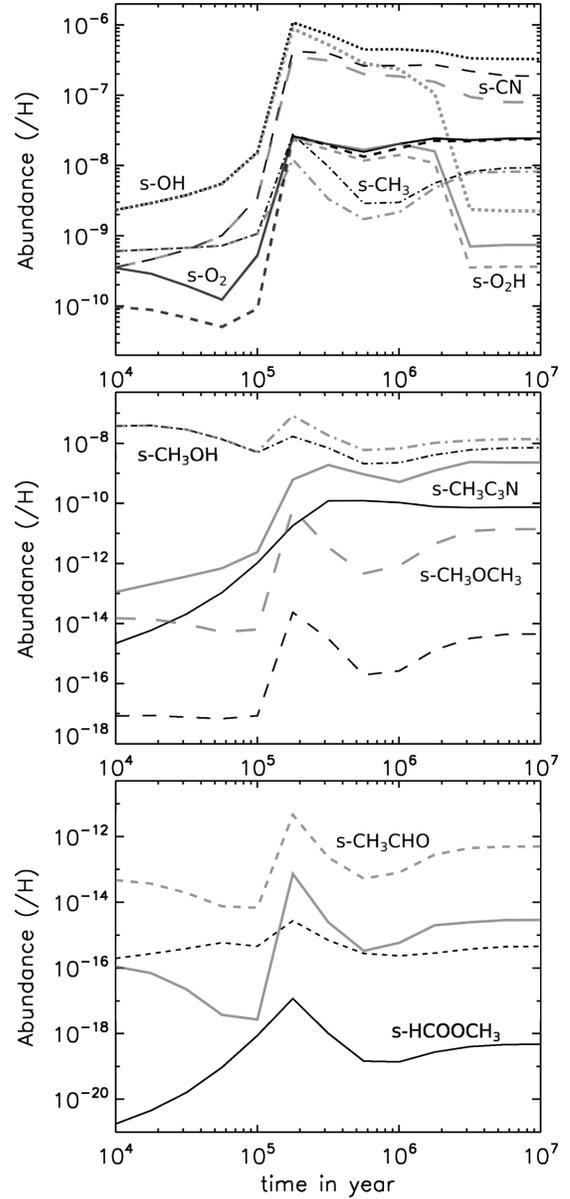


Figure 6. Grain-surface abundances of simple (top) and complex molecules (bottom) as a function of time for $A_V = 3$. Black lines are the results obtained with Model A and grey lines the results obtained with Model C.

Fig. 6 shows the computed abundances of both simple and complex molecules as a function of time for Model A and Model C for an A_V of 3. Complex surface species abundances are enhanced in Model C by a factor between ~ 2 for $s\text{-CH}_3\text{OH}$ and more than a factor 1000 for $s\text{-HCOOCH}_3$ at the final time, whereas abundances of simpler molecules such as $s\text{-OH}$, $s\text{-CN}$, $s\text{-O}_2$, $s\text{-O}_2\text{H}$, and $s\text{-CH}_3$ are lowered by orders of magnitude. At higher temperature, the time for an adsorbed species to scan the entire grain being shorter, the recombination of radicals is more efficient allowing us to convert simpler species into more complex molecules. Radicals' abundance is then decreased while that of heavier species is increased. Gas-phase abundances are also affected as well with many complex species abundances, such as CH_3OH , CH_3CHO , HCOOCH_3 , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$,

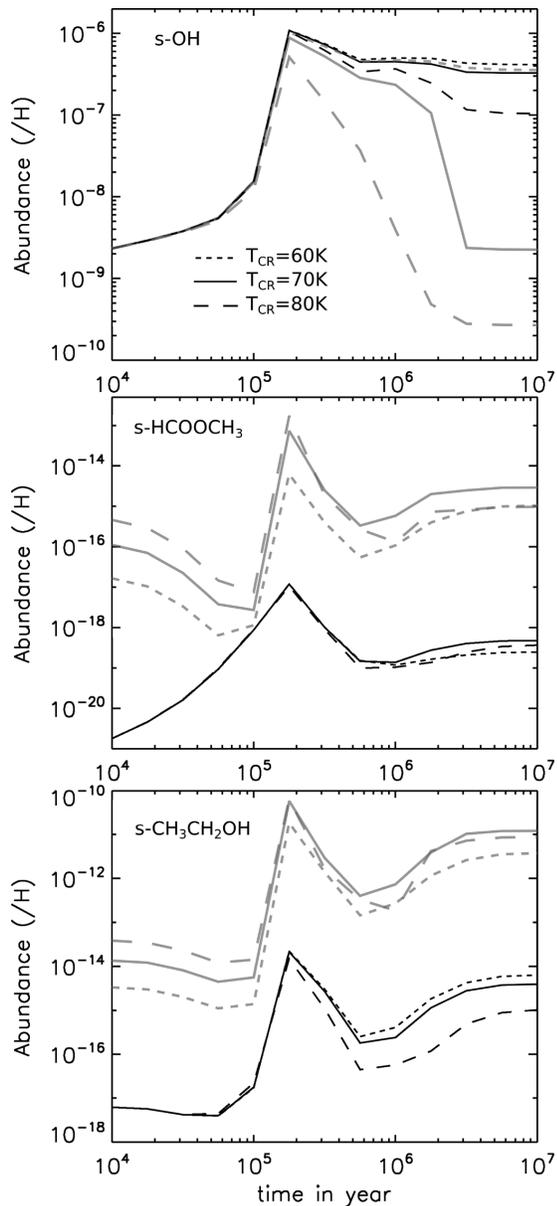


Figure 7. Surface species abundances as a function of time computed for different dust peak temperatures for $A_V = 3$. Results obtained with Model A are shown in black lines while those obtained with Model C are shown in grey lines.

CH_3OCH_3 , CH_2OH , and CH_3COCH_3 , which are enhanced by a factor between ~ 1.5 and ~ 1000 .

3.2.2 Sensitivity to dust peak temperature

We study the effect of dust grain peak temperature induced by cosmic ray heating T_{CR} (see equation 18) on the abundances. Fig. 7 shows the computed surface abundances for three molecules as a function of time for three different values of T_{CR} : 60, 70 (the nominal value), and 80 K. Note that the value of T_{CR} determines the efficiency of the CRID process but also the cosmic-ray-induced desorption (see Section 2.2). This is why we find small differences in Model A as well. When the temperature is lower (60 K), the

mechanism is less efficient: radicals mobility being lower, they scan the surface more slowly and their recombination into more complex species is less efficient. On the contrary, surface radicals' abundance decreases much more when the temperature is higher (80 K) for two main reasons. First, the recombination efficiency is better due to a higher mobility, and secondly, the dust temperature being warmer, species desorb back into the gas-phase more efficiently. At 80 K, complex species abundance is increased between 10^4 and 10^5 yr due to the higher mobility of simpler species. However, after 10^5 yr, abundance at $T_{\text{CR}} = 80$ K obtained with Model C is lower than at 70 K. Indeed, both radicals and complex species desorb back into the gas-phase, the desorption coefficient rate being 10–10 000 times higher at 80 K.

3.2.3 Sensitivity to cosmic ray ionization rate

The CRID mechanism is directly proportional to the cosmic ray ionization rate ζ_{CR} . Fig. 8 shows computed abundances as a function of time for three different cosmic ray ionization rates. The solid lines represent the nominal value of the rate and the dashed lines a rate four times higher ($5.2 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$) and 10 times lower ($1.3 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$) than this value. Considering the Model A only, i.e. without CRID, the effect of cosmic rays is not the same for all molecules. For many complex molecules at the surface of the grains, the time at which the abundance peaks is shifted towards longer times when ζ_{CR} is decreased. The global s-HCOOCH_3 is increased by higher ζ_{CR} whereas the abundance of $\text{s-CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ is decreased. Using the lower ζ_{CR} , the mechanism of cosmic rays impact is less important than with the nominal value, due to the fact that time spent by grains at 70 K is much less important. Therefore, radicals do not have enough time to recombine in more complex species. With a rate four times higher, the efficiency is less important: the ionization rate is so strong that both simple and complex species desorb back into the gas-phase.

The CRID mechanism is much more sensitive to the visual extinction, for an A_V too large (above 5), the dust temperature and the cosmic ray ionization rate have no impact on the abundances.

3.3 Combined effects of both mechanisms

We now study the effect of both mechanisms by including in the model the H, H_2 , and O diffusion by tunnelling effect and the CRID mechanism (hereafter Model D). Fig. 9 shows the abundances of some molecules as a function of time computed for models B, C, and D (see Table 2). As seen before, when the value of the visual extinction is 10, CRID is inefficient and abundances are only sensitive to the quantum tunnelling mechanism (Model B and Model D curves overlap). On the contrary, for a visual extinction of 3, the abundances of Model C and Model D are quite the same, suggesting that CRID dominates the diffusion of the species on the surfaces. The results which are shown in Fig. 9 have been obtained for a dust temperature of 10 K. At lower temperature, it is the quantum tunnelling mechanism which dominates (see Section 3.1.1).

4 COMPARISON WITH OBSERVATIONS

We have compared the model predictions with some observations in two dark clouds: TMC-1 (CP: cyanopolynes peak) for which we compared 51 observed species and L134N for which we compared 33 species. The observed abundances are listed in Agúndez & Wakelam (2013; see table 4 of their paper). Species for which only

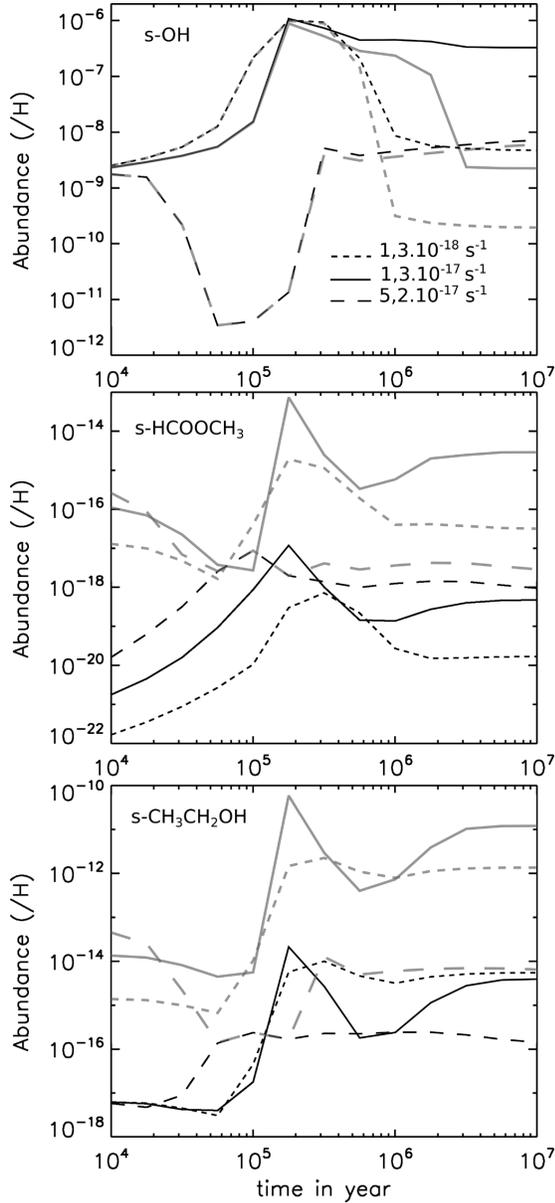


Figure 8. Surface species abundances as a function of time computed for different cosmic ray ionization rates for $A_V = 3$. Results obtained with Model A are shown in black lines while those obtained with Model C are shown in grey lines.

upper limits are available have been removed from this list as some of the species which are not included in our model Nautilus. To compare the model results with observations, we used the method described in Wakelam, Herbst & Selsis (2006) in which a distance of disagreement is computed for each species i . A distance between the models and the observations is defined as

$$D(t) = \frac{1}{N_{\text{obs}}} \sum_i |\log[X_i(t)] - \log[X_{\text{obs},i}]|, \quad (21)$$

where X_i is the abundance of species i computed by the model at the time t , $X_{\text{obs},i}$ the observed abundance of species i , and N_{obs} is the number of species which have been observed. A smaller value of D corresponds to a better agreement.

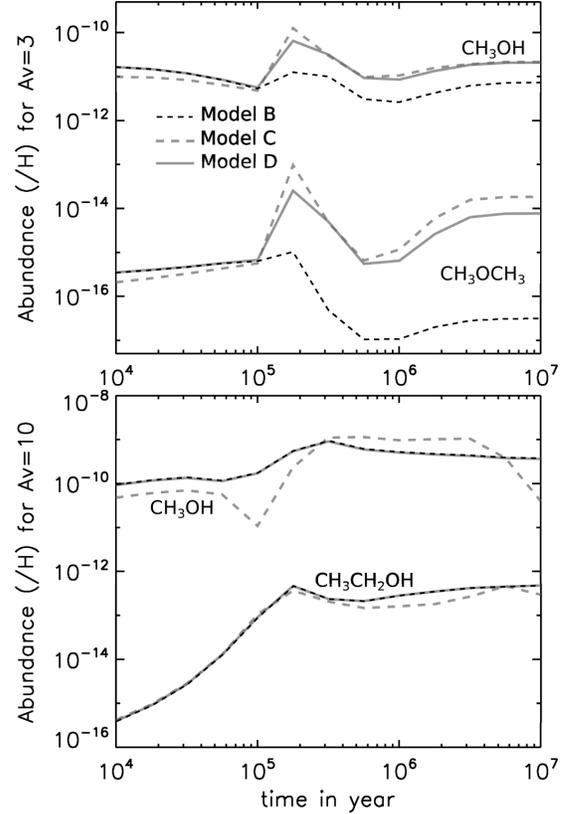


Figure 9. Comparison of the three models for $A_V = 3$ (top) and $A_V = 10$ (bottom). For $A_V = 10$, the curves of models B and D are superimposed.

Fig. 10 presents the distance of disagreement obtained for four different models : Model A, Model B, Model E (which is the same as Model A but with a lower C/O ratio: 0.7 instead of 1.2) and Model F (which is the same as Model B but with the C/O ratio equal to 0.7). The four models have been computed for a visual extinction of 10. We do not consider Model C here since the effect of cosmic rays on the diffusion rate is quite inefficient for such value of the visual extinction. We also do not consider Model D since Model B and Model D are equivalent for $A_V = 10$ (see Section 3.3). The physical parameters are the same as our nominal cloud (see Section 3).

The C/O ratio does not affect so much the agreement in the case of L134N. However, in TMC-1 (CP), a lower elemental O abundance matches best the observations between 2×10^5 and 1.5×10^6 yr due to the higher abundance of cyanopolyynes during this range of time. In all cases, considering the tunnel effect for H, H_2 , and O does not change significantly the agreement between the models and the observations. Those similarities can be explained by the fact that most species that present significant differences when diffusion by tunnelling is included are not observed. The best agreement is obtained at 6×10^5 yr for both clouds, corresponding to a time when grain-surface chemistry plays an important role.

In Table 4, we show the abundances predicted in the gas-phase and at the surface of the grains by models A and B at 10^5 yr and 6×10^5 yr for the species observed in TMC-1CP and L134N that present strong sensitivity to the diffusion by tunnelling process. This represents only three species (HNCO, CH_2CHCN , and CH_3OH) that are increased when diffusion by tunnelling of O is considered (see Table A1, left-hand column). At the best age previously determined

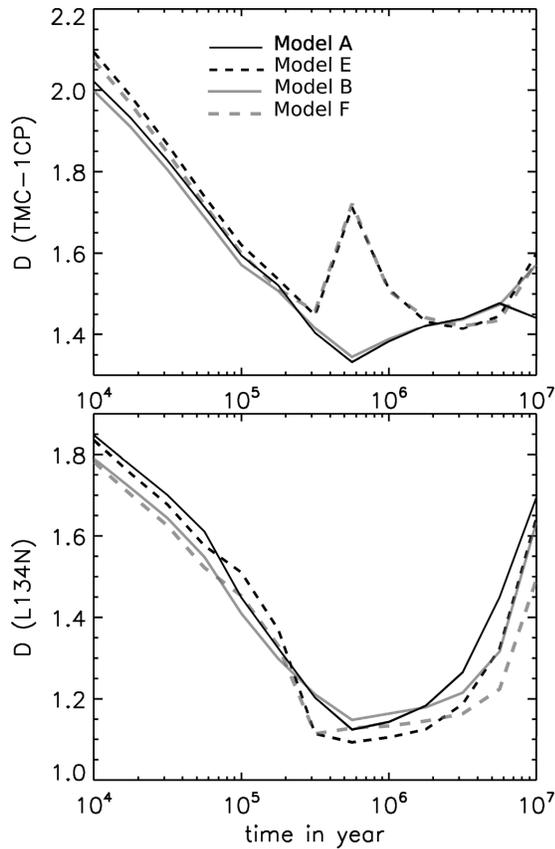


Figure 10. Distance of disagreement between models predictions and observed abundances in two dark clouds: TMC-1 (CP) (top) and L134N (bottom).

(6×10^5 yr), the gas-phase abundances obtained with Model B are increased by a factor ~ 1.6 and 15 for, respectively, CH_2CHCN and HNCO . However, CH_3OH gas-phase abundance is decreased by a factor ~ 1.8 when the tunnel effect is considered at 6×10^5 yr. The surface species abundances are also increased with Model B at 6×10^5 yr for CH_2CHCN and HNCO with both a factor ~ 1.4 . CH_3OH grain-surface abundance is decreased by a factor ~ 1.5 . The predicted gas-phase abundances reflect the surface ones. However, those surface abundances are much larger (100–1000 times larger) than the gas-phase observed ones for CH_3OH and HNCO , suggesting that other desorption mechanisms should be taken into account

in order to remove those surface species back into the gas-phase and increase their gas-phase abundances.

5 CONCLUSIONS

In this paper, we have studied the diffusion of species on the grain surfaces in molecular clouds using our gas–grain model Nautilus. In particular, we revisited the efficiency of diffusion by tunnelling effect of H, H_2 , and O based on recent experiments by Minissale et al. (2013). We also introduced a new mechanism to take into account the ‘boost’ of surface species diffusion induced by the stochastic heating by cosmic ray particles. We call this new mechanism CRID. Species most affected by those two mechanisms are listed in Table A1.

The diffusion by tunnel effect allows surface radicals to move faster at lower temperature which increased the abundances of simple and complex species (in the gas-phase and at the surface of the grains), such as HOOH , CH_3OCH_3 , for typical dense cloud physical parameters and ages. This effect becomes even more important for temperatures below 10 K. The newly introduced CRID mechanism increases the mobility of radicals at the surface of the grains, which can recombine with each other and form more complex molecules. However, we notice that this mechanism is only efficient when the visual extinction is smaller or equal to 3 for $0.1 \mu\text{m}$ grains. For such values of visual extinction, we show that complex species abundances can be increased significantly while those of simpler molecules are decreased. This is because the photodissociation of molecules at the surface of the grains produces more radicals that can then react and their formation rate is then larger than their destruction one.

The general agreement of our chemical model with molecular abundances observed in the two clouds TMC-1CP and L134N is not significantly changed by considering the diffusion by tunnelling of H, H_2 , and O because most of the observed species are not affected by this process. Only three are significantly sensitive: HNCO , CH_2CHCN , and CH_3OH . For those species, the predicted gas-phase abundances are larger and come closer to the observations. Furthermore, on the surface, their abundances are much larger than the gas-phase observed ones for CH_3OH and HNCO . For the complex species observed in pre-stellar cores by Bacmann et al. (2012) and Cernicharo et al. (2012), the diffusion of atomic oxygen by tunnelling is not important enough to reproduce the large gas-phase abundances for HCOOCH_3 , CH_3OCH_3 , CH_2CO , and CH_3O . Even on the surfaces, their abundances stay at a level lower than the gas-phase observed ones.

Table 4. Predicted and observed abundances of some species detected in TMC-1CP and L134N (s refers for surface species).

Molecules	Abundances (/H)				Observations	
	Model A 10^5 yr	6×10^5 yr	Model B 10^5 yr	6×10^5 yr	TMC-1CP ^a	L134N ^a
HNCO	8.8×10^{-10} 4.1×10^{-7} (s)	1.1×10^{-12} 1.3×10^{-7} (s)	1.3×10^{-9} 5.9×10^{-7} (s)	1.6×10^{-11} 1.9×10^{-7} (s)	4×10^{-10}	2.5×10^{-10}
CH_2CHCN	1.1×10^{-11} 4.3×10^{-13} (s)	1.6×10^{-10} 2.2×10^{-10} (s)	9.2×10^{-12} 4×10^{-13} (s)	2.6×10^{-10} 2.8×10^{-10} (s)	10^{-9}	–
CH_3OH	1.1×10^{-11} 2.3×10^{-7} (s)	1.1×10^{-9} 9.1×10^{-6} (s)	1.7×10^{-10} 5.6×10^{-7} (s)	5.9×10^{-10} 6.1×10^{-6} (s)	3.2×10^{-9}	5.1×10^{-9}

^aAgúndez & Wakelam (2013).

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors thank the French CNRS/INSU programme PCMI for their partial support of this work. VW and FH research are funded by the ERC Starting Grant (3DICE, grant agreement 336474). The authors also thank the referee for suggestions which helped to improve this paper.

REFERENCES

- Agundez M., Wakelam V., 2013, *Chem. Rev.*, 113, 8710
 Bacmann A., Taquet V., Faure A., Kahane C., Ceccarelli C., 2012, *A&A*, 541, L12
 Belloche A., Garrod R. T., Müller H. S. P., Menten K. M., Comito C., Schilke P., 2009, *A&A*, 499, 215
 Blake G. A., Sutton E. C., Masson C. R., Phillips T. G., 1987, *ApJ*, 315, 621
 Caselli P. et al., 2012, *ApJ*, 759, L37
 Cernicharo J., Marcelino N., Roueff E., Gerin M., Jiménez-Escobar A., Muñoz Caro G. M., 2012, *ApJ*, 759, L43
 Cummins S. E., Linke R. A., Thaddeus P., 1986, *ApJS*, 60, 819
 Duley W. W., Williams D. A., 1993, *MNRAS*, 260, 37
 Fayolle E. C., Öberg K. I., Cuppen H. M., Visser R., Linnartz H., 2011, *A&A*, 529, A74
 Garrod R. T., Herbst E., 2006, *A&A*, 457, 927
 Garrod R. T., Park I. H., Caselli P., Herbst E., 2006, *Faraday Discuss.*, 133, 51
 Garrod R. T., Wakelam V., Herbst E., 2007, *A&A*, 467, 1103
 Goumans T. P. M., Andersson S., 2010, *MNRAS*, 406, 2213
 Graedel T. E., Langer W. D., Frerking M. A., 1982, *ApJS*, 48, 321
 Hasegawa T. I., Herbst E., 1993, *MNRAS*, 261, 83
 Hasegawa T. I., Herbst E., Leung C. M., 1992, *ApJS*, 82, 167
 Herbst E., van Dishoeck E. F., 2009, *ARA&A*, 47, 427
 Hincelin U., Wakelam V., Hersant F., Guilloteau S., Loison J. C., Honvault P., Troe J., 2011, *A&A*, 530, A61
 Holbrook K. A., Pilling M. J., Robertson S. H., 1996, *Unimolecular Reactions*, 2nd edn. Wiley, New York
 Hollenbach D., Salpeter E. E., 1970, *The J. Chem. Phys.*, 53, 1
 Hollenbach D., Kaufman M. J., Bergin E. A., Melnick G. J., 2009, *ApJ*, 690, 1497
 Jenkins E. B., 2009, *ApJ*, 700, 1299
 Léger A., Jura M., Omont A., 1985, *A&A*, 144, 147
 Loison J. C., Halvick P., Bergeat A., Hickson K. M., Wakelam V., 2012, *MNRAS*, 421, 1476
 Minissale M. et al., 2013, *Phys. Rev. Lett.*, 111, 5
 Mottram J. C., van Dishoeck E. F., Schmalzl M., Kristensen L. E., Visser R., Hogerheijde M. R., Bruderer S., 2013, *A&A*, 558, A126
 Nummelin A., Bergman P., Hjalmarsen Å., Friberg P., Irvine W. M., Millar T. J., Ohishi M., Saito S., 2000, *ApJS*, 128, 213
 Öberg K. I., van Dishoeck E. F., Linnartz H., 2009a, *A&A*, 496, 281
 Öberg K. I., Linnartz H., Visser R., van Dishoeck E. F., 2009b, *ApJ*, 693, 1209
 Ricca F., Pisani C., Garrone E., 1969, *The J. Chem. Phys.*, 51, 9
 Ruffle D. P., Herbst E., 2000, *MNRAS*, 319, 837
 Semenov D. et al., 2010, *A&A*, 522, A42
 Shen C. J., Greenberg J. M., Schutte W. A., van Dishoeck E. F., 2004, *A&A*, 415, 203
 Tielens A. G. G. M., Allamandola L. J., 1987, in Morfill G. E., Scholer M., eds, *Proc. NATO ASI, Physical Processes in Interstellar Clouds*. Reidel, Dordrecht, p. 333
 Vasyunin A. I., Herbst E., 2013, *ApJ*, 769, 34
 Wakelam V., Herbst E., 2008, *ApJ*, 680, 371
 Wakelam V., Herbst E., Selsis F., 2006, *A&A*, 451, 551
 Wakelam V. et al., 2012, *ApJS*, 199, 21

- Wakelam V., Smith I. W. M., Loison J. C., Talbi D., Klippenstein S. J., Bergeat A., Geppert W. D., Hickson K. M., 2013, preprint ([arXiv:1310.4350](https://arxiv.org/abs/1310.4350))
 Watson W. D., 1976, *Rev. Mod. Phys.*, 48, 513
 Willacy K., Williams D. A., Duley W. W., 1994, *MNRAS*, 267, 949

APPENDIX A

Table A1. Species for which abundances (above 10^{-13} (H)) are affected by more than a factor 2 (with respect to Model A) at 10^6 yr. s- refers for surface species. Species detected towards TMC-1 (CP) are marked with *, those detected towards L134N are marked with *.

