



**HAL**  
open science

# Nano-poussières carbonées dans les disques protoplanétaires

Thomas Boutéraon

► **To cite this version:**

Thomas Boutéraon. Nano-poussières carbonées dans les disques protoplanétaires. Astrophysique galactique [astro-ph.GA]. Université Paris Saclay (COmUE), 2019. Français. NNT : 2019SACLS250 . tel-02356309

**HAL Id: tel-02356309**

**<https://theses.hal.science/tel-02356309v1>**

Submitted on 8 Nov 2019

**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.

# Nano-poussières carbonées dans les disques protoplanétaires

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay  
préparée à Université Paris-Sud

Ecole doctorale n°127 Astronomie et astrophysique d'Ile-de-France (AAIF)  
Spécialité de doctorat : astronomie et astrophysique

Thèse présentée et soutenue à Orsay, le 19 septembre 2019, par

**THOMAS BOUTÉRAON**

Laurent Verstraete Professeur, Université Paris-Sud (IAS)	Président
Emilie Habart Enseignante-chercheuse, Université Paris-Sud (IAS)	Directrice de thèse
Nathalie Ysard Chargée de recherche, CNRS (IAS)	Co-directrice de thèse
Inga Kamp Professeure, Kapteyn Institute	Rapporteuse
Jeroen Bouwman Chercheur, Max Planck Institute for Astronomy	Rapporteur
Stephanie Cazaux Astronome, Kapteyn Institute	Examinatrice
Olivier Berné Chargé de recherche, CNRS (IRAP)	Examineur
Eric Pantin Ingénieur-chercheur, CEA (IRFU/SAP)	Invité

---

# Remerciements

Mes premiers remerciements vont à Emilie Habart et Nathalie Ysard, mes directrices de thèse. Dans cette "exploration au-delà des frontières de la connaissance" (~sic MAMD) qu'est la recherche, leur soutien et leur patience ont été essentiels.

Mes seconds remerciements vont aux personnes de l'équipe AMIS et plus généralement à celles de l'IAS. Je remercie notamment Anthony Jones, le père de THEMIS, et Robert Brauer pour le plaisir de nos discussions. Je remercie aussi Hervé Dole pour les échnages passionés sur les politiques de la recherche et de l'enseignement.

Merci et salut aux thésards pour ces trois années : Antoine, Thiébaud, Victor, Nadège, Benjamin et tous les autres.

Je souhaite également remercier les enseignants et chercheurs que j'ai rencontrés durant mon parcours. Je pense à Chris Ewels, Jean-Luc Duvail.

Je remercie aussi ma famille, mes parents, Pascal et Sylvie, mes amis.

Surtout, je remercie Marie.

J'aimerais terminer ces remerciements par ce poème de Willima Butler Yeats qui m'accompagne depuis plusieurs années.

*Si je pouvais t'offrir le bleu secret du ciel,  
Brodé de lumière d'or et de reflets d'argent,  
Le mysétieux secret, le secret éternel,  
De la vie et du jour, de la nuit et du temps,  
Avec tout mon amour, je le mettrais à tes pieds.  
Mais moi qui suis pauvre et n'ai que mes rêves,  
Sous tes pas, je les ai déroulés.  
Marche doucement car tu marches sur mes rêves.*

---

# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>iii</b>
<b>Table des matières</b>	<b>v</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>1 La matière solide dans l'espace</b>	<b>3</b>
1.1 Le milieu interstellaire . . . . .	5
1.1.1 Les phases du milieu interstellaire . . . . .	5
1.1.2 Sources d'énergie . . . . .	6
1.2 Signatures de la matière solide . . . . .	8
1.2.1 Extinction interstellaire . . . . .	8
1.2.2 Emission de la poussière . . . . .	13
1.2.3 Polarisation . . . . .	22
1.2.4 Résumé en une image . . . . .	23
1.3 Propriétés de la matière solide . . . . .	24
1.3.1 Composition et liaisons chimiques . . . . .	24
1.3.2 Modes de vibration et signatures spectroscopiques . . . . .	28
1.3.3 Chauffage et refroidissement des grains de poussière . . . . .	33
1.3.4 Propriétés optiques des grains . . . . .	36
1.4 Les modèles de poussière . . . . .	38
1.5 Le cycle de la poussière . . . . .	40
1.6 La poussière dans les disques protoplanétaires . . . . .	44
1.6.1 Classification des disques . . . . .	44
1.6.2 Structure, taille et masse des disques . . . . .	45
1.6.3 Transport et croissance de la poussière dans les disques . . . . .	48
1.6.4 L'émission de la poussière selon sa localisation . . . . .	50
1.6.5 Les nano-particules dans les disques protoplanétaires . . . . .	51
1.7 Résumé et motivations . . . . .	53
<b>2 Le modèle THEMIS</b>	<b>55</b>
2.1 L'approche de THEMIS . . . . .	56
2.1.1 Le modèle eRCN . . . . .	57
2.1.2 Le modèle DG . . . . .	59
2.1.3 Spectres et grandeurs prédits par les modèles eRCN/DG . . . . .	60
2.1.4 Le modèle optEC . . . . .	60
2.1.5 Propriétés dépendantes de la taille . . . . .	64
2.2 Le modèle THEMIS . . . . .	68
2.2.1 Populations de poussière . . . . .	68
2.2.2 Evolution de la poussière . . . . .	69
2.3 Spectres d'émission en fonction des propriétés des nano-grains carbonés et des conditions d'excitation . . . . .	73
2.3.1 Espace des paramètres . . . . .	73

---

2.3.2	Contribution des nano-particules . . . . .	79
2.4	Résumé du modèle THEMIS/Summary of the THEMIS model . . . . .	83
2.5	Etude des effets de la taille et de la structure des gros grains . . . . .	84
<b>3</b>	<b>Émission des nano-poussières carbonées dans les disques protoplanétaires : les composants aliphatiques-aromatiques</b>	<b>89</b>
3.1	Résumé . . . . .	90
3.2	Réduction des données NaCo . . . . .	92
3.3	Papier . . . . .	95
3.4	Variation du rapport 3.4/3.3 en fonction de $G_0/n_H$ . . . . .	112
<b>4</b>	<b>Distribution spatiale des signatures aromatiques et aliphatiques des nano-grains carbonés dans le disque protoplanétaire de HD 100546</b>	<b>115</b>
4.1	Résumé . . . . .	116
4.2	Papier . . . . .	117
4.3	Analyse des spectres dans les régions proches de l'étoile . . . . .	136
	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>138</b>
	<b>Liste des figures</b>	<b>III</b>
	<b>Liste des tableaux</b>	<b>IX</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>XI</b>

# Introduction générale

« *sell pell* »

---

Devise de Loperhet

Durant cette thèse, je me suis intéressé aux signatures associées à la poussière carbonée, en particulier celles émises par les nano-particules dans l'infrarouge proche et moyen. Ces signatures sont largement observées dans le milieu interstellaire et les galaxies et représentent ainsi un outil essentiel pour étudier les conditions physiques qui y règnent. Notamment, leur étude dans les environnements circumstellaires d'étoiles de type Herbig contribue à notre connaissance de la formation des systèmes planétaires et du cycle de la matière dans la Voie lactée. Ces signatures ne sont pas uniquement le reflet des conditions physiques à l'échelle de l'Univers et des galaxies mais portent également en elles l'information sur la composition et la manière dont s'organise la matière au coeur des grains de poussières. Même si la poussière ne représente qu'un faible pourcentage de la matière galactique, elle intervient dans la formation d'espèces chimiques complexes, le chauffage photo-électrique du gaz, la balance énergétique ou la dynamique des structures. Ainsi, elle participe directement à la structuration et à l'évolution du milieu où elle se trouve. De ces liens réciproques entre petites et grandes échelles naît la complexité que l'astrophysicien cherche à élucider.

Le travail présenté ici se base sur le traitement et l'analyse de données d'observations spectroscopiques obtenues avec le *Very Large Telescope* (VLT) de l'Observatoire européen austral (ESO <sup>1</sup>) au Chili. L'instrument et la méthode utilisés pour l'observation ont permis d'obtenir des spectres résolus spatialement et même après traitement de générer des cartes, d'émission des nano-poussières carbonées de disques protoplanétaires dans le proche infrarouge.

L'interprétation de ces observations nécessite le cadre d'un modèle de représentations. Le modèle THEMIS <sup>2</sup> fournit ce cadre en proposant un modèle physique de la poussière dans lequel les propriétés optiques sont calculées en considérant la composition, la structure et la taille de populations de grains. THEMIS propose un scénario d'évolution de celle-ci au travers des différentes phases du milieu interstellaire. Ce modèle se nourrit des contraintes apportées par les observations et les expériences de laboratoire sur les analogues de poussière. La comparaison des observations au modèle révèle ainsi un peu plus la nature de la matière carbonée au coeur des disques

---

1. European Southern Observatory

2. The Heterogeneous dust Evolution Model for Interstellar Solids



protoplanétaires.

Dans le chapitre 1, nous allons faire l'état de l'art de la matière solide dans l'espace. Quelles sont ses composantes ? Comment l'observe-t-on ? Quels sont les modèles qui la décrivent ? Comment se forme et évolue-t-elle dans le milieu interstellaire de la Voie Lactée ? Nous détaillerons également le cas particulier de la poussière dans les disques protoplanétaires. Quels sont plus précisément les rôles de la poussière ?

Dans le chapitre 2, nous allons détailler le modèle THEMIS. Comment est-il construit ? Comment est-il contraint ? Comment relie-t-il les observations à la physique sous-jacente ? Nous explorons certains des paramètres comme la composition ou la taille pour comprendre leurs contributions aux propriétés optiques.

Le chapitre 3 présente le travail ayant conduit à la publication d'un article dans *Astronomy & Astrophysics* sur l'observation résolue spatialement de signatures spectroscopiques associées aux nano-grains de poussière carbonée dans quatre disques protoplanétaires autour d'étoiles Herbig. Nous montrons notamment que ces signatures sont étendues spatialement et sont portées par des particules sub-nanométriques dont la composition varie peu d'un disque à l'autre.

Dans le chapitre 4, dans la continuité du travail précédent, nous faisons une analyse détaillée des signatures spectroscopiques du disque de HD 100546 dans le proche et moyen infrarouge. Nous modélisons aussi la structure des disques et prenons en compte le transfert radiatif pour prédire l'émission de la poussière. Dans ce travail, soumis à *Astronomy & Astrophysics*, nous montrons notamment que la composition des grains de poussières évoluent avec les conditions physiques.

Les résultats, les perspectives et questions apportés par ce travail sont en [conclusion](#).

# Chapitre 1

## La matière solide dans l'espace

*« J'ai vu une fleur sauvage.  
Quand j'ai su son nom,  
Je l'ai trouvée plus belle. »*

Haïku japonais

### Sommaire

<b>1.1 Le milieu interstellaire</b>	<b>5</b>
1.1.1 Les phases du milieu interstellaire	5
1.1.2 Sources d'énergie	6
<b>1.2 Signatures de la matière solide</b>	<b>8</b>
1.2.1 Extinction interstellaire	8
1.2.1.1 Albédo et diffusion	9
1.2.1.2 La bosse UV à 217.5 nm	10
1.2.1.3 Les bandes d'absorption infrarouge	10
1.2.1.4 Les bandes interstellaires diffuses	13
1.2.2 Emission de la poussière	13
1.2.2.1 Les bandes d'émission infrarouge	15
1.2.2.2 L'émission thermique	21
1.2.2.3 L'émission rouge étendue	21
1.2.3 Polarisation	22
1.2.4 Résumé en une image	23
<b>1.3 Propriétés de la matière solide</b>	<b>24</b>
1.3.1 Composition et liaisons chimiques	24
1.3.1.1 Les poussières carbonées	24
1.3.1.2 Les silicates	26
1.3.1.3 Les glaces	27
1.3.2 Modes de vibration et signatures spectroscopiques	28
1.3.3 Chauffage et refroidissement des grains de poussière	33
1.3.4 Propriétés optiques des grains	36
1.3.4.1 Absorption et diffusion	36
1.3.4.2 Gap optique des matériaux carbonés	37
<b>1.4 Les modèles de poussière</b>	<b>38</b>
<b>1.5 Le cycle de la poussière</b>	<b>40</b>
<b>1.6 La poussière dans les disques protoplanétaires</b>	<b>44</b>
1.6.1 Classification des disques	44
1.6.2 Structure, taille et masse des disques	45
1.6.3 Transport et croissance de la poussière dans les disques	48
1.6.4 L'émission de la poussière selon sa localisation	50

1.6.5 Les nano-particules dans les disques protoplanétaires . . . . .	51
<b>1.7 Résumé et motivations . . . . .</b>	<b>53</b>

---

**Accès direct aux chapitres 1, 2, 3, 4, conclusion**

L'espace entre les étoiles est-il vide ou rempli de matière? Au début du XXe siècle, [BARNARD \(1907; 1910; 1922\)](#) s'intéresse aux nébuleuses, ces "*some remarkable small black spots in the Milky Way*", qui atténuent la lumière des étoiles. En 1930, un consensus semble se dessiner sur la présence d'un "*rarefied invisible material medium [...] not necessarily of uniform distribution throughout all space*" ([TRUMPLER 1930](#)). [TRUMPLER \(1930\)](#) interroge les différents mécanismes qui participent à l'extinction de la lumière sur la ligne de visée séparant l'étoile de l'observateur : l'absorption qu'elle soit globale, sélective ou monochromatique, l'occultation par un astre et la diffusion.

Par sa simple présence, cette matière interroge. De quoi est-elle faite? D'où vient-elle? Comment se répartit-elle autour de nous? Quelles sont ses propriétés? Quels rôles joue-t-elle? En particulier, quel est son impact sur la chimie, l'équilibre énergétique et la dynamique?

## 1.1 Le milieu interstellaire

### 1.1.1 Les phases du milieu interstellaire

Le milieu interstellaire (MIS), défini par l'espace entre les étoiles permet d'appréhender ce qu'est la matière solide dans l'espace. La description de ses différentes phases permet de comprendre les structures de notre galaxie, le cycle de la matière et la formation des systèmes stellaires et planétaires.

Dans notre galaxie, 10% de la masse baryonique se trouve dans le gaz et la poussière qui remplissent le MIS, les 90% restants forment les étoiles. Le MIS est un milieu très peu dense avec en moyenne 1 particule/cm<sup>3</sup> à mettre en comparaison de l'air marin sur Terre qui en contient de l'ordre de 10<sup>19</sup>. La masse de la poussière ne compte que pour 1% de celle de la matière interstellaire mais joue pourtant un rôle essentiel dans la vie de la galaxie. Considérant la composition, cette matière interstellaire est faite de 89% d'atomes d'hydrogène, 9% d'hélium et 2% d'éléments plus lourds appelés métaux dont notamment le carbone, l'oxygène, l'azote, le silicium et le fer qui forment la poussière. La figure 1.1 montre l'abondance des éléments chimiques de la photosphère solaire qui sert de référence pour l'évaluation de l'abondance interstellaire ([ASPLUND et al. 2009](#)). On remarquera que l'hydrogène représente la grande majorité des atomes. C'est pourquoi il est utilisé pour décrire les différentes phases du MIS.

[MCKEE et OSTRIKER \(1977\)](#) proposent une description du MIS en trois phases selon l'état de l'hydrogène (ionisé, atomique ou moléculaire), sa densité et sa température. Dans son manuel de référence, [DRAINE \(2010\)](#) propose une distinction plus détaillée des différentes phases du MIS résumées dans la table 1.1. Le gaz coronal est l'hydrogène ionisé et chauffé par les chocs des explosions de supernovae résultant de la mort des étoiles massives. La phase HII correspond aussi à de l'hydrogène ionisé mais plus froid. Son ionisation est due aux photons UV des étoiles chaudes. Si ces deux phases ionisées occupent près de 50% du volume de MIS, elles ne représentent en revanche qu'une faible masse du gaz interstellaire.

L'hydrogène atomique neutre (HI), qu'il soit tiède (WNM) ou froid (CNM) occupe environ 40% du volume du MIS. Plus froids que les milieux ionisés, les nuages de HI contiennent plus de la moitié de la masse interstellaire. Ils sont tracés en émission ou absorption par la raie HI à 21 cm.

Les nuages moléculaires ont des densités suffisantes pour que leur cœur protégé des rayonnements énergétiques contienne des molécules de dihydrogène H<sub>2</sub>. Opaques dans le visible (Fig. 1.2), ils sont suffisamment froids pour que les grains de poussière accrètent le gaz qui forme des manteaux de glaces (H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, NH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>OH, etc.). C'est en leur sein que se forment les nouvelles étoiles par effondrement gravitationnel. Le H<sub>2</sub>, ne présentant pas de dipôle électrique, est difficilement observable et le monoxyde de carbone gazeux CO est utilisé pour observer les nuages moléculaires.

L'existence d'un gaz sombre, tracé ni par la raie à 21 cm, ni par le CO, est suggéré par l'interaction des rayons cosmiques avec le gaz neutre ([GRENIER et al. 2005](#)), l'excès d'émission dans l'IR lointain ([PLANCK COLLABORATION et al. 2011](#)), l'extinction de la poussière au travers des nuages diffus ([PARADIS et al. 2012](#)) et l'émission du carbone ionisé ([LANGER et al. 2014](#)). Son origine et ses

propriétés sont actuellement vivement débattues (e.g., [MURRAY et al. 2018](#)). Il pourrait représenter une part significative de la matière interstellaire.

La section 1.5 détaillera le cycle de la poussière à travers ces différentes phases.

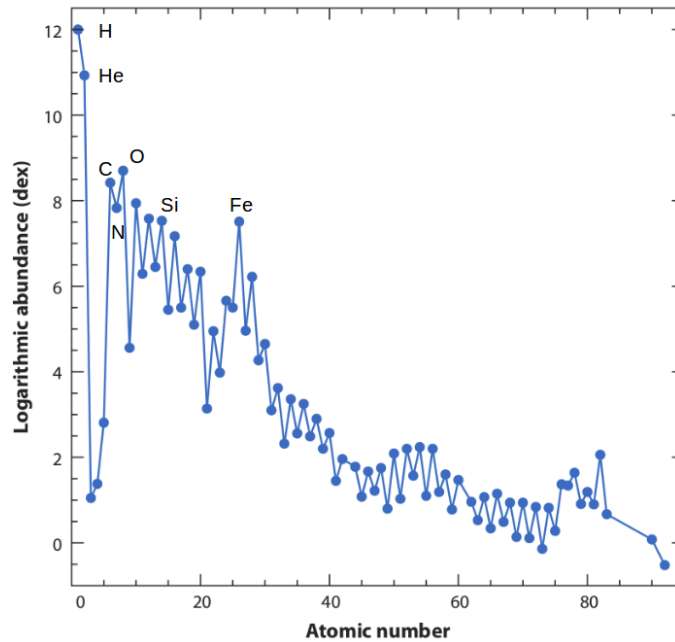


FIGURE 1.1 – Abondance des éléments chimiques dans la photosphère solaire. Figure adaptée de [ASPLUND et al. \(2009\)](#), Fig. 4. Les abondances sont normalisées à celle de l'hydrogène dont la valeur est fixée à  $10^{12}$ .

### 1.1.2 Sources d'énergie

Les conditions de température, de densité et d'ionisation de la matière interstellaire sont le reflet des processus énergétiques auxquels elle est confrontée. Dans le MIS, l'énergie est présente sous forme de photons, de rayons cosmiques, de champs gravitationnel et magnétique, thermique, turbulente ou encore chimique. L'énergie lumineuse se retrouve notamment dans trois catégories : la lumière des étoiles, l'émission infrarouge (IR) de la poussière, et le CMB<sup>1</sup> qui est le rayonnement fossile des premiers âges de l'univers. La table 1.2 résume les densités associées à chaque type d'énergie. [DRAINE \(2010\)](#) note qu'il est remarquable que ces énergies tombent dans la gamme  $0.2\text{-}2\text{ eV}\cdot\text{cm}^{-3}$  et que si cela peut relever de la coïncidence, cela suggère que ces énergies sont en fait couplées :

*<< the magnetic energy has been built up by fluid motions, so it is probably not a coincidence that the magnetic energy density  $B^2/8\pi$  and the turbulent energy  $(1/2)\rho v^2$  are comparable in magnitude. Similarly, if the cosmic ray energy density were much larger, it would not be possible for the magnetized ISM to confine the cosmic rays, and they would be able to escape freely from the Galaxy - this negative feedback limits the cosmic ray energy density to approximate equipartition with the sum of the turbulent energy density and thermal pressure in the ISM. [...] if the starlight energy density were much larger (by a factor  $\sim 10^2$ ), radiation pressure acting on dust grains would be able to "levitate" the ISM above and below the galactic midplane, presumably suppressing star formation; this feedback loop may play a role in regulating the starlight energy density in star-forming galaxies.>>*

1. Cosmic microwave background

TABLEAU 1.1 – Phases du milieu interstellaire. Adapté de [DRAINE \(2010\)](#), Table 1.3.  $f_v$  est le facteur de remplissage volumique

Phase	T [K]	$n_H$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]
Gaz coronal (HIM*) $f_v \approx 0.5$ $n_H f_v \approx 0.002 \text{ cm}^{-3}$ <i>*Hot ionized medium</i>	$\geq 10^{5.5}$	$\sim 0.004$
Gaz HII $f_v \approx 0.1$ $n_H f_v \approx 0.02 \text{ cm}^{-3}$	$10^4$	$0.3-10^4$
HI tiède (WNM*) $f_v \approx 0.4$ $n_H f_v \approx 0.2 \text{ cm}^{-3}$ <i>*Warm Neutral Medium</i>	$\sim 5000$	0.6
HI froid (CNM*) $f_v \approx 0.01$ $n_H f_v \approx 0.3 \text{ cm}^{-3}$ <i>*Cold Neutral Medium</i>	$\sim 100$	30
H <sub>2</sub> diffus $f_v \approx 0.001$ $n_H f_v \approx 0.1 \text{ cm}^{-3}$	$\sim 50$	$\sim 100$
H <sub>2</sub> dense $f_v \approx 10^{-4}$ $n_H f_v \approx 0.2 \text{ cm}^{-3}$	10-50	$10^3-10^6$
Flux stellaires froids	$50-10^3$	$1-10^6$



FIGURE 1.2 – Nuage moléculaire sombre Barnard 68. Image composite en trois couleurs, bleu, vert, IR, obtenus avec les instruments ANTU et FORS1 au VLT au petit matin du 27 mars 1999. Le champ mesure  $6.8 \times 6.8''$ . Crédit : ESO

TABLEAU 1.2 – Densités énergétiques dans le MIS. Adapté de [DRAINE \(2010\)](#), Table 1.5 (voir pour références des valeurs)

Composante énergétique	Densité d'énergie [eV.cm <sup>-3</sup> ]
Emission IR lointain de la poussière	0.31
Lumière des étoiles (E<13.6 eV)	0.54
CMB (T <sub>CMB</sub> =2.725 K)	0.265
Energie cinétique thermique (3/2)nkT	0.49
Energie cinétique turbulente (1/2)ρv <sup>2</sup>	0.22
Energie magnétique B <sup>2</sup> /8π	0.89
Rayons cosmiques	1.39

Selon leur environnement local, le gaz et la poussière connaissent des mécanismes de chauffage/refroidissement, de formation/destruction ou de transformation (coagulation et aromatisation des grains de poussières carbonées, accréation du gaz sur les grains) qui dépendent du type d'énergie qui domine.

## 1.2 Signatures de la matière solide

L'interaction de la lumière avec la matière est la principale source d'information que nous pouvons obtenir sur les environnements astrophysiques. A travers celle-ci, la matière imprime sa signature sur les photons qui arrivent jusqu'à nos télescopes. L'analyse photométrique ou spectroscopique nous permet de remonter aux propriétés de la matière et aux conditions physiques du MIS. Les mécanismes, grandeurs et observations associées à ces signatures sont introduits dans la suite.

### 1.2.1 Extinction interstellaire

L'extinction interstellaire est l'atténuation du rayonnement émis par une source astrophysique. Elle est due à l'absorption et à la diffusion de la lumière par la poussière sur la ligne de visée entre la source et l'observateur. L'intensité du rayonnement reçu  $I(\lambda)$  est liée à celle du rayonnement émis  $I_0(\lambda)$  par la relation :

$$I(\lambda) = I_0(\lambda)e^{-\tau(\lambda)} \quad (1.1)$$

avec  $\tau$ , la profondeur optique, caractéristique de la transmission du milieu.

L'extinction  $A_\lambda$  exprime une différence de magnitude et est définie par :

$$A_\lambda = -2.5 \log(I(\lambda)/I_0(\lambda)) \quad (1.2)$$

Ainsi, on a :

$$A_\lambda = 1.086\tau(\lambda) \quad (1.3)$$

En pratique,  $I_0(\lambda)$  et donc  $A_\lambda$  ou  $\tau$  ne sont pas accessibles directement et il est nécessaire d'introduire la notion d'excès de couleur.

Le flux reçu  $F$  par une étoile de luminosité  $L_\star$  située à une distance  $D$  est :

$$F(\lambda) = \frac{L_\star(\lambda)}{4\pi D^2} e^{-\tau(\lambda)} \quad (1.4)$$

Sa magnitude s'exprime comme :

$$m(\lambda) = -\ln L_\star(\lambda) + \tau(\lambda) + 2\ln(D) + \text{constante} \quad (1.5)$$

Si on considère les mesures de la magnitude de deux étoiles de même type spectral et de même luminosité  $L_\star$ , l'une subissant de l'extinction ( $\tau_1$ ), l'autre non ( $\tau_2=0$ ) et situées à des distances  $D_1$  et  $D_2$  alors la différence de leurs magnitudes  $\Delta m(\lambda)$  vaut :

$$\Delta m(\lambda) = -\tau_1(\lambda) - 2\ln(D_1/D_2) \quad (1.6)$$

Cette différence de magnitude permet d'introduire l'excès de couleur  $E(\lambda, \lambda')$  qui est la différence de  $\Delta m$  pour deux longueurs d'ondes  $\lambda$  et  $\lambda'$  :

$$E(\lambda, \lambda') = \Delta m(\lambda) - \Delta m(\lambda') \quad (1.7)$$

L'excès de couleur standard  $E(B, V)$  ou  $E_{B-V}$  est l'excès de couleur entre les bandes B ( $\lambda = 0.44 \mu\text{m}$ ) et V ( $\lambda = 0.55 \mu\text{m}$ ).

La loi d'extinction interstellaire standard est donnée par :

$$ext(\lambda) = \frac{E(\lambda, V)}{E(B, V)} = \frac{A_\lambda - A_V}{A_B - A_V} = \frac{\tau_\lambda - \tau_V}{\tau_B - \tau_V} \quad (1.8)$$

Le paramètre  $R_V$  introduit par [CARDELLI et al. \(1989\)](#) permet d'estimer et de caractériser la loi d'extinction. Il correspond au rapport entre l'extinction dans la bande V et l'excès de couleur standard :

$$R_V = \frac{A_V}{E_{B-V}} \quad (1.9)$$

Les courbes d'extinction pour plusieurs valeurs de  $R_V$  (Fig. 1.3) montrent que l'extinction est indépendante de  $R_V$  pour les longueurs d'ondes de l'IR-visible ( $\lambda^{-1} < 2 \mu\text{m}^{-1}$ ). Dans le moyen IR, entre 3 et 8  $\mu\text{m}$ , l'extinction est plus plate que celle prédite par les modèles ([MCCLURE 2009](#), [WANG et al. 2013](#)). La présence de grains graphitiques microniques pour expliquer cette observation ([WANG et al. 2015](#)) n'est pas compatible avec les observations Planck à 3 mm, longueur d'onde à laquelle ces grains auraient une contribution thermique. Une explication alternative pourrait se trouver dans le réexamen des propriétés optiques des silicates interstellaires ([DEMYK et al. 2017](#), [MUTSCHKE et MOHR 2019](#)).

Dans l'UV, la pente dépend très fortement de  $R_V$  et augmente quand  $R_V$  diminue. L'extinction croissante quand la longueur d'onde diminue explique le rougissement des étoiles. On note la présence d'une bosse vers  $\lambda^{-1} \approx 4.6 \mu\text{m}^{-1}$  ( $\lambda \approx 217.5 \text{ nm}$ ) appelée *UV bump* ou bosse UV.

Pour le MIS diffus,  $R_V \approx 3.1$  ([SAVAGE et MATHIS 1979](#), [CARDELLI et al. 1989](#)). Dans les régions plus denses,  $R_V$  augmente ([FITZPATRICK et MASSA 2007](#), [CARDELLI et al. 1989](#)) tel que  $4 < R_V < 6$  ([MATHIS 1990](#)). Cette augmentation suggère à l'augmentation de la taille des grains (e.g., [WHITTET et al. 2001](#)). La gamme de variation de  $R_V$  s'étend de  $\sim 0.7$  pour les quasars ([WANG et al. 2004](#)) à  $\sim 7$  pour les lentilles gravitationnelles des galaxies ([FALCO et al. 1999](#)).

L'étude des courbes d'extinction est riche en information et les observables remarquables associées à la poussière sont discutées dans la suite.

### 1.2.1.1 Albédo et diffusion

D'autre part, comme il a été précisé en début de section, la profondeur optique  $\tau$  dépend de l'absorption et de la diffusion de la lumière par la matière sur la ligne de visée. Si on considère sa densité volumique  $n$  et  $L$  la longueur de la ligne de visée, les particules qui constituent le matériau ont une certaine probabilité d'éteindre le rayonnement. Cette probabilité, appelée section efficace d'extinction et notée  $\sigma_{ext}$ , a la dimension d'une surface.  $\sigma_{ext}$  et  $\tau$  sont reliées par l'intégrale sur la ligne de visée de la densité de matière :

$$\tau(\lambda) = \sigma_{ext}(\lambda) \int n dL = \sigma_{ext}(\lambda) N \quad (1.10)$$

avec  $N$ , la densité de colonne.

$\sigma_{ext}$  est donnée par la somme des sections efficaces d'absorption  $\sigma_{abs}$  et de diffusion  $\sigma_{sca}$  :

$$\sigma_{ext} = \sigma_{abs} + \sigma_{sca} \quad (1.11)$$

Dans la suite, les efficacités d'absorption  $Q_{abs}$  et de diffusion  $Q_{sca}$  seront souvent préférées aux sections efficaces. On a :

$$Q_{abs} = \frac{\sigma_{abs}}{\pi a^2} \quad (1.12)$$



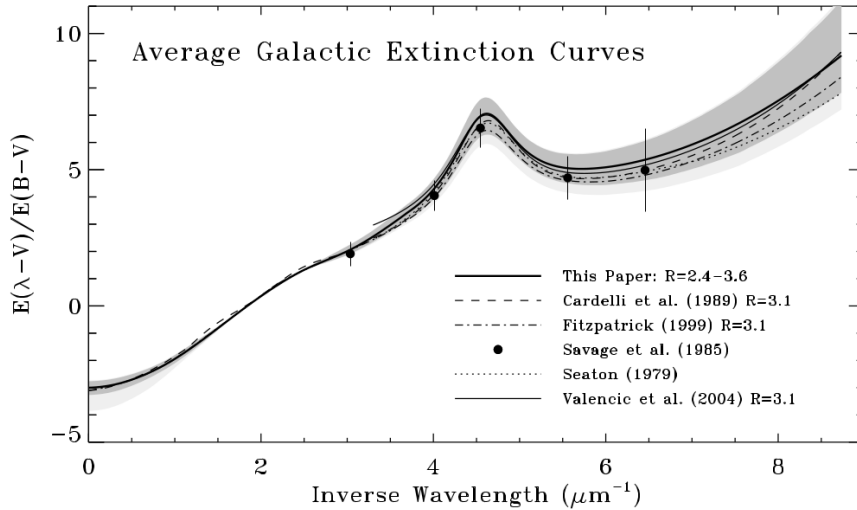


FIGURE 1.3 – Courbes d’extinction pour  $2.4 < R_V < 3.6$ . Les zones grisées montrent la variance des courbes en fonction de la longueur d’onde. (Source : FITZPATRICK et MASSA 2007; Fig. 9).

$$Q_{sca} = \frac{\sigma_{sca}}{\pi a^2} \quad (1.13)$$

Pour une particule sphérique de rayon  $a$  dans la limite de Rayleigh, la théorie de Mie dit que  $Q_{abs} \propto a/\lambda$  et  $Q_{sca} \propto (a/\lambda)^4$ . Ainsi l’absorption domine quand  $a \ll \lambda$  et la diffusion quand  $\lambda \approx 2\pi a$ .

Les efficacités d’absorption et de diffusion permettent d’introduire une grandeur utile, l’albédo  $Q_{sca}/Q_{ext}$  avec  $Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{sca}$ , l’efficacité d’extinction. L’albédo permet d’expliciter les contributions relatives de l’absorption et de la diffusion selon la longueur d’onde et fournit donc des contraintes sur la taille des particules.

La figure 1.4 montre les albédos mesurés pour des milieux diffus et denses. On observe une chute de l’albédo (i.e. une absorption dominante) vers  $\lambda^{-1} \approx 4.6 \mu m^{-1}$  ( $\lambda \approx 217.5$  nm), c’est-à-dire pour la bosse UV. Ceci suggère donc que la bosse UV est due à des particules de taille nanométrique, capables d’absorber à ces longueurs d’onde.

### 1.2.1.2 La bosse UV à 217.5 nm

La bosse UV a été rapportée la première fois par STECHER (1965; 1969). Sa position varie assez peu contrairement à son intensité et sa largeur (FITZPATRICK et MASSA 1986). L’origine de cette signature reste encore mal comprise mais est attribuée généralement aux transitions électroniques des matériaux carbonés. Différents porteurs ont été proposés pour l’expliquer : le graphite (DRAINE et LEE 1984), les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP ou PAH<sup>2</sup>) (e.g., JOBLIN et al. 1992, STEGLICH et al. 2011) ou les carbones amorphes hydrogénés (a-C:H) (e.g., JONES 1990; 2016a, GAVILAN et al. 2017). Comme il vient d’être précisé juste avant, les mesures d’albédo suggèrent que cette signature est portée par des particules de taille nanométrique.

### 1.2.1.3 Les bandes d’absorption infrarouge

L’examen particulier des courbes d’extinction révèle la présence de bandes d’absorption dans l’IR (Fig. 1.5). Ces bandes sont dues aux vibrations des molécules et groupements au cœur des matériaux absorbants et représentent un vaste objet d’étude de la spectroscopie infrarouge. Les mécanismes sous-jacents et les propriétés seront détaillés dans la section 1.3. On notera que l’énergie

2. Polycyclic aromatic hydrocarbons

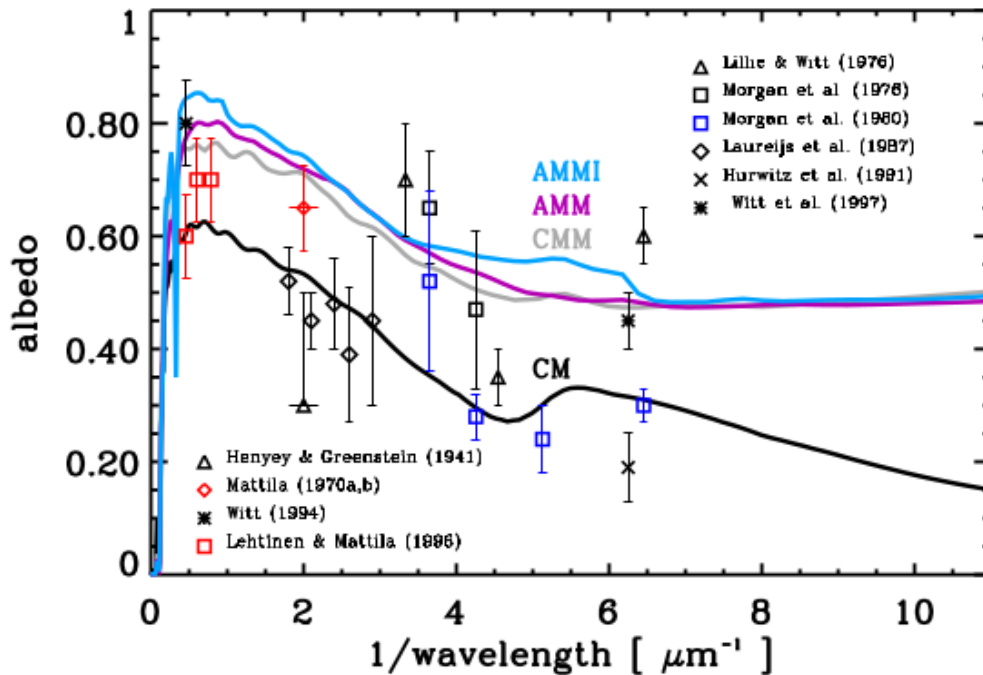


FIGURE 1.4 – Albédos mesurés pour le milieu diffus (noir) et des milieux denses (rouge et bleu). Les albédos prédits pour différentes populations de grains par le modèle THEMIS (Chap. 2) et KÖHLER et al. (2015) sont tacés (lignes) pour aider la lecture. (Source : JONES et al. 2016; Fig. 11).

des modes de rotation est à plus grande longueur d'onde et celle des transitions électroniques à plus petites longueurs d'onde et sont aussi objets particuliers d'étude.

**La matière carbonée.** Trois signatures à 3.4, 6.85 et 7.25  $\mu\text{m}$  (Fig. 1.5) sont observées dans le MIS galactique et extragalactique (WICKRAMASINGHE et ALLEN 1980, ADAMSON et al. 1990, WHITTET et al. 1997, PENDLETON et ALLAMANDOLA 2002, SPOON et al. 2004, DARTOIS et al. 2007).

La signature à 3.4  $\mu\text{m}$ , découverte en direction du centre galactique (SOIFER et al. 1976), est une large bande présentant notamment des sous-structures à 3.41 et 3.48  $\mu\text{m}$  (MCFADZEAN et al. 1989). Elle est détectée sur différentes lignes de visée en direction du centre galactique et d'autres régions du MIS diffus (SANDFORD et al. 1991, PENDLETON et al. 1994, RAWLINGS et al. 2003, GODARD et al. 2012).

Ces signatures sont associées à des modes de vibrations C-H des matériaux carbonés amorphes (DULEY et WILLIAMS 1983). Les signatures à 6.85 et 7.25  $\mu\text{m}$ , visibles seulement depuis l'espace sont observées vers le centre galactique (CHIAR et al. 2000, DARTOIS et al. 2004a) et dans les autres galaxies (SPOON et al. 2004). GODARD (2011) en fait une revue détaillée dans sa thèse qui précise que du fait du rapport extinction visuelle/profondeur optique  $A_V/\tau_{3.4}$  élevé, cette bande est difficile à observer. Cela est encore plus vrai pour la bande à 6.85  $\mu\text{m}$  (DARTOIS et MUÑOZ-CARO 2007). Ces signatures, caractéristiques des matériaux carbonés amorphes mais difficiles à observer révèlent que ceux-ci contiennent une part importante de la masse du carbone (DARTOIS et MUÑOZ-CARO 2007).

Des signatures en absorption à 3.28  $\mu\text{m}$  (CHIAR et al. 2000) et 6.2  $\mu\text{m}$  (SCHUTTE et al. 1998) sont attribuées aux carbonés aromatiques. Une signature à 3.47  $\mu\text{m}$  est associée aux nano-diamants (PIRALI et al. 2007, ALLAMANDOLA et al. 1992; 1993) et est observée dans les nuages denses.

**Les silicates.** La présence des silicates est révélée par deux larges signatures à 9.7 et 18  $\mu\text{m}$  (Fig. 1.5). Ces signatures en absorption sont largement observées dans le MIS diffus (e.g., WHITTET et al. 1997, CHIAR et al. 2000, CHIAR et TIELENS 2006, FOGERTY et al. 2016) et les nuages moléculaires

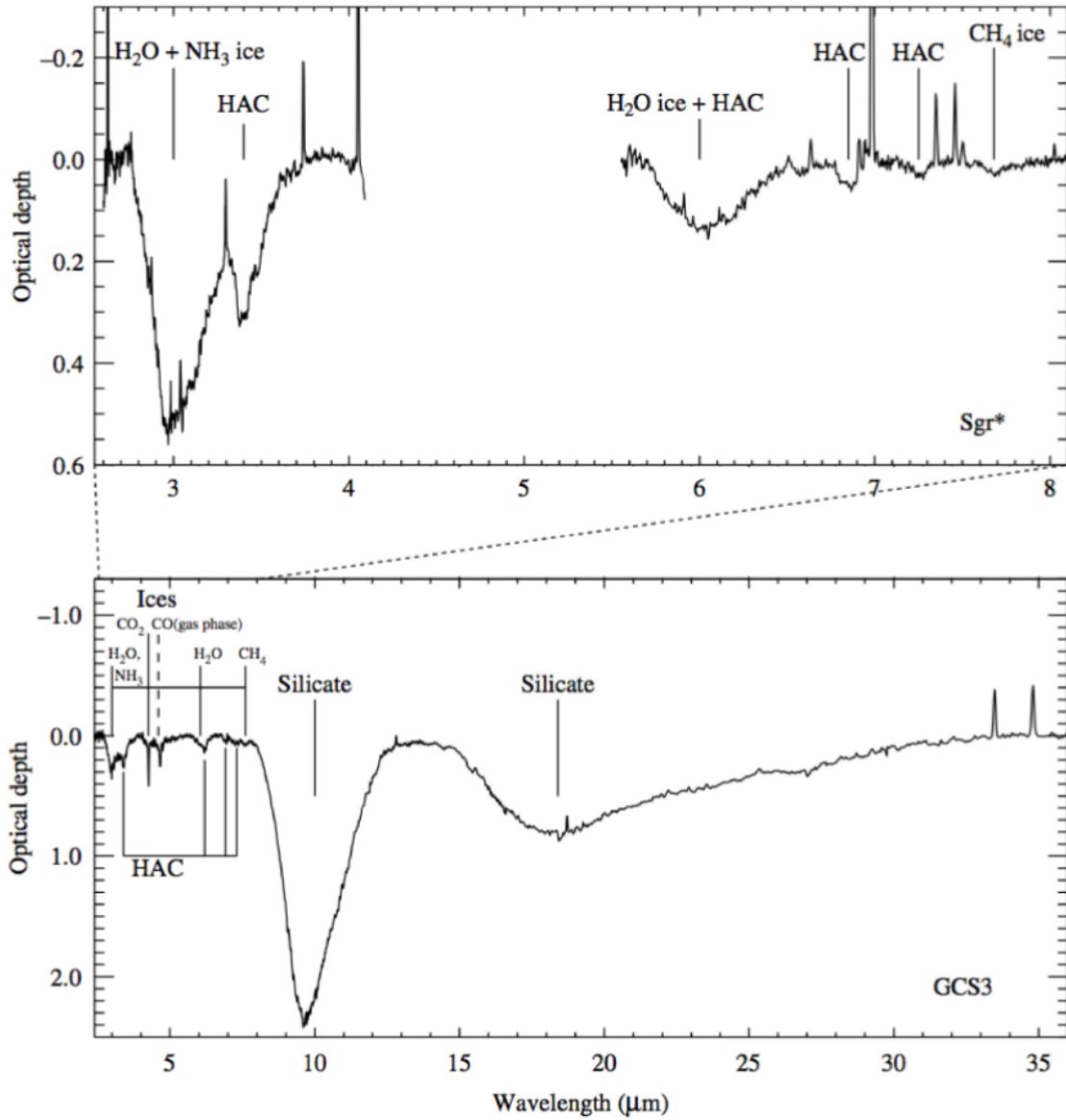


FIGURE 1.5 – Spectres illustrant l'absorption IR de sources en direction du centre galactique. Certaines signatures sont associées aux a-C:H (HAC) dans le milieu diffus, d'autres le sont aux glaces présentes dans les nuages moléculaires. (Source : TIELENS 2005; Fig. 5.8).

(e.g., [VAN BREEMEN et al. 2011](#)) et sont liées aux modes de vibrations des liaisons Si-O et O-Si-O des silicates amorphes de type olivine et pyroxène, respectivement. Amorphes dans le MIS diffus, les silicates sont partiellement cristallisés (~2%) dans les environnements circumstellaires (e.g., [KEMPER et al. 2004](#), [LI et DRAINE 2001](#)) et suggèrent ainsi des mécanismes de transformations. Une signature en absorption de silicates cristallins à 11  $\mu\text{m}$  est aussi observée autour d'étoiles jeunes et évoluées ([WRIGHT et al. 2016](#)). [MOLSTER et al. \(2010\)](#), [HENNING \(2010\)](#) en donnent une revue détaillée.

Les silicates et la matière carbonée sont les deux composants majeurs de la poussière. Leurs propriétés et observations en émission seront abordées plus en détail dans la suite.

**Les glaces.** Elles se forment dans les régions denses quand les conditions de température permettent leur condensation. Elles sont observées dans les nuages et cœurs denses, les enveloppes et les disques des jeunes objets stellaires (YSO<sup>3</sup>), autour des étoiles évoluées, vers le centre galactique et les autres galaxies (voir la revue de [BOOGERT et al. \(2015\)](#) et les références dedans). Les principales glaces sont celles de H<sub>2</sub>O, CO et CO<sub>2</sub> et présentent des signatures à 3  $\mu\text{m}$ , 4.67  $\mu\text{m}$  et 15.2  $\mu\text{m}$ , respectivement.

Dans le cas des YSO de masse faible ou intermédiaire, étapes entre les cœurs denses des nuages moléculaires et les disques protoplanétaires, la première détection d'une bande de glace, celle de H<sub>2</sub>O à 3  $\mu\text{m}$ , date de 1975 autour de HL Tau ([COHEN 1975](#)). Une étude de [ZASOWSKI et al. \(2009\)](#) basée sur les observations du télescope spatial Spitzer dans la gamme 5-20  $\mu\text{m}$  sur les YSO du nuage du Taureau inventorie les espèces de glaces et leur abondance : H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>CO, HCOOH, et SO<sub>2</sub>.

#### 1.2.1.4 Les bandes interstellaires diffuses

Les bandes interstellaires diffuses (DIB<sup>4</sup>) (Fig. 1.6) sont observées dans le visible et proche IR. Découvertes par [HEGER \(1922\)](#) en 1922, plus de 400 sont répertoriées aujourd'hui ([HOBBS et al. 2009](#)). Différentes hypothèses sur leur origine ont été avancées ([SNOW et DESTREE 2011](#)) comme les PAH. Les porteurs des DIB sont largement inconnus et seulement quatre DIB ont pu être associées au fullerène C<sub>60</sub><sup>+</sup> par [CAMPBELL et al. \(2015\)](#). L'intensité des DIB corrèle bien avec l'extinction sauf dans les régions plus denses où une déplétion accrue des DIB est observée ([HERBIG 1995](#)). Récemment, [FAN et al. \(2017\)](#), [ELYAJOURI et LALLEMENT \(2019\)](#) ont établi la corrélation entre la déplétion des porteurs des DIB et l'extinction de la poussière dans les cœurs denses. Cette déplétion pourrait s'expliquer par des effets de charge, la photo-transformation (hydrogénation/déhydrogénation) des grains de poussières ou par la coagulation et la formation d'agrégats (Voir [ELYAJOURI et LALLEMENT 2019](#); et références à l'intérieur). Si la corrélation au premier ordre entre les DIB est positive, les différences suggèrent des porteurs différents ([HERBIG 1995](#)). Certaines DIB présentent des sous-structures spectrales compatibles avec les modes non résolus des rotations de molécules ([ELYAJOURI et al. 2018](#)). L'identification des DIB représente un enjeu majeur pour comprendre le cycle de la matière dans le MIS.

#### 1.2.2 Emission de la poussière

Dans la section précédente, nous avons vu que l'extinction de la lumière révélait la présence de poussière sur la ligne de visée. Selon les conditions d'équilibre thermique du milieu, l'énergie absorbée est réémise par la poussière. Cette absorption/émission de lumière participe au chauffage/refroidissement du MIS et se traduit par des changements sur les spectres observés.

L'émission de la poussière représente près du quart de l'énergie émise et domine largement le spectre du moyen-IR au sub-millimétrique ([GALLIANO et al. 2018](#)). La moitié de l'énergie émise

3. *Young stellar objects*

4. *Diffuse interstellar bands*

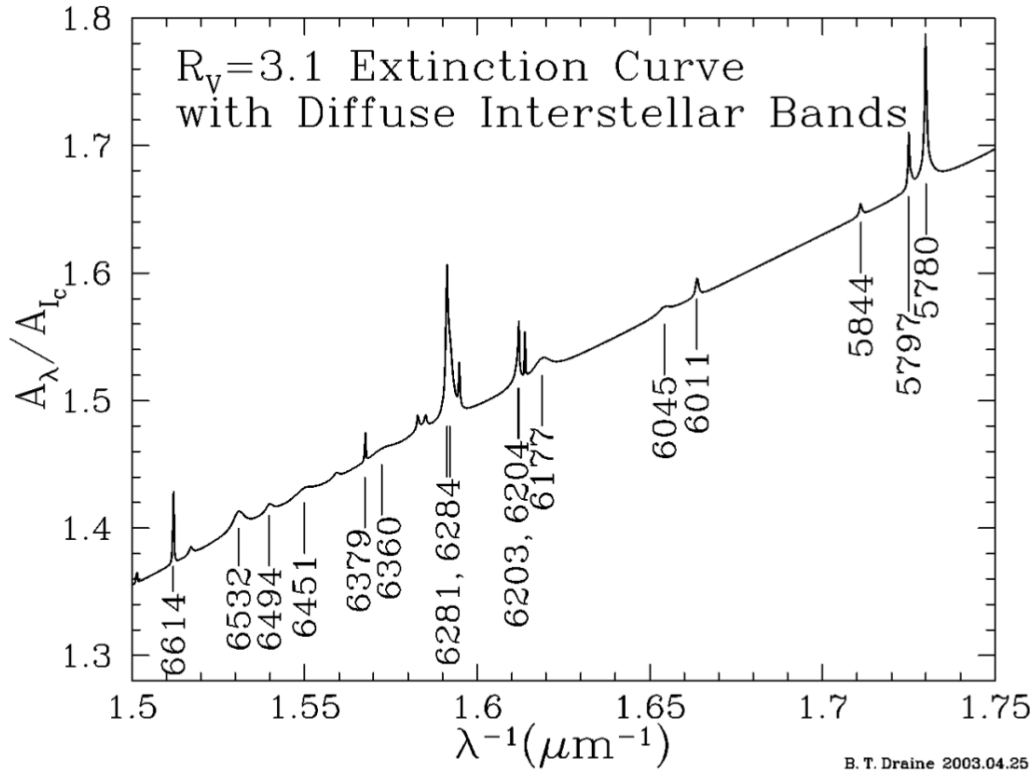


FIGURE 1.6 – Bandes interstellaires diffuses (DIB) dans la région 550-667 nm. L'extinction est normalisée à celle de la bande I. (Source : [DRAINE 2003](#); Fig. 5).

l'est par les étoiles et près de 20% par le CMB. Les autres sources d'émission sont, par ordre décroissant d'importance, le rayonnement de freinage (*free-free*) des plasmas, celui de l'hydrogène et notamment la raie H $\alpha$ , les rayonnements X puis synchrotron ([DRAINE 2010](#); Chap. 12). On note que si la poussière ne contient qu'une faible proportion de la masse totale des galaxies, son poids est essentiel dans la balance énergétique.

Dans le MIS, la poussière absorbe environ un tiers du rayonnement UV-visible pour le ré-émettre dans l'IR ([BERNSTEIN et al. 2002](#)). L'observation d'un spectre d'émission (Fig. 1.7) montre des bandes d'émission dans l'IR entre 3 et 20  $\mu\text{m}$ , une émission de corps noir modifié dans l'IR lointain. On observe aussi une émission de corps gris entre 20 et 100  $\mu\text{m}$ .

Le spectre de la figure 1.7 reflète les différents mécanismes d'émission de la poussière. Selon la taille des grains de poussières et les conditions d'irradiation, les grains sont soit à l'équilibre thermique et ont une émission de corps noir, soit chauffés stochastiquement et ont une émission de bandes. Ces mécanismes liés aux propriétés de composition et de taille de la poussière sont détaillés dans la section 1.3.

On remarque qu'on focalise ici sur l'aspect absorption/émission de la lumière par la poussière. En réalité, de multiples processus sont à l'œuvre comme la transformation/destruction, la formation/croissance des grains. Ces processus, compétitifs, dépendent de l'intensité et de la dureté du champ de rayonnement, de la densité du milieu, de la composition et des propriétés de la poussière. Dès lors, il faut garder à l'esprit que les spectres observés sont le résultat de ces différents mécanismes. Ainsi, ils fournissent des contraintes sur la physique du MIS et suggèrent l'idée d'évolution et de cycle de la matière.

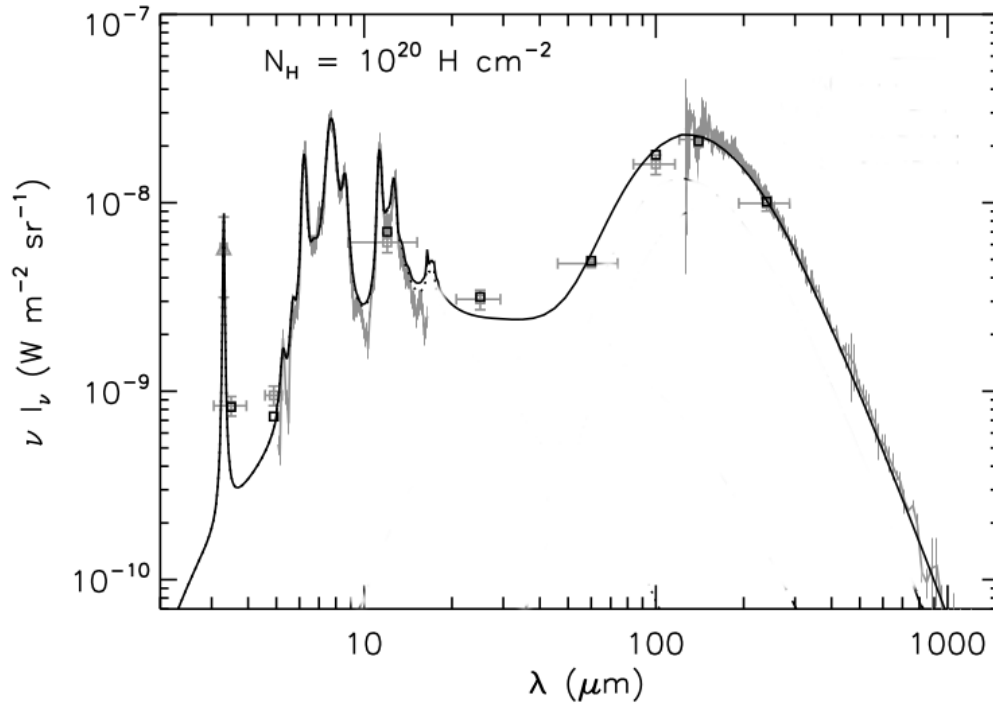


FIGURE 1.7 – Spectre d’émission du milieu interstellaire diffus à haute latitude galactique. Les données d’observation viennent des spectres  $\sim 5\text{-}15\ \mu\text{m}$  ISOCAM/CVF d’ISO et  $\sim 100\text{-}1000\ \mu\text{m}$  de FIRAS/COBE, de la mesure AROME à  $3.3\ \mu\text{m}$  en bande étroite (triangle) et de la photométrie DIRBE/COBE (carrés). Le trait plein noir est le spectre prédit par le modèle de [COMPIÈGNE et al. \(2011\)](#). La figure est adaptée de [COMPIÈGNE et al. \(2011\)](#), Fig. 2.

### 1.2.2.1 Les bandes d’émission infrarouge

**Les carbones aromatiques.** Le spectre d’émission du MIS (Fig. 1.7) montre la présence de bandes à  $3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.3$  et  $12.7\ \mu\text{m}$ . Découvertes dans les années 1970 et d’abord nommées UIR<sup>5</sup>, ces signatures sont attribuées dans les années 1980 aux carbones aromatiques ([DULEY et WILLIAMS 1981](#)) et notamment aux PAH ([LEGER et PUGET 1984](#), [ALLAMANDOLA et al. 1985](#)). Elles sont plus généralement nommées AIB<sup>6</sup> du fait qu’elles soient portées par des grosses molécules ou des petits grains ([ALLAMANDOLA et al. 1989](#)) chauffés stochastiquement. Comme illustré par la figure 1.8, les AIB sont largement observées dans le MIS et sont utilisées notamment pour sonder les régions de photo-dissociation (PDR<sup>7</sup>), qui séparent les régions ionisées des régions moléculaires (e.g., [TIELENS et al. 1993](#)). Elles sont observées dans un très grand nombre d’objets galactiques comme les nébuleuse interstellaires, les disques protoplanétaires et les nébuleuses planétaires ; et extra-galactiques (voir la revue détaillée de [TIELENS \(2008\)](#)).

**Les carbones aliphatiques.** La bande à  $3.4\ \mu\text{m}$  révèle une structure présentant plusieurs sous-structures à  $3.4, 3.46, 3.51$  et  $3.56\ \mu\text{m}$  (Fig. 1.9). Ces signatures sont associées aux carbones aliphatiques ([DULEY et WILLIAMS 1983](#)) et sont observées dans les nébuleuses (proto-)planétaires autour d’étoiles évoluées<sup>8</sup> ([JOURDAIN DE MUIZON et al. 1990](#), [GEBALLE et al. 1992](#), [HRIVNAK et al. 2007](#)), dans les disques protoplanétaires (Sect. 1.6) et semblent plus largement distribués dans les galaxies ([YAMAGISHI et al. 2012](#)). Les carbones aliphatiques présentent également des signatures à  $6.9$  et  $7.3\ \mu\text{m}$  ([KWOK et al. 1999](#)).

5. *Unidentified InfraRed bands*

6. *Aromatic infrared bands*

7. *Photo Dissociation Region*

8. Le nom de nébuleuse planétaire est plutôt mal choisi car il s’agit d’un des derniers stades de la vie des étoiles.

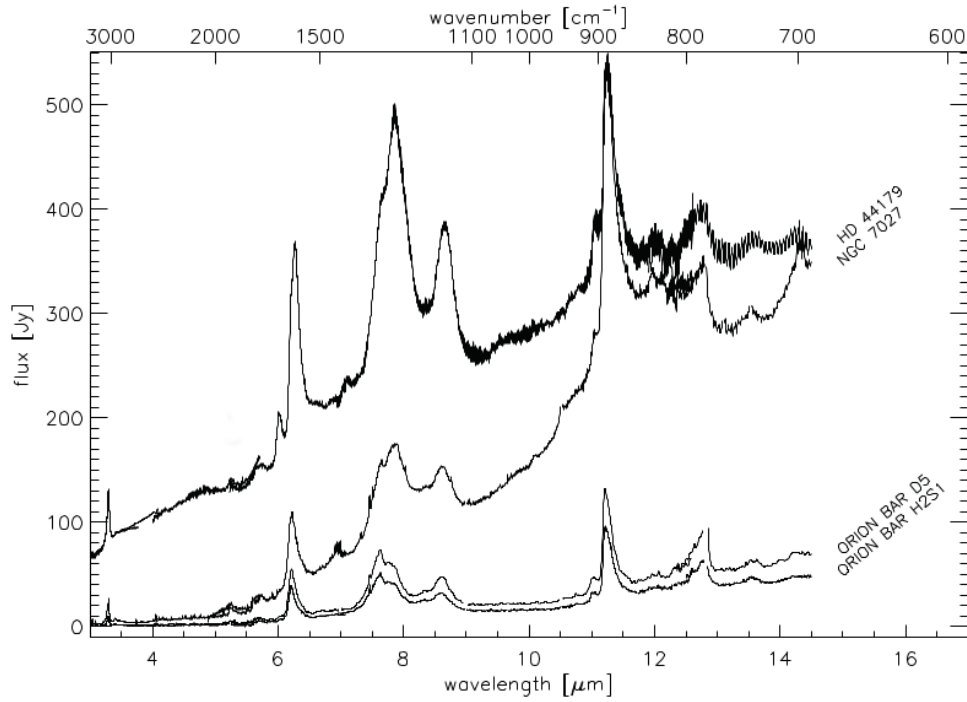


FIGURE 1.8 – Spectres ISO-SWS dans l'IR où les AIB sont observées. Les spectres sont ceux de la protoné-  
buleuse planétaire du Rectangle Rouge (HD 44179), de la nébuleuse planétaire NGC 7027 et deux positions  
dans la nébuleuse diffuse d'Orion. (Source : [BOERSMA 2009](#); Fig. 1.1).

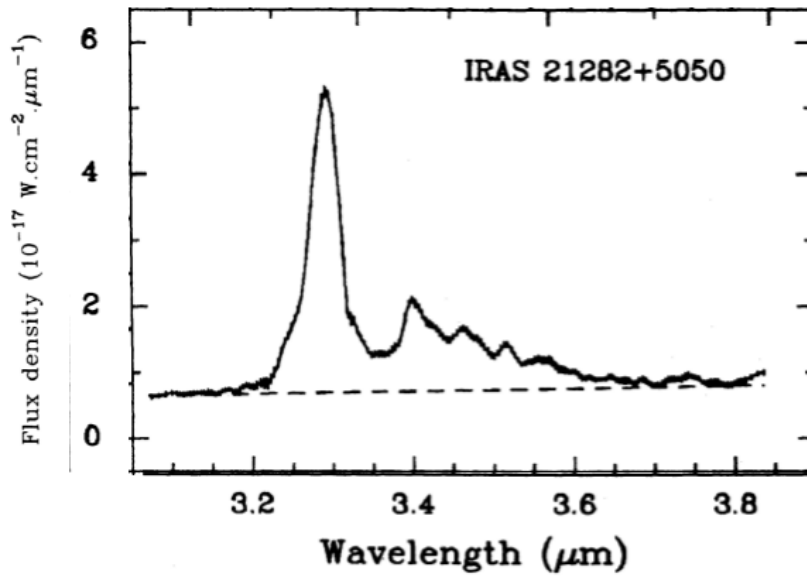


FIGURE 1.9 – Spectres d'émission IR entre 3 et 4 μm où les signatures aliphatiques sont observées. Le spectre  
est celui de la nébuleuse planétaire 21282+5050. (Source : [JOURDAIN DE MUIZON et al. 1990](#); Fig. 1).

**Les carbones aromatiques/aliphatiques.** Les observations montrent que la position des bandes associées aux carbones aromatiques, leurs intensités relatives et leurs largeurs varient (Fig. 1.10). Les spectres mesurés en laboratoire permettent d'expliquer en partie ces changements par les variations de température et de taille des particules (JOBLIN et al. 1994b; 1995). Leur prise en compte dans les modèles ainsi que de la composition et de l'état d'ionisation des porteurs permettent de reproduire les observations (DRAINE et LI 2001, PAGE et al. 2003, RAPACIOLI et al. 2005, FLAGEY et al. 2006). La figure 1.10 montre plus précisément les changements de position et de profils des bandes observées. Pour tenir compte de cette diversité, PEETERS et al. (2002) proposent de classer les objets en trois classes A, B et C selon la position des bandes en longueur d'onde. Les auteurs remarquent que toutes les sources du MIS diffus, quelques nébuleuses planétaires et post-AGB sont de classe A. Les étoiles Herbig isolées, les nébuleuses planétaires et quelques post-AGB appartiennent à la classe B. Deux post-AGB sont associées à la classe C. VAN DIEDENHOVEN et al. (2004) ajoutent à la classe A les YSO et les étoiles Herbig non-isolées.

Ces observations suggèrent que la composition de la poussière carbonée évolue avec les conditions physiques. En effet, l'émission proche et moyen IR dépend des propriétés des grains et de leur composition. Des changements de leur émission suggère donc une évolution de leurs propriétés. Cette idée n'est pas nouvelle et ROBERTSON (1986; 2002) s'est intéressé à la composition des carbones amorphes (hydrogénés) a-C(:H) et comment celle-ci est reliée aux liaisons aromatiques et aliphatiques. Différentes expériences de laboratoire sur les a-C(:H) suggèrent que leur signatures spectrales permettent d'expliquer l'émission dans les bandes IR (e.g. DISCHLER et al. 1983a;b, DARTOIS et al. 2005, PINO et al. 2008, DARTOIS et al. 2014). D'un autre côté, les propriétés des PAH couramment associés aux AIB, sont largement étudiées (e.g., BAUSCHLICHER et al. 2010, RICCA et al. 2013, MALLOCI et al. 2007, BAUSCHLICHER et al. 2010, SADJADI et al. 2015) mais ne permettent pas d'expliquer toute l'émission dans les bandes IR. Celle-ci le serait mieux par des nano-particules aromatiques/aliphatiques (KWOK et ZHANG (2011), PILLERI et al. (2015), JONES (2018) et voir Chap 2).

**Remarque :** on distingue là deux approches de la matière carbonée. D'un côté, une approche *top-down*/"solide" considère les a-C(:H), et leurs sous-structures faites d'îlots aromatiques reliés par des chaînes aliphatiques. C'est l'approche utilisée par le modèle THEMIS (Chap. 2) qui décrit toute la gamme de composition et de taille des a-C(:H). De l'autre côté, une approche *bottom-up*/"molécule" considère la complexification des PAH par l'ajout de groupements aliphatiques.

Le travail de PINO et al. (2008) montre notamment que la position de la bande à 6.2  $\mu\text{m}$  est liée à la composition aromatique/aliphatique des a-C(:H) dont les variations de composition permettent de comprendre les classes définies par PEETERS et al. (2002). Ainsi, la composition de la poussière carbonée dépend de son environnement et contribue à l'idée de son évolution dans le MIS.

Nous verrons plus en détail dans la section 1.3 la composition et la structure des porteurs attribués à ces signatures.

D'autres bandes d'émission IR révèlent la richesse des matériaux carbonés dans le MIS.

**Les fullerènes,** porteurs de certaines DIB (Sect. 1.2.1.4), présentent également des signatures dans le moyen IR à 7.0, 8.5, 17.4 et 18.9  $\mu\text{m}$  observées autour d'étoiles évoluées (CAMI et al. 2010, GARCÍA-HERNÁNDEZ et al. 2010), dans les régions fortement irradiées des nébuleuses (SELLGREN et al. 2010, BERNÉ et al. 2013, CASTELLANOS et al. 2014), autour des YSO et d'étoiles Herbig (ROBERTS et al. 2012) et le MIS diffus (BERNÉ et al. 2017).