Model B (for $A_V = 10$)	Model C (for $A_V = 3$)
C ₂ H ₄	H ₂ O
CH ₂ CCH	OH**
CH ₃ OH**	CO ₂
NH ₂ CHO	SiO ₂
CH ₂ CHCN*	HCOOH*
HCOOCH ₃	CH ₃ OH*
CH ₃ CH ₂ OH	C ₂ H _n ($n = 5; 6$)
CH ₃ OCH ₃	O ₃
O ₃	CH ₂ OH
HNCO**	s-C ₂ H _n ($n = 5; 6$)
HC ₂ O	s-CH ₂ OH
CH ₂ OH	s-CH ₃ CH ₂ OH
s-C ₂ H _n ($n = 4; 5$)	s-CH ₂
s-CH ₃ CH ₂ OH	s-H ₂ CCN
s-CCS	s-CH ₃ C _n N ($n = 1; 3; 5; 7$)
s-CH ₂ CCH	s-CH ₃ OCH ₃
s-CH ₂ CHCN	s-CH ₃ OH
s-C ₃ O	s-CH ₃ NH ₂
s-CH ₂	s-CN
s-H ₂ CCO	s-CO ₂
s-CH ₃	s-CS
s-CH ₃ OH	s-H ₂ CO
s-CN	s-H ₂ CS
s-CO	s-H ₂ O
s-CO ₂	s-HCOOH
s-H	s-HNO
s-H ₂ CO	s-NH ₂ CHO
s-H ₂ CS	s-NS
s-HCOOCH ₃	s-O
s-HNCO	s-O ₂ H
s-HNO	s-O ₃
s-C _n H ₂ ($n = 4; 5; 6; 8; 9$)	s-OCS
s-NH	s-OH
s-NH ₂	s-S
s-NH ₂ CHO	s-SO ₂
s-NO	–
s-OH	–
s-SO	–
s-CS	–
s-HOOH	–
s-H ₂ S	–
s-NS	–
s-O ₂	–

This paper has been typeset from a $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ file prepared by the author.

A.2 Chemistry in protoplanetary disks : the gas-phase CO/H₂ ratio and the carbon reservoir

Article publié en 2015 :
disponible dans la revue A&A
[Reboussin et al. \(2015b\)](#)

Chemistry in protoplanetary disks: the gas-phase CO/H₂ ratio and the carbon reservoir

L. Reboussin^{1,2}, V. Wakelam^{1,2}, S. Guilloteau^{1,2}, F. Hersant^{1,2}, and A. Dutrey^{1,2}

¹ Université Bordeaux, LAB, UMR 5804, 33270 Floirac, France
e-mail: laura.reboussin@obs.u-bordeaux1.fr

² CNRS, LAB, UMR 5804, 33270 Floirac France

Received 13 February 2015 / Accepted 5 May 2015

ABSTRACT

Context. The gas mass of protoplanetary disks and the gas-to-dust ratio are two key elements driving the evolution of these disks and the formation of planetary system.

Aims. We explore to what extent CO (or its isotopologues) can be used as a tracer of gas mass.

Methods. We use a detailed gas-grain chemical model and study the evolution of the disk composition, starting from a dense prestellar core composition. We explore a range of disk temperature profiles, cosmic-ray ionization rates, and disk ages for a disk model representative of T Tauri stars.

Results. At the high densities that prevail in disks, we find that because of fast reactions on grain surfaces, CO can be converted to less volatile forms (principally s-CO₂, and to a lesser extent s-CH₄) instead of being evaporated over a wide range of temperature. The canonical gas-phase abundance of 10⁻⁴ is only reached above about 30–35 K. The dominant carbon bearing entity depends on the temperature structure and age of the disk. The chemical evolution of CO is also sensitive to the cosmic-ray ionization rate. Larger gas phase CO abundances are found in younger disks. Initial conditions, such as parent cloud age and density, have a limited impact.

Conclusions. This study reveals that CO gas-phase abundance is heavily dependent on grain surface processes, which remain very incompletely understood so far. The strong dependence on dust temperature profile makes CO a poor tracer of the gas-phase content of disks.

Key words. astrochemistry – protoplanetary disks – molecular processes

1. Introduction

Measuring the mass of protoplanetary disks remains a challenging task. Because H₂ is either unobservable in the physical conditions prevailing throughout most disks, or when detected, only sampling peculiar conditions (Bary et al. 2008), we have to rely on indirect tracers to estimate disk masses.

A common practice is based on the dust emission at mm wavelengths, where the dust opacity is moderate and thus the emission sensitive to most of the dust mass. However, the dust emissivity is not well known: it depends on dust characteristics, in particular the grain size distribution, and differential grain growth has been observed in disks (Guilloteau et al. 2011; Pérez et al. 2012), invalidating the use of a unique emissivity coefficient throughout the disk. Despite this limitation, under the simple assumption of an average emissivity of order 2 cm² g⁻¹, it has been shown that the dust masses of protoplanetary disks scale with their host stellar mass (Andrews et al. 2013).

In any case, dust alone cannot inform us about the gas content. It is often assumed that the gas-to-dust ratio is of order 100 to derive disk masses, but many processes (such as the vertical dust settling and the radial drift of large grains) may affect the gas-to-dust ratio. HD is perhaps the best proxy for H₂, and has been detected so far in TW Hya (Bergin et al. 2013). However, the interpretation is strongly dependent on the thermal profile of the disk. Furthermore, there is no longer any telescope that is sensitive enough to detect it in more distant protoplanetary disks.

Early studies of disk emission found that the ¹³CO lines were much fainter than expected from mm continuum emission from dust (Beckwith et al. 1990; Dutrey et al. 1996). Part of this discrepancy may be attributable to different disk sizes in dust and continuum (Piétu et al. 2006, 2007; Hughes et al. 2009), but depletion of CO on dust grains was invoked as the main cause.

Recently, Williams & Best (2014) suggested that, because of its relatively simple chemistry, CO could be a reliable tracer of dust mass. They argued that gas-phase CO abundance depends mostly on gas temperature, and that with a reasonable knowledge of the disk thermal structure, the fraction of carbon locked up in gas-phase CO can be evaluated (10⁻⁴ where $T > 20$ K). Apart from the upper layers, which contain little mass, the thermal structure in disks is dominated by dust (Chiang & Goldreich 1997) and can be reasonably well constrained from SED measurements. Exploring a large grid of disk parameters, Williams & Best (2014) concluded that disk gas masses were in general rather small, leading to an average gas-to-dust ratio well below the canonical value of 100 found in the interstellar medium.

However, this finding contradicts the high mass suggested by the analysis of the HD observations of TW Hya (Bergin et al. 2013). To resolve the discrepancy between these two approaches, a very low CO to H₂ ratio is required. Very low apparent CO to dust ratios were also found by Chapillon et al. (2008) for CQ Tau and MWC 758, two Herbig Ae stars, as well as for BP Tau (Dutrey et al. 2003), despite large temperatures (above 30 K) deduced from CO. Under the simple assumption

that CO is mostly in the gas phase because of high temperatures, [Chapillon et al. \(2010\)](#) showed that the lack of detection of CI in CQ Tau excludes photodissociation as the sole cause of low CO column densities, and implies a very low gas-to-dust ratio.

Since CO rotational transitions are generally very optically thick in disks, using the less abundant isotopologues is required to sample the gas content. This introduces a significant complexity because of the different shielding of the isotopologues against photodissociation by the UV radiation field. Another added complexity is the ^{13}CO fractionation that can occur in lukewarm regions (20–30 K). These processes have been studied in detail in [Miotello et al. \(2014\)](#), who showed that these effects have a substantial impact on the derivation of the CO gas content and could reduce the discrepancy between the two approaches.

[Favre et al. \(2013\)](#) concluded that the emission of C^{18}O in TW Hya could only be explained assuming CO has been converted to other hydrocarbons, rather than released from grains. As an other alternative, [Chapillon et al. \(2008\)](#) suggested that because large grains can remain cold, CO might remain trapped in these grains even in relatively warm disks, like those around the Herbig Ae stars CQ Tau or MWC 758.

Given that other molecules suffer from an even more complex chemistry than CO and its isotopologues, it is important to understand to what extent CO can be a tracer of disk masses.

In this paper, we re-explore this issue using a detailed gas-grain chemical network. We concentrate here on some aspects of chemistry that can affect the (gas-phase) CO abundance in protoplanetary disks. We first study the impact of temperature profile and the role of grain surface chemistry for disks of different ages. Second, we evaluate the importance of initial conditions on the time-dependent disk chemistry.

Our purpose is not to build complete disk models, but to reveal the importance of these effects on the chemical evolution of protoplanetary disks. The paper is organized as follows. In Sect. 2, we describe our chemical model and the physical disk structure used for this work. In Sect. 3, we present the effect of the disk vertical temperature profile on the chemistry of carbon-bearing species, as well as the impact of the cosmic-ray ionization rate and the age of the disk. We also study the sensitivity of our model to the initial C/O ratio, the gas density, and the age of the parent molecular cloud. Section 4 contains a discussion of our work. Finally, in Sect. 5 we present our conclusions about this work.

2. Modeling

2.1. Chemistry

2.1.1. Model description

We used the Nautilus chemical model ([Semenov et al. 2010](#); [Reboussin et al. 2014](#)), which computes the abundance of species as a function of time in the gas phase and at the surface of the grains. The model includes pure gas-phase chemistry with bimolecular reactions, ionizations, and dissociations by direct impact of cosmic ray particle and UV photons (interstellar FUV photons and secondary UV photons induced by cosmic ray/ H_2 interactions). We assume the standard cosmic-ray ionization rate $\zeta_{\text{CR}} = 1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$. The dust grains are represented by spherical particles with a radius of $0.1 \mu\text{m}$, a density of 3 g cm^{-3} , and are made of amorphous olivine. The gas and dust temperatures are assumed to be the same and we use a gas-to-dust mass ratio of 100. The gas-grain interactions include adsorption of gas-phase species, those species can desorb back into the gas-phase by thermal desorption and nonthermal desorption (via the

Table 1. Initial abundances used in our model.

Element	Abundance relative to H
H_2	0.5
He	$9 \times 10^{-2} \text{ }^a$
N	$6.2 \times 10^{-5} \text{ }^b$
O	$3.3 \times 10^{-4} \text{ }^c$ (C/O = 0.5)
	$1.4 \times 10^{-4} \text{ }^c$ (C/O = 1.2)
C^+	$1.7 \times 10^{-4} \text{ }^b$
S^+	$8 \times 10^{-9} \text{ }^d$
Si^+	$8 \times 10^{-9} \text{ }^d$
Fe^+	$3 \times 10^{-9} \text{ }^d$
Na^+	$2 \times 10^{-9} \text{ }^d$
Mg^+	$7 \times 10^{-9} \text{ }^d$
P $^+$	$2 \times 10^{-10} \text{ }^d$
Cl $^+$	$1 \times 10^{-9} \text{ }^d$

Notes. ^(a) See discussion in [Wakelam & Herbst \(2008\)](#). ^(b) [Jenkins \(2009\)](#), ^(c) See discussion in [Hincelin et al. \(2011\)](#). ^(d) Low metal abundances ([Graedel et al. 1982](#)).

energy released by exothermic surface reactions and cosmic ray induced desorption). The impact of photodesorption is discussed in Sect. 3.2. The model takes grain-surface reactions with diffusion reactions at the surface of the dust particle via thermal hopping into account (we do not take diffusion by quantum tunneling into account). The energy barrier between two adjacent sites is taken as half of the binding energy ([Garrod & Herbst 2006](#)). Photodissociation on the surface by UV photons and cosmic ray induced UV field are also considered.

2.1.2. Cloud model parameters

To obtain the initial chemical composition of the disk, we first compute the chemical composition of the parent molecular cloud. We run Nautilus during 10^6 yr for typical dense cloud conditions as our nominal cloud: a gas density of $n_{\text{H}} = n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2) = 2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$, a temperature of 10 K (with $T_{\text{gas}} = T_{\text{dust}}$), a visual extinction of 10, a cosmic-ray ionization rate of $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$, and the initial abundances as listed in Table 1. For all elements but He, N, C, and O, we used the “low metal” elemental abundances defined by [Graedel et al. \(1982\)](#). For oxygen, two values have been considered: a “low depletion” case, which corresponds to C/O = 0.5 in our standard model, and a “high depletion” case, which corresponds to C/O = 1.2 considered in Sect. 3.5.2. The helium abundance is assumed to be 0.09 ([Wakelam & Herbst 2008](#)), while the nitrogen and carbon abundances are extrapolated from [Jenkins \(2009\)](#) up to a density of $2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ (see discussion in [Hincelin et al. 2011](#)).

2.1.3. Chemical network

The chemical network used for this work contains 8624 reactions: 6844 are pure gas-phase reactions and 1780 are grain-surface and gas-grain interactions. The model follows the chemistry of 703 species (atoms, radicals, ions and molecules): 504 are gas-phase species and 199 are species on grains. The surface network is based on [Garrod et al. \(2007\)](#) whereas the gas-phase network is based on [kida.uva.2011](#) with updates from [Wakelam et al. \(2013\)](#) and [Loison et al. \(2014a,b\)](#). We have added 19 gas-phase species and 377 pure gas-phase reactions (mainly carbon and nitrogen chains). The network is available on the KInetic Database for Astrochemistry (KIDA) website¹.

¹ <http://kida.obs.u-bordeaux1.fr/models>

2.2. Disk structure

For the disk physical parameters, we used the disk model described in [Hersant et al. \(2009\)](#). The vertical density structure is obtained by integrating the equation of hydrostatic equilibrium,

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial z} = - \left[\left(\frac{GM_* z}{r^3} \right) \left(\frac{\mu m_{\text{H}}}{k_{\text{B}} T} \right) + \frac{\partial \ln T}{\partial z} \right], \quad (1)$$

where G is the gravitational constant, $M_* = 0.5 M_{\odot}$ is the mass of the central star, $\mu = 2.4$ is the reduced mass of total hydrogen, m_{H} the mass of the proton, and k_{B} the Boltzmann constant.

For the isothermal case, the vertical density is given by

$$\rho(z) = \rho_0 \exp - \left(\frac{1}{2} \left(\frac{z}{H} \right)^2 \right), \quad (2)$$

where $H = (k_{\text{B}} T_{\text{mid}} r^3 / GM_* \mu m_{\text{H}})^{1/2}$ is the pressure scale height derived from the midplane temperature T_{mid} .

We assumed the disk surface density to vary as $r^{-1.5}$ described in [Hersant et al. \(2009\)](#) as follows:

$$\Sigma(r) = \Sigma_{100} \left(\frac{r}{100 \text{ au}} \right)^{-1.5} \text{ g cm}^{-2}, \quad (3)$$

with $\Sigma_{100} = 0.8 \text{ g cm}^{-2}$. The hydrogen surface density is given by $\Sigma_{100} = \mu m_{\text{H}} N_{100}(H)$ in which μ is the mean weight per H nuclei, which we approximate as $\mu/2$. Thus, $N_{100}(H) \approx 4 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$. With an outer radius of 700 au, the disk mass is $M_{\text{d}} = 0.03 M_{\odot}$.

Contrary to [Hersant et al. \(2009\)](#), we use the disk temperature structure as described in [Williams & Best \(2014\)](#). The radial midplane temperature T_{mid} and the atmospheric temperature T_{atm} (temperature at $z \geq 4H$) are given as a power law of the radius:

$$T_{\text{mid}}(r) = T_{\text{mid},1} \left(\frac{r}{1 \text{ au}} \right)^{-q}, \quad (4)$$

$$T_{\text{atm}}(r) = T_{\text{atm},1} \left(\frac{r}{1 \text{ au}} \right)^{-q}, \quad (5)$$

with $q = 0.55$, which leads to a flaring exponent of 1.23.

A sine function is used for the connection between the midplane and the atmosphere gas temperatures:

$$T(r, z) = \begin{cases} T_{\text{mid}} + (T_{\text{atm}} - T_{\text{mid}}) \left[\sin \left(\frac{\pi z}{2z_q} \right) \right]^{2\delta} & \text{if } z < z_q \\ T_{\text{atm}} & \text{if } z \geq z_q, \end{cases} \quad (6)$$

with $\delta = 2$ (steepness of the profile) and $z_q = 4H$ (height at which the disk reaches the atmospheric value). The visual extinction is related to the total column density of hydrogen by $A_V = N(H)/1.6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$, following [Wagenblast & Hartquist \(1989\)](#), consistent with the adopted mean grain radius of $0.1 \mu\text{m}$. Changing the temperature profile also affects the density and visual extinction distributions.

For the UV radiative transfer in the disk, we consider only the vertical extinction. We assume that the radial extinction of stellar UV field is very efficient so that UV photons are scattered by small grains at high altitudes. The UV flux is decreasing as $1/r^2$ from the central star. We consider $G_0 = 410$ for the field for a distance of 100 au from the star: this is representative of low mass T Tauri stars like DM Tau. Half of this flux is assumed to be scattered downward inside the disk. To model the CO and H₂ UV self-shielding, we used the approximation from [Lee et al. \(1996\)](#). We use 64 points in the vertical direction.

Table 2. Model descriptions.

	$T_{\text{gas}} = T_{\text{dust}}$
Model 1	Weak temperature gradient defined as: $T_{\text{atm},1} = T_{\text{mid},1} + 300 \text{ K}^a$
	$T_{\text{gas}} = T_{\text{dust}}$
Model 2	Strong temperature gradient defined as: $T_{\text{atm},1} = T_{\text{mid},1} + 1000 \text{ K}^a$
	$T_{\text{gas}} > T_{\text{dust}}$
Model 3	Dust temperature profile as in Model 1. Gas temperature profile as in Model 2.

Notes. ^(a) For $r = 1 \text{ au}$.

Table 3. Molecular binding (desorption) energies.

Species	E_D (K)
C	800
CO	1150
CH ₄	1300
H ₂ CO	2050
CO ₂	2575
CH ₃ CCH	3837
C ₂ H ₆	4387
CH ₃ OH	5534

We created a large grid of models by varying the values of $T_{\text{mid},1}$ and $T_{\text{atm},1}$. The disk midplane temperature is therefore ranging between 4 and 52 K while the temperature in the upper layer is ranging between 17 and 95 K (at 300 au). We also considered different models (see Table 2 for a description of our models). Model 1 is considered our nominal model. In Model 2, we study the impact of the steepness of the temperature profile taken as stronger in this model by increasing the value of $T_{\text{atm},1}$. A third model (Model 3) was considered in which the dust temperature has been considered as different from the gas temperature. In that case, the gas temperature is assumed to follow the strong gradient temperature of Model 2, while the dust temperature follows that of Model 1. Figure 1 shows the disk temperature, visual extinction, and density vertical profiles at 300 au for some of those models. Depending on the temperature profile considered, disks have different height, and the warmer disks are thicker. From coldest to the warmest, shown in Fig. 1, the disk heights at 300 au are respectively, 29, 62, and 88 au.

3. Results

In this section, we present the results obtained with our models. First, we study the impact of the temperature profile on the disk chemistry and, more particularly, on the carbon-bearing species abundances. Second, we show the sensitivity to the initial cloud composition. The initial chemical conditions used for disk modeling are listed in Table 4. Hereafter, for any molecule X, we shall use s-X to refer to molecules trapped on grains, and X for molecule in the gas-phase.

3.1. Impact of the vertical temperature profile

The (gas-phase) CO vertical abundance at $r = 300 \text{ au}$ is represented in Fig. 2 for the six profiles shown in Fig. 1 and for a disk age of 1 Myr. In the upper layer of the disk, the CO abundance

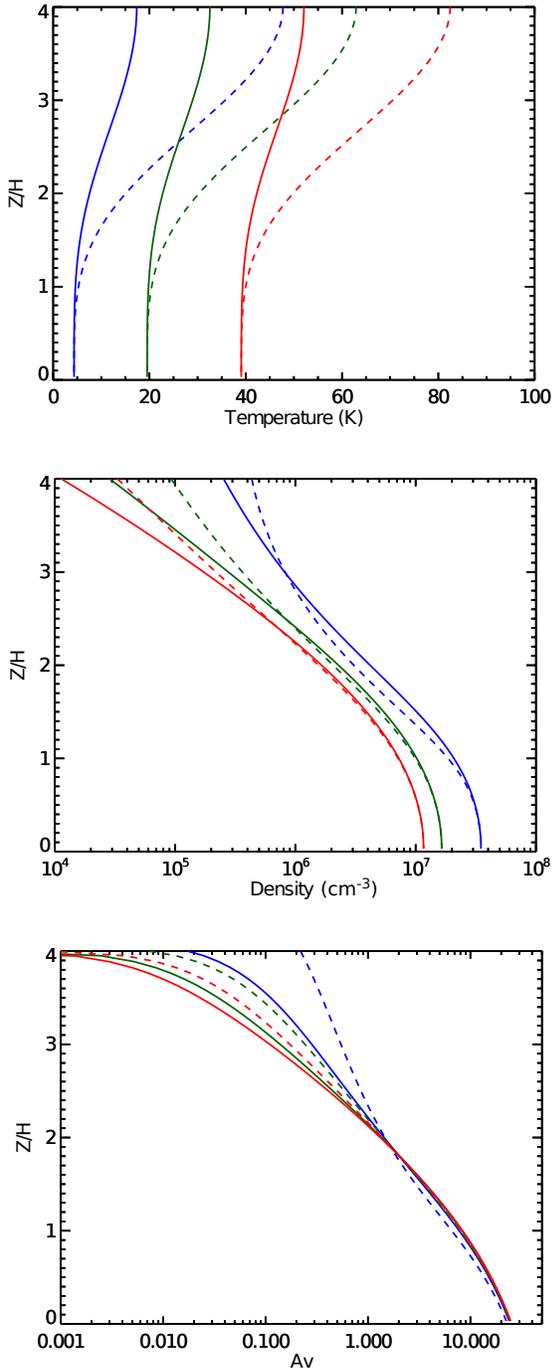


Fig. 1. Examples of temperature, density, and visual extinction vertical profiles in the protoplanetary disk at 300 au used for the chemical modeling. Solid lines are for Model 1 and dashed lines for Model 2 (see Table 2). The vertical profiles for these two models are shown for three different values of the midplane temperature T_{mid} at 300 au: ~ 4 K (blue lines), ~ 20 K (green lines), and ~ 40 K (red lines). Disk heights depend on the temperature: from the coldest to the warmest model, the disk heights are 29, 62 and 88 au at 300 au.

is mostly affected by the photodissociation process. Because of different scale heights, the visual extinction at $Z/H = 4$ varies between models (see Fig. 1). In the upper layer, CO is more efficiently photodissociated by UV photons for the warmer models (green and red) because the visual extinction is smaller.

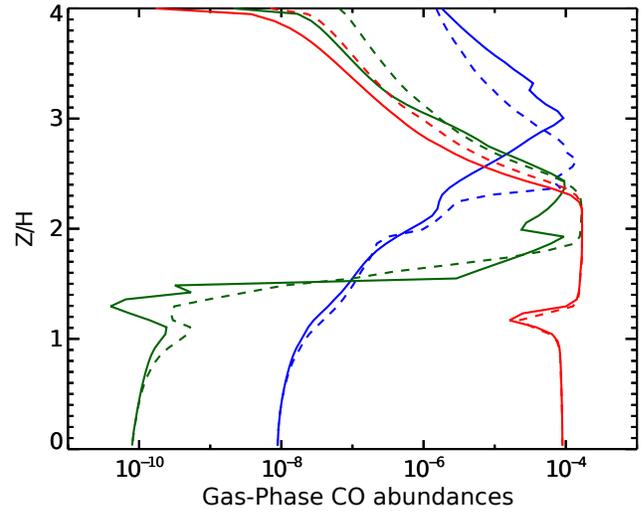


Fig. 2. Vertical gas-phase CO abundances (relative to total hydrogen) at 300 au for a disk age of 1 Myr. The color coding corresponds to the vertical profiles shown in Fig. 1. Solid lines are for Model 1 and dashed lines for Model 2 (see Table 2).

The largest CO abundances are obtained in the warm molecular layer, whose height and thickness differs according to the model. The coldest model with a stronger temperature gradient (blue dashed line in Fig. 2) shows a larger CO abundance at smaller scale height compared to the coldest model with a weak temperature gradient (blue solid line in Fig. 2). This is because the desorption temperature of CO is reached at a smaller height. In the disk midplane, the larger CO abundance is obtained with the higher T_{mid} model (in red in Fig. 1) because of a more efficient desorption of s-CO from the ices. For this model, the CO depletion is small, as expected at these high temperatures. The CO abundance obtained with the smaller T_{mid} model (in blue in Fig. 1) is higher than the intermediate model (green). In fact, at approximately 15 K, s-CO is destroyed on the dust grains to form more complex species by secondary UV photons induced by cosmic rays, such as s-CO₂, s-H₂CO and s-CH₃OH, whereas when the temperature is too low (below 9 K), the diffusion of the species, even atomic hydrogen, is less efficient at the surface of the grains.

The CO abundance profiles obtained with the models are then sensitive to the vertical temperature profile that is assumed: the midplane temperature as well as the steepness of the gradient. For midplane temperatures larger than 20 K, the steepness of the gradient no longer substantially affects the CO abundance because the evaporation temperature of s-CO is reached in the molecular layer.

For the models displayed in Fig. 2, only the warmest (red lines) reach the value $\text{CO}/\text{H}_2 = 10^{-4}$. For the other models, which are colder, this ratio is much smaller for two main reasons. Firstly, the warm molecular layer in which larger CO abundances are obtained is less extensive than in the case of warmer models, and, secondly, the CO depletion due to freeze-out and grain surface chemistry is very efficient in the disk midplane.

Figure 3 represents the disk column densities and vertical abundances (computed from the molecular column densities and the total H column density) of some carbon-bearing species in the gas phase and at the surface of the grains as a function of the disk midplane temperature and for the three models as described in Table 2. The results are obtained for a disk age of 1 Myr.

Table 4. Predicted abundances in the molecular cloud considering different model parameters.

Species	Abundances ^a (with respect to n_{H})				
	Nominal cloud	C/O = 1.2	10 ⁵ yr	10 ⁷ yr	$n_{\text{H}} = 2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$
CO	2.4(-5)	1.3(-5)	7.2(-5)	2.9(-7)	2.2(-6)
CH ₄	1.5(-7)	4.0(-7)	4.5(-7)	6.5(-7)	2.4(-8)
CO ₂	3.3(-8)	6.0(-9)	4.7(-8)	9.2(-11)	7.9(-10)
C	3.1(-8)	7.0(-8)	2.9(-5)	5.4(-8)	1.4(-8)
C ⁺	4.2(-9)	8.0(-10)	2.0(-9)	1.2(-13)	4.4(-10)
C ₂ H ₆	6.2(-9)	7.1(-9)	7.1(-11)	1.2(-8)	8.3(-9)
H ₂ CO	9.8(-9)	1.8(-8)	4.5(-8)	1.6(-9)	2.3(-9)
CH ₃ OH	7.1(-10)	1.0(-9)	7.2(-11)	6.2(-11)	1.1(-10)
s-CO	7.2(-5)	3.0(-5)	2.5(-5)	1.9(-7)	9.9(-5)
s-CH ₄	8.5(-6)	2.5(-5)	4.2(-6)	9.2(-5)	5.1(-6)
s-CO ₂	1.6(-6)	5.6(-8)	8.1(-7)	3.9(-9)	2.3(-6)
s-C ₂ H ₆	3.4(-6)	3.9(-6)	3.9(-8)	6.4(-6)	4.6(-6)
s-H ₂ CO	2.8(-5)	4.1(-5)	1.8(-6)	1.0(-6)	2.3(-5)
s-CH ₃ OH	9.7(-6)	1.6(-5)	5.0(-7)	2.5(-6)	5.8(-6)
s-CH ₃ CCH	2.4(-6)	6.1(-6)	1.0(-6)	4.6(-6)	1.0(-6)

Notes. ^(a) $a(b)$ represents $a \times 10^b$.

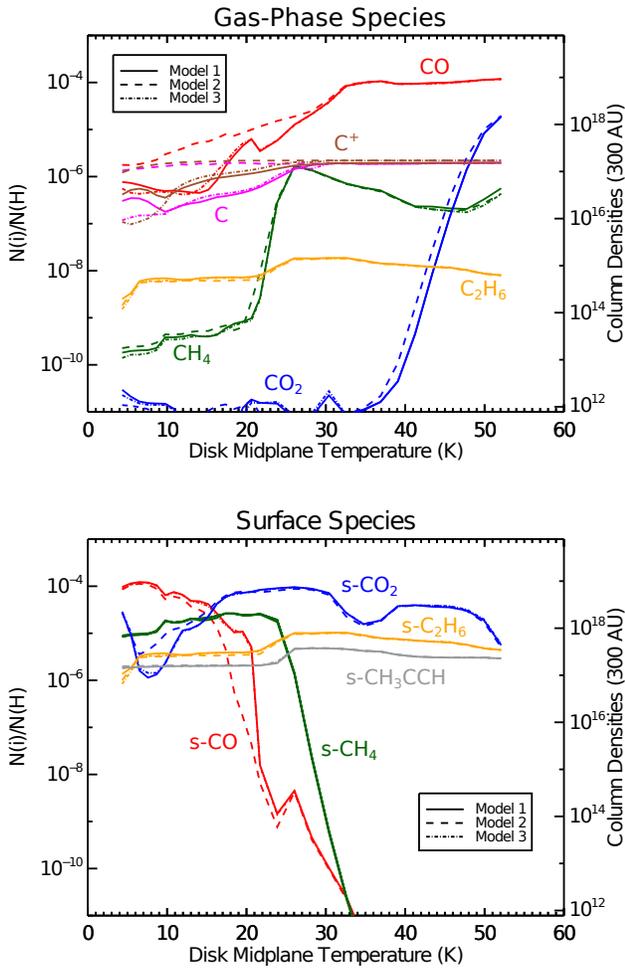


Fig. 3. Average abundances and integrated column densities (cm^{-2}) of carbon-bearing species in the gas-phase and on the grain surfaces for Model 1, 2, and 3 as a function of the disk midplane temperature (T_{mid}). s- refers for surface species. Those results are obtained at 300 au for our nominal cloud and for a disk age of 1 Myr.

In the case of temperature profiles with a midplane temperature between 5 and ~ 15 K in Model 1, s-CO is the most abundant

C-bearing species. At higher temperatures, its abundance decreases because it is converted into other C-bearing molecules such as s-CH₄. The direct photodissociation of CO in the gas and at the surface of the grains increases the abundance of neutral carbon, and subsequent hydrogenation of carbon on the surfaces contributes to form s-CH₄. Above 15 K, s-CO₂ becomes the most abundant molecule. Its formation is due to the following reactions, for which the efficiencies are increased by 10 to ~ 20 orders of magnitude at such temperatures compared to 15 K:



Reaction 7 is the main formation path of s-CO₂ in our model although it must overcome a large activation energy barrier (1000 K). Reaction 8, being without a barrier, also contributes to form s-CO₂ efficiently. Reaction 9 must overcome a small activation energy barrier (80 K). The warm dust temperature enables the increase of the mobility of species at the surface of the grains and the diffusion becomes much more efficient. However, the dust temperature is not warm enough to desorb the s-CO₂ back into the gas phase. At even higher temperatures (above 30 K), CO in gas-phase is the reservoir of C because of efficient desorption and the lack of sticking on the grains.

Model 3 (in which $T_{\text{gas}} > T_{\text{dust}}$) produces species abundances very similar to Model 1 whatever T_{mid} , meaning that it is the grain temperature that is the important parameter here. For temperatures between 25 and 50 K (depending on the molecule), the steepness of the temperature gradient does not influence the computed abundances in the gas phase nor at the surface of the grains. For T_{mid} smaller than 25 K, the gas-phase abundances are larger for Model 2, mainly because s-CO desorbs from the grains in Model 2 in the molecular layer producing the other C-bearing species, while it stays on the grains in Model 1.

s-CH₃OH and s-H₂CO are efficiently formed at low T_{mid} : between 10 and 20 K, their abundances are respectively, $\sim 10^{-5}$ and $\sim 10^{-6}$. Their main formation paths are:



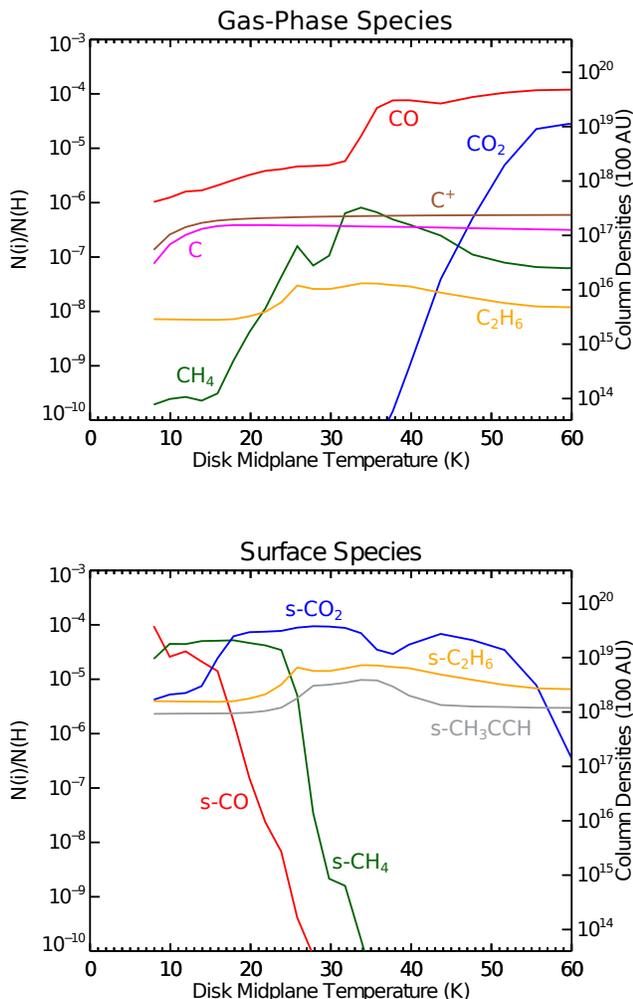


Fig. 4. Average abundances and integrated column densities (cm^{-2}) of carbon-bearing species in the gas phase and on the grain surfaces at 100 au as a function of the disk midplane temperature (T_{mid}). Results are for Model 1 and for a disk age of 1 Myr.

However, their abundances are strongly decreased at higher T_{mid} since s-H, s-HCO, s-O, and s-CH₂ are easily desorbed at such temperatures. The largest CH₃OH and H₂CO gas-phase column densities are found to be around 10^{12} cm^{-2} for $T_{\text{mid}} = 20 \text{ K}$.

In summary, the carbon reservoir in protoplanetary disks strongly depends on the disk vertical temperature profile, which is controlled by the midplane temperature; the reservoirs are s-CO in the ices below 15 K, s-CO₂ in the ices between 15 and 30 K, and CO in the gas-phase above 30 K.

The results described above were obtained at 300 au. We now show the results of Model 1 (weak temperature gradient) at 100 au. In Fig. 4, are represented the disk abundances and column densities of carbon-bearing species in the gas-phase and on the grain surfaces at 100 au for Model 1 as a function of the disk midplane temperature (to be compared to Fig. 3). At 100 au, for a given vertical temperature profile, the density, the visual extinction, and the UV flux are larger than at 300 au. Considering the larger densities, the reservoirs of carbon at low temperature ($T_{\text{mid}} \leq 17 \text{ K}$) are s-CH₄ and s-CO, and s-CO₂ between 17 and 34 K. At larger temperatures, gas-phase CO becomes dominant.

3.2. Photodesorption

Photodesorption was not included in our previous models. High desorption yields were found by Öberg et al. (2007), but it has been shown that the desorption efficiency depends on the shape of the UV spectrum (Fayolle et al. 2011). In particular, the photodesorption yield of CO ice induced by Ly- α photons is small (Chen et al. 2014).

We tested the impact of photodesorption on our results at 100 and 300 au for a disk age of 1 Myr. We used a large yield of 10^{-3} molecules photons⁻¹ for all species except for CH₃OH, H₂O, CO₂, N₂, and CO for which we used the formalism described in Öberg et al. (2009a,b,c).

The carbon reservoir remains the same for both radii. The gas-phase CO abundance is only affected at 300 au for mid-plane temperatures between 4 and 15 K, with a CO abundance five times larger than in our nominal model. However, s-CO remains the main carbon-bearing species. For both radii, only more complex molecules, such as C₂H₆ and CH₃CCH, are efficiently photodesorbed (their abundances are increased by more than a factor 10).

3.3. Impact of the cosmic-ray ionization rate

Cosmic rays are important for the ionization in the disk. As recently suggested by Cleeves et al. (2013), however, cosmic ray penetration may be highly reduced in the presence of stellar winds and/or magnetic fields. In this section we study the impact of a lower (cosmic-ray) ionization rate on disk chemistry.

Figure 5 shows the abundances of the main carbon-bearing species for two values of the cosmic-ray ionization rate: 1.3×10^{-17} and $1.3 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$ (in solid and dashed lines, respectively). The impact of the ionization rate on CO abundance is limited, as it is restricted to the temperature range 20–35 K. Considering the lower value for ζ_{CR} , s-CO abundance increases because its dissociation on the grain surface by UV photons induced by cosmic rays is less efficient. As a consequence, there is less carbon available to form s-CH₄. In the gas phase, the dissociation by secondary UV photons induced by cosmic ray/H₂ interactions is also less efficient so that CH₄ abundance increases at 300 au. At 100 au, the UV flux being larger, the direct photodissociation is the dominant process. CH₄ therefore presents similar sensitivity as s-CH₄ and decreases as well. We also ran our Model 1 for $\zeta_{\text{CR}} = 1.3 \times 10^{-19} \text{ s}^{-1}$, but the reservoirs remain the same as those shown in Fig. 5 (dashed lines) for both disk radii.

3.4. Impact of the age of the disk

The conversion of s-CO into more complex molecules on grains is a time-dependent process, which requires a minimum timescale to occur. Up to now, the results described were obtained for disks of 1 Myr. In this section we study the chemistry of carbon-bearing species for disks five times older.

Figure 6 shows the abundances of CO, s-CO, s-CO₂, and s-CH₄ obtained for Model 1 and for $T_{\text{mid}} = 20 \text{ K}$, as a function of time. The s-CO abundance strongly decreases at 10^5 yr because of its conversion into other species, such as s-CO₂ and s-CH₄. We see that the formation of s-CH₄ requires a longer timescale to occur than the formation of s-CO₂. The species s-CH₄ reaches its highest abundance at 10^7 yr , while s-CO₂ is the most abundant species for a disk at an age of 10^6 yr . The reservoirs of carbon are therefore changed while considering an older disk.

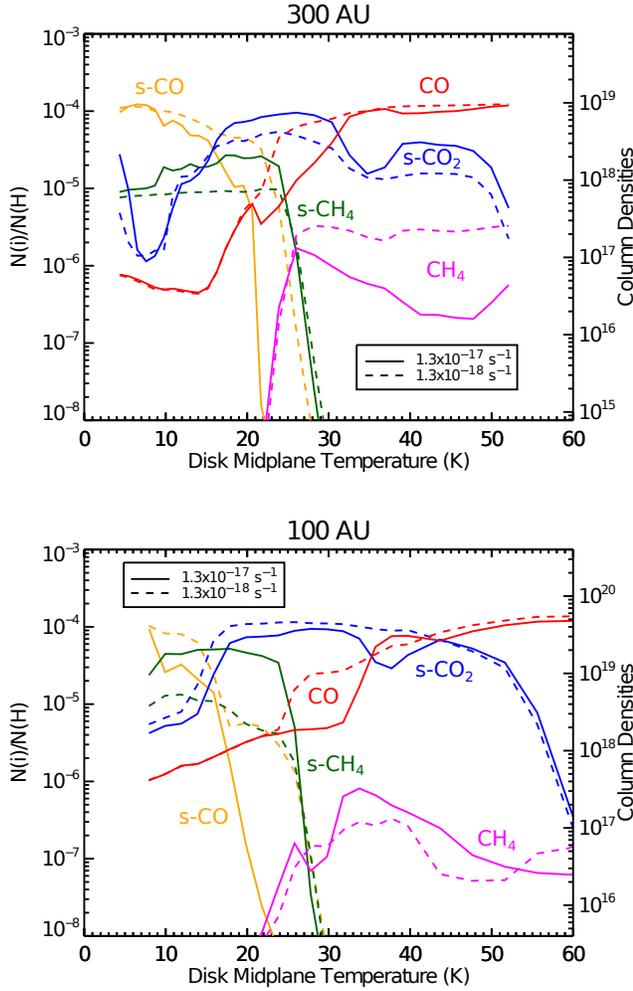


Fig. 5. Average abundances and integrated column densities (cm^{-2}) of main reservoirs of carbon at 300 au and 100 au for two values of the cosmic-ray ionization rate as a function of the disk midplane temperature (T_{mid}). Results are for Model 1 and for a disk age of 1 Myr.

Figure 7 represents the abundances and column densities of the main carbon-bearing species as a function of the disk midplane temperature for disks of 1 and 5 Myr. For the older disk, s-CH₄ is now the reservoir of carbon between 10 and 22 K in the midplane, which is due to its long formation timescale. The species s-CO₂ is also more abundant than CO between 32 and 40 K at 5 Myr compared to 1 Myr. This apparent dependency with temperature is actually a density effect. Because of the hydrostatic scale height, densities in the disk are smaller for higher temperatures, and the conversion time is just inversely proportional to the density. The conversion of CO into s-CO₂ is then longer in warmer disk so that at 35 K CO is the main carbon-bearing species for a disk of 1 Myr. For instance, in our model, this conversion timescale varies from 6×10^5 yr for disks at 25 K to 2×10^6 yr for disks at 35 K.

3.5. Sensitivity to the initial conditions

We now study the impact of the chemical composition of the parent molecular cloud on the disk chemistry. Several parameters have been studied such as gas density, C/O elemental ratio, and age of the parent cloud. The abundances of the main C-bearing

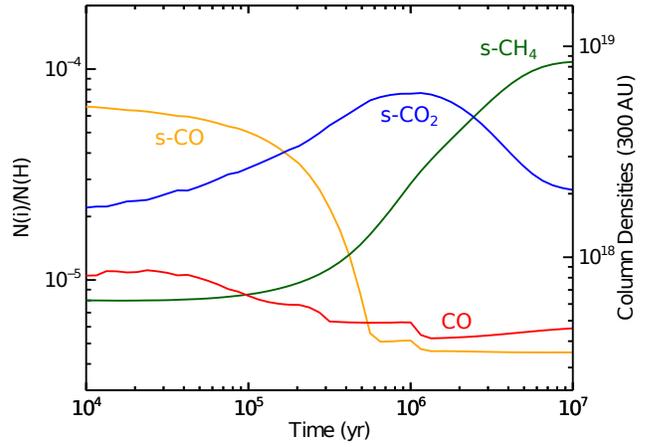


Fig. 6. Average abundances and integrated column densities (cm^{-2}) of main reservoirs of carbon at 300 au as a function of time. The results are obtained for Model 1 and for $T_{\text{mid}} = 20$ K at 300 au.

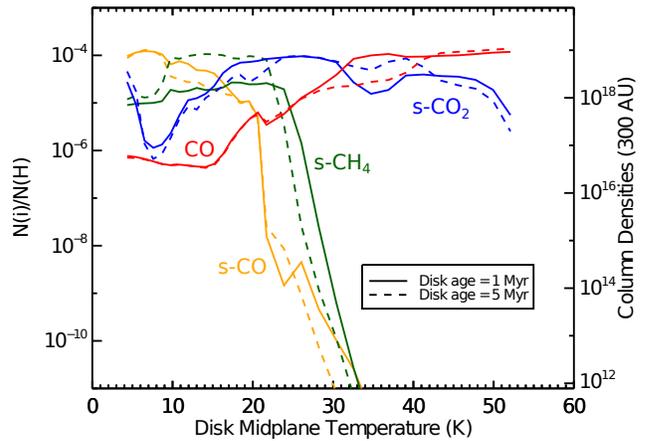


Fig. 7. Average abundances and integrated column densities (cm^{-2}) of main reservoirs of carbon at 300 au for two disk ages as a function of the disk midplane temperature (T_{mid}). Results are obtained for our Model 1.

species obtained for different cloud parameters, and used as initial conditions for the disk chemistry, are listed in Table 4. The results presented in this section are for disks of 1 Myr.

3.5.1. Density of the parent molecular cloud

To test the importance of the density of the parent molecular cloud, we redid our simulations but multiplied the density of the parent cloud by a factor of ten. The disk carbon chemistry is not very sensitive to the gas density of the parent molecular cloud. The reservoirs of carbon as described in the previous section are not changed. Only CH₃CCH abundance in the ices is decreased by a factor up to ~ 2 for all T_{mid} values.

3.5.2. C/O elemental ratio

For the carbon abundance, we use the value determined by Jenkins (2009) and we vary the C/O ratio by considering two different values for the oxygen elemental abundance: 1) 3.3×10^{-4} (value of our nominal model), a low depletion case; and 2) 1.4×10^{-4} , a high depletion case (see Sect. 2.1.2).

The reservoirs of carbon are not changed while using the high depletion case for C/O elemental ratio ($C/O = 1.2$). The only main difference is a smaller abundance of CO containing species and a larger abundance of CH containing species under some conditions. At 7 K, for instance, the CO, CH₄, and CO₂ abundances in the ices are 8.8×10^{-5} , 2.5×10^{-5} , and 3.8×10^{-7} , respectively.

3.5.3. Age of the parent molecular cloud

The age of molecular clouds is still a subject of debate. Ages are often considered between a few million years (Hartmann et al. 2001; Ballesteros-Paredes & Hartmann 2007) and 10 million years (Mouschovias et al. 2006). Ballesteros-Paredes & Hartmann (2007) suggested a short timescale of a few million years. They argued that as starless molecular clouds are rarely observed, star formation should occur shortly after cloud formation. Long cloud lifetimes have been favored because of the difficulty in explaining the sufficient formation of molecular hydrogen in only a few Myr, considering the slow rate at which H₂ forms in the ISM (Hollenbach et al. 1971). Glover & Mac Low (2007), however, suggested that turbulence significantly reduces the time required for the conversion of H into H₂ (less than 1–2 Myr). Pagani et al. (2011) suggested that the absence of DCO⁺ in dark clouds is due to a high ortho-H₂ abundance, which provides an upper limit to the age of 3–6 million years. More recently, Brünken et al. (2014) used the abundance ratio of ortho-H₂D⁺ and para-H₂D⁺ and determined an age of dense molecular clouds around one million years.

To study the sensitivity of the model results to the age of the parent molecular cloud, we considered two additional cases. We computed the initial cloud composition at 10^5 yr and 10^7 yr, in addition to our standard model at 10^6 yr. In Fig. 8, we display the abundances and column densities of carbon-bearing species as a function of the disk midplane temperature computed with the different initial compositions. The abundances of the main C-bearing species obtained in the parent cloud at the different times (10^5 , 10^6 and 10^7 yr) are listed in Table 4. The reservoirs of carbon in the disk are the same if a younger parent cloud is considered. However CO reaches its canonical value at larger T_{mid} : 40 K instead of 32 K. In the case of an older cloud the reservoirs of carbon are changed. At temperatures smaller than 9 K for instance and in the case of a 10^7 yr cloud, CO in the ices is not the main C-bearing molecule anymore while CH₄ in the ices is the main C-bearing molecule. This can be explained by differences in the initial chemical composition of the cloud. The 10^5 and 10^6 yr compositions are similar and only the fraction between gas phase and surface CO is reversed. At the large density of the disks, the gas-phase CO is quickly depleted on the grains. At 10^7 yr in the cloud, the CO in the ices is hydrogenated to form H₂CO and CH₃OH in the ices, but is also photodissociated by secondary UV photons induced by cosmic rays and the atomic carbon is hydrogenated to s-CH₄. This means the reservoir of carbon in the disk remains CH₄ in the ices. At larger temperature, s-CO₂ is no longer the reservoir of carbon since CO₂ is formed on the surfaces from CO (already under abundant in the cloud) and the reservoir is C₂H₆ in the ices. To summarize, the reservoirs of carbon in a disk formed from an older molecular cloud with an age of 10^7 yr are CH₄ in the ices for temperature profiles computed with a $T_{\text{mid}} < 22$ K and C₂H₆ in the ices for larger T_{mid} .

The reservoir of carbon in disks is thus rather insensitive to initial conditions. The age of the cloud has an effect only if it is old enough, at least 10 Myr, a value on the high end of estimated

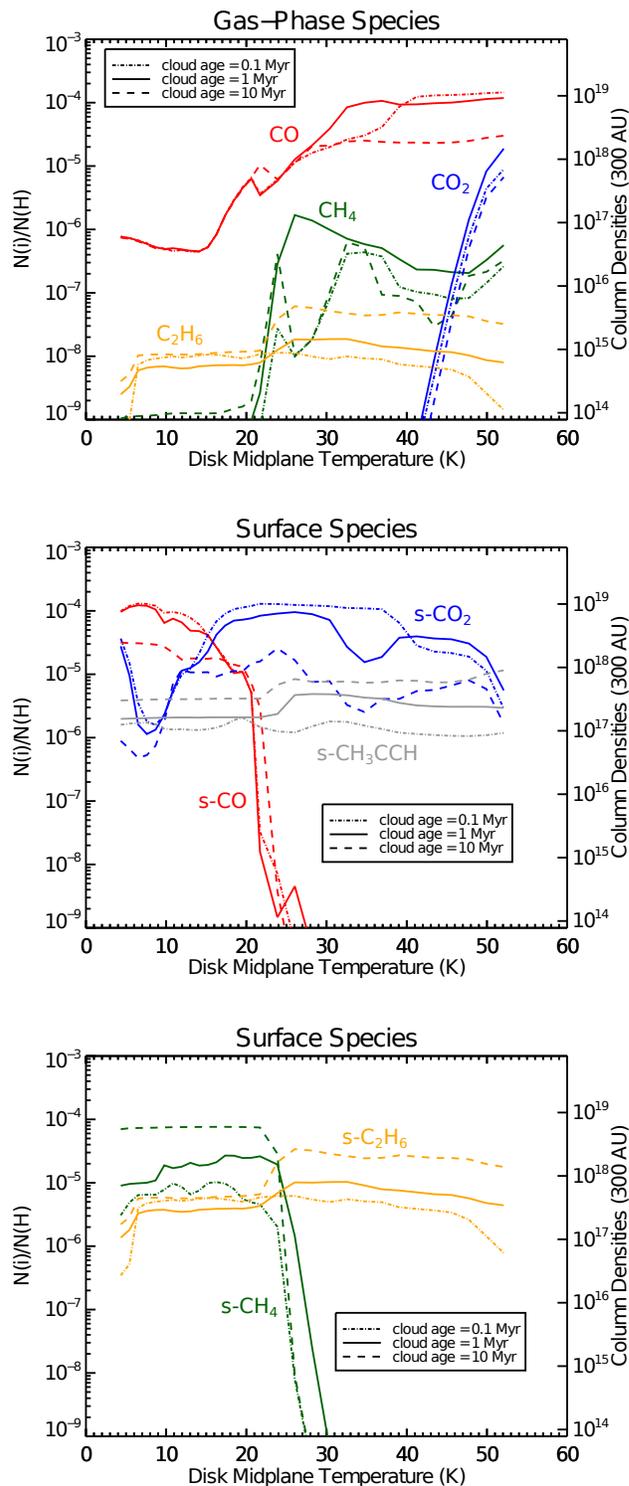


Fig. 8. Average abundances and integrated column densities (cm^{-2}) of carbon-bearing species in the gas-phase and on the grain surfaces for three ages of the parent molecular cloud as a function of the disk midplane temperature. Results are for Model I at 300 au, and for a disk age of 1 Myr. The results obtained for C and C⁺ are not shown since the differences are very small.

cloud ages. In that case, s-CH₄ becomes the dominant C-bearing molecule instead of s-CO in the ices (for $T_{\text{mid}} < 22$ K). For instance, for $T_{\text{mid}} = 15$ K, the s-CH₄/s-CO ratio is ~ 5 . This ratio is

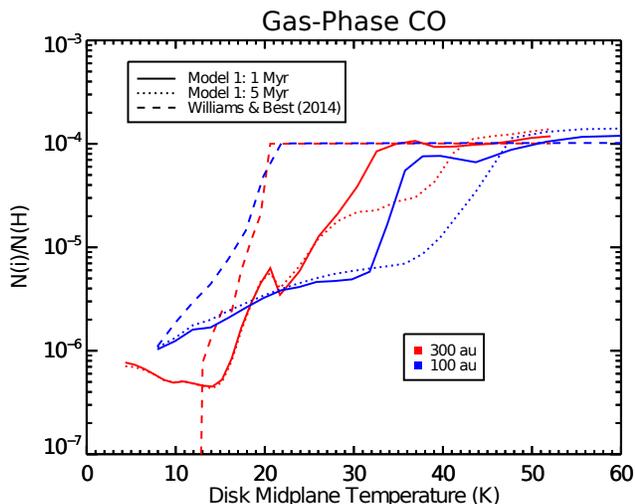


Fig. 9. Average abundance of gas-phase CO as a function of the disk midplane temperature (T_{mid}). The results obtained with our Model 1 for disks of 1 and 5 Myr and at 100 and 300 au are compared to the model used by Williams & Best (2014) for CO chemistry.

much larger than those found in solar system comets (see Table 1 of Bockelée-Morvan et al. 2004), which may indicate that our solar system originates from a younger cloud.