**Les diamants.** La présence de diamants est révélée par les signatures à 3.43 et 3.53  $\mu\text{m}$  et sont observées autour des étoiles Herbig Elias 1 et HD 97048 (GUILLOIS et al. 1999, HABART et al. 2004c, VAN KERCKHOVEN et al. 2002, GOTO et al. 2009) et autour d'une étoile évoluée post-AGB (GEBALLE



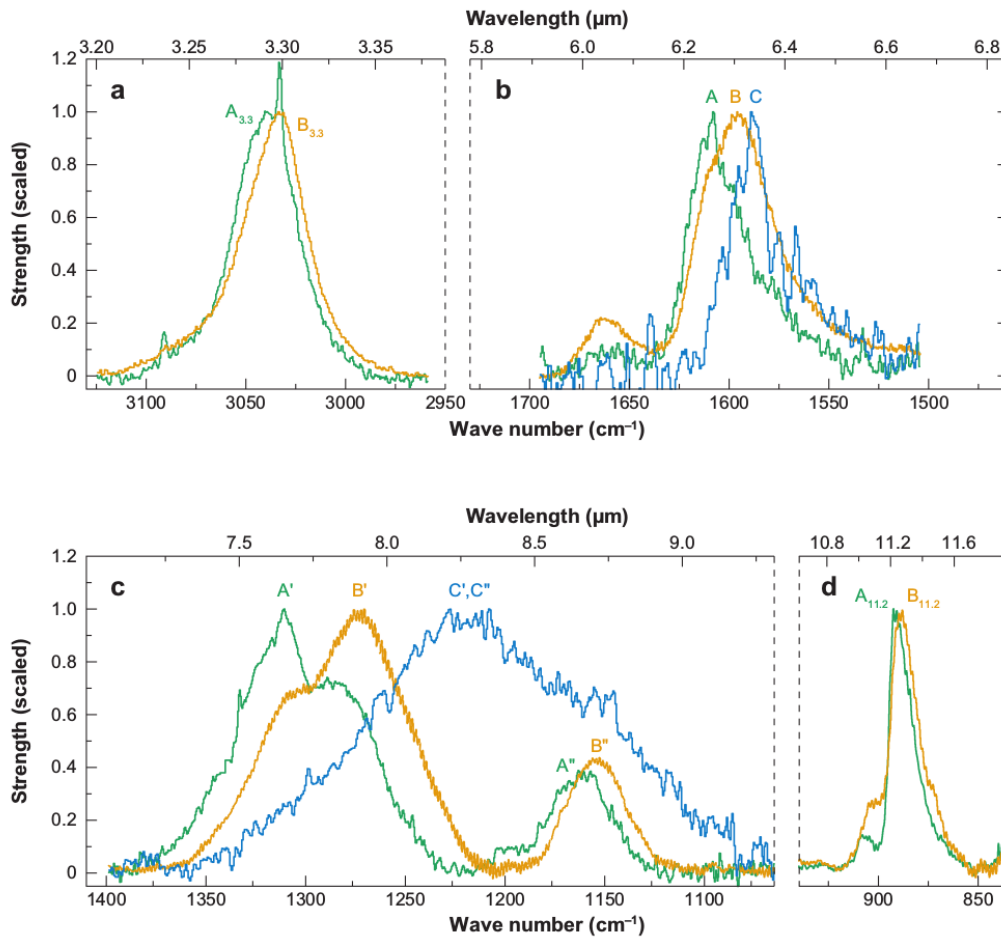


FIGURE 1.10 – Variations de position et de profils des bandes IR. Les signatures à 3  $\mu\text{m}$  et à 10-15  $\mu\text{m}$  ne montrent que des variations mineures, contrairement à la gamme 6-9  $\mu\text{m}$ . (Source : TIELENS (2008), Fig. 4, adaptée de VAN DIEDENHOVEN et al. (2004)).

et al. 1989). Dans ces environnements, la taille estimée des diamants, de l'ordre de 10-50 nm ou plus, est supérieure à celle des nano-diamants (2-3 nm) observées dans les météorites primitives (JONES et al. 2004). Cette identification est convaincante en raison de la bonne correspondance entre les spectres observés et ceux du laboratoire. Leur origine reste encore mal comprise et leur formation pourrait résulter de l'irradiation de matériaux graphitiques par des particules très énergétiques (GOTO et al. 2009). De plus, PIRALI et al. (2007) suggèrent que les nano-diamants permettent d'expliquer la bande d'absorption à 3.47  $\mu\text{m}$  (ALLAMANDOLA et al. 1992; 1993).

La figure 1.11(a) montre les signatures des fullerènes dans les nébuleuses NGC 7023 et NGC 2023. On note également la présence des AIB auxquelles elles sont mélangées entre 6 et 8  $\mu\text{m}$ . La figure 1.11(b) montre les signatures des diamants détectées auour des étoiles Herbig Elias 1 et HD 97048. On remarque que les spectres dans le proche et moyen IR présentent une richesse de bandes associées à la matière carbonée et qui traduit sa complexité.

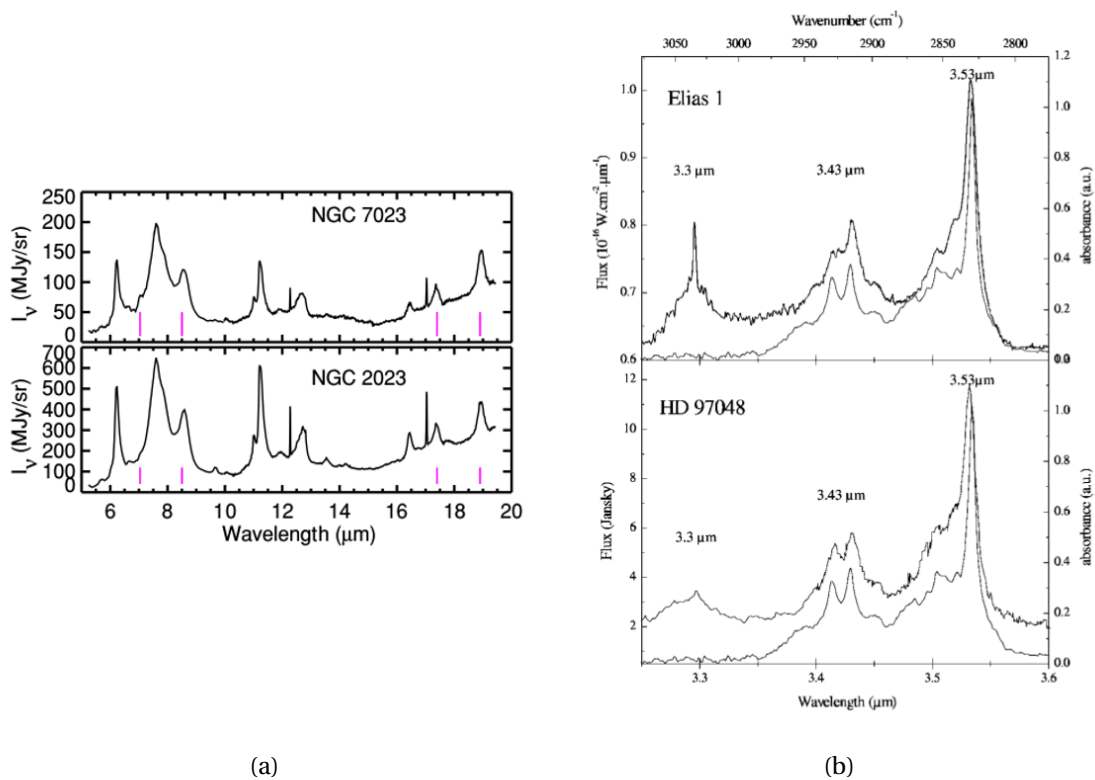


FIGURE 1.11 – (a) Spectres Spitzer entre 5 et 20  $\mu\text{m}$  de NGC 7023 et NGC 2023 montrant les signatures des fullerènes. Leurs positions à 7.0, 8.5, 17.4 et 18.9  $\mu\text{m}$  sont indiquées par les traits mauves. (Source : SELLGREN et al. 2010; Fig. 1). (b) Spectres à 3  $\mu\text{m}$  de Elias 1 et HD 97048 montrant les signatures des diamants à 3.43 et 3.53  $\mu\text{m}$ . Les spectres des mesures de laboratoires sur nano-cristaux de diamants sont aussi tracés. (Source : GUILLOIS et al. 1999; Fig. 2).

**Les silicates.** Les deux bandes larges observées à 9.7 et 18  $\mu\text{m}$  en absorption et associées aux silicates amorphes de type olivine et pyroxène le sont également en émission. Dans les milieux circumstellaires, autour des étoiles jeunes Herbig ou T Tauri (e.g., BOUWMAN et al. 2001, FORREST et al. 2004, VAN BOEKEL et al. 2004, SARGENT et al. 2009, SICILIA-AGUILAR et al. 2007) ou les étoiles évoluées (e.g, WATERS et al. 1996), des signatures associées aux silicates cristallins sont aussi observées (Fig. 1.12) et s'étendent de 10 à 70  $\mu\text{m}$ . La présence de silicates cristallins autour des objets évolués et jeunes et leur quasi-absence dans le MIS diffus indiquent que des processus de transformation (amorphisation) des silicates se déroulent dans le MIS.

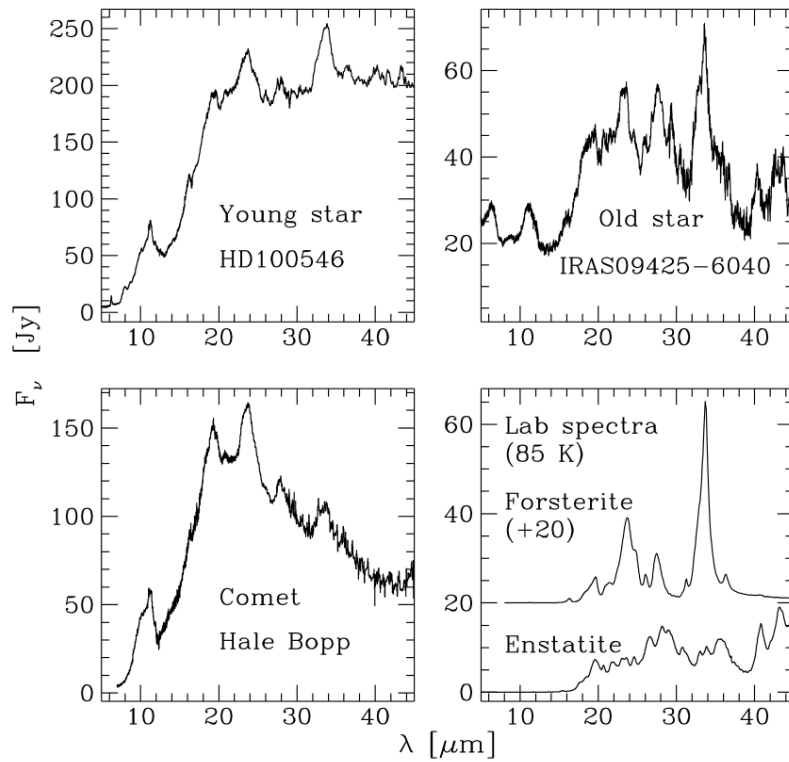


FIGURE 1.12 – Spectres moyen IR d’environnements où sont observés les silicates cristallins : étoile jeune Herbig (en haut à gauche), étoile évoluée (en haut à droite). Les spectres de la comète Hale-Bopp (en bas à gauche) montre aussi les signatures de silicates cristallins. Les spectres de la forsterite et de l’enstatite présentent des signatures permettant d’expliquer celles observées. (Source : [MOLSTER et KEMPER 2005](#); Fig. 2).

### 1.2.2.2 L'émission thermique

La cartographie du ciel entier par la mission Planck montre que l'émission thermique de la poussière (Fig. 1.13) dans l'IR lointain est loin d'être la même partout dans la galaxie (e.g., [PLANCK COLLABORATION et al. 2014](#), [REMY et al. 2018](#)). Celle-ci est bien ajustée par une fonction de corps noir modifié :

$$I_\nu = \tau_{\nu_0} B_\nu(T_{\text{obs}}) \left( \frac{\nu}{\nu_0} \right)^{\beta_{\text{obs}}} \quad (1.14)$$

avec  $\tau_{\nu_0}$ , l'opacité à la fréquence de référence  $\nu_0$ ,  $B_\nu$ , la fonction de Planck,  $\beta_{\text{obs}}$ , l'indice spectral et  $T_{\text{obs}}$ , la température observée de la poussière.

Notamment, le rapport de l'émission IR lointain à l'extinction visible prédit par les modèles standards de poussière de [DRAINE et LI \(2007\)](#) et [COMPIÈGNE et al. \(2011\)](#) est surestimé d'un facteur 2 ([PLANCK COLLABORATION et al. 2016a](#), [FANCIULLO et al. 2015](#)) et reflète une sur-estimation de la masse de poussière.

Dans le MIS diffus ( $N_{\text{H}} \approx 10^{20-21} \text{ H/cm}^2$ ), [PLANCK COLLABORATION et al. \(2014\)](#) montre que la luminosité de la poussière est, de façon surprenante, indépendante de la température alors que son opacité diminue quand la température augmente. De plus, les dernières observations indiquent que le rapport de masse de gaz/poussière de Bohlin ([BOHLIN et al. 1978](#)), considéré comme canonique, est supérieur de 20 à 60% et varie localement ([LISZT 2014](#), [LENZ et al. 2017](#), [NGUYEN et al. 2018](#), [MURRAY et al. 2018](#)). Les variations de l'opacité et du rapport de Bohlin suggèrent que la poussière évolue dans le MIS diffus et est plus émissive quand elle est plus froide ([REACH et al. 2015; 2017](#)).

Dans le MIS dense, la diminution du rapport des émissions IR moyen/lointain dans les nuages moléculaires et cœur denses ([STEPNIK et al. 2003](#)), la diminution de la température de  $\sim 20 \text{ K}$  dans le MIS diffus à  $< 15 \text{ K}$  dans les régions denses ([JUVELA et al. 2011](#)) et l'augmentation de l'opacité et de l'indice spectral dans l'IR lointain et le sub-millimétrique (e.g., [ROY et al. 2013](#), [REMY et al. 2018](#)) sont le signe de la croissance des grains de poussière. L'augmentation de la diffusion du proche au moyen IR quand la densité augmente [FOSTER et GOODMAN \(2006\)](#), [PAGANI et al. \(2010\)](#) va également dans le sens de la croissance des grains.

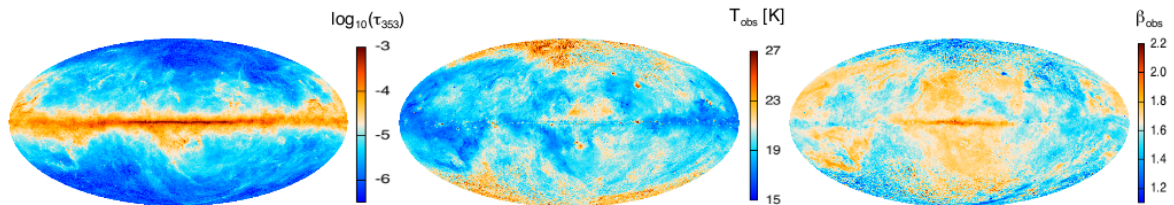


FIGURE 1.13 – Cartes du ciel complet des paramètres issus de l'ajustement des données Planck à 353, 545 et 857 GHz et IRAS à  $100 \mu\text{m}$  par un corps noir modifié. Gauche : profondeur optique à 353 GHz,  $\tau_{353}$ , à une résolution de  $5'$ . Milieu : température de la poussière observée,  $T_{\text{obs}}$ , à une résolution de  $5'$ . Droite : indice spectral de poussière observé,  $\beta_{\text{obs}}$ , à une résolution de  $30'$ . La figure est adaptée de [PLANCK COLLABORATION et al. \(2014\)](#), Fig. 9.

### 1.2.2.3 L'émission rouge étendue

L'émission rouge étendue (ERE) est une large bande d'émission, ne présentant pas de structure claire, dans le visible-proche IR entre 500 et 950 nm. Découverte dans la proto-nébuleuse planétaire du Rectangle rouge (Fig. 1.14) ([COHEN et al. 1975](#), [SCHMIDT et al. 1980](#)), elle est observée largement dans les différentes phases du MIS : diffus (e.g., [WITT et al. 2008](#)), H II (e.g., [DARBON et al. 2000](#)), nébuleuses par réflexion (e.g., [WITT et BOROSON 1990](#)), nébuleuses planétaires (e.g., [FURTON et WITT 1990](#)). L'ERE est attribuée à la photoluminescence de la poussière chauffée par les photons UV et visibles (e.g., [WITT et al. 2006](#)) mais pourrait résulter de la combinaison de photoluminescence et d'émission thermique ([DULEY 2009](#)). De nombreux candidats sont ou ont été envisagés : PAH (e.g., [D'HENDECOURT et al. 1986](#), [VIJH et al. 2005](#), [BERNÉ et al. 2008](#)), a-C:H (e.g.,

WITT et BOROSON 1990), nano-diamants (e.g., CHANG et al. 2006), fullerènes (e.g., WEBSTER 1993) et silicium cristallin (e.g., LEDOUX et al. 1998).

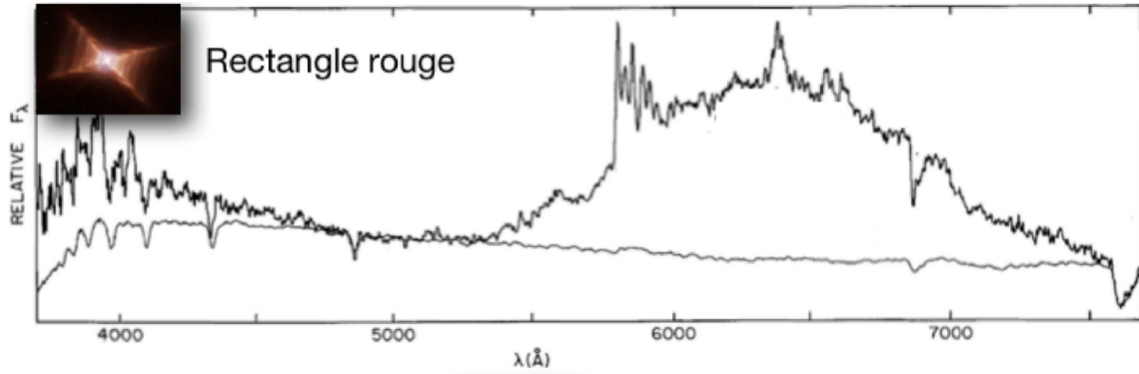


FIGURE 1.14 – Spectre de l'ERE dans le Rectangle Rouge (SCHMIDT et al. 1980). Le trait fin représente le spectre de son étoile centrale HD 44179, normalisé à 5000Å. La figure est adaptée de GODARD (2011), Fig. 2.8.

### 1.2.3 Polarisation

En présence d'un champ magnétique, les grains de poussière non-sphériques tendent à aligner leur axe principal le long des lignes de champ. L'extinction dichroïque du champ de rayonnement par les grains de poussière entraîne alors une polarisation de la lumière, parallèle au champ magnétique en extinction et perpendiculaire à celui-ci en émission.

La figure 1.15 montre la carte de la polarisation en émission de tout le ciel dans le sub-millimétrique. La fraction de lumière polarisée et le rapport de l'extinction à l'émission en polarisation mesurés par PLANCK COLLABORATION et al. (2016b) ne sont pas reproduits par les modèles pour le MIS diffus. Notamment, le rapport prédit par DRAINE et FRAISSE (2009) est  $\sim 2.5$  inférieur. Les observations en émission ou en absorption de la polarisation mettent en évidence des changements des propriétés des grains dans les milieux plus denses (FANCIULLO et al. 2017). Ces changements ne peuvent s'expliquer uniquement par des changements de taille mais aussi par des modifications de leur composition, de leur forme (SIEBENMORGEN et al. 2014, GUILLET et al. 2017, JUVELA et al. 2018) et une diminution de l'efficacité d'alignement. Les mesures polarimétriques représentent un outil essentiel pour contraindre les différentes hypothèses sur les propriétés de la poussière et le lien ou non entre ses différentes composantes, notamment au travers des signatures à 3.4, 9.7 et 18  $\mu\text{m}$  (HENSLEY et al. 2019).

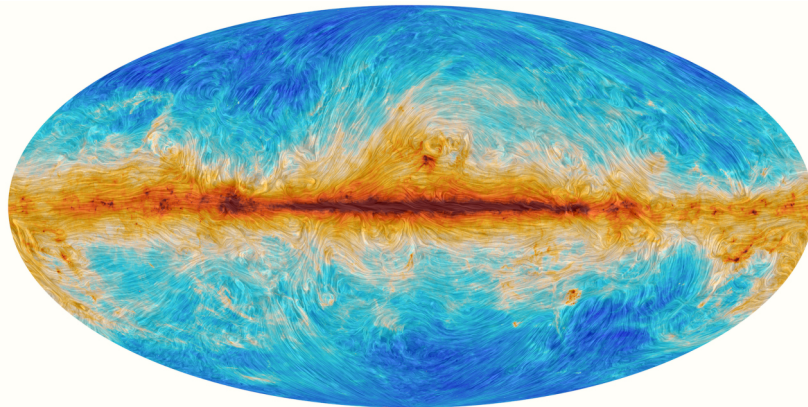


FIGURE 1.15 – Carte Planck de la polarisation en émission dans le sub-millimétrique. Les lignes de champs magnétiques sont en sur-impression. (Crédit : Planck collaboration)

### 1.2.4 Résumé en une image

La figure 1.16 montre la distribution spectrale d'énergie caractéristique des signatures observées dans le MIS des galaxies. Notamment, les contributions des trois sources principales d'émission que sont les étoiles, le gaz et la poussière, sont représentées. On remarquera l'identification des différentes signatures détaillées précédemment, des petites aux grandes longueurs d'onde :

- l'absorption et la diffusion de la poussière,
- les bandes interstellaires diffuses (DIB),
- l'émission rouge étendue (ERE),
- les bandes d'émission infrarouge aromatique (AIB), aliphatique et silicates,
- l'émission thermique des grains,

D'autres signatures évoquées mais non traitées ici et associées aux gaz sont également précisées : l'émission micro-onde anormale (AME), l'émission de freinage (*free-free*), synchrotron et les raies atomiques ou moléculaires des différentes espèces gazeuses. Enfin, un encart précise la proportion de la lumière polarisée en extinction et en émission.

On retiendra que l'attribution certaine des porteurs de ces différentes signatures est une question complexe et représente un des enjeux majeurs pour comprendre la matière interstellaire.

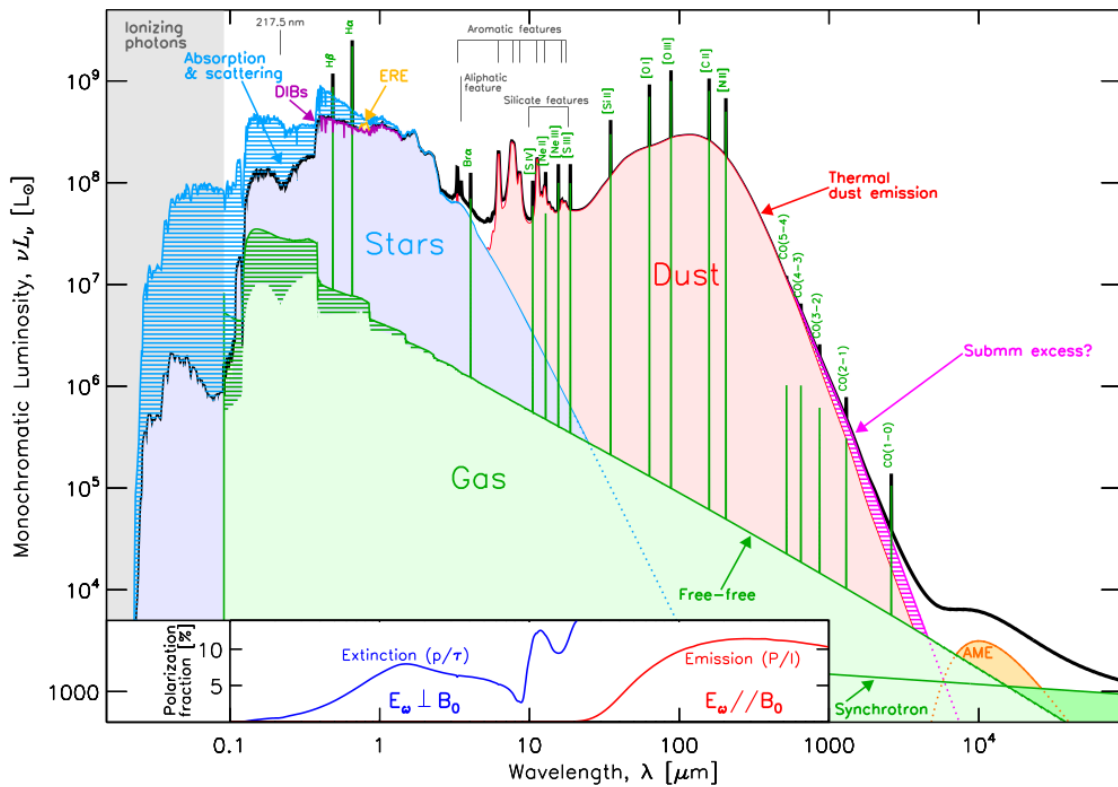


FIGURE 1.16 – Distribution spectrale d'énergie typique d'une galaxie de type tardif. Les principales sources d'émission et la partie du spectre associée sont représentées : étoiles (bleu), gaz (vert), poussière (rouge). Les principaux types d'émission sont indiqués : DIB (mauve), ERE (orange), bandes IR et émission thermique (rouge), émission de freinage (*free-free*) et synchrotron (vert) et AME (orange). L'énergie absorbée par la poussière est en bleu barré. L'encart montre la fraction de la lumière polarisée. (Source : [GALLIANO et al. 2018](#); Fig. 1).

## 1.3 Propriétés de la matière solide

Nous avons vu dans la section précédente que les signatures de la matière solide sont observées dans les différentes phases du MIS et nous les avons associées aux poussières carbonées et silicatées et aux glaces. La connaissance de la composition de ces poussières et glaces repose sur les expériences en laboratoire et les analyses des météorites qui nous fournissent une mesure directe des propriétés de la matière interstellaire ou de ses analogues. La composition chimique, les liaisons formées et les modes de vibrations associés de la matière solide interstellaire, carbonée en particulier, sont développés dans la suite.

### 1.3.1 Composition et liaisons chimiques

#### 1.3.1.1 Les poussières carbonées

La matière carbonée est formée essentiellement d'atomes de carbone et d'hydrogène et est qualifiée d'organique. Le carbone présente une chimie riche à l'origine de matériaux divers et aux propriétés variées. Une manière d'appréhender cette diversité est de regarder les types de liaisons que le carbone établit avec ses voisins. Un atome de carbone possède quatre électrons sur sa couche de valence, c'est-à-dire susceptibles de participer à des liaisons chimiques. Les orbitales de ces électrons peuvent s'hybrider de différentes façons (Fig. 1.17). Ce sont les orbitales résultantes qui forment la liaison avec les orbitales des atomes voisins. Ainsi, on distingue trois types d'hybridation pour l'atome de carbone :

- $sp^3$  : présente quatre orbitales organisées tri-dimensionnellement qui forment des liaisons simples ( $\sigma$ ) avec les atomes voisins.
- $sp^2$  : présente trois orbitales dans un plan (2D) qui contribuent à trois liaisons  $\sigma$ . Une orbitale  $p$ , perpendiculaire au plan, participe à la formation d'une liaison  $\pi$  qui associée à une liaison  $\sigma$  donne une liaison double.
- $sp$  : deux orbitales forment une structure linéaire (1D). Les deux électrons disponibles permettent de former une liaison triple ( $\sigma + 2\pi$ ).

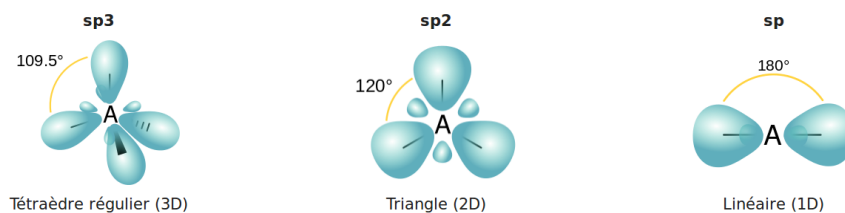


FIGURE 1.17 – Hybridation des orbitales atomiques de l'atome de carbone. (Source de l'image : Wikipédia)

Ce sont ces trois types d'hybridation, notamment  $sp^2$  et  $sp^3$ , qui permettent d'expliquer la richesse des formes et des propriétés de la matière carbonée. Elles sont à l'origine des différents matériaux carbonés appelés allotropes dont le diamant, hybridé  $sp^3$ , et le graphite, hybridé  $sp^2$ , qui en sont les deux représentants les plus emblématiques. Entre ces deux formes d'hybridation pure, et selon le degré d'hydrogénation du carbone, on trouve les fullerènes, les nanotubes, les chaînes carbonées (haute hydrogénation) ou compacte et planaire avec les PAH (peu hydrogéné). Quand la matière carbonée présente une faible organisation, on la trouve sous forme de carbone amorphe hydrogéné ou non (a-C(:H) ou HAC<sup>9</sup>). La figure 1.18 illustre ces différentes formes du carbone.

Il s'agit là de définir des catégories présentant certaines caractéristiques mais ces différentes formes peuvent s'associer et on passe continûment de l'une à l'autre. Surtout, c'est une vision

9. Hydrogenated amorphous carbon

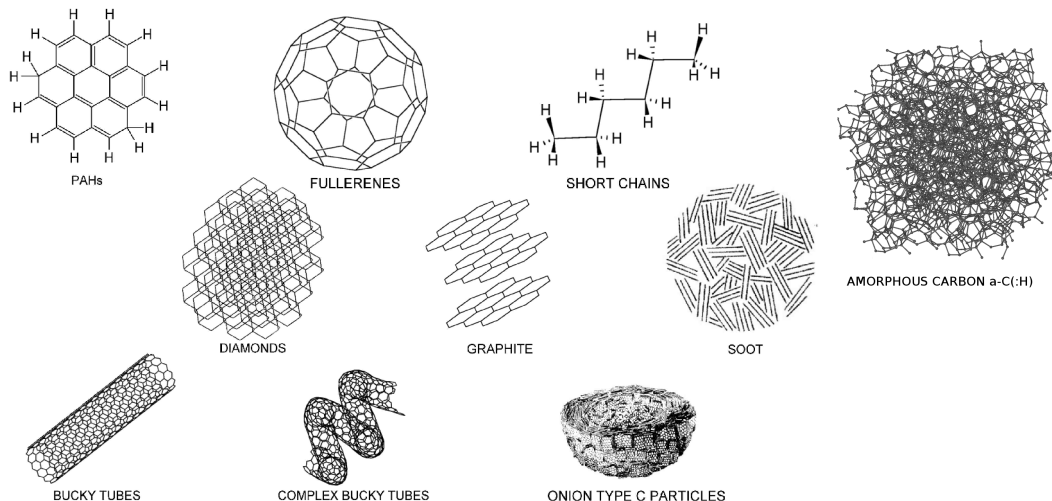


FIGURE 1.18 – Les formes allotropiques de la matière carbonée. (Source des images : [EHRENFREUND et CHARNLEY \(2000\)](#)).

idéalisée où, dans le cas de la matière carbonée, on ne considère que carbone et hydrogène. En réalité, d'autres espèces chimiques, alors appelées hétéro-atomes, forment des liaisons et participent à la richesse de ces familles.

Le diamant, constitué d'atomes de carbone hybridés  $sp^3$ , est dur et transparent. Le graphite, qui est un empilement de plans d'épaisseur monoatomique de graphène constitué de carbones hybridés  $sp^2$  formant des cycles aromatiques à six carbones, est noir et conducteur. Les PAH se rapprochent du graphène car formés par l'agencement plan de cycles aromatiques mais sont de taille moléculaire et se retrouvent dans les suies. Leurs cousins, les fullerènes forment des cages du fait de la présence de cycles à cinq atomes de carbone qui introduisent une courbure qui les referment sur eux mêmes, les rendant particulièrement résistants. Autres cousins, les nanotubes, à mi-chemin entre le graphène et les fullerènes, peuvent être vus comme des feuillets de graphène enroulés en cylindre. Quant aux carbones amorphes, les  $a-C(:H)$ , sans organisation à grande échelle, ils peuvent présenter des sous-structures se rapprochant du diamant, des PAH ou encore des fullerènes, reliées entre elles par des chaînes carbonées.

Dans la suite, on considérera trois catégories liées aux types de liaisons au sein de la matière carbonée (Fig. 1.19) :

- aromatiques : ce sont les liaisons faisant intervenir des cycles aromatiques à six carbones. Elles concernent les carbones hybridés  $sp^2$ . On y trouve les liaisons  $>C=C<$  et  $-CH=CH-$ .
- oléfiniques : il s'agit de matériaux faisant intervenir des liaisons double  $-C=C-$  hors cycles aromatiques, généralement dans des chaînes dites insaturées. Les carbones sont hybridés  $sp^2$ . On y trouve des liaisons  $=CH-$ ,  $=CH_2$ .
- aliphatiques : ce type de liaisons concerne les carbones hybridés  $sp^3$ . Ce sont des liaisons saturées. On trouve les groupement  $-CH_3$ ,  $-CH_2-$  et  $>CH-$ .

On pourra citer les travaux majeurs de [ROBERTSON \(1986; 2002\)](#) sur les propriétés des  $a-C(:H)$ .

La figure 1.20 montre le diagramme de phase ternaire des  $a-C(:H)$  selon les trois pôles : hybridation pure  $sp^2$  (graphite),  $sp^3$  (diamant) et teneur en hydrogène. Lorsque le contenu en hy-



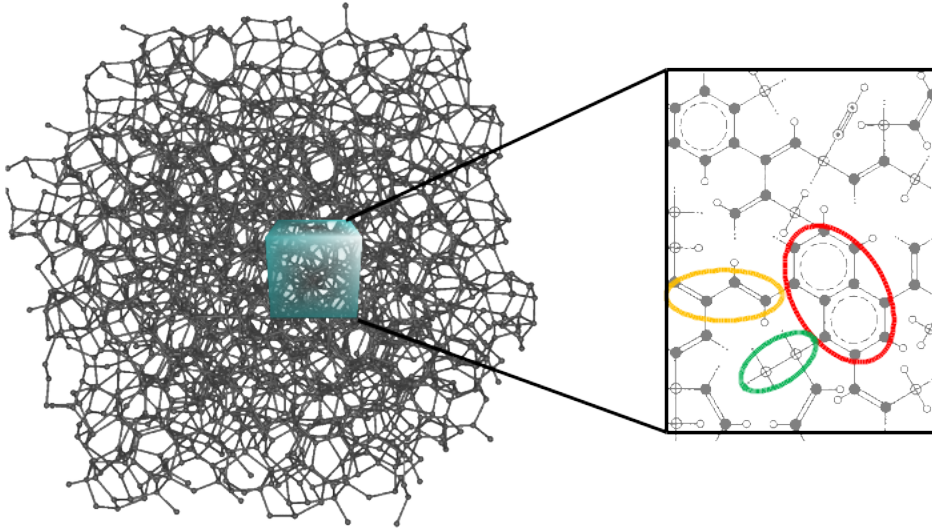


FIGURE 1.19 – Représentation des types de liaisons dans la matière carbonée : aromatique (rouge), oléfinique (jaune), aliphatique (vert).

drogène est trop important, le matériau ne peut former de solide (zone cyan). Quand elle diminue, des polymères sont formés (zone marron). Les lignes noires représentent les frontières du contenu minimal en hydrogène (DARTOIS 2011, GODARD 2011), aux structures oléfiniques pures  $>C=C<$  (ANGUS et JANSEN 1988) et aromatiques pures (JONES 1990). Ces lignes délimitent des zones dans lesquelles se trouvent les différentes phases des a-C(:H) : a-C:H (rouge), ta-C:H tétraédrique (bleue), ta-C (verte), suies a-C(:H) (mauve).

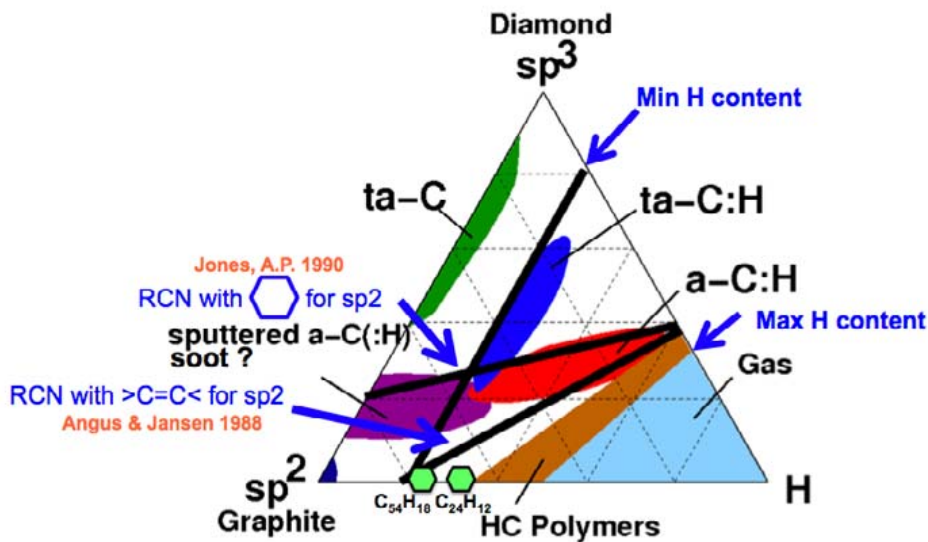


FIGURE 1.20 – Diagramme de phase des a-C(:H) selon le type de liaisons en leur sein. (Source : DARTOIS 2011; Fig. 3).

### 1.3.1.2 Les silicates

Les silicates sont des minéraux, dits réfractaires, constitués d'atomes de silicium, d'oxygène, de fer, de magnésium et dans une moindre mesure de calcium et d'aluminium. La structure de base des silicates est le tétraèdre formé par l'ion  $[SiO_4]^{4-}$  où l'atome de silicium au centre est entouré de quatre atomes d'oxygène (Fig. 1.21). La charge portée par cet élément de base doit être

compensée par des ions positifs et explique la diversité des familles de silicates.

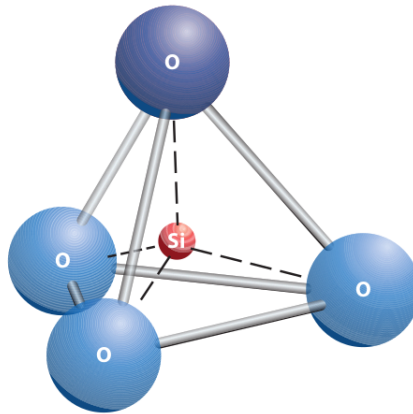


FIGURE 1.21 – Tétraèdre de  $\text{SiO}_4$  (Source : HENNING 2010; Fig. 1).

Dans le MIS, les silicates se trouvent principalement sous forme amorphe (Sect. 1.2) et sont représentés par des olivines et des pyroxènes de formules brutes  $\text{Mg}_{2x}\text{Fe}_{2-2x}\text{SiO}_4$  et  $\text{Mg}_x\text{Fe}_{1-x}\text{SiO}_3$ , respectivement. Sous forme cristalline, on trouve la forstérite et l'énstatite, de formules  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  et  $\text{Mg}_2\text{Si}_2\text{O}_6$  qui sont les pôles purs magnésiens de l'olivine et du pyroxène, respectivement. La figure 1.22 donne une représentation de l'organisation structurale des silicates amorphes et cristallins. HENNING (2010), MOLSTER et KEMPER (2005) en donnent des revues complètes.

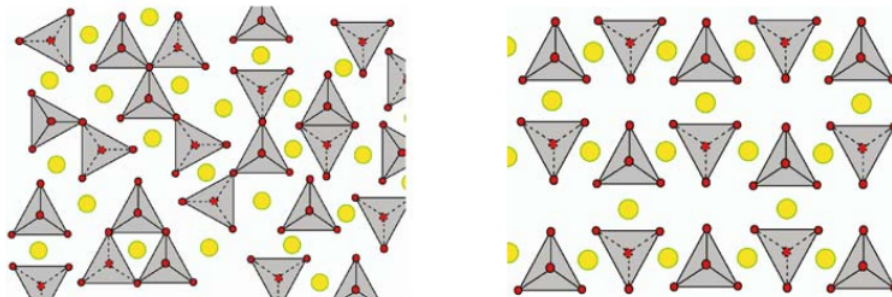


FIGURE 1.22 – Représentation des structures amorphes (gauche) et cristallines (droite) des silicates. (La figure est adaptée de MOLSTER et KEMPER 2005; Fig. 1).

De plus, il est à noter que l'observation des déplétions du fer (e.g., SAVAGE et BOHLIN 1979, JONES 2000, JENKINS 2009) et du soufre (e.g., UEDA et al. 2005) de la phase gazeuse dans les MIS diffus et/ou dense pourraient s'expliquer par l'incorporation d'inclusions de nano-particules de Fe et FeS dans les silicates (KÖHLER et al. 2014, JONES et SPITZER 1967).

### 1.3.1.3 Les glaces

Elles sont constituées de molécules simples, volatiles, qui depuis la phase gazeuse se condensent sur les grains de poussière lorsque leur température descend sous leur température de condensation. Les principales molécules constituant les glaces sont celles d'eau  $\text{H}_2\text{O}$ , d'ammoniac  $\text{NH}_3$ , de dioxyde de carbone  $\text{CO}_2$ , de monoxyde de carbone  $\text{CO}$  et de méthanol  $\text{CH}_3\text{OH}$ .

La formation et la chimie des glaces dépendent des conditions de température, de densité et de rayonnement auxquelles elles sont exposées (Fig. 1.23). Les glaces sont donc des systèmes complexes, indispensables à la formation de nouvelles molécules dans les milieux denses (e.g., HERBST et VAN DISHOECK 2009, JONES 2016b). Elles interviennent dans la régulation entre phases gazeuses

et solides et fournissent un réservoir de matière pour la chimie interstellaire. La compréhension de ces rôles est essentielle pour la physico-chimie des milieux denses et la formation planétaire. BOOGERT et al. (2015) en proposent une revue détaillée.

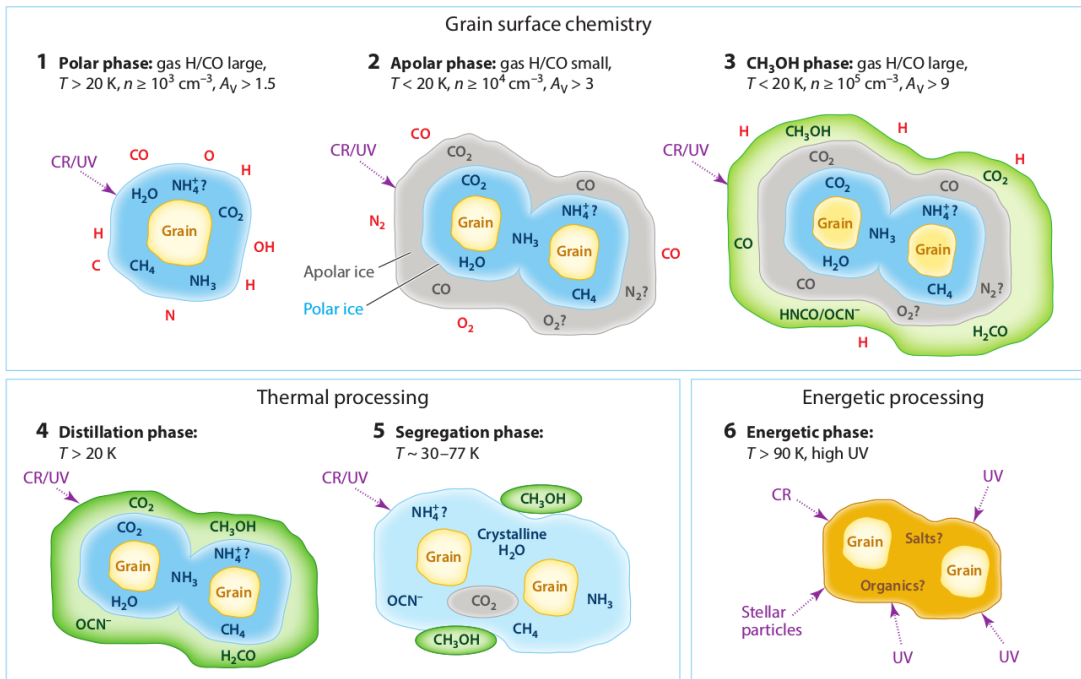


FIGURE 1.23 – Représentation schématique des manteaux de glaces sur les grains à travers différentes phases denses et illustrant les processus physiques et chimiques à la surface des grains. Les phases 3 à 6 pourraient être celles des conditions dans les enveloppes et les disques autour des YSO. La taille des grains et l'épaisseur des manteaux sont nanométriques. (Source : BOOGERT et al. 2015; Fig. 10).

### 1.3.2 Modes de vibration et signatures spectroscopiques

Considérant un système moléculaire, celui-ci est décrit par la mécanique quantique. Il possède des niveaux d'énergie discrets parfaitement définis, liés à la nature des atomes qui le composent et aux liaisons entre ceux-ci. Dans l'approximation de Born-Oppenheimer, le mouvement des noyaux atomiques est lent ( $10^{-12}$  s, i.e. picoseconde) devant celui des électrons ( $10^{-15}$  s, i.e. femtoseconde) et permet de considérer l'énergie totale de la molécule  $E_{\text{tot}}$  comme une somme de termes indépendants :

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{el}} + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} \quad (1.15)$$

avec  $E_{\text{el}}$  l'énergie des électrons,  $E_{\text{vib}}$  l'énergie de vibration,  $E_{\text{rot}}$ , l'énergie de rotation de la molécule.

Dans une molécule, l'émission ou l'absorption d'un photon ne peut se faire qu'entre deux niveaux d'énergie  $E_{\text{initial}}$  et  $E_{\text{final}}$  de celle-ci et l'énergie du photon  $h\nu$  est donc parfaitement définie  $h\nu = E_{\text{final}} - E_{\text{initial}}$ . La figure 1.24 illustre l'énergie des photons et le domaine correspondant selon le type de (des-)excitation. On note que la gamme d'énergie correspondant aux vibrations de la molécule tombe dans le moyen IR. L'excitation électronique est faite par les photons UV et visible, celle des rotations par les photons de faible énergie dans l'IR lointain.

Comme il a été précisé juste avant, les énergies d'un système moléculaire dépendent de la nature des atomes et des types de liaisons qui le compose. Dans le cas de la vibration de deux atomes, le modèle de l'oscillateur harmonique est utilisé pour décrire l'énergie potentielle des

atomes oscillants autour d'une position d'équilibre. La fréquence propre  $\nu_0$  du système est :

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (1.16)$$

avec  $k$ , analogue de la constante de raideur de la liaison chimique, et  $\mu$  la masse réduite de la molécule diatomique. Il y a transfert d'énergie entre le système et une onde électromagnétique pour une fréquence de résonance égale à la fréquence propre du système. Pour tenir compte des phénomènes réels comme la dispersion de l'énergie, une force de frottement est ajoutée à l'équation dynamique de l'oscillateur harmonique. En pratique, l'émission ou l'absorption d'un photon par une molécule se fait dans une gamme de longueur d'onde décrite par une fonction lorentzienne (ce qui est effectivement observé en spectroscopie).

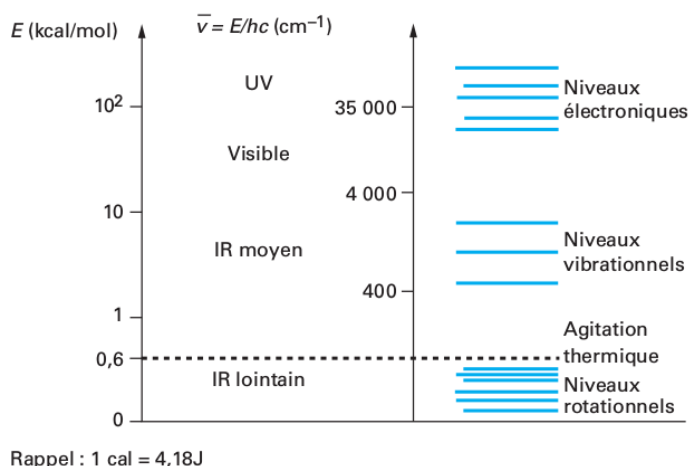


FIGURE 1.24 – Niveaux énergétiques moléculaires aux fréquences (ou énergies) des différents domaines spectraux de photons. (Source : HUMBERT et al. 2012; Fig. 1)

Dans le cas de molécules plus complexes ou de nano-particules, à chaque type de liaison d'un groupe d'atomes est associé plusieurs modes de vibration. Une molécule de  $N$  atomes possède trois degrés de mouvement de translation, trois de rotation (deux si la molécule est linéaire) et  $3N - 6$  (ou 5 si linéaire) modes de vibration interne. La figure 1.26 donne une représentation de ces modes de vibration dans le cas du groupement  $-\text{CH}_2-$  présent notamment dans les  $\alpha\text{-C}(\text{:H})$ . On distingue trois grands types de modes de vibration :

- les élongations (*stretching*), symétriques ou asymétriques : elles concernent le déplacement des atomes selon l'axe de leur liaison dans le plan formé par ceux-ci,
- les déformations (*bending*) dans le plan avec le cisaillement (*scissoring/shearing*) et le balancement (*swinging/rocking*),
- les déformations hors-plan avec le hâchement (*nodding/wagging*) et la torsion (*twisting*).

A chacun de ces modes correspond une énergie qui dépend du type d'atome, du type de liaison mais aussi de l'environnement local dans lequel est plongé le groupement considéré. On pensera notamment à une liaison  $-\text{CH}$  dans un cycle aromatique ou à la présence d'hétéro-atomes dans les  $\alpha\text{-C}(\text{:H})$ . La détermination de l'énergie des modes de vibration de ces systèmes plus complexes n'est pas triviale et s'appuie sur l'analyse des mesures spectroscopiques effectuées en laboratoire. La figure 1.25 illustre les variations associées aux liaisons  $-\text{CH}$  selon la composition en carbone et hydrogène de suies de nano-particules carbonées.

De plus, pour qu'un mode soit actif dans l'IR, c'est-à-dire présente des signatures spectroscopiques, il faut que la vibration entraîne une modification du moment dipolaire.

Au-delà des modes de vibrations, il est nécessaire de prendre en compte :

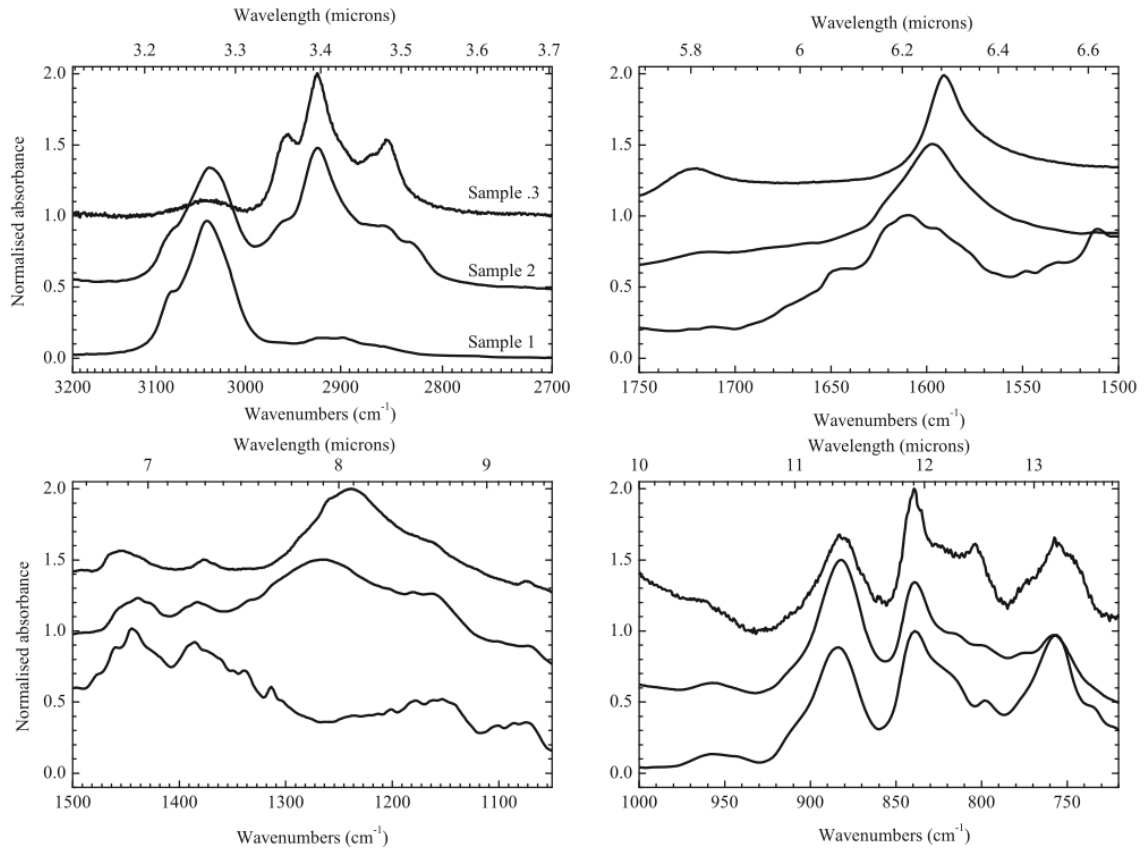


FIGURE 1.25 – Spectres d'absorption IR pour trois échantillons de nano'particules (suies) produites en laboratoire, des plus aromatiques (sample 1), aux plus aliphatiques (sample 3). Source : PINO et al. (2008)

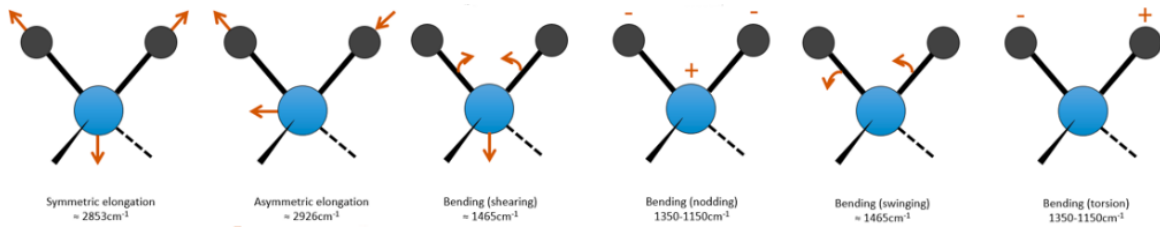
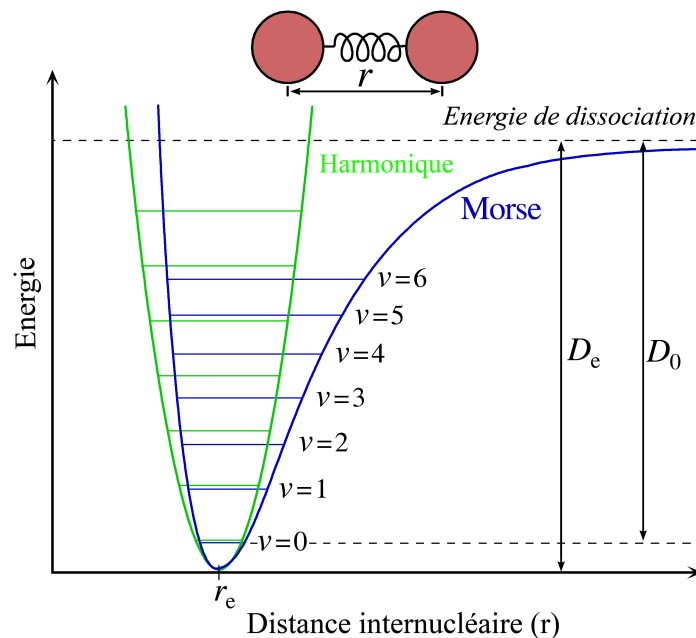


FIGURE 1.26 – Modes de vibration CH<sub>2</sub> d'une chaîne carbonée. Source : AKBAR (2016)

- les modes harmoniques/anharmoniques : ils correspondent aux états excités des modes de vibration. Dans le cas harmonique, la fréquence des modes est un multiple entier de la fréquence fondamentale. Dans le cas anharmonique, qui prend en compte la dispersion de l'énergie, les fréquences des modes sont inférieures à celles des modes harmoniques correspondants (Fig. 1.27).
- les modes combinés : ils sont observés quand deux modes de vibrations fondamentaux ou plus sont excités simultanément. La fréquence des modes fondamentaux peut s'additionner ou se retrancher.
- les résonances de Fermi : lorsque deux modes de vibrations (un fondamental et un harmonique ou combiné) ont des énergies proches, il en résulte un décalage de la fréquence de chacun des modes et une augmentation de leur intensité.
- les bandes chaudes : elles résultent de l'excitation de modes déjà excités et dépendent de la température.



(a)

FIGURE 1.27 – Représentation des énergies de vibration pour un oscillateur harmonique (vert) ou anharmonique (bleu) en fonction de la distance inter-atomique. (Image : CC-BY-SA-3.0; Created by Mark Somoza March 26 2006)

Dès lors, on saisit toute la difficulté de comprendre la nature des porteurs des signatures observées en astrophysique (Sect. 1.2) :

- impossibilité d'accéder directement à la composition de la matière,
- spectre intégré sur des grandes échelles spatiales, moyenne de la matière présente et des conditions physiques,

Les tableaux suivants font la synthèse des signatures IR et des modes qui leur sont attribuées pour les a-C(:H) (Table 1.3) et les silicates (Fig. 1.28). Dans le cas de la poussière carbonée, l'assignation des bandes est basée sur les travaux de [DARTOIS et al. \(2004a;b\)](#), [JOBLIN et al. \(1994a\)](#), [RISTEIN \(1998\)](#), [WEXLER \(1967\)](#) et de [MENNELLA \(2008\)](#) pour la bande à 3.47  $\mu\text{m}$ . Certaines bandes additionnelles sont basées sur les travaux de [ROBERTSON \(1986\)](#), [VERSTRAETE et al. \(2001\)](#). La gamme de variations des signatures est discutée dans [BOUTÉRAON et al. \(2019\)](#) (Chap. 3).

TABLEAU 1.3 – Signatures et assignation des modes CH et CC considérés pour les a-C(:H) dans le cadre du modèle THEMIS (JONES et al. 2017). Pour la signature à 3.3  $\mu\text{m}$ , la gamme de variations de sa position basée sur la compilation de BOUTÉRAON et al. (2019) est entre parenthèse. (Source : adapté de JONES et al. 2013)

Signature		Assignation de la bande
$\lambda_0$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\nu_0$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	
<u>modes CH d'élongation</u>		
3.25	3078	$sp^2$ CH <sub>2</sub> oléfinique, asymétrique
"3.3" (3.268-3.295)	3050 (3060-3035)	$sp^2$ CH aromatique
3.32	3010	$sp^2$ CH oléfinique
3.35	2985	$sp^2$ CH <sub>2</sub> oléfinique, symétrique
3.38	2960	$sp^3$ CH <sub>3</sub> aliphatique, asymétrique
3.42	2925	$sp^3$ CH <sub>2</sub> aliphatique, asymétrique
3.45	2900	$sp^3$ CH <sub>2</sub> aliphatique
3.47	2882	$sp^3$ CH tertiaire aliphatique
3.48	2871	$sp^3$ CH <sub>3</sub> aliphatique, symétrique
3.51	2850	$sp^3$ CH <sub>2</sub> aliphatique, symétrique
<u>modes CH de déformation</u>		
6.80	1470	$sp^3$ CH <sub>3</sub> aliphatique, asymétrique
6.90	1450	$sp^3$ CH <sub>2</sub> aliphatique
6.99	1430	$sp^2$ CH aromatique
7.09	1410	$sp^2$ CH <sub>2</sub> oléfinique
7.14	1400	$sp^3$ (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> aliphatique, symétrique
7.30	1370	$sp^3$ CH <sub>3</sub> aliphatique, symétrique
<u>modes C-C</u>		
6.25	1600	$sp^2$ C=C aromatique
6.67	1500	$sp^2$ C=C aromatique
6.10	1640	$sp^2$ C=C oléfinique
<u>modes C-H supplémentaires et estimés</u>		
3.31	3020	$sp^2$ CH oléfinique
11.24	890	$sp^2$ CH aromatique
11.36	880	$sp^2$ CH aromatique
12.66	790	$sp^2$ CH aromatique
<u>modes C-C supplémentaires et estimés</u>		
7.53	1328	$sp^2$ C-C aromatique
7.69	1300	$sp^2$ C-C aromatique
7.85	1274	$sp^2$ C-C aromatique
8.60	1163	$sp^2$ C-C aromatique

Observed bands	Assignments	composition
9.7 $\mu\text{m}$	amorphous silicate	Si-O stretching mode
18 $\mu\text{m}$	amorphous silicate	O-Si-O bending mode
9.8 $\mu\text{m}$	forsterite + enstatite	$\text{Mg}_2\text{SiO}_4 + \text{MgSiO}_3$
10.7 $\mu\text{m}$	enstatite	$\text{MgSiO}_3$
11.4 $\mu\text{m}$	forsterite + diopside	$\text{Mg}_2\text{SiO}_4 + \text{CaMgSi}_2\text{O}_6$
15.2 $\mu\text{m}$	enstatite	$\text{MgSiO}_3$
16.2 $\mu\text{m}$	forsterite	$\text{Mg}_2\text{SiO}_4$
17.5 $\mu\text{m}$	enstatite	$\text{MgSiO}_3$
18 $\mu\text{m}$	enstatite + forsterite	$\text{MgSiO}_3 + \text{Mg}_2\text{SiO}_4$
19.5 $\mu\text{m}$	enstatite + forsterite	$\text{MgSiO}_3 + \text{Mg}_2\text{SiO}_4$
23 $\mu\text{m}$	enstatite	$\text{MgSiO}_3$
23.7 $\mu\text{m}$	forsterite	$\text{Mg}_2\text{SiO}_4$
27.6 $\mu\text{m}$	forsterite	$\text{Mg}_2\text{SiO}_4$
28.2 $\mu\text{m}$	enstatite	$\text{MgSiO}_3$
33.6 $\mu\text{m}$	forsterite	$\text{Mg}_2\text{SiO}_4$
39.8 $\mu\text{m}$	diopside	$\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$
40.5 $\mu\text{m}$	enstatite	$\text{MgSiO}_3$
43 $\mu\text{m}$	enstatite + water ice	$\text{MgSiO}_3 + \text{cryst.H}_2\text{O ice}$
43.8 $\mu\text{m}$	enstatite	$\text{MgSiO}_3$
69 $\mu\text{m}$	forsterite	$\text{Mg}_2\text{SiO}_4$

 FIGURE 1.28 – Liste des principales bandes attribuées aux silicates (Source : [DEMYK 2011](#); Table 1).

### 1.3.3 Chauffage et refroidissement des grains de poussière

Dans les deux sections précédentes, nous avons relié la composition de la matière et le type de liaisons aux modes de vibration et énergies des signatures spectroscopiques. Outre la nécessité que le moment dipolaire du matériau soit modifié pour que le mode de vibration soit actif dans l'IR, il faut de plus que la température du système soit suffisante pour que le matériau rayonne à l'énergie du mode considéré. Cette section s'intéresse aux mécanismes d'excitation et de désexcitation par les photons. Comme il a déjà été évoqué dans la section 1.2, l'émission de la poussière dépend de la nature des grains et surtout de leur taille.

La figure 1.29 illustre les variations de température de grains carbonés aromatiques selon leur taille (de 1 à 20 nm) et excités par un champ de rayonnement à deux intensités différentes. On constate que la température des grains dépend à la fois de leur taille et de l'intensité du champ de radiation. Plus la taille de grain augmente, moins celui-ci subit de fluctuations de température et rejoint une température moyenne d'équilibre. Au contraire, quand le grain est petit, celui-ci connaît une forte augmentation de température suite à l'absorption d'un photon puis se refroidit progressivement. Quand l'intensité du champ de radiation augmente, c'est-à-dire quand la densité de photons augmente, les grains les plus gros ont une température plus élevée et présentent moins de fluctuations. Les grains les plus petits sont excités plus souvent et certains tendent vers une température d'équilibre.

Ce qu'on appelle température d'un grain de poussière peut être assimilée à une mesure de son énergie interne  $E_{int}$  répartie dans les modes de vibration et dans les états électroniques faiblement excités ([DRAINE 2010](#)). Selon les conditions physiques du milieu, différentes interactions contribuent à faire varier l'énergie du grain : absorption/émission d'un photon, collisions inélastiques atome/ion-grain, grain-grain, électron-grain (voir [BOCCHIO \(2014\)](#) pour les différents processus affectant la poussière). Cette thèse s'intéresse aux nano-particules carbonées dans les disques protoplanétaires. L'émission de celles-ci dans les bandes IR provient essentiellement de la surface des



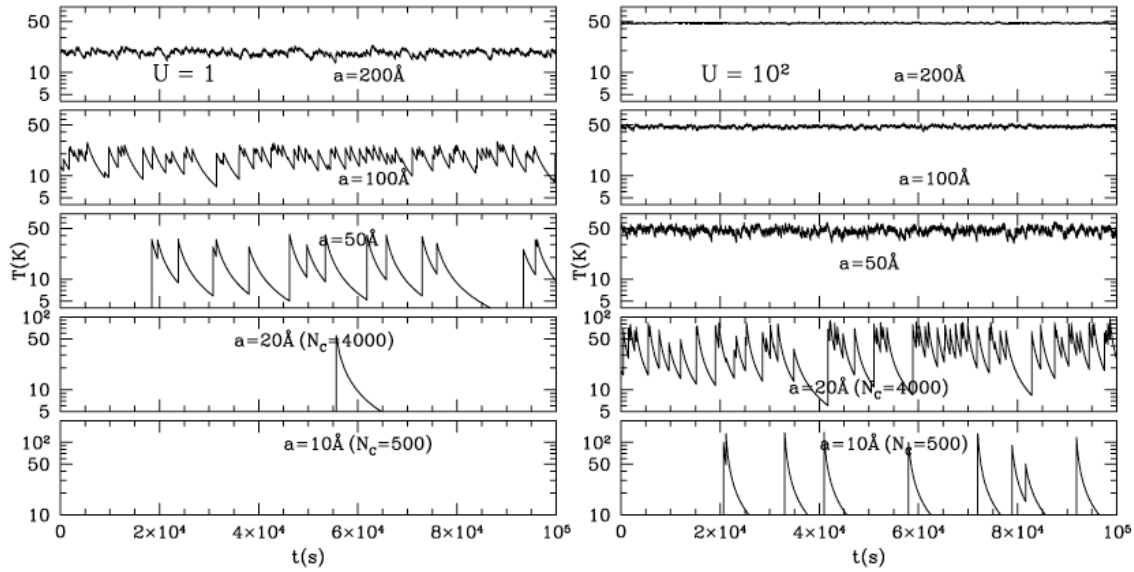


FIGURE 1.29 – Variations de la température sur une journée de grains graphitiques selon leur taille pour deux intensités du champ d'irradiation local du MIS (ISRF). (Source : DRAINE 2010; Fig. 24.5).

disques exposée au champ de radiation intense de l'étoile (Sect. 1.6). Ainsi, il est attendu que les interactions avec la lumière dominent les processus affectant les nano-particules carbonées.

L'absorption d'un photon UV ou visible conduit à l'excitation électronique de la particule (Fig. 1.24), c'est-à-dire à la promotion d'un électron sur un niveau d'énergie excité. Si l'énergie du photon est suffisante, la particule peut être ionisée et le photo-électron produit participe au chauffage du gaz et de la poussière environnante. Une fois excitée, la particule tend à se désexciter rapidement via notamment :

- la conversion interne : il s'agit du transfert non radiatif de l'énergie vers les états vibrationnels moins excités de la particule,
- la fluorescence : il s'agit de l'émission d'un photon dont l'énergie est égale à la différence d'énergie entre le niveau excité initial et le niveau moins excité final.

La transition radiative entre états vibrationnels s'accompagne de l'émission de photons de faible énergie dans l'IR. La figure 1.30 représente les mécanismes de fluorescence, de conversion interne et d'émission IR qui suivent l'excitation d'une particule par un photon UV/visible.

Considérant que la conversion interne puis l'émission IR sont les mécanismes dominant du retour des particules vers leur état fondamental (ALLAMANDOLA et al. 1989, DRAINE 2010), on remarque que celles-ci absorbent principalement dans l'UV pour ré-émettre dans l'IR.

Le taux de chauffage, c'est-à-dire, le taux auquel l'énergie interne  $\left(\frac{dE}{dt}(a)\right)_{\text{abs}}$  d'une particule de rayon  $a$  augmente par absorption de photons est donné par :

$$\left(\frac{dE}{dt}(a)\right)_{\text{abs}} = \pi a^2 \int Q_{\text{abs}}(a, \lambda) J_{\lambda} d\lambda \quad (1.17)$$

avec  $\pi a^2 Q_{\text{abs}}(a, \lambda)$ , la section efficace d'absorption de la particule,  $J_{\lambda}$ , l'intensité du champ de radiation à la longueur d'onde  $\lambda$ . On remarque que plus la particule est grande et le champ intense, plus celle-ci absorbe de photons (Fig. 1.29).