4. Discussion

Transformation of CO into more complex species on grain surfaces was already invoked by Aikawa et al. (1997). In their study, however, the process is driven by neutral carbon and required enhanced X-ray ionization to be started. Ionized helium atoms react with CO to release C, which further reacts on grain surfaces to get s-CO₂ or other hydrocarbons. We have shown here that with a more complete grain chemistry, this mechanism is no longer necessary and CO can be converted to other forms even without enhanced ionization.

Our modeling reveals that, because of this processing on dust grains, the CO chemistry does not behave in a simple way. Figure 9 compares our average CO abundances with those predicted using the simple prediction of Williams & Best (2014), who assumed $\text{CO}/\text{H}_2 = 0$ where $T \leq 20$ K and in the photodissociation region, and $\text{CO}/\text{H}_2 = 10^{-4}$ elsewhere. Except for the coldest disks (where it predicts no CO), the simple prescription clearly overpredicts the average CO abundance for midplane temperatures below 30 to 35 K. At 20 K, the difference between our chemical model and the simple prescription is a factor of ~ 40 . This suggests that gas-phase CO abundance is critically dependent on the (dust) temperature distribution and grain surface chemistry. Figure 9 shows that an abundance of 10^{-4} is only reached for disks with a midplane dust temperature above 30 K at 1 Myr and above 40 K at 5 Myr.

This complex CO chemistry may explain the low C¹⁸O to dust ratio observed in TW Hya by Favre et al. (2013). With an age estimate of 7–8 Myr (Barrado Y Navascués 2006; Ducourant et al. 2014)², TW Hya is old enough compared to the timescale required to convert CO to other forms on grain

² A younger age of 3 Myr has been quoted by Vacca & Sandell (2011), but seems inconsistent with the dynamical age derived by Ducourant et al. (2014).

surfaces. To estimate the fraction of CO in gas phase quantitatively, a very accurate thermal model is needed. Hughes et al. (2008) reproduced the mm continuum and CO images of the TW Hya disk with two different disk models, a “cold” model with $T(r) = 30 \text{ K}(r/100 \text{ au})^{-0.5}$, and a “warm” solution with $T(r) = 40 \text{ K}(r/100 \text{ au})^{-0.2}$. We also note that Hughes et al. (2008) assume $T_{\text{dust}} = T_{\text{gas}}$, and the temperatures are certainly biased toward somewhat higher values because of the expected vertical temperature gradient and the difference between gas and dust temperatures. Nevertheless, for both cases, we would predict abundances of order 10^{-5} , in reasonable agreement with the results of Favre et al. (2013). Thus, there may be no need to invoke other mechanisms than the conversion of s-CO to s-CO₂ which is the dominant process in our study.

In comparison with other objects, CO depletion due to surface chemistry may not explain the apparent low CO-to-dust ratio derived by Chapillon et al. (2008) for the very warm disk of CQ Tau, where temperatures may exceed 50 K. However, Chapillon et al. (2008) only marginally resolved the source and their quoted temperatures are only for gas. Higher resolution studies, coupled with a more detailed thermal and chemical modeling for this source, would be needed to reach a conclusion.

We did not consider the very strong UV flux of Herbig Ae stars, so that a direct comparison between our results and any specific object is premature. Similarly, we only considered small grains. Larger grains reduce the gas-grain interactions, thereby augmenting the conversion timescale for CO, but as pointed out by Chapillon et al. (2008), these large grains could remain cooler. Also, turbulent mixing may play a role in bringing more frequently dust in the warm region, reducing the CO deficit. Turbulent mixing has been studied by Furuya & Aikawa (2014), and found to suppress the carbon depletion only within the inner 50 au. High CO content is thus expected in the inner regions (radius perhaps up to 30–50 au only). This is consistent with the CO/H₂ ratio about 10^{-4} derived from IR measurements by France et al. (2014) for RW Aur.

5. Conclusions

We have discussed the chemistry of carbon-bearing species in protoplanetary disks using our gas-grain chemical model Nautilus. In particular, we studied the effect of the disk temperature structure on the chemistry of carbon reservoir in disks. We also studied the impact of different initial parent cloud compositions. We found that the reservoir of carbon in disks is not sensitive to initial conditions such as gas density or C/O elemental ratio of the parent molecular cloud.

However, carbon chemistry is strongly sensitive to the disk vertical temperature profile. In many of our models, we have found that the CO gas-phase abundance is lower than the canonical value of $\sim 10^{-4}$ generally assumed. Indeed, with our models, these abundances are only reached for warm disks with a midplane temperature above 30 K, at 100 and 300 au for a disk age of 1 and 5 Myr. For smaller temperatures, we found that CO is converted into other species at the surface of the grains, such as s-CO₂, for which higher freeze-out temperatures prevent their desorption back into the gas-phase. The effect is slightly less efficient at a low cosmic-ray ionization rate (down to $1.3 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$) and large radii (300 au).

Finally, our work demonstrates that CO is not a simple tracer of H₂ in protoplanetary disks, because its abundance is very sensitive to the large (dust) temperature gradients that exist there. These gradients will be very difficult to constrain with sufficient

accuracy. Given the additional complexity of isotopologue selective photodissociation and fractionation, evaluating disk masses from measurements of the CO isotopologue emission alone will remain a very challenging task.

Acknowledgements. The authors thank the French CNRS/INSU program PCMI for their partial support of this work. V.W. and F.H. research is funded by the ERC Starting Grant (3DICE, grant agreement 336474). The authors also thank the referee for suggestions which helped to improve this paper.

References

- Aikawa, Y., Umebayashi, T., Nakano, T., & Miyama, S. M. 1997, *ApJ*, **486**, L51
- Andrews, S. M., Rosenfeld, K. A., Kraus, A. L., & Wilner, D. J. 2013, *ApJ*, **771**, L29
- Ballesteros-Paredes, J., & Hartmann, L. 2007, *Rev. Mex. Astron. Astrofis.*, **43**, 123
- Barrado Y Navascués, D. 2006, *A&A*, **459**, 511
- Bary, J. S., Weintraub, D. A., Shukla, S. J., Leisenring, J. M., & Kastner, J. H. 2008, *ApJ*, **678**, 1088
- Beckwith, S. V. W., Sargent, A. I., Chini, R. S., & Guesten, R. 1990, *AJ*, **99**, 924
- Bergin, E. A., Cleaves, L. I., Gorti, U., et al. 2013, *Nature*, **493**, 644
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Mumma, M. J., & Weaver, H. A. 2004, in *The composition of cometary volatiles*, ed. G. W. Kronk (Tucson: University of Arizona Press), 391
- Brünken, S., Sipilä, O., Chambers, E. T., et al. 2014, *Nature*, **516**, 219
- Chapillon, E., Guilloteau, S., Dutrey, A., & Piétu, V. 2008, *A&A*, **488**, 565
- Chapillon, E., Parise, B., Guilloteau, S., Dutrey, A., & Wakelam, V. 2010, *A&A*, **520**, A61
- Chen, Y.-J., Chuang, K.-J., Muñoz Caro, G. M., et al. 2014, *ApJ*, **781**, 15
- Chiang, E. I., & Goldreich, P. 1997, *ApJ*, **490**, 368
- Cleaves, L. I., Adams, F. C., & Bergin, E. A. 2013, *ApJ*, **772**, 5
- Ducourant, C., Teixeira, R., Galli, P. A. B., et al. 2014, *A&A*, **563**, A121
- Dutrey, A., Guilloteau, S., Duvert, G., et al. 1996, *A&A*, **309**, 493
- Dutrey, A., Guilloteau, S., & Simon, M. 2003, *A&A*, **402**, 1003
- Favre, C., Cleaves, L. I., Bergin, E. A., Qi, C., & Blake, G. A. 2013, *ApJ*, **776**, L38
- Fayolle, E. C., Bertin, M., Romanzin, C., et al. 2011, *ApJ*, **739**, L36
- France, K., Herczeg, G. J., McJunkin, M., & Penton, S. V. 2014, *ApJ*, **794**, 160
- Furuya, K., & Aikawa, Y. 2014, *ApJ*, **790**, 97
- Garrod, R. T., & Herbst, E. 2006, *A&A*, **457**, 927
- Garrod, R. T., Wakelam, V., & Herbst, E. 2007, *A&A*, **467**, 1103
- Glover, S. C. O., & Mac Low, M.-M. 2007, *ApJ*, **659**, 1317
- Graedel, T. E., Langer, W. D., & Frerking, M. A. 1982, *ApJS*, **48**, 321
- Guilloteau, S., Dutrey, A., Piétu, V., & Boehler, Y. 2011, *A&A*, **529**, A105
- Hartmann, L., Ballesteros-Paredes, J., & Bergin, E. A. 2001, *ApJ*, **562**, 852
- Hersant, F., Wakelam, V., Dutrey, A., Guilloteau, S., & Herbst, E. 2009, *A&A*, **493**, L49
- Hincelin, U., Wakelam, V., Hersant, F., et al. 2011, *A&A*, **530**, A61
- Hollenbach, D. J., Werner, M. W., & Salpeter, E. E. 1971, *ApJ*, **163**, 165
- Hughes, A. M., Wilner, D. J., Qi, C., & Hogerheijde, M. R. 2008, *ApJ*, **678**, 1119
- Hughes, A. M., Andrews, S. M., Espaillat, C., et al. 2009, *ApJ*, **698**, 131
- Jenkins, E. B. 2009, *ApJ*, **700**, 1299
- Lee, H.-H., Herbst, E., Pineau des Forets, G., Roueff, E., & Le Bourlot, J. 1996, *A&A*, **311**, 690
- Loison, J.-C., Wakelam, V., & Hickson, K. M. 2014a, *MNRAS*, **443**, 398
- Loison, J.-C., Wakelam, V., Hickson, K. M., Bergeat, A., & Mereau, R. 2014b, *MNRAS*, **437**, 930
- Miotello, A., Bruderer, S., & van Dishoeck, E. F. 2014, *A&A*, **572**, A96
- Mouschovias, T. C., Tassis, K., & Kunz, M. W. 2006, *ApJ*, **646**, 1043
- Öberg, K. I., Fuchs, G. W., Awad, Z., et al. 2007, *ApJ*, **662**, L23
- Öberg, K. I., Garrod, R. T., van Dishoeck, E. F., & Linnartz, H. 2009a, *A&A*, **504**, 891
- Öberg, K. I., Linnartz, H., Visser, R., & van Dishoeck, E. F. 2009b, *ApJ*, **693**, 1209
- Öberg, K. I., van Dishoeck, E. F., & Linnartz, H. 2009c, *A&A*, **496**, 281
- Pagani, L., Roueff, E., & Lesaffre, P. 2011, *ApJ*, **739**, L35
- Pérez, L. M., Carpenter, J. M., Chandler, C. J., et al. 2012, *ApJ*, **760**, L17
- Piétu, V., Dutrey, A., Guilloteau, S., Chapillon, E., & Pety, J. 2006, *A&A*, **460**, L43
- Piétu, V., Dutrey, A., & Guilloteau, S. 2007, *A&A*, **467**, 163
- Reboussin, L., Wakelam, V., Guilloteau, S., & Hersant, F. 2014, *MNRAS*, **440**, 3557
- Semenov, D., Hersant, F., Wakelam, V., et al. 2010, *A&A*, **522**, A42
- Vacca, W. D., & Sandell, G. 2011, *ApJ*, **732**, 8
- Wagenblast, R., & Hartquist, T. W. 1989, *MNRAS*, **237**, 1019
- Wakelam, V., & Herbst, E. 2008, *ApJ*, **680**, 371
- Wakelam, V., Smith, I. W. M., Loison, J.-C., et al. 2013, unpublished [arXiv:1310.4350]
- Williams, J. P., & Best, W. M. J. 2014, *ApJ*, **788**, 59

A.3 Sensitive survey for ^{13}CO , CN, H_2CO , and SO in the disks of T Tauri and Herbig Ae stars
II. Stars in ρ Ophiuchi and upper Scorpius

Article publié en 2015 :
disponible dans la revue A&A
[Reboussin et al. \(2015a\)](#)

Sensitive survey for ^{13}CO , CN, H_2CO , and SO in the disks of T Tauri and Herbig Ae stars

II. Stars in ρ Ophiuchi and upper Scorpius^{*,**}

L. Reboussin^{1,2}, S. Guilloteau^{1,2}, M. Simon³, N. Grosso⁴, V. Wakelam^{1,2}, E. Di Folco^{1,2}, A. Dutrey^{1,2}, and V. Piétu⁵

¹ Univ. Bordeaux, LAB, UMR 5804, 33270 Floirac, France
e-mail: laura.reboussin@obs.u-bordeaux1.fr

² CNRS, LAB, UMR 5804, 33270 Floirac, France

³ Department of Physics and Astronomy, Stony Brook University, Stony Brook, NY 11794-3800, USA

⁴ Observatoire Astronomique de Strasbourg, Université de Strasbourg, CNRS, UMR 7550, 11 rue de l'Université, 67000 Strasbourg, France

⁵ IRAM, 300 rue de la piscine, 38406 Saint Martin d'Hères, France

Received 21 January 2015 / Accepted 30 March 2015

ABSTRACT

Aims. We attempt to determine the molecular composition of disks around young low-mass stars in the ρ Oph region and to compare our results with a similar study performed in the Taurus-Auriga region.

Methods. We used the IRAM 30 m telescope to perform a sensitive search for CN $N = 2-1$ in 29 T Tauri stars located in the ρ Oph and upper Scorpius regions. $^{13}\text{CO } J = 2-1$ is observed simultaneously to provide an indication of the level of confusion with the surrounding molecular cloud. The bandpass also contains two transitions of ortho- H_2CO , one of SO, and the $\text{C}^{17}\text{O } J = 2-1$ line, which provides complementary information on the nature of the emission.

Results. Contamination by molecular cloud in ^{13}CO and even C^{17}O is ubiquitous. The CN detection rate appears to be lower than for the Taurus region, with only four sources being detected (three are attributable to disks). H_2CO emission is found more frequently, but appears in general to be due to the surrounding cloud. The weaker emission than in Taurus may suggest that the average disk size in the ρ Oph region is smaller than in the Taurus cloud. Chemical modeling shows that the somewhat higher expected disk temperatures in ρ Oph play a direct role in decreasing the CN abundance. Warmer dust temperatures contribute to convert CN into less volatile forms.

Conclusions. In such a young region, CN is no longer a simple, sensitive tracer of disks, and observations with other tracers and at high enough resolution with ALMA are required to probe the gas disk population.

Key words. circumstellar matter – protoplanetary disks – radio lines: stars

1. Introduction

Star formation occurs in clusters that are embedded in collapsing molecular clouds (Lada & Lada 2003). The different stellar populations and properties, such as age, mass or density, can have effects on the circumstellar disk evolution, which strongly depends on the environment. In regions of high stellar density, disks can be more easily photoevaporated by the intense UV radiation (Johnstone et al. 1998). This means that the evolution of disks in the vicinity of massive stars will differ from the evolution of isolated disks (see, e.g., Mann et al. 2014). The disk structure and chemistry can therefore vary from region to region.

Circumstellar disks are the sites where planets form and their gas and dust provide the raw materials for planet building. Constraining the chemical evolution of protoplanetary disks therefore is a major challenge in understanding the planet formation process. Molecular-line emission is an important tool for deriving the disk characteristics (Dartois et al. 2003; Qi et al. 2006). Because H_2 , the most abundant molecule, cannot be

observed, we rely on lower abundance tracers, principally simple molecules, to derive those characteristics. In a previous study of ~ 45 stars in the Taurus region, we showed that CN $N = 2-1$ is a good tracer of disks because it is readily detectable in at least 50% of the observed sources (Guilloteau et al. 2013, hereafter Paper I). Contamination by molecular clouds was minimal in this line; it was found in fewer than 10% of the cases, but some sources exhibited strong lines that most likely originate from outflows rather than circumstellar disks.

However, the Taurus-Auriga area is a region of isolated star formation, and the previous result may not be applicable for other star-forming regions, either because of stellar density or more simply, because of age. We extend here our study to the ρ Oph star-forming region, which is both younger and denser than the Taurus region. We report a search for CN, ortho- H_2CO , SO, ^{13}CO , and C^{17}O emissions in 22 young stars located in the ρ Oph region and 7 stars in the upper Scorpius area. We attempt to compare these results with previous observations performed in the Taurus region (Paper I), and more particularly, the CN content in these star-forming regions.

The paper is organized as follows. The observations and data analysis are described in Sect. 2. We present the results and the source analysis in Sect. 3. In Sect. 4 we discuss the difference in molecular composition observed between the Taurus region and

* Based on observations carried out with the IRAM 30-m telescope. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany) and IGN (Spain).

** Appendix A is available in electronic form at <http://www.aanda.org>

Table 1. Source sample.

Object	α (J2000)	δ (J2000)	$S_{\nu}(3.4)$ (mJy)	$S_{\nu}(1.3)$ (mJy)	Other name	Sp Type	L_* (L_{\odot})	Mass (M_{\odot})	Age (Myr)	rms (mK)
<i>V1146 Sco</i>	15:57:20.0	-23:38:50.0				M0				28
<i>J1603-1751</i>	16:03:23.7	-17:51:42.3				M2				36
<i>AS 205A</i>	16:11:31.4	-18:38:26.0	27.2	450	HBC 254	K5	4.0			67
SR 4	16:25:56.1	-24:20:48.3	4.4	31	AS 206	K5	2.17	1.14	1.1	41
GSS 26 (*)	16:26:10.3	-24:20:54.9	24.2	125		M0	1.39	0.56	0.5	34
EL 20	16:26:18.9	-24:28:20.2	7.3	50	VSSG 1	M0	0.93	0.62	1.1	54
LFAM 1	16:26:21.7	-24:22:50.8	17.5	250						37
DoAr 24E	16:26:23.4	-24:21:00.7	8.3	70	GSS 31					35
DoAr 25	16:26:23.7	-24:43:14.1	25.0	280	WSB 29	K5	1.43	1.12	2.1	40
EL 24	16:26:24.1	-24:16:14.0	48.8	390	WSB 31	K6	2.58	0.96	0.6	38
EL 27	16:26:45.0	-24:23:08.2	38.7	300	GSS 39	M0	0.78	0.58	1.2	38
WL 18	16:26:49.0	-24:38:25.7	3.1	85	GY 129	K7	0.3			70
SR 24S	16:26:58.5	-24:45:37.1	26.6	530	HBC 262	K2	4.4			78
SR 21	16:27:10.2	-24:19:12.9	4.2	95	EL 30	G3	11.38	1.97	2.2	33
<i>J1627-2451B</i>	16:27:15.1	-24:51:38.8				M2				28
IRS 41	16:27:19.3	-24:28:44.4	6.2	<60	WL 3	K7	1.61	0.80	0.8	50
CRBR 85	16:27:24.7	-24:41:03.2	1.5	150			1.4			22
YLV 16c	16:27:26.5	-24:39:23.4	6.5	60	GY 262	M1	1.11	0.48	0.5	23
IRS 49	16:27:38.3	-24:36:58.8	4.4	25	GY 308	M0	1.02	0.64	1.0	47
DoAr 33	16:27:39.0	-23:58:19.1	3.7	40	WSB 53	K4	1.81	1.44	2.9	38
WSB 52	16:27:39.5	-24:39:15.9	10.2	51	GY 314	K5	0.95	1.04	4.2	41
IRS 51	16:27:39.8	-24:43:15.0	12.7	110	GY 315					83
Flying Saucer(*)	16:28:13.7	-24:31:39.1	3			M1	0.14			40
WSB 60	16:28:16.5	-24:36:58.0	15.3	89	YLV 58	M4	0.23	0.20	0.9	31
SR 13	16:28:45.3	-24:28:19.2	10.0	60	HBC 266					37
DoAr 44	16:31:33.5	-24:27:37.7	10.4	105	HBC 268	K3	1.55	1.29	5.1	38
<i>RNO 90</i>	16:34:09.2	-15:48:16.9	7.6	25	HBC 649	G5	10.24	1.87	2.3	31
<i>Wa Oph 6</i>	16:48:45.6	-14:16:36.0	10.3	130	HBC 653	K6	2.32	0.98	0.7	26
<i>AS 209 (*)</i>	16:49:15.3	-14:22:08.6	17.5	300	HBC 270	K5	2.11	1.18	1.2	24
<i>HD 163296 (*)</i>	17:56:21.3	-21:57:22.0				A1		2.25	5.0	50

Notes. Sources in upper Scorpius are listed in italics. Sources marked with (*) are the sources for which CN emission from disk has been detected. The epoch 2000 coordinates are adopted from SIMBAD. S_{ν} is the continuum flux at 3.4 mm and 1.3 mm. Spectral types and luminosities (given for ~ 130 pc) are taken from Ricci et al. (2010) except for AS 205A (Bast et al. 2011), WL 18 (Andrews et al. 2010), SR 24S (Andrews et al. 2010), CRBR 85 (Pontoppidan et al. 2005), and the Flying Saucer (Grosso et al. 2003). Masses and ages are derived from the tracks reported in Palla & Stahler (1999) using the luminosities and effective temperatures from Ricci et al. (2010).

that of ρ Oph. We conclude in Sect. 5. Appendix A displays all the observed spectra.

2. Observations and data analysis

2.1. Source sample

Table 1 lists the 30 stars involved in this study. HD 163296, an isolated HAe star, was used for calibration purposes. Our main objective was to search for potential targets for the stellar mass determination, to test models of early stellar evolution. Hence, our sample is biased toward late spectral types.

The overall sample covers a wide range of spectral types (from M4 to A1), luminosities (from 0.2 to $12 L_{\odot}$), and 1.3 mm continuum flux densities (from <4 to ~ 800 mJy), but is not complete with respect to these quantities. No specific account of extinction and location with respect to molecular clouds was made when we selected the sources. Sources with outflows were deliberately included. The distribution of sources is displayed in Fig. 1, which shows the location of the studied sources overlaid on an extinction map. Of these 30 stars, 22 are located in the ρ Oph star-forming region, for which a reliable distance, 120 pc^1 ,

¹ However, Loainard et al. (2008b) reported for the two stars WL 5 and VSSG 14 (located near IRS 41) preliminary measurements indicating a distance of ~ 165 pc.

based on VLBI astrometry (Loainard et al. 2008a) or optical extinction (Knude & Hog 1998), is available. The distances to the other 8 stars might lie in the range 120 to 170 pc (Loainard et al. 2008b; de Geus et al. 1989); we assume 160 pc hereafter. We report our observations of these stars, but cannot reliably analyze them in terms of stellar luminosity and mass.

2.2. Observations

Observations were carried out with the IRAM 30 m radiotelescope on October 12–13, 2012, and from August 8–14, 2013. The weather conditions were quite varied, with water vapor content changing from 3 mm on good nights to 6–7 mm on others. Given the low elevation of the sources (mostly below 25°), this resulted in single-sideband system temperatures ranging from 350 K to about 1000 K, with averaged values between 400 K and 600 K for most sources. However, pointing conditions were good.

A few strong lines of SO, SO₂, and SO⁺ found in one of the sources allowed us to check the sideband rejection, which was found to be around 13 dB. All observations were made at relatively low but constant elevation. We thus did not apply any gain-elevation curve correction and used a simple uniform conversion factor from antenna temperature (T_A^*) to flux density of $J_K = 9 \text{ Jy/K}$. A comparison with previous observations on

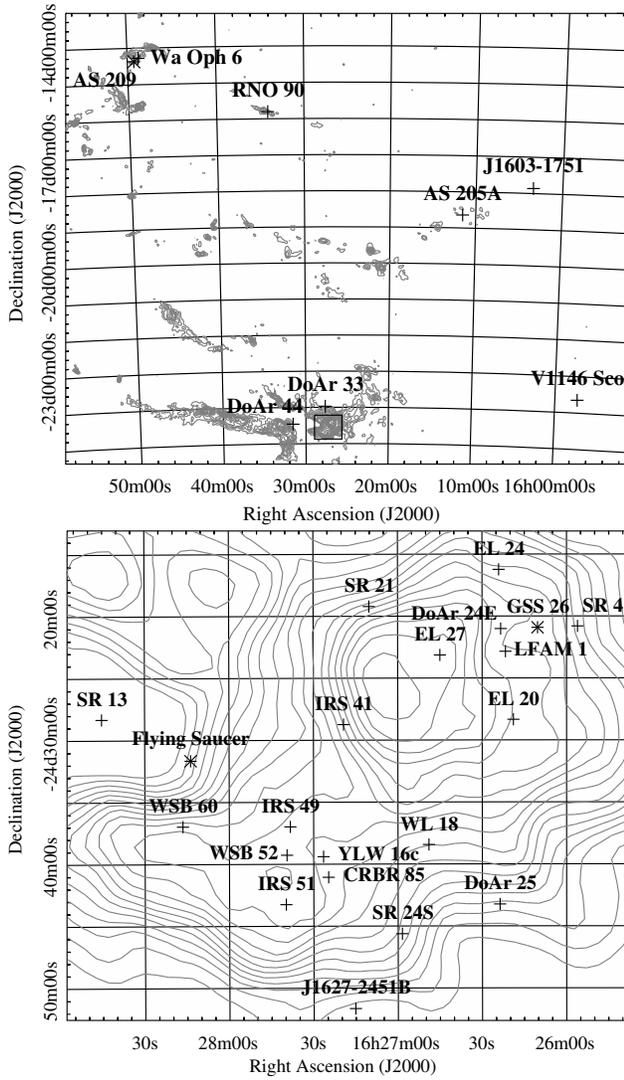


Fig. 1. Extinction maps of the ρ -Oph star-forming region (based on the 2MASS PSC Dobashi et al. 2013), contours from 1 to 18 mag in steps of 1 mag. The bottom map is a zoom on the area in which most sources are located (black square in the top map). Asterisks are sources with CN detection.

HD 163296 (Paper I) suggests that our calibration is accurate within 10%.

The observations were performed in symmetric wobbler-switching mode, with the two references $\pm 60''$ away at the same elevation. The weather conditions were stable enough to provide flat baselines.

As the system temperature varied much from day to day, we observed the sample of 30 sources (see Table 1) for integration times varying between 1 and 8 h. The resulting sensitivity at the nominal resolution of $\delta V \approx 0.26 \text{ km s}^{-1}$ is given in Table 1 (rms column). For a typical line width of $\Delta V = 3 \text{ km s}^{-1}$, the corresponding 1σ error on the integrated line flux can be obtained by multiplying this number by $J_K = \sqrt{\Delta V \delta V} \approx 8 \text{ Jy km s}^{-1}/\text{K}$. Our survey depth is thus ranging between 0.18 to $0.65 \text{ Jy km s}^{-1}$, with a typical value of 0.3 Jy km s^{-1} .

2.3. Data analysis

We applied the same analysis procedure as in Paper I, removing linear baselines in a window $\pm 60 \text{ km s}^{-1}$ wide around each spectral line, and fitting Gaussian profiles to detect lines, with proper account for the hyperfine structure of CN and C^{17}O .

The two transitions of ortho- H_2CO differ only by the small K splitting, with the 211.2 GHz line on average 20% stronger than the 225.2 GHz line. We computed an average H_2CO spectrum and line intensity using this ratio.

3. Results

As described in Paper I, line emission from these objects can come a priori from four distinct regions: molecular cloud(s) along the line of sight, the circumstellar disk, a molecular outflow, and (especially for the youngest objects) a remnant envelope. A molecular cloud will exhibit narrow lines, and because of our observing technique, which differentiates the emission from that $\pm 1'$ away, may appear in emission or absorption. Disks should lead to symmetric, in general double-peaked, line profiles, and line widths $\propto \sin i$ (with typical values $2\text{--}4 \text{ km s}^{-1}$, face-on objects being rare). Contribution from outflows, envelopes, or molecular clouds may vary considerably and may be difficult to distinguish from disk emission, so that our results can be dominated by contamination.

Figure 2 shows the spectra toward the two illustrative sources CRBR 85 and the Flying Saucer, an edge-on disk at the periphery of ρ Oph (Grosso et al. 2003). Spectra for all other sources are presented in Appendix A.

The ^{13}CO results are completely dominated by contamination. Only four sources show no obvious sign of contamination: AS 205, J1603-1751, DoAr 44, and V1146 Sco. No disk component can be fit to the observed profiles, except for the already known case of the isolated H Ae star HD 163296.

Even in $\text{C}^{17}\text{O } J = 2\text{--}1$, contamination exists, with negative signals in IRS 41, IRS 49, El 20, SR 21, El 24, El 27, and WSB 60, and strong emission toward CRBR 85, LFAM 1, YLW 16c, and GSS 26. We have a weak detection in HD 1632926 (see below).

On the other hand, CN emission is extremely rare. The only emissions that can be attributed to disks are from HD 163296, AS 209, the Flying Saucer (see Fig. 2), and perhaps GSS 26. Our line flux for AS 209 is slightly lower than that reported from SMA observations by Öberg et al. (2011), probably as a result of contamination, and we also detect the second group of hyperfine components that was below the sensitivity threshold for the SMA. We have clear evidence of cloud contamination in DoAR 24E, LFAM 1, because of negative features, and in CRBR 85. In the latter case (Fig. 2), the spectrum is the superposition of a very narrow component, with highly anomalous hyperfine ratios, and a broader component that may be due to an underlying disk. The case of IRS 41 remains unclear: there is some CN emission ($1.1 \pm 0.3 \text{ Jy km s}^{-1}$), but relatively narrow, $\sim 0.9 \text{ km s}^{-1}$, and at a velocity where C^{17}O shows residual contamination. Line parameters for the detected sources are indicated in Table 2.

For H_2CO , contamination also seems to be rather widespread: negative signals are observed in El 20, SR 21, SR 4, El 27, DoAr 24E, and LFAM 1. Positive signals are detected in GSS 26, WSB 60, El 24, YLW 16c, and CRBR 85. This is a ratio of 11 to 29 sources.

SO is rare: there is strong emission in LFAM 1, and a strong negative signal in IRS 41, but nothing elsewhere.

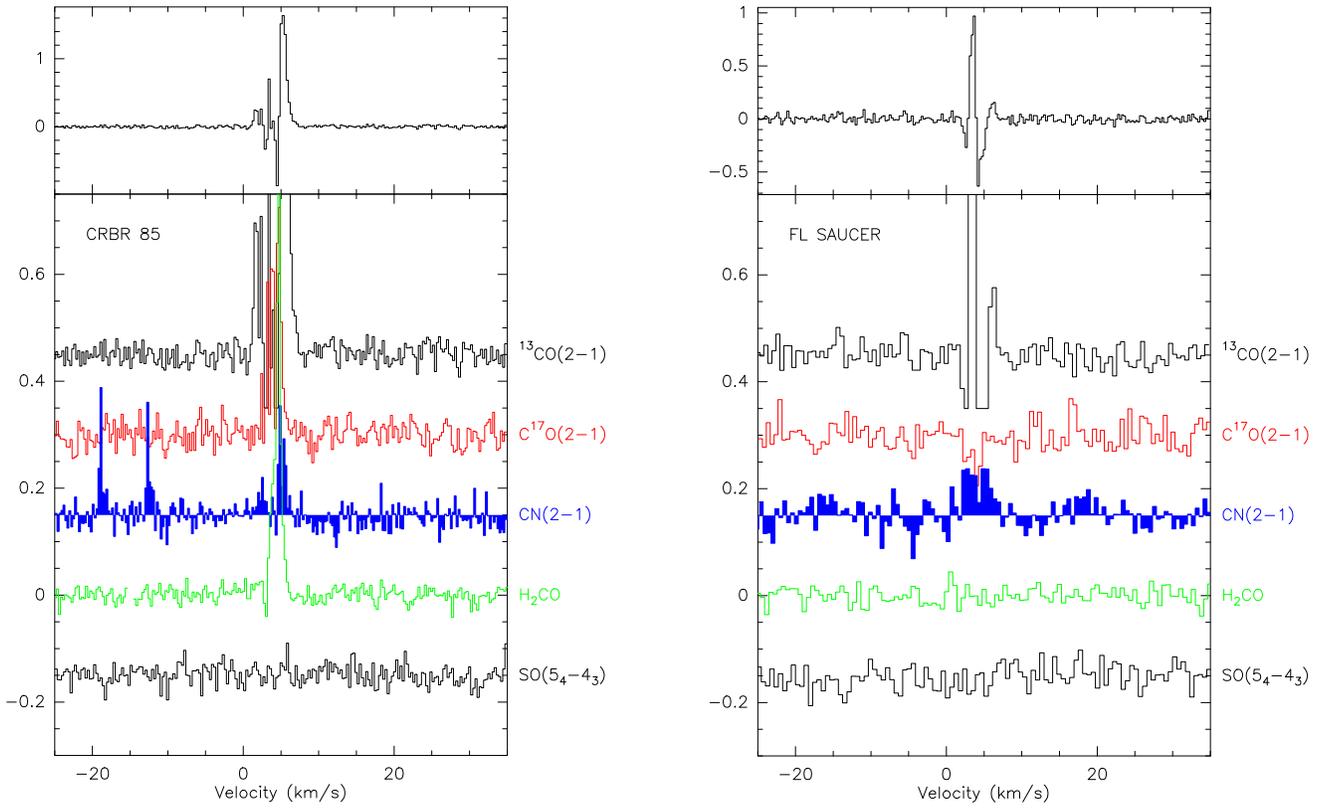


Fig. 2. Lines toward CRBR 85 and the Flying Saucer. *Top panel:* $^{13}\text{CO } J = 2-1$ spectrum. *Bottom panel, from top to bottom:* $^{13}\text{CO } J = 2-1$, $\text{C}^{17}\text{O } J = 2-1$, $\text{CN } N = 2-1$, the average of both $\text{o-H}_2\text{CO}$ transitions, and $\text{SO } 5_4-4_3$, shifted in intensity by multiples of 0.15 K to avoid overlap. The intensity scale is the antenna temperature (T_A^* in K): conversion to flux density can be obtained using a factor of 9 Jy/K. The spectral resolution is 0.26 km s^{-1} . For the Flying Saucer, the *bottom panel* spectra has been smoothed by a factor 2 for better clarity.

Table 2. Detected CN emission.

Source name	Line flux (Jy km s^{-1})	Velocity (km s^{-1})	Width (km s^{-1})
AS 209	2.1 ± 0.3	4.5 ± 0.4	4.2 ± 0.7
GSS 26	2.2 ± 0.3	4.0 ± 0.2	2.2 ± 0.4
IRS 41	1.5 ± 0.3	5.5 ± 0.1	0.9 ± 0.2
CRBR 85	≈ 2.5	see Fig. 2	
Flying Saucer	3.4 ± 0.5	4.1 ± 0.3	4.1 ± 0.6

Notes. CN line parameters for the detected sources.

3.1. Specific objects

HD 163296. Although only included here as a calibration source, we note that we have a 5σ detection of C^{17}O , with a total line flux of $4.3 \pm 0.9 \text{ Jy km s}^{-1}$. The CN and ^{13}CO line fluxes are consistent with previous measurements, indicating good calibration.

GSS 26. This is one of the possible new disk detections in CN. The line width, however, is very narrow, $0.75 \pm 0.12 \text{ km s}^{-1}$, and is in fact consistent with that derived from H_2CO lines, $0.63 \pm 0.06 \text{ km s}^{-1}$, although the systemic velocity differs slightly (3.81 ± 0.06 vs. $3.43 \pm 0.03 \text{ km s}^{-1}$). Either this is a disk seen nearly face-on, or the detected lines are residual contamination by the surroundings, as may be suggested by the rather strong C^{17}O emission.

CRBR 85. The spectra of CRBR 85 (also known as CRBR 2422.8-3423, see [Comeron et al. 1993](#); [Pontoppidan et al. 2005](#)), clearly show two components: a very narrow component ($\Delta V \sim 0.5 \text{ km s}^{-1}$) superimposed on a broader emission ($\Delta V \sim 1.5-2 \text{ km s}^{-1}$). The narrow component exhibits very unusual hyperfine ratios for CN $N = 2-1$, which, if interpreted as saturation, would indicate very high opacities. However, they are most likely the result of our differential observation technique in a cloud extending over 2 arcmin that is nearly opaque in the strongest hyperfine components, as for CW Tau in Paper I.

The broad component may be attributable to disk or envelope emission. As CRBR 85 is a highly inclined, embedded object, the limited linewidth indicates a very low mass star if this emission comes from a disk. The other possibility is emission from a larger distance, that is, from the envelope. The low line flux would then indicate low excitation, since the detection of weak hyperfine components indicates substantial opacity. Note, however, that the main group of hyperfine components may be seriously affected by absorption or contamination due to the narrow component, which would result in higher apparent opacities than in reality.

LFAM 1. Also known as GSS 30 IRS 3, this is a strong radio source with emission at 6 cm ([Leous et al. 1991](#)). This source is classified as a Class I source ([Bontemps et al. 2001](#)). The spectra in this direction are very unusual. We have strong emission from SO and SO_2 , but also the ion SO^+ , as well as several isotopologues of SO and SO_2 . H_2CO is quite bright, and CN shows

a negative feature that indicates contamination by a molecular cloud. S-bearing molecules are in general enhanced in shocks. In fact, SO^+ is a clear indicator of shock chemistry (Turner 1992), predicted to be abundant in dissociative shocks (Neufeld & Dalgarno 1989), and has recently been detected in the jet-driven outflow of L1157 (Podio et al. 2014). The unusual spectrum of LFAM 1 therefore probably indicates an outflow from a very young object. Another possibility is some contribution from an outflow driven by GSS 30 IRS 1 because LFAM 1 is located $15''$ to the northeast of this Class I source, on the edge of its extended V-shaped nebula (see Fig. 8 of Allen et al. 2002), typical of a large outflow cavity.

YLW 16c. This source is the only one clearly showing the double-peaked spectrum expected from Keplerian rotation in one molecule, here in H_2CO . However, the $\text{H}_2\text{CO}/\text{CN}$ ratio is high. In Paper I, we only had strong H_2CO emission and/or high $\text{H}_2\text{CO}/\text{CN}$ ratio from sources with outflows, or relatively massive stars, while YLW 16c is of spectral type M1.

4. Discussion

4.1. ρ Ophiuchi and Taurus: two different regions

The properties of sources in ρ Oph look very different from those in Taurus-Auriga: only two potential disk detections in CN (GSS 26, Flying Saucer), plus perhaps CRBR 85 and one source in SO (LFAM 1) out of 22 sources. In Taurus, there are 21 disks detected in CN (this number excludes the sources that also have SO emission of unknown origin) out of 46 sources, and 8 sources emitting in SO out of 41.

Our survey depth ranges between 0.18 to $0.65 \text{ Jy km s}^{-1}$, with a median value of $0.32 \text{ Jy km s}^{-1}$, a mean of 0.36 , and a dispersion of 0.17 . Rescaled to the same distance (i.e., corrected by a factor $(120/140)^2$), the Taurus observations of Paper I reached a median sensitivity of $0.20 \text{ Jy km s}^{-1}$ (mean 0.25) with a dispersion of 0.17 . There is thus a typical factor of 1.5 in sensitivity.

However, this does not appear to be the cause of the large apparent difference in detection statistics between the two regions. Figure 3 shows the CN line intensity vs. the 1.3 mm continuum flux (rescaled to a common distance of 120 pc) for both regions. Red indicates that CN has been detected. The Taurus region exhibited a high disk detection rate ($>50\%$), whereas only three or four sources have been detected in the ρ Oph region. Furthermore, the population of bright disks found in Taurus has not been detected in our ρ Oph study.

We also performed a more detailed study of the CN flux density distribution in both regions. We applied a statistical treatment to our data that takes upper limits into account. We used the Kaplan-Meier estimator, which provides a maximum likelihood distribution for a randomly censored dataset. A part of our data being limited (upper limits), this estimator allows us to estimate the fraction of sources for which the flux is below (or above) a given value. The details about this method can be found in Feigelson & Nelson (1985). This estimator only requires that the censoring be random, which is the case in our samples since we have considered sources lying at different distances. We computed the Kaplan-Meier estimator for detections and nondetections (upper limits) for both samples. The results are displayed in Fig. 4. The distributions show the probability that a given source in our sample has a CN flux higher than the abscissa value. The difference between the two samples is large: for the Taurus region, the median value for the flux is $\sim 0.8 \text{ Jy km s}^{-1}$, whereas

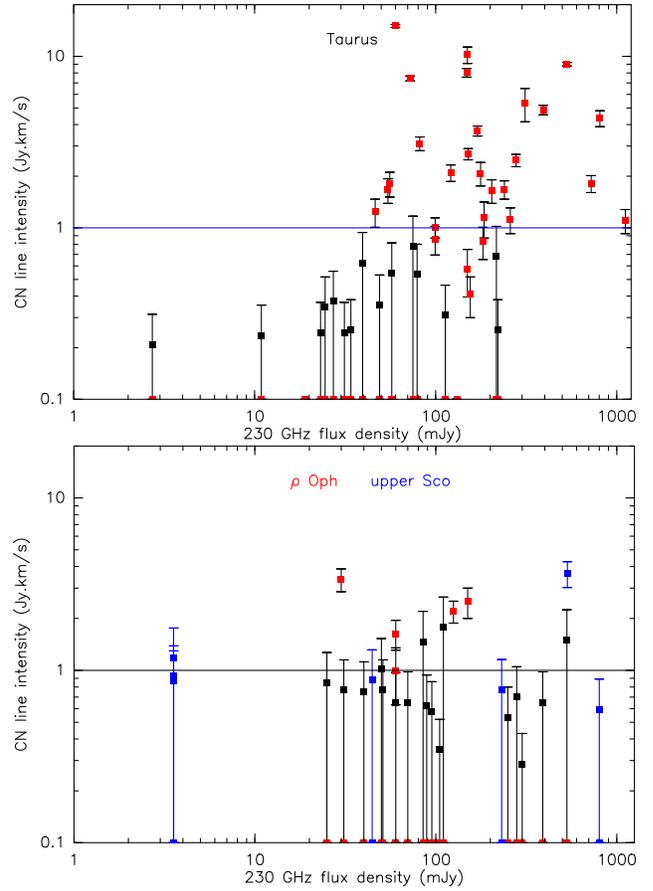


Fig. 3. CN line intensities vs 1.3 mm continuum flux. Red dots highlight detected sources in ρ Oph and Taurus, while blue is for sources in upper Scorpius. All fluxes have been rescaled to a distance of 120 pc .

this value is about twice lower for the ρ Oph sample. Only 20% of the sources have a flux higher than 1 Jy km s^{-1} in ρ Oph, whereas the sources in Taurus are much brighter since 40% of the sources have a flux higher than 1 Jy km s^{-1} .

4.2. Possible cause of these differences

The CN disk detection rate clearly is much lower in the ρ Oph region than in the Taurus region. Furthermore, we observed a lack of bright sources in ρ Oph. We discuss in this section some hypotheses that might explain the differences between the two regions.

Different stellar properties (sample bias)? As discussed in Sect. 2.1, the two samples were not built using the same criteria. Unlike the Taurus sample, which included a variety of stars from spectral type M4 to A0, our ρ Oph sample mostly includes stars in the M2-K3 range and has no warm star (only one G5 and one G3). However, CN is most easily detected precisely in this M2-K3 range in Taurus sources (Paper I). If we restrict the Taurus sample to these spectral types, the difference between ρ Oph and Taurus is even more striking.

Contamination? Might contamination be the only cause of the difference? While it is obviously stronger in this region, this

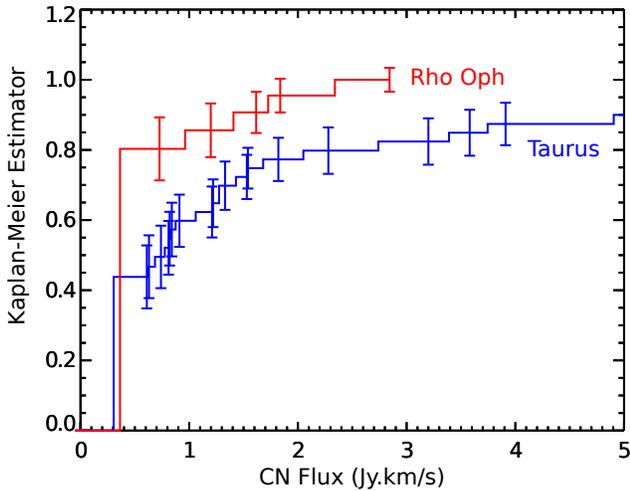


Fig. 4. Cumulative flux density distribution for CN emission in Taurus (blue line) and ρ Oph (red line), constructed using the Kaplan-Meier estimator to include upper limits and scaled to a common distance ($d = 120$ pc). The sample size are 46 stars for Taurus (Paper I) and 22 stars for ρ Oph.

looks very unlikely. Contamination by clouds is best traced by H_2CO and C^{17}O , which always show very narrow lines. Such narrow lines would not have prevented a detection of the wider lines coming from Keplerian disks in CN.

Smaller disks? In Paper I, we suggested that CN surface densities were essentially constant (except in the warmer sources). Under this assumption, which was substantiated by chemical modelling (Chapillon et al. 2012), the CN line flux provides a nearly direct measure of the disk size. The apparent radii derived from the line flux under this simple hypothesis agreed well with interferometric determination in Taurus. With the same assumptions, the measured flux densities indicate here that we have detected three disks with outer radii 500–600 au (GSS 26, AS 209, and the Flying Saucer), have 3σ upper limits around 500 au for three other sources (WL 18, SR 24S and IRS 51), and that most sources are smaller than 320 au, with only one putative disk at 450 au, IRS 41.

The smaller size observed here may be due to the source ages, disks in ρ Oph being younger and therefore having less time to spread by viscous effects. Making this statement quantitative is difficult, however, because the age difference between ρ Oph (age < 1 Myr Luhman & Rieke 1999) and Taurus (~ 1 Myr, but with sources up to a few Myr Luhman et al. 2003) is not well known. In the framework of self-similar viscously spreading disks (Lynden-Bell & Pringle 1974), the disk radius evolves with time as $T^{1/(2-\gamma)}$, where γ is the radial exponent of the viscosity and $T = 1 + t_*/t_s$, t_* being the disk age and t_s the viscous timescale. The classical α disk prescription yields $\gamma = 3/2 - q$, where q is the radial exponent of the temperature law, thus $\gamma \sim 1$ as $q \sim 0.5$ for typical disks (see, e.g., Guilloteau et al. 2011, for derivations). Viscous timescales are unfortunately poorly known. Given all uncertainties, it is possible that viscous spreading in disks located in the Taurus region produces disk sizes larger by 1.2 to 2 times than those in ρ Oph. Even a limited size difference might be sufficient to explain the observed distribution: according to Fig. 4, 80% of the sample sources have a flux below 1 Jy km s^{-1} in ρ Oph, while for Taurus this is obtained for $2\text{--}3 \text{ Jy km s}^{-1}$, which means that radii differing by

$1.4\text{--}1.7$ could bring the two distributions to agree reasonably well. ρ Oph would still lack the brighter sources found in Taurus, but these are presumably outflows, not disks.

The smaller size might also be a result of initial conditions linked to the more crowded environment in ρ Oph, an effect that is known to affect the size of the protostellar envelopes (Motte et al. 1998). The missing protostellar material at large distances is the one with the highest angular momentum, which means that disks may be born smaller in ρ Oph.

Different CN chemistry? The intrinsic differences in disk properties between ρ Oph and Taurus can affect the CN chemistry and invalidate the assumption of similar CN surface densities, however. Because ρ Oph is younger, the stars are brighter: from evolutionary tracks, a factor of about $2\text{--}3$ in luminosities for stars between 1 and 3 Myr is expected. This in turn should lead to a factor $(2\text{--}3)^{1/4} = 1.2\text{--}1.3$ in disk temperature at the same radius. Moreover, disks are not at chemical equilibrium, therefore age matters. In the next section, we present the results we obtained with our chemical model that evaluates the importance of these effects.

4.3. Impact of the chemistry

We used the Nautilus gas-grain model described in Semenov et al. (2010) and Reboussin et al. (2014). Nautilus computes the abundance of species as a function of time in the gas phase and at the surface of the grains. The chemical network contains 8624 reactions: 6844 are pure gas-phase reactions, 1780 are grain-surface and gas-grain interactions. The gas-phase network used for this work is the same as described in Reboussin et al. (2014). The full network is available on the KIDA (KINetic Database for Astrochemistry) website². The dust grains are represented by spherical particles with a radius of $0.1 \mu\text{m}$ and are made of amorphous olivine. The gas and dust temperatures were assumed to be the same, and we used a dust-to-gas mass ratio of 0.01. To obtain the initial chemical composition of the disk, we first computed the chemical composition of the parent molecular cloud. We ran Nautilus during 10^6 yr for typical dense cloud conditions: a gas density of $2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$, a temperature of 10 K, a visual extinction of 10, a cosmic ray ionization rate of $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$, and a C/O ratio of 0.5. The elemental abundances used for this work are listed in Reboussin et al. (2014, see Table 1 of their paper), except for the oxygen elemental abundance, for which we considered the value 3.3×10^{-4} (a low-depletion case). For the disk physical parameters, we used the parametric disk model described in Hersant et al. (2009) except for the vertical temperature profile, which is based on Williams & Best (2014). The model corresponds to a disk mass of $0.03 M_\odot$ with a $1/r^{1.5}$ surface density profile out to $r = 700$ au. The disk mid-plane temperature was used as a free parameter. The abundances of chemical species in the disk were calculated up to 5×10^6 yr.

Figure 5 shows the CN column densities as a function of the disk midplane temperature at a radius of 300 au, at three different disk ages and for two different temperature profiles (small or strong vertical gradient). Overall, the CN column density decreases as the temperature increases and even reaches values well below any detectable levels (down to a few 10^{11} cm^{-2}) at temperatures above 40 K in the disk midplane. With the 30 m radiotelescope, our detection limit is around $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ for a disk of 400 au radius for a detection level of 1 Jy km s^{-1} . This

² <http://kida.obs.u-bordeaux1.fr/models>

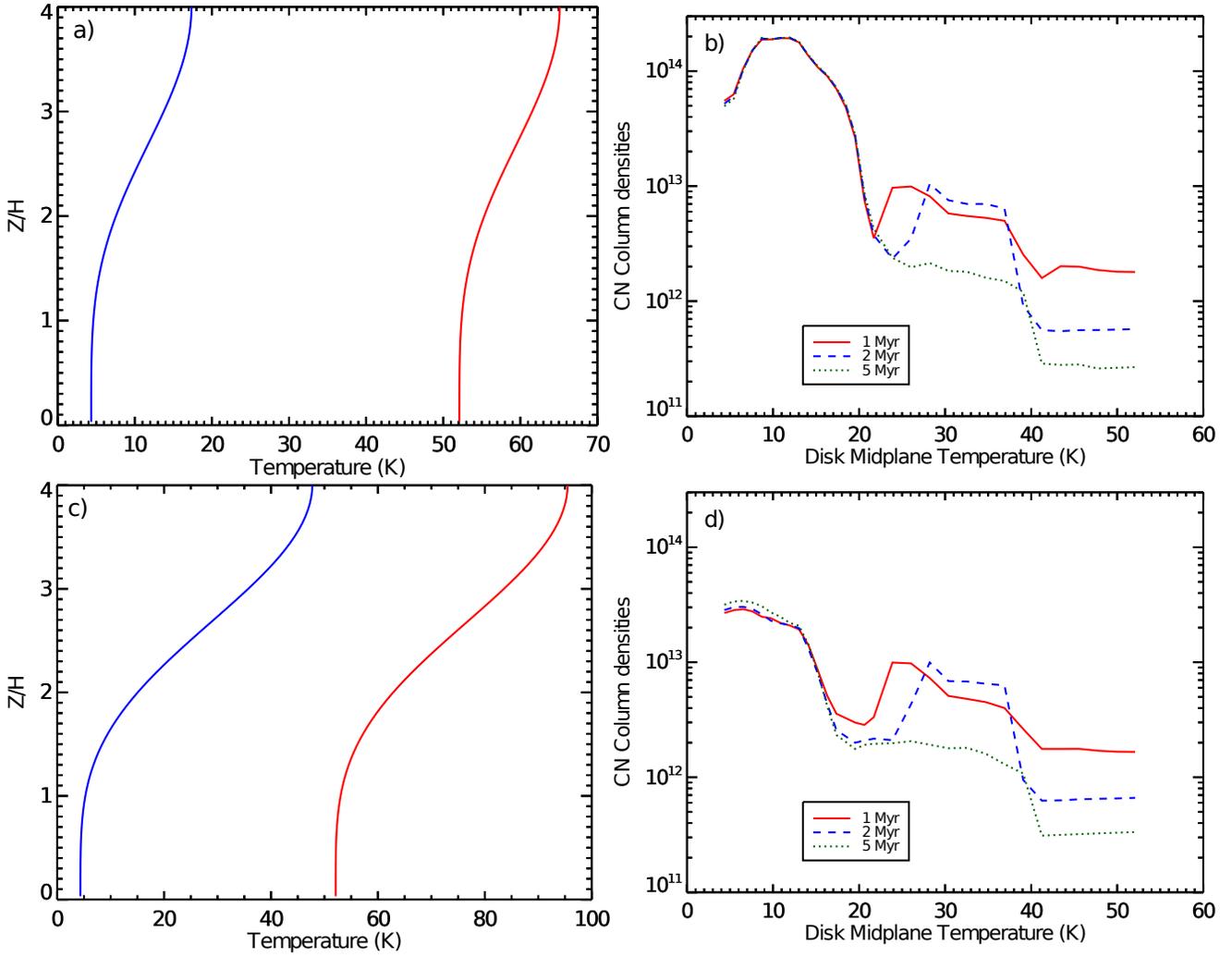


Fig. 5. Panel a): two extreme temperature profiles at 300 au for a weak temperature gradient, and corresponding CN column density as a function of the disk midplane temperature for three different ages: 1, 2, and 5 Myr are shown in panel b). Panels c), d): as a), b), but for a strong temperature gradient.

value does not vary much with the temperature. The temperature dependence is complex and non-monotonic because the dominant reaction routes for CN change with temperature. The gas-phase CN abundance is mostly affected by grain-surface chemistry: at higher temperatures, the diffusion of the species at the surface of the grain is much more efficient, which contributes to convert molecules on grains into less volatile forms. As this conversion process is relatively slow, the temperature dependence is more pronounced at later ages. The difference between the two temperature profiles is quite small at high temperatures, but for very low temperatures (below 15 K), the CN column density is lower when we use a strong temperature gradient. These results agree with the observations obtained in Paper I, in which CN was undetectable in most warm sources. As mentioned before, all these simulations were performed considering the same temperature for the gas and dust. Models in which these two quantities differ indicate that the decisive factor for CN chemistry is the dust temperature. Figure 5 also shows that the 20–30% higher temperature of disks in ρ Oph is sufficient to affect the CN surface density by a factor of a few, except for very low temperatures (below 10 K). Similar differences exist as a function of disk ages for disk temperatures above 15 K.