L'énergie interne  $E_{\text{int}}(a)$  de la particule est reliée à la température par la relation :

$$E_{\text{int}}(a) = \int_{T_{\text{min}}}^{T_{\text{max}}} C(a, T) dT \quad (1.18)$$

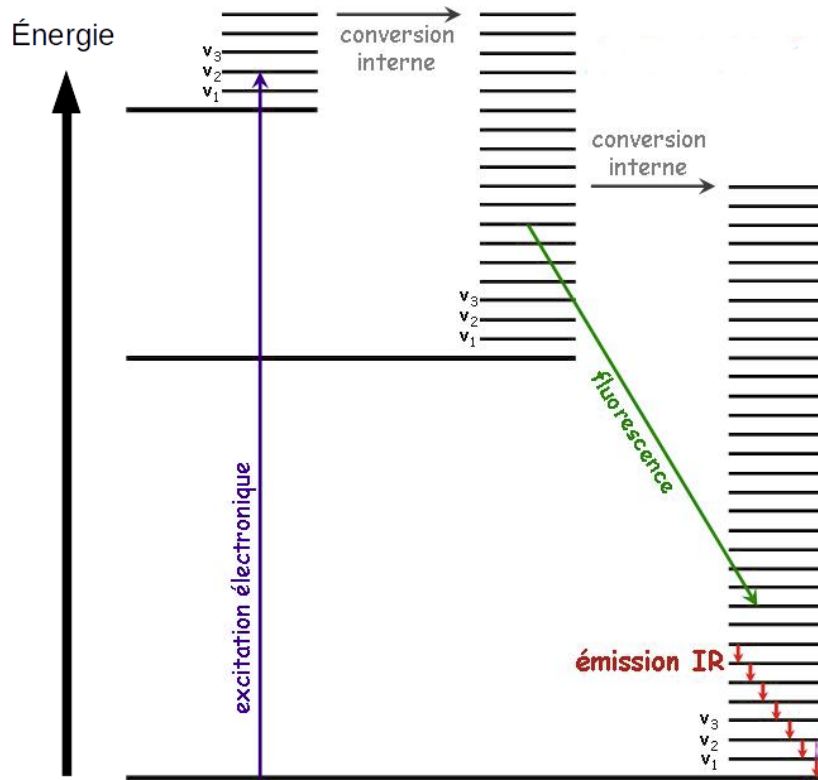


FIGURE 1.30 – Représentation schématique des principaux mécanismes d'excitation/désexcitation dans une particule. L'excitation électronique est due à l'absorption d'un photon UV/visible. La désexcitation via la fluorescence et la conversion interne conduisent à l'émission IR.

avec  $T_{\min}$  et  $T_{\max}$ , les températures de la particule avant et après l'absorption du photon.  $C(a, T)$  est la capacité thermique, une grandeur qui traduit la capacité d'un système à absorber ou à restituer de l'énergie. Elle résulte du nombre de degrés de liberté de la particule, c'est-à-dire, entre autres, du nombre de modes de vibrations et de transition électronique en son sein. Ainsi, plus la particule est grande, plus sa capacité thermique est importante et l'énergie du photon absorbé se distribue sur un grand nombre de degrés de liberté. Inversement, plus la particule est petite et moins il y a de degrés de liberté disponibles pour distribuer l'énergie. Cela explique les différences de fluctuations de température des grains selon leur taille (Fig. 1.29).

De plus, pour les plus gros grains, les fluctuations faibles et les absorptions fréquentes font qu'ils atteignent une température moyenne quasiment constante, ils sont à l'équilibre thermique. Au contraire, pour les plus petits grains, les fortes augmentations de température mais peu fréquentes conduisent à des fluctuations importantes. On parle alors de chauffage stochastique. Dès lors, le concept de température n'est pas évident pour les petits grains et pour comprendre la façon dont ils émettent, il est utile de considérer la distribution de probabilité  $dP/dT$  avec  $P(T)$ , la probabilité que les particules aient une température inférieure ou égale à  $T$ . La figure 1.31 montre la distribution  $dP/dT$  pour différentes tailles de grains. On note que plus la taille augmente et plus la distribution est piquée, tendant vers une fonction de Dirac qui signifie alors que le grain n'a plus qu'une seule température.

Le grain, chauffé par l'absorption d'un photon, se refroidit selon ses propriétés optiques et sa température selon l'expression :

$$I_{\lambda}(a) = \pi a^2 Q_{\text{em}}(a, \lambda) \times \int_0^{\infty} B_{\lambda}(T) \frac{dP}{dT} dT \quad (1.19)$$

avec  $\pi a^2 Q_{\text{em}}(a, \lambda)$ , la section efficace d'émission,  $B_{\lambda}(T)$  est la fonction de corps noir de Planck. Selon les lois de Kirchhoff,  $Q_{\text{em}}(a, \lambda) = Q_{\text{abs}}(a, \lambda)$ .

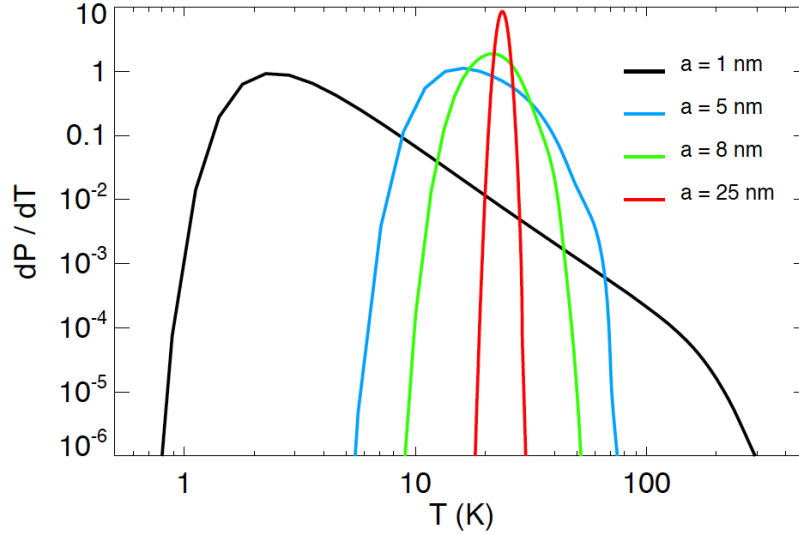


FIGURE 1.31 – Distribution de probabilité de la température  $dP/dT$  pour quatre tailles de grains de 1 à 25 nm (Source : [BOCCHIO 2014](#); Fig. 3.6)

Si on considère maintenant une distribution de taille de grains  $dn/da$  qui décrit le nombre de grains  $dn$  avec une taille  $a$  entre  $a$  et  $a + da$ , on a alors :

$$I_\lambda = N_H \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} da \pi a^2 \frac{dn}{da} Q_{\text{em}}(a, \lambda) \int_0^\infty dT B_\lambda(T) \frac{dP}{dT} \quad (1.20)$$

avec  $N_H$ , la densité de colonne d'hydrogène,  $a_{\min}$  et  $a_{\max}$ , les tailles minimale et maximale des grains.

### 1.3.4 Propriétés optiques des grains

#### 1.3.4.1 Absorption et diffusion

On a vu juste avant que l'absorption et l'émission de photons par les grains dépendaient de leur section efficace d'absorption  $\pi a^2 Q_{\text{abs}}(a, \lambda)$ . Dans la section 1.2.1, on avait également introduit la section efficace de diffusion  $\pi a^2 Q_{\text{sca}}(a, \lambda)$  pour définir l'albédo. Ces deux grandeurs traduisent la manière dont une onde électromagnétique interagit avec un matériau. Formellement, cette interaction onde/matière est décrite par les équations électromagnétiques de Maxwell.

La théorie de Mie est une solution particulière des équations de Maxwell pour une onde électromagnétique interagissant avec une particule sphérique caractérisée par sa fonction diélectrique  $\epsilon$  :

$$\epsilon(\lambda) = \epsilon_1(\lambda) + i\epsilon_2(\lambda) \quad (1.21)$$

La fonction diélectrique est reliée à l'indice de réfraction complexe  $m = n + ik$  par  $m^2 = \epsilon$ . La partie imaginaire de l'indice de réfraction  $k$  peut être déduite des mesures du coefficient d'absorption  $\alpha$  d'une couche mince du matériau :  $\alpha = \frac{2\pi k}{\lambda}$ . La partie réelle de l'indice  $n$  est calculée à partir de  $k$  avec les relations de Kramers-Kronig :

$$n = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (1.22)$$

avec  $\mathcal{P}$ , la valeur principale de l'intégrale et  $\omega = 2\pi\nu$ , la pulsation.

Dans le cas d'une particule sphérique dont la taille est petite devant la longueur d'onde, c'est-à-dire que le paramètre de taille  $x = 2\pi a/\lambda \ll 1$ ,  $Q_{\text{abs}}$  et  $Q_{\text{sca}}$  peuvent être calculées analytiquement

dans l'approximation de Rayleigh :

$$Q_{\text{abs}} = 4x \operatorname{Im} \left( \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) \quad (1.23)$$

$$Q_{\text{sca}} = \frac{8}{3} x^4 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 \quad (1.24)$$

Si  $(m^2 - 1) / (m^2 + 2)$  varie peu avec la longueur d'onde sur un intervalle donné, on a (comme il a été précisé dans la section 1.2.1),  $Q_{\text{abs}} \propto \frac{1}{\lambda}$  et  $Q_{\text{sca}} \propto \frac{1}{\lambda^4}$ .

En pratique, dans le cas de particules sphériques, le calcul de  $Q_{\text{abs}}$  et  $Q_{\text{sca}}$  peut être fait en utilisant des codes comme BHMIE (BOHREN et HUFFMAN 1998). Pour des grains non sphériques, l'approximation de la structure par dipôles discrets (DDA) peut être utilisée (PURCELL et PENNY-PACKER 1973, DRAINE 1988, DRAINE et FLATAU 1994).

### 1.3.4.2 Gap optique des matériaux carbonés

Dans les solides carbonés comme les a-C(:H), la formation de liaisons  $\sigma$  et  $\pi$  entre les atomes de carbone conduit à une structure de bandes électroniques occupées par les électrons (voir notamment ROBERTSON (1986)). La distribution des électrons dans les bandes est fonction de la température<sup>10</sup>. Entre le haut de la dernière bande occupée et le bas de première bande non occupée, il y a une bande d'énergie interdite, le gap. De manière générale, selon la valeur de ce gap, on peut classer les matériaux en trois catégories : isolants, semi-conducteurs et métaux (Fig. 1.32). Dans le cas des métaux, la dernière bande occupée ne l'est que partiellement : les électrons sont libres de se déplacer et participent à la conductivité électrique du métal.

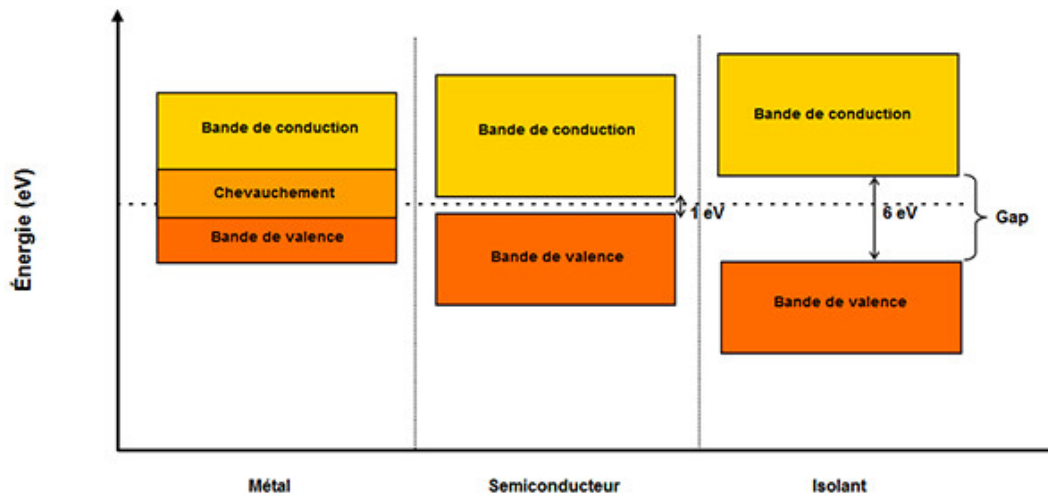


FIGURE 1.32 – Classes des matériaux selon leur énergie de gap. Les métaux n'ont pas de gap, les isolants ont gap élevé et les semi-conducteurs un gap intermédiaire.

Lorsqu'un matériau est exposé à un champ de rayonnement, les photons dont l'énergie est supérieure à celle du gap peuvent être absorbés. Dans le cas de semi-conducteurs, l'énergie de gap, de l'ordre de 1 ou 2 eV, correspond à une énergie de photon IR. Le travail de ROBERTSON (1986) établit le lien entre le contenu en hydrogène  $X_H$  et l'énergie de gap  $E_g$  des a-C(:H). TAMOR et WU (1990) dérivent la relation suivante :

$$E_g (\text{eV}) \approx 4.3X_H \quad (1.25)$$

10. La description précise de la répartition des électrons sur les niveaux d'énergie est donnée par la statistique de Fermi-Dirac qui tend vers la la statistique de Maxwell-Boltzmann pour les températures élevées.

Le modèle THEMIS (JONES et al. 2017, JONES 2012a;b) se base sur ce constat pour dériver les propriétés optiques d'une large gamme de composition pour les a-C(:H). Le chapitre 2 décrit dans le détail l'approche utilisée par le modèle THEMIS.

La structure des a-C(:H) ne présente pas d'ordre à grande échelle et les bandes vont dépendre de l'organisation du réseau de liaisons  $\sigma$  et  $\pi$  entre atomes de carbone. La présence d'atomes d'hydrogène tend à introduire du désordre dans le réseau de liaisons  $\pi$  et contribue à l'augmentation du gap. On remarque que plus le réseau de liaisons  $\pi$  est étendu et forme des cycles aromatiques, plus l'énergie de gap est faible. Ultimement, le réseau est constitué uniquement de cycles aromatiques comme le graphène et son gap est nul.

En pratique, l'énergie de gap peut être déterminée à partir des mesures de l'absorption  $\alpha$  des a-C(:H) en utilisant la relation de Tauc (TAUC et al. 1966) qui dit que la quantité  $\sqrt{\alpha E}$  est proportionnelle à la différence d'énergie  $E - E_{Tauc}$  avec  $E$ , l'énergie du photon incident et  $E_{Tauc}$  l'intersection de l'axe des abscisses avec le prolongement de la partie affine de la fonction  $\sqrt{\alpha E} = f(E)$ . Il s'agit donc d'une relation graphique dont la figure 1.33 donne un exemple. Le gap de Tauc  $E_{Tauc}$  peut être assimilé au gap optique  $E_g$ .

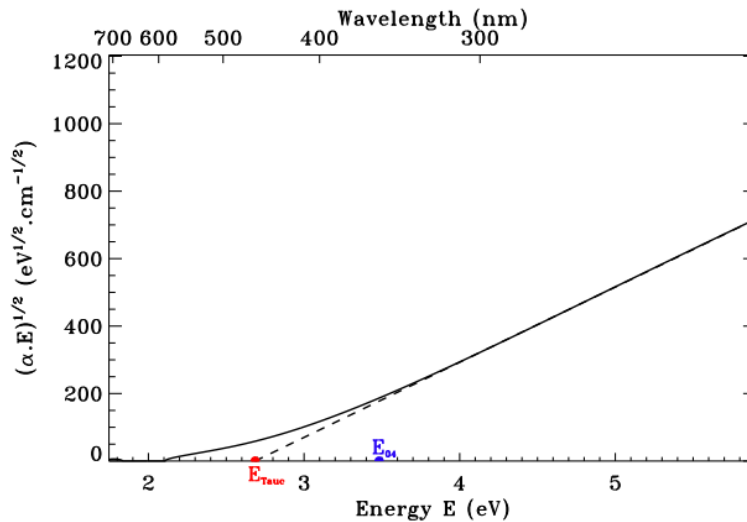


FIGURE 1.33 – Exemple de détermination du gap de Tauc  $E_g$  ( $E_{Tauc}$  (rouge) sur la figure).  $E_g$  est alors donnée par l'intersection entre l'axe des énergies et la prolongation de la partie affine de la courbe  $\sqrt{E\alpha}$ . (Source : GODARD 2011; Fig. 6.5)

## 1.4 Les modèles de poussière

Notre connaissance de la poussière s'est construite progressivement, contrainte par les observations et nourrie par les expériences de laboratoire. La construction de modèles permet la description cohérente de la poussière et propose à travers eux de fournir une histoire de la matière interstellaire pour décrypter son rôle dans la formation stellaire ou planétaire et la chimie. Cette section décrit l'histoire des modèles de poussière en relevant les points d'intérêts majeurs. Elle suit le fil conducteur de l'introduction de JONES et al. (2017).

Suite aux travaux de TRUMPLER (1930) et SCHALÉN (1929; 1931) sur l'absorption interstellaire, les premiers modèles de poussière utilisant la théorie de la diffusion de la lumière de Mie appliquée à un nuage de particules métalliques illuminé par une étoile (SCHOENBERG et JUNG 1934). Ils esquissent une explication des mécanismes à l'oeuvre et donnent une idée de la taille des particules.

Dans les années 1940, VAN DE HULST (1943) puis OORT et VAN DE HULST (1946) développent un modèle de "glace sale" qui tient compte des échanges entre phases gazeuse et solide dans les nuages interstellaires. Il s'agit donc d'un modèle qui considère une évolution de la matière. Les auteurs expliquent que si l'évaporation permet de comprendre la présence de l'hydrogène et de l'hélium gazeux, il faut un autre mécanisme, la collision des grains, pour expliquer la présence des autres espèces chimiques en phase gazeuse. Ce premier modèle permet d'estimer le taux de transformation de la matière et sa durée de vie dans des conditions physiques données. On saisit dès lors l'intérêt de bien connaître la poussière. En effet, sa composition, sa taille, sa forme définissent comment elle interagit avec la lumière. Ainsi pour comprendre les observations et les conditions physiques des milieux desquels elle provient, il est indispensable de contraindre les propriétés de la poussière.

Ces contraintes sont d'abord apportées par les observations qui imposent aux modèles de les expliquer. Ainsi en 1962 HOYLE et WICKRAMASINGHE (1962) proposent des flocons graphitiques pour expliquer l'extinction de la lumière visible et proche-IR. Considérant que l'abondance des éléments observée dans la photosphère solaire (GOLDBERG et al. 1960) est comparable à celle de la galaxie, le constat est fait que seuls le carbone et l'oxygène sont en assez grande quantité pour contribuer à la densité des grains. Les auteurs dérivent alors les propriétés de flocons graphitiques en considérant que l'oxygène se lie à l'hydrogène pour former des glaces. Puis WICKRAMASINGHE (1963; 1970/ed) prend en compte des grains de silicates en plus du graphite, avec ou sans manteau de glace et pour expliquer le rougissement. La mesure de l'extinction UV et de la bosse UV vers 217 nm (STECHEER et DONN 1965, STECHER 1969) renforce l'hypothèse du graphite (STECHEER 1965). En 1969, HOYLE et WICKRAMASINGHE (1969) proposent que silicates et graphite se forment autour des étoiles géantes rouges et utilisent des propriétés optiques dérivées des mesures de laboratoire. Le fameux modèle de poussières de silicates et de graphite était né.

En 1977, le modèle de MATHIS, RUMPL et NORDSIECK (1977), nommé MRN, permet de reproduire l'extinction et la bosse UV. Ils confirment l'importance des composés graphitiques et explorent leur association avec d'autres matériaux comme l'enstatite, l'olivine, le carbure de silicium SiC, le fer et la magnétite. Surtout, MATHIS et al. (1977) proposent que la distribution de taille des particules suit une loi de puissance  $n(a) \propto a^{-3.5}$  avec  $5 \text{ nm} \leq a \leq 1 \text{ } \mu\text{m}$ . Le modèle de DRAINE et LEE (1984), basé sur le modèle MRN, utilise une combinaison de graphite et de "silicates astronomiques". Ces silicates astronomiques sont considérés comme étant constitués d'un cœur silicate entouré d'un manteau réfractaire (GREENBERG et LI 1996). Leurs propriétés optiques s'appuient sur celles de l'olivine amorphe (vitreuse) et de résidus organiques de glace formées sous l'action de photons UV. L'hypothèse PAH (LEGER et PUGET 1984, ALLAMANDOLA et al. 1985) conduit à leur introduction dans plusieurs modèles (DESERT et al. 1990, SIEBENMORGEN et KRUEGEL 1992, DWEK et al. 1997, DRAINE et LI 2001, LI et DRAINE 2001; 2002, SIEBENMORGEN et al. 2014). Notamment, DESERT et al. (1990) considèrent trois populations distinctes : les PAH, les très petits grains (VSG<sup>11</sup>) graphitiques, les gros grains (BG<sup>12</sup>) constitués de silicates et de matière carbonée. Une variante de ce type de modèles consiste à considérer des carbones amorphes à la place du graphite (ZUBKO et al. 2004, COMPIÈGNE et al. 2011, GALLIANO et al. 2011).

Alternativement, étant donné que le MIS est un milieu turbulent où la déplétion des éléments varie significativement (e.g., CRINKLAW et al. 1994, SAVAGE et SEMBACH 1996, JONES 2000, WELTY et al. 2002, JENKINS 2009, PARVATHI et al. 2012), le cycle de la poussière et du gaz à travers les différentes phases du MIS suggère que les composantes de la poussière sont mélangées. Ce mélange peut prendre différentes formes : des grains de graphite recouverts d'un manteau de glace (WICKRAMASINGHE 1963), la formation d'un matériau réfractaire à partir de la transformation de glace par les photons UV (GREENBERG 1986) ou des particules poreuses ou des agrégats (e.g., JONES 1988, MATHIS et WHIFFEN 1989). Une série de modèles émerge de cette considération que la poussière est nécessairement mélangée et transformée dans le MIS et forme des grains ayant une structure cœur/manteau (GREENBERG 1986, DULEY 1987, DULEY et al. 1989, JONES et al. 1987; 1990;

11. *Very Small Grains*

12. *Big Grains*

2017, JONES 1990, SORRELL 1991, LI et GREENBERG 1997, IATÌ et al. 2008, CECCHI-PESTELLINI et al. 2010; 2014, ZONCA et al. 2011, KÖHLER et al. 2014). Le modèle THEMIS (Chap. 2) s'inscrit dans cette lignée.

L'observation des AIB à 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.3 et 12.7  $\mu\text{m}$  et l'hypothèse PAH (LEGER et PUGET 1984, ALLAMANDOLA et al. 1989) pour les expliquer ont conduit à de nombreux travaux de laboratoire et des calculs théoriques sur les PAH (TIELENS 2008). On notera par exemple que le rapport d'intensités des AIB dépend de l'état d'ionisation (ALLAMANDOLA et al. 1999). On pourra également citer les modèles *ad hoc* qui permettent de décomposer les observations des bandes IR en utilisant une combinaison de spectres associés à des populations de PAH :

- l'outil PAHTAT<sup>13</sup> qui considère PAH neutres, cations, gros PAH et des VSG volatiles (eVSG<sup>14</sup>) (PILLERI et al. 2012).
- l'outil PAHdb<sup>15</sup> qui utilise la base de données *NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database* contenant les spectres calculés (et mesurés) d'une large gamme d'espèces PAH neutres, ionisés ou contenant des hétéro-atomes (BOERSMA et al. 2014, BAUSCHLICHER et al. 2018). Cet outil est développé en lien avec la mission JWST.

## 1.5 Le cycle de la poussière

L'évolution de la poussière constatée par les changements dans les signatures spectrales observées et les expériences de laboratoire laisse entrevoir le cycle de la poussière à travers les différentes phases du MIS.

Au cours de leur vie, les étoiles réalisent la nucléosynthèse des éléments chimiques de plus en plus lourds. Les étoiles de masse faible ou moyenne (0.8-8  $M_{\odot}$ ) évoluent vers le stade AGB<sup>16</sup> où leur cœur est composé d'atomes de carbone et d'oxygène. Durant ce stade, l'alternance de phases de compression et d'expansion de l'enveloppe stellaire conduit à l'expulsion de la matière qui la compose dans le vent stellaire. Les conditions de températures plus froides (1000-2500 K) dans les enveloppes externes et circumstellaires permettent la formation des molécules et la croissance des grains de poussière (HÖFNER et OLOFSSON 2018, ALHARBI 2018). Selon le rapport C/O d'atomes de carbone et d'oxygène, des silicates seront principalement formés (C/O < 1) ou des carbones amorphes (C/O > 1) (Fig. 1.34). Dans le MIS de la galaxie, 90% de la poussière pourrait être injectée par le vent stellaire des AGB (SLOAN et al. 2008). La poussière joue un rôle critique dans les mécanismes des vents stellaires (HÖFNER et OLOFSSON 2018, WOITKE 2006) et participent au rougisement de l'étoile.

Les étoiles massives (>8  $M_{\odot}$ ) évoluent en supernovae. Du fait de leur masse plus importante, ces étoiles réalisent la fusion d'éléments chimiques jusqu'à former un noyau de fer et contribuent donc à alimenter le MIS en éléments lourds. L'explosion d'une supernova est un événement très énergétique qui agit nécessairement sur la matière qu'elle a produit. La possibilité pour les poussières de survivre à ce genre d'événements est mal connue et s'il apparaît qu'elle peut effectivement persister et enrichir le MIS (SUGERMAN et al. 2006, BIANCHI et SCHNEIDER 2007, SARANGI et al. 2018) elles sont également détruites par les chocs (DWEK et al. 2008, ARENDT et al. 2010, MICELLOTTA et al. 2010; 2018). Des AIB sont notamment observées dans les restes d'une supernova du grand nuage de Magellan (TAPPE et al. 2006). Les supernovae jouent donc un rôle de régulation dans le cycle de la poussière par les éléments lourds qu'elles injectent et la transformation/destruction des grains par les ondes de chocs qu'elles produisent (BORKOWSKI et DWEK 1995, JONES et al. 1996).

13. <http://userpages.irap.omp.eu/~cjoblin/PAHTAT/Site/PAHTAT.html>

14. *evaporating VSG*

15. <https://www.astrochemistry.org/pahdb/theoretical/3.00/default/view>

16. *Asymptotic giant branch*

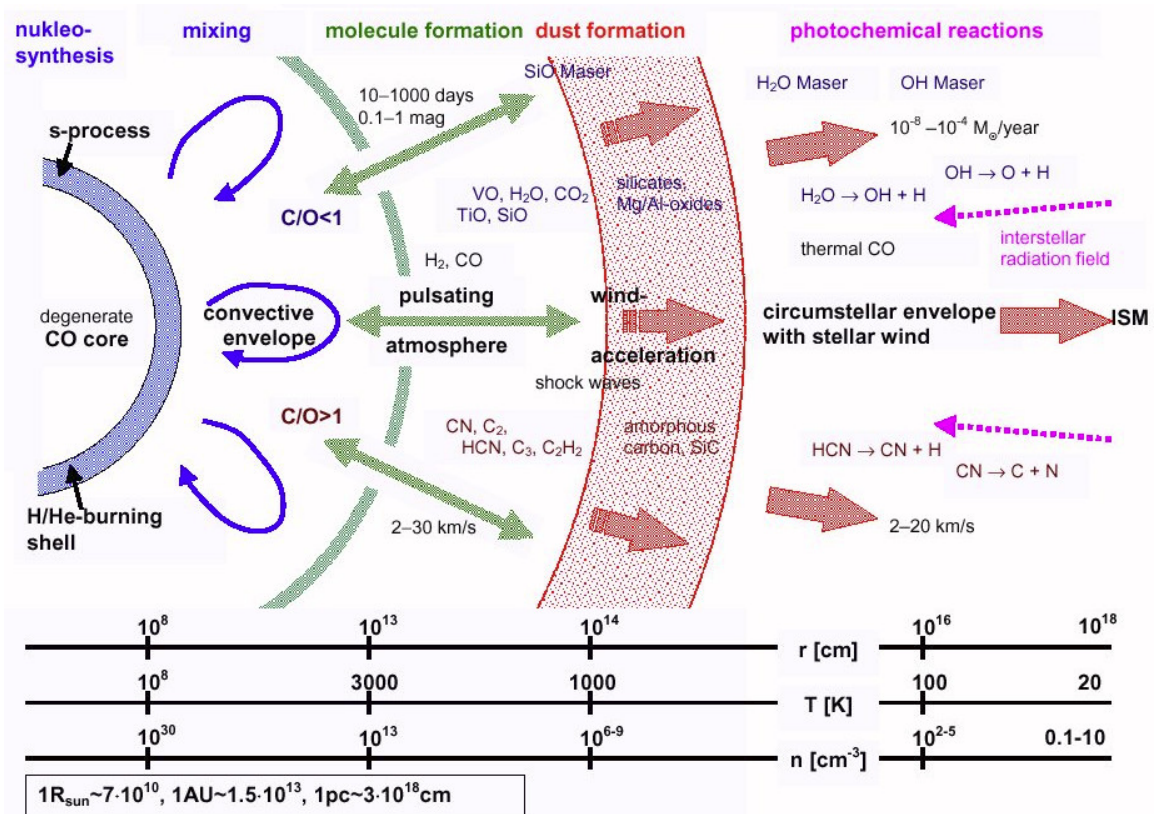


FIGURE 1.34 – Représentation schématique de la structure des étoiles AGB. (Source : J. Hron, Inst. for Astronomy, Univ of Vienna).

Dans le MIS, la poussière est exposée à des conditions variées de température, d'irradiation et de densité qui conduisent à la destruction, à la transformation et au cyclage de la matière (JONES et NUTH 2011). 20 à 100% des éléments C, O, Si, Mg et Fe qui constituent la poussière sont supposés se trouver en phase solide (JONES et YSARD 2019, ASPLUND et al. 2009, PRZYBILLA et al. 2008). L'estimation de la durée de destruction de la poussière est de l'ordre de  $10^8$  ans (JONES et al. 1996) Celle de résidence de la matière dans les MIS entre sa production dans les étoiles en fin de vie et son incorporation dans un nouveau système proto-stellaire est évaluée à  $10^9$  années (JONES et al. 1994; 1996, JONES et NUTH 2011). Cela suggère des échanges entre phases diffuses et denses du MIS pour re-former et re-transformer la poussière.

Le modèle THEMIS (JONES et YSARD 2019, JONES et al. 2013; 2017) propose un scénario du cycle de la poussière depuis sa formation dans les étoiles AGB aux nuages moléculaires denses (Fig. 1.35). La matière carbonée, initialement amorphe et aliphatique, est aromatisée par les photons UV dans le MIS diffus. Du fait de leur taille, les plus gros grains ( $>20$  nm) ont un cœur aliphatique et un manteau aromatisé. Ils subissent la fragmentation dans les chocs et les vents stellaires et contribuent à former des grains plus petits aromatisés et homogènes. Les silicates, amorphes et plus résistants que les carbones (BIOCCIO et al. 2014), accrètent des manteaux de carbones aromatisés. Dans les phases plus denses des nuages moléculaires, les grains, protégés du rayonnement UV, grossissent par accrétion de carbones aliphatiques (KÖHLER et al. 2015). Dans les cœurs denses, ces grains coagulent et forment des manteaux de glaces. Puis selon les aléas des événements de la vie galactique, les grains de poussières peuvent se retrouver à nouveau exposés aux conditions du MIS diffus et être fragmentés et aromatisés comme dans les PDR.

Les nuages moléculaires, denses et froids, et notamment les nuages moléculaires géants (GMC<sup>17</sup>) dont la masse vaut entre  $10^2$  et  $10^7 M_{\odot}$  sont connus pour être le lieu de formation des étoiles.

17. Giant Molecular Cloud



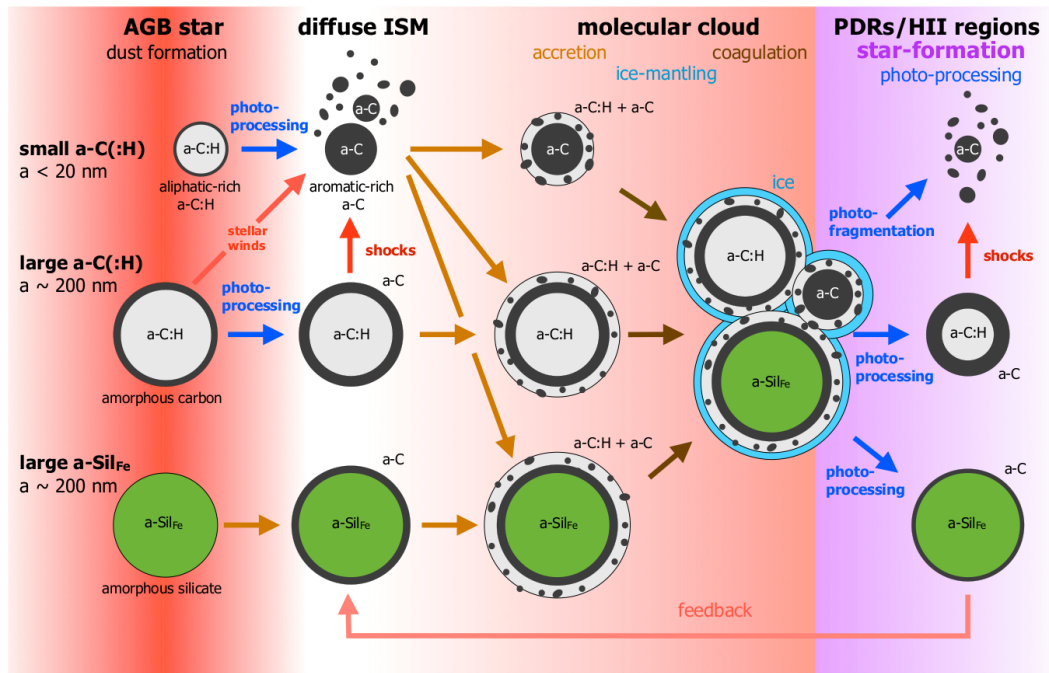


FIGURE 1.35 – Vue schématique du cycle de vie de la poussière interstellaire en termes de pistes d'évolution : Les pistes de "transformation parallèle" qui mènent à une évolution en douceur sont horizontales (c.-à-d. l'accrétion et la photo-transformation) et les pistes "croisées" qui mènent à un transfert de masse important entre les tailles de grains (c.-à-d. la coagulation et la désagrégation) sont diagonales et verticales. Qualitativement, l'ombrage rouge reflète la densité,  $n_H$  et l'ombrage violet, à l'extrême droite, représente des champs de rayonnement  $G_0$  élevés. (Source : JONES et al. 2013; Fig. 16)

Les GMC naissent dans les sillages des fronts d'onde de choc à grande échelle créés par les bras spiraux de la galaxie. Ils présentent des sous-structures filamenteuses, des nappes et des bulles qui se contractent sous l'effet de la gravitation. La turbulence, par l'énergie qu'elle injecte dans les nuages moléculaires, joue un rôle essentiel dans l'effondrement gravitationnel des cœurs pré-stellaires. La principale source de turbulence au sein des GMC semble être la rétroaction des jets stellaires des étoiles nouvellement formées (voir MCKEE et OSTRICKER (2007) pour plus de détails).

Le cœur pré-stellaire devenu proto-stellaire accrète gaz et poussière depuis son enveloppe. La conservation du moment cinétique accentue la rotation du cœur et forme un disque d'accrétion. La masse du cœur augmente et celui-ci se contracte sous l'effet de la gravitation. L'étoile nouvellement formée (YSO) convertit l'excès de moment cinétique dans des jets polaires. L'étoile et le disque évoluent en quelques millions d'années pour aboutir à un nouveau système stellaire ou planétaire.

Du cœur proto-stellaire à la fin de la formation du nouveau système, les différentes phases sont rangées dans les classes 0, I, II et III (LADA et WILKING 1984, SHU et al. 1987, LADA 1999) (Fig. 1.36). Chacune de ces classes est caractérisée par un spectre d'émission révélant la présence de poussière. La classe 0 correspond à la formation de l'étoile par effondrement du cœur proto-stellaire; seule l'émission de la poussière froide dans l'IR lointain de l'enveloppe est observée. Lorsque la masse de la (proto-)étoile dépasse celle de l'enveloppe, on parle alors d'YSO de classe I; l'émission de la (proto-)étoile est observée mais reste dominée par celle de la poussière. En classe II, le disque protoplanétaire est formé et les grains de poussière sédimentent dans le disque (Sect. 1.6). L'émission du disque domine dans l'IR et celle de l'étoile à plus courte longueur d'onde. Enfin, en classe III, les planètes se sont formées, l'étoile a accru ou expulsé ce qu'il restait de gaz et de poussière; on parle alors de disque de débris et le spectre associé est largement dominé par l'émission de l'étoile et l'excès d'émission dû à la poussière est limité. Les disques de débris sont formés de poussières dites de seconde génération renouvelées continuellement par les collisions de

corps comme les planétésimaux.

Au cours de cette évolution du cœur proto-stellaire au disque de débris, la poussière connaît des conditions physiques très variées. D'abord, les agrégats de grains coagulés dans les nuages denses sont exposés au rayonnement de l'étoile naissante qui conduit à leur transformation. Puis, selon leur localisation et la dynamique du disque, les grains continuent d'évoluer, sont dissociés, coagulés, transformés ou renouvelés (Voir Sect. 1.6).

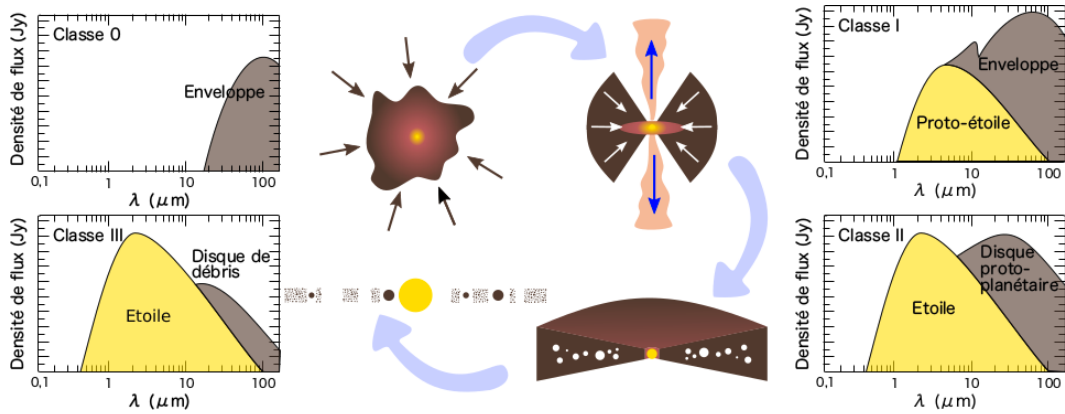


FIGURE 1.36 – Représentation des classes 0, I, II et III de formation stellaire des YSO et du spectre associé. (Source : PERICAUD 2016; Fig. 2.1)

Les étoiles, T Tauri ( $< 2M_{\odot}$ ) ou Herbig ( $\geq 2M_{\odot}$ ) pré-séquence principale, formées dans les nuages moléculaires, évoluent sur la séquence principale puis vers un stade de géante rouge AGB ou une supernova selon leur masse, synthétisant de nouveaux éléments qui contribueront à former de nouvelles poussières alimentant le MIS. La figure 1.37 résume le cycle de la poussière à travers les différentes phases du MIS.

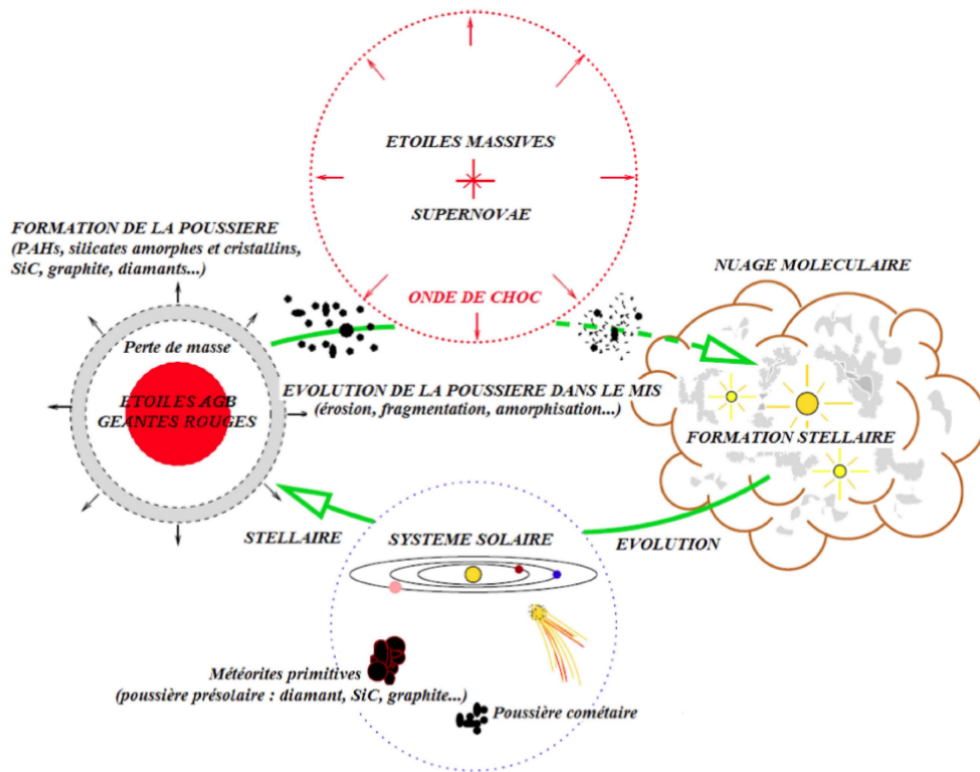


FIGURE 1.37 – Représentation du cycle de la poussière interstellaire. (Source : JONES (2004) adaptée dans GODARD (2011))

## 1.6 La poussière dans les disques protoplanétaires

La Terre est née il y a 4.5 milliards d'années du disque protoplanétaire orbitant autour du Soleil. Les découvertes depuis 30 ans d'exoplanètes autour d'autres étoiles de notre galaxie révèlent leur diversité et surtout leur nombre, plus de 4000<sup>18</sup> actuellement. Ce nombre suggère que la plupart des étoiles naines de la séquence principale (comme le Soleil) doivent avoir une planète (WINN et FABRYCKY 2015). L'étude des disques circumstellaires est donc essentiel pour comprendre les conditions dans lesquelles se forment les planètes.

### 1.6.1 Classification des disques

La description de plus en plus précise des disques conduit à les classer selon leur état d'évolution en disques pleins, pré-transitionnels, transitionnels et de débris (ESPAILLAT et al. (2007) ou voir ESPAILLAT et al. (2014) pour une revue de l'observation des disques transitionnels). Chronologiquement, c'est d'abord l'observation d'un excès d'émission dans le proche et le moyen IR qui a permis de mettre en évidence la présence des disques circumstellaires autour des YSO comme les étoiles Herbig (e.g., STROM et al. 1972) et les T Tauri (GRASDALEN et al. 1984, STROM et al. 1989, SKRUTSKIE et al. 1990). Des disques transitionnels entre les YSO de classe II et III présentant une cavité interne sont ensuite observés (SKRUTSKIE et al. 1990). Cette cavité suggère la présence d'un compagnon stellaire ou de planètes en orbite (MARSH et MAHONEY 1992; 1993). Avec ISO puis Spitzer, des études plus détaillées sont possibles autour des étoiles Herbig, plus brillantes que les T Tauri. On notera qu'une cavité interne est notamment découverte dans le disque de HD 100546 (BOUWMAN et al. 2003). Enfin, l'existence d'un disque interne optiquement épais séparé du disque externe est révélée dans plusieurs objets (BROWN et al. 2007, ESPAILLAT et al. 2007). Ce sont les disques pré-transitionnels.

18. <https://exoplanets.nasa.gov/exoplanet-catalog/>

La figure 1.38 illustre la classification des disques. Une manière de les classer consiste à comparer leur SED à la SED médiane des disques dans la région de formation stellaire du Taureau, considérée comme représentative de celle d'un disque plein (ESPAILLAT et al. 2014). Dans le proche IR (1-5  $\mu\text{m}$ ), l'excès d'émission est dû la diffusion par les grains microniques et à la poussière chaude du bord interne du disque alors que dans le moyen IR (5-20  $\mu\text{m}$ ), il provient de la poussière moins chaude s'étendant sur quelques dizaines d'unités astronomiques (au). Ainsi, la SED des disques :

- pleins présente un excès d'émission dans l'IR proche, moyen et lointain,
- pré-transitionnels a un excès d'émission dans le proche IR lié au disque interne et une chute de l'excès dans le moyen IR liée à la cavité,
- transitionnels ne présente plus d'excès proche IR lié à la disparition du disque interne,
- de débris (ou évolués) présente un excès d'émission IR faible dû à la disparition du gaz et de la poussière.

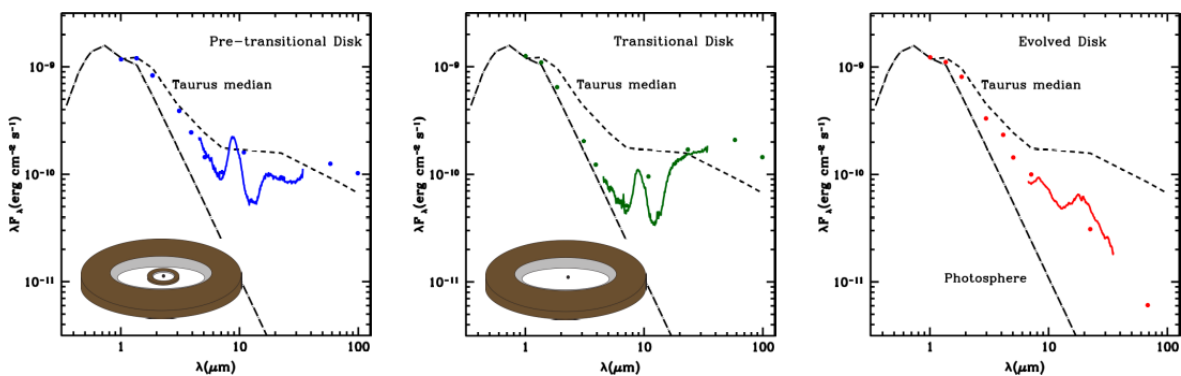


FIGURE 1.38 – SED de disques selon leur classe : pré-transitionnel (gauche), transitionnel (milieu), de débris (droite). (Source : figure adaptée de ESPAILLAT et al. 2014; Fig. 1 et 2))

Les disques protoplanétaires étudiés dans les chapitres 3 et 4 sont des disques (pré-)transitionnels autour des étoiles Herbig Ae/Be HD 100546, HD 100453, HD 169142 et HD 179218.

## 1.6.2 Structure, taille et masse des disques

**La structure des disques.** Parallèlement aux mesures spectroscopiques, dès les années 1990, la photométrie dans les longueurs d'onde millimétriques permet de sonder la distribution spatiale d'espèces chimiques gazeuses et leur température (e.g., DUTREY et al. 1994, ÖBERG et al. 2010) ainsi que la poussière froide (e.g., SIMON et GUILLOTEAU 1992). Avec Hubble, les disques sont observés par contraste avec les régions brillantes en arrière plan et dévoilent une structure évasée (e.g., PADGETT et al. 1999). Cette forme évasée est prédite par les modèles de disque irradié à l'équilibre hydrostatique (e.g., KENYON et HARTMANN 1987, CHIANG et GOLDBREICH 1997, DULLEMOND 2002).

Mais c'est avec ALMA<sup>19</sup>, SPHERE<sup>20</sup> et les autres instruments à haute résolution angulaire que la structure des disques est révélée en détail. ALMA dévoile notamment anneaux (ANDREWS et al. 2016, ISELLA et al. 2016, ALMA PARTNERSHIP et al. 2015) et spirales (PÉREZ et al. 2016) dans le (sub-)millimétrique (Fig. 1.39a). On note qu'à ces longueurs d'onde, ce sont l'émission thermique des grains de poussière froids de taille millimétrique et les rotations des molécules en phase gazeuse qui sont sondées. Le CO dont la température de condensation vaut  $\sim 21$  K permet de sonder la température dans les disques en révélant les lignes de glace (PINTE et al. 2018).

Aux longueurs d'onde visible/proche IR, la polarimétrie à haute résolution permet de sonder la lumière diffusée par les grains de taille micronique et révèle également la présence d'anneaux, de

19. Atacama Large Millimeter/submillimeter Array

20. Spectro-Polarimetric High-contrast Exoplanet REsearch instrument

gaps ou de spirales et d'asymétries (e.g., HASHIMOTO et al. 2011, AVENHAUS et al. 2014a;b, THALMANN et al. 2015, MONNIER et al. 2017, BERTRANG et al. 2018). Notamment, l'instrument SPHERE au VLT dévoile des disques évasés et inclinés (Fig. 1.39b) (AVENHAUS et al. 2018, SISSA et al. 2018). GARUFI et al. (2017) donnent une revue des principaux résultats de SPHERE.

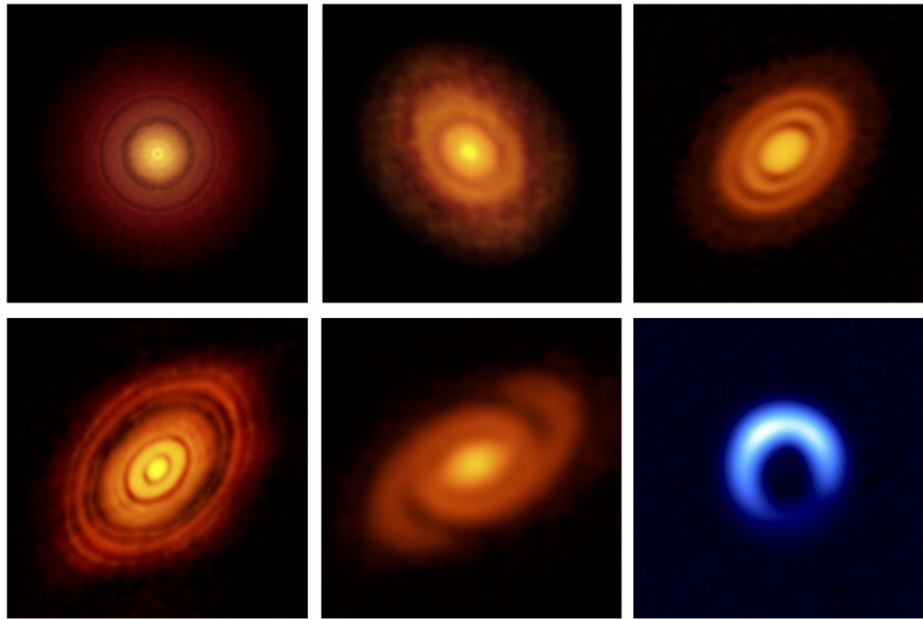
La figure 1.40 montre les observations ALMA, SPHERE et GPI des disques protoplanétaires HD 100546, HD 100453 et HD 169142 et étudiés dans le chapitre 3.

**La taille des disques.** La première estimation de la taille des disques a été inférée par des observations aux longueurs d'onde radio dans les régions HII de la nébuleuse d'Orion (CHURCHWELL et al. 1987). Une des principales méthodes consiste à observer l'extension spatiale du continuum dans le millimétrique (OSTERLOH et BECKWITH 1995, DUTREY et al. 1996). Avec le télescope Hubble, le contraste des disques optiquement épais sur le fond brillant des régions HII ou le front d'ionisation, équivalent à une PDR, dû à la photo-évaporation de la surface des disques par les étoiles massives fournissent à la fois des indications sur la taille et la forme des disques (MCCAUGHREAN 1997/ed, PADGETT et al. 1999, BALLY et al. 2000, VICENTE et ALVES 2005). Ainsi, les disques présentent une structure évasée s'étendant sur quelques dizaines à plusieurs centaines d'au. Néanmoins, PIÉTU et al. (2014) suggèrent qu'une grande proportion des disques pourraient avoir des rayons de l'ordre de 10-20 au et n'auraient pas été détectés jusque là par manque de sensibilité et de résolution spatiale. Une étude récente sur les jeunes disques montre que ceux-ci ont majoritairement un rayon inférieur à 60 au et que les disques plus étendus seraient assez rares (MAURY et al. 2019).

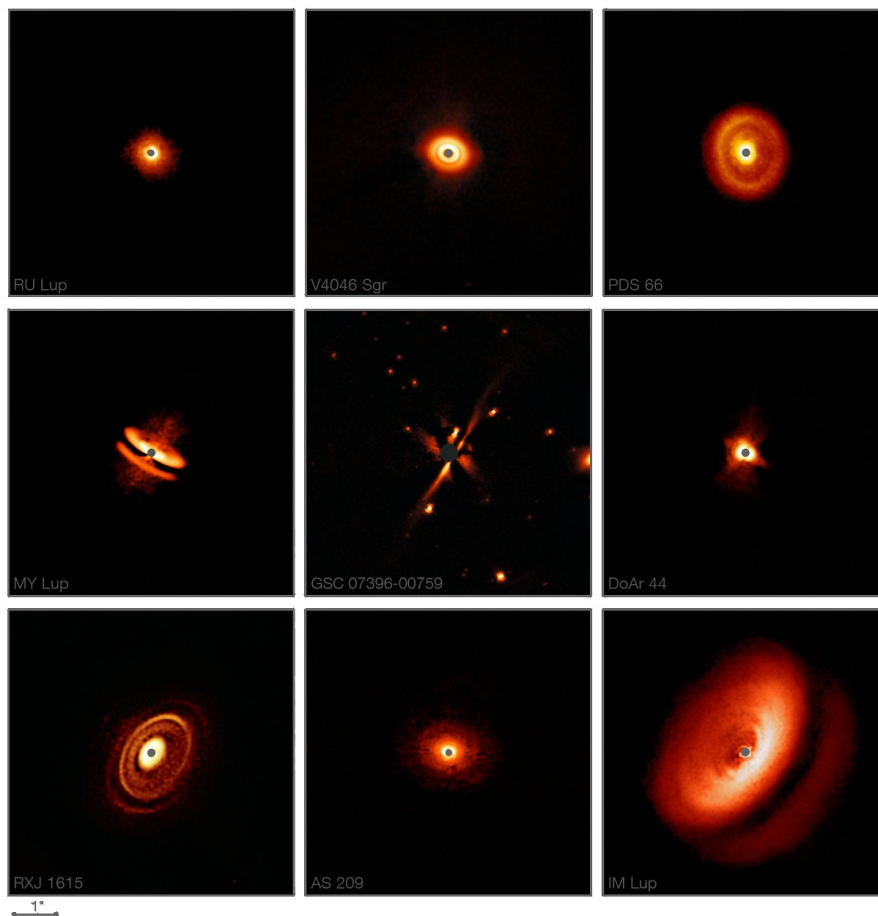
**La masse des disques.** Les disques protoplanétaires sont considérés comme étant largement formés de gaz dont la principale composante est le dihydrogène  $H_2$ . Le rapport des masses gaz/poussière est généralement pris égal à 100 (WILLIAMS et CIEZA 2011). La question de la détermination de la masse des disques est critique car elle est liée à celle de la masse disponible pour la formation planétaire (MORDASINI et al. 2012).  $H_2$  étant difficilement observable du fait de l'absence de moment dipolaire, plusieurs méthodes sont utilisées pour déterminer la masse des disques : l'opacité de la poussière à grande longueur d'onde (BECKWITH et al. 1990, ANDREWS et WILLIAMS 2005; 2007, WILLIAMS et CIEZA 2011) ou du CO (DUTREY et al. 1996, WILLIAMS et BEST 2014) ou la mesure des raies de l'isotopologue du  $H_2$ , HD (BERGIN et al. 2013, McCLURE et al. 2016).

La première méthode suppose un rapport de masses gaz/poussière constant et se base sur l'opacité de la poussière. Or cette dernière dépend de la taille et de la composition des grains et nécessite donc une bonne connaissance de leur composition. La deuxième méthode considère un rapport d'abondance CO/ $H_2$  constant. Or celui-ci varie dans les disques à cause de la dissociation par les photons UV et la condensation du CO dans le plan médian du disque (VAN ZADELHOFF et al. 2001, REBOUSSIN et al. 2015). Quant à la troisième méthode, elle est une mesure relativement directe de la masse du disque car le rapport de HD à  $H_2$  doit être constant.

La masse des disques est une question complexe et les estimations peuvent varier. Les ordres de grandeur généralement acceptés sont une masse de  $10^{-2} M_*$  ( $10^{-3}$ - $1 M_*$ ) pour le gaz, et considérant un rapport de masses gaz/poussière de 100, une masse de  $10^{-4} M_*$  pour la poussière. Néanmoins, les observations réalisées avec ALMA semblent indiquer un rapport de masses gaz/poussière  $<100$  (ANSDELL et al. 2016) mais aussi que la masse de poussière diminue à mesure que le disque évolue (BARENFIELD et al. 2017). Cependant, dès 1-2 millions d'années, la quantité de poussière semble insuffisante pour former des planètes (TESTI et al. 2016, MANARA et al. 2018). Celles-ci se forment-elles très rapidement comme cela est suggéré par le gap observé du jeune système HL Tau (ALMA PARTNERSHIP et al. 2015) ? Observe-t-on réellement la matière qui forme les planètes ou cette poussière est-elle le produit de collisions de corps plus gros et les planètes sont-elles déjà formées ? Ou finalement, la masse de poussière est-elle bien estimée ? Les contraintes qu'on peut poser sur les propriétés des poussières permettraient d'apporter des éléments de réponse.



(a) Observations de disques protoplanétaires avec ALMA. Avec de gauche à droite et de haut en bas : TW Hya (ANDREWS et al. 2016), V883 Ori (CIEZA et al. 2016), HD 163296 (ISELLA et al. 2016), HL Tau (ALMA PARTNERSHIP et al. 2015), Elias 2-27 (PÉREZ et al. 2016) et HD 142527 (KATAOKA et al. 2016). (Crédit : S. Andrews, L. Cieza, A. Isella, A. Kataoka, B. Saxton (NRAO/AUI/NSF), et ALMA (ESO/NAOJ/NRAO))



(b) Observations de disques protoplanétaires avec SPHERE. (Crédit : ESO/H. Avenhaus et al./E. Sissa et al./DARTT-S and SHINE collaborations)

FIGURE 1.39

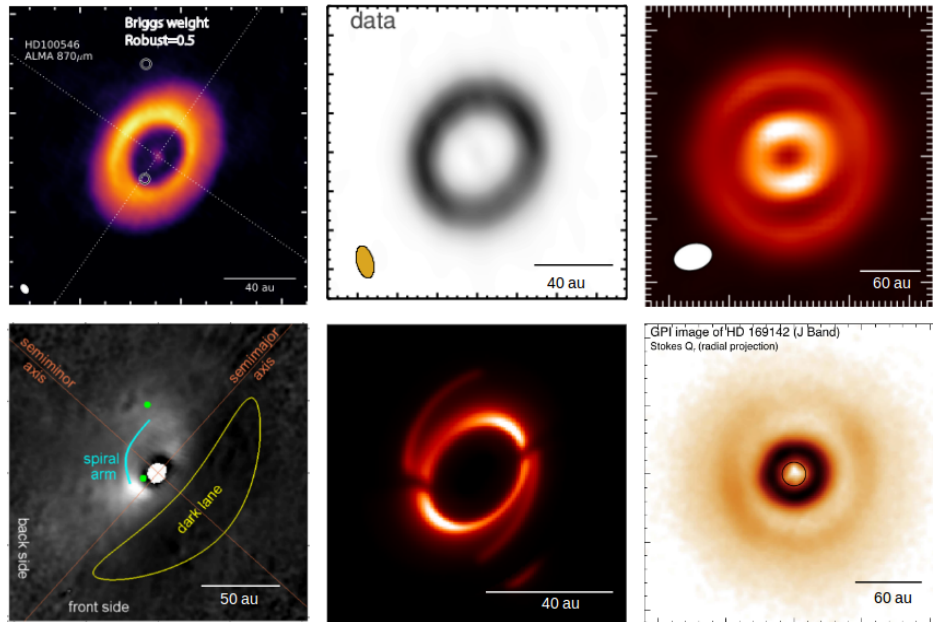


FIGURE 1.40 – Observations des disques protoplanétaires HD 100546 (gauche), HD 100453 (milieu) et HD 169142 (droite) avec ALMA (haut) et SPHERE et GPI (bas). Ces disques sont étudiés dans le chapitre 3. Les figures de la mosaïque sont tirées, avec de gauche à droite et de haut en bas, de [PINEDA et al. \(2018\)](#), [AVENHAUS et al. \(2014a\)](#), [BENISTY et al. \(2017\)](#), [VAN DER PLAS et al. \(2019\)](#), [FEDELE et al. \(2017\)](#), [MONNIER et al. \(2017\)](#)

**Le mouvement képlérien des disques.** La masse du disque étant faible devant celle de son étoile centrale, il est attendu que son mouvement soit (quasi) képlérien. Cela est confirmé par l'observation du CO (e.g., [KOERNER et al. 1993](#), [DUTREY et al. 1994](#), [DUVERT et al. 1998](#)). Néanmoins, dans un milieu condensé comme les disques, le gradient de pression dans le gaz conduit à une rotation plus lente qui se traduit par des forces de freinage s'exerçant sur la poussière qui chute alors vers l'étoile ([WEIDENSCHILLING 1977](#), [TESTI et al. 2014](#)) (Sect. 1.6.3).

**L'âge des disques.** L'observation de régions de formation stellaire conduit à une estimation de la durée de vie des disques de quelques millions d'années ( $3-5 \times 10^6$  années) ([KARL E. HAISCH et al. 2001](#), [HERNÁNDEZ et al. 2007](#), [RIBAS et al. 2015](#)). Cette durée relativement courte impose une formation rapide des planètes qui doit être d'autant plus rapide du fait de la compétition exercée par l'accrétion de matière sur l'étoile centrale et la photo-évaporation par les photons X et UV des étoiles voisines ([GORTI et al. 2009; 2016](#), [CHAMPION et al. 2017](#)).

**La détection de planètes.** La présence de gap suggère celle de planètes formées à partir de la matière du disque. Plusieurs candidates sont répertoriées autour de HD 100546 ([QUANZ et al. 2015](#), [CURRIE et al. 2015](#), [GARUFI et al. 2016](#)), HD 169142 ([BILLER et al. 2014](#), [REGGIANI et al. 2014](#), [OSORIO et al. 2014](#)) ou encore HD 163296 ([ISELLA et al. 2018](#), [TEAGUE et al. 2018](#)) ou encore HD 97048 ([PINTE et al. 2019](#)). Ce faible taux de détections potentielles, non confirmées à différentes longueurs d'onde, peut être lié à la forte extinction de la poussière à courte longueur d'onde. Une bonne connaissance des propriétés de la poussière, de son évolution et de la dynamique au sein de disques apparaît alors essentielle.

### 1.6.3 Transport et croissance de la poussière dans les disques

Considérant le cas idéal d'un disque évasé à l'équilibre hydrostatique irradié par son étoile centrale, [TESTI et al. \(2014\)](#) détaillent les mécanismes de transport qui conduisent à la croissance des grains de poussière.

**Mécanismes.** La description des interactions entre grains de poussière et particules du gaz au sein du disque dépend de la taille des grains. Lorsque celle-ci est supérieure au libre parcours moyen des particules de gaz ( $\sim$ cm), les grains subissent une force de frottement de la part du gaz alors décrit comme un fluide de Stokes. Le régime de Stokes dépend non seulement de la taille du grain mais aussi de la vitesse relative et de la densité du gaz qui varient selon la localisation dans le disque. Cette force de frottement subie est à l'origine du glissement radial des plus gros grains qui tombent en spirale vers l'étoile (e.g., WEIDENSCHILLING 1977). L'estimation du temps de chute est faible devant la durée de vie des disques et d'autres mécanismes doivent contre-balancer le freinage radial (TAKEUCHI et LIN 2005, ALEXANDER et ARMITAGE 2007). Notamment, la transition des grains de poussière vers le régime de Stokes pourrait être important pour piéger la poussière et expliquer la croissance des grains jusqu'à former des planétésimaux (BIRNSTIEL et al. 2010, LAIBE et al. 2012, OKUZUMI et al. 2012). D'autre part, des mécanismes comme les vents stellaires ou l'advection dans le plan médian du disque peuvent exister et expliquer la présence de silicates cristallins dans les parties externes des disques (SHU et al. 2001, KELLER et GAIL 2004, CIESLA 2009).

Il s'agit là de mécanismes transportant radialement la matière. Mais le transport vertical est aussi à considérer. Celui-ci brasse verticalement la poussière et notamment conduit à la sédimentation des plus gros grains dans le plan médian du disque par gravité. La sédimentation<sup>21</sup> peut être contre-balançée par la turbulence et l'équilibre entre les deux contributions permet de décrire la structure verticale des disques (DUBRULLE et al. 1995). De plus, si la sédimentation peut conduire à la croissance rapide des grains, les collisions peuvent aussi produire des fragments de petits grains participant au renouvellement de la matière à la surface des disques (e.g., DULLEMOND et DOMINIK 2005, BIRNSTIEL et al. 2009).

**Croissance des grains.** Les différents mécanismes de transport conduisent aux collisions des grains entre eux. De ces collisions résulte la fragmentation des grains, leur collage et des transferts de masse qui contribuent en partie à la croissance des grains. La mesure de la diminution de l'indice spectral  $\beta$  à grande longueur d'onde permet de sonder la croissance des grains (NATTA et TESTI 2004, DRAINE 2006, NATTA et al. 2007). Les observations montrent une augmentation de  $\beta$  des régions internes ( $\beta$  faible ou nul) vers les bords externes du disque ( $\beta \sim 1.5-2$ ) (ISELLA et al. 2010, GUILLOTEAU et al. 2011, PÉREZ et al. 2012). Ainsi, l'observation à grande longueur d'onde avec ALMA permet de mettre évidence le peuplement du plan médian du disque par les gros grains et leur migration interne. La croissance des grains et leur forme sont aussi mises en évidence par l'auto-diffusion de la lumière polarisée dans les disques (e.g., KATAOKA et al. 2015; 2016, GIRART et al. 2018).

Les expériences de laboratoire s'intéressant aux mécanismes physiques de la croissance des grains montrent qu'une première barrière apparaît vers  $\sim 1$  mm due au collage et à la fragmentation (BLUM et WURM 2000, ZSOM et al. 2010). En supposant que le collage des grains permet néanmoins de franchir cette barrière et de former des cailloux (*pebbles*) entre 10 cm et 1 m, la chute rapide de ceux-ci sur l'étoile (WEIDENSCHILLING 1977) constitue une deuxième barrière à la formation des planètes. Différents mécanismes ont été proposés pour contourner ces barrières : la formation d'agrégats poreux (GUNDLACH et BLUM 2015, LOREK et al. 2018), la concentration de cailloux par les turbulences (JOHANSEN et al. 2007) ou l'auto-piégeage de la poussière (GONZALEZ et al. 2017). Une des questions importantes est de comprendre comment les conditions locales qui affectent la composition et la structure des grains de poussière favorisent ou limitent leur croissance.

21. Les récentes observations ALMA montrent que les disques sont minces dans l'émission des poussières sub-millimétriques, ce qui suggère la sédimentation verticale des poussières dans le plan du disque et une importance limitée de la turbulence.



### 1.6.4 L'émission de la poussière selon sa localisation

Les observations des disques et la description des mécanismes de transport conduisent à la représentation de la structure d'un disque protoplanétaire schématisée ici dans la figure 1.41. On note que les mécanismes de transport conduisent à une ségrégation des populations de poussières dans le disque :

- les gros grains sédimentent dans le plan médian du disque.
- les petits grains, couplés au gaz, sont exposés à la surface.