5. Conclusions

We have performed a sensitive survey of 29 young stars in the ρ Oph and upper Scorpius regions in CN, ortho- H_2CO , SO, ^{13}CO , and C^{17}O rotational lines near 206–228 GHz with the IRAM 30 m telescope. Compared to a similar study performed for the isolated star formation region Taurus-Auriga, the detection rate of CN is much lower in the ρ Oph region.

This result may indicate that disks in the ρ Oph region are on average smaller than those in the Taurus-Auriga complex, perhaps because they have not spread out sufficiently by viscous diffusion, or as a result of initial truncation of their parental protostellar condensation.

However, the CN chemistry is shown to be sensitive to disk temperature, so that a direct comparison of the disk properties would require resolving the disks out instead of relying on the good correlation between CN flux and disk radii previously found in the Taurus region. Interferometric observations are required for this purpose.

Finally, these results show that even large single-dish telescopes are severely limited in identifying disks around embedded young stars because of contamination, but also because of

sensitivity. Disks smaller than about 300 au, which represent 50% of the disks in the sample studied by [Guilloteau et al. \(2013\)](#) in the Taurus region, are beyond the sensitivity limit of even the largest telescope operating at 1.3 mm, the IRAM 30 m. Only ALMA is sensitive enough in the southern hemisphere to detect a substantial fraction of the gas disk population.

Acknowledgements. We acknowledge all the 30 m IRAM staff for their help during the observations. This work was supported by “Programme National de Physique Stellaire” (PNPS) and “Programme National de Physique Chimie du Milieu Interstellaire” (PCMI) from INSU/CNRS. The work of M.S. was supported in part by NSF grant AST 09-07745. This research has made use of the SIMBAD database, operated at CDS, Strasbourg, France. V.W.’s research work is funded by the ERC Starting Grant (3DICE, grant agreement 336474).

References

- Allen, L. E., Myers, P. C., Di Francesco, J., et al. 2002, *ApJ*, **566**, 993
- Andrews, S. M., Wilner, D. J., Hughes, A. M., Qi, C., & Dullemond, C. P. 2010, *ApJ*, **723**, 1241
- Bast, J. E., Brown, J. M., Herczeg, G. J., van Dishoeck, E. F., & Pontoppidan, K. M. 2011, *A&A*, **527**, A119
- Bontemps, S., André, P., Kaas, A. A., et al. 2001, *A&A*, **372**, 173
- Chapillon, E., Guilloteau, S., Dutrey, A., Piétu, V., & Guélin, M. 2012, *A&A*, **537**, A60
- Comeron, F., Rieke, G. H., Burrows, A., & Rieke, M. J. 1993, *ApJ*, **416**, 185
- Dartois, E., Dutrey, A., & Guilloteau, S. 2003, *A&A*, **399**, 773
- de Geus, E. J., de Zeeuw, P. T., & Lub, J. 1989, *A&A*, **216**, 44
- Dobashi, K., Marshall, D. J., Shimoikura, T., & Bernard, J.-P. 2013, *PASJ*, **65**, 31
- Feigelson, E. D., & Nelson, P. I. 1985, *ApJ*, **293**, 192
- Grosso, N., Alves, J., Wood, K., et al. 2003, *ApJ*, **586**, 296
- Guilloteau, S., Dutrey, A., Piétu, V., & Boehler, Y. 2011, *A&A*, **529**, A105
- Guilloteau, S., Di Folco, E., Dutrey, A., et al. 2013, *A&A*, **549**, A92
- Hersant, F., Wakelam, V., Dutrey, A., Guilloteau, S., & Herbst, E. 2009, *A&A*, **493**, L49
- Johnstone, D., Hollenbach, D., & Bally, J. 1998, *ApJ*, **499**, 758
- Knude, J., & Hog, E. 1998, *A&A*, **338**, 897
- Lada, C. J., & Lada, E. A. 2003, *ARA&A*, **41**, 57
- Leous, J. A., Feigelson, E. D., Andre, P., & Montmerle, T. 1991, *ApJ*, **379**, 683
- Loinard, L., Torres, R. M., Mioduszewski, A. J., & Rodríguez, L. F. 2008a, *ApJ*, **675**, L29
- Loinard, L., Torres, R. M., Mioduszewski, A. J., & Rodríguez, L. F. 2008b, in *IAU Symp.*, 248, eds. W. J. Jin, I. Platais, & M. A. C. Perryman, 186
- Luhman, K. L., & Rieke, G. H. 1999, *ApJ*, **525**, 440
- Luhman, K. L., Stauffer, J. R., Muench, A. A., et al. 2003, *ApJ*, **593**, 1093
- Lynden-Bell, D., & Pringle, J. E. 1974, *MNRAS*, **168**, 603
- Mann, R. K., Di Francesco, J., Johnstone, D., et al. 2014, *ApJ*, **784**, 82
- Motte, F., André, P., & Neri, R. 1998, *A&A*, **336**, 150
- Neufeld, D. A., & Dalgarno, A. 1989, *ApJ*, **340**, 869
- Öberg, K. I., Qi, C., Fogel, J. K. J., et al. 2011, *ApJ*, **734**, 98
- Palla, F., & Stahler, S. W. 1999, *ApJ*, **525**, 772
- Podio, L., Lefloch, B., Ceccarelli, C., Codella, C., & Bachiller, R. 2014, *A&A*, **565**, A64
- Pontoppidan, K. M., Dullemond, C. P., van Dishoeck, E. F., et al. 2005, *ApJ*, **622**, 463
- Qi, C., Wilner, D. J., Calvet, N., et al. 2006, *ApJ*, **636**, L157
- Reboussin, L., Wakelam, V., Guilloteau, S., & Hersant, F. 2014, *MNRAS*, **440**, 3557
- Ricci, L., Testi, L., Natta, A., & Brooks, K. J. 2010, *A&A*, **521**, A66
- Semenov, D., Hersant, F., Wakelam, V., et al. 2010, *A&A*, **522**, A42
- Turner, B. E. 1992, *ApJ*, **396**, L107
- Williams, J. P., & Best, W. M. J. 2014, *ApJ*, **788**, 59

Appendix A: Spectra for individual sources

This appendix displays the spectra toward the various sources (in the same order as listed in Table 1). For each source, the top panel shows the $^{13}\text{CO } J = 2-1$ spectrum. The bottom panel displays on a common scale from top to bottom the spectra of $^{13}\text{CO } J = 2-1$ (with fit as in top panel), $\text{C}^{17}\text{O } J = 2-1$, $\text{CN } N = 2-1$, the average of both $\text{o-H}_2\text{CO}$ transitions, and $\text{SO } 5_4 - 4_3$, shifted in intensity by multiples of 0.15 K to avoid overlap. The intensity scale is the antenna temperature (T_{A}^* in K): a conversion to flux density can be obtained using a factor of 9 Jy/K.

The spectral resolution is 0.26 km s^{-1} in the upper panel, while the other spectra have been smoothed by a factor 1, 2, or 4 for better clarity.

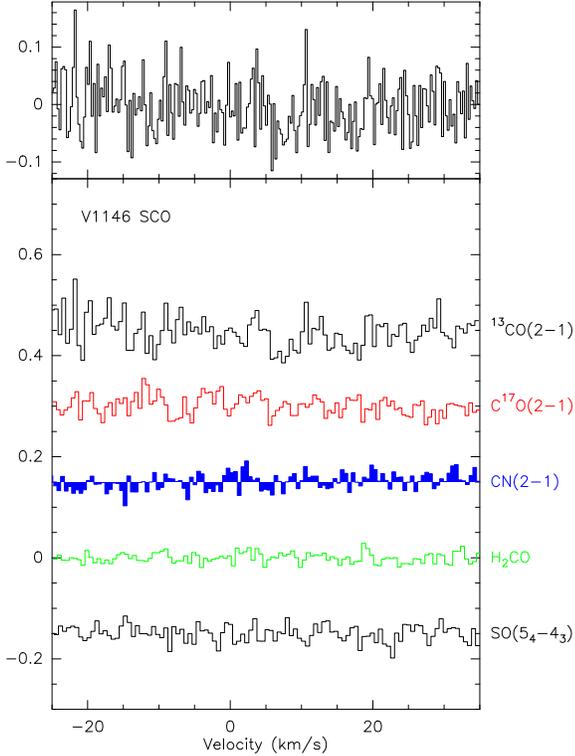


Fig. A.1. Lines toward V1146 Sco.

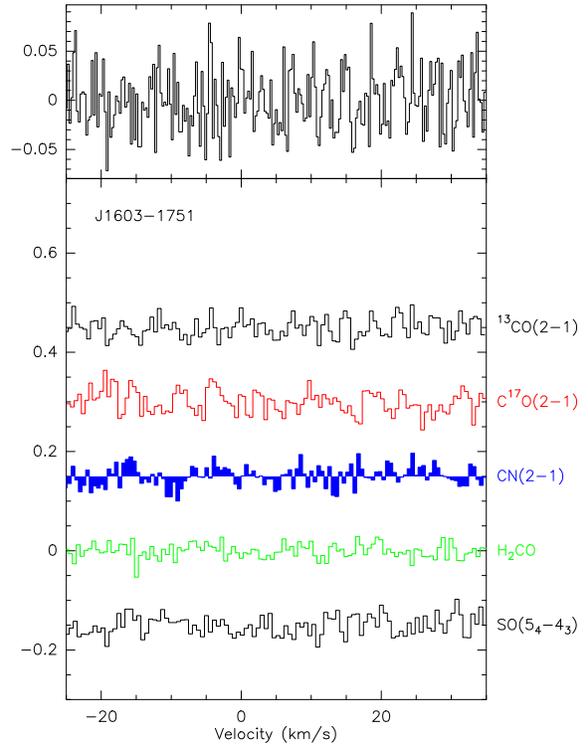


Fig. A.2. Lines toward J1603-1751.

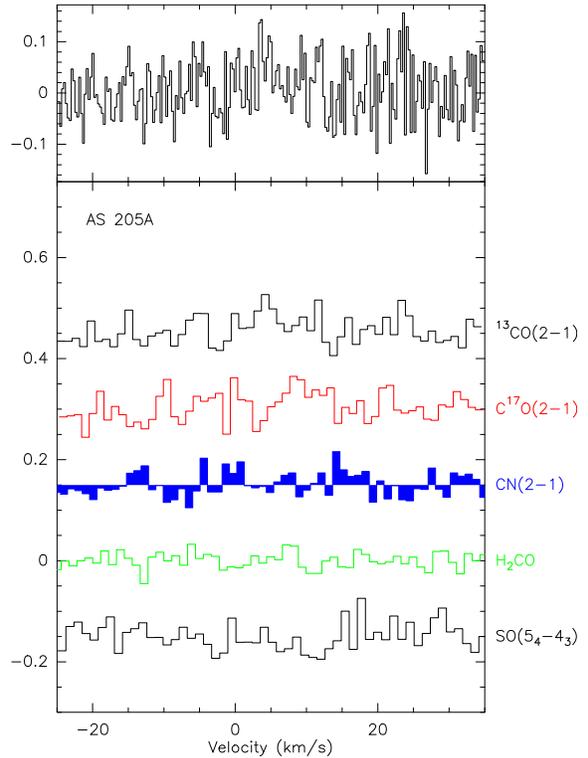


Fig. A.3. Lines toward AS 205A.

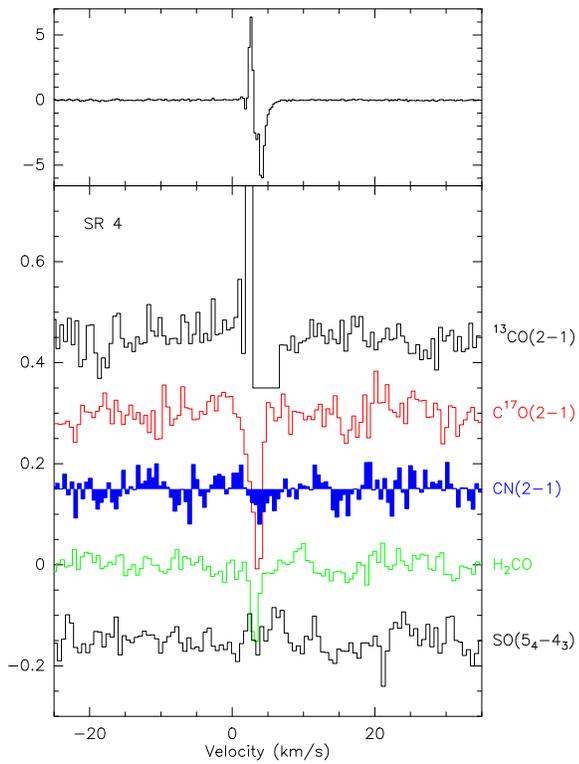


Fig. A.4. Lines toward SR 4.

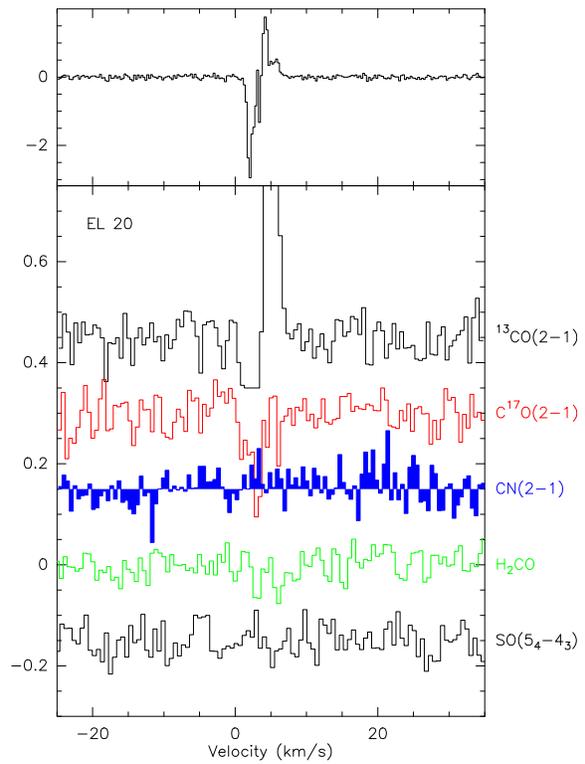


Fig. A.6. Lines toward EL 20.

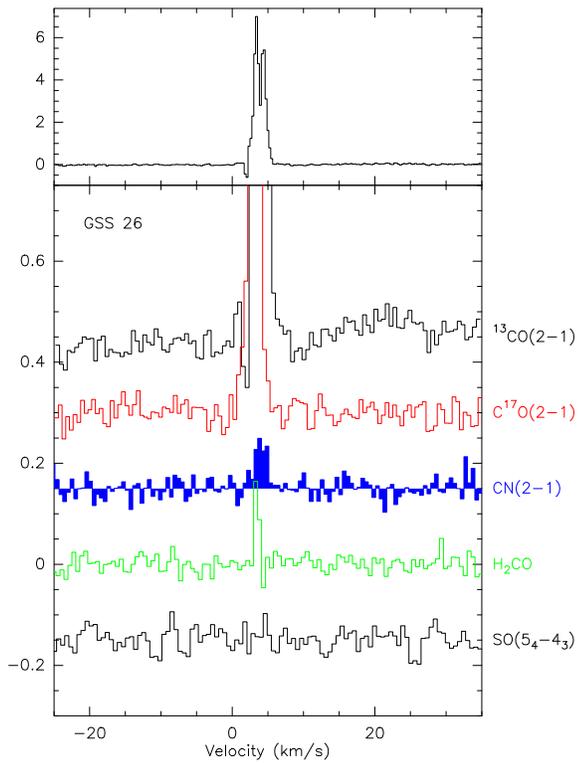


Fig. A.5. Lines toward GSS 26.

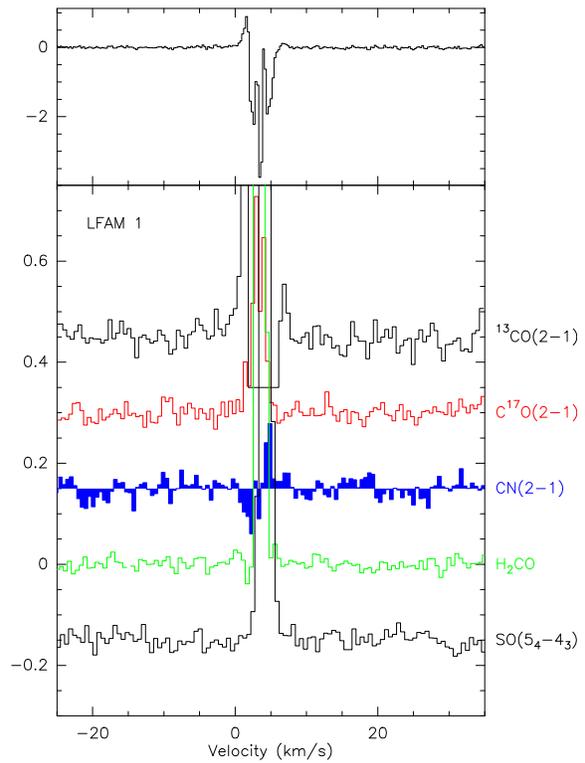


Fig. A.7. Lines toward LFAM 1.

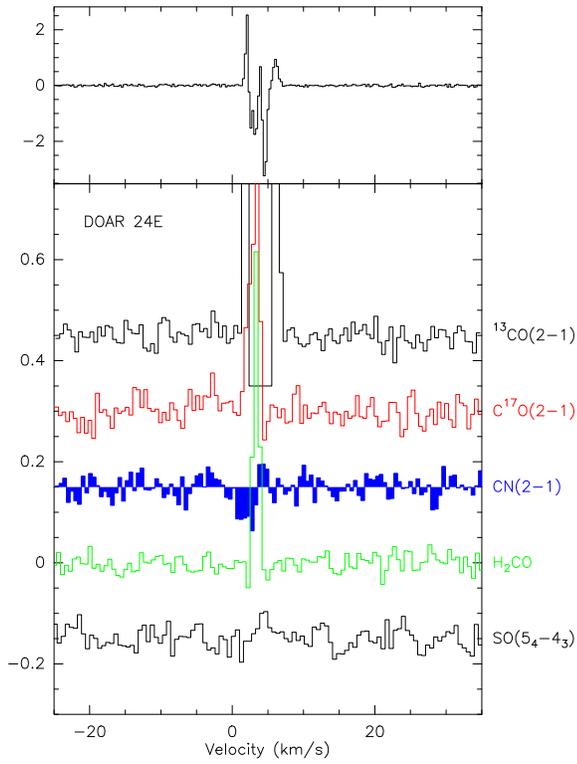


Fig. A.8. Lines toward DoAr 24E.

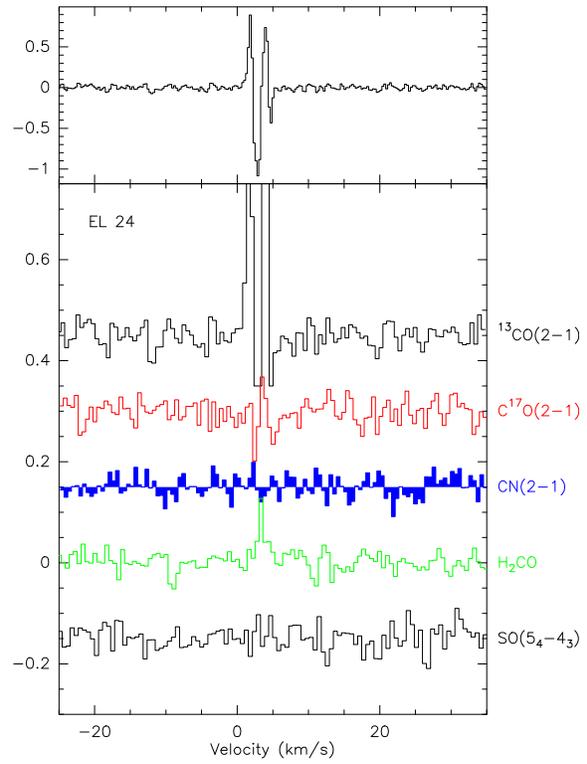


Fig. A.10. Lines toward EL 24.

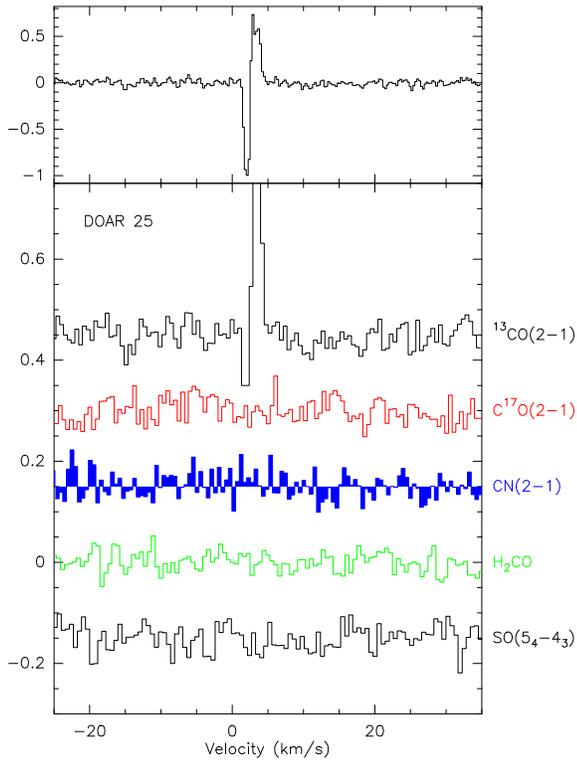


Fig. A.9. Lines toward DoAr 25.

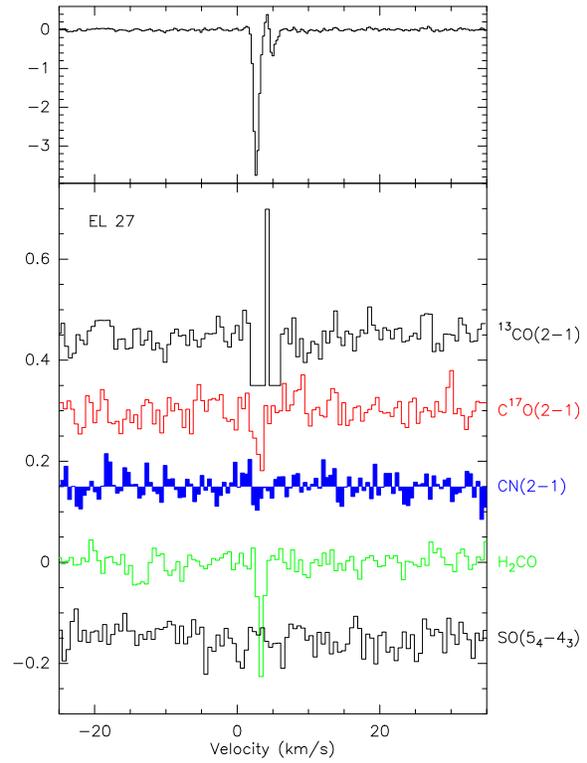


Fig. A.11. Lines toward EL 27.

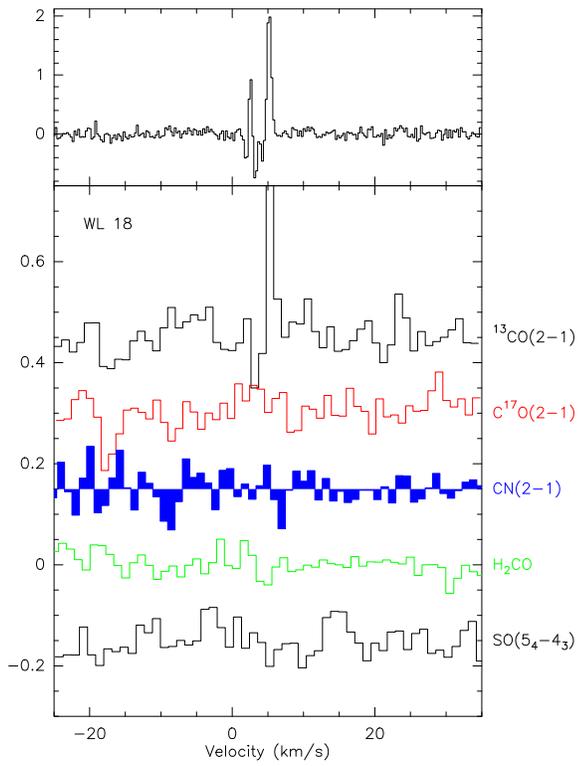


Fig. A.12. Lines toward WL 18.

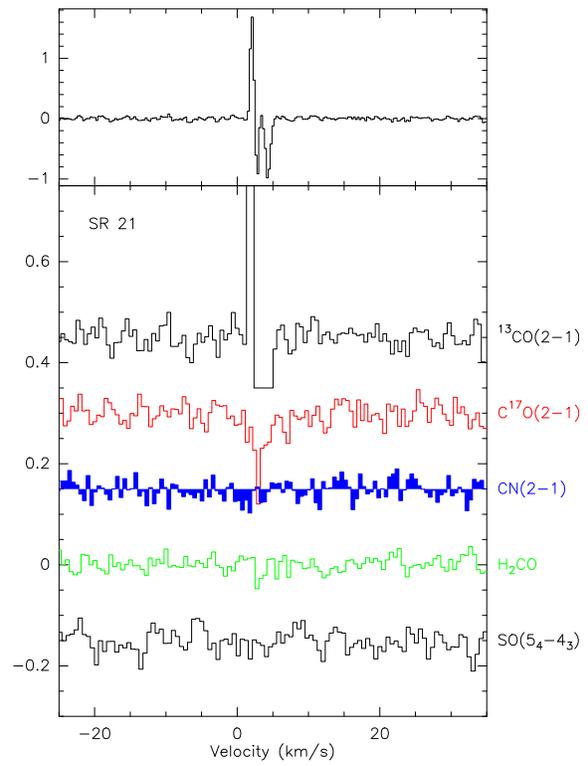


Fig. A.14. Lines toward SR 21.

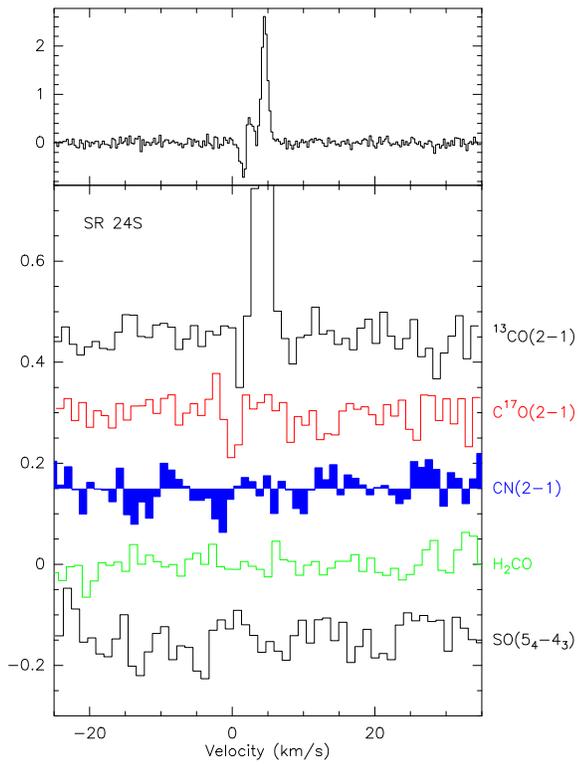


Fig. A.13. Lines toward SR 24S.

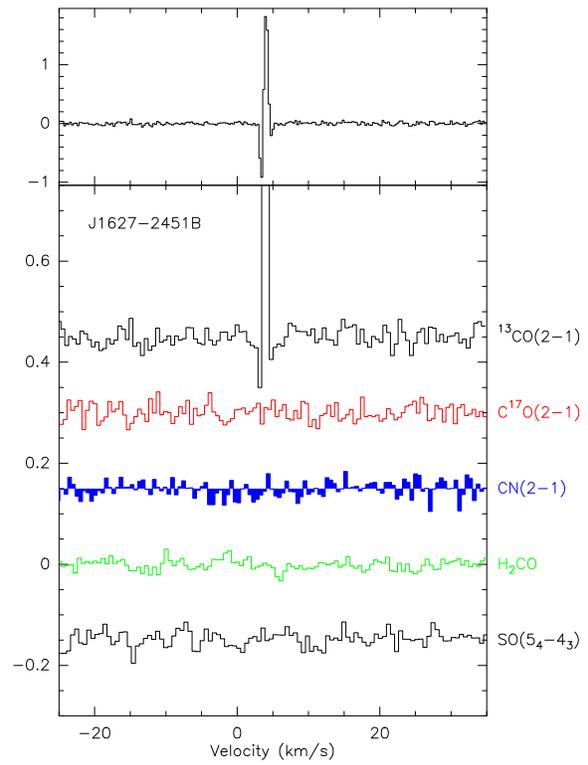


Fig. A.15. Lines toward J1627-2451B.

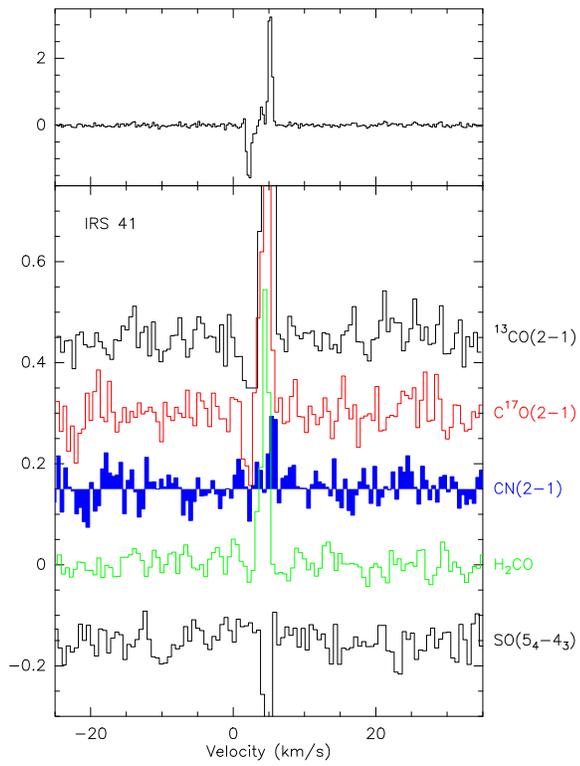


Fig. A.16. Lines toward IRS 41.

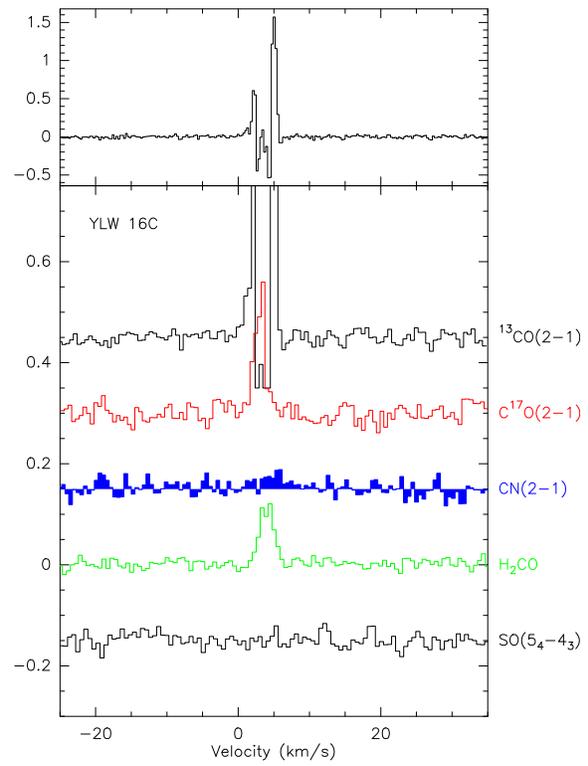


Fig. A.18. Lines toward YLW 16c.

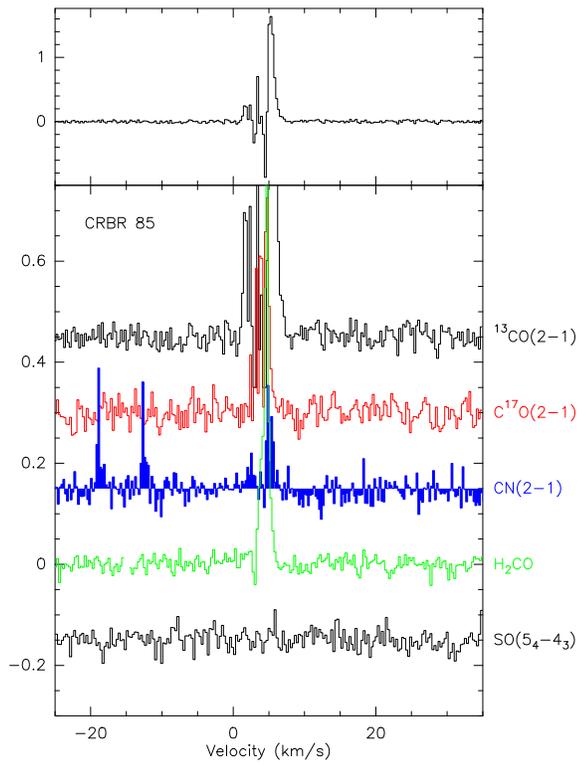


Fig. A.17. Lines toward CRBR 85.

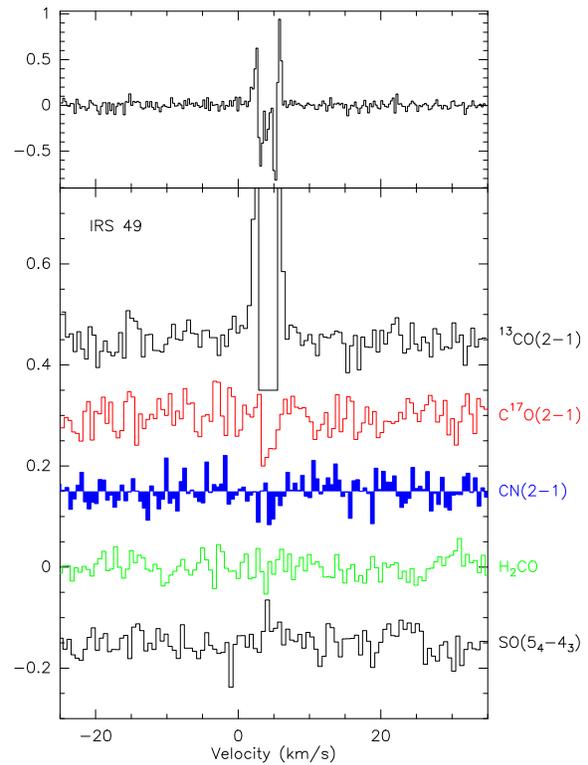


Fig. A.19. Lines toward IRS 49.

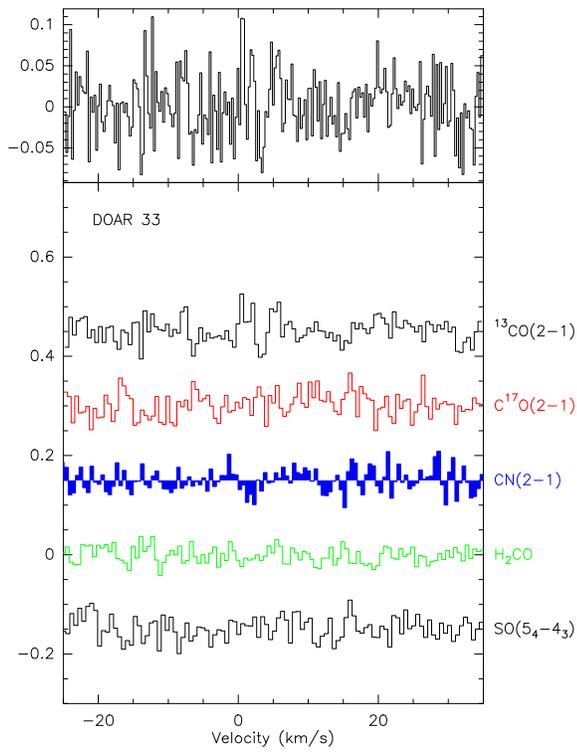


Fig. A.20. Lines toward DoAr 33.

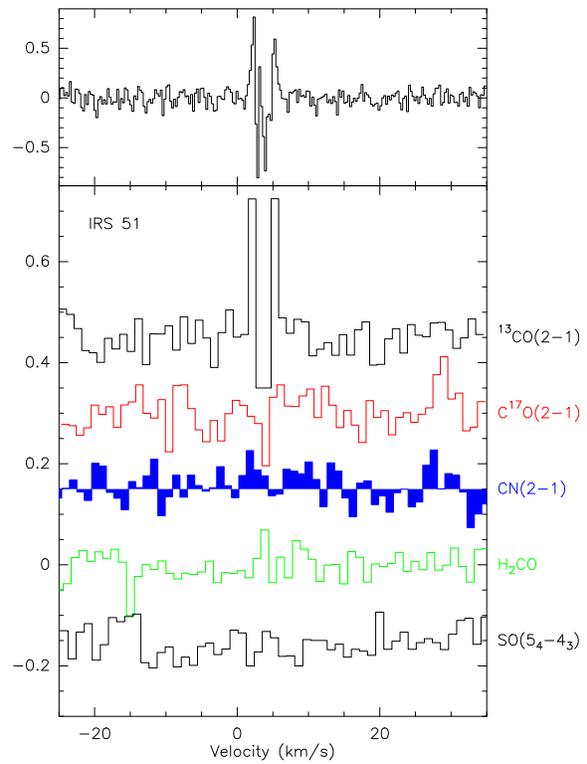


Fig. A.22. Lines toward IRS 51.

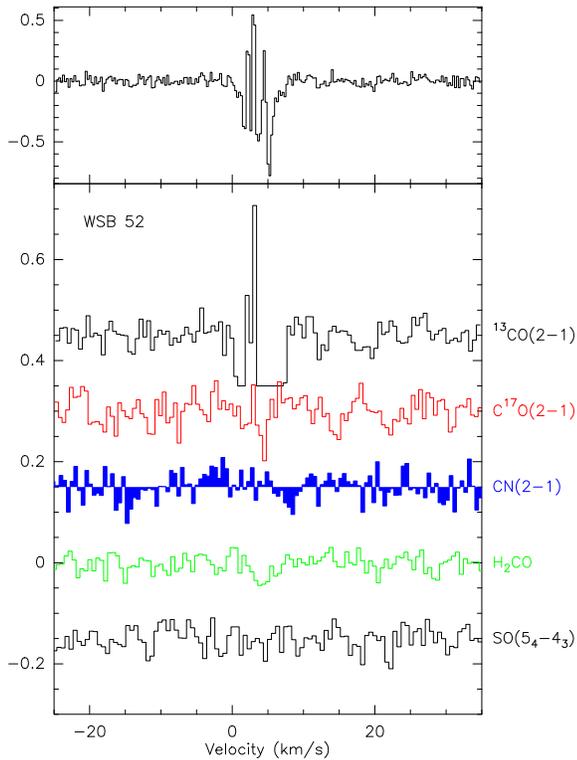


Fig. A.21. Lines toward WSB 52.

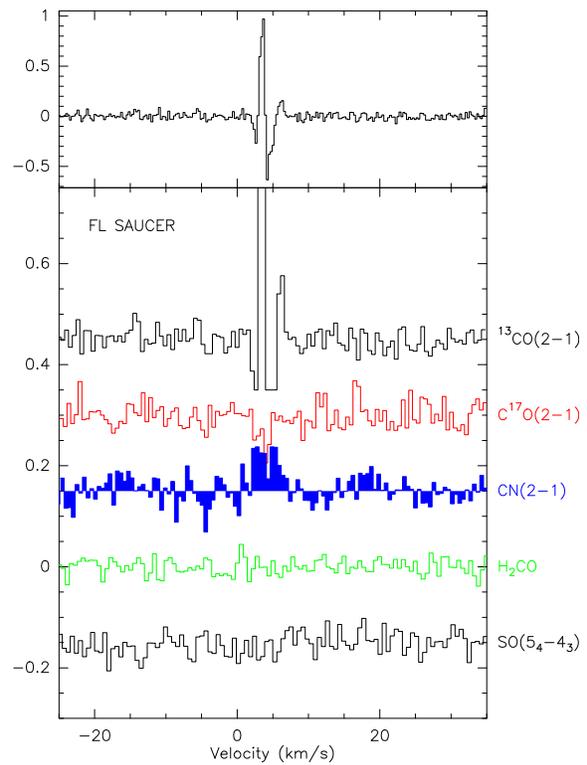


Fig. A.23. Lines toward Flying Saucer.

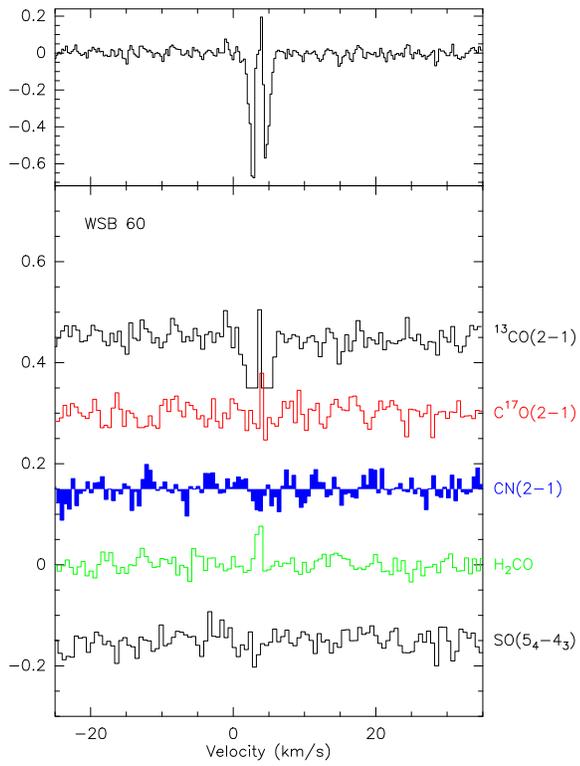


Fig. A.24. Lines toward WSB 60.

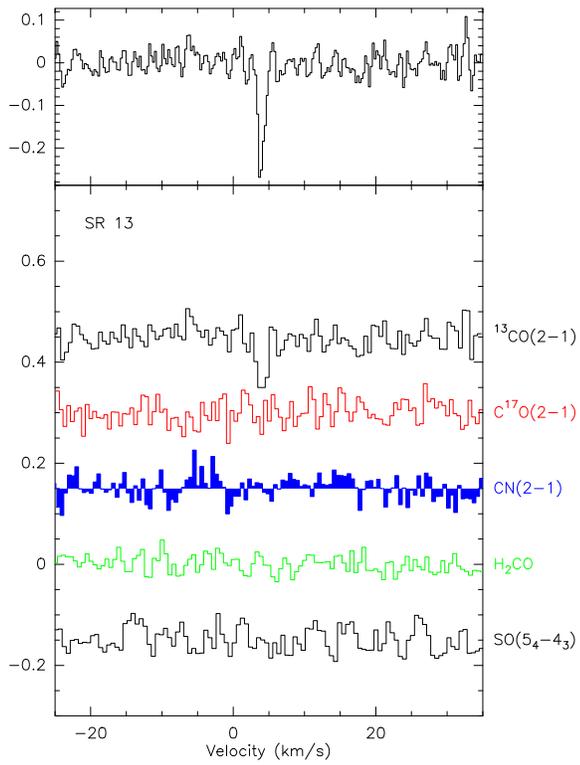


Fig. A.25. Lines toward SR 13.

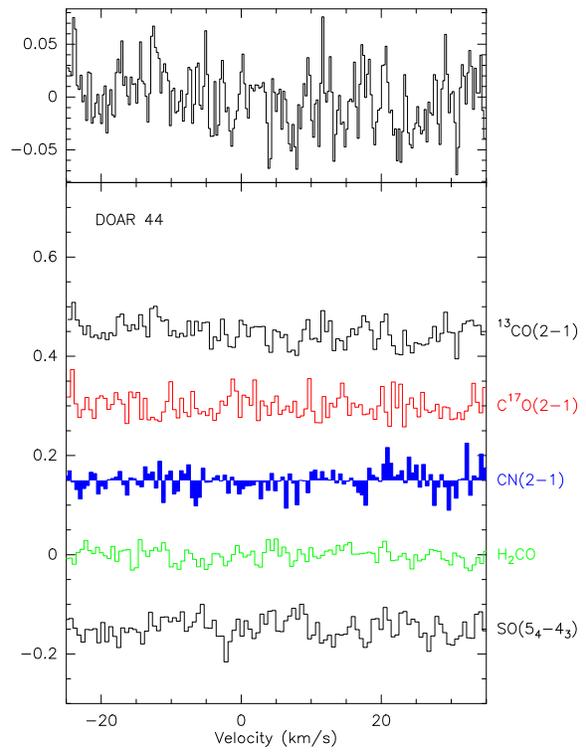


Fig. A.26. Lines toward DoAr 44.

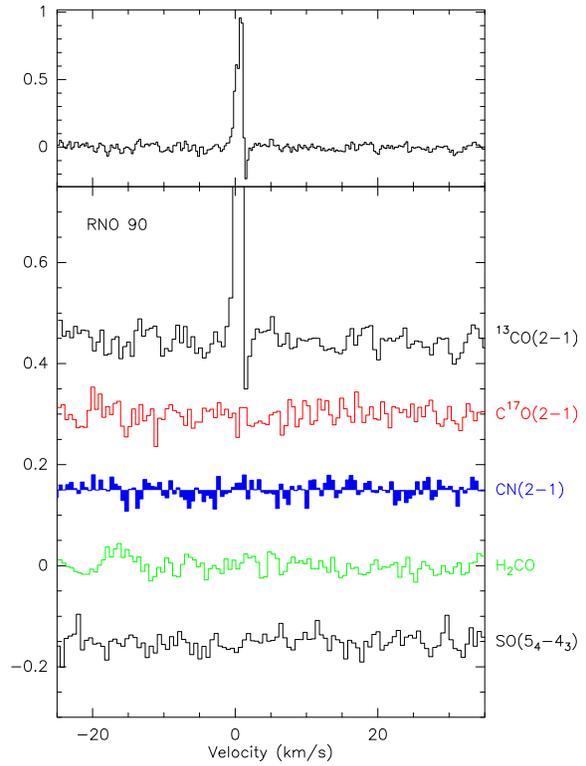


Fig. A.27. Lines toward RNO 90.

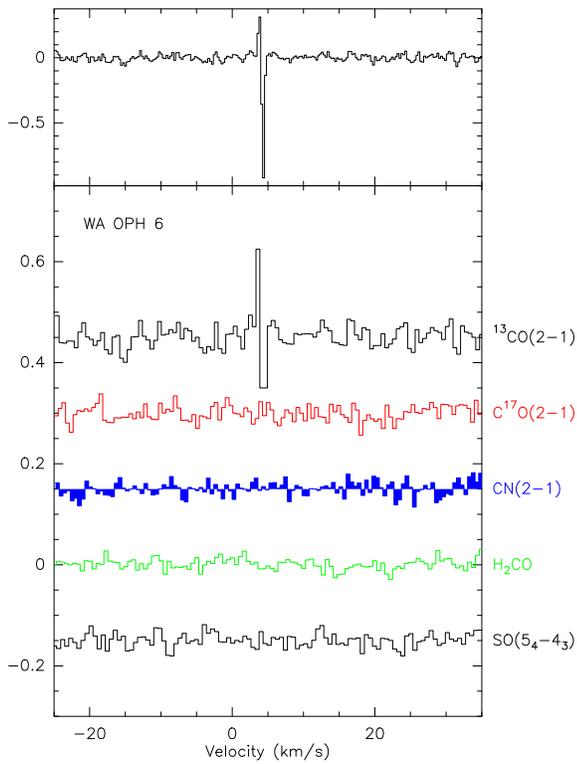


Fig. A.28. Lines toward Wa Oph 6.

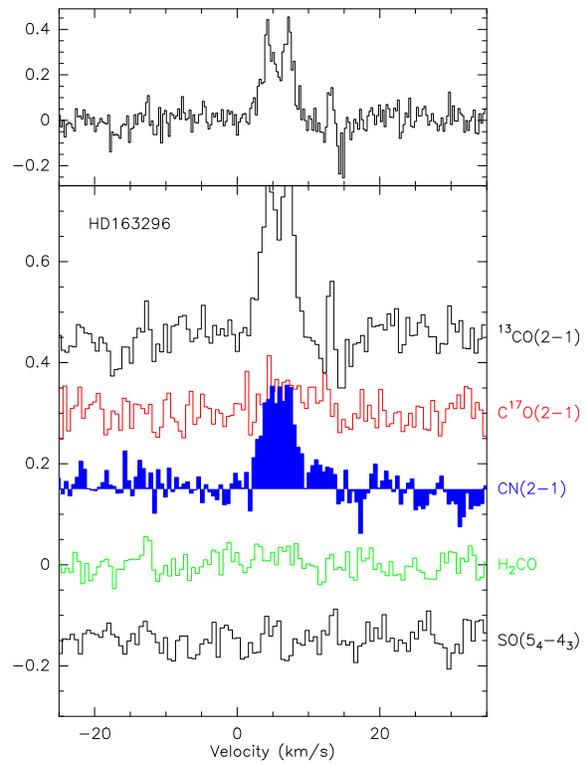


Fig. A.30. Lines toward HD 163296.

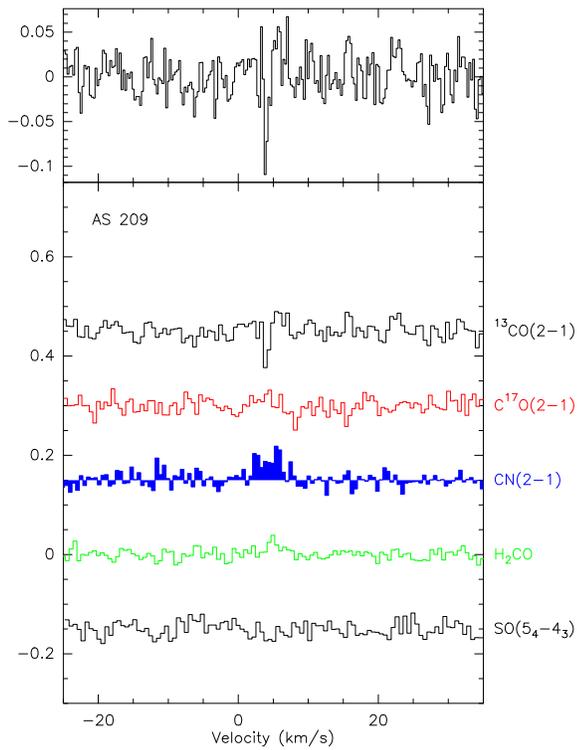


Fig. A.29. Lines toward AS 209.