Ainsi, l'observation à une longueur d'onde permet non seulement de sonder un type de population de grains mais aussi une localisation dans le disque.

- l'émission continuum dans le proche et moyen IR permet de sonder les grains chauds dans les régions internes du disque,
- les longueurs d'onde (sub-)millimétriques sondent les gros grains à l'équilibre thermique dans les régions froides du plan médian ou externes,
- la lumière diffusée dans le visible et le proche-IR permet de sonder les grains microniques présents à la surface des disques,
- à cela, il faut ajouter l'émission dans les bandes IR, due au chauffage stochastique des plus petits grains à la surface des disques (Sect. 1.6.5).

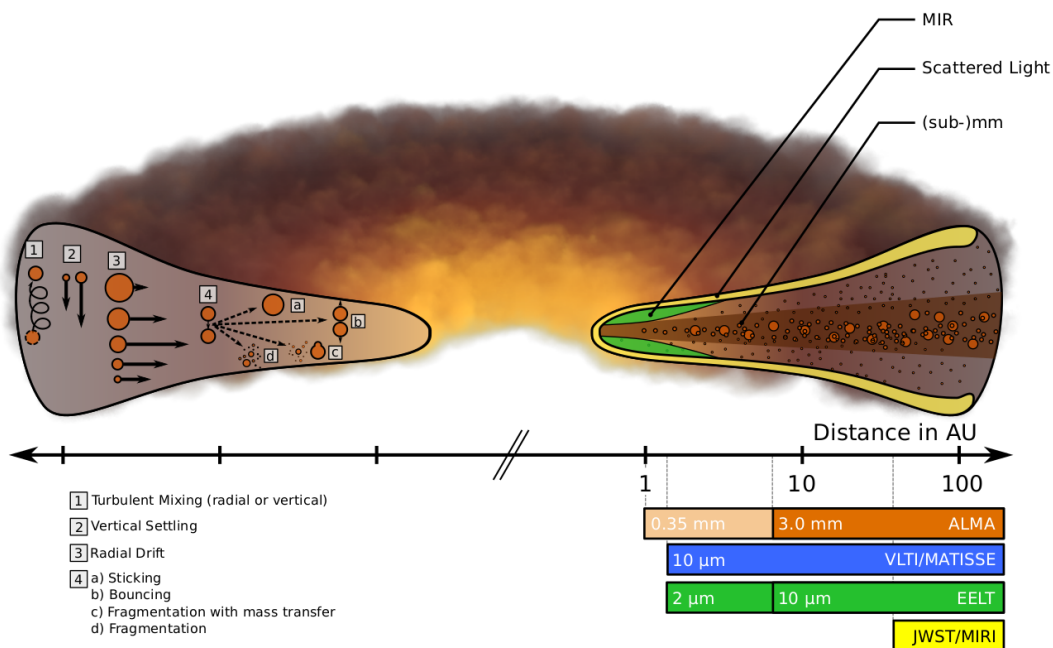


FIGURE 1.41 – Représentation de la structure d'un disque protoplanétaire. A gauche : Les différents mécanismes de transport sont représentés : turbulence (1), sédimentation (2), freinage radial (3) ; ainsi que les interactions grain-grain (4) conduisant à leur collage (a), leur rebond avec échange ou non de matière (b), et la fragmentation avec (c) ou non (d) transfert de masse. La longueur des flèches représentent la vitesse des grains. A droite : les différentes parties accessibles du disque selon la longueur d'onde sont représentées. (Source : TESTI et al. 2014; Fig. 1))

En pratique, la modélisation des disques et de son émission est à la croisée de différents domaines de recherche (HAWORTH et al. 2016) : la dynamique du gaz et de la poussière, le transfert radiatif, la chimie et les champs magnétiques (MHD<sup>22</sup>). Chacun de ces domaines est déjà l'objet de recherches intensives et un modèle de disque cohérent nécessite des interactions entre ces domaines.

22. MagnetoHydroDynamics

On note que le modèle POLARIS<sup>23</sup> (REISSL et al. 2016, BRAUER et al. 2017, BRAUER et al.) sera utilisé dans cette thèse (Chap. 4). Il considère un disque à l'équilibre hydrostatique avec une distribution de matière similaire à SHAKURA et SUNYAEV (1973). Il s'appuie sur les propriétés optiques du modèle de poussière THEMIS (Chap. 2) et utilise le transfert radiatif pour simuler les SED des disques.

### 1.6.5 Les nano-particules dans les disques protoplanétaires

**Pourquoi étudier les nano-particules dans les disques ?** Les grains (sub-)nanométriques sont couplés au gaz et ne sédimentent pas dans le plan du disque. Il en résulte que leur distribution spatiale diffère de celles des gros grains. Ils sont présents à la surface du disque (e.g., BROOKE et al. 1993, MEEUS et al. 2001, ACKE et VAN DEN ANCKER 2004, HABART et al. 2004b, SLOAN et al. 2005, LAGAGE et al. 2006) où ils permettent de tracer le gaz chaud. Ils peuvent également être présents dans la cavité et les gaps où les grains plus gros et les cailloux (*pebbles*) sont absents (GEERS et al. 2007a, MAASKANT et al. 2013, KRAUS et al. 2013, KLARMANN et al. 2017).

Comme on l'a vu dans les sections 1.2 et 1.3, les nano-grains sont chauffés stochastiquement par les photons UV et présentent une émission spatialement plus étendue que les grains à l'équilibre thermique (e.g., VAN BOEKEL et al. 2004, HABART et al. 2006, LAGAGE et al. 2006) qui permet de caractériser la géométrie des disques. Leurs signatures, les bandes d'émission dans l'IR, sont caractéristiques de leur composition, de leur taille et de leur état d'ionisation qui évoluent avec les conditions physiques. Elles peuvent donc être utilisées pour les sonder.

Présentes à la surface du disque et très absorbantes dans l'UV, les nano-particules ont un rôle dans l'énergétique du disque et le chauffage du gaz par effet photo-électrique (MEEUS et al. 2012; 2013). Elles protègent les grains et les molécules des couches internes de la photo-transformation par les photons UV. Par ailleurs les nano-particules ont du fait de leur nombre et de leur taille un rapport surface/volume élevé et présentent ainsi une grande surface de réaction pour la formation des molécules, comme le H<sub>2</sub> (HABART et al. 2004a, CAZAUX et TIELENS 2004, BRON et al. 2014, JONES et HABART 2015). Les nano-particules jouent aussi un rôle dans l'état d'ionisation du gaz.

Si les nano-particules ne représentent qu'une portion de la masse de poussière, qui elle-même n'est qu'une petite portion de la masse totale de matière, elles jouent un rôle majeur dans la régulation et l'évolution des disques protoplanétaires. Leur étude apparaît donc indispensable pour éclairer notre compréhension des disques.

**Observations des nano-particules dans les disques.** Parmi les différentes signatures associées aux nano-particules, les AIB à 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.2  $\mu\text{m}$  ont été largement observées dans les disques protoplanétaires par ISO, Spitzer et AKARI (e.g., BROOKE et al. 1993, MEEUS et al. 2001, ACKE et VAN DEN ANCKER 2004, HABART et al. 2004b, SLOAN et al. 2005, GEERS et al. 2006; 2007b;a, KELLER et al. 2008, ACKE et al. 2010, MAASKANT et al. 2014, SEOK et LI 2017). Les caractéristiques des AIB dans les disques les distinguent des AIB observées dans le MIS diffus et les rangent dans la classe B (PEETERS et al. (2002), voir Fig. 1.10, Sect. 1.2.2.1).

Basé sur les données Spitzer, le taux de détection des AIB est  $\sim 70\%$  autour des étoiles Herbig Ae,  $\sim 50\%$  autour des étoiles Herbig Be (ACKE et al. 2010),  $\sim 10\%$  autour des étoiles T Tauri (FURLAN et al. 2006, GEERS et al. 2006) mais sont peu observées dans les disques de débris (CHEN et al. 2006). De plus, les bandes aliphatiques à 6.9 et 7.3  $\mu\text{m}$  sont observées dans  $\sim 55\%$  des Herbig (ACKE et al. 2010) et celles entre 3.4 et 3.6  $\mu\text{m}$  sont détectées autour de quelques unes (e.g. SLOAN et al. 1997, ACKE et VAN DEN ANCKER 2006, HABART et al. 2006).

Enfin, des bandes à 3.43 et 3.53  $\mu\text{m}$  associées aux nano-diamants (e.g. BLADES et WHITTET 1980, GUILLOIS et al. 1999, VAN KERCKHOVEN et al. 2002, HABART et al. 2004b, GOTO et al. 2009) sont observées autour de HD 97048 et Elias 1. Les bandes à 7.0, 8.5, 17.4 et 18.9  $\mu\text{m}$ , attribuées au fullerène C<sub>60</sub> sont observées dans un objet (ROBERTS et al. 2012).

---

23. POLARized Radiation Simulator

La figure 1.42 (rangées 1 et 3) montre les spectres proche et moyen IR de plusieurs disques protoplanétaires obtenus avec ISO/SWS (ACKE et VAN DEN ANCKER 2004). A partir des spectres ISO, Spitzer et sols, SEOK et LI (2017) ont obtenus des spectres des AIB en soustrayant le continuum sous-jacent et les autres composantes de poussière (Fig. 1.42, rangées 1 et 3).

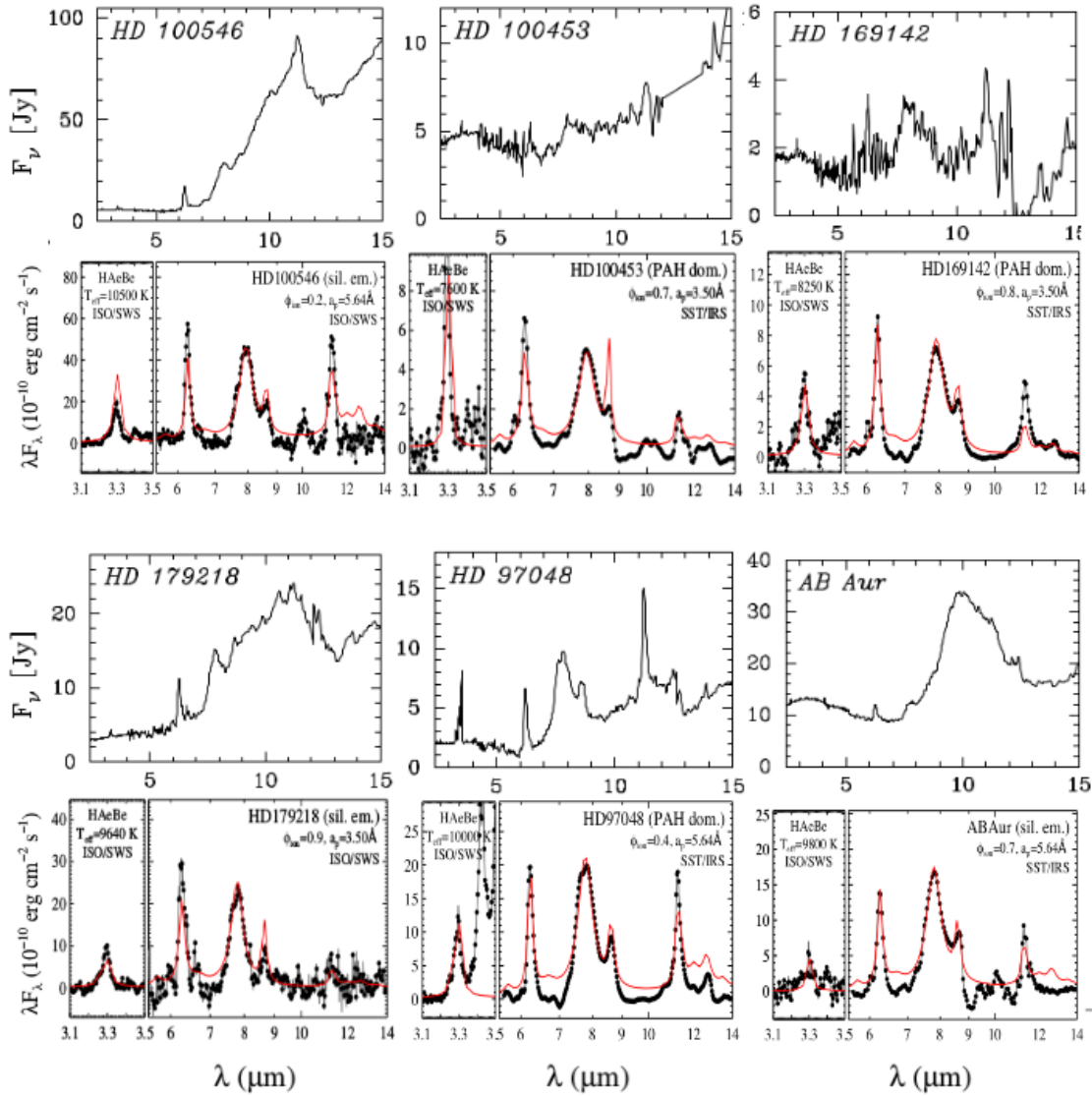


FIGURE 1.42 – Spectres d’émission IR de disques protoplanétaires. Les spectres ISO/SWS (1ère et 3ème rangées) sont tirés de ACKE et VAN DEN ANCKER (2004). Les spectres continuum soustrait mettant en évidence les signatures des AIB sont tirées de SEOK et LI (2017). Les disques de HD 100546 (en haut à gauche), de HD 100453 (en haut au milieu), de HD 169142 (en haut à droite) et de HD 179218 (en bas à gauche) sont étudiés dans le chapitre 3.

L’imagerie directe des AIB à 8.6 et 11.3  $\mu\text{m}$  montre clairement l’évasement du disque autour de l’étoile Herbig HD 100546 (LAGAGE et al. (2006), DOUCET (2006), voir aussi la figure 1.43). L’émission des AIB permet aussi de sonder la structure verticale (BERNÉ et al. 2015) comme le montre la figure 1.43 d’un disque vu de côté. La comparaison de la distribution spatiale de l’émission des AIB à celle du continuum à 18.7  $\mu\text{m}$  montre que les nano-particules peuvent être présentes dans les régions centrales contrairement aux grains microniques (GEERS et al. 2007b) (Fig. 1.43).

L’interférométrie dans le proche et moyen IR peut aussi être utilisée pour contraindre la distribution spatiale des nano-particules et la structure des disques. Notamment, celle-ci montre la présence de nano-particules dans les gaps des disques (pré-)transitionnels (KRAUS et al. 2013,

KLARMANN et al. 2017, KLUSKA et al. 2018).

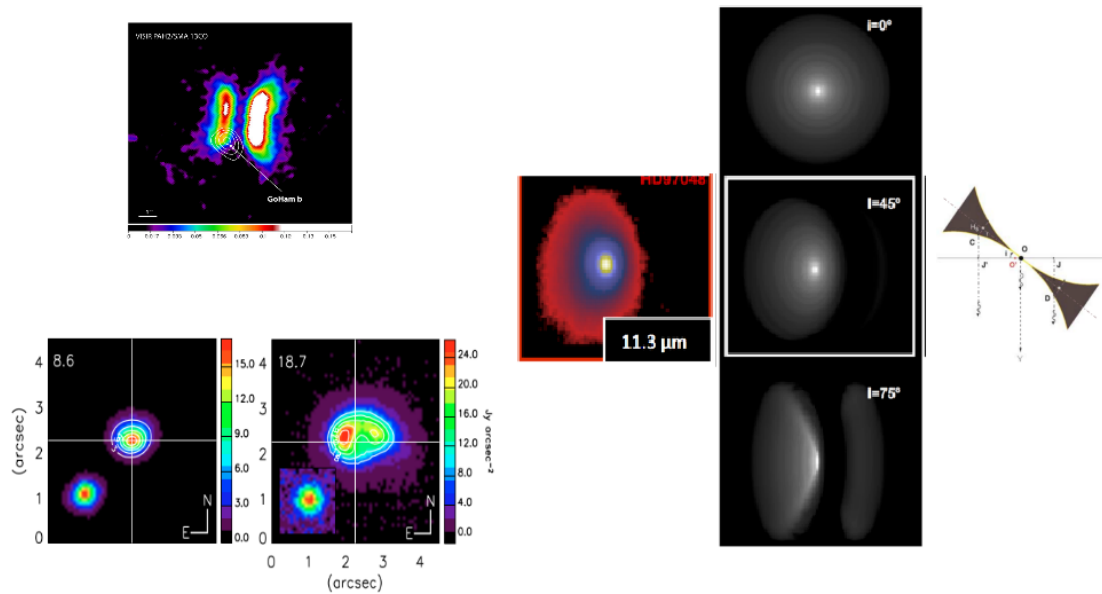


FIGURE 1.43 – Imagerie des AIB dans les disques protoplanétaires. En haut à gauche : Structure verticale du Hamburger de Gomez et candidat planétaire (BERNÉ et al. 2015). En bas à gauche : distribution spatiale de l'AIB à 11.3  $\mu\text{m}$  et du continuum à 18.7  $\mu\text{m}$  dans IRS 48 (GEERS et al. 2007b). A droite : observation de l'AIB à 11.3  $\mu\text{m}$  dans HD 97048 et comparaison avec trois inclinaisons du disque modélisé (LAGAGE et al. 2006).

**Persistance et destruction des nano-grains.** Des études se sont intéressées à la persistance des nano-particules aromatiques sous forme de PAH dans les disques. Notamment, SIEBENMORGEN et KRÜGEL (2010) trouvent que les PAH doivent être détruits rapidement dans les disques par les photons énergétiques et proposent qu'ils soient renouvelés par le brassage turbulent vertical. D'autre part, (BERNÉ et al. 2009) trouvent que l'émission des PAH, qu'ils soient petits, grands ou ionisés, augmente et que celle des VSG diminue avec la luminosité UV de l'étoile. Cela suggère que les PAH résultent de la destruction des VSG. Une étude récente de SEOK et LI (2017) sur un large échantillon de  $\sim 70$  disques protoplanétaires montre une corrélation positive entre l'augmentation de la température de l'étoile et la taille des PAH qui va dans le sens de la photo-destruction plus rapide des plus petits grains soumis à des photons plus énergétiques. Mais le fait que la taille des PAH ne soit pas corrélée à l'âge du disque suggère que les nano-particules doivent être renouvelées en permanence dans les disques possiblement par la collision des corps plus gros.

## 1.7 Résumé et motivations

La poussière interstellaire est largement observée dans les différents environnements de la galaxie et est sensible aux conditions physiques et à l'évolution de ces milieux qu'elle permet de sonder. Ses propriétés optiques, sa structure, sa taille et sa composition lui confèrent des rôles dans la physique, la chimie et la dynamique des environnements interstellaires.

Elle est responsable de la redistribution du rayonnement stellaire des domaines UV et visible vers l'IR et le millimétrique via l'absorption et l'émission thermique.

Elle participe au chauffage du gaz par effet photo-électrique.

Par leur surface, les grains de poussière fournissent les sites nécessaires à la catalyse de la formation des molécules simples comme le  $\text{H}_2$  et des macro-molécules plus complexes et influencent l'état d'ionisation.

Dans cette thèse, je m'intéresse aux nano-poussières carbonées dans les disques protoplanétaires qui sont la phase de formation des systèmes planétaires. Ils présentent des conditions physiques et des structures variées très différentes du MIS dans lesquelles la poussière évolue fortement. En particulier, les nano-particules, par leur taille et leur mécanisme de chauffage stochastique, permettent de sonder la surface des disques protoplanétaires loin de l'étoile et les régions centrales des disques où les grains plus gros sont absents.

La présence de nano-particules dans les disques soulève un certain nombre de questions.

Sont-elles présentes partout à la surface du disque ? Comment leurs propriétés (taille, composition, abondance) évoluent à travers le disque, et notamment dans les parties internes ?

Quel est leur impact sur l'évolution du gaz ? Quel est leur rôle dans la chimie du disque ?

Comment peuvent-elles être utilisées pour tracer les conditions physiques ?

Les disques sont une phase du cycle de la matière dans la galaxie. Il est attendu que les nano-particules s'accrètent sur des grains plus gros et participent à leur croissance dans les régions denses du MIS avant d'être à nouveau présentes dans les disques.

Comment les nano-grains se reforment-ils dans les disques ?

Comment survivent-ils aux conditions d'irradiation ?

Sont-ils renouvelés en continu ? Quels en sont les mécanismes ?

Ces dernières années, l'observation des disques a grandement bénéficié de l'avènement des spectromètres UV (Hubble) et IR dans l'espace (ISO, Spitzer, Herschel), et au sol avec une haute résolution angulaire et spectrale (VLT), ainsi que de l'optique adaptative et de l'interférométrie (VLT, VLTI, ALMA/NOEMA). Cependant les disques sont des sources compactes et l'observation des signatures spectroscopiques des poussières est limitée par le manque d'observations spatialement résolues dans l'IR et ne permet d'accéder qu'aux bandes les plus intenses dans les objets les plus brillants.

De plus l'observation dans l'IR est affectée par :

- un fort continuum dû à la diffusion par les grains microniques,
- la présence de bandes telluriques pour les observations depuis le sol,
- l'émission des grains chauds comme les VSG,
- le mélange de signatures associées à des porteurs différents (matière carbonée et silicates).

Ainsi, il est complexe de distinguer quelle est la contribution de chaque composante. Ce problème peut être surmonté avec les instruments de spectro-imagerie haute résolution angulaire comme NaCo et VISIR au VLT ou le futur JWST.

Dans ce travail, je fais une étude détaillée d'observations spectroscopiques à haute résolution angulaire obtenues avec NaCo au VLT et dont l'analyse permet de mieux comprendre l'évolution des nano-grains de poussière carbonée dans les disques protoplanétaires. L'interprétation de ces données nécessite un cadre cohérent qui est apporté par le modèle de poussière THEMIS présenté dans le chapitre suivant. J'y montre notamment l'impact d'un certain nombre de paramètres comme la taille, la composition des nano-grains en fonction de l'intensité et de la dureté du champ de rayonnement dans les conditions des disques.

# Chapitre 2

## Le modèle THEMIS

*« Voir un monde dans un grain de sable,  
Et un paradis dans une fleur sauvage.  
Tenir l'infini dans le creux de sa main  
Et l'éternité dans une heure. »*

---

William Blake

### Sommaire

---

<b>2.1 L'approche de THEMIS</b> . . . . .	<b>56</b>
2.1.1 Le modèle eRCN . . . . .	57
2.1.2 Le modèle DG . . . . .	59
2.1.3 Spectres et grandeurs prédits par les modèles eRCN/DG . . . . .	60
2.1.4 Le modèle optEC . . . . .	60
2.1.5 Propriétés dépendantes de la taille . . . . .	64
<b>2.2 Le modèle THEMIS</b> . . . . .	<b>68</b>
2.2.1 Populations de poussière . . . . .	68
2.2.2 Evolution de la poussière . . . . .	69
<b>2.3 Spectres d'émission en fonction des propriétés des nano-grains carbonés et des conditions d'excitation</b> . . . . .	<b>73</b>
2.3.1 Espace des paramètres . . . . .	73
2.3.1.1 Influence de la distribution et taille minimale des nano-particules . . . . .	73
2.3.1.2 Influence de l'intensité du champ de rayonnement . . . . .	73
2.3.1.3 Influence de la dureté du champ de rayonnement . . . . .	76
2.3.1.4 Influence de la composition et de la taille minimum des nano-particules entre 3 et 4 $\mu\text{m}$ . . . . .	77
2.3.2 Contribution des nano-particules . . . . .	79
<b>2.4 Résumé du modèle THEMIS/Summary of the THEMIS model</b> . . . . .	<b>83</b>
<b>2.5 Etude des effets de la taille et de la structure des gros grains</b> . . . . .	<b>84</b>

---

**Accès direct aux chapitres 1, 2, 3, 4, conclusion**

THEMIS est une approche globale pour modéliser la poussière interstellaire basée sur la mesure en laboratoire d’analogues de celle-ci, à savoir carbone hydrogéné a-C(:H) et silicates amorphes. THEMIS permet de décrire l’évolution de ses propriétés (taille, composition et structure) en réponse aux conditions physiques locales (intensité et dureté du champ de radiation, densité du gaz et dynamique). Les grains de poussière sont le résultat des interactions avec les photons, les chocs et les rayons cosmiques et qui conduisent à leur transformation, destruction, coagulation ou l’accrétion de gaz. Ainsi, l’approche de THEMIS est de proposer un scénario cohérent d’évolution de la poussière à travers les différentes phases du MIS et de le tester en le confrontant aux observations.

Une série d’articles fondateurs (JONES 2012a;b, JONES 2012a) décrit la composition, la taille et les propriétés optiques des poussières carbonées. Connaissant un développement continu, THEMIS fait d’améliorations et d’extensions régulières (JONES et al. 2013, KÖHLER et al. 2014, JONES 2015, JONES et al. 2017). Une version publique est disponible en ligne<sup>1</sup>.

Notamment, THEMIS permet de reproduire les observations du milieu interstellaire diffus (Fig. 2.9, JONES et al. 2013, YSARD et al. 2015; 2016b), propose une explication au phénomène de *cloud/core shine* (JONES et al. 2016, YSARD et al. 2016a), décrit une façon efficace de formation du H<sub>2</sub> dans les milieux denses faiblement irradiés (JONES et HABART 2015) et envisage une explication des DIB par l’inclusion d’hétéro-atomes dans les a-C(:H) (JONES 2014). Utilisant le modèle THEMIS, BOCCHIO et al. (2014) estiment que le temps de survie de la poussière soumise aux chocs produits par les supernovae est court et implique que la poussière soit reformée dans les régions denses.

## 2.1 L’approche de THEMIS

Le point de départ de la construction du modèle THEMIS est de considérer que la composition de la poussière et notamment des a-C(:H) évolue en réponse aux conditions physiques de son environnement (JONES 2012a). En particulier, l’irradiation par les photons UV et les ions, ainsi que l’augmentation de leur température conduisent à leur aromatisation par dé-hydrogénation et ré-arrangement de la structure du squelette carboné. JONES (2012a) fournit un cadre unique et cohérent qui permet de prendre en compte les transformations subies par les a-C(:H). Celui-ci s’appuie sur le formalisme mathématique des modèles eRCN<sup>2</sup> (Sect. 2.1.1) pour les composés riches en hydrogène et DG<sup>3</sup> (Sect. 2.1.2) pour les composés pauvres en hydrogène. Ce formalisme relie de manière univoque la composition, c’est-à-dire le contenu en hydrogène en carbone, aux propriétés structurales, à savoir le type de liaisons, aromatiques, oléfiniques ou aliphatiques (Sect. 1.3.1). Considérant expériences de laboratoire et observations (Sect. 2.1.3), JONES (2012a) attribue aux différentes liaisons les modes de vibration, leur position en longueur d’onde, leur largeur et leur section efficace (Table 2.2). Ces attributions permettent alors de prédire les spectres observés dans l’IR proche à moyen (Fig. 2.2).

Le modèle optEC<sup>4</sup> (JONES 2012b) étend ensuite les bases du modèle en proposant de dériver plus largement les propriétés optiques des a-C(:H), leur fonction diélectrique et indices de réfraction (Fig. 2.5), depuis l’extrême UV aux longueurs d’onde centimétriques (Sect. 2.1.4) à partir d’ajustements de mesures de laboratoire et des observations astronomiques.

Enfin, la prise en compte de la taille des particules permet de décrire les effets de la surface et de la limitation de la taille finie des grains sur les propriétés optiques (modèle optEC<sub>(s)(a)</sub> JONES 2012a) (Sect. 2.1.5).

1. <https://www.ias.u-psud.fr/themis/>

2. extended Random Covalent Network

3. Defective Graphite

4. optical property prediction tool for the Evolution of Carbonaceous (s)olids

### 2.1.1 Le modèle eRCN

Le modèle RCN est une théorie qui permet de décrire l'organisation d'un matériau amorphe à l'échelle microscopique (PHILLIPS 1979, DÖHLER et al. 1980, THORPE 1983, ANGUS et JANSEN 1988, JONES 1990). Considérant l'absence d'ordre à grande échelle, le modèle (e)RCN focalise sur l'environnement local d'un atome en terme statistique. Il se base sur la prise en compte du nombre de degrés de liberté et des contraintes imposées à celui-ci. Dans un matériau composé uniquement d'hydrogène et de carbone, si on néglige l'hybridation (Sect. 1.3.1) marginale sp1 du carbone (JONES 2012a), alors les fractions atomiques d'hydrogène  $X_H$  et de carbone hybridé sp2 et sp3,  $X_{sp2}$  et  $X_{sp3}$  sont reliées par :

$$X_H + X_{sp2} + X_{sp3} = 1 \quad (2.1)$$

Chaque atome pouvant établir un certain nombre de liaisons avec ses proches voisins (1 pour H, 3 pour C sp2, 4 pour C sp3), un réseau tri-dimensionnel est complètement contraint si le nombre de contraintes est égal au nombre de degrés de liberté (PHILLIPS 1979). Cette condition est donnée par (DÖHLER et al. 1980) :

$$aX_H + bX_{sp2} + cX_{sp3} = 3 \quad (2.2)$$

Ici,  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont des fonctions qui représentent le nombre de contraintes pour les atomes d'hydrogène, de carbone sp2 et sp3, respectivement.

Outre le nombre de liaisons que chaque atome pris individuellement peut établir, la prise en compte des faits suivants :

- un carbone sp2 est nécessairement associé à un autre,
- la formation d'îlots aromatiques,
- la présence de groupes terminaux -CH<sub>3</sub>,

conduit JONES (2012a) à dériver les expressions suivantes :

$$a = 0.5 \quad (2.3)$$

$$b = 7[0.5(1 - f)] + Zf \quad (2.4)$$

$$c = 7 + \phi X_H \quad (2.5)$$

avec :

- $f$ , la fraction de carbone sp2 dans les îlots aromatiques.

$$f = f_{max} / e^{(X_H - X_{Hc})\delta} + 1 \quad (2.6)$$

où  $f_{max}=0.6$  est le maximum de la fraction de carbones sp2 dans les îlots aromatiques,  $X_{Hc}=0.33$  est une fraction critique d'atomes d'hydrogène et  $\delta=0.07$  paramétrise la pente de la transition entre les grandes et petites valeurs de  $f$ ,

- $Z$  représente le nombre de contraintes par atome de carbone dans un îlot donné (pour plus de détails, voir l'annexe A de JONES (2012a) pour les îlots compacts ou linéaires),
- $\phi$  est la fraction des sites de carbone sp3 remplacés par un radical -CH<sub>3</sub>,  $\phi = 30(X_H - 0.5)^2$

On définit R, le rapport  $X_{sp3}/X_{sp2}$ . Son expression est donnée par :

$$R = \frac{(6X_H - 1) + Y_f(1 - X_H)}{(8 - 13X_H) + 2\phi X_H + Y_f} \quad (2.7)$$

avec  $Y_f = (7 - 2Z)$  qui est un paramètre caractéristique des carbones aromatiques.

Ces expressions permettent de calculer la proportion de chaque type de liaisons dans le matériau (Table 2.1).

Le modèle eRCN est valide pour une proportion  $0.20 \leq X_H \leq 0.62$ . Pour  $X_H > 0.62$ , les équations ne sont plus valides. Pour  $X_H < 0.20$ , le modèle DG permet de mieux décrire la structure des a-C(:H).



TABLEAU 2.1 – Désignation et formules des liaisons dans le modèle eRCN

Hybridation Atomes de carbone	Liaison	Fraction atomique	Fraction atomique Expression	Notes
<u>Atomes</u>				
H	—	$X_H$	= $X_H$	
$sp^2$ C	—	$X_{sp^2}$	= $X_{sp^2}$	
$sp^3$ C	—	$X_{sp^3}$	= $X_{sp^3}$	
<u>C-H aro.</u>				
$sp^2$	CH aro.	$X_{CH,ar}^2$	= $\eta m_{ar} f X_{sp^2}$	$\eta = X_H / (1 - X_H)$ , $[H] / [C]$ $m_{ar} = (\text{no. îlots aro.}) / (\text{no. C})$
<u>C-H oléf. et aliph. - pour <math>X_H \leq 0.5</math></u>				
$sp^2$	CH oléf.	$X_{CH}^2$	= $u \eta (1 - f) X_{sp^2}$	(a)
$sp^2$	CH <sub>2</sub> oléf.	$X_{CH_2}^2$	= 0	
$sp^3$	CH aliph.	$X_{CH}^3$	= $u \eta X_{sp^3}$	
$sp^3$	CH <sub>2</sub> aliph.	$X_{CH_2}^3$	= 0	
$sp^3$	CH <sub>3</sub> aliph.	$X_{CH_3}^3$	= 0	
<u>C-H oléf. et aliph. - pour <math>X_H &gt; 0.5</math></u>				
$sp^2$	CH oléf.	$X_{CH}^2$	= $u (2 - \eta) (1 - f) X_{sp^2}$	
$sp^2$	CH <sub>2</sub> oléf.	$X_{CH_2}^2$	= $2 u (\eta - 1) (1 - f) X_{sp^2}$	
$sp^3$	CH aliph.	$X_{CH}^3$	= $u (2 - \eta) X_{sp^3} / (1 + \phi)$	$\phi = 30(X_H - 0.5)^2$
$sp^3$	CH <sub>2</sub> aliph.	$X_{CH_2}^3$	= $2 u (\eta - 1) X_{sp^3} / (1 + \phi)$	
$sp^3$	CH <sub>3</sub> aliph.	$X_{CH_3}^3$	= $3 u \phi X_{sp^3} / (1 + \phi)$	$(1 + \phi)$ re-normalisé pour CH <sub>3</sub>
<u>C-C<sup>(b)</sup></u>				
$sp^2$	C=C aro.	$X_{C=C}$	= $\frac{3}{2} f X_{sp^2} / X_{bond}$	$f = 0.5e^x / (1 + e^x)$
$sp^2$	C=C oléf.	$X_{C=C}$	= $\frac{1}{2} (1 - f) X_{sp^2} / X_{bond}$	$x = (X_H - X_0) / \delta$ , $X_0 = 0.35$ , $\delta = 0.085$
$sp^3$	C-C aliph.	$X_{C-C}$	= $X_{sp^3} / X_{bond}$	$X_{bond} = X_H + (\frac{1}{2} + f) X_{sp^2} + X_{sp^3}$

Notes – (a) Le paramètre  $u$  corrige le fait que seulement les atomes de carbone périphériques des îlots aromatiques sont hydrogénés, relâchant ainsi plus d'atomes d'hydrogène pour former des liaisons non-aromatiques :  $u = \{1 + ((1 - m_{ar}) / [(1 - X_H) / (f X_{sp^2}) - 1])\}$ . (b) Le facteur de normalisation  $X_{bond}$  est nécessaire parce que le nombre de liaisons dans le modèle eRCN est différent du nombre d'atomes, comme indiqué par le facteur devant les expressions de la fraction de liaisons  $sp^2$  C-C.

### 2.1.2 Le modèle DG

Le modèle DG s'appuie sur le formalisme de TAMOR et WU (1990) qui considère l'introduction de lacunes de carbone dans une couche de graphite (ou graphène). Chaque lacune de carbone laisse sur les trois carbones voisins des liaisons pendantes. En considérant que l'hybridation de ces atomes évolue alors de  $sp^2$  vers  $sp^3$ , ce sont alors six nouvelles liaisons qui peuvent être formées. Ainsi, si on suppose que le réseau doit être passivé (c.à.d, pas de liaisons pendantes), la disparition d'un carbone est compensée par l'ajout de six atomes d'hydrogène. De plus, la formation d'une lacune conduit à la disparition de trois cycles aromatiques et l'hydrogénation des carbones adjacents à la perte de l'aromaticité des cycles voisins (Fig. 2.1). La multiplication des lacunes dans le réseau est décrite par la théorie de la percolation (STAUFFER et AHARONY 1994) et conduit à la création d'îlots aromatiques.

Si on envisage le modèle DG comme l'empilement de couches de graphite, alors l'apparition de lacunes peut conduire à la formation de liaisons entre carbones de deux couches successives. En supposant que ces liaisons croisées ne peuvent se faire qu'entre des carbones  $sp^3$ , pour des raisons de contraintes stériques, alors une lacune permet la formation d'un pont aliphatique avec deux couches voisines au maximum.

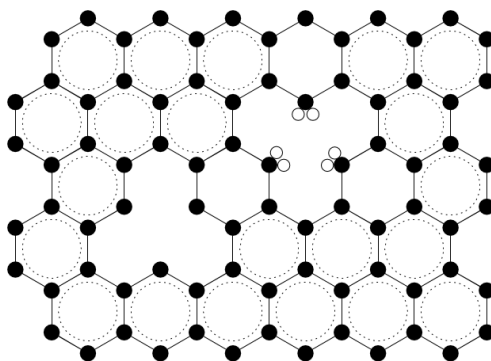


FIGURE 2.1 – Réseau de modèle DG. Les cercles remplis (ouverts) représentent des atomes de carbone (hydrogène) dans un réseau aromatique. Les cercles en pointillés indiquent des cycles au caractère aromatique. (source : JONES 2012a; Fig. 12)

Ainsi, dans le cadre du modèle DG, quatre types de liaisons sont à considérer :  $sp^2 >C=C<$ ,  $sp^3 -CH_2-CH_2-$ ,  $-CH$  et  $-CH_2$ . JONES (2012a) développe les expressions qui permettent de calculer la proportion de chaque type de liaisons,  $X_{C=C,DG}$ ,  $X_{C-C,DG}$ ,  $X_{CH,DG}$  et  $X_{CH_2,DG}$ , respectivement. Soit  $X_{bond} = \frac{3}{2}X_{sp^2} + 2X_{sp^3} + X_H$ , le nombre total de liaisons. On a alors :

$$X_{C=C,DG} = \frac{3X_{sp^2}}{2X_{bond}} \quad (2.8)$$

$$X_{C-C,DG} = \frac{2X_{sp^3}}{X_{bond}} \quad (2.9)$$

$$X_{CH,DG} = \frac{LX_{sp^3}}{X_{bond}} \quad (2.10)$$

$$X_{CH_2,DG} = \frac{(3-L)X_{sp^3}}{X_{bond}} \quad (2.11)$$

avec L, le nombre de liaisons croisées avec des couches graphitiques voisines.

Si le domaine de validité du modèle DG s'étend pour des abondances relatives d'hydrogène comprises entre  $0 \leq X_H \leq 0.35$ , les expériences de laboratoire (ADEL et al. 1989, GODARD et al. 2011) indiquent un minimum  $X_H \approx 5\%$  dans les a-C(:H).

### 2.1.3 Spectres et grandeurs prédits par les modèles eRCN/DG

Le formalisme des modèles eRCN/DG permet, pour un taux d'hydrogène donné, de déterminer le type de liaisons et leur abondance relative pour les a-C(:H). En se basant sur des expériences de laboratoire (DARTOIS et al. 2004a;b, JOBLIN et al. 1994, RISTEIN 1998, WEXLER 1967) et certaines observations (VERSTRAETE et al. 2001, ROBERTSON 1986), il est alors possible de prédire les spectres de ces matériaux en associant à chaque type de liaisons leurs modes de vibration. Ces modes de vibration sont caractérisés par une certaine énergie exprimée en fréquence, en nombre ou longueur d'onde et une section efficace. La table 2.2 relie modes de vibration et types de liaisons.

La profondeur optique  $\tau(\nu)$  à une fréquence donnée pour une densité de colonne  $N_C$  pour le matériau considéré est donnée par :

$$\frac{\tau(\nu)}{N_C} = \sum_i \frac{\sigma_{C,i} X_i^h g_i(\nu)}{\int_0^\infty g_i(\nu) d\nu} \quad (2.12)$$

avec  $\sigma_{C,i}$ , la section efficace intégrée par atome de carbone pour la bande  $i$ ;  $X_i^h$ , l'abondance relative du groupe  $i$ ; et  $h$ , l'indice de l'état d'hybridation.  $g(\nu)$  est le profil de la bande. On supposera un profil de Drude pour toutes les bandes (JONES 2012a) :

$$g(\nu) = \frac{(\gamma\nu)^2}{(\nu - \nu_0)^2 + (\gamma\nu)^2} \quad (2.13)$$

avec  $\nu_0$ , la fréquence centrale de la bande et  $\gamma$ , sa largeur. La figure 2.2 montre les spectres<sup>5</sup> prédits dans la région 2.5-13.5  $\mu\text{m}$ .

TAMOR et WU (1990) montrent que pour les a-C(:H), l'énergie du gap  $E_g$  (Sect. 1.3.4) est reliée à l'abondance d'hydrogène  $X_H$  par la relation :

$$E_g(\text{eV}) \approx 4.3X_H \quad (2.14)$$

On peut dès lors utiliser indifféremment l'énergie de gap ou l'abondance d'hydrogène pour caractériser le matériau. Il faut bien garder à l'esprit que  $E_g$  est liée à la délocalisation des électrons dans les bandes associées aux îlots aromatiques (Sect. 1.3). Ainsi,  $E_g$  est directement dépendante de la taille de ces îlots. ROBERTSON et O'REILLY (1987) dérivent une relation entre le gap et le nombre de cycles dans les domaines aromatiques,  $N_R$  :

$$N_R \approx \left( \frac{5.8}{E_g[\text{eV}]} \right)^2 \quad (2.15)$$

Ensuite, JONES (2012a) relie le nombre de ces cycles à la taille de l'îlot aromatique le plus compact,  $a_r$  :

$$a_r = 0.09[2N_R + \sqrt{N_R} + 0.5]^{0.5} \quad (2.16)$$

Ces grandeurs seront utiles pour prendre en compte l'effet de la taille des grains (Sect. 2.1.5).

### 2.1.4 Le modèle optEC

JONES (2012a) formalise et établit le lien entre composition, types de liaisons et modes de vibration, c'est-à-dire les propriétés spectroscopiques dans l'IR, posant ainsi les bases du modèle THEMIS. JONES (2012b) étend les bases du modèle en proposant de dériver plus largement les propriétés optiques des a-C(:H), ainsi que leur fonction diélectrique et indices de réfraction, depuis l'extrême UV aux longueurs d'onde centimétriques.

5. Le coefficient d'absorption  $\alpha$  et  $\tau$  sont reliés par l'intégrale sur la ligne de visée.

TABLEAU 2.2 – Les modes C-H et C-C considérés pour les modèles eRCN/DG pour les solides a-C(:H) : centre de bande ( $\nu_0$ ), largeur ( $\delta$ ) et section efficace intégrée ( $\sigma$ ). (Source : adapté de JONES et al. 2013)

no.	$\nu_0$ [ $\text{cm}^{-1}$ ( $\mu\text{m}$ ) ]	$\delta$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	$\sigma$ [ $\times 10^{-18}$ $\text{cm}^2$ ]	Bande assignation	eRCN désignation
<u>modes C-H d'élongation</u>					
1	3078 ( 3.25 )	22.5	1.40	$sp^2$ CH <sub>2</sub> oléfinique, asy.	$X_{\text{CH}_2}^2$
2	3050 ( 3.28 )	53.1	1.50	$sp^2$ CH aromatique	$X_{\text{CH}_{\text{ar}}}^2$
3	3010 ( 3.32 )	47.1	2.50	$sp^2$ CH oléfinique	$X_{\text{CH}}^2$
4	2985 ( 3.35 )	17.7	1.15	$sp^2$ CH <sub>2</sub> oléfinique, sym.	$X_{\text{CH}_2}^2$
5	2960 ( 3.38 )	29.3	4.00	$sp^3$ CH <sub>3</sub> aliphatique, asy.	$\phi X_{\text{CH}_3}^3$
6	2925 ( 3.42 )	28.9	3.30	$sp^3$ CH <sub>2</sub> aliphatique, asy.	$X_{\text{CH}_2}^3$
7	2900 ( 3.45 )	30.0	0.50	$sp^3$ CH <sub>2</sub> aliphatique	$X_{\text{CH}}^3$
8	2882 ( 3.47 )	30.2	1.00	$sp^3$ CH tertiaire aliphatique	$X_{\text{CH}_2}^3$
9	2871 ( 3.48 )	27.8	1.45	$sp^3$ CH <sub>3</sub> aliphatique, sym.	$\phi X_{\text{CH}_3}^3$
10	2850 ( 3.51 )	41.8	2.20	$sp^3$ CH <sub>2</sub> aliphatique, sym.	$X_{\text{CH}_2}^3$
<u>modes C-H de déformation</u>					
11	1470 ( 6.80 )	30.0	0.30	$sp^3$ CH <sub>3</sub> aliphatique, asy.	$\phi X_{\text{CH}_3}^3$
12	1450 ( 6.90 )	3.0	1.20	$sp^3$ CH <sub>2</sub> aliphatique	$X_{\text{CH}_2}^3$
13	1430 ( 6.99 )	120.0	0.20	$sp^2$ CH aromatique	$X_{\text{CH}_{\text{ar}}}^2$
14	1410 ( 7.09 )	30.0	1.00	$sp^2$ CH <sub>2</sub> oléfinique	$X_{\text{CH}_2}^2$
15	1400 ( 7.14 )	30.0	0.10	$sp^3$ (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> aliphatique, sym.	$X_{(\text{CH}_3)_3}^3$
16	1370 ( 7.30 )	30.0	0.30	$sp^3$ CH <sub>3</sub> aliphatique, sym.	$\phi X_{\text{CH}_3}^3$
<u>modes C-C</u>					
17	1600 ( 6.25 )	160.0	0.29	$sp^2$ C=C aromatique	$X_{\text{C}=\text{C}}$
18	1500 ( 6.67 )	4.0	0.15	$sp^2$ C=C aromatique	$X_{\text{C}=\text{C}}$
19	1640 ( 6.10 )	40.0	0.10	$sp^2$ C=C oléfinique	$X_{\text{C}=\text{C}}$
<u>modes C-H supplémentaires et estimés</u>					
20	3020 ( 3.31 )	50.0	0.50	$sp^2$ CH oléfinique	$X_{\text{CH}}^2$
21	890 ( 11.24 )	8.0	0.50	$sp^2$ CH aromatique	$X_{\text{CH}_{\text{ar}}}^2$
22	880 ( 11.36 )	40.0	0.50	$sp^2$ CH aromatique	$X_{\text{CH}_{\text{ar}}}^2$
23	790 ( 12.66 )	50.0	0.50	$sp^2$ CH aromatique	$X_{\text{CH}_{\text{ar}}}^2$
<u>modes C-C supplémentaires et estimés</u>					
24	1328 ( 7.53 )	600.0	0.10	$sp^2$ C-C aromatique	$X_{\text{C}=\text{C}}^2$
25	1300 ( 7.69 )	720.0	0.05	$sp^2$ C-C aromatique	$X_{\text{C}=\text{C}}^2$
26	1274 ( 7.85 )	600.0	0.05	$sp^2$ C-C aromatique	$X_{\text{C}=\text{C}}^2$
27	1163 ( 8.60 )	270.0	0.05	$sp^2$ C-C aromatique	$X_{\text{C}=\text{C}}^2$

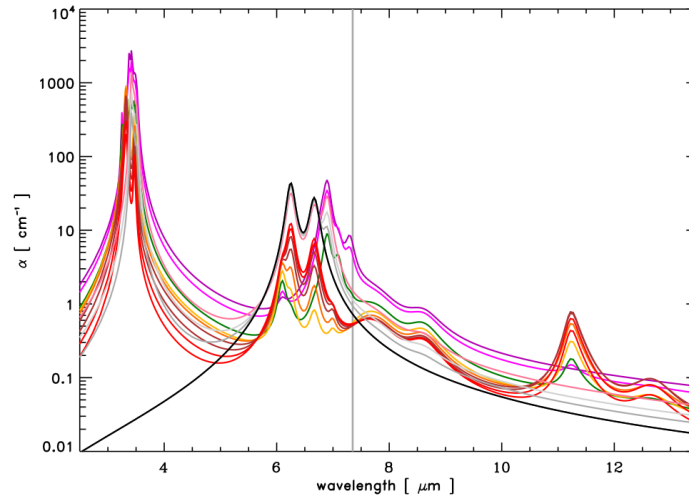


FIGURE 2.2 – Les spectres eRCN et DG prédits, présentés sous forme de coefficient d'absorption,  $\alpha$ , dans la région 2.5-13.5  $\mu\text{m}$  en fonction de  $E_g$ . Les spectres sont tracés pour différentes valeurs d'énergies de gap  $E_g$  allant de 0 eV (gris) à 2.5 eV (violet) par pas de 0.25 eV. Les spectres pour les valeurs -0.1 eV (noir), 0.1 eV (gris clair) et 2.67 eV (violet) sont également tracés. Les positions centrales des bandes à droite de la ligne grise verticale ( $\lambda > 7.3 \mu\text{m}$ ) ne sont pas encore bien déterminées par les mesures en laboratoire. (Source : JONES 2012a; Fig. 13)

L'approche du modèle optEC consiste à proposer un outil pour prédire les propriétés optiques des a-C(:H) sur une large gamme :

- de composition : des a-C, pauvres en hydrogène ( $E_g \sim 0\text{eV}$ ) aux a-C:H très riches en hydrogène ( $E_g \sim 3\text{eV}$ ),
- d'énergies (longueurs d'onde) :  $2.5 \times 10^{-6}$ -56 eV (0.022  $\mu\text{m}$ -50 cm).

Le but est de fournir un jeu de données cohérentes pour les propriétés des poussières dans le contexte astrophysique.

Les travaux de SMITH (1984), ROULEAU et MARTIN (1991), MENNELLA et al. (1995), ZUBKO et al. (1996) et la base de données JENA (2008) fournissent une large collection de données de propriétés optiques basées sur les mesures en absorption de matériaux carbonés de différentes tailles, exposés à des températures variées dans plusieurs gammes de longueurs d'onde. A partir de ces données, la relation de Tauc (TAUC et al. 1966), reliant l'absorption  $\alpha$  à l'énergie  $E$  via le graphique  $\sqrt{\alpha E} = f(E)$ , permet d'estimer le gap optique de Tauc des a-C(:H), assimilé ici à l'énergie de gap  $E_g$  (Sect. 1.3.4)S. Cette relation montre que les propriétés optiques dépendent uniquement du gap du matériau, ou de manière complètement équivalente (pour le matériau "bulk"), de sa fraction d'hydrogène  $X_H$  (Fig. 2.3)

Le modèle optEC s'appuie d'abord sur la revue détaillée de ROBERTSON (1986). L'étude des spectres des a-C(:H) (des a-C aux a-C:H) montre la présence claire de deux pics à  $\sim 4 \text{ eV}$  ( $\sim 310 \text{ nm}$ ) et  $\sim 13 \text{ eV}$  ( $\sim 95 \text{ nm}$ ) et attribués aux transitions  $\pi - \pi^*$  et  $\sigma - \sigma^*$ , respectivement. Un troisième pic à  $\sim 6.5 \text{ eV}$  ( $\sim 190 \text{ nm}$ ) est attribué aux îlots aromatiques  $C_6$ . Le profil de ces bandes  $g_i(E)$  s'appuie sur celles du graphite et du diamant qui sont ajustées expérimentalement par :

$$g_i(E) = \exp \left\{ - \left[ \ln \left( \frac{E}{E_{0,i}} \right) \right]^2 \frac{1}{2\sigma_i^2} \right\} \quad (2.17)$$

avec  $E_{0,i}$ , l'énergie au centre de bande et en supposant  $\sigma_i = 0.3 \text{ eV}$ , la largeur de chaque bande.

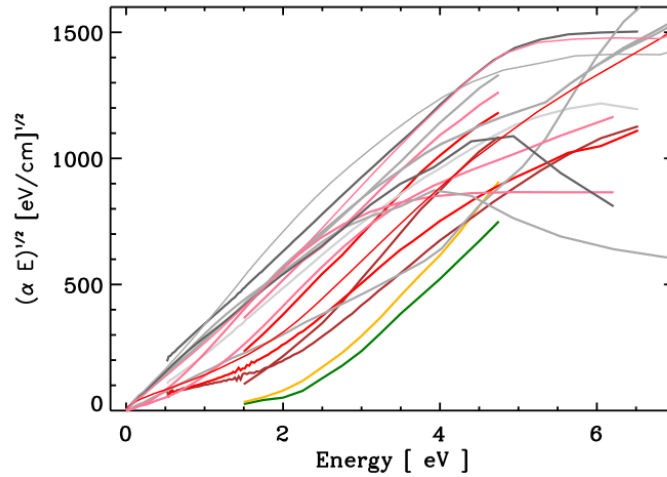


FIGURE 2.3 – Graphique de Tauc. Les données sont celles utilisées dans JONES (2012b). L'énergie de gap  $E_g$  décroît de bas (vert) en haut (gris clair). (Source : JONES 2012b; Fig. 2)

Pour les énergies supérieures à  $E_{EUV}=16$  eV, le profil de la bande  $\sigma - \sigma^*$  est modifié pour tenir compte de la section efficace dans l'extrême UV (EUV) et les rayons X :

$$g'_i(E) = g_i(E) \times \left\{ \frac{E}{E_{EUV}} \right\}^{-2.5} \quad \text{pour } E > E_{EUV} \quad (2.18)$$

Cette asymétrie dans la bande est identique au formalisme 2-TL (2 oscillateurs Tauc-Lorentz) de KASSAVETIS et al. (2007).

Aux basses énergies, où  $E < E'_l$  (avec  $E'_l = 4.5 - (E_g/1.2)$ ), pour tenir compte de la tendance linéaire des propriétés optiques (JONES 2012b; Fig. 1), il faut alors considérer que la partie complexe de l'indice de réfraction pour un matériau donné  $k(E, E_g) \propto E^\gamma$  avec  $\gamma = 2(E_g - 0.07)$ .

Il est dès lors possible de calculer la partie imaginaire  $k(E, E_g)$  de l'indice de réfraction complexe pour toute la gamme de composition des a-C:H :

$$k(E, E_g) = \sum_{i=1}^3 \{ f(E_{g+}) S_i(E_{g+}) + f(E_{g-}) S_i(E_{g-}) \} g_i(E) \quad (2.19)$$

avec  $g_i(E)$  le profil de bande défini par l'Eq. 2.17,  $f(E_{g+})$  et  $f(E_{g-})$  sont les fractions des a-C:H (gap élevé) et a-C (petit gap), respectivement et sont données par :

$$f(E_{g+}) = \frac{(E_g - E_{g-})}{(E_{g+} - E_{g-})}, f(E_{g-}) = 1 - f(E_{g+}) \quad (2.20)$$

On a  $E_{g-} \approx -0.15$  eV et  $E_{g+} \approx 2.6$  eV.  $S_i$  est un facteur de normalisation de la force de la bande  $i$  normalisée à la bande  $\sigma - \sigma^*$ .  $i=1,2,3$  pour les bandes  $C_6$ ,  $\pi - \pi^*$ ,  $\sigma - \sigma^*$ . Pour  $E_{g+}$ , on a  $S_{1,2,3} = 1.65, 0.60, 1.00$  et pour  $E_{g-}$ , on a  $S_{1,2,3} = 0.00, 0.30, 1.00$ . Cette modélisation est en bon accord avec les indices dérivés des expériences de laboratoire. La Fig. 2.4 montre le résultat de cette modélisation.

L'étape suivante est la prise en compte des bandes IR déterminées dans les sections précédentes dans le cadre des modèles eRCN/DG. La contribution  $k_p$  à l'indice  $k$  est donnée par :

$$k_p = \sigma_C N_C \lambda / (4\pi) = hc \sigma_C N_C / (4\pi E) \quad (2.21)$$

avec  $N_C$  le nombre de carbone par unité de volume dans le matériau considéré tel que :

$$N_C(E_g) = \frac{\rho(X_H)}{m_c} \left\{ 1 + \frac{X_H}{12(1 - X_H)} \right\}^{-1} \quad (2.22)$$

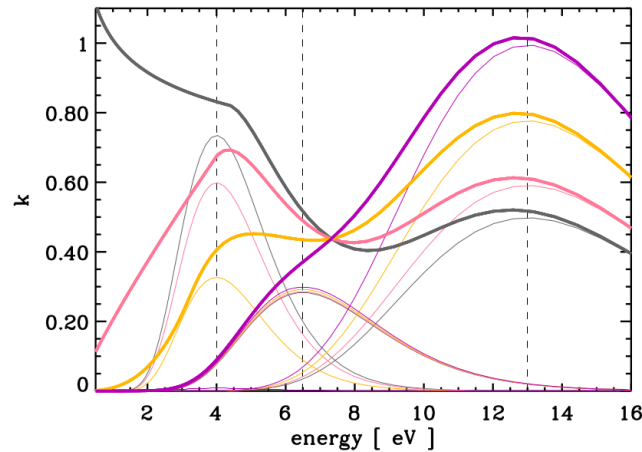


FIGURE 2.4 – Partie imaginaire de l'indice optique,  $k$  pour des a-C(:H) avec  $E_g = 0, 0.5, 1.5$  et  $2.67$  eV (gris foncé, rose, jaune-et violettes, respectivement). Les lignes pointillées verticales marquent le centre des bandes  $\pi - \pi^*$ ,  $C_6$  et  $\sigma - \sigma^*$  à  $4.0, 6.5$  et  $13$  eV, respectivement. (Source : JONES 2012b; Fig. 7)

avec  $\rho(X_H)[g.cm^{-3}] \approx 1.3 + 0.4 \exp[-(E_g + 0.2)]$ , la masse volumique du matériau,  $m_C$  est la masse de l'atome de carbone.

Pour obtenir l'indice  $k$  dans l'IR, on ajoute alors les différentes contributions :

$$k_{IR}(E, E_g) = k(E, E_g) + N_C(E_g) \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{hc\sigma_{C,j}(E)}{4\pi E} \right\} \quad (2.23)$$

L'indice de réfraction complexe s'exprime comme  $m = n + ik$ . L'outil KKTOOL<sup>6</sup>, basé sur les relations de Kramers-Kronig, permet alors de calculer la partie réelle  $n$ . La Fig. 2.5 montre les parties imaginaires  $k$  et réelles  $n$  pour toute la gamme de composition des a-C(:H).

On remarquera que la conductivité électrique des matériaux, qui dépend à la fois de la percolation du réseau aromatique et des propriétés semi-conductrices des a-C(:H) peut avoir un impact sur les propriétés optiques. De fait, JONES (2012a) explique que les a-C(:H) présentent des îlots aromatiques entourés de matériaux aliphatiques (isolants) ou oléfiniques (semi-conducteurs). Ainsi, il existe une barrière d'activation de la conductivité qui peut notamment produire des effets à grande longueur d'onde. En pratique, la conductivité des a-C(:H) est faible et cet effet est limité. JONES (2012a) conclue que l'impact de la conductivité sur les propriétés optiques peut être négligé à grande longueur d'onde dans le contexte du milieu interstellaire.

### 2.1.5 Propriétés dépendantes de la taille

Précédemment, on s'est intéressé à définir un cadre permettant de relier la composition des a-C(:H) aux types de liaisons (JONES 2012a) et à leurs propriétés optiques (JONES 2012b) sans tenir compte de la taille. Celle-ci a pourtant un rôle considérable dans les propriétés des a-C(:H), surtout pour des particules de rayon sub-nanométrique. JONES (2012a) permet d'inclure cet aspect qui se manifeste par les effets de surface et la limitation de la taille des îlots aromatiques.

Jusque là, les propriétés dérivées étaient celles d'un solide, c'est-à-dire un matériau dont le rapport volume/surface est important, et dépendaient donc principalement de la structure au cœur du matériau. Pour les particules sub-nanométriques, ce rapport s'inverse et on ne peut plus négliger les effets de surface à laquelle se trouvent des carbones présentant des liaisons pendantes. Si on considère que la passivation de la surface se fait uniquement par hydrogénation et non par réorganisation de celle-ci (qui modifierait les propriétés du matériau), il y a alors un excès d'atomes d'hydrogène. Ceux-ci ne modifient pas la structure globale, ni le gap du matériau mais

6. <https://hera.ph1.uni-koeln.de/~ossk/Jena/pubcodes.html>

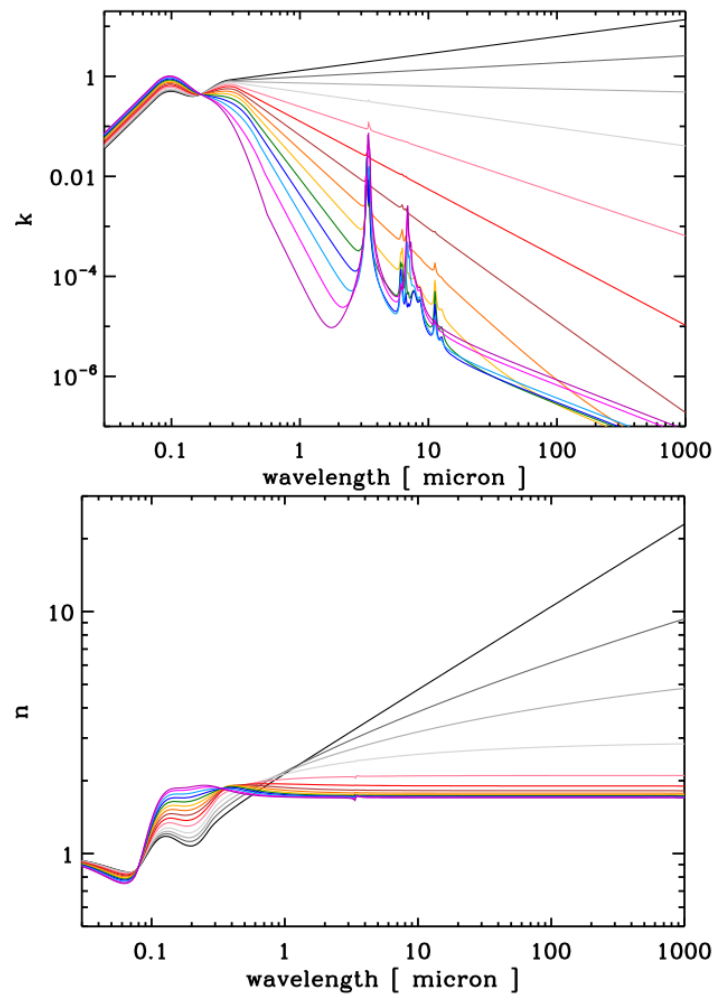


FIGURE 2.5 – Parties imaginaire  $k$  (haut) et réelle  $n$  de l'indice optique complexe pour des énergies de gap  $E_g$  allant de 0.1 eV (noir) à 2.67 eV (mauve). (Source : JONES 2012b; Fig. 9)



affectent le spectre par l'augmentation du nombre de groupements  $-CH_n$  ( $n \leq 3$ ) (voir annexe A, JONES 2012a; pour plus de détails). La considération d'atomes d'hydrogène supplémentaires à la surface est appuyée par les expériences de laboratoire qui montrent que le taux minimal d'hydrogène dans les a-C(:H) est de  $\sim 5\%$  (ADEL et al. 1989, GODARD et al. 2011).

D'autre part, la taille des particules affecte le gap du matériau car celle-ci impose une limite supérieure à la taille des îlots aromatiques (Eq. 2.14, 2.15, 2.16). La forme et l'amplitude des bandes  $\pi-\pi^*$  et  $C_6$  dépendant de ces îlots aromatiques, limiter leur taille revient à limiter leur absorption, en particulier à grande longueur d'onde (voir annexe B, JONES 2012a; pour plus de détails). On notera en particulier que les changements de la partie imaginaire de l'indice de réfraction  $k$  induits par la diminution de la taille permettent d'expliquer la bosse à  $\sim 217$  nm. Les figures 2.6 et 2.7 montrent l'effet de la taille sur l'énergie de gap et l'efficacité de l'absorption. On remarque que pour les grains aliphatiques avec  $a=100$  nm la diffusion domine dans l'UV-visible-proche IR. A plus grande longueur d'onde, c'est l'absorption qui domine. Pour les grains aromatiques, absorption et diffusion contribuent à l'extinction dans l'UV-visible-proche IR. A grande longueur d'onde, du fait de leur conductivité, l'absorption est très grande par rapport à celle des grains aliphatiques. Les grains de 0.5 nm ne diffusent pas et que ce soit pour les grains aromatiques ou aliphatiques, leur conductivité étant limitée, l'absorption se fait dans le l'UV-visible et dans les bandes IR.

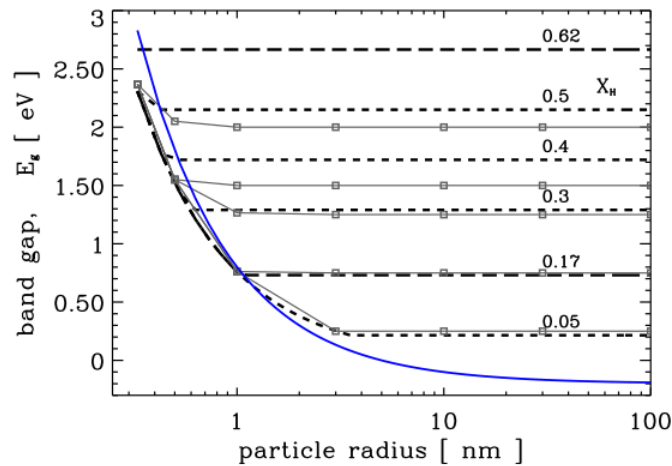


FIGURE 2.6 – Énergie de gap selon la taille du grain de poussière pour différentes proportions d'hydrogène  $X_H$  (Source : JONES 2012a; Fig. 2)

La prise en compte de la taille des particules permet de décrire d'une manière continue la transition entre solide et molécule. Par exemple, pour un matériau avec une proportion d'hydrogène  $X_H=0.5$ , le nombre d'atomes de carbone par particule est de  $\approx 10^8$  pour une particule de 100 nm,  $\approx 10^7$  pour 30 nm,  $\approx 10^5$  pour 10 nm,  $\approx 10^4$  pour 3 nm,  $\approx 300$  pour 1 nm et  $\approx 60$  pour 0.5 nm (JONES 2012a).

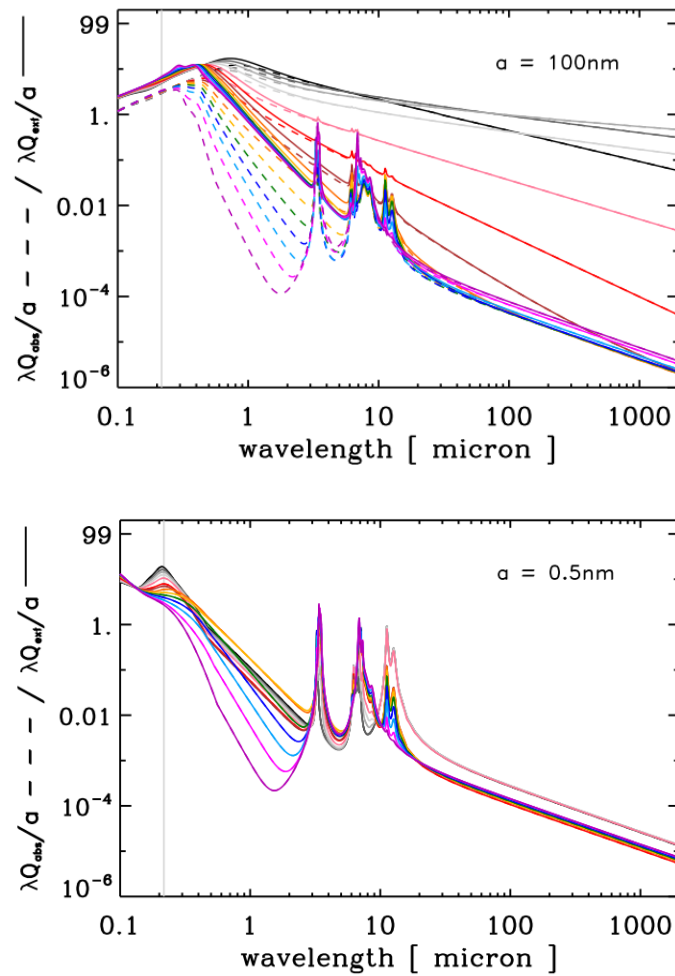


FIGURE 2.7 –  $\lambda Q_{abs}/a$  et  $\lambda Q_{ext}/a$  en fonction de la longueur d'onde pour un grain de rayon  $a=100\text{ nm}$  (haut) et  $a=0.5\text{ nm}$  (bas) (Source : JONES 2012b; Fig. 10,13)

## 2.2 Le modèle THEMIS

En tant que modèle de poussière interstellaire, THEMIS se base sur l'utilisation des propriétés optiques issues de mesures de laboratoire pour dériver les sections efficaces d'extinction, d'absorption, de diffusion et de polarisation. Le modèle eRCN/DG-optEC, décrit dans les sections précédentes (et en détail dans JONES 2012a;b, JONES 2012a), fournit une méthode pour déterminer ces propriétés dans le cas d'a-C(:H) qui présentent une large gamme de composition, allant des structures diamants sp<sup>3</sup> aux graphites sp<sup>2</sup> en passant par les polymères organiques.

L'outil DustEM<sup>7</sup> (COMPIÈGNE et al. 2011) est utilisé pour calculer l'émission et l'extinction des grains étant données leur distribution de taille et leurs propriétés optiques et thermiques. Le température des grains est calculé selon le formalisme de (DESERT et al. 1986). On notera que DustEM se place dans le cas optiquement fin.

### 2.2.1 Populations de poussière

La composition des silicates utilisés par THEMIS est décrite dans KÖHLER et al. (2014). Celle-ci consiste en des silicates amorphes dont 10% du volume est occupé par des nano-inclusions de fer Fe et sulfure de fer FeS. Les constantes optiques des inclusions Fe/FeS, dans les proportions 70%/30%, sont tirées des travaux de ORDAL et al. (1985; 1988) et POLLACK et al. (1994), respectivement. La théorie des milieux effectifs de Maxwell-Garnett permet dans un premier temps de calculer les propriétés optiques des inclusions métalliques et dans un second temps, celles des silicates contenant ces inclusions. Par ailleurs, deux types de silicates amorphes ayant soit une composition similaire à celles de l'enstatite MgSiO<sub>3</sub>, soit de la forsterite Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> (SCOTT et DULEY 1996). Chaque type représente 50% de la masse totale des silicates.

On considère que :

- les a-C(:H) ayant fondamentalement une continuité de composition et de taille, leur exposition au champ de radiation interstellaire moyen pendant 10<sup>6</sup> années conduit à une aromatisation des particules (sub-)nanométriques jusqu'à une profondeur de 20 nm (JONES 2012b, JONES et al. 2014). Les grains de taille supérieure ont une structure cœur aliphatique/manteau aromatique a-C:H/a-C (JONES 2012a;b, JONES 2012a),
- l'interprétation des observations de Planck (PLANCK COLLABORATION et al. 2011a;b) montre que la SED de la poussière à grande longueur d'onde dans le MIS diffus est bien ajustée par un corps noir modifié unique avec  $T \approx 18$  K,  $\beta \approx 1.8$  et suggère que l'émission est dominée par une seule population de grains. Dans le cadre de THEMIS, ces grains présentent une structure cœur silicaté avec inclusions de Fe/FeS /manteau aromatique a-Sil<sub>Fe/FeS</sub>/a-C avec une épaisseur de 5-10 nm. (KÖHLER et al. 2011; 2012; 2014).

Ainsi, trois populations de poussière sont considérées par THEMIS :

- des nano-particules a-C ( $a < 20$  nm) ayant une distribution de taille en loi de puissance avec des propriétés optiques fortement dépendantes de la taille et de la composition,
- des gros grains cœur/manteau (CM) a-C(:H)/a-C ( $a \sim 160$  nm) avec une distribution de taille log-normale, et
- des gros grains CM a-Sil<sub>Fe,FeS</sub>/a-C ( $a \sim 140$  nm) ayant une distribution de taille log-normale formés par accréation de carbone et coagulation de nano-particules a-C sur leurs surfaces.

La figure 2.8 donne une représentation de la distribution de taille des différentes populations de poussière.

Le modèle de poussière THEMIS standard pour le MIS diffus utilise ~200 ppm (partie par millions) de carbone (~140 ppm dans les nanoparticules a-C, ~50 ppm dans les grains CM a-C(:H)/a-C et ~10 ppm dans les manteaux a-C des grains a-Sil<sub>Fe/FeS</sub>), ~110 ppm d'oxygène, ~45 ppm de magnésium, ~32 ppm de silicium, ~19 ppm de fer et ~3 ppm de soufre dans les inclusions FeS (YSARD

7. <https://www.ias.u-psud.fr/DUSTEM/index.html>

et al. 2015). Cependant, il faut noter que l'abondance du carbone est probablement très variable et sensible à la densité locale et aux conditions du champ de rayonnement (JONES et al. 2013, JONES 2014; 2016, YSARD et al. 2015).

Les nano-particules a-C, les grains CM a-C:H/a-C et les a-Sil<sub>Fe</sub>/FeS/a-C comptent respectivement pour ~23%, ~8% et ~69% de la masse de poussière.

La figure 2.9 fait la synthèse du modèle standard THEMIS pour le MIS diffus à travers la distribution de tailles, l'extinction IR-visible-UV, l'extinction dans l'IR proche à lointain et la SED prédits. On remarque que les observations sont bien reproduites et il est possible d'y associer les populations responsables :

- les a-C sont responsables de l'émission dans les bandes IR, de l'émission continuum dans le proche et moyen IR, de l'extinction dans le lointain UV et de la bosse à 217 nm,
- les gros grains, quant à eux, sont responsables de l'extinction dans le visible et le moyen IR, de l'émission dans l'IR lointain et le sub-millimétrique et contribuent à l'extinction dans l'UV.

La figure 2.10 montre la contribution relative de chaque population à la SED.

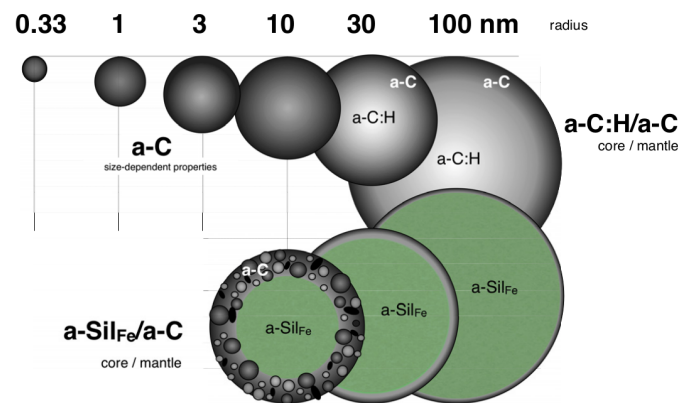


FIGURE 2.8 – Les populations de poussières en coupe transversale. Dans la partie supérieure, les grains a-C:H/a-C sont représentés, où le noir représente la matière riche en aromatiques et le blanc la matière riche en aliphatiques. Dans la partie inférieure, les grains de silicate amorphe (vert) sont représentés avec un manteau a-C coagulé/accrété de 5 nm d'épaisseur. Les rayons des particules sont indiqués sur une échelle logarithmique. (Source : JONES et al. 2013; Fig. 1)

### 2.2.2 Evolution de la poussière

Des variations de la SED de la poussière sont clairement observées entre MIS diffus et nuages moléculaires : diminution de la température, augmentation de l'opacité et de l'indice spectral mesurés à partir de l'émission thermique dans l'IR lointain/sub-mm, diminution du rapport d'intensité de l'IR moyen et lointain, et augmentation de la diffusion à courte longueur d'onde (voir introduction du chapitre). Ces observations sont interprétées en termes d'évolution de la poussière : croissance des grains et formation d'un manteau de glace.

La capacité de THEMIS à reproduire les variations des SED observées aussi bien pour le MIS diffus (YSARD et al. 2015, FANCIULLO et al. 2015) que pour le milieu dense (KÖHLER et al. 2015, YSARD et al. 2016a) sont en accord avec les mesures d'extinction.

Considérant l'évolution de la poussière, JONES et al. (2014) supposent que les grains accrètent des espèces gazeuses et sont susceptibles de former un manteau de carbone amorphe. Dans le MIS diffus, où la poussière est exposée au champ de radiation interstellaire, le manteau est déhydrogéné par les photons UV et est aromatisé. Dans les régions plus denses, cependant, où le

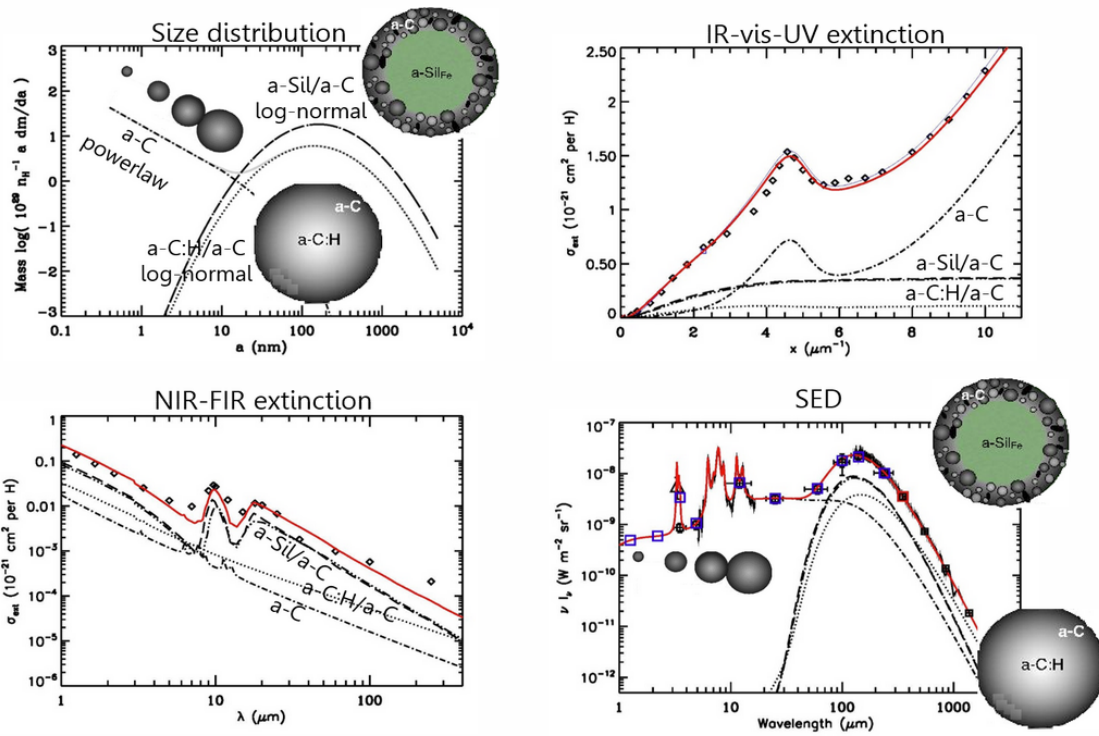


FIGURE 2.9 – Modèle standard THEMIS pour  $N_H = 10^{20} \text{ H cm}^{-2}$  et  $G_0=1$  pour l'ISRF : distribution de taille (en haut à gauche), extinction proche IR-UV (en haut à droite), extinction IR (en bas à gauche), et la SED de la poussière complète (en bas à gauche). Les totaux sont indiqués par les lignes pleines (rouges). Les données sur l'extinction sont tirées de [MATHIS \(1990\)](#). Les données d'observation dans le graphique en bas à gauche sont : les spectres  $\sim 5\text{-}15 \mu\text{m}$  ISOCAM/CVF d'ISO et  $\sim 100\text{-}1000 \mu\text{m}$  de FIRAS/COBE, la mesure AROME à  $3.3 \mu\text{m}$  en bande étroite (triangle) et photométrie DIRBE/COBE (carrés) ([JONES et al. 2013](#)).

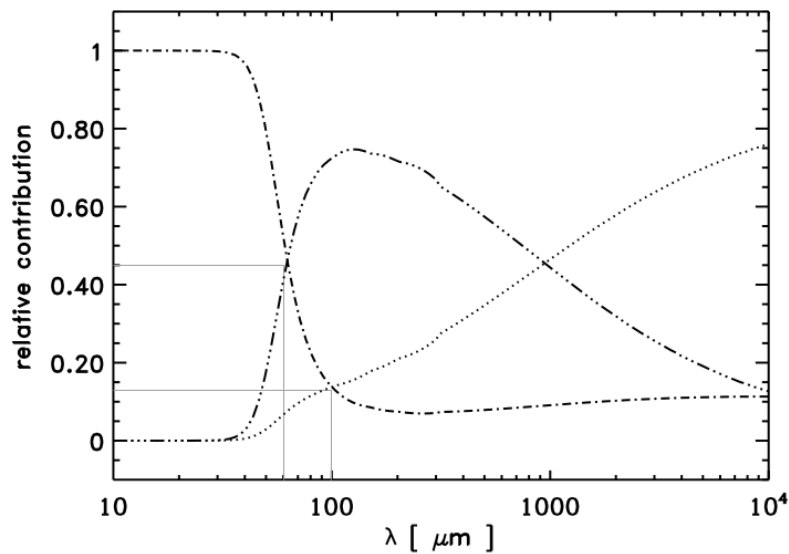


FIGURE 2.10 – Contributions relatives des composantes à la SED : a-C (tirets simples pointillés), a-C:H/a-C (tirets triples pointillés), a-Sil/a-C (pointillés). On peut noter que la population de petits grains a-C:(H) contribue pour  $\approx 45\%$  de l'émission totale à  $60 \mu\text{m}$  et  $\approx 13\%$  de l'émission totale à  $100 \mu\text{m}$ . (Source : [JONES et al. 2013](#); Fig. 4)

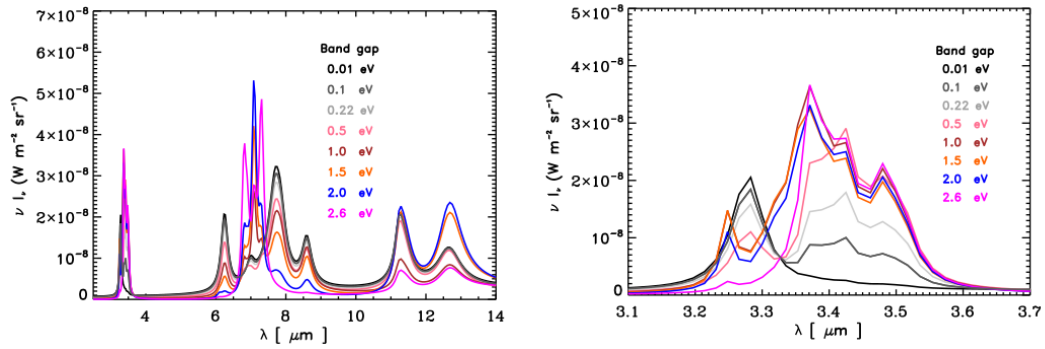


FIGURE 2.11 – Spectres de bande d'émission à 3-14  $\mu\text{m}$  (gauche) et 3.1-3.7  $\mu\text{m}$  (droite) en fonction de la bande interdite a-C(H) du matériau,  $E_g$  (eV). (Source : JONES et al. 2013; Fig. 11)

rayonnement est plus faible, les atomes d'hydrogène ne sont plus arrachés et les manteaux accrés sont plutôt riches en aliphatiques (a-C:H). En raison de la formation de ces "deuxièmes" manteaux, la composition des grains de poussière change et on parle alors de grains cœur/manteau/manteau (CMM). Cela a une influence sur la façon dont les particules absorbent, émettent et diffusent la lumière. On notera, entre autres, une augmentation de l'indice spectral  $\beta$  et de l'albédo des poussières, ce qui concorde avec les observations des nuages sombres.

De plus, on considère que la coagulation ou le collage des grains conduit à la formation d'agrégats dans les régions plus denses du MIS. On parle alors d'agrégats/manteaux/manteaux (AMM). Les calculs prédisent que la température des grains diminue et que l'émissivité des agrégats dans l'IR lointain/sub-mm augmente par rapport aux grains individuels (KÖHLER et al. 2015). Ces agrégats diffusent efficacement la lumière dans le visible-moyen IR (YSARD et al. 2016a).

Dans ces régions plus denses, où le rayonnement est atténué et donc plus faible que dans le MIS diffus, des manteaux de glace peuvent également se former sur la surface des agrégats (AMMI<sup>8</sup>). En raison de la formation d'un manteau de glace, la taille des grains continue de croître, ce qui entraîne une augmentation supplémentaire de l'émissivité et une diminution de la température. Bien que la composition des grains change, elle n'a aucune influence sur l'indice spectral  $\beta$ .

Dans les régions de formation stellaire, la poussière évoluée des nuages denses est exposée aux champs de radiation intenses des jeunes étoiles voisines à la surface des PDR ou des disques protoplanétaires. Les grains et agrégats sont transformés ou détruits rapidement par les photons et les chocs induits par les vents générés par les étoiles. Dans son travail de thèse, T. Schirmer s'intéresse à l'évolution et aux signatures de ces grains dans les PDR dans le cadre de THEMIS. Cet aspect reste à explorer à la surface des disques protoplanétaires.

La figure 2.12 schématise cette évolution de la poussière du milieu diffus vers les phases denses où la partie de droite montre des grains avec des manteaux a-C plus épais.

8. I pour icy

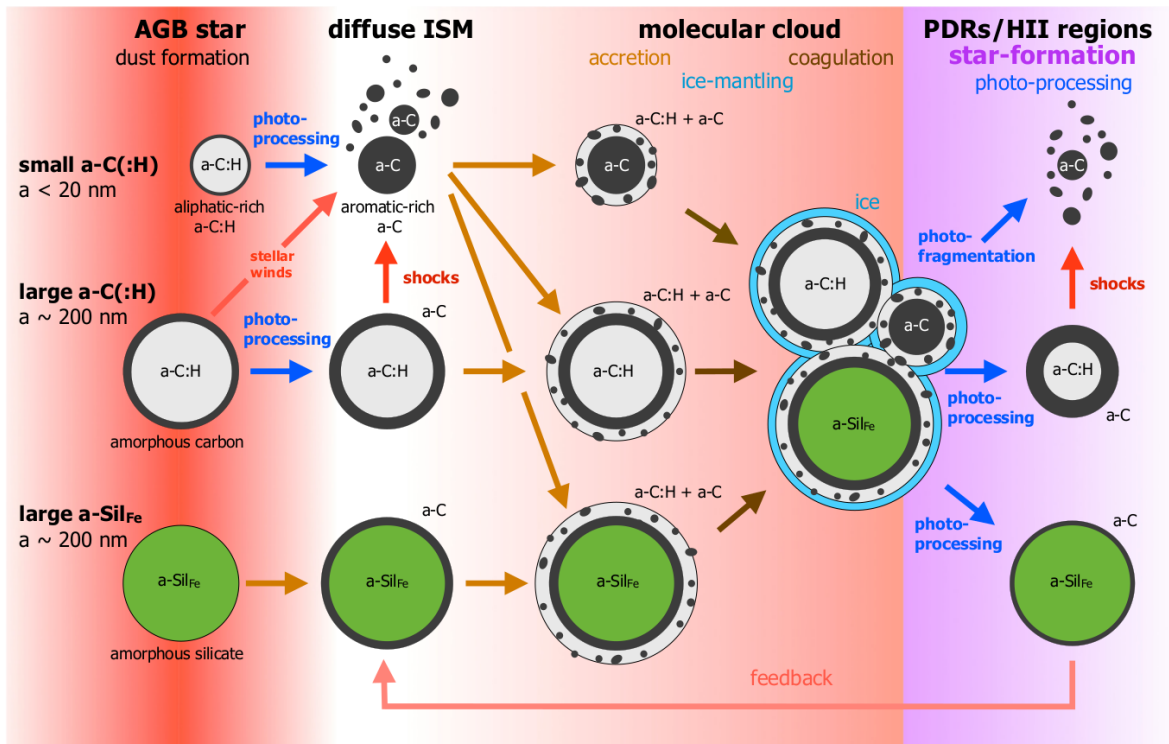


FIGURE 2.12 – Vue schématique du cycle de vie de la poussière interstellaire en termes de pistes d'évolution : Les pistes de "transformation parallèle" qui mènent à une évolution en douceur sont horizontales (c.-à-d. l'accrétion et la photo-transformation) et les pistes "croisées" qui mènent à un transfert de masse important entre les tailles de grains (c.-à-d. la coagulation et la désagrégation) sont diagonales et verticales. Qualitativement, l'ombrage rouge reflète la densité,  $n_H$  et l'ombrage violet, à l'extrême droite, représente des champs de rayonnement  $G_0$  élevés. (Source : JONES et al. 2013; Fig. 16)

## 2.3 Spectres d'émission en fonction des propriétés des nano-grains carbonés et des conditions d'excitation

### 2.3.1 Espace des paramètres

Comme il a été précisé dans la section précédente, l'outil DustEM (COMPIÈGNE et al. 2011) est utilisé pour calculer les spectres d'extinction et d'émission. Notamment, il est possible d'investiguer l'effet des paramètres comme la taille, la pente de la distribution de tailles, l'intensité et la dureté du champ de rayonnement sur la SED.

#### 2.3.1.1 Influence de la distribution et taille minimale des nano-particules

La figure 2.13 montre les SED pour la poussière exposée au champ de radiation interstellaire local (ISRF<sup>9</sup>) de MATHIS et al. (1983) avec différentes intensités. Trois paramètres sont variés ici :

- l'intensité de l'ISRF, exprimée en valeur de  $G_0$  qui correspond au flux intégré dans l'UV entre 6 et 13.6 eV avec  $G_0 = 1$  pour un flux de  $1.6 \times 10^{-3} \text{ erg.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$  (HABING 1968),
- la taille minimale des a-C avec  $0.4 \leq a_{min} \leq 1 \text{ nm}$ ,
- la pente  $\alpha$  de la distribution de tailles des petits a-C avec  $-6 \leq \alpha \leq -2$ . Le nombre des plus petits a-C diminue par rapport aux plus grands quand  $\alpha$  augmente.

On notera qu'on ne considère pas ici de variations de composition et de propriétés optiques en fonction du rayonnement.

L'émission continuum dans le proche IR et celle dans les bandes diminuent quand  $\alpha$  et  $a_{min}$  augmentent. Notamment, la bande à 3.3  $\mu\text{m}$  est particulièrement sensible à la taille et est quasiment absente pour  $a_{min}=1 \text{ nm}$ . Pour des valeurs de  $1 \leq G_0 \leq 100$ , avec  $\alpha=-5$  ou  $-6$ , quand  $a_{min}$  passe de 0.4 à 1 nm, le rapport de l'intensité des bandes 3.3/11.3  $\mu\text{m}$  diminue d'un facteur  $\sim 100$ . Cela traduit le fait qu'il n'y a pas de petits grains assez chauds émettant dans le proche IR.

Par ailleurs, pour  $a_{min}=0.4 \text{ nm}$ , les nano-particules émettent un fort continuum dans le proche IR qui diminue très fortement pour  $a_{min}=1 \text{ nm}$ . De plus, le rapport de la bande à 3.3  $\mu\text{m}$  au continuum à 2  $\mu\text{m}$  3.3/2  $\mu\text{m}$  diminue d'un facteur  $\sim 3$  quand  $a_{min}$  passe de 0.4 à 1 nm. Ainsi, le modèle THEMIS prédit que les particules sub-nanométriques a-C émettent un fort continuum du fait de leur structure. Cela s'explique par le fait que dans l'approche de THEMIS, la distribution de tailles de grains est continue entre le solide et les nano-particules qui conservent des propriétés intermédiaires entre molécules et solides. La figure 2.14 compare la SED prédite par THEMIS et DESERT et al. (1990), DRAINE et LI (2001), COMPIÈGNE et al. (2011) en utilisant leur distribution de taille standard (Fig. 2.18). On constate qu'en effet, THEMIS prédit un continuum dans le proche IR supérieur à celui des autres modèles. D'un point de vue observationnel, l'émission du continuum dans l'IR proche par les a-C sub-nanométriques est suggérée dans différents environnements interstellaires (e.g. PARADIS et al. 2019) et les disques protoplanétaires (e.g. KLARMANN et al. 2017).

#### 2.3.1.2 Influence de l'intensité du champ de rayonnement

Sur la figure 2.13, on voit comme attendu, que l'émission des nano-particules, qui subissent des fluctuations de température, varie linéairement avec  $G_0$  ( $\sim 10^{-25}, 10^{-23}, 10^{-21} \text{ erg/s/H}$  pour  $G_0=1, 100, 10^4$ , respectivement). En revanche, l'émission des gros grains, à l'équilibre thermique, montre un comportement plus complexe, augmentant mais aussi se décalant vers les petites longueurs d'onde quand  $G_0$  augmente et s'explique par l'augmentation de leur température d'équilibre  $T_{eq}$  avec le flux de photons incidents. La figure 2.15 présente la température d'équilibre  $T_{eq}$  en fonction de  $G_0$  pour les différentes populations de grains. Pour  $G_0=1$ , la température d'équilibre des gros grains est  $T_{eq} \sim 18 \text{ K}$ , l'émission de corps noir pique à  $\sim 160 \mu\text{m}$ . Pour  $G_0=100$ ,  $T_{eq} \sim 40 \text{ K}$ , le corps noir pique à  $\sim 75 \mu\text{m}$ . Pour  $G_0=10^4$ ,  $T_{eq} \sim 80 \text{ K}$ , le corps noir pique à  $\sim 35 \mu\text{m}$ . Pour  $G_0=10^8$ ,  $T_{eq} \sim 700 \text{ K}$ , le corps noir pique à  $\sim 4 \mu\text{m}$  et les bandes silicates sont alors visibles vers 10 et 20  $\mu\text{m}$ .

9. InterStellar Radiation Field



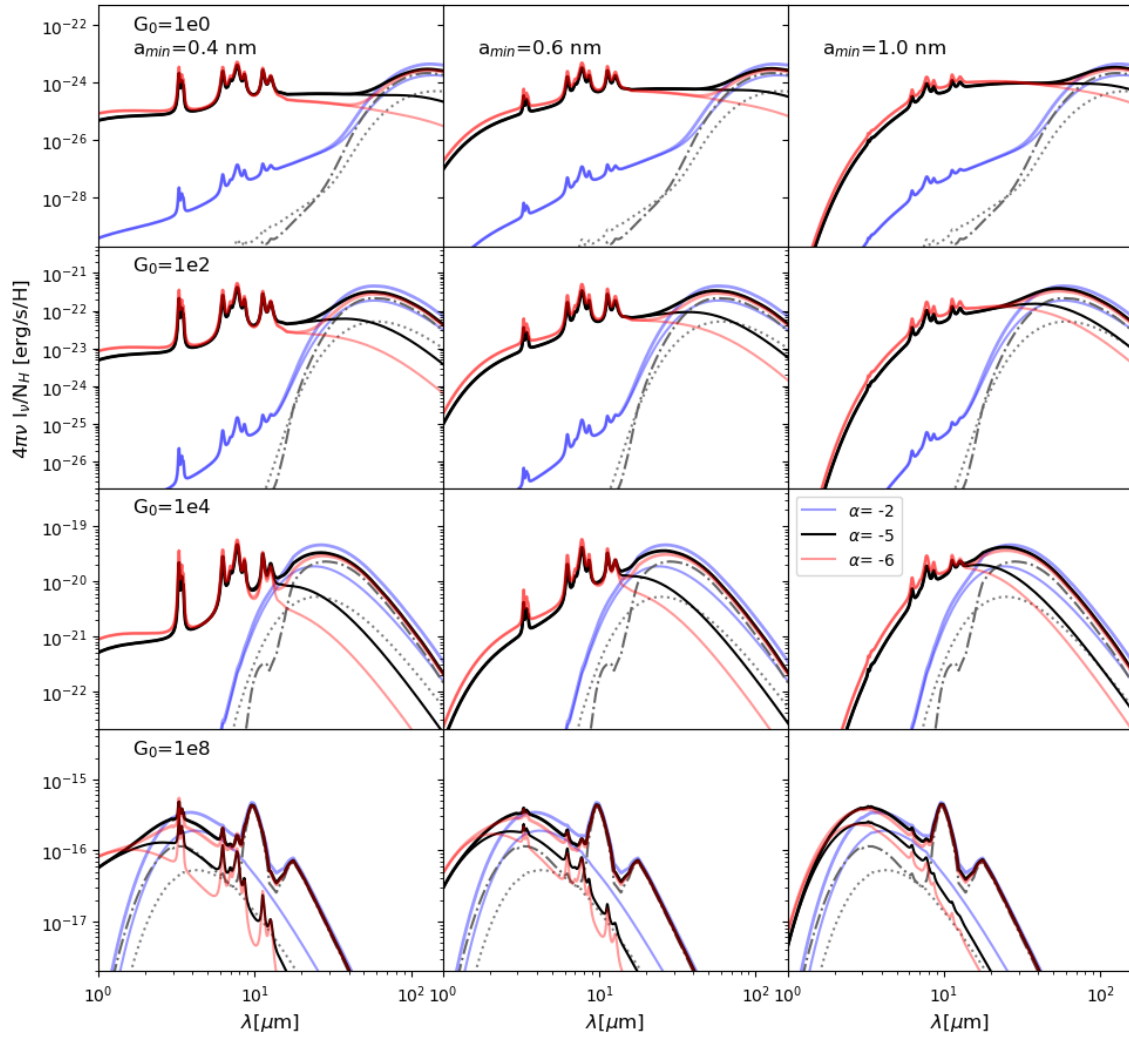


FIGURE 2.13 – SED de la poussière dans l’IR. De gauche à droite,  $a_{min}$  vaut 0.4, 0.6, 1 nm. De haut en bas,  $G_0$  vaut  $1$ ,  $10^2$ ,  $10^4$  puis  $10^8$ . Sur chaque graphique,  $\alpha$  prend les valeurs -2 (bleu), -5 (noir) et -6 (rouge). Les contributions des petits a-C (trait plein), des gros a-C:H/a-C (pointillés) et a-Si<sub>Fe</sub>/FeS/a-C (pointillés-tirets-longs) sont distinguées. L’émission totale est en trait plein épais.

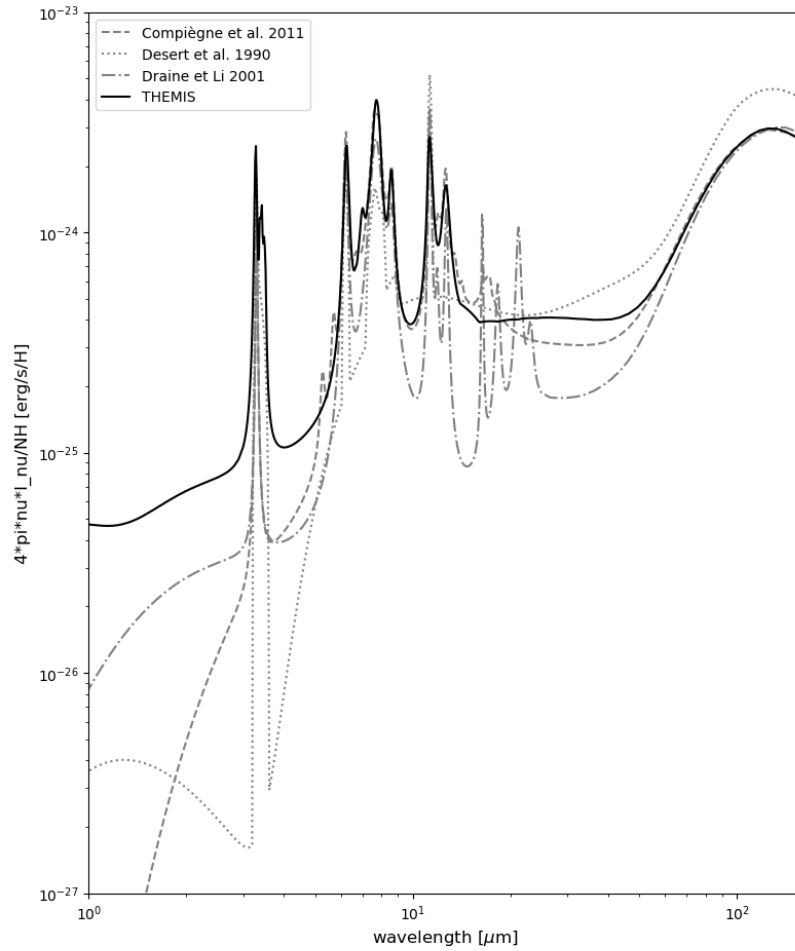


FIGURE 2.14 – Comparaison des SED de la poussière dans l’IR pour THEMIS (noir) à d’autres modèles [COMPIÈGNE et al. \(2011\)](#) (tirets gris), [DESERT et al. \(1990\)](#) (pointillés gris), [DRAINE et LI \(2001\)](#) (tirets pointillés gris). Les distributions de tailles sont présentées dans la figure 2.18.

Dans le cas des nano-particules,  $T_{eq}$  est la température équivalente à l'énergie moyenne absorbée. Pour des nano-particules avec un rayon  $a=0.4$  nm,  $T_{eq}$  vaut  $\sim 65$  K,  $\sim 70$  K,  $>100$  K et  $>1000$  K pour  $G_0=1, 100, 10^4$  et  $10^8$ , respectivement. Ces "températures" élevées des nano-particules sont liées au chauffage stochastique et expliquent la possibilité qu'elles ont d'émettre dans l'IR proche et moyen. Pour les nano-particules avec  $a\sim 1.3$  nm, à mesure que  $G_0$  augmente, elles atteignent l'équilibre thermique avec le champ de rayonnement et par conséquent suivent le même type de comportement que les grains plus gros. Pour ces nano-particules, le chauffage stochastique domine jusque  $G_0=10^4$ . Les a-C avec  $a\sim 10$  nm sont en revanche à l'équilibre quelque soit l'intensité du champ de rayonnement.

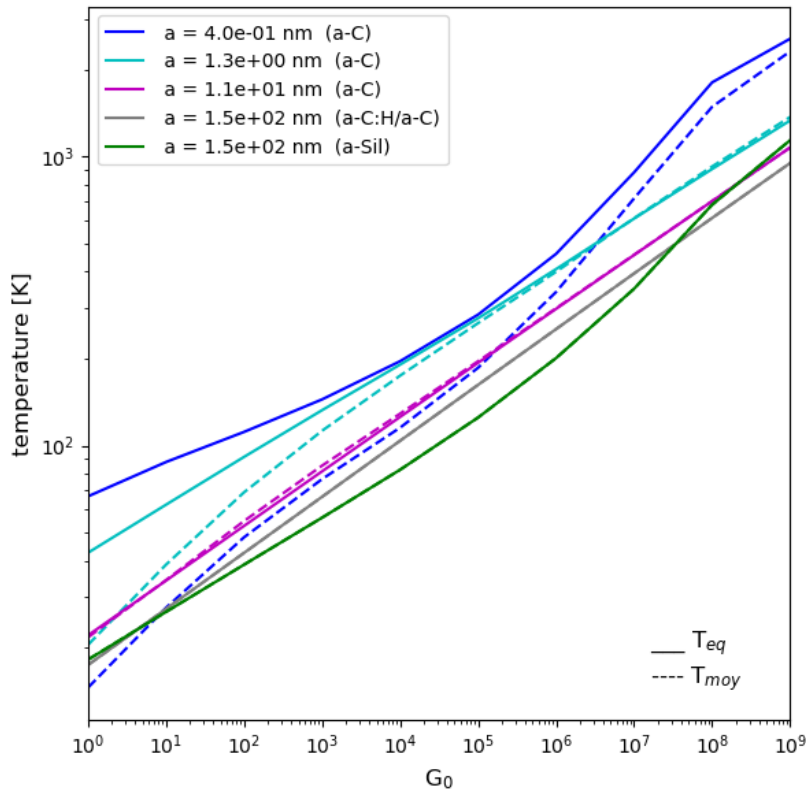


FIGURE 2.15 – Températures d'équilibre  $T_{eq}$  (trait plein) et moyenne  $T_{moy}$  (tirets) pour des a-C de rayon  $a=4$  nm (bleu),  $\sim 1.3$  nm (cyan),  $\sim 10$  nm (magenta), un a-C:H/a-C (gris) et a-Sil (vert) de  $\sim 150$  nm en fonction de  $G_0$ . Pour les grains à l'équilibre thermique, on a  $T_{eq}=T_{moy}$ .

### 2.3.1.3 Influence de la dureté du champ de rayonnement

La figure 2.16 permet d'illustrer l'effet de la dureté du rayonnement, c'est-à-dire l'effet de l'énergie moyenne des photons incidents absorbés. Elle montre les SED pour la poussière irradiée par des corps noirs de température effective  $T_{eff}$  de 5000, 10000 et 30000 K et pour différentes valeurs de  $G_0$ . Les valeurs standards  $a_{min}=0.4$  nm et  $\alpha=-5$  sont gardées constantes.

Lorsque  $T_{eff}$  augmente et donc la dureté, l'énergie moyenne des photons absorbés  $\langle E_{abs} \rangle$  par des nano-particules de rayon  $a=0.4$  nm augmente :  $\langle E_{abs} \rangle \sim 3.8, \sim 5.2$  et  $\sim 11$  eV pour  $T_{eff}=5000, 10000$  et  $30000$  K, respectivement. Pour des valeurs de  $G_0$  faibles, entre 1 et 100 voire  $10^4$ , quand  $T_{eff}$  passe de 5000 à 30000 K, les rapports de l'intensité :

- des bandes  $3.3/8.6$  et  $3.3/11.3$   $\mu\text{m}$  augmentent d'un facteur  $\sim 6$  et traduisent l'augmentation de l'émission dans la bande à  $3.3$   $\mu\text{m}$  avec la dureté.
- de la bande à  $3.3$   $\mu\text{m}$  au continuum à  $2$   $\mu\text{m}$  diminue d'un facteur  $\sim 7$  du fait de l'augmentation de l'émission continuum dans le proche IR.

Ainsi, les émissions continuum proche IR et dans la bande à 3.3  $\mu\text{m}$  par chauffage stochastique augmentent avec la dureté et dépendent donc fortement de la température de la source irradiante.

On note ensuite que l'intensité du champ de radiation exprimée en terme de  $G_0$  correspond à une grandeur normalisée au flux UV. Ainsi, à  $G_0$  constant, le flux de photons dans le visible et l'IR diminue quand  $T_{eff}$  augmente (de gauche à droite). Cela se traduit :

- pour  $G_0=1$ , par une température d'équilibre  $T_{eq}$  des gros grains plus basse :  $T_{eq} \sim 40, 19, 14$  K pour  $T_{eff}=5000, 10000, 30000$  K, respectivement.
- par une émission IR globalement plus basse.

Si on regarde maintenant l'évolution des différents rapports avec  $G_0$  pour  $T_{eff}$  constant (de haut en bas), on constate que :

- pour  $G_0 \leq 10^4$ , les rapports de bandes 3.3/8.6 et 3.3/11.3  $\mu\text{m}$  sont quasiment constants ou varient peu et s'expliquent par le même mécanisme de chauffage, stochastique, des nano-particules,
- pour  $G_0=10^4$ , le rapport 3.3/2  $\mu\text{m}$  est divisé par 3 pour  $T_{eff}=5000$  K dû à l'excitation multi-photon des nano-particules. Le rapport reste constant pour  $T_{eff}=10000$  et 30000 K car seul le chauffage stochastique contribue à l'émission dans le proche IR.
- pour  $G_0=10^8$ , les rapports 3.3/8.6 et 3.3/11.3  $\mu\text{m}$  augmentent fortement et le rapport 3.3/2  $\mu\text{m}$  chute. Ces variations sont liées à la contribution importante des grains chauds à l'équilibre thermique. En particulier, pour  $T_{eff}=5000$  K, les bandes IR des nano-particules ne sont plus visibles.

On note que dans le cas  $G_0=10^8$ , la température d'équilibre des gros grains  $T_{eq} \sim 1700, \sim 700, \sim 500$  K pour  $T_{eff}=5000, 10000, 30000$  K, respectivement. Celle des nano-particules dépasse les 2000 K dans les trois situations. Pour  $T_{eff}=5000$  K et  $G_0=10^8$ , les températures d'équilibre  $T_{eq}$  des grains sont élevées et doivent conduire à leur transformation/destruction rapide. Ainsi la SED prédite dans ces conditions n'est sans doute pas réaliste. Pour  $T_{eff}=10000$  ou 30000 K, les conditions sont extrêmes pour les nano-particules qui doivent être détruites rapidement. Mais les températures d'équilibre des grains plus gros sont viables et leur transformation/destruction progressive pourrait représenter un réservoir pour former de nouvelles nano-particules. Notamment,  $T_{eff}=10000$  K et  $G_0=10^8$  sont des conditions qui se retrouvent dans les régions internes des disques protoplanétaires autour des étoiles Herbig (voir chapitres suivants).

#### 2.3.1.4 Influence de la composition et de la taille minimum des nano-particules entre 3 et 4 $\mu\text{m}$

La figure 2.17 explore les effets de  $a_{min}$  et de la composition sur la SED des nano-particules entre 3 et 4  $\mu\text{m}$  (en lien avec mon étude de quatre disques protoplanétaires (BOUTÉRAON et al. 2019) chapitre suivant de la thèse). L'évolution progressive d'une composition plutôt aromatique ( $E_g=0$  eV) vers une composition plutôt aliphatique ( $E_g=2.4$  eV) (de gauche à droite, de haut en bas) s'accompagne d'une évolution des signatures observées. Notamment, pour  $E_g=0$  eV, seule la signature aromatique à 3.3  $\mu\text{m}$  est visible. Puis de  $E_g=0.1$  à 0.6 eV, les signatures aliphatiques entre 3.4 et 3.5  $\mu\text{m}$  apparaissent et les rapports de bandes aromatique/aliphatiques s'inversent. A partir de  $E_g=0.8$  eV, la signature aromatique à 3.3  $\mu\text{m}$  disparaît au profit des signatures oléfiniques entre 3.25 et 3.4  $\mu\text{m}$  en raison du taux d'hydrogène  $X_H$  qui tend à réduire l'aromaticité. Entre  $E_g=0.8$  et 2 eV, l'émission dans les bandes oléfiniques croît plus rapidement que celle des bandes aliphatiques. Pour  $E_g=2.4$  eV, ce sont les signatures aliphatiques qui dominent l'émission.

Si on regarde maintenant l'effet de l'augmentation de  $a_{min}$ , on observe pour des compositions aromatiques ( $E_g=0-0.1$  eV) que l'émission dans la bande aromatique à 3.3  $\mu\text{m}$  due aux a-C (sub-)nanométriques diminue et que celle du continuum adjacent augmente. Ce dernier point s'explique par le fait que les calculs sont effectués à masse constante. Ainsi, la masse qui ne se

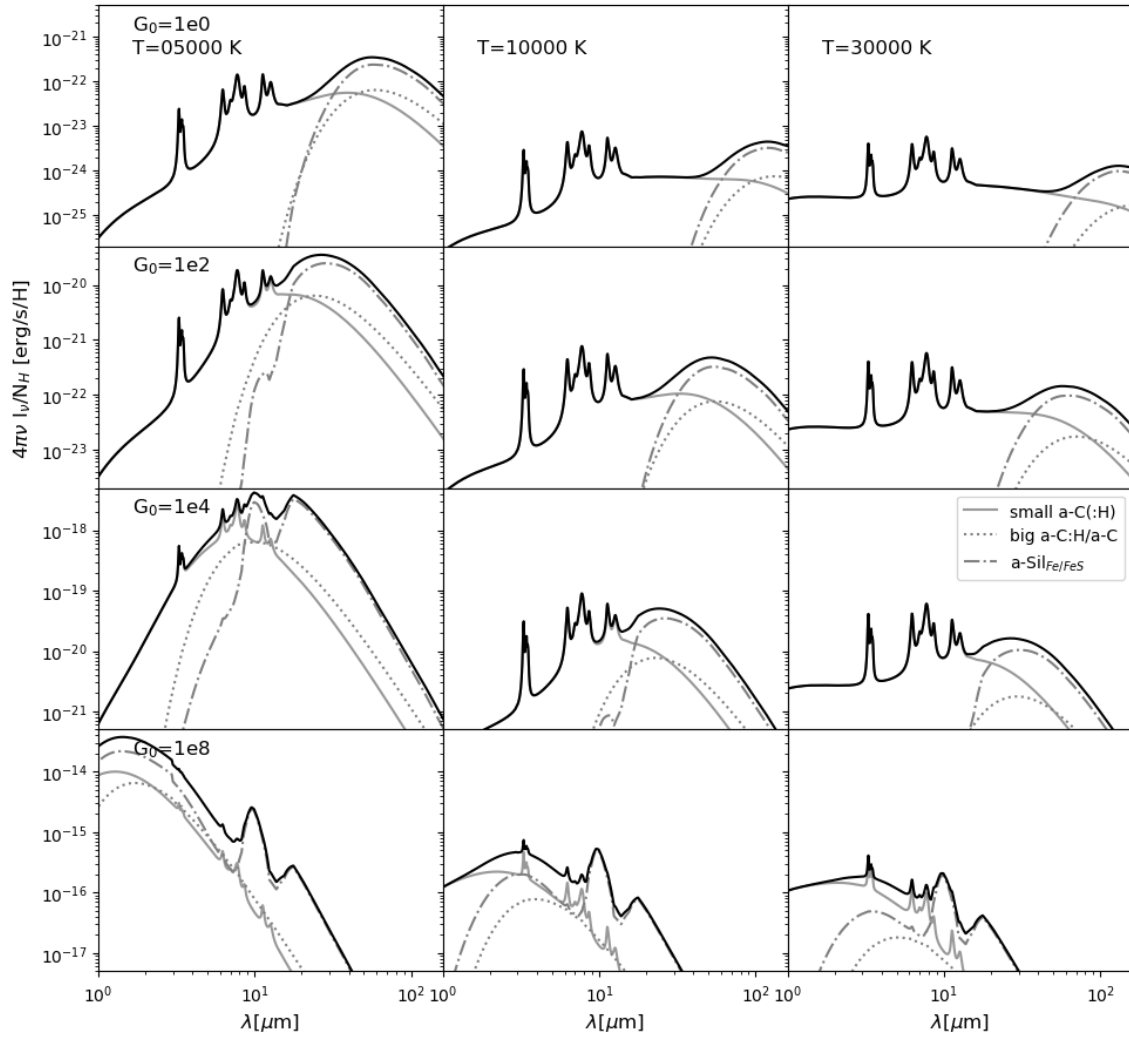


FIGURE 2.16 – SED de la poussière dans l'IR. De gauche à droite, la température du corps noir irradiant vaut 5000, 10000 et 30000 K. De haut en bas,  $G_0$  vaut 1,  $10^2$ ,  $10^4$  puis  $10^8$ . Les contributions des petits a-C (trait plein), des gros a-C:H/a-C (pointillés) et gris a-Sil<sub>Fe/FeS</sub> (pointillés-tirets-longs). L'émission totale est en trait plein épais.

trouve plus dans les plus petits grains est répartie dans les grains plus gros augmentant mécaniquement le continuum. Cet effet est accentué par le fait que les grains aromatiques plus gros sont meilleurs conducteurs (îlots aromatiques plus grands) que les plus petits et donc plus émissifs dans le proche IR. Pour des compositions aliphatiques ( $E_g$  grand), les grains sont isolants et émettent peu de continuum dans le proche IR. Ainsi l'émission se fait principalement dans les bandes IR et explique la convergence des SED pour  $E_g$  plus élevé.

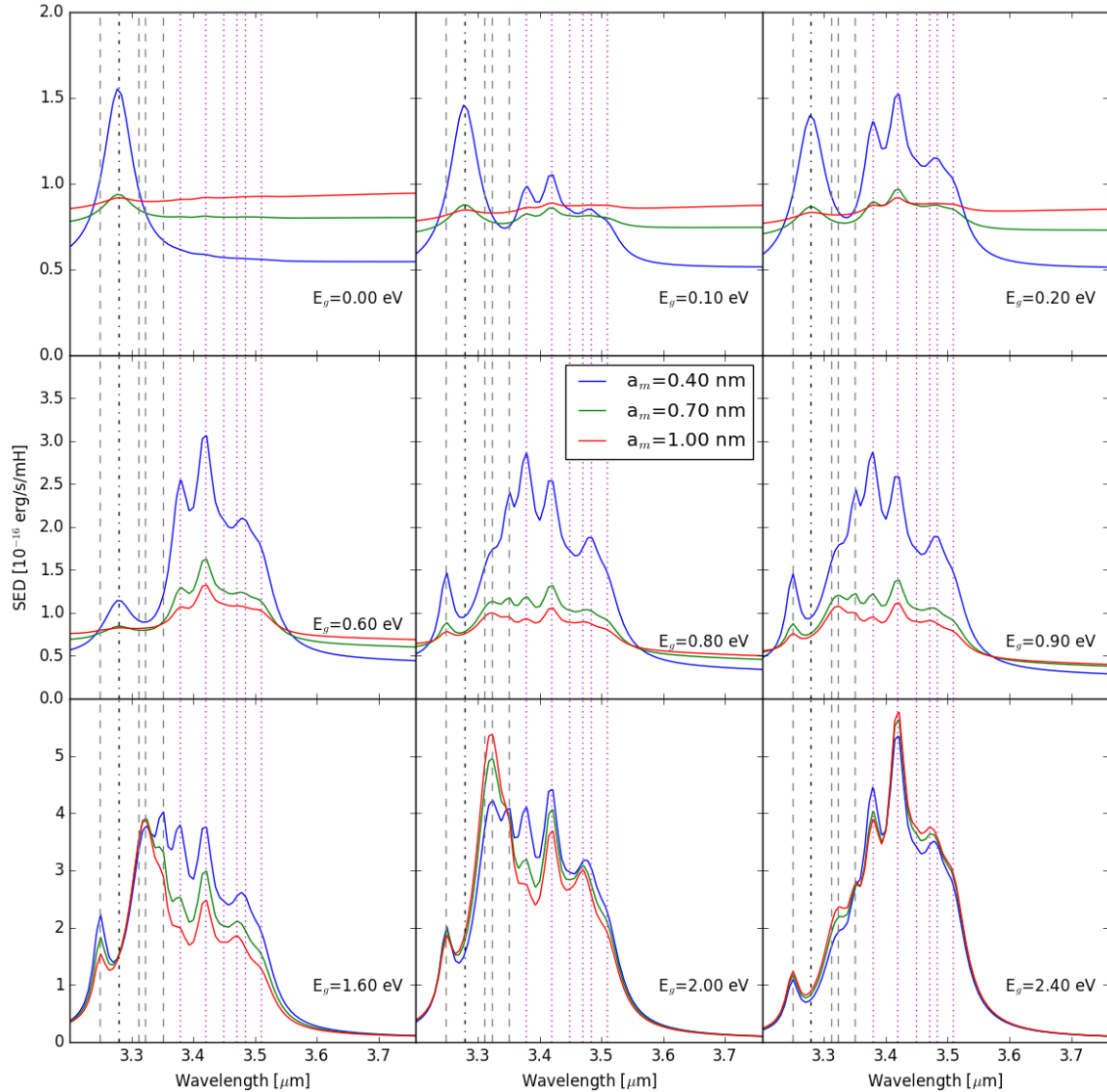


FIGURE 2.17 – SED de la poussière entre 3 et 4  $\mu\text{m}$ . De gauche à droite, et de haut en bas,  $E_g$  augmente de 0 eV à 2.4 eV. Pour chaque graphique la SED est tracée pour  $a_{min}=0.4$  nm (bleu), 0.7 nm (vert), 1 nm (rouge). Les centres des bandes associées aux liaisons aromatiques (tirets pointillés noirs), oléfiniques (tirets gris) et aliphatiques (pointillés mauves) sont représentés. (Source : BOUTÉRAON et al. 2019; Fig. 8)

### 2.3.2 Contribution des nano-particules

On a vu que l'émission dans les bandes IR provient essentiellement des nano-particules. Or, dans le modèle THEMIS, celles-ci présentent une distribution de taille allant du sub-nanométrique à 20 nm. Pour affiner notre compréhension de la contribution des nano-particules aux signatures

TABLEAU 2.3 – Distribution et taille caractéristique des populations de poussière.

Modèle	Population	Loi de distribution	Taille carac. (nm)	$M_{pop} / M_{tot}$ (%)
COMPIÈGNE et al. (2011)	PAH	log-normale	0.64	~16
	petits a-C:H	log-normale	2	~1.5
	grands a-C:H	puissance + q. exp. <sup>a</sup>	~200	~14.5
	a-Sil	puissance + q. exp. <sup>a</sup>	~300	~68
DESERT et al. (1990)	PAH	puissance	0.4-1.2	~6
	VSG	puissance	1.2-15	~6
	BG	puissance	15-110	~88
DRAINE et LI (2001)	PAH	log-normale	~0.6	~9
	petits graphites	log-normale	~5	~1.5
	grands graphites	puissance + q. exp. <sup>a</sup>	~200	~19.5
	a-Sil	puissance + q. exp. <sup>a</sup>	~300	~70
THEMIS	a-C <sub>ep</sub>	puissance	0.4-0.7	~10
	a-C <sub>tp</sub>	puissance	0.7-1.5	~7
	a-C <sub>p</sub>	puissance	1.5-20	~6
	a-C:H/a-C	log-normale	~160	~8
	a-Sil	log-normale	~140	~69

(a) Voir WEINGARTNER et DRAINE (2001) pour plus de détails sur la fonction de distribution.

et donner des éléments de comparaison aux autres modèles, considérons trois sous-populations<sup>10</sup> :

- a-C<sub>ep</sub> : les a-C extrêmement petits avec  $a < 0.7$  nm
- a-C<sub>tp</sub> : les a-C très petits avec  $0.7 \text{ nm} < a < 1.5$  nm
- a-C<sub>p</sub> : les a-C petits avec  $a > 1.5$  nm

La figure 2.18 compare la distribution de taille dans THEMIS à celle des modèles de DESERT et al. (1990), DRAINE et LI (2001), COMPIÈGNE et al. (2011). Les populations dont la taille et/ou la composition sont similaires sont représentées avec le même style de ligne. La table 2.3 précise les distributions, les tailles et la proportion en masse des populations de chaque modèle. On note que pour chacun des modèles :

- la masse se trouve principalement dans les grains les plus gros,
- les nano-particules comptent pour ~10% de la masse dans THEMIS et DRAINE et LI (2001), un peu plus pour COMPIÈGNE et al. (2011) et un peu moins pour DESERT et al. (1990).

La figure 2.19 montre la contribution de chaque population du modèle THEMIS à l'émission totale dans le proche et moyen IR de la poussière exposée à l'ISRF de MATHIS et al. (1983). On observe que pour  $G_0 \leq 10^4$  :

- les a-C<sub>ep</sub> contribuent pour ~95%, ~50% et entre 40-50% aux pics des bandes à 3.3  $\mu\text{m}$ , 8.6  $\mu\text{m}$  et 11.3  $\mu\text{m}$ , respectivement,
- les a-C<sub>tp</sub> y contribuent pour ~5%, ~45% et entre 40-45%,
- les a-C<sub>p</sub> ont d'abord une contribution nulle (à 3.3  $\mu\text{m}$ ) ou marginale puis augmente progressivement jusqu'à atteindre 10 et 15% pour les bandes 8.6  $\mu\text{m}$  et 11.3  $\mu\text{m}$ , respectivement.

Si l'émission de la bande à 3.3  $\mu\text{m}$  reste largement dominée par l'émission des a-C<sub>ep</sub>, celles des bandes 8.6  $\mu\text{m}$  et 11.3  $\mu\text{m}$  le sont à parts équivalentes pour les a-C<sub>ep</sub> et a-C<sub>tp</sub> avec une contribution des a-C<sub>p</sub> quand  $G_0$  et donc leur température augmentent.

Pour une valeur  $G_0 = 10^8$  très intense, l'émission thermique des gros grains s'ajoute et déforme le spectre sous les bandes.

10. Suggestion de Frédéric Galliano

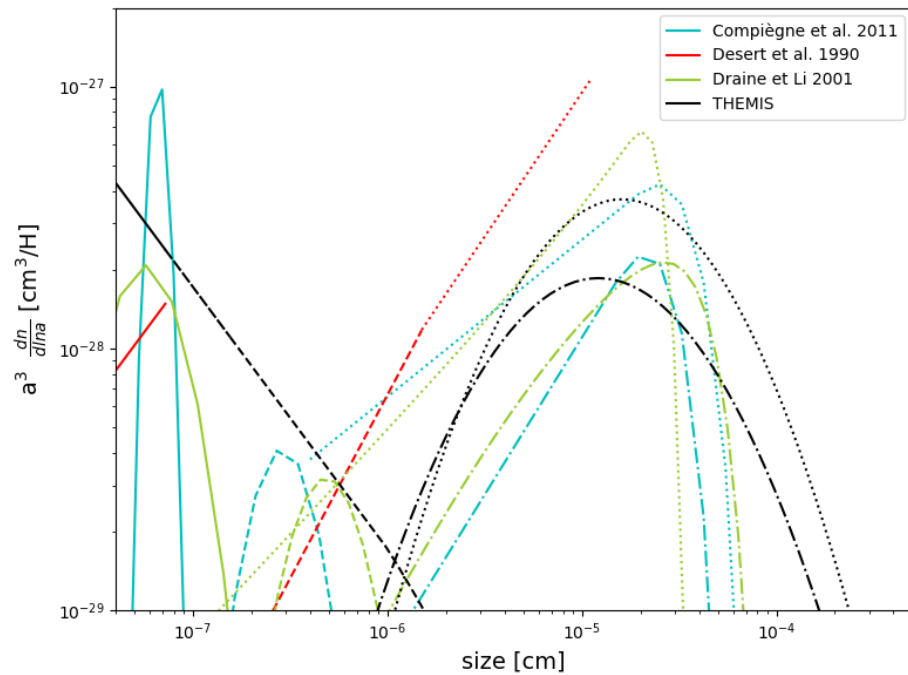


FIGURE 2.18 – Comparaison des distributions de taille des différentes populations de poussière pour THEMIS (noir) aux modèles de COMPIÈGNE et al. (2011) (cyan), DESERT et al. (1990) (rouge) et DRAINE et LI (2001) (vert-jaune). Un style de ligne est attribué aux populations dont la taille et la composition sont similaires : a- $C_{e/tp}$ /PAH (trait continu), a- $C_p$ /VSG/graphite (tirets), a-C:H/graphite (pointillés), a-Sil/Gros grains (tirets-pointillés).



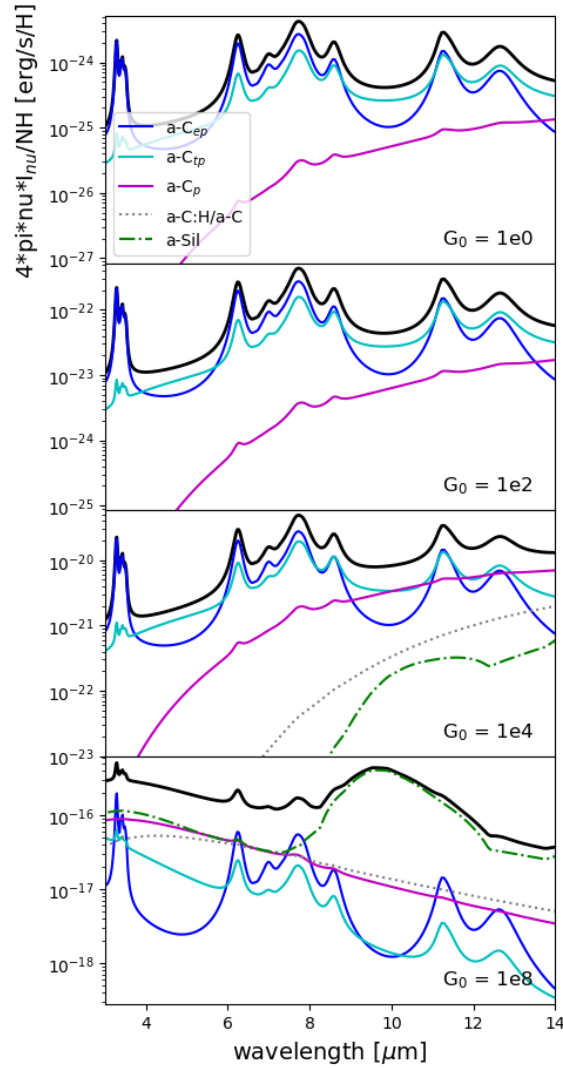


FIGURE 2.19 – SED de la poussière entre 3 et 14  $\mu\text{m}$ . De gauche à droite, et de haut en bas,  $E_g$  augmente de 0 eV à 2.4 eV. De haut en bas,  $G_0$  vaut 1,  $10^2$ ,  $10^4$  puis  $10^8$ . Sur chaque graphique, les émissions des  $a-C_{ep}$  (bleu),  $a-C_{tp}$  (cyan),  $a-C_p$  (magenta),  $a-C:H/a-C$  (pointillés gris) et  $a-Sil$  (tirets pointillés verts) sont tracées. L'émission totale est en trait noir plein épais.

## 2.4 Résumé du modèle THEMIS/Summary of the THEMIS model

### Résumé

Les sections précédentes ont permis de détailler l'approche du modèle THEMIS et quelques prédictions. Cette section en résume les points majeurs.

Le formalisme mathématique du modèle eRCN/DG-optEC relie de manière univoque composition chimique et types de liaisons de la matière carbonée.

Les propriétés optiques associées à une composition donnée sont contraintes par les expériences de laboratoire et les observations de l'UV aux longueurs d'onde centimétriques.

La gamme de composition permise par le modèle eRCN/DG fournit un cadre pour décrire l'évolution de la poussière carbonée.

La distribution de taille et la structure cœur/manteau découlant de considérations physiques permettent de reproduire une grande partie des observations du MIS diffus et dense.

Notamment, pour  $G_0=1$ ,

les a-C sont responsables de l'émission dans les bandes IR, de l'émission continuum dans le proche et moyen IR, de l'extinction dans le lointain UV et de la bosse à 217 nm,

les gros grains, quant à eux, sont responsables de l'extinction dans le visible et le moyen IR, de l'émission dans l'IR lointain et le sub-millimétrique et contribuent à l'extinction dans l'UV.

Cette thèse s'intéresse particulièrement à l'émission dans le proche et moyen IR dominée par les nano-grains carbonés. On pourra noter que :

THEMIS prédit que l'émission continuum dans le proche IR est dominée par nano-particules stochastiquement chauffées pour des  $G_0$  faibles. Pour des  $G_0$  plus élevés comme dans les disques protoplanétaires, la contribution des gros grains est importante.

l'intensité de la bande à 3.3  $\mu\text{m}$  dépend très sensiblement de la taille, de la dureté du champ de rayonnement et de la composition : elle diminue quand  $a_{min}$  augmente, augmente avec la dureté du champ de rayonnement et l'aromatization,

le rapport des bandes aliphatiques entre 3.4-3.6  $\mu\text{m}$  à la bande aromatique à 3.3  $\mu\text{m}$  augmente quand le gap et la taille minimale augmentent.

En pratique, THEMIS<sup>11</sup> fournit des fichiers formatés des efficacités d'absorption  $Q_{abs}$ , de diffusion  $Q_{sca}$ , des facteurs de diffusion  $g = \langle \cos\theta \rangle$  et des capacités thermiques  $C$  pour une composition et une gamme de taille données à l'outil DustEM<sup>12</sup>. Ensuite, DustEM calcule l'extinction et la SED de la poussière selon les propriétés fournies. DustEM permet de définir les distributions de taille des populations de poussière, leur abondance relativement à l'hydrogène et le champ de radiation et son intensité.

### Summary

The previous sections provided details on the THEMIS model and some predictions. This section summarises the main points.

The mathematical formalism of the eRCN/DG-optEC model unambiguously links the chemical composition and bond types of carbonaceous materials.

The optical properties associated with a given composition are constrained by laboratory experiments and observations from UV to centimetre wavelengths.

The range of composition allowed by the eRCN/DG model provides a framework for describing the evolution of carbonaceous dust.

11. <https://www.ias.u-psud.fr/themis/index.html>

12. <https://www.ias.u-psud.fr/DUSTEM/>

The size distribution and core/mantle structure resulting from physical considerations allow to reproduce various observations of the diffuse ISM.

In particular, for  $G_0=1$ ,

a-C are responsible for emission in the IR bands, continuum emission in the near and mid-IR, extinction in the far UV and bump at 217 nm,

big grains are responsible for extinction in the visible and mid-IR, emission in the far-IR and sub-millimetre and contribute to extinction in the UV.

This thesis is particularly interested in the emission in the near and medium IR dominated by carbon nano-grains. It may be noted that :

THEMIS predicts that the continuum emission in the near IR is dominated to stochastically heated nano-particles for low values of  $G_0$ . For higher  $G_0$  as in protoplanetary discs, the contribution of big grains is important.

the intensity of the 3.3  $\mu\text{m}$  band strongly depends on the size, hardness of the radiation field and composition : it decreases when  $a_{min}$  increases and increases with the hardness of the radiation field and aromatisation,

the ratio of aliphatic bands between 3.4-3.6  $\mu\text{m}$  to the aromatic band at 3.3  $\mu\text{m}$  increases as the gap and the minimal size increase.

In practice, THEMIS provides formatted files of absorption  $Q_{abs}$ , scattering  $Q_{sca}$  efficiencies, scattering factors  $g = \langle \cos\theta \rangle$  and heat capacities  $C$  for a given composition and size range to the DustEM tool. Then, DustEM calculates the extinction and the SED of the dust according to the properties provided. DustEM allows the user to define the size distributions of dust populations, their abundance with respect to hydrogen, and the radiation field and its intensity.

## 2.5 Etude des effets de la taille et de la structure des gros grains

L'étude présentée dans cette section concerne un travail auquel j'ai participé et qui a fait l'objet d'une publication (YSARD, JONES, DEMYK, BOUTÉRAON et KOEHLER 2018). Elle s'intéresse aux changements des propriétés optiques des gros grains ( $a \geq 50$  nm) et des agrégats en fonction de leur taille et de leur structure. Dans le cadre de THEMIS, il est attendu que les grains de poussière croissent et évoluent progressivement au cours de leur passage des phases diffuses aux nuages denses et l'étude de ces effets présente donc un intérêt majeur pour comprendre la physique de ces milieux.

L'étude de YSARD et al. (2018) explore les effets des grains compacts ou poreux, sphériques ou non, formant des agrégats ou non et de leur taille sur les propriétés optiques. Pour cela, trois compositions de grains de THEMIS et leurs constantes optiques sont utilisées :

- des silicates a-Sil<sub>Fe/FeS</sub> (KÖHLER et al. 2014),
- des carbones amorphes aromatiques a-C avec  $E_g=0.1$  eV et
- des carbones amorphes aliphatiques a-C:H avec  $E_g=2.5$  eV (JONES et al. 2017).

Différentes structures de grains sont considérées :

- des grains sphériques compacts avec un rayon  $0.05 \leq a \leq 5$   $\mu\text{m}$ ,
- des grains sphériques poreux de rayon  $a=0.1$   $\mu\text{m}$  et une porosité  $P=10,20,30,40,50\%$ ,
- des grains sphéroïdes compacts aplatis ou allongés.

Ces grains sont utilisés pour former des agrégats de  $2 \leq N \leq 16$  monomères :

- de sphères compactes de rayon  $a_0=0.05, 0.1, 0.5$  ou  $1$   $\mu\text{m}$ ,
- de sphères poreuses avec  $a_0=0.1$   $\mu\text{m}$  et  $P=20\%$ ,
- de sphéroïdes, allongés ou aplatis, alignés selon leur axe principal,

- ou des agrégats faits de quatre sphères compactes avec deux rayons différents, 0.05 et 0.1 ou 0.5  $\mu\text{m}$ .