Bibliographie

- Adams, F. C. and Shu, F. H. (1986). Infrared spectra of rotating protostars. *ApJ*, 308 :836–853. (Cité en page [33](#).)
- Alexander, R. D., Clarke, C. J., and Pringle, J. E. (2006). Photoevaporation of protoplanetary discs - II. Evolutionary models and observable properties. *MNRAS*, 369 :229–239. (Cité en page [36](#).)
- André, P. (2002). The Initial Conditions for Protostellar Collapse : Observational Constraints. In Bouvier, J. and Zahn, J.-P., editors, *EAS Publications Series*, volume 3 of *EAS Publications Series*, pages 1–38. (Cité en page [3](#).)
- Andre, P., Ward-Thompson, D., and Barsony, M. (1993). Submillimeter continuum observations of Rho Ophiuchi A - The candidate protostar VLA 1623 and prestellar clumps. *ApJ*, 406 :122–141. (Cité en pages [2](#) and [4](#).)
- Armitage, P. J. (2011). Dynamics of Protoplanetary Disks. *ARA&A*, 49 :195–236. (Cité en page [33](#).)
- Bachiller, R. (1996). Bipolar Molecular Outflows from Young Stars and Protostars. *ARA&A*, 34 :111–154. (Cité en page [4](#).)
- Bacmann, A., Taquet, V., Faure, A., Kahane, C., and Ceccarelli, C. (2012). Detection of complex organic molecules in a prestellar core : a new challenge for astrochemical models. *A&A*, 541 :L12. (Cité en page [19](#).)
- Balbus, S. A. and Hawley, J. F. (1991). A powerful local shear instability in weakly magnetized disks. I - Linear analysis. II - Nonlinear evolution. *ApJ*, 376 :214–233. (Cité en page [31](#).)
- Ballesteros-Paredes, J. and Hartmann, L. (2007). Remarks on Rapid vs. Slow Star Formation. *Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica*, 43 :123–136. (Cité en page [60](#).)
- Beckwith, S. V. W. and Sargent, A. I. (1993). Molecular line emission from circumstellar disks. *ApJ*, 402 :280–291. (Cité en page [79](#).)
- Beckwith, S. V. W., Sargent, A. I., Chini, R. S., and Guesten, R. (1990). A survey for circumstellar disks around young stellar objects. *AJ*, 99 :924–945. (Cité en page [5](#).)

- Begelman, M. C., McKee, C. F., and Shields, G. A. (1983). Compton heated winds and coronae above accretion disks. I Dynamics. *ApJ*, 271 :70–88. (Cité en page 35.)
- Belloche, A., Garrod, R. T., Müller, H. S. P., Menten, K. M., Comito, C., and Schilke, P. (2009). Increased complexity in interstellar chemistry : detection and chemical modeling of ethyl formate and n-propyl cyanide in Sagittarius B2(N). *A&A*, 499 :215–232. (Cité en page 19.)
- Bergin, E. A., Aikawa, Y., Blake, G. A., and van Dishoeck, E. F. (2007). The Chemical Evolution of Protoplanetary Disks. *Protostars and Planets V*, pages 751–766. (Cité en page 34.)
- Blake, G. A., Sutton, E. C., Masson, C. R., and Phillips, T. G. (1987). Molecular abundances in OMC-1 - The chemical composition of interstellar molecular clouds and the influence of massive star formation. *ApJ*, 315 :621–645. (Cité en page 19.)
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Mumma, M. J., and Weaver, H. A. (2004). *The composition of cometary volatiles*. (Cité en page 61.)
- Bontemps, S., Andre, P., Terebey, S., and Cabrit, S. (1996). Evolution of outflow activity around low-mass embedded young stellar objects. *A&A*, 311 :858–872. (Cité en page 4.)
- Brünken, S., Sipilä, O., Chambers, E. T., Harju, J., Caselli, P., Asvany, O., Honingh, C. E., Kamiński, T., Menten, K. M., Stutzki, J., and Schlemmer, S. (2014). H₂D⁺ observations give an age of at least one million years for a cloud core forming Sun-like stars. *Nature*, 516 :219–221. (Cité en page 60.)
- Burrows, C. J., Stapelfeldt, K. R., Watson, A. M., Krist, J. E., Ballester, G. E., Clarke, J. T., Crisp, D., Gallagher, III, J. S., Griffiths, R. E., Hester, J. J., Hoessel, J. G., Holtzman, J. A., Mould, J. R., Scowen, P. A., Trauger, J. T., and Westphal, J. A. (1996). Hubble Space Telescope Observations of the Disk and Jet of HH 30. *ApJ*, 473 :437. (Cité en page 67.)
- Cazaux, S. and Tielens, A. G. G. M. (2004). H₂ Formation on Grain Surfaces. *ApJ*, 604 :222–237. (Cité en page 21.)
- Cernicharo, J., Marcelino, N., Roueff, E., Gerin, M., Jiménez-Escobar, A., and Muñoz Caro, G. M. (2012). Discovery of the Methoxy Radical, CH₃O, toward B1 : Dust Grain and Gas-phase Chemistry in Cold Dark Clouds. *ApJ*, 759 :L43. (Cité en page 19.)
- Chapillon, E., Dutrey, A., Guilloteau, S., Piétu, V., Wakelam, V., Hersant, F., Gueth, F., Henning, T., Launhardt, R., Schreyer, K., and Semenov, D. (2012a). Chemistry in Disks. VII. First Detection of HC₃N in Protoplanetary Disks. *ApJ*, 756 :58. (Cité en page 5.)
- Chapillon, E., Guilloteau, S., Dutrey, A., Piétu, V., and Guélin, M. (2012b). Chemistry in disks. VI. CN and HCN in protoplanetary disks. *A&A*, 537 :A60. (Cité en pages 80, 86, 93, and 100.)

- Chen, Y.-J., Chuang, K.-J., Muñoz Caro, G. M., Nuevo, M., Chu, C.-C., Yih, T.-S., Ip, W.-H., and Wu, C.-Y. R. (2014). Vacuum Ultraviolet Emission Spectrum Measurement of a Microwave-discharge Hydrogen-flow lamp in several configurations : Application to Photo-desorption of CO ice. *ApJ*, 781 :15. (Cité en page 56.)
- Chiang, E. I. and Goldreich, P. (1997). Spectral Energy Distributions of T Tauri Stars with Passive Circumstellar Disks. *ApJ*, 490 :368–376. (Cité en page 33.)
- Chyba, C. and Sagan, C. (1992). Endogenous production, exogenous delivery and impact-shock synthesis of organic molecules : an inventory for the origins of life. *Nature*, 355 :125–132. (Cité en page 86.)
- Cleeves, L. I., Adams, F. C., and Bergin, E. A. (2013). Exclusion of Cosmic Rays in Protoplanetary Disks : Stellar and Magnetic Effects. *ApJ*, 772 :5. (Cité en pages 32, 57, and 58.)
- Cummins, S. E., Linke, R. A., and Thaddeus, P. (1986). A survey of the millimeter-wave spectrum of Sagittarius B2. *ApJS*, 60 :819–878. (Cité en page 19.)
- Dartois, E., Dutrey, A., and Guilloteau, S. (2003). Structure of the DM Tau Outer Disk : Probing the vertical kinetic temperature gradient. *A&A*, 399 :773–787. (Cité en pages 95 and 96.)
- D’Hendecourt, L. B., Allamandola, L. J., and Greenberg, J. M. (1985). Time dependent chemistry in dense molecular clouds. I - Grain surface reactions, gas/grain interactions and infrared spectroscopy. *A&A*, 152 :130–150. (Cité en page 14.)
- Draine, B. T. (1978). Photoelectric heating of interstellar gas. *ApJS*, 36 :595–619. (Cité en pages 13, 43, and 57.)
- Dutrey, A., Guilloteau, S., and Guelin, M. (1997). Chemistry of protosolar-like nebulae : The molecular content of the DM Tau and GG Tau disks. *A&A*, 317 :L55–L58. (Cité en pages 5, 48, 86, and 93.)
- Dutrey, A., Guilloteau, S., and Simon, M. (1994). Images of the GG Tauri rotating ring. *A&A*, 286 :149–159. (Cité en page 5.)
- Dutrey, A., Henning, T., Guilloteau, S., Semenov, D., Piétu, V., Schreyer, K., Bacmann, A., Launhardt, R., Pety, J., and Gueth, F. (2007). Chemistry in disks. I. Deep search for N₂H⁺ in the protoplanetary disks around LkCa 15, MWC 480, and DM Tauri. *A&A*, 464 :615–623. (Cité en page 5.)
- Favre, C., Cleeves, L. I., Bergin, E. A., Qi, C., and Blake, G. A. (2013). A Significantly Low CO Abundance toward the TW Hya Protoplanetary Disk : A Path to Active Carbon Chemistry? *ApJ*, 776 :L38. (Cité en page 48.)

- Fayolle, E. C., Bertin, M., Romanzin, C., Michaut, X., Öberg, K. I., Linnartz, H., and Fillion, J.-H. (2011). CO Ice Photodesorption : A Wavelength-dependent Study. *ApJ*, 739 :L36. (Cité en page 56.)
- Feigelson, E. D. and Nelson, P. I. (1985). Statistical methods for astronomical data with upper limits. I - Univariate distributions. *ApJ*, 293 :192–206. (Cité en page 75.)
- Fuente, A., Martin-Pintado, J., Cernicharo, J., and Bachiller, R. (1993). A chemical study of the photodissociation region NGC 7023. *A&A*, 276 :473. (Cité en pages 86 and 97.)
- Gammie, C. F. (1996). Layered Accretion in T Tauri Disks. *ApJ*, 457 :355. (Cité en page 32.)
- Garrod, R. T. and Herbst, E. (2006). Formation of methyl formate and other organic species in the warm-up phase of hot molecular cores. *A&A*, 457 :927–936. (Cité en page 19.)
- Garrod, R. T., Wakelam, V., and Herbst, E. (2007). Non-thermal desorption from interstellar dust grains via exothermic surface reactions. *A&A*, 467 :1103–1115. (Cité en page 15.)
- Glover, S. C. O. and Mac Low, M.-M. (2007). Simulating the Formation of Molecular Clouds. II. Rapid Formation from Turbulent Initial Conditions. *ApJ*, 659 :1317–1337. (Cité en page 60.)
- Graedel, T. E., Langer, W. D., and Frerking, M. A. (1982). The kinetic chemistry of dense interstellar clouds. *ApJS*, 48 :321–368. (Cité en pages 20 and 49.)
- Graninger, D., Oberg, K. I., Qi, C., and Kastner, J. (2015). HNC in Protoplanetary Disks. *ArXiv*. (Cité en pages 86 and 93.)
- Greenberg, R., Hartmann, W. K., Chapman, C. R., and Wacker, J. F. (1978). Planetesimals to planets - Numerical simulation of collisional evolution. *Icarus*, 35 :1–26. (Cité en page 37.)
- Guilloteau, S., Di Folco, E., Dutrey, A., Simon, M., Grosso, N., and Piétu, V. (2013). A sensitive survey for ^{13}CO , CN, H_2CO , and SO in the disks of T Tauri and Herbig Ae stars. *A&A*, 549 :A92. (Cité en pages 71, 72, 78, 79, 80, and 86.)
- Guilloteau, S. and Dutrey, A. (1994). A Keplerian disk around DM Tau? *A&A*, 291 :L23–L26. (Cité en page 95.)
- Guilloteau, S. and Dutrey, A. (1998). Physical parameters of the Keplerian protoplanetary disk of DM Tauri. *A&A*, 339 :467–476. (Cité en page 79.)
- Guilloteau, S., Dutrey, A., Piétu, V., and Boehler, Y. (2011). A dual-frequency sub-arcsecond study of proto-planetary disks at mm wavelengths : first evidence for radial variations of the dust properties. *A&A*, 529 :A105. (Cité en page 31.)
- Hartmann, L., Ballesteros-Paredes, J., and Bergin, E. A. (2001). Rapid Formation of Molecular Clouds and Stars in the Solar Neighborhood. *ApJ*, 562 :852–868. (Cité en page 60.)

- Hartmann, L., Calvet, N., Gullbring, E., and D'Alessio, P. (1998). Accretion and the Evolution of T Tauri Disks. *ApJ*, 495 :385–400. (Cité en page 31.)
- Hasegawa, T. I. and Herbst, E. (1993). New gas-grain chemical models of quiescent dense interstellar clouds - The effects of H₂ tunnelling reactions and cosmic ray induced desorption. *MNRAS*, 261 :83–102. (Cité en pages 15 and 21.)
- Hasegawa, T. I., Herbst, E., and Leung, C. M. (1992). Models of gas-grain chemistry in dense interstellar clouds with complex organic molecules. *ApJS*, 82 :167–195. (Cité en pages 13, 14, 16, and 17.)
- Hayashi, C. (1981). Structure of the Solar Nebula, Growth and Decay of Magnetic Fields and Effects of Magnetic and Turbulent Viscosities on the Nebula. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 70 :35–53. (Cité en page 46.)
- Herbig, G. H. and Goodrich, R. W. (1986). Near-simultaneous ultraviolet and optical spectrophotometry of T Tauri stars. *ApJ*, 309 :294–305. (Cité en page 43.)
- Herbst, E. and van Dishoeck, E. F. (2009). Complex Organic Interstellar Molecules. *ARA&A*, 47 :427–480. (Cité en page 19.)
- Hildebrand, R. H. (1983). The Determination of Cloud Masses and Dust Characteristics from Submillimetre Thermal Emission. *QJRAS*, 24 :267. (Cité en page 47.)
- Hincelin, U., Wakelam, V., Hersant, F., Guilloteau, S., Loison, J. C., Honvault, P., and Troe, J. (2011). Oxygen depletion in dense molecular clouds : a clue to a low O₂ abundance? *A&A*, 530 :A61. (Cité en pages 20, 21, and 49.)
- Hogerheijde, M. R., Bergin, E. A., Brinch, C., Cleaves, L. I., Fogel, J. K. J., Blake, G. A., Dominik, C., Lis, D. C., Melnick, G., Neufeld, D., Panić, O., Pearson, J. C., Kristensen, L., Yıldız, U. A., and van Dishoeck, E. F. (2011). Detection of the Water Reservoir in a Forming Planetary System. *Science*, 334 :338. (Cité en page 5.)
- Holbrook, K. A., Pilling, M. J., and Robertson, S. H. (1996). *Unimolecular Reactions*. Second Edition (New York : Wiley). (Cité en page 15.)
- Hollenbach, D. J., Werner, M. W., and Salpeter, E. E. (1971). Molecular Hydrogen in H I Regions. *ApJ*, 163 :165. (Cité en page 60.)
- Jenkins, E. B. (2009). A Unified Representation of Gas-Phase Element Depletions in the Interstellar Medium. *ApJ*, 700 :1299–1348. (Cité en pages 20, 21, 48, and 49.)
- Jin, M., Lee, J.-E., and Kim, K.-T. (2015). The HCN/HNC abundance ratio toward different evolutionary phases of massive star formation. *Astroph.* (Cité en page 97.)
- Joy, A. H. (1945). T Tauri Variable Stars. *ApJ*, 102 :168. (Cité en page 2.)

- Kenyon, S. J. and Hartmann, L. (1987). Spectral energy distributions of T Tauri stars - Disk flaring and limits on accretion. *ApJ*, 323 :714–733. (Cité en page 33.)
- Lada, C. J. (1987). Star formation - From OB associations to protostars. In Peimbert, M. and Jugaku, J., editors, *Star Forming Regions*, volume 115 of *IAU Symposium*, pages 1–17. (Cité en page 2.)
- Lada, E. A., Strom, K. M., and Myers, P. C. (1993). Environments of star formation - Relationship between molecular clouds, dense cores and young stars. In Levy, E. H. and Lunine, J. I., editors, *Protostars and Planets III*, pages 245–277. (Cité en page 72.)
- Larson, R. B. (1969). Numerical calculations of the dynamics of collapsing proto-star. *MNRAS*, 145 :271. (Cité en page 4.)
- Lee, H.-H., Herbst, E., Pineau des Forets, G., Roueff, E., and Le Bourlot, J. (1996). Photodissociation of H₂ and CO and time dependent chemistry in inhomogeneous interstellar clouds. *A&A*, 311 :690–707. (Cité en pages 43 and 44.)
- Leger, A., Jura, M., and Omont, A. (1985). Desorption from interstellar grains. *A&A*, 144 :147–160. (Cité en page 15.)
- Liszt, H. and Lucas, R. (2001). Comparative chemistry of diffuse clouds. II. CN, HCN, HNC, CH₃CN & N₂H⁺. *A&A*, 370 :576–585. (Cité en page 86.)
- Loinard, L., Mioduszewski, A. J., Rodríguez, L. F., González, R. A., Rodríguez, M. I., and Torres, R. M. (2005). Multiepoch VLBA Observations of T Tauri South. *ApJ*, 619 :L179–L182. (Cité en page 72.)
- Loinard, L., Torres, R. M., Mioduszewski, A. J., and Rodríguez, L. F. (2008). A Preliminary VLBA Distance to the Core of Ophiuchus, with an Accuracy of 4%. *ApJ*, 675 :L29–L32. (Cité en page 72.)
- Loison, J.-C., Wakelam, V., and Hickson, K. M. (2014a). The interstellar gas-phase chemistry of HCN and HNC. *MNRAS*, 443 :398–410. (Cité en page 10.)
- Loison, J.-C., Wakelam, V., Hickson, K. M., Bergeat, A., and Mereau, R. (2014b). The gas-phase chemistry of carbon chains in dark cloud chemical models. *MNRAS*, 437 :930–945. (Cité en page 10.)
- Mendoza V., E. E. (1966). Infrared Photometry of T Tauri Stars and Related Objects. *ApJ*, 143 :1010. (Cité en page 2.)
- Minissale, M., Congiu, E., Baouche, S., Chaabouni, H., Moudens, A., Dulieu, F., Accolla, M., Cazaux, S., Manicó, G., and Pirronello, V. (2013). Quantum Tunneling of Oxygen Atoms on Very Cold Surfaces. *Physical Review Letters*, 111(5) :053201. (Cité en pages 17, 21, and 26.)

- Minissale, M. and Dulieu, F. (2014). Influence of surface coverage on the chemical desorption process. *The Journal of Chemical Physics*, 141 :014304. (Cité en page 15.)
- Mouschovias, T. C., Tassis, K., and Kunz, M. W. (2006). Observational Constraints on the Ages of Molecular Clouds and the Star Formation Timescale : Ambipolar-Diffusion-controlled or Turbulence-induced Star Formation ? *ApJ*, 646 :1043–1049. (Cité en page 60.)
- Muñoz Caro, G. M., Jiménez-Escobar, A., Martín-Gago, J. Á., Rogero, C., Atienza, C., Puer-tas, S., Sobrado, J. M., and Torres-Redondo, J. (2010). New results on thermal and photo-desorption of CO ice using the novel InterStellar Astrochemistry Chamber (ISAC). *A&A*, 522 :A108. (Cité en page 56.)
- Nummelin, A., Bergman, P., Hjalmarsen, Å., Friberg, P., Irvine, W. M., Millar, T. J., Ohishi, M., and Saito, S. (2000). A Three-Position Spectral Line Survey of Sagittarius B2 between 218 and 263 GHz. II. Data Analysis. *ApJS*, pages 213–243. (Cité en page 19.)
- Öberg, K. I., Fuchs, G. W., Awad, Z., Fraser, H. J., Schlemmer, S., van Dishoeck, E. F., and Linnartz, H. (2007). Photodesorption of CO Ice. *ApJL*, 662 :L23–L26. (Cité en pages 56 and 57.)
- Öberg, K. I., Garrod, R. T., van Dishoeck, E. F., and Linnartz, H. (2009a). Formation rates of complex organics in UV irradiated CH₃OH-rich ices. I. Experiments. *A&A*, 504 :891–913. (Cité en page 57.)
- Öberg, K. I., Linnartz, H., Visser, R., and van Dishoeck, E. F. (2009b). Photodesorption of Ices. II. H₂O and D₂O. *ApJ*, 693 :1209–1218. (Cité en page 57.)
- Öberg, K. I., Qi, C., Wilner, D. J., and Hogerheijde, M. R. (2012). Evidence for Multiple Pathways to Deuterium Enhancements in Protoplanetary Disks. *ApJ*, 749 :162. (Cité en page 5.)
- Öberg, K. I., van Dishoeck, E. F., and Linnartz, H. (2009c). Photodesorption of ices I : CO, N₂, and CO₂. *A&A*, 496 :281–293. (Cité en page 57.)
- Pagani, L., Roueff, E., and Lesaffre, P. (2011). Ortho-H₂ and the Age of Interstellar Dark Clouds. *ApJ*, 739 :L35. (Cité en page 60.)
- Pascucci, I., Apai, D., Luhman, K., Henning, T., Bouwman, J., Meyer, M. R., Lahuis, F., and Natta, A. (2009). The Different Evolution of Gas and Dust in Disks around Sun-Like and Cool Stars. *ApJ*, 696 :143–159. (Cité en page 86.)
- Piétu, V., Dutrey, A., and Guilloteau, S. (2007). Probing the structure of protoplanetary disks : a comparative study of DM Tau, LkCa 15, and MWC 480. *A&A*, 467 :163–178. (Cité en pages 95 and 96.)

- Piétu, V., Dutrey, A., Guilloteau, S., Chapillon, E., and Pety, J. (2006). Resolving the inner dust disks surrounding LkCa 15 and MWC 480 at mm wavelengths. *A&A*, 460 :L43–L47. (Cité en page 95.)
- Pineau des Forets, G., Roueff, E., and Flower, D. R. (1990). The formation of nitrogen-bearing species in dark interstellar clouds. *MNRAS*, 244 :668–674. (Cité en page 101.)
- Prasad, S. S. and Tarafdar, S. P. (1983). UV radiation field inside dense clouds - Its possible existence and chemical implications. *ApJ*, 267 :603–609. (Cité en page 12.)
- Pringle, J. E. (1981). Accretion discs in astrophysics. *ARA&A*, 19 :137–162. (Cité en page 31.)
- Qi, C., Wilner, D. J., Aikawa, Y., Blake, G. A., and Hogerheijde, M. R. (2008). Resolving the Chemistry in the Disk of TW Hydrae. I. Deuterated Species. *A&A*, 681 :1396–1407. (Cité en page 5.)
- Reboussin, L., Guilloteau, S., Simon, M., Grosso, N., Wakelam, V., Di Folco, E., Dutrey, A., and Piétu, V. (2015a). Sensitive survey for ^{13}CO , CN, H_2CO , and SO in the disks of T Tauri and Herbig Ae stars. II. Stars in ρ Ophiuchi and upper Scorpius. *A&A*, 578 :A31. (Cité en pages 83 and 131.)
- Reboussin, L., Wakelam, V., Guilloteau, S., and Hersant, F. (2014). Grain-surface reactions in molecular clouds : the effect of cosmic rays and quantum tunnelling. *MNRAS*, 440 :3557–3567. (Cité en pages 27 and 107.)
- Reboussin, L., Wakelam, V., Guilloteau, S., Hersant, F., and Dutrey, A. (2015b). Chemistry in Protoplanetary Disks : the gas-phase CO/H₂ ratio and the Carbon reservoir. *ArXiv*. (Cité en pages 63 and 119.)
- Ruffle, D. P. and Herbst, E. (2000). New models of interstellar gas-grain chemistry - I. Surface diffusion rates. *MNRAS*, 319 :837–850. (Cité en page 16.)
- Safronov, V. S. (1972). *Evolution of the protoplanetary cloud and formation of the earth and planets*. (Cité en page 37.)
- Semenov, D., Hersant, F., Wakelam, V., Dutrey, A., Chapillon, E., Guilloteau, S., Henning, T., Launhardt, R., Piétu, V., and Schreyer, K. (2010). Chemistry in disks. IV. Benchmarking gas-grain chemical models with surface reactions. *A&A*, 522 :A42. (Cité en page 10.)
- Shakura, N. I. and Sunyaev, R. A. (1973). Black holes in binary systems. Observational appearance. *A&A*, 24 :337–355. (Cité en page 31.)
- Shapiro, R. (1995). The prebiotic role of adenine : A critical analysis. *Origins of Life and Evolution of the Biosphere*, 25 :83–98. (Cité en page 86.)
- Simon, M., Dutrey, A., and Guilloteau, S. (2000). Dynamical Masses of T Tauri Stars and Calibration of Pre-Main-Sequence Evolution. *ApJ*, 545 :1034–1043. (Cité en page 95.)

- Simon, M. and Prato, L. (1995). Disk Dissipation in Single and Binary Young Star Systems in Taurus. *ApJ*, 450 :824. (Cité en page 35.)
- Sobolev, V. V. (1960). *Moving envelopes of stars*. (Cité en page 41.)
- Spitzer, Jr., L. and Tomasko, M. G. (1968). Heating of H i Regions by Energetic Particles. *ApJ*, 152 :971. (Cité en page 13.)
- Tielens, A. G. G. M. (2005). *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*. (Cité en page 14.)
- Turner, B. E., Pirogov, L., and Minh, Y. C. (1997). The Physics and Chemistry of Small Translucent Molecular Clouds. VIII. HCN and HNC. *ApJ*, 483 :235–261. (Cité en page 86.)
- Umebayashi, T. and Nakano, T. (2009). Effects of Radionuclides on the Ionization State of Protoplanetary Disks and Dense Cloud Cores. *ApJ*, 690 :69–81. (Cité en page 57.)
- van Dishoeck, E. F., Thi, W.-F., and van Zadelhoff, G.-J. (2003). Detection of DCO⁺ in a circumstellar disk. *A&A*, 400 :L1–L4. (Cité en page 5.)
- Wagenblast, R. and Hartquist, T. W. (1989). Non-equilibrium level populations of molecular hydrogen. II - Models of the Zeta OPH cloud. *MNRAS*, 237 :1019–1025. (Cité en page 43.)
- Wakelam, V. and Herbst, E. (2008). Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Dense Cloud Chemistry. *ApJ*, 680 :371–383. (Cité en pages 20, 21, and 49.)
- Wakelam, V., Smith, I. W. M., Loison, J.-C., Talbi, D., Klippenstein, S. J., Bergeat, A., Geppert, W. D., and Hickson, K. M. (2013). Review of important reactions for the nitrogen chemistry in the interstellar medium. *ArXiv e-prints*. (Cité en page 10.)
- Watson, W. D. (1976). Interstellar molecule reactions. *Reviews of Modern Physics*, 48 :513–552. (Cité en page 16.)
- Williams, J. P. and Best, W. M. J. (2014). A Parametric Modeling Approach to Measuring the Gas Masses of Circumstellar Disks. *ApJ*, 788 :59. (Cité en pages 42 and 62.)
- Wolk, S. J. and Walter, F. M. (1996). A Search for Protoplanetary Disks Around Naked T Tauri Stars. *AJ*, 111 :2066. (Cité en page 35.)