La figure 2.20 donne deux exemples d'agrégats. Les propriétés optiques de ces grains et agrégats sont calculées en utilisant la théorie de Mie pour les grains sphériques (BOHREN et HUFFMAN 1998) ou l'approximation des dipôles discrets (DDA<sup>13</sup>) (PURCELL et PENNYPACKER 1973, DRAINE 1988, DRAINE et FLATAU 1994) pour les structures plus complexes. Les efficacités d'absorption et de diffusion,  $Q_{abs}$  et  $Q_{sca}$ , sont utilisées pour calculer l'opacité  $\kappa$  :

$$\kappa [\text{cm}^2\text{g}^{-1}] = \frac{3}{4\rho} \frac{Q_{abs} + Q_{sca}}{a} \quad (2.24)$$

avec  $\rho$ , la densité du matériau,  $Q_{abs}$  et  $Q_{sca}$  les efficacités d'absorption et de diffusion, respectivement, et  $a$ , le rayon de la particule.

La synthèse des effets de structure, de forme et de taille sur l'opacité massique à 250  $\mu\text{m}$  des trois compositions de grains et l'extinction des bandes silicates à 10 et 18  $\mu\text{m}$  est donnée par les figures 2.21 et 2.22. Les changements dans la structure des grains entraînent des variations des propriétés optiques à toutes les longueurs d'onde :

- l'opacité dans l'IR lointain augmente pour les agrégats (Fig. 2.21, haut), avec la porosité (Fig. 2.21, milieu), l'allongement du grain (Fig. 2.21, bas)
- la dépendance spectrale de cette augmentation dépend de la nature du matériau composant le grain : il est indépendant de la longueur d'onde pour les isolants (a-Sil<sub>Fe/FeS</sub> et a-C:H) mais pas pour les conducteurs (a-C),
- pour les agrégats, l'augmentation du rayonnement IR lointain ne dépend pas de la taille du monomère et sature à partir de six monomères,
- dans le visible et le proche IR, l'opacité des agrégats est similaire à celle de sphères compactes de même masse alors qu'à plus grande longueur d'onde, elle se rapproche de celle des grains poreux,
- pour les silicates, le spectre dans le moyen IR à 18  $\mu\text{m}$  est plus sensible aux effets de structure du grain qu'à 10  $\mu\text{m}$  (Fig. 2.22).

Ainsi, les propriétés optiques de la poussière, du visible à l'IR lointain, dépendent fortement de la composition, de la taille et de la structure des grains. Cette étude apporte des premières considérations sur les propriétés des grains aux structures plus complexes pouvant jouer des rôles dans des milieux denses et irradiés comme les disques protoplanétaires.

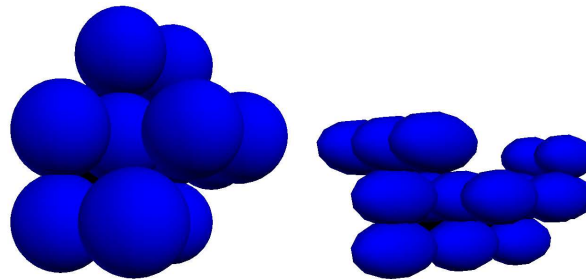


FIGURE 2.20 – Deux exemples de formes d'agrégats (échelles arbitraires). A gauche : agrégat composé de  $N = 12$  monomères sphériques compacts avec un  $a = 0.1 \mu\text{m}$ . A droite : agrégat composé de  $N = 16$  monomères sphéroïdes allongés compacts avec un  $a = 0.05 \mu\text{m}$  et un rapport d'aspect de 2. (Source : YSARD et al. 2018; Fig. 2)

13. *Discrete-Dipole Approximation*

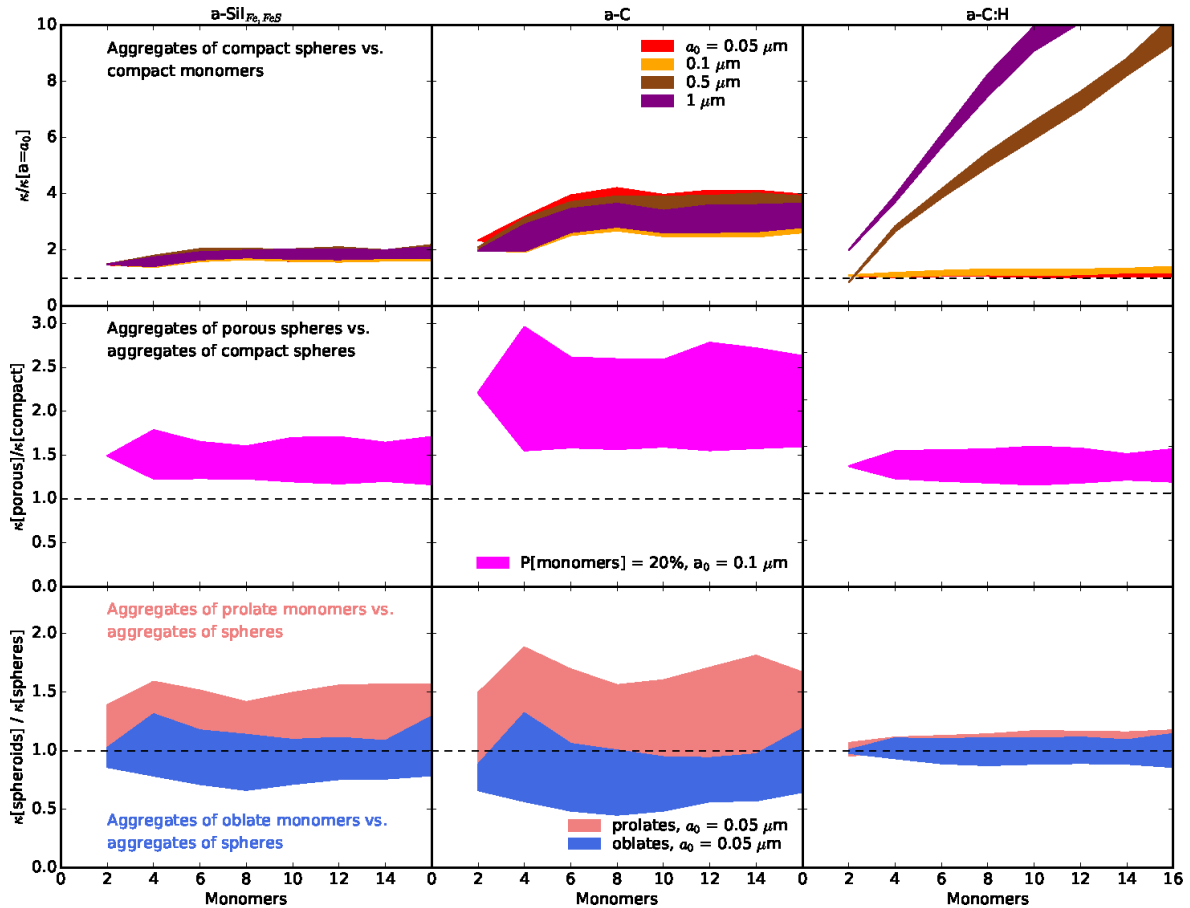


FIGURE 2.21 – Opacités massiques à 250  $\mu\text{m}$  normalisées des  $a\text{-Si}_{\text{Fe/FeS}}$  (gauche),  $a\text{-C}$  (milieu) et  $a\text{-C:H}$  (droite) en fonction du nombre de monomères  $N$  composant les agrégats. Haut :  $\kappa(a_0, N)$  pour des sphères de rayon  $a_0 = 0.05$  (rouge), 0.1 (orange), 0.5 (brun) et 1  $\mu\text{m}$  (pourpre) normalisé à  $\kappa(a_0, 1)$ . Milieu :  $\kappa(a_0 = 0.1 \mu\text{m}, N, P = 20\%)$  normalisé à  $\kappa(a_0 = 0.1 \mu\text{m}, N, P = 0\%)$ . Bas :  $\kappa(\text{monomères aplatis}, N)$  en bleu et  $\kappa(\text{monomères allongés}, N)$  en rose normalisé à  $\kappa(\text{monomères sphériques}, N)$ . Les zones remplies montrent la dispersion des opacités massiques pour dix formes d'agrégats choisies au hasard. (Source : [YSARD et al. 2018](#); Fig. 11)

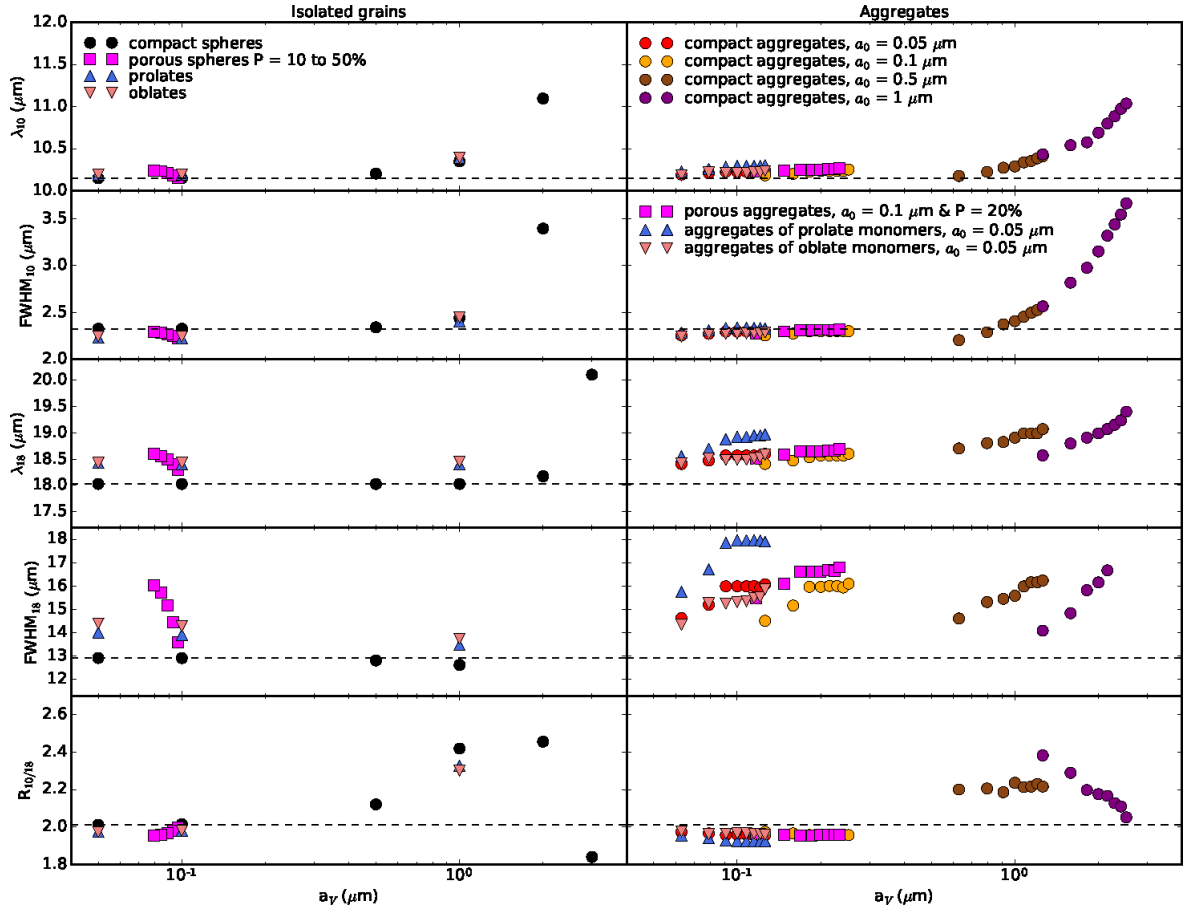


FIGURE 2.22 – Positions des centres de bandes à 10 et 18  $\mu\text{m}$ ,  $\lambda_{10}$  et  $\lambda_{18}$  (première et troisième rangées), largeurs à mi-hauteur,  $\text{FWHM}_{10}$  et  $\text{FWHM}_{18}$  (deuxième et quatrième rangées), et rapports des opacités massiques des a-Sil dans l'IR,  $R_{10/18}$  (rangée inférieure), pour des grains isolés (gauche) et des agrégats (droite).  $\lambda$ , FWHM et  $R_{10/18}$  sont tracés pour des sphères compactes (cercles noirs), des sphères poreuses (carrés fuchsia), des grains allongés (triangles bleus), des grains aplatis (triangles corail) et des agrégats de sphères compactes avec  $a_0 = 0.05$  (cercles rouges), 0.1 (cercles orange), 0.5 (cercles bruns), 1  $\mu\text{m}$  (cercles violets), agrégats de sphères poreuses avec  $P = 20\%$  et  $a_0 = 0.1$   $\mu\text{m}$  (carrés fuchsia), agrégats de monomères avec  $a_0 = 0.05$   $\mu\text{m}$ , allongés (triangles bleus) et aplatis (triangles corail). Les lignes pointillées horizontales noires indiquent les valeurs de  $\lambda$ , FWHM et  $R_{10/18}$  de la plus petite sphère compacte isolée. (Source : YSARD et al. 2018; Fig. 12)



## Chapitre 3

# Émission des nano-poussières carbonées dans les disques protoplanétaires : les composants aliphatiques-aromatiques

### Sommaire

---

<a href="#">3.1 Résumé</a> . . . . .	90
<a href="#">3.2 Réduction des données NaCo</a> . . . . .	92
<a href="#">3.3 Papier</a> . . . . .	95
<a href="#">3.4 Variation du rapport 3.4/3.3 en fonction de <math>G_0/n_H</math></a> . . . . .	112

---

Accès direct aux chapitres [1](#), [2](#), [3](#), [4](#), [conclusion](#)



### 3.1 Résumé

Ce chapitre présente les résultats issus des observations spectroscopiques dans le proche IR obtenues avec l'instrument NAOS<sup>1</sup> CONICA<sup>2</sup> (NaCo) au VLT de disques protoplanétaires autour d'étoiles Herbig. Comme nous l'avons vu dans les chapitres précédents, la gamme de longueur d'onde 3-4  $\mu\text{m}$  montre des signatures associées aux nano-grains de poussière carbonée qui sont particulièrement sensibles à la taille et à la composition de ceux-ci. Ces nano-grains, chauffés stochastiquement, permettent de sonder la surface du disque.

#### Disques observés

Les observations traitées ici sont celles de quatre disques protoplanétaires (pré-)transitionnels entre disques riches en gaz et disques de débris pauvres en gaz orbitant autour d'étoiles Herbig Ae/Be. Les quatre disques présentent un évasement (MEEUS et al. 2001). L'émission à grande longueur d'onde et la diffusion dans le proche IR des gros grains révèlent des gaps, anneaux et spirales dans le plan médian des disques. Notamment, chaque disque présente au moins un disque interne s'étendant jusqu'à quelques *au*, un gap d'une dizaine d'*au*, puis un disque externe pouvant s'étendre jusqu'à plusieurs centaines d'*au* (Voir Annexe A de l'article). La formation de planètes est envisagée pour expliquer la présence de gaps, en particulier autour de HD 100546 (QUANZ et al. 2015, CURRIE et al. 2015) et HD 169142 (BILLER et al. 2014, REGGIANI et al. 2014, OSORIO et al. 2014).

Ces disques ont été observés à différentes longueurs d'onde avec ISO, Spitzer et depuis le sol et montrent des signatures aromatiques et probablement aliphatiques (MEEUS et al. 2001, ACKE et VAN DEN ANCKER 2004, SLOAN et al. 2005, HABART et al. 2006, GEERS et al. 2007, KELLER et al. 2008, ACKE et al. 2010, SEOK et LI 2017). Des silicates cristallins et amorphes sont détectés dans HD 100546 (HU et al. 1989) et HD 179218 (BOUWMAN et al. 2001, SCHÜTZ et al. 2005, VAN BOEKEL et al. 2005), respectivement. La table 2 de l'article résume les caractéristiques des disques observés.

#### Observations et réduction des données

Les observations ont été réalisées en utilisant une longue fente en bande L entre 3.20 et 3.76  $\mu\text{m}$ . La projection de la fente sur le ciel couvre une zone de 28" de long par 0.086" de large qui correspond à la limite de diffraction (Fig. 3.1). La résolution spectrale de NaCo est de  $\sim 1000$ . L'acquisition a été faite pour plusieurs positions de la fente, une centrée sur l'étoile et les autres décalées d'une demi-largeur de fente à chaque nouvelle position. Ainsi, sept ou neuf positions de fentes ont permis d'extraire des spectres pour des surfaces de 2"  $\times$  0.258" ou 2"  $\times$  0.354" centrées sur l'étoile, respectivement. La référence du jeu de données est 075.C-0624(A)<sup>3</sup>.

Les observations spectroscopiques proche IR depuis le sol ont nécessité l'utilisation d'une technique standard de *chopping/nodding* (cf Sect. 3.2) pour corriger les contributions atmosphériques et instrumentales. Les bandes telluriques ont été utilisées pour calibrer les données en longueur d'onde puis soustraites des données en utilisant les observations d'étoiles standards durant chaque acquisition. Un facteur d'échelle a été appliqué au spectre de l'étoile standard pour compenser la masse d'air et optimiser la soustraction des bandes telluriques. Les différents points de la réduction sont discutés dans la section suivante 3.2.

#### Résultats

Ce travail focalisant sur l'émission dans les bandes proche IR des nano-grains carbonés, nous avons soustrait le continuum sous-jacent des spectres extraits de chaque pixel. Un cube de données ayant jusqu'à 360 spectres pour un objet, nous avons automatisé la méthode de soustraction en utilisant un polynôme d'ordre 3 considérant l'intensité à 3.2  $\mu\text{m}$ , la gamme 3.6-3.7  $\mu\text{m}$

---

1. *Nasmyth Adaptive Optics System*

2. *Near-Infrared Imager and Spectrograph*

3. [https://archive.eso.org/wdb/wdb/eso/sched\\_rep\\_arc/query?progid=075.C-0624\(A\)](https://archive.eso.org/wdb/wdb/eso/sched_rep_arc/query?progid=075.C-0624(A))

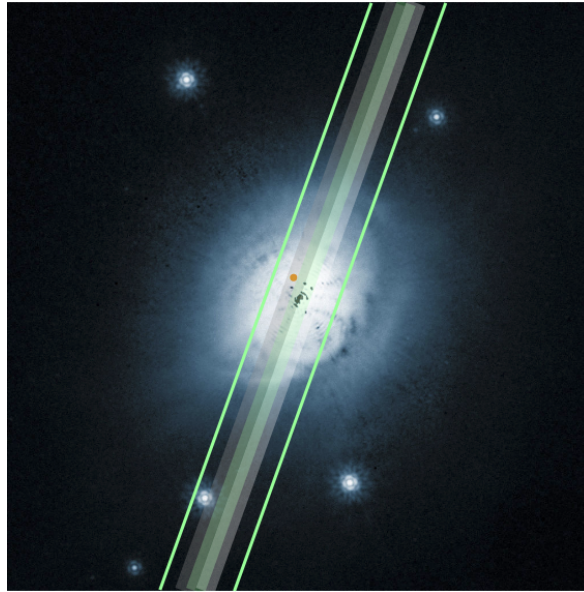


FIGURE 3.1 – Représentation de la projection de la longue fente sur le ciel. Dans le cas de HD 100546 comme ici, la fente est alignée selon le grand axe du disque. Trois différentes positions de fentes sont représentées en transparence par les rectangles. Credit : ESO/NASA/ESA/Ardila et al.

dans laquelle les a-C(:H) n'ont pas de signature spectrale et l'intensité à  $3.35 \mu\text{m}$  pour contraindre le polynôme. Les spectres obtenus (Fig. 2 du papier) sont similaires pour les quatre disques : la bande aromatique à  $3.3 \mu\text{m}$ , des bandes aliphatiques dans la région  $3.4\text{-}3.6 \mu\text{m}$  et les lignes de recombinaison de l'hydrogène Pfund 9 et 8 à  $3.297$  et  $3.741 \mu\text{m}$ .

Pour interpréter la forme et l'évolution des signatures, nous avons considéré que leur largeur était due à des processus variés et hétérogènes, nous conduisant ainsi à utiliser une méthode de décomposition en gaussiennes pour reproduire le signal. La discussion des expériences de laboratoire dans la section 2 de l'article sur les signatures, leur origine et leur variabilité nous a amené à considérer huit gaussiennes : une associée à la signature aromatique à  $3.3 \mu\text{m}$ , cinq pour les signatures aliphatiques dans la région  $3.4\text{-}3.6 \mu\text{m}$ , deux pour les lignes de recombinaison de l'hydrogène. Le résultat de cette décomposition est illustré dans la figure 3 du papier.

1. les signatures liées aux matériaux aromatiques et aliphatiques sont observées sur une large gamme spatiale autour des étoiles centrales (d'environ  $\sim 10$  à  $100 \text{ au}$ ), même si les parties les plus internes des disques restent inaccessibles aux observations (Fig. 2 du papier).
2. Les différentes conditions de rayonnement UV d'un disque à l'autre et la corrélation des intensités des signatures aliphatiques et aromatiques plaident en faveur de nano-grains chauffés stochastiquement comme porteurs de celles-ci (Fig. 4 du papier).
3. Les faibles variations des rapports de bandes aliphatique/aromatique en fonction de la distance à l'étoile (Fig. 5 du papier) vont dans le sens d'une composition relativement stable des grains. De plus, les liaisons aliphatiques étant plus fragiles que les liaisons aromatiques, ces faibles variations des rapports suggèrent une mécanisme de renouvellement continu à la surface des disques. Ceci est appuyé par le fait que des nano-grains de taille comparable sont observés dans l'ensemble des disques, alors que les plus petits grains devraient être détruits dans les zones les plus fortement irradiées. La photo-fragmentation et les collisions de grains plus gros pourraient expliquer ce renouvellement.
4. Les rapports de bandes  $3.4/3.3$  observés dans les disques sont comparables à ceux observés dans les PDR (Fig. 7 du papier) et semblent dépendre non seulement de la résistance aux UV lointains, mais aussi de la densité du gaz.

5. Les variations de la position du centre de bande et de la largeur de la bande à  $3.3 \mu\text{m}$  (Fig. 6 du papier) suggèrent que la signature est la résultante de plusieurs composantes : aromatique et oléfinique. Les variations observées dépendent toutefois du disque considéré et restent à confirmer.
6. Les rapports des bandes IR sont bien reproduits avec THEMIS pour une population de nano-grains avec  $E_g = 0.1 \text{ eV}$  et  $a_{\text{min}} = 0.4\text{-}0.5 \text{ nm}$  (Fig. 9 du papier).

## 3.2 Réduction des données NaCo

L'observation au sol dans l'IR est affectée par la transmission atmosphérique (Fig. 3.2), les températures des instruments utilisés et des couches atmosphériques et les turbulences dues aux déplacements de masses d'air. La considération de ces effets permet la mise en œuvre de techniques et de méthodes pour les limiter.

Si la limite de diffraction du VLT est  $\lambda/D = 0.057''$ , la résolution spatiale est fortement limitée par les turbulences qui sont caractérisées par, d'une part, le paramètre de Fried  $r_0$  tel que  $\lambda/r_0 \sim 0.7''$  où  $r_0 \propto \lambda^{6/5}$ , et d'autre part, leur temps de corrélation  $\tau_0$ , relié à  $r_0$  et à la vitesse des masses d'air. Typiquement,  $r_0=60 \text{ cm}$  et  $\tau_0 \sim 60 \text{ ms}$  à  $2.2 \mu\text{m}$  pour un vent de  $10 \text{ m/s}$ . L'instrument d'optique adaptative NAOS permet de limiter les effets des turbulences en adaptant la courbure du miroir en temps réel en mesurant les déformations du front d'onde.

Ainsi la performance de l'optique adaptative dépend des conditions d'observations liée à la qualité de la visibilité ou *seeing*, qui correspond à la largeur à mi-hauteur de la PSF<sup>4</sup>, à la luminosité et la distance de la source observée. Un dernier paramètre permettant de caractériser la qualité de l'observation est le ratio de Strehl (SR) qui correspond à la quantité de lumière contenue dans la limite de diffraction par rapport au flux total. Lorsque les conditions sont bonnes, SR peut atteindre 30% et la PSF résultante est proche de la limite de diffraction.

L'eau  $\text{H}_2\text{O}$ , le dioxyde de carbone  $\text{CO}_2$ , le méthane  $\text{CH}_4$  et les autres espèces chimiques dans l'atmosphère présentent des modes de vibrations dans l'IR dont les signatures, les bandes telluriques, contribuent à limiter la transmission dans cette gamme de longueur d'onde (Fig. 3.2). Il est essentiel de les éliminer de l'analyse des observations. De plus, la température des différentes couches atmosphériques et des instruments affectent les observations. Leur contribution est éliminée grâce à une méthode standard de *chopping/nodding*. Celle-ci consiste à observer la source en alternant la position du miroir secondaire (*chopping*) pour produire des images de la source à deux positions. La soustraction de la seconde image B de la première A produit une nouvelle image de laquelle le ciel est soustrait et avec la source en positif et en négatif. Le *chopping* du miroir secondaire doit être compensé par le *nodding* du télescope, c'est-à-dire le décalage dans la direction opposée, pour limiter les forts résidus sur le détecteur liés aux chemins optiques différents.

Les différentes étapes de la réduction des données, ou de la transformation des données brutes en données exploitables et analysables suivent une méthode standard : *flat fielding*, calibration, ABBA, correction tellurique, . Le "livre de cuisine" de réduction des données NaCo<sup>5</sup> fournit des éléments de méthodes pour la réduction. Les blocs de données utilisés sont issues des observations présentées en section 3.1 et dans le papier (section suivante).

Pour chaque jeu de données, la source est observée quatre fois pour une position de fente selon le motif A1, B1, B2, A2. Puis la fente est décalée d'une demi-largeur. Selon l'objet observé, 7 ou 9 positions de la fente sont utilisées. Ainsi, en sortie, 28 ou 36 fichiers de l'objet sont produits. Pour chaque bloc, une étoile standard, proche et de même type stellaire, est observée et permet de corriger les bandes telluriques. Des champs plats (*flat fields*), illuminés ou dans l'obscurité, sont mesurés pour corriger les défauts du détecteur.

---

4. *Point Spread Function*

5. [https://www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/naco/doc/VLT-MAN-ESO-14200-4038\\_v0.pdf](https://www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/naco/doc/VLT-MAN-ESO-14200-4038_v0.pdf)

En résumé, dans un premier temps, la calibration en longueur d'onde est faite à partir de l'image combinée de toutes les images :

- création du champ plat, le *flat*,
- combinaison de toutes les images *im* de l'objet, *im\_comb*,
- *im\_comb/flat*,
- suppression des pixels défectueux,
- soustraction du ciel avec un polynôme d'ordre 4,
- identification des bandes caractéristiques pour calibrer les données en longueur d'onde,
- correction des distorsions instrumentales (polynôme de Legendre),

Il s'agit ensuite d'appliquer la calibration aux images individuelles afin d'en extraire les spectres à analyser. Pour cela, les étapes suivantes sont appliquées pour chaque position de fente (Fig. 3.3) :

- A1-B1 et B2-A2,
- division par le *flat*,
- calibration en longueur d'onde en utilisant la calibration réalisé précédemment,
- multiplication des images par -1,
- combinaison des lignes positives des images.

A cette étape, on obtient donc des images de l'objet pour chaque position de fente. Les spectres sont extraits de l'image en considérant une certaine ouverture (i.e. nombre de pixels) et une fonction spline adaptée à la trace du spectre sur l'image du capteur. Une méthode similaire est appliquée pour les images des étoiles standards.

La dernière étape consiste à corriger les bandes telluriques des spectres. Pour cela, le spectre combiné de l'objet est divisé par celui de l'étoile standard. Tenant compte du fait qu'un décalage en longueur d'onde lors de la calibration peut exister entre les spectres de l'étoile standard et de l'objet, et de la différence de valeur de la masse d'air, une correction est apportée au spectre de l'étoile standard :

$$I_{\lambda_i_{corr}}^{std} = I_{\lambda_j}^{std^s} \quad (3.1)$$

avec  $\lambda_i, j$ , la position de  $\lambda$  dans le vecteur des abscisses, et  $s$  un facteur de correction de la masse d'air. En pratique,  $i - 5 < j < i + 5$  et  $0.1 < s < 2$ . Pour un décalage donné, l'écart-type est calculé pour toute la gamme de valeurs de  $s$  dans une zone de spectre sans signature. La valeur  $s$  correspondant au minimum de l'écart-type est sélectionné. Enfin, la fonction de correction donnée par le rapport du spectre corrigé sur le spectre non corrigé de l'objet est appliquée à l'ensemble des spectres. La figure 3.4 montre le spectre combiné corrigé. On constate qu'une raie tellurique vers  $3.3 \mu\text{m}$  persiste.

Le jeu de données de référence 075.C-0624(A) contient de deux à quatre blocs de données par objet correspondant à différentes dates d'observations et différentes orientations de la fente. Seul le bloc présentant les meilleures conditions d'observations a été retenu pour l'analyse faite dans le papier (section suivante).

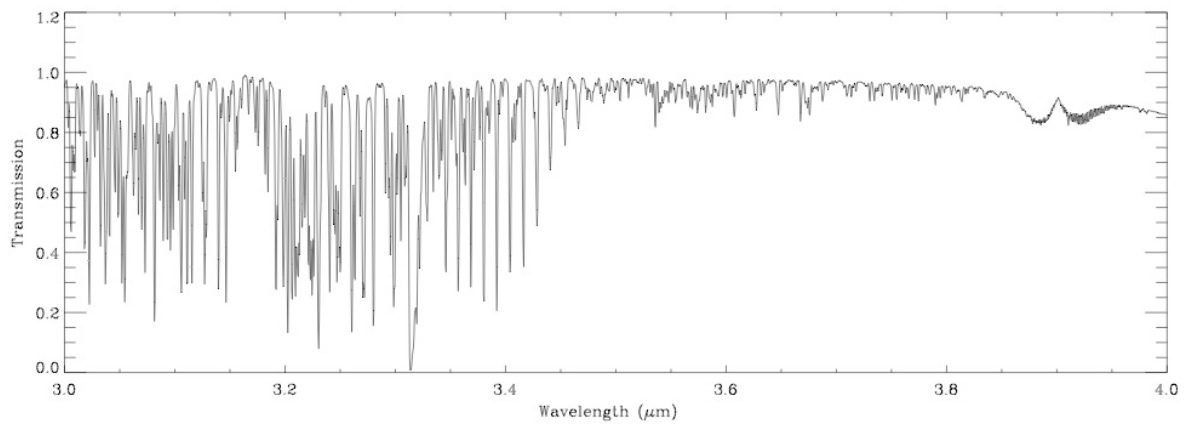


FIGURE 3.2 – Modèle de la transmission atmosphérique entre 3 et 4  $\mu\text{m}$  pour une densité de colonne de vapeur d'eau de 1.6 mm et de masse d'air 1. Source : Fig. 3.2 du manuel utilisateur NaCo<sup>(a)</sup> basé sur le travail de LORD (1992).

<sup>(a)</sup>[https://www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/naco/doc/VLT-MAN-ESO-14200-2761\\_v99.pdf](https://www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/naco/doc/VLT-MAN-ESO-14200-2761_v99.pdf)

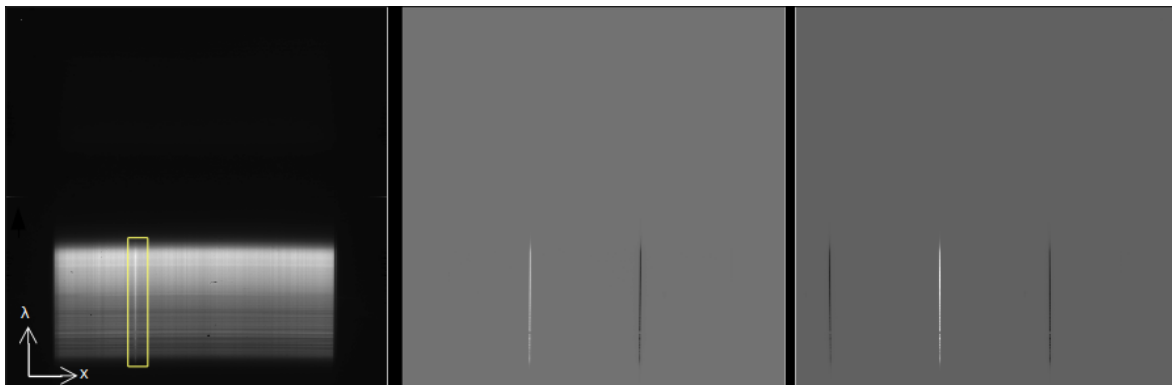


FIGURE 3.3 – Cycle de ABBA de la réduction des données. *Gauche* : Image des données brutes. L'axe vertical  $\lambda$  correspond à la dimension spectrale de l'image. L'axe horizontal  $x$  est pour la dimension spatiale. La trace de l'étoile est la indiqué par le cadre jaune. *Milieu* : Combinaison A - B. Les traces de l'étoile apparaissent en positif (clair) et négatif (sombre). *Droite* : Combinaison ABBA des traces positives. Deux traces en négatif persistent.

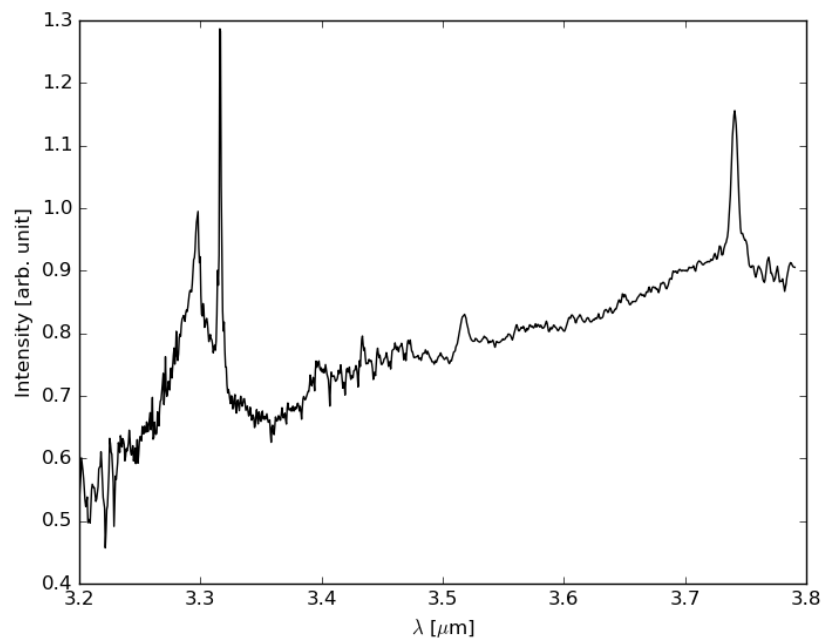


FIGURE 3.4 – Spectre combiné, réduit et corrigé de HD 100546 (avec continuum).

### 3.3 Papier

# Carbonaceous nano-dust emission in proto-planetary discs: the aliphatic-aromatic components<sup>★</sup>

T. Boutéraon<sup>1</sup>, E. Habart<sup>1</sup>, N. Ysard<sup>1</sup>, A. P. Jones<sup>1</sup>, E. Dartois<sup>2</sup>, and T. Pino<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institut d'Astrophysique Spatiale (IAS), UMR 8617-CNRS, Université Paris Sud, 91405 Orsay, France

<sup>2</sup> Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), CNRS, Université Paris Sud, Université Paris-Saclay, 91405 Orsay, France  
e-mail: thomas.bouteraon@ias.u-psud.fr

Received 3 August 2018 / Accepted 17 January 2019

## ABSTRACT

**Context.** In the interstellar medium, carbon (nano-)grains are a major component of interstellar dust. This solid phase is more vulnerable to processing and destruction than its silicate counterpart. It exhibits a complex, size-dependent evolution that is due to interactions within different radiative and dynamical environments. Infrared signatures of these carbon nano-grains are seen in a large number of discs around Herbig HAeBe stars.

**Aims.** We probe the composition and evolution of carbon nano-grains at the surface of (pre-)transitional proto-planetary discs around Herbig stars.

**Methods.** We present spatially resolved infrared emission spectra obtained with the Nasmyth Adaptive Optics System (NAOS) Near-Infrared Imager and Spectrograph (CONICA) at the Very Large Telescope (VLT) in the 3–4  $\mu\text{m}$  range with a spatial resolution of 0.1", which allowed us to trace aromatic, olefinic, and aliphatic bands that are attributed to sub-nanometer hydrocarbon grains. We applied a Gaussian fitting to analyse the observed spectral signatures. Finally, we propose an interpretation in the framework of the The Heterogeneous dust Evolution Model of Interstellar Solids (THEMIS).

**Results.** We show the presence of several spatially extended spectral features that are related to aromatic and aliphatic hydrocarbon material in discs around Herbig stars, from ~10 to 50–100 au, and even in inner gaps that are devoid of large grains. The correlation and constant intensity ratios between aliphatic and aromatic CH stretching bands suggests a common nature of the carriers. Given their expected high destruction rates through UV photons, our observations suggest that they are continuously replenished at the disc surfaces.

**Key words.** protoplanetary disks – infrared: planetary systems

## 1. Introduction

Carbonaceous dust is a major component of the solid matter in the interstellar medium (ISM). It is observed in a wide variety of environments in emission and extinction. Much more sensitive to energetic events than its silicate counterpart, carbonaceous dust has been shown to be highly processed in UV-irradiated regions and in shocks (e.g., Jones 1990; Dartois et al. 2004a,b; Pino et al. 2008; Mennella 2008; Godard et al. 2011; Micelotta et al. 2010a,b). It is thus expected to be sensitive to the local physical conditions in the environments where it is observed. Processing of carbonaceous dust is expected to be reflected in the aromatic and aliphatic near- to mid-IR emission bands that are attributed to sub-nanometer polycyclic aromatic hydrocarbon-like molecules (PAHs; Leger & Puget 1984) or hydrogenated amorphous carbons (a-C:H; Jones 1990, and references therein). a-C:(H) materials, which includes both H-poor a-C and H-rich a-c:H, are a broad family of compounds that include various proportions of polyaromatic units of various sizes that are linked by olefinic and aliphatic bridges. These components, when observed in emission, which are associated with the aromatic phase, should thus exhibit a series of bands between 3.4 and 3.6  $\mu\text{m}$ , in addition to the aromatic 3.3  $\mu\text{m}$  band (e.g. Geballe et al. 1985; Jourdain de Muizon et al. 1990a,b;

Joblin et al. 1996; Goto et al. 2003; Pilleri et al. 2015), as well as bands at 6.9 and 7.3  $\mu\text{m}$  (Pino et al. 2008; Carpentier et al. 2012).

Aromatic infrared bands (AIBs) have been observed using the Infrared Space Observatory (ISO), *Spitzer*, AKARI, and ground-based observations towards proto-planetary discs around pre-main-sequence stars (e.g. Brooke et al. 1993; Meeus et al. 2001; Acke & van den Ancker 2004; Habart et al. 2004; Sloan et al. 2005; Geers et al. 2006, 2007a,b; Keller et al. 2008; Acke et al. 2010; Maaskant et al. 2014; Seok & Li 2017). Based on *Spitzer* data, the detection rate is ~70% in Herbig Ae stars, ~50% in Herbig Be stars (Acke et al. 2010), and ~10% in T Tauri stars (Furlan et al. 2006; Geers et al. 2006). AIBs are detected only towards a few debris discs (Chen et al. 2006a). Furthermore, mid-IR bands attributed to C–H aliphatic bonds at 6.9 and 7.3  $\mu\text{m}$  have been observed in ~55% of Herbig stars (Acke et al. 2010). The study of the aromatic/aliphatic band ratio in the mid-IR *Spitzer* spectra (Acke et al. 2010) suggests that strong UV fluxes reduce the aliphatic component and magnify the spectral signature of the aromatic molecules in the IR spectra. However, dehydrogenation caused by UV photons (Muñoz Caro et al. 2001) also reduces the C–H aromatic signatures. Finally, fullerenes have been detected in one disc (Roberts et al. 2012).

Bands between 3.4 and 3.6  $\mu\text{m}$  have also been detected in some Herbig Ae/Be (HAeBe) stars (e.g. Acke & Van den Ancker 2006; Habart et al. 2006). A few of them (two to three) show peculiar strong features that peak at 3.43 and 3.53  $\mu\text{m}$  (e.g. Blades & Whittet 1980; Guillois et al. 1999;

<sup>★</sup> The reduced spectra (Fig. 2) are only available at the CDS via anonymous ftp to [cdsarc.u-strasbg.fr](http://cdsarc.u-strasbg.fr) (130.79.128.5) or via <http://cdsarc.u-strasbg.fr/viz-bin/qcat?J/A+A/623/A135>

Van Kerckhoven et al. 2002. With adaptive optics high angular resolution spectroscopic observations of the HAeBe star HD 97048 and Elias 1, the emission in the strong features at 3.43 and 3.53  $\mu\text{m}$  was spatially resolved (Habart et al. 2004; Goto et al. 2009). Several studies have proposed attributing these features to surface C–H stretching modes on 10–50 nm or larger diamond particles (e.g. Guillois et al. 1999; Sheu et al. 2002; Jones et al. 2004; Piralì et al. 2007). On the other hand, some discs show relatively weak but distinguishable features between 3.4 and 3.6  $\mu\text{m}$  at 3.40, 3.46, 3.51, and 3.56  $\mu\text{m}$  (e.g. Sloan et al. 1997), which may be attributed to aliphatic components. These features were also detected towards photo-dissociation regions (PDRs) in star-forming regions, reflection nebulae, and (proto-)planetary nebulae (e.g. Geballe et al. 1985; Jourdain de Muizon et al. 1990a,b; Joblin et al. 1996; Goto et al. 2003; Pilleri et al. 2015). Towards a proto-planetary nebula, Goto et al. (2003) found that the relative intensity of the aliphatic feature at 3.4  $\mu\text{m}$  to the aromatic feature at 3.3  $\mu\text{m}$  decreases with the distance from the star. They suggested that thermal processing is likely to account for the spectral variation that reflects the history of the planetary nebula. Towards the NGC 7023 north-west PDR, Pilleri et al. (2015) traced the evolution of the 3.3 and 3.4  $\mu\text{m}$  bands. They showed that the intensity of the 3.3  $\mu\text{m}$  band relative to the total PAH emission increases with the UV flux, while the relative contribution of the 3.4  $\mu\text{m}$  band decreases with the UV flux. The UV photo-processing of very small grains that leads to PAHs with attached aliphatic sidegroups in the lower UV flux region, which then become PAHs in the higher UV flux region, was suggested to explain the spectral variation. Variations in the ratio of the 3.3 to 3.4 micron bands raise the question of the nature and stability of the carriers of these bands and of their excitation mechanisms as a function of the local physical conditions.

It is therefore important to study the aromatic and aliphatic bands in proto-planetary discs, where the carbon nano-grains are likely highly processed, to understand the mechanisms at work on carbon dust. Photo-induced processes may be important at the disc surfaces. Carbon nano-grains, which escape settling, are very well coupled to the gas in the upper disc layers. The AIBs emission arises from the very thin upper disc surface layers that are penetrated by UV photons from the central star, which can be interpreted as a PDR. Because of the stochastic heating mechanism, the emission in the bands is spatially extended (e.g. Habart et al. 2006) and thus enables probing the composition of the disc surface material over large distances, as well as the disc geometry. High AIBs-to-stellar luminosity ratios are observed in targets with a flared disc (e.g. Meeus et al. 2001; Habart et al. 2004; Keller et al. 2008; Acke et al. 2010). Observations of AIBs provide one of the most striking indications for flared discs around HAeBe stars (e.g. Lagage et al. 2006; Berné et al. 2015). Furthermore, AIBs have been detected in the inner disc cavities, where on-going planet formation could have started (e.g. Geers et al. 2007a; Maaskant et al. 2013, 2014; Kraus et al. 2013; Schworer et al. 2017). Recently, near-IR interferometric observations of HAeBe stars tracing the inner part of the warm dusty discs revealed unusually extended near-IR emission (out to  $\sim 10$  au Klarmann et al. 2017; Kluska et al. 2018). This suggests stochastically heated very small (sub-)nanometer grains in the inner disc parts. Finally, similarly as in PDRs, carbon nano-grains could play a key role in gas heating through photoelectric effects and might thus influence the vertical disc structure (e.g. Meeus et al. 2012). Because of their very large effective surface area, nano-grains are also expected to play an important role in the formation of key molecules (e.g.  $\text{H}_2$ , hydrocarbon molecules)

and charge balance. A better knowledge of them is therefore essential to understand disc physics and chemistry.

This study focuses on the near-IR emission between 3 and 4  $\mu\text{m}$  of spatially resolved spectra around young Herbig stars that are orbited by a proto-planetary disc and have been observed with the Nasmyth Adaptive Optics System (NAOS) Near-Infrared Imager and Spectrograph (CONICA; NaCo) at the Very Large Telescope (VLT) in Chile. This is the first study of spatially resolved weak bands in the 3 to 4  $\mu\text{m}$  range in proto-planetary discs. Our aim is to use the aromatic and aliphatic signatures that are detected at the disc surfaces to characterise the size and composition of the sub-nanometer carbonaceous grains. In Sect. 2 we discuss the diversity of the carbonaceous signatures. In Sect. 3 we present the astrophysical parameters and main characteristics of the observed discs. In Sect. 4 we describe the observations and data reduction. In Sect. 5 we present the observational results, the fitting method for the spectral signatures, and the identified bands. In Sect. 6 we briefly describe the THEMIS framework, which is a global model within which dust composition, evolution, and signatures can be analysed. In Sect. 7 we discuss the results and their astrophysical implications.

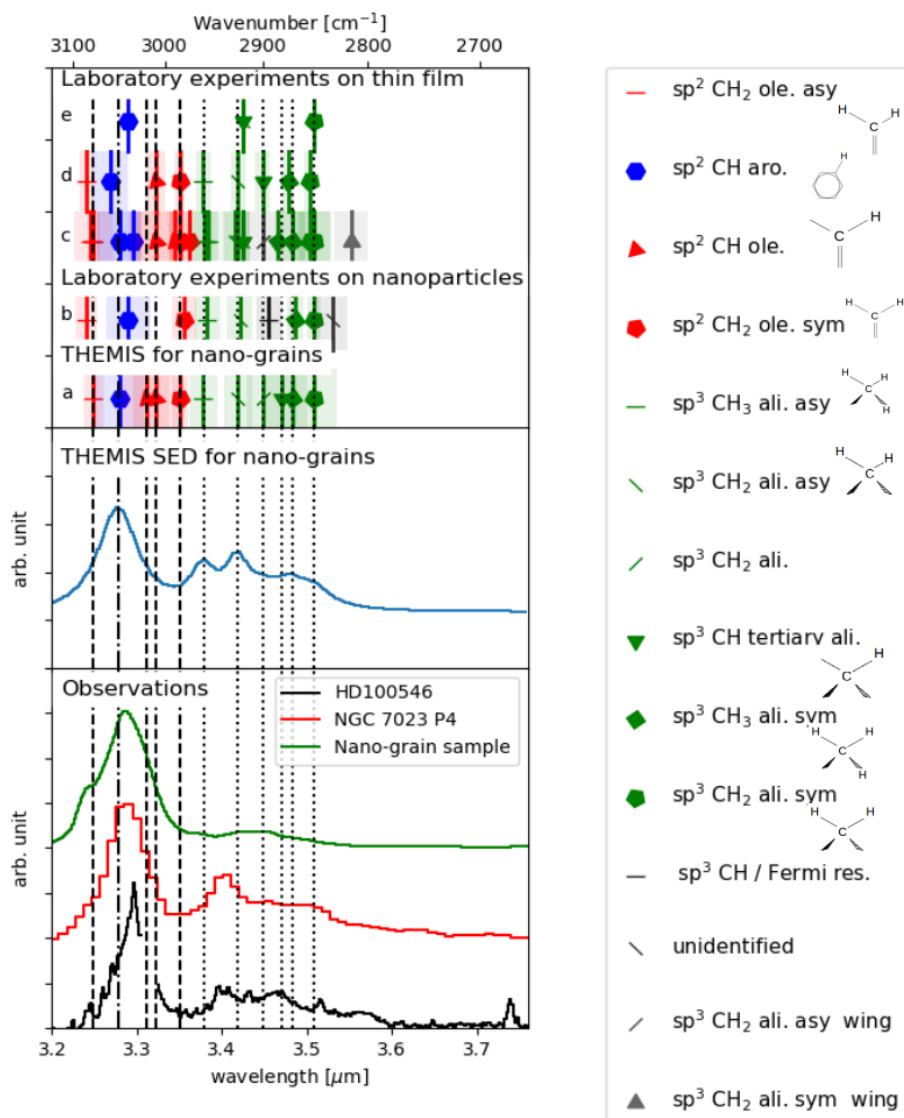
## 2. Variability in carbonaceous signatures

Figure 1 presents the diversity of the features that are related to hydrogenated amorphous carbonaceous (a-C:H) materials in the 3–4  $\mu\text{m}$  near-IR range where C–H stretching vibrational modes are observed. These vibrational modes are particularly interesting because they characterise the bonds between carbon and hydrogen atoms that vary according to their local environment (closest neighbours).

Figure 1 illustrates these variations for the related signatures of two major types of laboratory experiments. Four experiments feature a-C:H deposited on thin-film samples (Dartois et al. 2005, 2004a; Ristein 1998; Dischler 1987), and one experiment focuses on soot nano-grains, which have disordered carbon nano-structures and were produced in flames (Pino et al. 2008). An analysis was made using IR absorption spectroscopy. The experiments of these studies give an overview of the variability in features that are related to carbonaceous materials, and they highlight the difficulty of signature assignments. The assignment of the band origin in the 3.22–3.32  $\mu\text{m}$  range is still quite uncertain because four or five vibrations overlap in this region.

Table 1 lists the assumed signature assignments, their band centre and width ranges, in wavelengths and wavenumbers. These modes correspond to C–H stretching (str) vibrational modes. We distinguish three main types of bonds: aromatics, olefinics, and aliphatics. Representations of these vibration modes are given in Fig. 1. The aromatic band at 3.3  $\mu\text{m}$  corresponds to the vibration of hydrogen bonded to a carbon included in an aromatic cycle and labelled  $\text{sp}^2$  (hybridisation state) CH aromatic (aro.). Its band centre varies from 3.268 to 3.295  $\mu\text{m}$  and its width from 0.005 to 0.057  $\mu\text{m}$ . Olefinic (ole.) modes correspond to the vibration of the CH or  $\text{CH}_2$  group where the carbon atom is engaged in a C=C bond. The  $\text{CH}_2$  asymmetric (asy) mode varies from 3.240 to 3.249  $\mu\text{m}$  with a width between 0.014 and 0.045  $\mu\text{m}$ . It is less variable than its symmetrical (sym) counterpart, for which the band centre varies from 3.350 to 3.396  $\mu\text{m}$  and the width between 0.003 and 0.028  $\mu\text{m}$ . A third olefinic mode involving only the CH group occurs at an intermediate wavelength between 3.311 and 3.344  $\mu\text{m}$  with width variations between 0.008 and 0.062  $\mu\text{m}$ . These modes are





**Fig. 1.** *Top panel:* band centre (line) and width (transparent box) of the spectral signatures related to a-C:H materials obtained in laboratory experiments on thin film or on nano-grains in the mid-IR range where C–H stretching vibrational modes are observed. We show the aromatic compound (blue), olefinic (red) and aliphatic (green) bonds, and other non-assigned signatures (grey). The signatures used in the THEMIS model are based on these experiments and are drawn in row *a*. They are extended by vertical lines for aromatics (dash-dotted), olefinics (dashed), and aliphatics (dotted). *Middle panel:* SED for an H-poor, aromatic-rich grain population from the THEMIS model, calculated with DustEM. *Bottom panel:* characteristic spectrum from our study that shows the whole diversity observed in this range around the Herbig star HD 100546. Spectra from the PDR NGC 7023 (Pilleri et al. 2015) and nanoparticles (Carpentier et al. 2012; related to the study of Pino et al. 2008) are also plotted for comparison. The signatures in the *right panel* are labelled and a schematic view of vibrational modes is given. *a:* Jones et al. (2017), *b:* Pino et al. (2008), *c:* Dartois et al. (2004a), *d:* Ristain (1998), and *e:* Dischler (1987).

related to a  $sp^2$  planar hybridisation, where one carbon atom forms bonds with three other atoms.

Two types of aliphatic (ali.) modes can be distinguished in the CH stretch region: those that originated in the CH<sub>3</sub> and CH<sub>2</sub> functional group, with their asymmetric and symmetric characters. The CH<sub>3</sub> aliph asy mode varies from 3.378 to 3.84  $\mu\text{m}$  and its width varies between 0.008 and 0.033  $\mu\text{m}$ , while the CH<sub>2</sub> aliph asy mode varies from 3.413 to 3.425  $\mu\text{m}$  and its width varies between 0.006 and 0.034  $\mu\text{m}$ . At longer wavelength, the CH<sub>3</sub> aliph sym mode varies from 3.466 to 3.486  $\mu\text{m}$  and its width varies between 0.006 and 0.034  $\mu\text{m}$ , while the CH<sub>2</sub> aliph sym mode varies from 3.503 to 3.509  $\mu\text{m}$  and its width varies between 0.006 and 0.051  $\mu\text{m}$ . A fifth mode related to the aliphatic CH can be found at a wavelength intermediate between symmetric and asymmetric modes. It is labelled tertiary, and its band centre varies from 3.425 to 3.47  $\mu\text{m}$  and its width varies between 0.006 and 0.036  $\mu\text{m}$ . All aliphatic modes have a  $sp^3$  hybridisation in which carbon atoms are bonded to four other atoms.

In the following, observational data are compared to the THEMIS model (Jones et al. 2017, 2013), which takes into account vibrational modes from the thin-film experiments described above. The bands included in THEMIS (assignment

and characteristics) are also plotted in Fig. 1 for comparison. A typical spectrum from the disc observation and spectrum from the PDR NGC 7023 (Pilleri et al. 2015) are also plotted for comparison. Obvious differences between laboratory data, observations, and the model are found. They are discussed in Sect. 6.

### 3. Selected (pre-)transitional discs

Our sample consists of four well-known Herbig Ae/Be stars, all with evidence of a circumstellar disc that is thought to be in transition from a gas-rich proto-planetary disc to a gas-depleted debris disc. The four discs show clear evidence of flaring based on modelling their spectral energy distribution (SED; Meeus et al. 2001), and IR and millimeter interferometry observations (detailed descriptions of the discs and the associated references are given in Appendix A). Furthermore, it has recently become clear that these four discs show many spatial structures, such as annular gaps and rings in the large grain emission distribution near the mid-plane, as seen in millimeter and in the near-IR scattered stellar light by  $\mu\text{m}$  grains. Large-scale spiral arms are also seen in scattered light. In the innermost few astronomical units (au), evidence for a radial gap separating an

**Table 1.** Band centre ( $\lambda_0$ ,  $\nu_0$ ) and FWHM variations in laboratory experiments.

Band	$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	FWHM ( $\mu\text{m}$ )	$\nu_0$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	FWHM ( $\text{cm}^{-1}$ )
sp <sup>2</sup> CH <sub>2</sub> ole. asy str	3.240–3.249	0.014–0.045	3089–3078	13.3–42.4
sp <sup>2</sup> CH aro	3.268–3.295	0.005–0.057	3060–3035	5–53.1
sp <sup>2</sup> CH ole.	3.311–3.344	0.008–0.062	2990–3020	7–56.3
sp <sup>2</sup> CH <sub>2</sub> ole. sym str	3.350–3.396	0.003–0.028	2985–2945	3–25
sp <sup>2</sup> CH <sub>3</sub> ali. asy str	3.378–3.384	0.008–0.033	2960–2955	7–29.3
sp <sup>3</sup> CH <sub>2</sub> ali. asy str	3.413–3.425	0.006–0.034	2930–2920	5–28.9
sp <sup>3</sup> CH tertiary ali./Fermi resonance	3.425–3.47	0.006–0.036	2920–2882	5–30
sp <sup>3</sup> CH <sub>3</sub> ali. sym str	3.466–3.486	0.006–0.034	2885–2869	5–27.8
sp <sup>3</sup> CH <sub>2</sub> ali. sym str	3.503–3.509	0.006–0.051	2855–2850	5–41.8
sp <sup>3</sup> CH <sub>2</sub> ali. sym str wing	3.552	0.039–0.068	2815	31–53.6

inner disc (from  $\sim 0.1$  to few au) and the outer main disc (from  $\sim 10$  to 100 au or more) was found using near- and mid-IR observations. Some of these structures could be tracing on-going planet formation. Planet candidates have been found around two of our discs: HD 100546 (e.g. Quanz et al. 2015; Currie et al. 2015) and HD 169142 (Biller et al. 2014; Reggiani et al. 2014; Osorio et al. 2014). However, as discussed by several authors, the observed disc structures could also result from gravitational perturbations by binary stars, disc dynamical evolution (e.g. gas accretion from the surrounding molecular cloud and local maximum pressure), or dust evolution.

These discs have been observed at different wavelengths using ISO, *Spitzer*, and ground-based spectroscopy, all showing aromatic emission features and possibly aliphatic emission features (Meeus et al. 2001; Acke & van den Ancker 2004; Sloan et al. 2005; Habart et al. 2006; Geers et al. 2007b; Keller et al. 2008; Acke et al. 2010; Seok & Li 2017). In Table 2 we report (i) the astrophysical parameters of each star (spectral type, effective temperature, luminosity, mass, age, distance, and  $G_0$ , i.e., far-UV flux strength at 50 au from the star in terms of the Habing field (Habing 1968), and (ii) the dust spectral characteristics (presence of aromatic and aliphatic features). We also list the strength of the  $3.3 \mu\text{m}$  aromatic emission feature measured from the ISO spectra of Meeus et al. (2001) and Van Kerckhoven et al. (2002). Estimates of the radial spatial extension of the  $3.3 \mu\text{m}$  aromatic emission feature (FWHM) measured from ground-based spatially resolved observations are also reported.

#### 4. Observations and data reduction

Observations were performed using a long slit in the L band, between  $3.20$  and  $3.76 \mu\text{m}$ , with the NaCo at the VLT. The on-sky projection of the slit is  $28''$  long and  $0.086''$  wide, which corresponds to the diffraction limit in this wavelength range. The pixel scale is  $0.0547''$  and the spectral resolution is  $R = \lambda/\Delta\lambda \sim 1000$ . We took several slit positions, one centred on the star, and the other slits shifted by one half-width. Seven or nine positions allowed us to extract spectra on an area centred on the  $2'' \times 0.258''$  or  $2'' \times 0.354''$ , respectively. The long slit was aligned north-south, except for HD 100546. For HD 100546, the long slit was aligned with the major axis of the disc as resolved in scattered light (Augereau et al. 2001; Grady et al. 2001), with a position angle of  $\sim 160$  degrees measured east of north. The integration time per slit was three minutes. The data-set reference is 075.C-0624(A), and observations characteristics are summarised in Table 2.

Ground-based near-IR spectroscopic observations involve the use of a standard procedure to subtract the atmospheric contribution. For each disc, we employed the standard chopping/nodding technique with a throw of  $\sim 9''$  in the north-south direction in order to correct for the atmospheric and instrumental background. Telluric bands due to the atmosphere were used for the wavelength calibration of spectra. They were removed using standard stars observed during each data-set acquisition. To compensate for the airmass variation between the observations of the disc and the standard star, a scaling factor was applied to the standard star spectrum to optimise telluric band subtraction.

#### 5. Results

##### 5.1. Extraction, decomposition, and characteristics of the spectra

For the four discs, spectra were extracted from pixels for each slit on either side of the central star, covering a star-centred area of  $2'' \times 0.258''$  or  $2'' \times 0.354''$ . Because we focused on the carbonaceous dust emission evolution, we extracted the features from the original data by subtracting an underlying continuum. The continuum was subtracted with a polynomial of order three considering ranges where bands are absent, that is, the  $3.6$ – $3.7 \mu\text{m}$  range, and  $3.2 \mu\text{m}$ . The intensity at  $3.35 \mu\text{m}$  was used to constrain the polynomial so that the continuum was not higher than the signal. The spectra show similar structures for the four discs: the  $3.3 \mu\text{m}$  aromatic feature, at least five features between  $3.4$  and  $3.6 \mu\text{m}$  (cf. Fig. 3), and the hydrogen recombination lines Pfund 9 and 8 at  $3.297$  and  $3.741 \mu\text{m}$ .

To interpret the shape and evolution of the features that move away from the central star, we considered a heterogeneous widening, assuming several carriers associated with the same signature, and made a Gaussian decomposition of the spectra based on the experiments discussed in Sect. 2. The size, temperature, structure, and even composition of the various carriers imply that the signature is composed of multiple components. A good approximation of these signatures is thus a series of Gaussian profiles. We used eight Gaussians:

- $3.3 \mu\text{m}$  : related to the C–H stretching mode of aromatics.
- $3.4$ ,  $3.43$ ,  $3.46$ ,  $3.52$ , and  $3.56 \mu\text{m}$ , which most probably are associated with aliphatic materials.
- $3.297$  and  $3.741 \mu\text{m}$ , which are the recombination lines Pfund 9 and 8 of hydrogen.

The decomposition was made on the continuum-subtracted spectra expressed in wavenumber. The initial parameters and their tolerance range are summarised in Table 3. A zoom of the decomposition is presented in Fig. 3.

**Table 2.** Top part: astrophysical parameters of the selected discs. Bottom part: summary of the observations.

	HD 100546	HD 100453	HD 169142	HD 179218
Spec. type	B9Vne	A9Ve	B9V	A0Ve
Temp. (K)	10 500	7600	8250	9640
Lum. ( $L_{\odot}$ )	32	10	8.55	182
$M$ ( $M_{\odot}$ )	2.4	1.8	1.69	3.66
Age (Myr)	>10	15 (10 ?)	6	1.08
$d$ (pc)	109	104	117	245
$G_0$ at 50 au	$4.2 \times 10^6$	$2.4 \times 10^5$	$3.4 \times 10^5$	$1.6 \times 10^7$
$I_{3.3}$ ( $10^{-14}$ W/m <sup>2</sup> )	$2.5 \pm 0.5$	$1.3 \pm 0.2$	$1 \pm 0.2$	$1.7 \pm 0.2$
$FWHM$ (au)	12 (up to 50)	20	43	35
Date	2005/03/26	2005/03/30	2005/05/05	2005/07/14
Airmass	1.56	1.17	1.01	1.32
SR (%)	46	38	37	53
$r_0$ (cm)	16	8	11	14
$L_0$ (m)	25	19	18	17
Seeing (")	0.66	1.17	0.93	0.69

**Notes.** Top part: The standard star used for data reduction is HR6572. We list spectral type, effective temperature, luminosity, mass, and age (Seok & Li 2017). The distance is taken from Gaia Collaboration (2018).  $G_0$  is the far-UV flux strength at 50 au from the star expressed in units of the average interstellar radiation field, i.e.  $1.6 \times 10^{-3}$  erg s<sup>-1</sup> cm<sup>-2</sup> (Habing 1968). The integrated strength of the aromatic 3.3  $\mu$ m feature is taken from Habart et al. (2004). Estimates of the radial spatial extension of the 3.3  $\mu$ m band (FWHM) for HD 100546, HD 100453 and HD 169142 are from Geers et al. (2007b); Habart et al. (2006). FWHM for HD 17918 is derived from this work. Bottom part: SR is the Strehl ratio or coherent energy.  $r_0$  is the Fried parameter.  $L_0$  is the outer scale.

**Table 3.** Initial parameters of the Gaussian decomposition method.

Feature	Band centre (cm <sup>-1</sup> )	Standard deviation (cm <sup>-1</sup> )
3.3 $\mu$ m	$3040 \pm 10$	$25 \pm 10$
3.4 $\mu$ m	$2941 \pm 10$	$15 \pm 5$
3.43 $\mu$ m	$2915 \pm 10$	$10 \pm 5$
3.46 $\mu$ m	$2890 \pm 10$	$15 \pm 5$
3.52 $\mu$ m	$2841 \pm 10$	$15 \pm 5$
3.56 $\mu$ m	$2809 \pm 10$	$20 \pm 10$
H Pfund 9	$3027 \pm 5$	$2.25 \pm 0.3$
H Pfund 8	$2667 \pm 5$	$2.25 \pm 0.3$

We optimised the parameters for each Gaussian using the Powell method. If the amplitude of the 3.3  $\mu$ m band was three times lower than the mean noise of the underlying continuum, the spectrum was excluded. Then, we averaged the spectra according to their distance from the star, considering a step of 0.1", which corresponds to the spatial resolution of the instrument. Figure 2 presents the characteristic spectra according to the distance to the central star. These are normalised to the continuum at 3.2  $\mu$ m and thus show the evolution of the signatures relative to the continuum. The main observation is that all the discs exhibit similar spectral signatures: a 3.3  $\mu$ m aromatic feature, and other features in the 3.4–3.6  $\mu$ m range (Fig. 2).

Figure 3 shows details for one characteristic spectrum. For the 3.3, 3.4, and 3.46  $\mu$ m bands, the FWHMs are similar, but they are narrower for the 3.43 and 3.52  $\mu$ m bands. The FWHM of the 3.56  $\mu$ m band is broader, but the feature is poorly fitted. The hydrogen Pfund recombination lines are very close to their theoretical values, 3.297 and 3.741  $\mu$ m, with a narrow FWHM; this confirms the good wavelength calibration of the data. The decomposition method gives similar results for the other spectra.

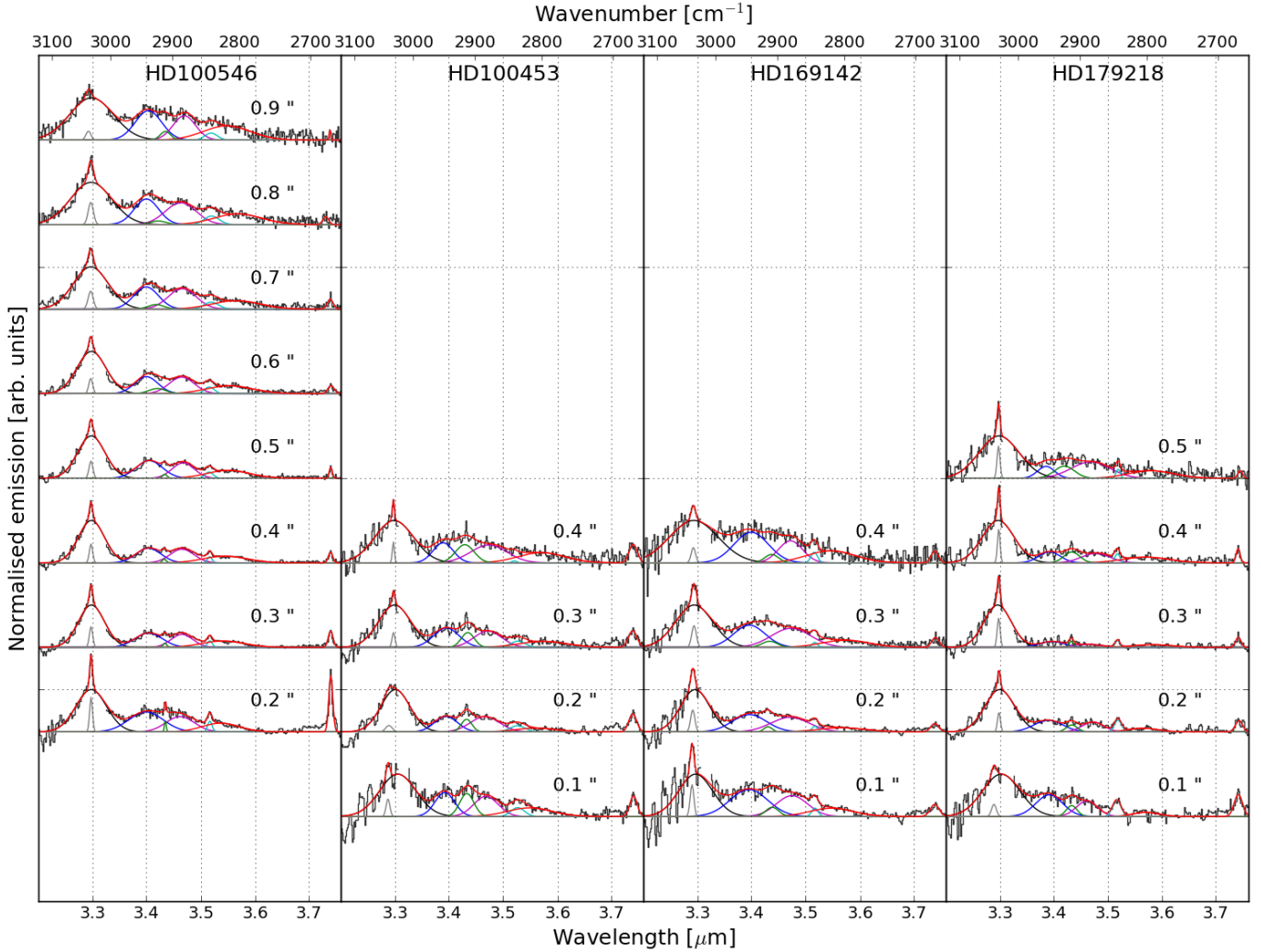
In the following, we focus on similarities and variations of these signatures.

### 5.2. Detection of the bands towards the disc

Aromatic and aliphatic bands are detected in HD 100546 between 0.2 and 0.9" (20–100 au) in the main outer disc (see Fig. 2). In HD 100453, they are seen between 0.1 and 0.4" (10–40 au) to cover an area that includes the gap that extends up to 20 au and the external disc. Likewise, in HD 169142, signatures are detected between 0.1 and 0.4" (10–45 au), which includes part of the two gaps detected between 1 and 20 au and between 30 and 55 au. In HD 179218, bands are detected between 0.1" and 0.5" (30–120 au). A gap exists out to 10 au. The data do not allow us to probe the inner part of the disc. Interestingly, for most of the discs, the IR band carriers seem to be present in the main disc regions and also in the gaps, which is in contrast to the situation for large grains (see references in the Appendix A).

### 5.3. Intensity variations

For each disc, Fig. 4 shows the intensities of each a-C:H emission band between 3.4 and 3.6  $\mu$ m as a function of the intensity in the 3.3  $\mu$ m aromatic band. These values come from the decomposition results of the individual pixel spectra that meet the selection criteria we discussed previously. For HD 100546, HD 100453, and HD 169142, the values are mostly distributed linearly. For HD 179218, the distribution is less clear. The Spearman rank correlation coefficients that describe the monotonic relationship between two variables show a good correlation between the 3.4 to 3.6  $\mu$ m features and the 3.3  $\mu$ m feature. The emission in aromatic and aliphatic bands in this wavelength range is very sensitive to the particle size. Moreover, this spatial correlation suggests that the band carriers are stochastically heated and have a similar size distribution.



**Fig. 2.** NaCo-averaged spectra (black) for different distances from the star in 0.1'' steps. Gaussian decomposition (in red) for each spectrum. Spectra are normalised to the continuum at 3.2  $\mu\text{m}$ .

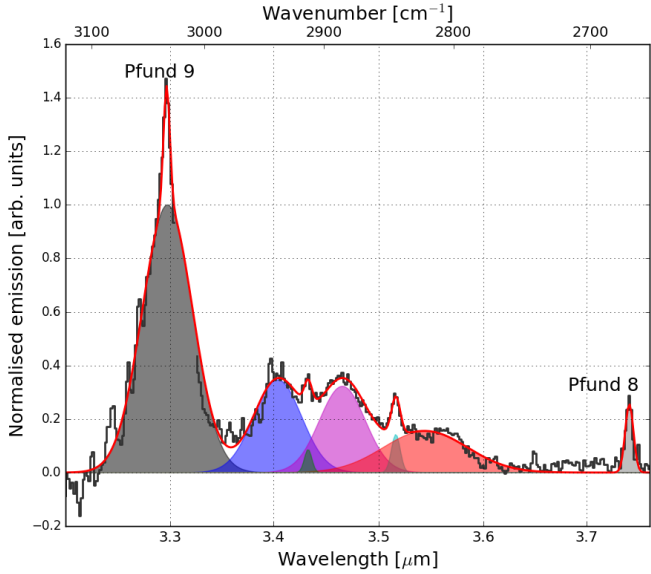
Figure 5 presents the distribution ratio values for the 3.4–3.6  $\mu\text{m}$  signatures to the 3.3  $\mu\text{m}$  band as a function of the distance from the star. For HD 100546, HD 100453, and HD 169142, the 3.4/3.3, 3.43/3.3, 3.46/3.3, and 3.52/3.3 ratios are of the same order and have a narrow dispersion without significant evolution as a function of the distance from the star, except for the ratio 3.43/3.3 for HD 100546, which has a larger dispersion. For HD 179218, the ratios are lower by  $\sim 1.4$ . As specified in Table 2, HD 179218 is more luminous than the three other stars, therefore we expect carbonaceous materials to be differently processed as a result of the very different physical conditions. The aliphatic bonds, which are more fragile than the aromatic rings, are expected to be the first to break under UV processing.

#### 5.4. 3.3 $\mu\text{m}$ band

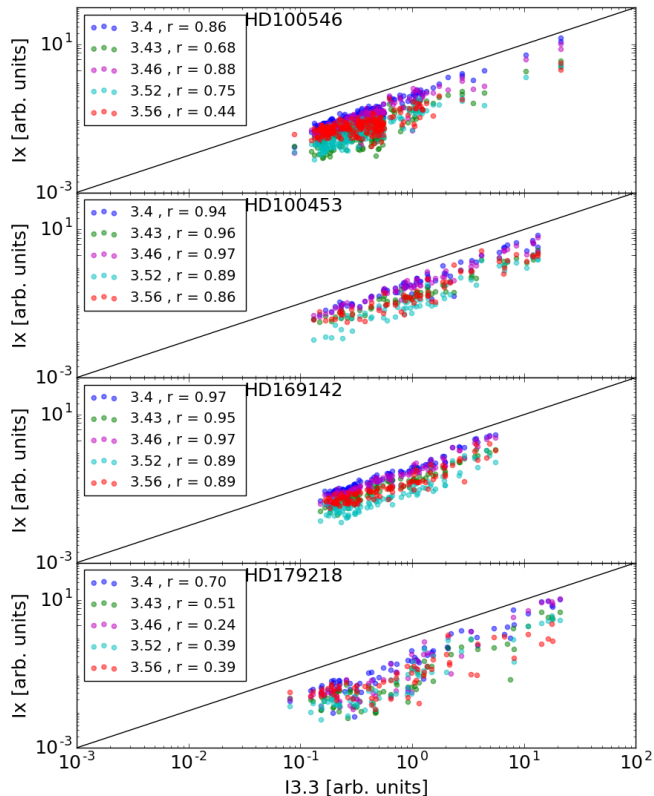
In this section, we investigate the position and width of the 3.3  $\mu\text{m}$  feature. Previous studies have pointed out that the 3.3  $\mu\text{m}$  feature is composed of two sub-bands: one band peaks at 3.28  $\mu\text{m}$ , and the other at 3.30  $\mu\text{m}$  (Sadjadi et al. 2017; Candian et al. 2012; Song et al. 2003; Tokunaga et al. 1991; Hammonds et al. 2015; Kwok & Zhang 2011). In particular, Tokunaga et al. (1991) classified the 3.3  $\mu\text{m}$  band into two types. Type 1 peaks at 3.289  $\mu\text{m}$  and has a width of 0.042  $\mu\text{m}$ . It is observed in numerous objects, such as planetary nebulae and HII regions. Type 2

peaks at 3.296  $\mu\text{m}$  and has a narrower width of 0.020  $\mu\text{m}$ , which is observed in pre-main-sequence and evolved stars. Tokunaga et al. (1991) noted that laboratory data did not allow a particular assignment to the features and proposed that Type 2 bands are best fitted by amorphous aromatic materials and Type 1 bands by heated PAHs. As suggested in Fig. 5, the carriers of the bands are likely due to a single material. A series of studies distinguished between Type 1 and Type 2 in the 3.3  $\mu\text{m}$  band and investigated the origin of this band in the Red Rectangle in emission (Song et al. 2003; Candian et al. 2012) and along a diffuse line of sight towards the Galactic centre (Chiar et al. 2013). While Candian et al. (2012) proposed that the 3.28  $\mu\text{m}$  feature comes from the structural organisation of the PAHs, Chiar et al. (2013) suggested an aliphatic origin for the 3.28  $\mu\text{m}$  band because of the stretching mode of olefinic C-H bonds in amorphous hydrocarbons. In another study, Sadjadi et al. (2017) performed quantum-mechanical calculations on aromatic, aliphatic, and olefinic compounds and proposed assigning the 3.28  $\mu\text{m}$  feature to aromatics and the 3.30  $\mu\text{m}$  to olefinics.

The averaged band centre and width of the 3.3  $\mu\text{m}$  band and variations with distance from the star are listed in Table 4. The band centre agrees with the laboratory experiment values reported in Table 1. For the all discs, the width between 0.055 and 0.089  $\mu\text{m}$  is globally higher than the highest width of 0.057  $\mu\text{m}$  measured in the laboratory, even though uncertainties



**Fig. 3.** NaCo-averaged spectrum (black) of HD 100546 at 0.4'' or 40 au from the star. The Gaussian decomposition is shown by the red curve, and the hydrogen recombination lines are plotted in grey. Individual contributor spectral signatures are identified at 3.3  $\mu\text{m}$  (black), 3.4  $\mu\text{m}$  (blue), 3.43  $\mu\text{m}$  (green), 3.46  $\mu\text{m}$  (magenta), 3.52  $\mu\text{m}$  (cyan), and 3.56  $\mu\text{m}$  (red). The spectrum is normalised to the continuum at 3.2  $\mu\text{m}$ .



**Fig. 4.** Aliphatic/Aromatic band intensity correlation. Points show the intensity (amplitude  $\times \sigma$ ) of the 3.4 (blue), 3.43 (green), 3.46 (magenta), 3.52 (cyan), 3.56 (red)  $\mu\text{m}$  band as function of the 3.3  $\mu\text{m}$  band intensity. For each set, the Spearman coefficient  $r$  is calculated.

could explain this difference in some cases. The averaged band centre and width of the other features and their variation ranges are listed in Table 5.

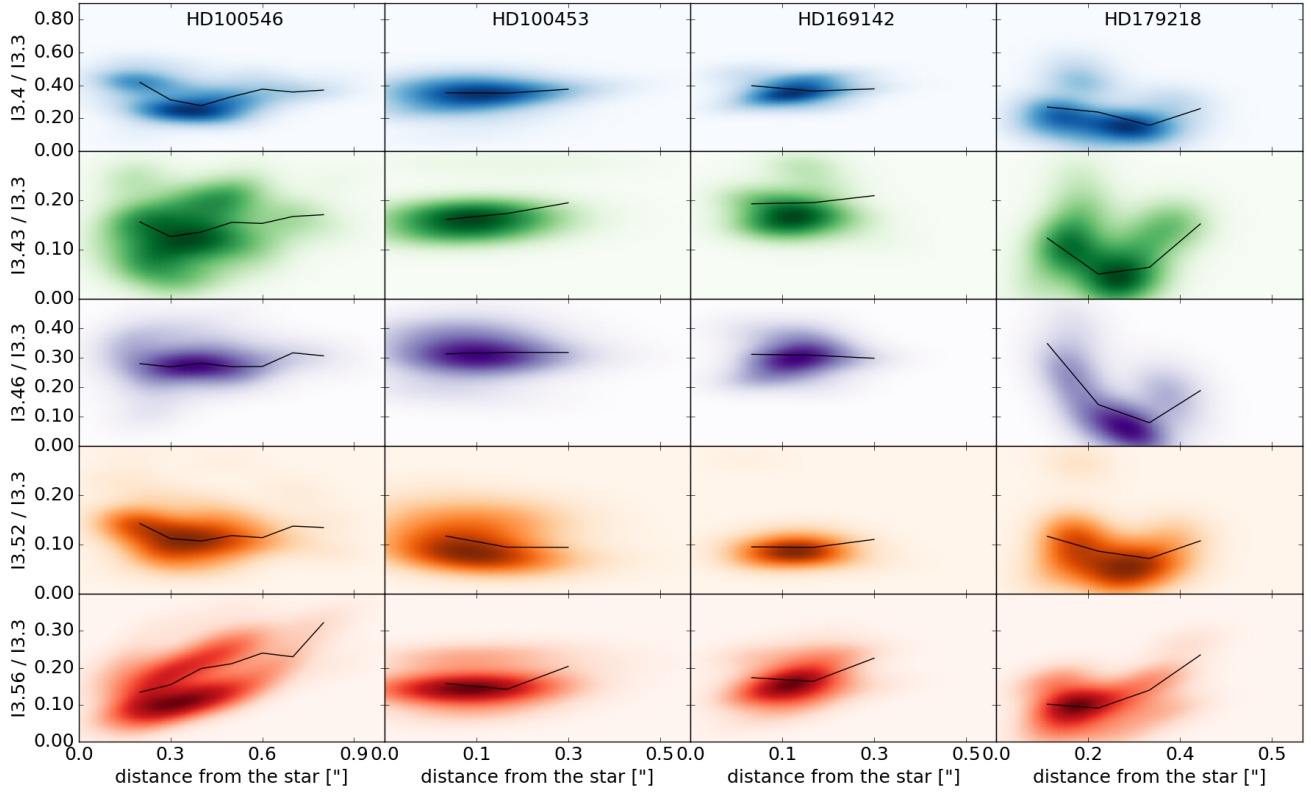
In Fig. 6 the parameter values of the band centre and FWHM based on the decomposition of pixel spectra are plotted as a function of the distance from the star. In the bottom panels, the FWHM is plotted versus band centre. The variations are reported in Table 4. In HD 100453 and HD 179218, the average band centre decreases with distance from 3.30  $\mu\text{m}$  to 3.29  $\mu\text{m}$ . In HD 100546 and HD 169142, the band centre remains constant at 3.295  $\mu\text{m}$ , moving away from the star. In all the discs, the FWHM first decreases and then increases with distance from the star. We also note that in HD 179218, the FWHM increases for band centres at longer wavelength. This suggests that close to 3.28  $\mu\text{m}$ , the carrier of the feature probably is more aromatic, and around 3.30 or 3.32  $\mu\text{m}$ , it probably is more olefinic or aliphatic (Sadjadi et al. 2017; Chiar et al. 2013). In this case, a narrow width would mean that one component dominates when a broader one would represent both components. This aspect is explored in more detail in Sect. 6. For HD 100453 and HD 179218, the 3.3  $\mu\text{m}$  band centre seems to shift from higher to lower values with distance from the central star. A priori, this is unexpected given the known behaviour of carbonaceous materials that are irradiated by UV photons. Close by the star, we expect that amorphous aliphatic materials would be aromatised by the more intense UV photon flux (e.g. Jones 1990; Dartois et al. 2004a,b; Pino et al. 2008; Mennella 2008; Godard et al. 2011). Variations in the centre and width of the band suggest chemical processing (e.g. increasing contribution of olefinic-to-aliphatic bridges with increasing distance to the star) that is complex and difficult to interpret; it requires further study to allow definitive conclusions. The 3.3  $\mu\text{m}$  band evolution could thus be used as a diagnostic probe of the carbonaceous dust composition.

### 5.5. 3.4–3.3 $\mu\text{m}$ band ratio

The top panel in Fig. 5 shows values of the ratio between the 3.4 to 3.3  $\mu\text{m}$  bands as a function of the distance from the star. Values of the averaged ratio are reported in Table 6. The ratio does not vary significantly with the distance, while the radiation field intensity at the disc surface decreases by several orders of magnitude.

A previous study by Pilleri et al. (2015) focused on spatially resolved spectra of the PDR NGC 7023 with AKARI and showed an increase in the 3.4/3.3 ratio when the far-UV flux  $G_0$  decreases. In order to compare our results with those of Pilleri et al. (2015), we applied our decomposition method (see Sect. 4) to their data to calculate the 3.4/3.3 ratio. We obtain higher ratios, but they vary in the same way with  $G_0$  as was found by Pilleri et al. (2015) (Table 7).

Figure 7 shows the 3.4/3.3 ratio versus  $G_0$  for NGC 7023 and the four discs. To calculate  $G_0$  at different distances from the central star in discs, we considered a blackbody with the effective temperature and stellar luminosity given in Table 2. The aliphatic-to-aromatic ratio does not appear to vary significantly between PDRs at the molecular edge and disc surfaces. Assuming a constant gas density, with the orders-of-magnitude higher UV flux expected in our disc sample, with the Pilleri extrapolation, we would expect a very low 3.4/3.3 ratio, and a rapid dehydrogenation of the carriers following experiments. However, the emission in the 3–4  $\mu\text{m}$  range depends not only on the UV flux, but also on the (re-)hydrogenation rate, which in turn depends on the gas density. Thus, the observation of an aliphatic-to-aromatic ratio that varies little may suggest either a recent exposure of the carriers to the radiation field (by a continuous local vertical replenishment at the disc surface) before their destruction or conversion, and/or that the ratio of  $G_0/n_{\text{H}}$  may be a



**Fig. 5.** Aliphatic/Aromatic band intensity ratios according to the distance from the star. Point densities show the band ratios (amplitude  $\times \sigma$ ) of the 3.4 (blue), 3.43 (green), 3.46 (magenta), 3.52 (orange), 3.56 (red) to the 3.3  $\mu\text{m}$  band vs. the distance from the star. The point densities are plotted instead of points to highlight the variations. The median value of the ratio is plotted as a black solid line.

**Table 4.** 3.3  $\mu\text{m}$  band characteristics and variations as a function of the distance from the star ( $d$ ).

$d$ (")	HD 100546		HD 100453	
	$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	$FWHM$ ( $\mu\text{m}$ )	$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	$FWHM$ ( $\mu\text{m}$ )
0.1	...	...	$3.300 \pm 0.002$	$0.072 \pm 0.008$
0.2	$3.295 \pm 0.004$	$0.065 \pm 0.011$	$3.298 \pm 0.004$	$0.064 \pm 0.006$
0.3	$3.296 \pm 0.003$	$0.055 \pm 0.005$	$3.294 \pm 0.003$	$0.073 \pm 0.005$
0.4	$3.295 \pm 0.003$	$0.055 \pm 0.007$	$3.293 \pm 0.001$	$0.089 \pm 0.000^a$
0.5	$3.295 \pm 0.002$	$0.057 \pm 0.008$	...	...
0.6	$3.295 \pm 0.002$	$0.060 \pm 0.012$	...	...
0.7	$3.294 \pm 0.002$	$0.070 \pm 0.010$	...	...
0.8	$3.295 \pm 0.002$	$0.089 \pm 0.013$	...	...
0.9	$3.295 \pm 0.004$	$0.089 \pm 0.002$	...	...

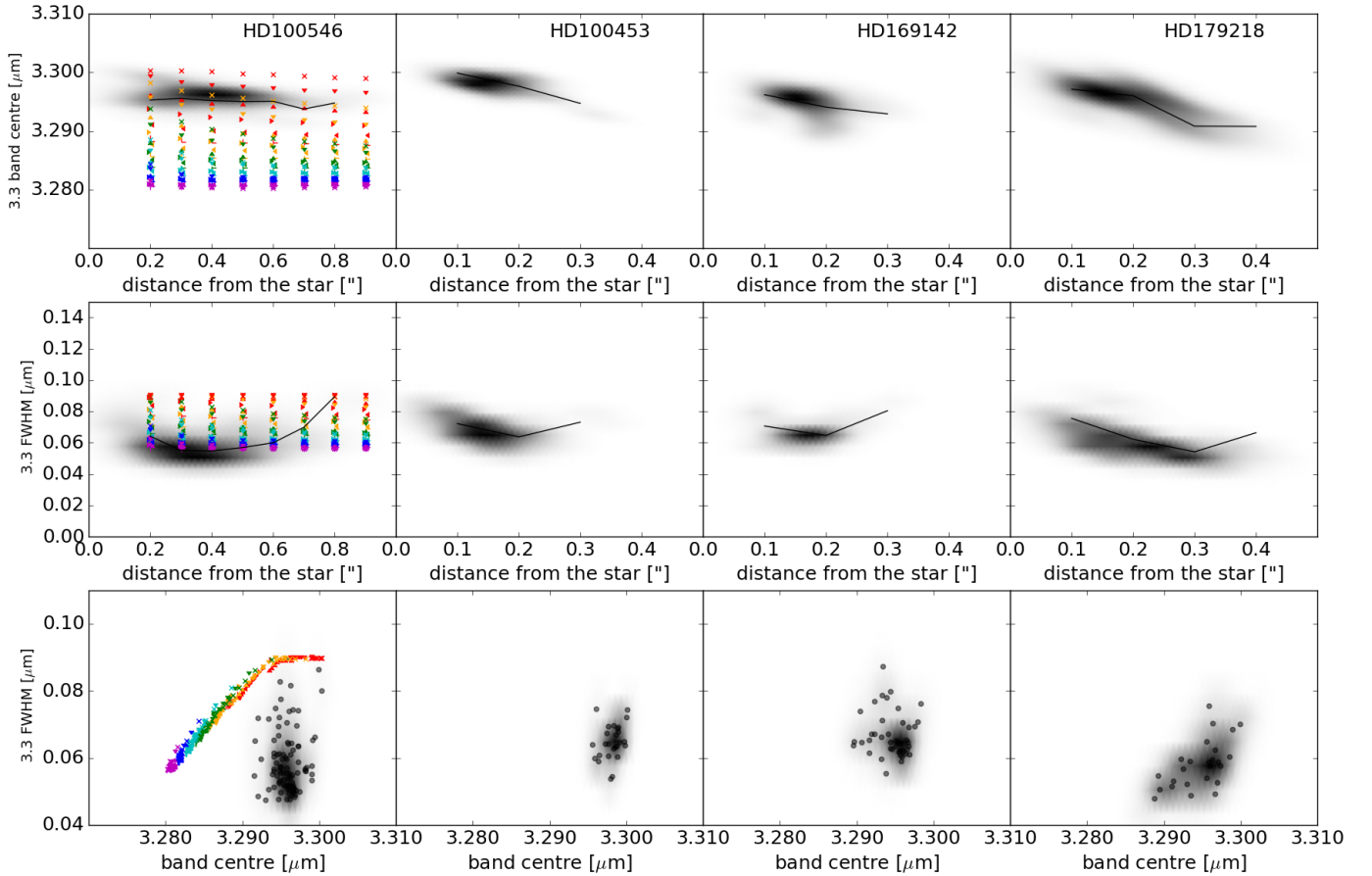
$d$ (")	HD 169142		HD 179218	
	$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	$FWHM$ ( $\mu\text{m}$ )	$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	$FWHM$ ( $\mu\text{m}$ )
0.1	$3.296 \pm 0.003$	$0.071 \pm 0.010$	$3.297 \pm 0.002$	$0.076 \pm 0.012$
0.2	$3.294 \pm 0.003$	$0.065 \pm 0.004$	$3.296 \pm 0.003$	$0.062 \pm 0.012$
0.3	$3.293 \pm 0.003$	$0.080 \pm 0.009$	$3.291 \pm 0.003$	$0.054 \pm 0.003$
0.4	$3.294 \pm 0.002$	$0.089 \pm 0.000^a$	$3.291 \pm 0.002$	$0.066 \pm 0.007$
0.5	...	...	$3.290 \pm 0.000^a$	$0.073 \pm 0.000^a$

**Notes.** <sup>(a)</sup>Too few data points to calculate the uncertainty.

better parameter to consider, and not the UV flux alone. In discs, the gas density is expected to be much higher than in PDRs and must increase when we approach the star.

To proceed in understanding the 3.4/3.3 ratio as a function of the local physical conditions, we considered the intensity of the

radiation in relation to the local gas density. Based on the model of [Woitke et al. \(2016\)](#), who considered a disc in thermal and hydrostatical equilibrium, the gas density at the upper surface of the disc at the radial optical depth  $A_v = 1$  can be estimated to be about  $n_{\text{H}} = 10^9$  and  $10^7 \text{ cm}^{-3}$  at 10 and 100 au, respectively,



**Fig. 6.** *Top panels:* 3.3  $\mu\text{m}$  band centre as a function of the distance from the star. *Middle panels:* 3.3  $\mu\text{m}$  FWHM as a function of the distance from the star. *Bottom panels:* 3.3  $\mu\text{m}$  FWHM over the band centre. For HD 100546, which is shown in the *left panels*, values are reported from THEMIS varying band gap from 0.1 eV (magenta) to 0.6 eV (red, as rainbow colours). *Top two panels:* size increases from bottom to top (for the same colour). *Bottom panels:* size increases from right to left.

**Table 5.** Band centres, widths, and variation ranges for each disc ( $d$ ).

HD 100546		HD 100453		HD 169142		HD 179218	
$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	$FWHM$ ( $\mu\text{m}$ )	$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	$FWHM$ ( $\mu\text{m}$ )	$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	$FWHM$ ( $\mu\text{m}$ )	$\lambda_0$ ( $\mu\text{m}$ )	$FWHM$ ( $\mu\text{m}$ )
$3.394 \pm 0.005$	$0.052 \pm 0.006$	$3.391 \pm 0.002$	$0.051 \pm 0.004$	$3.389 \pm 0.001$	$0.054 \pm 0.001$	$3.390 \pm 0.002$	$0.053 \pm 0.004$
$3.430 \pm 0.006$	$0.033 \pm 0.008$	$3.432 \pm 0.001$	$0.031 \pm 0.003$	$3.431 \pm 0.004$	$0.035 \pm 0.004$	$3.432 \pm 0.004$	$0.031 \pm 0.007$
$3.468 \pm 0.003$	$0.044 \pm 0.007$	$3.469 \pm 0.002$	$0.053 \pm 0.004$	$3.470 \pm 0.003$	$0.052 \pm 0.004$	$3.469 \pm 0.005$	$0.046 \pm 0.008$
$3.515 \pm 0.003$	$0.035 \pm 0.007$	$3.520 \pm 0.007$	$0.036 \pm 0.008$	$3.515 \pm 0.005$	$0.039 \pm 0.007$	$3.516 \pm 0.003$	$0.031 \pm 0.004$
$3.560 \pm 0.008$	$0.075 \pm 0.013$	$3.561 \pm 0.009$	$0.085 \pm 0.006$	$3.562 \pm 0.009$	$0.084 \pm 0.009$	$3.569 \pm 0.006$	$0.061 \pm 0.018$

from the central star (see their Fig. 4 for their reference model). Thus, considering that  $G_0$  scales as the inverse squared distance to the illuminating star, we can estimate that  $G_0/n_H$  does not vary to first order between 10 and 100 au. This could explain a 3.4/3.3 ratio that does not vary much with distance from the star in the discs. At the radial optical depth  $A_v = 1$  and considering  $G_0^{50 \text{ au}}$ , the far-UV strength at 50 au (see Table 2), we can roughly estimate the  $G_0/n_H$  ratio as a function of the distance  $d$  from the star by  $\sim G_0^{50 \text{ au}} \times (\frac{50 \text{ au}}{d})^2 \times e^{-A_v=1}/n_H(d)$ . We find  $G_0/n_H \sim 0.04$  for HD 100546,  $\sim 0.002$  and  $\sim 0.004$  for HD 100453 and HD 169142 and  $\sim 0.15$  for HD 179218 at 10 or 100 au. The 3.4/3.3 ratios in HD 100546, HD 100453, and HD 169142, are comparable to those at the P2, P3, and P4 positions in the PDR NGC 7023. In HD 179218, the 3.4/3.3 ratio is between that found for the P1 and P2 positions in the cavity and the PDR edge.

For NGC 7023, estimates of  $G_0$  can be found in Pilleri et al. (2015) and of  $n_H$  (the total number of hydrogen nuclei) in Köhler et al. (2014). This gives (i)  $G_0/n_H = 10^2$  in the cavity (ionised region – position P1); (ii)  $G_0/n_H = 0.26\text{--}2.6$  at the PDR edge (position P2); (iii)  $G_0/n_H = 1\text{--}2 \times 10^{-2}$  in the PDR ( $A_v \sim 1$  – position P3); and (iv)  $G_0/n_H = 10^{-3}\text{--}2.5 \times 10^{-4}$  in the PDR ( $A_v \sim 3$  – position P4). The 3.4/3.3 ratio is low in the cavity (P1) and remains constant towards the PDR even if  $G_0/n_H$  varies by several orders of magnitude. By combining the PDR and disc results, we find that the 3.4/3.3 ratio is roughly equal to 0.3–0.4 for  $G_0/n_H \leq 10^{-2}$ , but it decreases to  $\sim 0.2$  for  $G_0/n_H \geq 10^{-1}$ .

In conclusion, the 3.4/3.3 band ratios observed in discs are comparable to those observed in PDRs, and interestingly, they do not depend on the far-UV strength over density ratio beyond a certain threshold. However, a more detailed study of

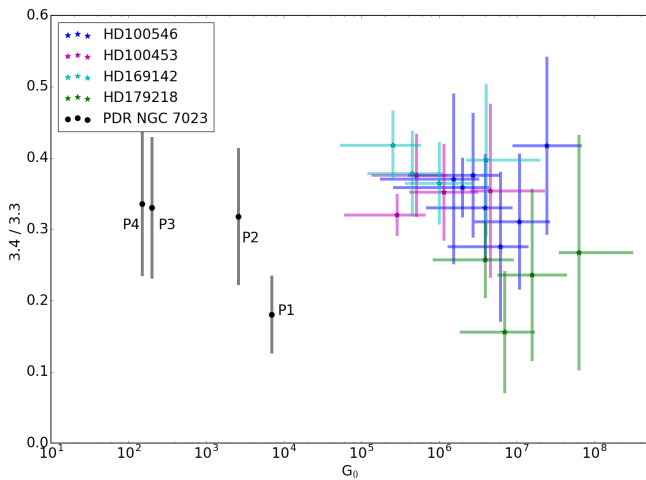
**Table 6.** Ratios of the 3.4–3.3  $\mu\text{m}$  bands for each disc.

$d$ (")	HD 100546	HD 100453	HD 169142	HD 179218
	3.4/3.3			
0.1	...	$0.354 \pm 0.122$	$0.397 \pm 0.107$	$0.268 \pm 0.165$
0.2	$0.418 \pm 0.124$	$0.352 \pm 0.068$	$0.365 \pm 0.058$	$0.236 \pm 0.121$
0.3	$0.311 \pm 0.095$	$0.376 \pm 0.058$	$0.378 \pm 0.060$	$0.156 \pm 0.085$
0.4	$0.276 \pm 0.105$	$0.320 \pm 0.029$	$0.418 \pm 0.049$	$0.258 \pm 0.053$
0.5	$0.330 \pm 0.076$	...	...	$0.289 \pm 0.000$
0.6	$0.376 \pm 0.087$	...	...	...
0.7	$0.359 \pm 0.041$	...	...	...
0.8	$0.371 \pm 0.120$	...	...	...
0.9	$0.402 \pm 0.076$	...	...	...

**Notes.** Their dispersions are also given.

**Table 7.** Ratios of the 3.4–3.3  $\mu\text{m}$  bands for NGC 7023.

Position	$G_0$	3.4/3.3	
		Pilleri et al. (2015)	This work
P1	7000	0.028	0.181
P2	2600	0.090	0.318
P3	200	0.11	0.330
P4	150	0.13	0.336



**Fig. 7.** 3.4/3.3 ratio as a function of  $G_0$ . The black dot shows the band ratio in PDR NGC 7023 (based on Pilleri et al. 2015). Stars show the band ratio for each disc and different distances to the central star. For the disc, the  $G_0$  has been estimated from a blackbody associated with the parameters of the central star (temperature and luminosity). The error bars for the 3.4/3.3 ratio are the dispersion of ratio values for the considered distance. The error bars for  $G_0$  correspond to the values for the considered distance inside the VLT/NACO beam.

the disc shape and irradiation conditions is needed to estimate the physical conditions ( $G_0$ ,  $n_{\text{H}}$ ) at the disc surfaces more accurately. A specific radiative transfer code for each disc with the appropriate structure (cavities and gaps) is required.

## 6. Modelling

The heterogeneous dust evolution model for interstellar solids (THEMIS)<sup>1</sup> is based on data derived from laboratory

<sup>1</sup> <https://www.ias.u-psud.fr/themis/>

experiments and is described in detail elsewhere (Jones 2012a,b,c; Jones et al. 2013, 2017; Köhler et al. 2014). THEMIS has been used before to analyse dense cloud observations (Köhler et al. 2015; Jones et al. 2016; Ysard et al. 2016), dust in the Magellanic Clouds (Chastenot et al. 2017) and other nearby galaxies within the Dustpedia project<sup>2</sup>. We are here mostly interested in the emission from stochastically heated nano-grains, therefore we briefly summarise the essential elements pertaining to these particles of THEMIS, which have radii from 0.4 nm to several tens of nanometers and a power-law size distribution that steeply declines in abundance with increasing radius. These nano-grains are primarily of amorphous, hydrogen-poor a-C composition and principally consist of poly-aromatic units linked together by olefinic/aliphatic bridges. These grains are rendered hydrogen-poor through the effects of photolytic dehydrogenation by the ambient interstellar UV radiation field in the diffuse ISM (Jones 2012a,b,c). The composition, structure, and optical properties of the THEMIS carbonaceous grains, which contain aromatic, olefinic, and aliphatic sub-components, were calculated using the extended random covalent network (eRCN) model for H-rich a-C:H and a defective graphite (DG) model for H-poor grains (Jones 2012a,b). The carbonaceous material properties are principally determined by their band gap, and the associated optical properties were calibrated using the available laboratory data as described in detail in Jones (2012a,b).

For grains with radii  $\leq 20$  nm, the size of the aromatic clusters is necessarily limited. As derived in Robertson (1986), the band gap depends on the size of these clusters. For a given composition, the smaller grains therefore have a larger gap than their bulk counterpart (Jones 2012b,c). This last point is taken into account in THEMIS with the definition of an effective band gap that depends upon the particle size. Thus, and in order to avoid any ambiguity in the following, we adopted the bulk material band gap in our description, with the advisory that in general, the effective band gap is larger than the bulk material band gap (Jones 2012c).

In THEMIS the spectroscopic assignments for the C–H and C–C vibrational modes were based on the available laboratory spectroscopic data (Jones 2012a). The parametrised band characteristics are a compromise given the diversity encountered in laboratory data (see Fig. 1) and observed through the interstellar IR emission bands. Thus, the THEMIS IR spectral predictions are globally and qualitatively consistent with the observed lab-

<sup>2</sup> <http://dustpedia.com/>



oratory and astronomical spectra. In particular, THEMIS can self-consistently explain the  $3.3\ \mu\text{m}$  band and its associated side bands in the  $3.4\text{--}3.6\ \mu\text{m}$  region. However, the current model is not able to explain the details of the observed emission spectra, that is, the band positions do not always agree with the observed bands, and as attested by the data presented in Fig. 1, neither are any of the available laboratory data sets. Thus, it appears that conditions in the laboratory cannot yet be made to match all the environments for the IR carriers in space, and we therefore have not yet achieved completely satisfactory spectral fits of the models to the data. Additionally, the THEMIS model predictions were made for dust in the diffuse ISM, whereas the best IR emission band spectra are generally for PDR regions with generally more intense and harsher radiation fields.

In our exploration of the dust model parameter space, the THEMIS model grid contain almost 200 spectra for a given disc as a function of distance. These were calculated using DustEM<sup>3</sup>, a numerical tool for dust emission and extinction (Compiègne et al. 2011).

Using THEMIS in its current form, we calculated a model grid for each disc and explored the nature of the THEMIS nano-grains as a function of three parameters:

1. the distance from the star, which translates into the local radiation field expressed in terms of  $G_0$ ,
2. the grain composition, in terms of the material effective band gap,  $E_g$ , which is explored over the range  $E_g = 0.0\text{--}2.5\ \text{eV}$ , that is, from aromatic-rich materials ( $E_g \sim 0\ \text{eV}$ ) to aliphatic-rich, a-C:H like materials ( $E_g > 2\ \text{eV}$ ), and
3. variations in the minimum size of the carbonaceous nano-grain size distribution ranging from  $a_{\text{min}} = 0.4$  to  $1.0\ \text{nm}$ . For greater sizes, the distribution follows that of Jones et al. (2013).

Figure 8 shows an example of the wide variability in SED allowed by THEMIS. From the top left panel to the bottom right panel, the gap increases, that is, underlying carriers vary from aromatic materials (small gap) to aliphatics (large gap). Increasing the gap leads to a switch-over of the aromatic signature (black dash-dotted line) at  $3.3\ \mu\text{m}$  to olefines and aliphatics signatures (grey dashed and magenta dotted line) between  $3.4$  and  $3.6\ \mu\text{m}$  for higher gaps. In each panel the colour traces are SEDs with different minimum sizes of the smallest grains in the distribution size. This illustrates the prevalence of the surface or bulk effects. The emission properties of the smallest grains vary rapidly with size, in particular, the band/continuum ratio. The choice of this range of minimum size allows us to illustrate these variations. For small gaps, with increasing minimum size, we note an increase in continuum emission and a decrease in band emission that is due to both the surface and bulk effect and to the effectively smaller gap for larger grains, which are less strongly limited by the size of aromatic clusters (Jones 2012a). For large gaps, the continuum emission remains weak with increasing size because the aromatic units are too small to allow emission at these wavelengths.

Thus, a first exploration was made throughout the grid to compare to the observations. We focused on HD 100546, which is the disc for which the spectra cover the widest range of distances from the star. The radiation field was modelled by a blackbody with the temperature and luminosity of the central star, that is,  $10\ 500\ \text{K}$  and  $32\ L_{\odot}$ . The field intensity  $G_0$  was calculated for steps of  $0.1''$  (the star is located at  $103\ \text{pc}$ ). For each distance from the star, the SED was simulated for several sets of

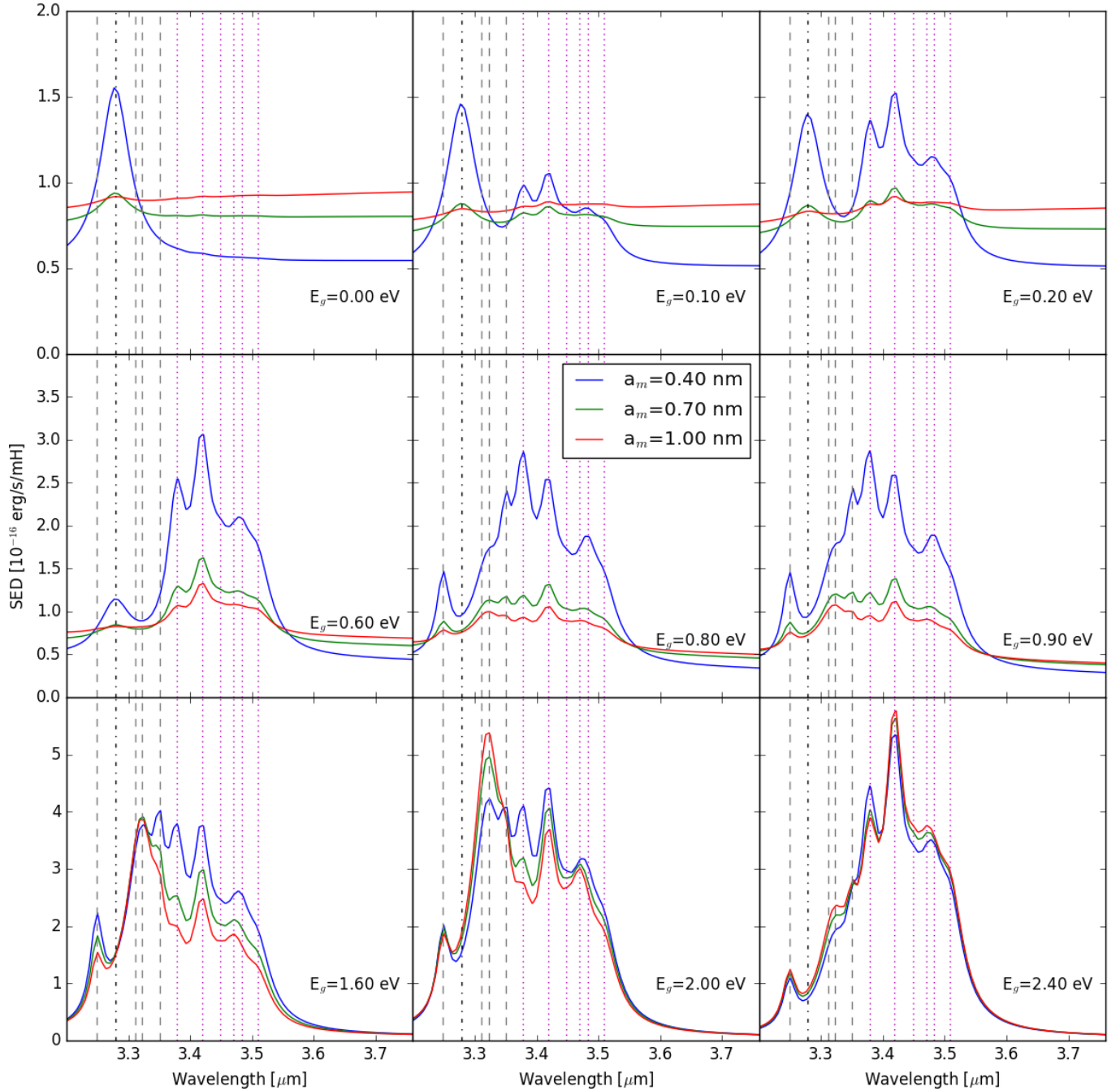
parameters of band gap  $E_g$  and minimum size  $a_{\text{min}}$ . To compare this to the observations, we then used the decomposition method presented in Sect. 4 on the model data to obtain the parameters of the Gaussian functions. The model spectra were normalised to the observational spectrum at  $0.2''$ .

The results are presented in Fig. 9. Figures B.1 and B.2 show the comparison with other parameter sets. In the left panel we plot the results of the model decomposition (the similar aspect is due to the normalisation). In right panel we show the relative intensities in the bands in the same plot as in Fig. 4. For Fig. 9, where  $a_{\text{min}} = 0.5\ \text{nm}$  and  $E_g = 0.1\ \text{eV}$ , the intensities obtained after normalisation match the observations in terms of the relative order of the distribution between the signatures for bands at  $3.4$ ,  $3.43$ ,  $3.46$ , and  $3.52\ \mu\text{m}$  and in terms of the intensities (derived from the field intensity  $G_0$ ). When  $a_{\text{min}}$  varies from  $0.5$  to  $0.4\ \text{nm}$  (Fig. B.1), we observe a global shift to higher intensities. When the effective gap increases from  $0.1$  to  $0.2\ \text{eV}$  (with  $a_{\text{min}} = 0.5\ \text{nm}$ , Fig. B.2), intensities of aliphatic bands increase with respect to the  $3.3\ \mu\text{m}$  band. The intensity of the signature at  $3.56\ \mu\text{m}$  seems to be underestimated when we consider  $a_{\text{min}} = 0.5\ \text{nm}$  and  $E_g = 0.1\ \text{eV}$ . As first described in Sect. 5.1, the fit of the  $3.56\ \mu\text{m}$  feature does not match very well. The decomposition method and THEMIS assume that observed signatures come from a-C:H materials that contain only carbon and hydrogen atoms. Thus, we speculate that the  $3.56\ \mu\text{m}$  feature could be explained by the chemical composition of the dust, such as inclusions of hetero-atoms of nitrogen or oxygen. As reported by Tallent & Siewers (1956) and Goebel et al. (1981), some carbonaceous materials with nitrogen or oxygen do have signatures around  $3.56\ \mu\text{m}$ . In the particular case of possible oxygen inclusion, some features expected in the mid-IR wavelength range may be searched for. With the inclusion of nitrogen in the aromatic network, this would be less evident as the infrared activity of potential new modes may be weak, but could influence and shift the position of some of the mid-IR aromatic modes (Socrates 2004).

Finally, as shown in Fig. 6 (bottom panel) in Sect. 5.4, we explored the width variation according to the band centre shift of the  $3.3\ \mu\text{m}$  band. In THEMIS, the increases in  $E_g$  (i.e., change in the grain composition) and  $a_{\text{min}}$  drive the increase in width and the shift of the band centre to longer wavelengths. This argues for multiple components for the  $3.3\ \mu\text{m}$  band, from aromatic composition close to  $3.28\ \mu\text{m}$  and hybrid aromatic-olefinic composition close to  $3.30\ \mu\text{m}$ .

For the whole spectrum, we note that the fit is not perfect. As explained above, THEMIS was developed for the diffuse ISM, and the signatures in this wavelength range present a great variability. Nevertheless, if the decomposition method does not use all signatures of the model, it fits signatures related to the same type of materials (aliphatics) that evolve in the same way, as indicated by the correlation in Fig. 4. This first exploration allows us some interpretations of the dust composition and size, but we recall that uncertainties remain high about the radiation field intensity, especially because of the large spatial scale covered by one spectrum where  $G_0$  varies quickly, and because analysis is based on averaged spectra for each distance and does not consider local variations due to the structure. By confirming that dust in HD 100546 is composed mostly of aromatic-rich sub-nanometer grains with aliphatic and olefinic components, these results indicate that THEMIS is useful for modelling dust in discs and sets limits on the composition and size of dust. Nevertheless, a more detailed study has to be conducted to fully and definitively understand the observed variations and their origin.

<sup>3</sup> <https://www.ias.u-psud.fr/DUSTEM/>



**Fig. 8.** Spectral energy density in the 3.2–3.8  $\mu\text{m}$  range calculated with THEMIS for a radiation field intensity  $G_0 = 2.5 \times 10^7$  similar to that found in discs. The calculation was made with DustEM. *From top right to bottom left*, the band gap varies from 0.1 eV to 2.4 eV. In each subplot, the SED is plotted for several minimum sizes of grains.

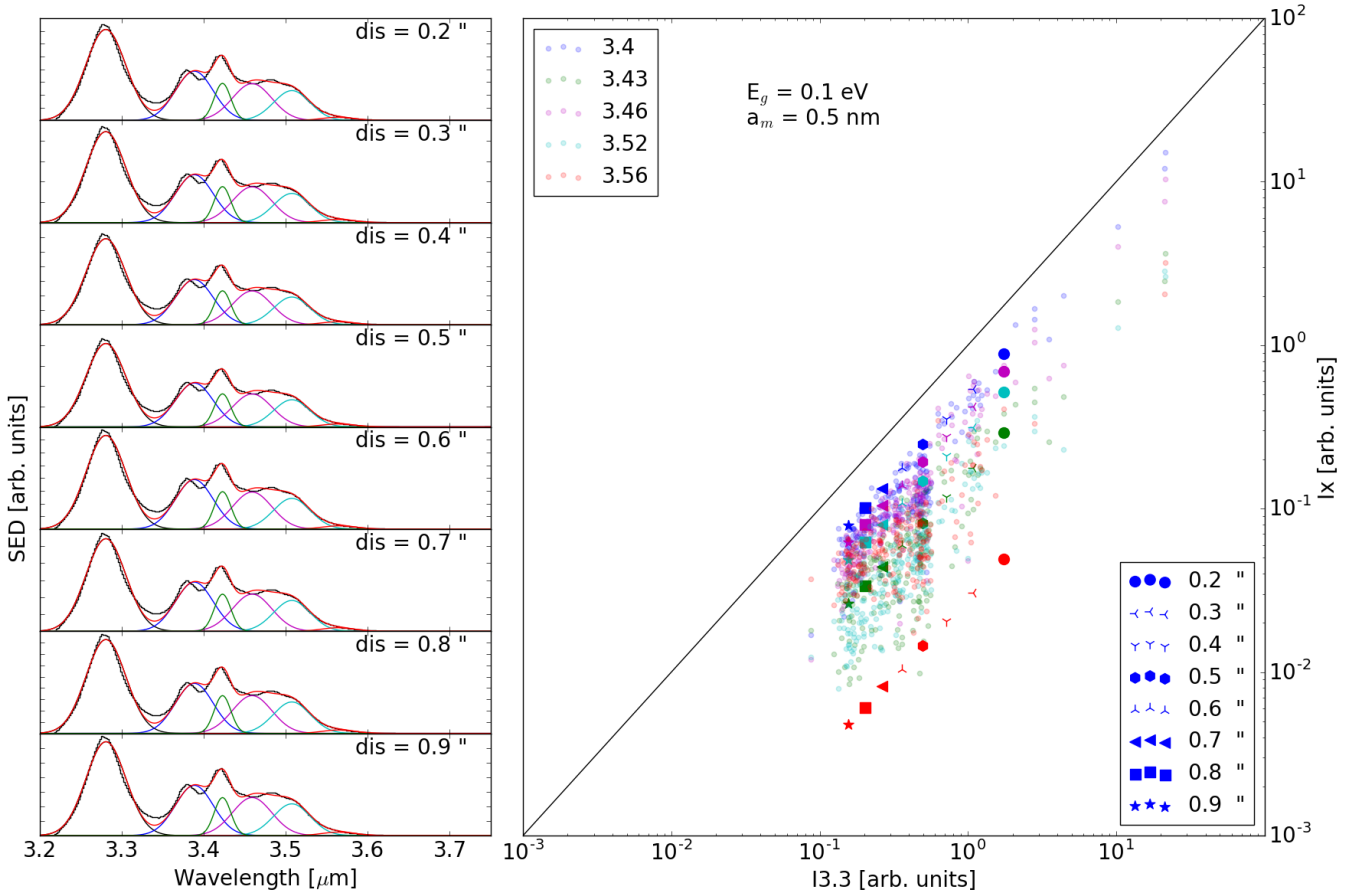
## 7. Conclusions

We presented NaCo/VLT spectroscopic observations in the 3  $\mu\text{m}$  region of a small sample of H AeBe stars. These data allowed us for the first time to spatially resolve the disc emission in the bands related to aromatic and aliphatic materials. Band assignments to aliphatic features is a complex question because of their high variability in terms of band positions and widths.

1. This work confirms the presence of features that are related to aromatic and aliphatic materials in discs around Herbig stars. These features are observed in a wide spatial range of

the discs (from about  $\sim 10$  to 100 au), even if the innermost parts of these discs remain inaccessible to our observations.

2. The various far-UV radiation conditions and correlated intensities of aliphatic features with aromatic features argue in favour for the common nature of the carriers, which are stochastically heated nano-grains. If there were distinct populations of carriers with significantly different sizes, there would be no reason to have spatially correlated features.
3. No strong variations in band ratios (aliphatic/aromatic) according to the distance from the star are observed. This suggests that features vary in a similar way: the same location and the same intensity. It also argues for grains with



**Fig. 9.** *Left panel:* decomposition of the continuum-subtracted spectra calculated with DustEM for a radial field intensity that is consistent with what is expected for HD 100546. All the spectra are normalised to the continuum at a distance of 0.2". *Right panel:* correlation between intensities in bands at 3.4, 3.43, 3.46, 3.52, 3.56 μm and the band at 3.3 μm, underlined by those calculated for pixels of HD 100546 that were previously shown in Fig. 4.

a mixed composition that is relatively stable. However, at a given distance, the dispersion of the values varies and depends on the data quality and intrinsic decomposition variations, but also on the physical dispersion that is due to these processes: aromatisation (due to UV irradiation), amorphisation, fragmentation, and internal dynamics. An important point to consider is that the aliphatic bonds, which are more fragile than the aromatic rings, are expected to be the first to break under UV processing. Thus, no strong variation in aliphatic-aromatic band ratios suggests that a continuous replenishment at the disc surface is at work. This is supported by the fact that nano-grains of comparable size are observed throughout the discs, whereas the smallest grains would be expected to be destroyed in the most highly irradiated areas. Photo-induced and/or collisional fragmentation of larger grains that may be important at the disc surfaces might be a process to explain the replenishment of the nano-grain component.

4. The 3.4/3.3 band ratios observed in discs are comparable to those observed in PDRs and appear to not only depend on the far-UV strength, but also on the gas density. Interestingly, the 3.4/3.3 ratio does not depend on the far-UV strength over density ratio beyond a certain threshold (of  $G_0/n_H \leq 0.01$ ).
5. The band centre and *FWHM* variations in the 3.3 μm band suggest multiple components of the feature with aromatic/olefinic composition. Evolution depends on the disc, however, and remains unclear.

6. This first comparison with THEMIS gives a reasonable but imperfect match to the observations: this is expected because THEMIS was developed for the diffuse ISM.
7. The relative order of IR features is well reproduced with THEMIS for a nano-grain population with  $E_g = 0.1$  eV and  $a_{\min} = 0.5$  nm.

This work raises new questions about the nature of the observed signatures and their underlying carriers. In our follow-up work, we will characterise the processing times of dust grains at the disc surface (photo-dissociation, recombination, dehydrogenation) to understand the process of their replenishment. To detect the bands and sub-bands of carbon dust in its many forms, which can be weak in a strong continuum, the combination of high spatial and spectral resolution and sensitivity is essential. The forthcoming observations with the MultiAperTure mid-Infrared SpectroScopic Experiment (MATISSE) at the VLT and with the *James Webb* Space Telescope will provide data that will allow further analyses and interpretations.

*Acknowledgements.* We thank our referee, A. Candian, for the care and quality of her comments and suggestions that greatly improved the clarity of this paper. This work was based on observations collected at the European Southern Observatory, Chile (ESO proposal number: 075.C-0624(A)), and was supported by P2IO LabEx (ANR-10-LABX-0038) in the framework of the “Investissements d’Avenir” (ANR-11-IDEX-0003-01) managed by the Agence Nationale de la Recherche (ANR, France), Programme National “Physique et Chimie du Milieu Interstellaire” (PCMI) of CNRS/INSU with INC/INP co-funded by CEA and CNES. We also acknowledge Paolo Pilleri for sharing his observations of the PDR NGC7023 (Pilleri et al. 2015). Reproduced with permission from Astronomy & Astrophysics, ©ESO.

## References

- Acke, B., & van den Ancker M. E. 2004, *A&A*, 426, 151
- Acke, B., & Van den Ancker M. E. 2006, *A&A*, 449, 267
- Acke, B., Bouwman, J., Juhász, A., et al. 2010, *ApJ*, 718, 558
- Ardila, D. R., Golimowski, D. A., Krist, J. E., et al. 2007, *ApJ*, 665, 512
- Augereau, J. C., Lagrange, A. M., Mouillet, D., & Ménard, F. 2001, *A&A*, 365, 78
- Benisty, M., Tatulli, E., Ménard, F., & Swain, M. R. 2010, *A&A*, 511, A75
- Berné, O., Fuente, A., Pantin, E., et al. 2015, *A&A*, 578, L8
- Bertrang, G. H.-M., Flock, M., & Wolf, S. 2017, *MNRAS*, 464, L61
- Biller, B. A., Males, J., Rodigas, T., et al. 2014, *ApJ*, 792, L22
- Blades, J. C., & Whittet, D. C. B. 1980, *MNRAS*, 191, 701
- Boccaletti, A., Pantin, E., Lagrange, A.-M., et al. 2013, *A&A*, 560, A20
- Bouwman, J., Meeus, G., de Koter, A., et al. 2001, *A&A*, 375, 950
- Bouwman, J., de Koter, A., Dominik, C., & Waters, L. B. F. M. 2003, *A&A*, 401, 577
- Brittain, S. D., Najita, J. R., & Carr, J. S. 2009, *ApJ*, 702, 85
- Brooke, T. Y., Tokunaga, A. T., & Strom, S. E. 1993, *AJ*, 106, 656
- Candian, A., Kerr, T. H., Song, I.-O., McCombie, J., & Sarre, P. J. 2012, *MNRAS*, 426, 389
- Carpentier, Y., Féraud, G., Dartois, E., et al. 2012, *A&A*, 548, A40
- Chastenet, J., Bot, C., Gordon, K. D., et al. 2017, *A&A*, 601, A55
- Chen, C. H., Sargent, B. A., Bohac, C., et al. 2006a, *ApJS*, 166, 351
- Chen, X. P., Henning, T., van Boekel, R., & Grady, C. A. 2006b, *A&A*, 445, 331
- Chiar, J. E., Tielens, A. G. G. M., Adamson, A. J., & Ricca, A. 2013, *ApJ*, 770, 78
- Collins, K. A., Grady, C. A., Hamaguchi, K., et al. 2009, *ApJ*, 697, 557
- Compiègne, M., Verstraete, L., Jones, A., et al. 2011, *A&A*, 525, A103
- Currie, T., Cloutier, R., Brittain, S., et al. 2015, *ApJ*, 814, L27
- Dartois, E., Muñoz Caro, G. M., Deboffe, D., & d'Hendecourt, L. 2004a, *A&A*, 423, L33
- Dartois, E., Marco, O., Muñoz-Caro, G. M., et al. 2004b, *A&A*, 423, 549
- Dartois, E., Caro, G. M. M., Deboffe, D., Montagnac, G., & d'Hendecourt, L. 2005, *A&A*, 432, 895
- Dischler, B. 1987, in *Proceedings of the EMRS Symposium*, 17, 189
- Dominik, C., Dullemond, C. P., Waters, L. B. F. M., & Walch, S. 2003, *A&A*, 398, 607
- Fedele, D., van den Ancker, M. E., Acke, B., et al. 2008, *A&A*, 491, 809
- Fedele, D., Carney, M., Hogerheijde, M. R., et al. 2017, *A&A*, 600, A72
- Follette, K. B., Rameau, J., Dong, R., et al. 2017, *AJ*, 153, 264
- Furlan, E., Hartmann, L., Calvet, N., et al. 2006, *ApJS*, 165, 568
- Gaia Collaboration (Brown, A. G. A., et al.) 2018, *A&A*, 616, A1
- Garufi, A., Quanz, S. P., Schmid, H. M., et al. 2016, *A&A*, 588, A8
- Geballe, T. R., Lacy, J. H., Persson, S. E., McGregor, P. J., & Soifer, B. T. 1985, *ApJ*, 292, 500
- Geers, V. C., Augereau, J.-C., Pontoppidan, K. M., et al. 2006, *A&A*, 459, 545
- Geers, V. C., Pontoppidan, K. M., Van Dishoeck, E. F., et al. 2007a, *A&A*, 469, L35
- Geers, V. C., van Dishoeck, E. F., Visser, R., et al. 2007b, *A&A*, 476, 279
- Godard, M., Féraud, G., Chabot, M., et al. 2011, *A&A*, 529, A146
- Goebel, J. H., Bregman, J. D., Witteborn, F. C., Taylor, B. J., & Willner, S. P. 1981, *ApJ*, 246, 455
- Goto, M., Gaessler, W., Hayano, Y., et al. 2003, *ApJ*, 589, 419
- Goto, M., Henning, T., Kouchi, A., et al. 2009, *ApJ*, 693, 610
- Grady, C. A., Polomski, E. F., Henning, T., et al. 2001, *AJ*, 122, 3396
- Grady, C. A., Schneider, G., Hamaguchi, K., et al. 2007, *ApJ*, 665, 1391
- Guilloy, O., Ledoux, G., & Reynaud, C. 1999, *ApJ*, 521, L133
- Habart, E., Natta, A., & Krügel, E. 2004, *A&A*, 427, 179
- Habart, E., Natta, A., Testi, L., & Carillet, M. 2006, *A&A*, 449, 1067
- Habing, H. J. 1968, *Bull. Astron. Inst. Netherlands*, 19, 421
- Hammonds, M., Mori, T., Usui, F., & Onaka, T. 2015, *Planet. Space Sci.*, 116, 73
- Honda, M. 2013, *Subaru Proposal*, 1, 22
- Hu, J. Y., The, P. S., & de Winter D. 1989, *A&A*, 208, 213
- Joblin, C., Tielens, A., Allamandola, L. J., & Geballe, T. R. 1996, *ApJ*, 458, 610
- Jones, A. P. 1990, *MNRAS*, 247, 305
- Jones, A. P. 2012a, *A&A*, 540, A1
- Jones, A. P. 2012b, *A&A*, 540, A2
- Jones, A. P. 2012c, *A&A*, 542, A98
- Jones, A. P., d'Hendecourt, L. B., Sheu, S.-Y., et al. 2004, *A&A*, 416, 235
- Jones, A. P., Fanciullo, L., Köhler, M., et al. 2013, *A&A*, 558, A62
- Jones, A. P., Köhler, M., Ysard, N., et al. 2016, *A&A*, 588, A43
- Jones, A. P., Köhler, M., Ysard, N., Bocchio, M., & Verstraete, L. 2017, *A&A*, 602, A46
- Jourdain de Muizon, M., d'Hendecourt, L. B., & Geballe, T. R. 1990a, *A&A*, 235, 367
- Jourdain de Muizon, M., d'Hendecourt, L. B., & Geballe, T. R. 1990b, *A&A*, 227, 526
- Keller, L. D., Sloan, G. C., Forrest, W. J., et al. 2008, *ApJ*, 684, 411
- Khalafinejad, S., Maaskant, K. M., Mariñas, N., & Tielens, A. 2016, *A&A*, 587, A62
- Klarmann, L., Benisty, M., Min, M., et al. 2017, *A&A*, 599, A80
- Kluska, J., Kraus, S., Davies, C. L., et al. 2018, *ApJ*, 855, 44
- Kühler, M., Jones, A., & Ysard, N. 2014, *A&A*, 565, L9
- Kühler, M., Ysard, N., & Jones, A. P. 2015, *A&A*, 579, A15
- Kraus, S., Ireland, M. J., Sitko, M. L., et al. 2013, *ApJ*, 768, 80
- Kwok, S., & Zhang, Y. 2011, *Nature*, 479, 80
- Lagage, P.-O., Doucet, C., Pantin, E., et al. 2006, *Science*, 314, 621
- Leger, A., & Puget, J. L. 1984, *A&A*, 137, L5
- Li, A., & Lunine, J. I. 2003, *ApJ*, 594, 987
- Ligi, R., Vigan, A., Gratton, R., et al. 2017, in *SF2A-2017: Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics*, eds. C. Reylé, P. Di Matteo, F. Herpin, et al., 337
- Lindegren, L., Lammars, U., Bastian, U., et al. 2016, *A&A*, 595, A4
- Liu, W. M., Hinz, P. M., Meyer, M. R., et al. 2003, *ApJ*, 598, L111
- Long, Z. C., Fernandes, R. B., Sitko, M., et al. 2017, *ApJ*, 838, 62
- Maaskant, K. M., Honda, M., Waters, L. B. F. M., et al. 2013, *A&A*, 555, A64
- Maaskant, K. M., Min, M., Waters, L., & Tielens, A. 2014, *A&A*, 563, A78
- Malfait, K., Waelkens, C., Waters, L., et al. 1998, *A&A*, 332, L25
- Manoj, P., Bhatt, H. C., Maheswar, G., & Muneer, S. 2006, *ApJ*, 653, 657
- Mariñas, N., Telesco, C. M., Fisher, R. S., & Packham, C. 2011, *ApJ*, 737, 57
- Meeus, G., Waters, L. B. F. M., Bouwman, J., et al. 2001, *A&A*, 365, 476
- Meeus, G., Montesinos, B., Mendigutía, I., et al. 2012, *A&A*, 544, A78
- Meeus, G., Salyk, C., Bruderer, S., et al. 2013, *A&A*, 559, A84
- Mennella, V. 2008, *ApJ*, 682, L101
- Micelotta, E. R., Jones, A. P., & Tielens, A. G. G. M. 2010a, *A&A*, 510, A36
- Micelotta, E. R., Jones, A. P., & Tielens, A. G. G. M. 2010b, *A&A*, 510, A37
- Momose, M., Morita, A., Fukagawa, M., et al. 2015, *Publ. Astron. Soc. Jpn.*, 67, 83
- Mulders, G. D., Min, M., Dominik, C., Debes, J. H., & Schneider, G. 2013, *A&A*, 549, A112
- Muñoz Caro, G. M., Ruitkamp, R., Schutte, W. A., Greenberg, J. M., & Mennella, V. 2001, *A&A*, 367, 347
- Osorio, M., Anglada, G., Carrasco-González, C., et al. 2014, *ApJ*, 791, L36
- Panić, O., Ratzka, T., Mulders, G. D., et al. 2014, *A&A*, 562, A101
- Peeters, E., Mattioda, A. L., Hudgins, D. M., & Allamandola, L. J. 2004, *ApJ*, 617, L65
- Pilleri, P., Joblin, C., Boulanger, F., & Onaka, T. 2015, *A&A*, 577, A16
- Pino, T., Dartois, E., Cao, A.-T., et al. 2008, *A&A*, 490, 665
- Pirali, O., Vervloet, M., Dahl, J. E., et al. 2007, *ApJ*, 661, 919
- Pohl, A., Benisty, M., Pinilla, P., et al. 2017, *ApJ*, 850, 52
- Quanz, S. P., Avenhaus, H., Buenzli, E., et al. 2013, *ApJ*, 766, L2
- Quanz, S. P., Amara, A., Meyer, M. R., et al. 2015, *ApJ*, 807, 64
- Reggiani, M., Quanz, S. P., Meyer, M. R., et al. 2014, *ApJ*, 792, L23
- Ristein, J. 1998, *J. Appl. Phys.*, 84, 3836
- Roberts, K. R. G., Smith, K. T., & Sarre, P. J. 2012, *MNRAS*, 421, 3277
- Robertson, J. 1986, *Adv. Phys.*, 35, 317
- Sadjadi, S., Zhang, Y., & Kwok, S. 2017, *ApJ*, 845, 123
- Schütz, O., Meeus, G., & Sterzik, M. F. 2005, *A&A*, 431, 165
- Schworer, G., Lacour, S., Huéramo, N., et al. 2017, *ApJ*, 842, 77
- Seok, J. Y., & Li, A. 2016, *ApJ*, 818, 2
- Seok, J. Y., & Li, A. 2017, *ApJ*, 835, 291
- Sheu, S.-Y., Lee, I.-P., Lee, Y. T., & Chang, H.-C. 2002, *ApJ*, 581, L55
- Sloan, G. C., Bregman, J. D., Geballe, T. R., Allamandola, L. J., & Woodward, C. E. 1997, *ApJ*, 474, 735
- Sloan, G. C., Keller, L. D., Forrest, W. J., et al. 2005, *ApJ*, 632, 956
- Socrates, G. 2004, *Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies: Tables and Charts* (John Wiley & Sons)
- Song, I.-O., Kerr, T. H., McCombie, J., & Sarre, P. J. 2003, *MNRAS*, 346, L1
- Taha, A. S., Labadie, L., Pantin, E., et al. 2018, *A&A*, 612, A15
- Tallent, W. H., & Siewers, I. J. 1956, *Anal. Chem.*, 28, 953
- Tatulli, E., Benisty, M., Ménard, F., et al. 2011, *A&A*, 531, A1
- Tokunaga, A. T., Sellgren, K., Smith, R. G., et al. 1991, *ApJ*, 380, 452
- van Boekel, R., Waters, L. B. F. M., Dominik, C., et al. 2004, *A&A*, 418, 177
- van Boekel, R., Min, M., Waters, L. B. F. M., et al. 2005, *A&A*, 437, 189
- van der Plas, G., van den Ancker, M. E., Acke, B., et al. 2009, *A&A*, 500, 1137
- Van Kerckhoven, C., Tielens, A. G. G. M., & Waelkens, C. 2002, *A&A*, 384, 568
- Wagner, K. R., Daniel, A., & Kasper, M. 2017, *LPI Contributions*, 2042, 4028
- Woitke, P., Min, M., Pinte, C., et al. 2016, *A&A*, 586, A103
- Yang, X. J., Glaser, R., Li, A., & Zhong, J. X. 2013, *ApJ*, 776, 110
- Yang, X. J., Li, A., Glaser, R., & Zhong, J. X. 2016, *ApJ*, 825, 22
- Ysard, N., Köhler, M., Jones, A., et al. 2016, *A&A*, 588, A44

## Appendix A: Discs

### A.1. HD 100546

HD 100546 is one of the nearest very well-studied Herbig Be stars ( $d = 109 \pm 4$  pc; [Gaia Collaboration 2018](#); [Lindgren et al. 2016](#)). Based on high-contrast images obtained with the HST and with ground-based instruments, an elliptical structure was detected that extends up to 350–380 au ([Augereau et al. 2001](#)), and multiple-arm spiral patterns were identified ([Grady et al. 2001](#); [Ardila et al. 2007](#); [Boccaletti et al. 2013](#)). An inner dust disc extending from  $\sim 0.2$  au to  $\sim 1$ –4 au was resolved using near-IR interferometry ([Benisty et al. 2010](#); [Tatulli et al. 2011](#); [Mulders et al. 2013](#); [Panić et al. 2014](#)). The (pre-)transitional nature of HD 100546 was initially proposed by [Bouwman et al. \(2003\)](#) from an SED analysis. A gap that extends to up to 10–15 au has been confirmed by mid-IR interferometry ([Liu et al. 2003](#); [Panić et al. 2014](#)), spectroscopy in the UV and the near-IR ([Grady et al. 2007](#); [Brittain et al. 2009](#); [van der Plas et al. 2009](#)), and high-resolution polarimetric imaging in the optical and near-IR ([Quanz et al. 2015](#); [Garufi et al. 2016](#); [Follette et al. 2017](#)).

It is the first disc in which crystalline silicates ([Hu et al. 1989](#)) and aromatic bands ([Malfait et al. 1998](#)) have been detected. HD 100546 is one of the few HAeBe stars to simultaneously show strong aromatic band luminosity and warm gas line luminosities ([Meeus et al. 2012, 2013](#)). The 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$  aromatic features are spatially extended over a few 100 au ([van Boekel et al. 2004](#)), and the spatial distribution of the 3.3  $\mu\text{m}$  emission shows a gap in the innermost region ( $\sim 5$ –10 au) and is extended up to at least 50 au ([Habart et al. 2006](#)). The FWHM is about  $\sim 12 \pm 3$  au ([Geers et al. \(2007b\)](#)). In [Habart et al. \(2006\)](#), some additional features in the 3.4–3.5  $\mu\text{m}$  region have also been detected, which were at the time attributed to aliphatic C–H stretches in methyl or ethyl side-groups attached to PAHs ([Joblin et al. 1996](#); [Yang et al. 2013, 2016](#)) or nano-diamonds.

### A.2. HD 100453

The Herbig Ae star HD 100453A ( $d = 104 \pm 3$  pc,  $M = 1.7M_{\text{sol}}$ ; [Gaia Collaboration 2018](#); [Dominik et al. 2003](#)) is less bright and not studied as frequently as HD 100546. Its proto-planetary disc was recently revealed to host a gap ([Khalafinejad et al. 2016](#)) and a global two-arm spiral structure in a SPHERE/VLT image. This is consistent with a companion-driven origin ([Wagner et al. 2017](#), and reference therein). The primary A-star hosts an M-dwarf companion with a mass of  $\sim 0.2M$  and an angular separation of 1.05'', which corresponds to a projected physical separation of  $\sim 108$  au if the orbit is seen close to face-on ([Chen et al. 2006b](#); [Collins et al. 2009](#)). The spatially resolved mid-IR Q-band image obtained with Gemini north/MICHELLE indicates an outer gap edge at  $\sim 20$  au, and the disc is extended up to  $\sim 200$  au ([Khalafinejad et al. 2016](#)). Based on the Gemini Planet Imager (GPI) polarized intensity (PI), SPHERE data, and the IR SED fitting, [Long et al. \(2017\)](#) suggested that the circumstellar disc of HD 100453 appears to contain an inner disc, which, when an SED fitting was made, extends from 0.13–1 au, followed by a large radial gap (1–18 au) and an outer disc (18–39 au).

Its *Spitzer*/IRS spectrum shows a very weak sign of silicate features at 10 and 20  $\mu\text{m}$ , which also indicates a gap in the disc (e.g., [Mariñas et al. 2011](#); [Maaskant et al. 2013](#)). The aromatic features at 3.3, 6.2, 7.8, 8.6, 11.3, and 12.7  $\mu\text{m}$  are detected ([Meeus et al. 2001](#)), with secondary features observed at 5.7, 6.0, 10.6, 12.0, and 13.5  $\mu\text{m}$ , and the 6.8 and 7.2  $\mu\text{m}$  aliphatic bands ([Acke et al. 2010](#)). HD 100453 also displays an emission feature at 16–19  $\mu\text{m}$  that might be attributed to the out-of-plane

skeletal modes of large elongated PAH molecules ([Peeters et al. 2004](#); [Acke et al. 2010](#)). The 3.3  $\mu\text{m}$  aromatic feature is spatially extended with an FWHM equal to  $\sim 20$  au. ([Habart et al. 2006](#); [Klarmann et al. 2017](#)) presented near-IR interferometric observations that showed extended flux that might be evidence for carbonaceous stochastically heated particles in the inner region of the proto-planetary discs around HD 100453.

### A.3. HD 169142

HD 169142 is a Herbig Ae star (A5Ve; [Keller et al. 2008](#)) that is well studied at a distance of  $117 \pm 4$  pc ([Grady et al. 2007](#); [Manoj et al. 2006](#); [Gaia Collaboration 2018](#)). It shows an (almost face-on) disc with (i) multiple gaps (an inner gap between  $\sim 1$  and  $\sim 20$  au and a middle gap between  $\sim 30$  and  $\sim 55$  au), (ii) dust rings at the edge of the gaps (at  $\sim 20$ –30 au and at 55–85 au), and (iii) an outer disc (e.g., [Honda 2013](#); [Quanz et al. 2013](#); [Osorio et al. 2014](#); [Momose et al. 2015](#); [Fedele et al. 2017](#); [Ligi et al. 2017](#); [Bertrang et al. 2017](#)).

[Seok & Li \(2016\)](#) and [Pohl et al. \(2017\)](#) also modelled the dust population according to its location or its evolution. [Seok & Li \(2016\)](#) performed a comprehensive modelling of its SED as well as the PAH emission features with porous dust and astronomical-PAHs and found that three dust populations and relatively small PAH molecules with an ionisation fraction of 0.8 can explain the entire SED and the observed PAH features<sup>4</sup>. In this disc, the aromatic feature at 3.3  $\mu\text{m}$  is clearly detected with the other aromatic bands at 6.2, 7.8, 8.6, 11.3 and 12.7  $\mu\text{m}$  ([Meeus et al. 2001](#); [Sloan et al. 2005](#)), as well as secondary features observed at 5.7, 6.0, 10.6, 12.0, and 13.5  $\mu\text{m}$ , and the 6.8 and 7.2  $\mu\text{m}$  aliphatic bands ([Acke et al. 2010](#)). The 3.3  $\mu\text{m}$  aromatic feature appears to be observed in the inner cavity and is spatially extended with an FWHM of 0.3'' or  $\sim 30$  au ([Habart et al. 2006](#), and this paper).

### A.4. HD 179218

The star HD 179218 is at a distance of  $\sim 290$  pc ([Gaia Collaboration 2018](#)) with a B9 spectral type and a strong luminosity of  $\sim 180 L$ . It harbours a circumstellar disc that is revealed through its IR excess and that is well known for its silicate-dominated IR spectrum ([Bouwman et al. 2001](#); [Schütz et al. 2005](#); [van Boekel et al. 2005](#)). Its IR spectra are dominated by crystalline forsterite and enstatite and not by small, amorphous silicate grains. HD 179218 is known to have a high percentage of crystalline dust. This indicates dust processing in the circumstellar disc of HD 179218, and the presence of cold enstatite at  $\sim 10$  au implies that it is mostly produced in the inner regions and is transported outwards by radial mixing ([van Boekel et al. 2005](#)). A double-ring-like emission at 10  $\mu\text{m}$  has been spatially resolved (e.g. [Fedele et al. 2008](#)), and it peaks at  $\sim 1$  and 20 au, respectively. A gap at  $\sim 10$  au is reported based on the mid-IR interferometry with VLTI/MIDI.

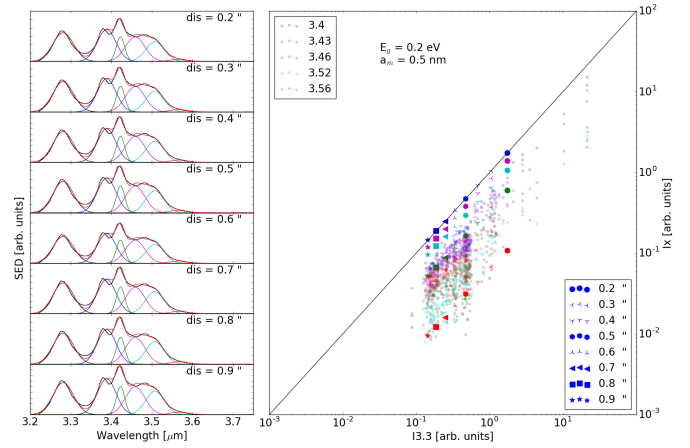
The aromatic feature at 3.3  $\mu\text{m}$  is detected, as well as the other aromatic bands at 6.2, 7.8, and 8.6  $\mu\text{m}$  ([Meeus et al. 2001](#); [Acke & van den Ancker 2004](#); [Acke et al. 2010](#)). A very recent study shows that has for the first time spatially resolved the aromatic emission of the disc ([Taha et al. 2018](#)). The average FWHM of the 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$  is of 0.232'' or 67 au and 0.280'' or 81 au. Based on spatial and spectroscopic considerations as well

<sup>4</sup> Similar PAHs properties are derived by [Seok & Li](#) for HD 100453 and HD 179218, while for HD 100546 relatively large PAHs with a small ionization fraction are found. The ionization fraction is the probability of finding a PAH molecule in a nonzero charge state ([Li & Lunine 2003](#)).

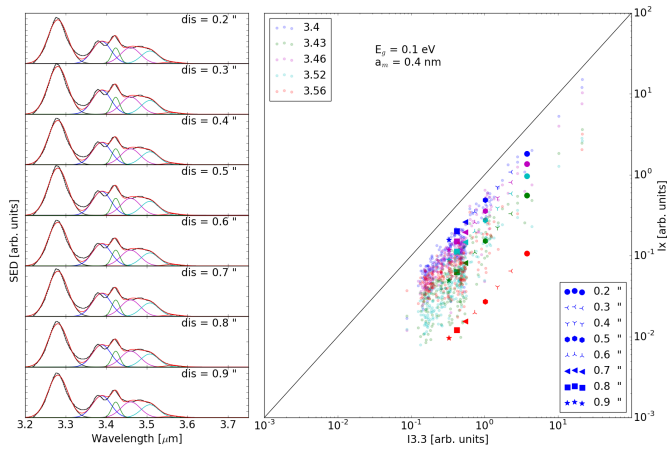
as on qualitative comparison with IRS 48 and HD 97048, the authors favoured a scenario in which PAHs extend out to large radii across the flared disc surface and are at the same time predominantly in an ionised charge state that is due to the strong UV radiation field of the central star. The  $3.3\ \mu\text{m}$  aromatic feature is detected from  $0.1''$  until  $0.5''$  or  $150\ \text{au}$  from the central star. In this study, we find that the FWHM is about  $0.2''$  or  $\sim 60\ \text{au}$ . Kluska et al. (2018) presented near-IR interferometric observations showing extended flux that might be evidence for carbonaceous stochastically heated particles in the inner region of the proto-planetary discs around HD 179218.

### Appendix B: Comparison of THEMIS with observations

Figures B.1 and B.2 show correlations between the aliphatic bands and the aromatic band for two sets of parameters obtained with THEMIS: ( $E_g = 0.2\ \text{eV}$ ,  $a_{\text{min}} = 5\ \text{nm}$ ) and ( $E_g = 0.1\ \text{eV}$ ,  $a_{\text{min}} = 4\ \text{nm}$ ), respectively. See Sect. 6 for details.



**Fig. B.2.** Correlation between intensities in bands 3.4, 3.43, 3.46, 3.52, and 3.46 and the band at  $3.3\ \mu\text{m}$ , underlined by those calculated for pixels of HD 100546 that were previously shown in Fig. 4.



**Fig. B.1.** Correlation between intensities in bands 3.4, 3.43, 3.46, 3.52, and 3.46 and the band at  $3.3\ \mu\text{m}$ , underlined by those calculated for pixels of HD 100546 that were previously shown in Fig. 4.

### 3.4 Variation du rapport 3.4/3.3 en fonction de $G_0/n_H$

Cette section complète la discussion sur la variation du rapport 3.4/3.3 en fonction des conditions d'irradiation (Sect. 5.5 du papier). Comme on l'a vu dans les chapitres 1 et 2, l'émission des bandes à 3.3 et 3.4  $\mu\text{m}$  dépend de la composition et de la taille des nano-particules les plus petites. Dans le cas des disques protoplanétaires, ces particules émettent depuis la surface où les conditions d'irradiation UV et la densité d'hydrogène varient radialement de plusieurs ordres de grandeur. D'un côté, l'intensité du champ de radiation UV  $G_0$  participe à la dé-hydrogénation/aromatization de la poussière carbonée. Proche de l'étoile, pour des valeurs de  $G_0$  élevées, les nano-particules sont détruites rapidement. De l'autre côté, les atomes d'hydrogène présents en phase gazeuse et exprimés en terme de densité  $n_H$  tendent à ré-hydrogéner la poussière. Ainsi, l'observation du rapport 3.4/3.3 en fonction du rapport  $G_0/n_H$  est sans doute pertinente dans le contexte des disques pour tracer l'évolution de la poussière avec les conditions physiques.

La figure 3.5 présente l'évolution du rapport 3.4/3.3 en fonction de  $G_0/n_H$  à la surface des disques protoplanétaires considérés et pour la PDR NGC 7023 (PILLERI et al. 2015). Pour NGC 7023, le rapport 3.4/3.3 pour les différentes positions a été réévalué en utilisant la méthode de décomposition décrite dans BOUTÉRAON et al. (2019). Les valeurs de  $G_0$  et  $n_H$  sont issues de PILLERI et al. (2015) et KÖHLER et al. (2014), respectivement. Pour les disques,  $G_0$  est simplement donné par le flux reçu à une certaine distance et émis par des corps noir ayant la température effective et la luminosité des étoiles centrales des disques. L'estimation de  $n_H$  est basée sur le modèle standard de disque présenté dans WOITKE et al. (2016).

Pour des valeurs de  $G_0/n_H < 10$ , les valeurs du rapport 3.4/3.3 varient assez peu  $\sim 30$ -35. Pour un  $G_0/n_H \sim 100$ , le rapport 3.4/3.3 vaut  $\sim 0.2$ . Le fait que le rapport 3.4/3.3 varie assez peu pour  $10^{-4} < G_0/n_H < 10$  traduisant des conditions physiques très différentes, suggère un mécanisme de renouvellement des nano-particules à la surface des disques et dans les PDR. Les études de BERNÉ et al. (2009), SEOK et LI (2017) vont dans ce sens. Pour  $G_0/n_H \sim 100$ , la diminution du rapport 3.4/3.3 pourrait indiquer un seuil au-delà duquel la transformation/destruction des nano-particules est plus rapide que leur renouvellement.

Il s'agit là d'une première estimation de cette observable que la décomposition plus robuste des données avec une nouvelle méthode de MARCHAL et al. (2019) et une modélisation plus fine tenant compte de la structure des disques et du transfert radiatif avec POLARIS (REISSL et al. 2016, BRAUER et al. 2017) vont permettre de compléter.

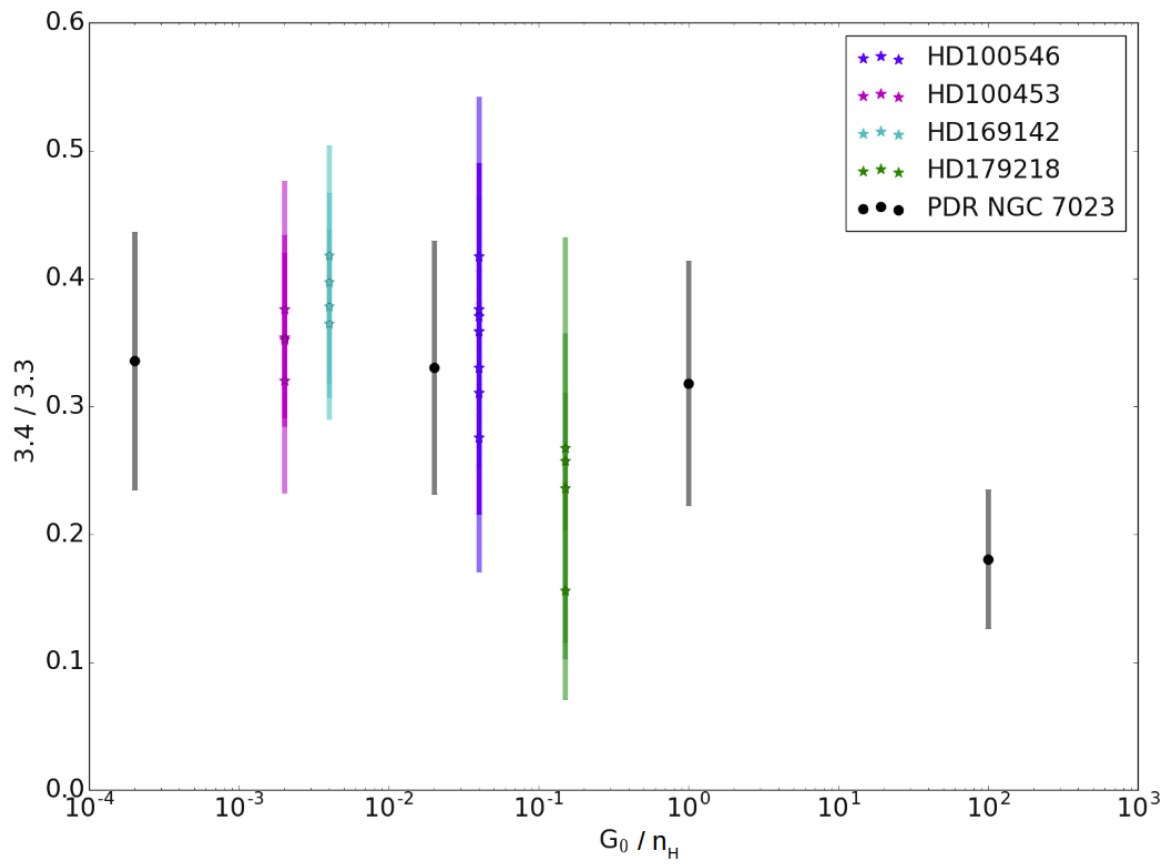


FIGURE 3.5 – Variation du rapport 3.4/3.3 en fonction de  $G_0/n_H$





## Chapitre 4

# Distribution spatiale des signatures aromatiques et aliphatiques des nano-grains carbonés dans le disque protoplanétaire de HD 100546

### Sommaire

---

<a href="#">4.1 Résumé</a> .....	116
<a href="#">4.2 Papier</a> .....	117
<a href="#">4.3 Analyse des spectres dans les régions proches de l'étoile</a> .....	136

---

Accès direct aux chapitres [1](#), [2](#), [3](#), [4](#), [conclusion](#)

## 4.1 Résumé

Ce chapitre présente la distribution spatiale des signatures aromatiques (AIB) à 3.3, 8.6 et 11.3  $\mu\text{m}$  et aliphatiques entre 3.4 et 3.5  $\mu\text{m}$  associées aux nano-grains carbonés dans le disque protoplanétaire (pré-)transitionnel de HD 100546.

Cette étude utilise les observations spectroscopiques en optique adaptative NaCo à une résolution angulaire de  $\sim 0.1''$  présentées dans le chapitre 3 et sur des données d'imagerie et de spectroscopie VISIR entre 8 et 12  $\mu\text{m}$  à une résolution de  $\sim 0.3''$ . Les cartes présentées dans le papier ont été produites à partir de la décomposition en gaussiennes des données NaCo avec l'outil ROHSA (MARCHAL et al. 2019). Les observations sont comparées aux prédictions de modèles de disques basés sur le modèle de poussière THEMIS et le code de transfert radiatif POLARIS pour différentes structures de disque.

### HD 100546

HD 100546 est l'une des étoiles Herbig Be proches les plus étudiées. Située à une distance de  $\sim 110$  pc (GAIA COLLABORATION et al. 2018), elle montre la présence d'un disque évasé et elliptique s'étendant jusqu'à 350-380 au (AUGEREAU et al. 2001) qui présente de multiples bras spiraux (GRADY et al. 2001, ARDILA et al. 2007, BOCCALETTI et al. 2013, AVENHAUS et al. 2014) et une inclinaison inférieure à  $50^\circ$  (AVENHAUS et al. 2014). Un disque interne entre  $\sim 0.2$  et  $\sim 1.4$  au est mis en évidence par interférométrie IR (BENISTY et al. 2010, TATULLI et al. 2011, MULDER et al. 2013, PANIĆ et al. 2014). La présence d'un gap s'étendant jusqu'à 10-15 au est confirmée par interférométrie IR (LIU et al. 2003, PANIĆ et al. 2014), spectroscopie UV et proche IR (GRADY et al. 2007, BRITAIN et al. 2009, VAN DER PLAS et al. 2009) et imagerie polarimétrique à haute résolution dans le visible et le proche IR (AVENHAUS et al. 2014, QUANZ et al. 2015, GARUFI et al. 2016, FOLLETTE et al. 2017). Une observation récente d'ALMA révèle un anneau asymétrique entre 20 et 40 au avec une émission de poussière optiquement fine (PINEDA et al. 2019). MILEY et al. (2019) estiment une limite basse de la masse de gaz de  $\sim 1\%$  de la masse l'étoile et un rapport de masse gaz/poussière de  $\sim 20$ . HD 100546 est aussi un des rares cas de disques où la présence d'une protoplanète est suggérée (QUANZ et al. 2015, CURRIE et al. 2015) mais reste toujours débattue (FOLLETTE et al. 2017, RAMEAU et al. 2017).

HD 100546 est le premier disque dans lequel ont été détectées les silicates cristallins (HU et al. 1989) et des AIB intenses entre 3 et 13  $\mu\text{m}$  (MALFAIT et al. 1998). Ces bandes sont mélangées avec des sous-bandes plus faibles (e.g., ACKE et al. 2010, BOUTÉRAON et al. 2019; et Chap 3) et spatialement étendues (VAN BOEKEL et al. 2004, HABART et al. 2006).

L'étude de SEOK et LI (2017) trouve que les porteurs des AIB sont majoritairement neutres avec un fraction d'ionisation de 20%, une masse  $M_{\text{PAH}} = 5.37 \times 10^{-6} M_{\oplus}$  et une taille moyenne de 5.64 Å. Cette taille est similaire à celle requise pour expliquer les observations du MIS diffus, et en accord avec l'analyse du chapitre 3 (BOUTÉRAON et al. 2019).

### Résultats

De l'analyse des observations et de la modélisation que nous avons faite, nous trouvons :

1. Les signatures aromatiques et aliphatiques entre 3.3 et 3.5  $\mu\text{m}$  sont spatialement étendues et présentent une certaine structuration (Fig. 1 du papier).
2. Le rapport de bandes aliphatique/aromatique  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$  montre une augmentation d'un facteur 2 avec la distance à l'étoile depuis  $\sim 0.2''$  ( $\sim 20$  au) à  $\sim 1''$  ( $\sim 100$  au). Cela est un argument en faveur de l'évolution de la composition des nano-particules qui sont aromatisées par le rayonnement UV dans les régions centrales.
3. Le modèle prédit que les bandes aromatiques et aliphatiques sont dues à différentes contributions de sous-populations de grains selon l'intensité du champ de rayonnement et la longueur d'onde. Les signatures à 3.3 et 3.4  $\mu\text{m}$  sont principalement dues aux particules sub-nanométriques d'une taille inférieure à 0.7 nm pour des  $G_0$  élevé et faible. L'émission à 8.6 et

11.3  $\mu\text{m}$  est principalement dues aux nano-particules d'une taille inférieure à 1.5 nm pour des valeurs de  $G_0$  faibles et à la contribution de plusieurs populations de grains pour des  $G_0$  plus élevées. Le continuum à 10.4  $\mu\text{m}$  est principalement dû aux grains sub-microniques près de l'étoile. Loin de l'étoile, il est dominé par les nano-particules.

4. Des signatures caractéristiques de silicates cristallins entre 8 et 12  $\mu\text{m}$  sont détectées sur les spectres observés de l'étoile et jusqu'à une distance de 1". L'émission dans la bande à 11.3  $\mu\text{m}$  augmente entre 0.5 et 1.5" puis domine le spectre à 2", en accord avec notre modélisation.
5. Le continuum à 10  $\mu\text{m}$  est spatialement étendu, comme les bandes à 8.6 et 11.3  $\mu\text{m}$ . Cela est en accord avec notre modèle qui prédit que l'émission continuum est principalement causées par les nano-particules loin de l'étoile.
6. La modélisation permet de bien reproduire les profils d'émission spatiale dans les bandes à 3.3 et 3.4  $\mu\text{m}$ , excepté pour les régions 20-40 au où l'émission observée est plate et n'augmente pas avec l'intensité du champ de rayonnement UV  $G_0$ . Les origines possibles de ces différences sont les variations des propriétés des nano-grains et des effets de structure du disque qui ne sont pas pris en compte par nos modèles.
7. Les modèles reproduisent bien les flux intégrés dans les AIB. Cependant, le profil et l'intensité de l'émission du continuum observée à 10  $\mu\text{m}$  ne sont pas bien reproduites par le modèle, l'émission observée étant plus abrupte et sous-estimée par le modèle. Cette différence peut s'expliquer par les changements dans les distributions radiales et verticales des nano-particules avec une taille supérieure à 0.7 nm et pour lesquelles nous n'avons pas de contrainte avec NaCo.

## 4.2 Papier

N.B : ce papier est actuellement soumis à *Astronomy & Astrophysics* dont le style d'édition est utilisé pour le papier qui suit.

# Spatial distribution of the aromatic and aliphatic from carbonaceous nano-grains features in the protoplanetary disk around HD 100546

T. Boutéraon<sup>1</sup>, R. Brauer<sup>1,2</sup>, E. Habart<sup>1</sup>, N. Ysard<sup>1</sup>, E. Pantin<sup>2</sup>, A. Marchal<sup>1,3</sup>, A.P. Jones<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut d'Astrophysique Spatiale (IAS), UMR 8617-CNRS Université Paris Sud, 91405 Orsay, France  
e-mail: thomas.bouteraon@ias.u-psud.fr

<sup>2</sup>IRFU/SAP Service D'Astrophysique, CEA, Gif-sur-Yvette, France

<sup>3</sup>AIM, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

Submitted 26 July 2019

## ABSTRACT

**Context.** Carbonaceous nano-grains are present at the surface of protoplanetary disks around Herbig Ae/Be stars, where most of the ultraviolet energy from the central star is dissipated. Efficiently coupled to the gas, they are unavoidable in the understanding of the physics and chemistry of these disks. Furthermore, nano-grains are able to trace the outer flaring parts of the disk, as well as, the gaps from which the larger grains are missing. However, their evolution through the disks, from internal to external regions are not yet well understood.

**Aims.** Our aim is to examine the spatial distribution and evolution of the nano-dust emission in the emblematic (pre-)transitional protoplanetary disk HD 100546. This disk shows many structures (annular gaps, rings, and spirals) and reveals very rich carbon nano-dust spectroscopic signatures (aromatic, aliphatic) in a wide spatial range of the disk ( $\sim 20 - 200$  au).

**Methods.** We analyse adaptive optics spectroscopic observations in the 3-4  $\mu\text{m}$  range (angular resolution of  $\sim 0.1''$ ), as well as, imaging and spectroscopic observations in the 8-12  $\mu\text{m}$  range (angular resolution of  $\sim 0.3''$ ). The hyper-spectral cube is decomposed into a sum of spatially coherent dust components using the Gaussian decomposition algorithm ROHSA (Regularized Optimization for Hyper-Spectral Analysis). We compare the data to model predictions using The Heterogeneous dust Evolution Model for Interstellar Solids (THEMIS) integrated into the radiative transfer code POLARIS by calculating the thermal and stochastic heating of micro- and nanometre-sized dust grains for a given disk structure.

**Results.** We find that the aromatic features at 3.3, 8.6, and 11.3  $\mu\text{m}$ , as well as, the aliphatic features between 3.4 and 3.5  $\mu\text{m}$  are spatially extended, with each band showing a specific morphology dependent on the local physical conditions. The aliphatic-to-aromatic band ratio, 3.4/3.3, increases with the distance to the star from  $\sim 0.2$  (at 0.2" or 20 au) to  $\sim 0.45$  (at 1" or 100 au). This is in agreement with previous studies and argues for an evolution of the composition of nano-materials which are more aromatic in the disk parts closer to the star with high UV field. In the 8-12  $\mu\text{m}$  observed spectra, several features characteristic of aromatic particles and crystalline silicates are detected with their relative contribution changing with the distance to the star. We model the sub- and main features characterising bonds between carbon and hydrogen considering grain sizes from 0.4 to 20 nm with size-dependent optical properties. The model predicts that the features and adjacent continuum are due to different combinations of grain sub-populations, with in most cases a high dependence on the intensity of the UV field. Shorter wavelength features are dominated by the smallest ones ( $a < 0.7$  nm) throughout the disk, while at longer wavelengths what dominates the emission close to the star is a mix of several grain populations, and far away from the star is the largest nano-grain population. The observed and predicted continuum emissions at 10  $\mu\text{m}$  are in fact spatially extended, but the observed emission is nevertheless higher and steeper than predicted. The model reproduces well the spatial emission profiles of the 3.3 and 3.4  $\mu\text{m}$  bands, except for the inner 20-40 au where the observed emission is flat and does not increase anymore with the UV field. These differences could be explained by several possibilities.

**Conclusions.** With our approach that combines both, observational data in the near- to mid-IR and disk modelling, we deliver constraints on the spatial distribution of nano-dust particles in link to the disk structure and radiation field.

**Key words.** protoplanetary disk - carbonaceous dust-IR emission - dust model - radiative transfer code

## 1. Introduction

The objective of this article is to study the spatial distribution and possible changes in the properties of carbon nano-dust in protoplanetary disks (PPDs). Carbon nano-dust, detected under more or less organised structures and different ionisation states, constitutes a major component of dust in the interstellar and circumstellar environments. Vibrational emission bands in the near- to mid-IR from nano-carbon dust have been observed towards PPDs around most of the Herbig Ae stars, about half of the Her-

big Be stars, and a few T-Tauri stars (e.g. Brooke et al. 1993; Acke & van den Ancker 2004; Acke et al. 2010; Seok & Li 2017). Contrary to large grains, these tiny and numerous carbon grains are well coupled to the gas and do not settle towards disk midplanes. It results in different spatial distributions with tiny grains present at the disk surfaces (e.g. Meeus et al. 2001; Habart et al. 2004; Lagage et al. 2006) and in the cavity or gaps from which the pebbles are missing (e.g. Geers et al. 2007; Kraus et al. 2013; Klarmann et al. 2017; Kluska et al. 2018; Maaskant et al. 2013). The presence of the very small carbon grains in the irra-

diated disk layers may have strong consequences (e.g. Gorti & Hollenbach 2008). As in the irradiated regions of the interstellar medium, they are the prevalent contributors to the energetic balance because they are very efficient at absorbing UV photons and heating the gas via the photoelectric effect. The highest fluxes of lines tracing the warm gas (e.g., [OI] 63 and [OI] 145  $\mu\text{m}$ , H<sub>2</sub> 0-0 S(1), high-J CO) are found in PPDs which show a large amount of flaring and high aromatic band strength (e.g. Meeus et al. 2013). Moreover, due to their large effective surface area, they may dominate the catalytic formation of key molecules as H<sub>2</sub>, as well as the charge balance. The disk structure further may depend on the level of nano-grains coupling with the gas. Characterising the size and properties of these tiny grains through the disks, from internal to external regions, is thus of prime importance to understand the structure and evolution of PPDs.

In a recent paper, Boutéraon et al. (2019) showed the presence of several spatially extended near-IR spectral features that are related to aromatic and aliphatic hydrocarbon material in PPDs around Herbig stars, from 10 to 50-100 au, and even in inner gaps that are devoid of large grains. The correlation between aliphatic and aromatic CH stretching bands suggested common carriers for all features. Since these hydrocarbon nano-particles are a priori easily destroyed by UV photons (e.g. Muñoz Caro et al. 2001; Mennella et al. 2001; Gadallah et al. 2012), this probably implies that they are continuously replenished at the disk surfaces. In the continuity of the Boutéraon et al. (2019) study, we investigate here the nano-dust properties in disks thanks to a decomposition tool applied to spectra, complementary observations at longer mid-IR wavelengths, and the coupling of THEMIS (The Heterogeneous dust Evolution Model for Interstellar Solids, Jones et al. 2017) with the radiative transfer code POLARIS (POLARized RadIation Simulator, Reissl et al. 2016; Brauer et al. 2017). We focus on the emblematic protoplanetary disk HD 100546, in transitional phase from a gas-rich to a dust debris disk (e.g. Bouwman et al. 2003).

The paper is organised as follows. Section 2 provides a description of the protoplanetary disk HD 100546. In Sect. 3, we analyse the adaptive optics spectroscopic observations in the L band obtained with NAOS-CONICA (NaCo) at VLT (Very Large Telescope) using ROHSA for the decomposition. Imaging and spectroscopic observations obtained with VISIR (VLT Imager and Spectrometer for mid Infrared) at VLT are also presented and analysed. In Sect. 4, the disk modelling with the THEMIS dust model and the radiative transfer code POLARIS are presented. In Sect. 5, we compare the model predictions to the NaCo and VISIR observations. In Sect. 6, our results concerning the nano-dust evolution are discussed.

## 2. HD 100546

HD 100546 is one of the closest very well studied Herbig Be stars ( $d = 110 \pm 4$  pc, Gaia Collaboration et al. 2018). It shows a clear evidence of a large flared disk and, based on Hubble Space Telescope (HST) and ground-based high-contrast images, an elliptical structure was detected that extends up to 350–380 au (Augereau et al. 2001). Furthermore, multiple-armed spiral patterns were identified as well (Grady et al. 2001; Ardila et al. 2007; Boccaletti et al. 2013; Avenhaus et al. 2014). The disk position angle measurements found in the literature ranges from  $\sim 130$  to  $160^\circ$  (Grady et al. 2001; Pantin et al. 2000; Ardila et al. 2007; Panić et al. 2014; Augereau et al. 2001; Avenhaus et al. 2014) and the inclination of the disk is smaller than  $50^\circ$  (Avenhaus et al. 2014). An inner dust disk extending from  $\sim 0.2$  to  $\sim 1 - 4$  au was resolved using near-IR interferometry (Benisty

et al. 2010; Tatulli et al. 2011; Mulders et al. 2013; Panić et al. 2014). The (pre-)transitional nature of HD 100546 was initially proposed by (Bouwman et al. 2003) based on a spectral energy distribution (SED) analysis. The presence of a gap extending up to 10-15 au has been confirmed by mid-IR interferometry (Liu et al. 2003; Panić et al. 2014), spectroscopy in the UV and near-IR (Grady et al. 2005; Brittain et al. 2009; van der Plas et al. 2009), and high-resolution polarimetric imaging in the optical and near-IR (Avenhaus et al. 2014; Quanz et al. 2015; Garufi et al. 2016; Follette et al. 2017). Recent ALMA observations reveal an asymmetric ring between  $\sim 20 - 40$  au with largely optically thin dust emission (Pineda et al. 2019). A central compact emission is also detected, which arises from the inner central disk, that, given its mass and the accretion rate onto the star, must be replenished with material from the outer disk. Miley et al. (2019) presented the first detection of C<sup>18</sup>O in this disk, which spatially coincides with the spiral arms, and derived a lower-limit on the total gas mass (around 1% of the stellar mass) and a gas-to-dust mass ratio in the disk of  $\sim 20$  assuming ISM abundances of C<sup>18</sup>O relative to H<sub>2</sub>. HD 100546 is also one of the few cases where protoplanet candidates have been suggested (e.g. Quanz et al. 2015; Currie et al. 2015) although this is still being debated (e.g. Follette et al. 2017; Rameau et al. 2017; Pérez et al. 2019). Recently, Pérez et al. (2019) detected a compact 1.3 mm continuum dust emission source which lies in the middle of the HD 100546 cavity (0.051" from the central star) which is compatible with circumplanetary disk emission.

On the other hand, this disk with high density and temperature coupled with high UV flux on its surface presents a very rich spectroscopy and variations in the chemical and physical dust structural properties. HD 100546 is the first disk in which crystalline silicates and intense aromatic bands between 3 and 13  $\mu\text{m}$  have been detected (Hu et al. 1989; Malfait et al. 1998). The carriers of these bands can be attributed to polyaromatic species and associated with an emission mechanism based on polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) photophysics. These intense bands are blended with many fainter sub-bands (e.g. Acke et al. 2010; Boutéraon et al. 2019) and are spatially extended on a few 100 au scale (van Boekel et al. 2004; Habart et al. 2006). In Boutéraon et al. (2019), we presented the diversity of the sub-features in the 3-4  $\mu\text{m}$  range where C-H vibrational modes are observed. These modes are particularly interesting since they characterise the bonds between carbon and hydrogen atoms varying according to their local environment and strongly depending on the hydrocarbon grain sizes. Constraints can thus be derived for the grain size distribution and the hydrogen-to-carbon ratio in the grains, depending on their more or less aromatic or aliphatic nature.

Seok & Li (2017) extracted the global mid-IR nano-carbon dust spectrum of HD 100546 and analysed it using the Li & Draine (2001) and Draine & Li (2007) astro-PAH model. They found that most of the PAHs are neutral, with a low ionisation fraction of 0.2, and a mass distribution peaked at 5.64 Å (log-normal size distribution centred at 0.5 Å with a width of 0.2), similar to what is required to explain diffuse ISM observations. These results are in agreement with the analysis made by Boutéraon et al. (2019) using the THEMIS amorphous hydrogenated carbon nano-grains. Assuming that all PAHs are located at 10 au from the central star, Seok & Li (2017) found a total PAH mass in the disk of  $M_{\text{PAH}} = 5.37 \times 10^{-6} M_{\oplus}$ .

Finally, HD 100546 is one of the few Herbig Ae/Be stars to show a strong luminosity in the aromatic bands and warm gas lines such as the rotational and rovibrational lines of H<sub>2</sub> (Carmona et al. 2011), CH<sup>+</sup> (Thi et al. 2011) and CO (Meeus et al.

**Table 1.** Band centre ( $\lambda_0$ ,  $\nu_0$ ) and FWHM variations in laboratory experiments (see references in Jones et al. (2013) and Boutéraon et al. (2019)).

band	$\lambda_0$ [ $\mu\text{m}$ ]	FWHM [ $\mu\text{m}$ ]	$\nu_0$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	FWHM [ $\text{cm}^{-1}$ ]
sp <sup>2</sup> CH aro	3.268 - 3.295	0.005 - 0.057	3060 - 3035	5 - 53.1
sp <sup>2</sup> CC aro	8.60	0.665	1163	90
sp <sup>2</sup> CH aro	11.236 - 11.364	0.252 - 0.517	890 - 880	20 - 40
sp <sup>2</sup> CH <sub>2</sub> ole. asy str	3.240 - 3.249	0.014 - 0.045	3089 - 3078	13.3 - 42.4
sp <sup>2</sup> CH ole.	3.311 - 3.344	0.008 - 0.062	2990 - 3020	7 - 56.3
sp <sup>2</sup> CH <sub>2</sub> ole. sym str	3.350 - 3.396	0.003 - 0.028	2985 - 2945	3 - 25
sp <sup>2</sup> CH <sub>3</sub> ali. asy str	3.378 - 3.384	0.008 - 0.033	2960 - 2955	7 - 29.3
sp <sup>3</sup> CH <sub>2</sub> ali. asy str	3.413 - 3.425	0.006 - 0.034	2930 - 2920	5 - 28.9
sp <sup>3</sup> CH tertiary ali. / Fermi resonance	3.425 - 3.47	0.006 - 0.036	2920 - 2882	5 - 30
sp <sup>3</sup> CH <sub>3</sub> ali. sym str	3.466 - 3.486	0.006 - 0.034	2885 - 2869	5 - 27.8
sp <sup>3</sup> CH <sub>2</sub> ali. sym str	3.503 - 3.509	0.006 - 0.051	2855 - 2850	5 - 41.8
sp <sup>3</sup> CH <sub>2</sub> ali. sym str wing	3.552	0.039 - 0.068	2815	31 - 53.6

2012, 2013) at the same time. This strongly suggests that the carriers of the aromatic bands which efficiently absorb the stellar UV radiation are one, if not the main, source of the gas heating through photoelectric effect in the warm disk surfaces (e.g. Meeus et al. 2013).

### 3. NaCo and VISIR observations

#### 3.1. NaCo observations and data decomposition using ROHSA

##### 3.1.1. Observations

NaCo observations were performed using a long slit in the L-band, between 3.20 and 3.76  $\mu\text{m}$  with the adaptive optics system NaCo at the VLT. The on-sky projection of the slit is 28"-long and 0.086"-wide, which corresponds to the diffraction limit in this wavelength range. The pixel scale is 0.0547" and the spectral resolution is  $R = \lambda/\Delta\lambda \sim 1000$ . We took nine slit positions, one centred on the star and the other slits shifted by a half width. Nine positions allowed to extract a spectral cube on an area star-centred of  $2'' \times 0.354''$ . The long slit was aligned with the major axis of the disk as resolved in scattered light (Augereau et al. 2001; Grady et al. 2001) with a position angle of  $160^\circ$  measured north to east. The data set reference is 075.C-0624(A) and observations characteristics and data reduction are summarised in Boutéraon et al. (2019).

##### 3.1.2. Spectral cube decomposition using ROHSA

The NaCo spectral cube was decomposed using ROHSA in order to produce maps in the various dust features observed in the 3.20 to 3.76  $\mu\text{m}$  spectral range. ROHSA is based on a regularised non-linear criterion that takes into account the spatial coherence of the emission (Marchal et al. 2019). To fit the cube, a multi-resolution process from coarse to fine grid is used. First, a Gaussian decomposition with a fix number of Gaussians  $N$  is performed on a spatially averaged version of the data (corresponding at the first iteration to the mean spectrum of the cube). So far, the method is similar to the one described in Boutéraon et al. (2019). The solution is then interpolated step by step at higher resolution until the initial resolution of the observations is reached. At each step of this process, the algorithm converges towards a solution that, for each Gaussian, is spatially coherent. Additionally, ROHSA minimises the variance of the dispersion of each component meaning that on average a Gaussian will have a similar width across the disk. It turned out that due to a strong

spectral blinding of the signatures, this minimisation is essential for their separation. This commanded spatial coherence allows to remove the random noise. Note that the central parts of the spectral cube are not provided to ROHSA because the signal-to-noise ratio in the bands is too low due to a strong continuum emission.

##### 3.1.3. Results

Figure 1 shows the result of the decomposition for spectra coming from different locations in the disk (Fig. 2). Twenty-eight Gaussians are needed to fully describe the signal and to fit the spectra towards the entire cube. We assume that a physical signature can be reproduced by several Gaussians. We gather Gaussians according to their central wavelength as in Boutéraon et al. (2019) who considered six features related to carbonaceous materials: one aromatic signature at 3.3  $\mu\text{m}$ , and five aliphatic ones at 3.4, 3.43, 3.46, 3.52, and 3.56  $\mu\text{m}$  (Fig. A.1). We move aside the Gaussians expected to be related to telluric bands.

For the 3.3  $\mu\text{m}$  aromatic band, we consider two Gaussians, one narrow centred at 3.297  $\mu\text{m}$  and one broader centred at 3.306  $\mu\text{m}$ . As discussed in Boutéraon et al. (2019), these two components could originate from two distinct kinds of bonding: aromatic and olefinic, respectively. For the 3.4  $\mu\text{m}$  aliphatic band, we consider three Gaussians, two narrow ones centred at 3.398 and 3.409  $\mu\text{m}$ , and one broader centred at 3.403  $\mu\text{m}$ . In this study, we focus only on these two features since they are brighter and less blended than the others.

Figure 2 shows the maps in the 3.3  $\mu\text{m}$  aromatic and 3.4  $\mu\text{m}$  aliphatic emission bands and Fig. 3 shows their average spatial emission profiles according to the distance  $d$  to the star. These two emission bands, due to transient emission after UV photon absorption, may trace the surface of the disk where most of the UV energy is dissipated and converted into near- to mid-IR emission by dust. The carriers being stochastically heated, the band intensities are proportional to the strength of the FUV radiation field given by  $G_0$  expressed in units of the average interstellar radiation field,  $1.6 \times 10^{-3} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$  (Habing 1968). The band emission is thus expected to be much more spatially extended than the IR thermal emission of big grains at thermal equilibrium. The maps and the spatial profiles show that the emission in the 3.3 and 3.4  $\mu\text{m}$  bands is in fact spatially extended up to  $\sim 1''$  (or  $\sim 110 \text{ au}$ ) and for both bands, we observe an emission peak between 0.2" and 0.4", or 22 and 44 au, located just after the inner edge of the outer disk at about 10-15 au. The decrease in emission for  $d > 0.4''$  roughly follows a  $1/d^2$  law (dashed lines

in Fig. 3), which corresponds to the dilution law of the far-UV radiation field strength,  $G_0$ .

Correlated intensities of aromatic and aliphatic features argue in favour of a common nature of the carriers: stochastically heated nano-particles (see also Boutéraon et al. 2019). One can note that, above 0.4", the intensity of the 3.3  $\mu\text{m}$  aromatic band decrease is slightly stronger than that of the 3.4  $\mu\text{m}$  aliphatic band. This could reflect size/composition changes in the nano-particles. Closer to the star, between 0.2" and 0.4", the emission is flat and does not vary anymore with  $G_0$ . This can be due to disk structure effects, e.g. cavity effects, shadows at the inner edge of the outer disk, or changes in the properties of the nano-particles, e.g. abundance and size. At large scale, the structure seen in the nano-dust emission appears to match the elliptical structure detected in the stellar light scattered by (sub-)micronic grains (e.g. Augereau et al. 2001). This is consistent with the expectation that the nano-dust emission traces the disk surface.

The maps in the aromatic and aliphatic bands show also slightly different morphologies (Fig. 2). Figure 3 shows the average spatial profiles of the aliphatic-to-aromatic band ratio,  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$ , according to the distance to the star. The  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$  ratio exhibits a clear increase by a factor of up to 2 when moving away from the star (from  $\sim 0.2''$  to  $1''$ ), which probably reflects the UV processing of the carbonaceous materials. This tendency was visible in Fig. 5 of Boutéraon et al. (2019) but it was not as clear, especially in the disk inner part. This can be explained by the fact that ROHSA is more robust to recover the signal. This will be discussed in more detail in Sect. 6.

## 3.2. VISIR observations

### 3.2.1. Observations

VISIR observations were performed using the ESO mid-IR instrument VISIR installed on the VLT (Paranal, Chili), equipped with a DRS (former Boeing)  $256 \times 256$  pixels BIB detector. The object was observed in the imaging and spectroscopic modes. It was observed in the aromatic bands at 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$  (pah1 and pah2 filters) and in the adjacent continuum at 10.4  $\mu\text{m}$ . Under good seeing conditions it provides diffraction-limited imaging and spectroscopy in the N and Q-band, which is 0.3" at 10  $\mu\text{m}$ . The spectrometre offers a range in spectral resolution of 150 to 30 000 and it has a pixel-scale of 127 mas/pix. In order to get rid of the high atmospheric background, the instrument employs standard chopping and nodding techniques.

The observations were obtained in 2005 as part of the VISIR GTO program on circumstellar disks. The medium resolution spectroscopic mode of VISIR was used. VISIR offers a choice in slit-width, slit-rotation and chopping throw. The orientation of the slit was aligned along the major axis of the disk. For all the observations chopping and nodding was performed parallel to the slit.

### 3.2.2. Results

Figure 4 shows VISIR mid-IR spectra measured at different distances from the central star (up to 2"). These spectra are centred on the 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$  aromatic features, which correspond to aromatic C-H bending in-plane and out-of-plane vibrational modes, respectively (see Tab. 1). The 8.6  $\mu\text{m}$  feature is not observed in the spectra centred on the star but its intensity relatively to the neighbouring continuum increases from 0.5" to 1.5" (left column in Fig. 4). At 2", the signal is too noisy to discern its presence. The narrow band at 8.8  $\mu\text{m}$  is an artefact due to

the data reduction. In the spectra centred at 11.3  $\mu\text{m}$ , two features at 11.4 and 11.9  $\mu\text{m}$ , characteristic of crystalline silicates, are clearly detected at the star location and up to a distance of 1" (right column in Fig. 4). The strong 11.4  $\mu\text{m}$  crystalline silicate feature does not allow to assess the presence of the 11.3  $\mu\text{m}$  aromatic band in the spectra centred on the star. However, the emission in the 11.3  $\mu\text{m}$  band, relatively to the emission in the crystalline silicate band, increases between 0.5" and 1.5", and finally dominates the spectrum at 2".

Figure 5 shows the 8.6  $\mu\text{m}$  and 11.3  $\mu\text{m}$  aromatic band profiles and the 10.4  $\mu\text{m}$  continuum emission profile, as well as the band-to-continuum ratios, according to the distance to star. This shows that both the emission in the bands and the continuum are spatially extended. The two aromatic band-to-continuum ratios increase with the distance to the star up to 1" ( $\sim 100$  au) and are constant at a longer distances. The low ratio values closer to the star are mostly due to the increase in the thermal emission of the larger grains at thermal equilibrium, the emission of which peaks at shorter wavelength when the UV flux increases. Up to a distance of 0.2 to 0.3" (or  $\sim 20 - 30$  au) from the star where  $10^6 \lesssim G_0 \lesssim 10^7$ , sub-micronic grains can reach an equilibrium temperature of  $\sim 300$  K and thus strongly emit in the 10  $\mu\text{m}$  range. On the other hand, the aromatic band profiles decrease slightly faster than a  $1/d^2$  law (dashed line in Fig. 5), showing that emission in the two bands does not simply scale linearly with  $G_0$ , a behaviour expected if emission is dominated by a single population of stochastically heated grains. This means that the emission could be due to a mix of the contributions of different nano-grain populations, e.g. extremely small to large nano-particles. As a consequence, the large nano-particles reach thermal equilibrium for the high  $G_0 > 10^4$  values at the disk surface and therefore modify the scaling of their mid-IR emission spectrum (see Sect. 4 for details). However, near the star, the emission profiles are dominated only by the thermal hot grain emission.

These observations also indicate that the mid-IR aromatic features are spatially more extended than the 3.3  $\mu\text{m}$  aromatic and 3.4  $\mu\text{m}$  aliphatic ones (Sect. 3.1.3). Among the aromatic bands, the less energetic ones (at 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$ ) are in fact expected to come mostly from the outer disk region (e.g. Habart et al. 2004), whereas the most energetic one (at 3.3  $\mu\text{m}$ ) is expected to be the less extended.

In order to probe the properties of the emitting particles, one could compare the intensity band ratios,  $I_{11.3\mu\text{m}}/I_{8.6\mu\text{m}}$ , particularly sensitive to their ionisation state, as well as, the  $I_{11.3\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$ , mostly depending on their size (e.g. Croiset et al. 2016). Nevertheless, from 0.5 to 1.5", where the aromatic bands are detected, doing such an analysis with our NaCo and VISIR data would be difficult. Indeed, the 8.6  $\mu\text{m}$  band is partly hidden by the strong continuum whereas the 11.3  $\mu\text{m}$  band is blended with the crystalline silicate feature at 11.4  $\mu\text{m}$  (see Fig. 4). Such an analysis is thus beyond the scope of this study but will be of prime interest when high signal-to-noise observations with the James Webb Space Telescope (JWST) will become available. In particular, the emission at 8.6 and 3.3  $\mu\text{m}$  will be detectable in the outer disk regions.

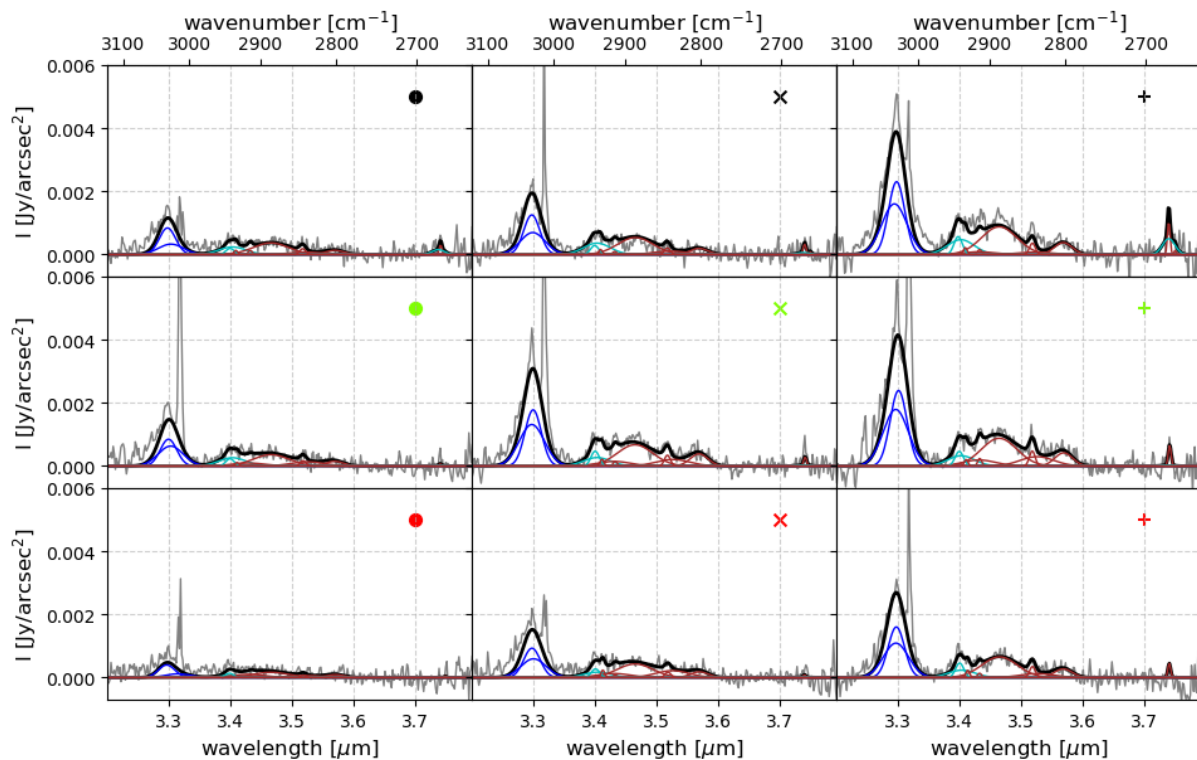
## 4. Disk modelling with THEMIS and POLARIS

### 4.1. THEMIS dust model

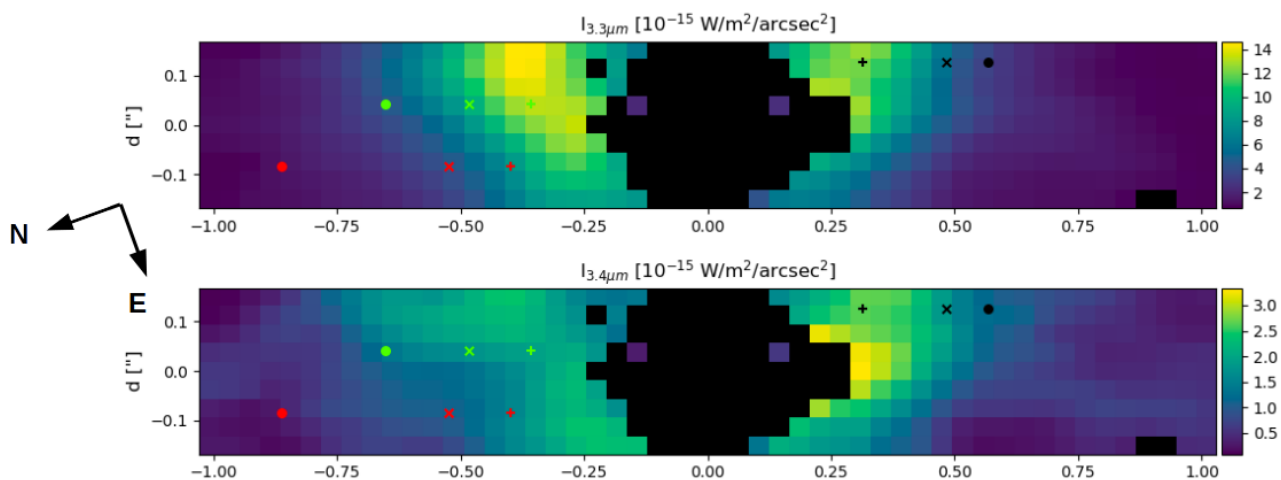
The Heterogeneous dust Evolution Model for Interstellar Solids (THEMIS<sup>1</sup>) is an evolutionary core-mantle dust model designed

<sup>1</sup> <https://www.ias.u-psud.fr/themis/>





**Fig. 1.** Mosaic of near-IR emission spectra of HD 100546 between 3.2 and 3.8  $\mu\text{m}$ . Their location (coloured symbols) are reported in Fig. 2. The result of the decomposition with ROHSA (black) is overplotted on NaCo data (grey). Gaussians related to the 3.3  $\mu\text{m}$  aromatic feature are in blue, and those related to the 3.4  $\mu\text{m}$  aliphatic feature in cyan. Other features are plotted in brown.

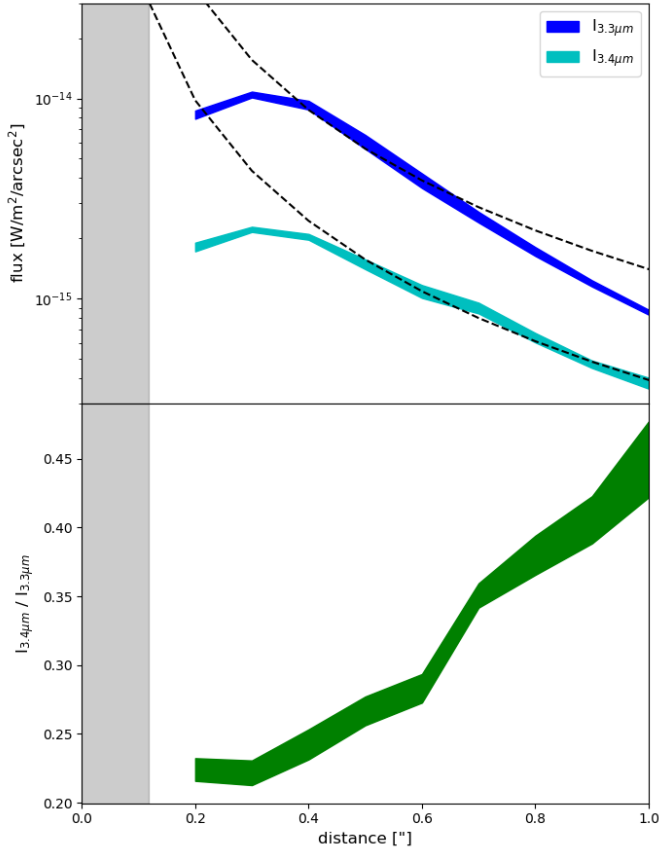


**Fig. 2.** 3.3  $\mu\text{m}$  and 3.4  $\mu\text{m}$  band emission maps. Intensities are integrals of the Gaussians related to the bands as seen in Fig. 1. Positions of the spectra in Figure 1 are represented by the coloured symbols.

to allow variations in the dust structure, composition, and size according to the local density and radiation field (Jones et al. 2013, 2014; Bocchio et al. 2014; Köhler et al. 2015; Jones et al. 2017). THEMIS has been used before to analyse far-IR to submm observations of the diffuse and dense ISM (e.g. Ysard et al. 2015, 2016), near-IR PPD observations (Boutéraon et al. 2019), and near-IR to submm observations of nearby galaxies (Chastenot et al. 2017; Viaene et al. 2019).

In the following, unless otherwise stated, we use the dust composition and size distribution of the THEMIS diffuse-ISM dust defined by Jones et al. (2013); Köhler et al. (2014) (Tab. 2).

It consists in three dust populations: a first one made of small hydrogenated amorphous carbon nano-particles ( $< 20$  nm, a-C); a second one of larger carbonaceous grains with an hydrogen-rich core surrounded by a 20 nm thick aromatic-rich mantle (a-C:H/a-C); and a third one of large amorphous silicate grains of which 10% of the volume is occupied by metallic nano-inclusions of Fe and FeS (a-Sil/a-C). In addition, these silicate cores are surrounded by a 5 nm thick a-C mantle. We thus consider diffuse-ISM like grains with radius  $a \lesssim 1 \mu\text{m}$ . Since, at the disk surface, these small grains absorb most of the stellar UV/visible light and dominate the emission in the near- to mid-IR, this is expected to



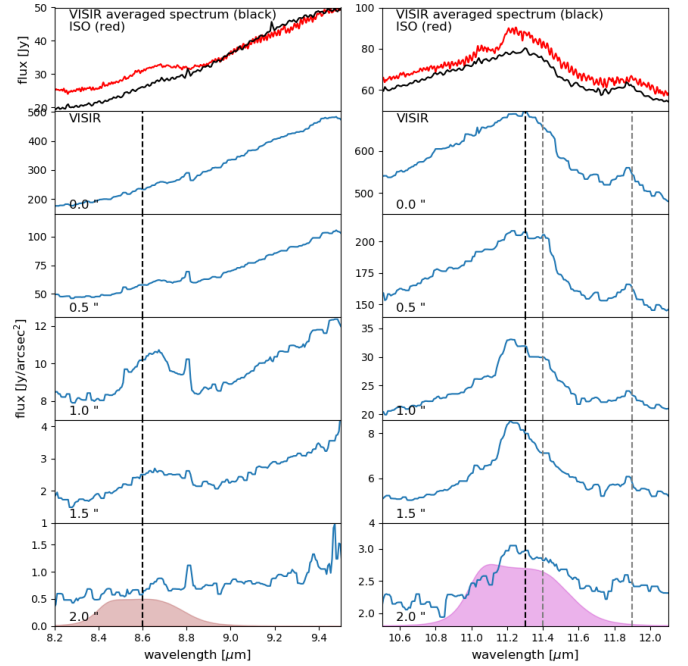
**Fig. 3.** Top panel:  $I_{3.3\mu\text{m}}$  (blue) and  $I_{3.4\mu\text{m}}$  (cyan) band emission according to the distance to the star. Values are the sum of the integrals of the Gaussians related to each feature and averaged for different distances from the star in  $0.1''$  step. Normalised  $1/d^2$  functions are also plotted (black dotted lines) to help the reader. Bottom panel:  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$  band ratio (green) according to the distance to the star. The transparent grey box on the left represents the distance up to which the cavity is extended in the POLARIS simulations ( $\sim 0.15''$  or 13 au).

provide a consistent modelling of the NaCo and VISIR observations of HD 100546.

In THEMIS, the population of a-C grains with sizes from 0.4 to 20 nm has continuous size-dependent optical properties as well as a continuous size distribution contrary to most dust models (e.g. Desert et al. 1990; Draine & Li 2001; Compiègne et al. 2011). In order to ease the comparison with previous models and studies, we distinguish three sub-populations of a-C grains:

- a-C1: a-C nano-particles with  $a \leq 0.7$  nm which would be equivalent to the smallest PAH grains in Desert et al. (1990); Draine & Li (2001); Compiègne et al. (2011) and represent more or less  $\sim 10\%$  of the mass for all models;
- a-C2: a-C with  $0.7 < a \leq 1.5$  nm which would be equivalent to the largest PAHs in Desert et al. (1990); Draine & Li (2001); Compiègne et al. (2011);
- Very Small Grains (VSG): larger a-C particles with  $a > 1.5$  nm which would be equivalent to the VSG as defined in Desert et al. (1990), the smallest carbon grains with graphite optical properties in Draine & Li (2001), and the Small Amorphous Carbon grains (SamC) in Compiègne et al. (2011).

The dust mass fraction of each THEMIS dust population and a-C sub-population, i.e. the population dust mass  $M_X$  to the total dust mass  $M_{\text{total}}$  ratio,  $q_X = M_X/M_{\text{total}}$  are:



**Fig. 4.** HD 100546 mid-IR spectra centred around  $8.6 \mu\text{m}$  (left column) and  $11.3 \mu\text{m}$  (right column). The top figures show the ISO unresolved spectra (red lines) and the VISIR averaged spectra (black lines). The other figures present the VISIR spectra at increasing distance from the star (top to bottom, blue lines). The VISIR filters (filled brown and magenta areas) are shown in the bottom figures. The positions of the  $8.6$  and  $11.3 \mu\text{m}$  aromatic features (black dotted lines) and of the  $11.4$  and  $11.9 \mu\text{m}$  crystalline silicate features (grey dotted lines) are also plotted.

- $q_{\text{a-C1}} \sim 10\%$ ;
- $q_{\text{a-C2}} \sim 7\%$ ;
- $q_{\text{VSG}} \sim 6\%$ ;
- $q_{\text{a-C:H/a-C}} \sim 8\%$ ;
- $q_{\text{a-Sil/a-C}} \sim 69\%$ .

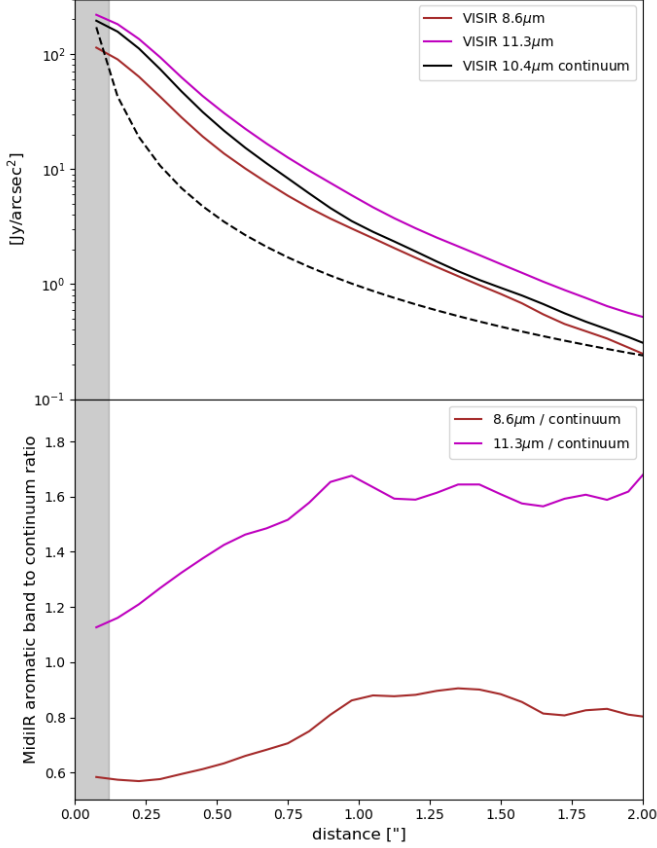
Finally, we have to mention that for simplicity, we consider only amorphous silicate grains in our model, while several signatures from crystalline silicates have clearly been observed towards HD 100546 (e.g. Malfait et al. 1998; Bouwman et al. 2003; Sturm et al. 2010, Bouwman et al in prep.). However, this assumption will not affect our results, since we focus on the spatial distribution of the nano-carbon grain emission features and do not do a detailed analysis of the band profiles.

#### 4.2. POLARIS radiative transfer code

In order to analyse the NaCo and VISIR data with THEMIS, we apply the three-dimensional continuum radiative transfer code POLARIS (Reissl et al. 2016; Brauer et al. 2017). It solves the radiative transfer problem self-consistently with the Monte Carlo method. Main applications of POLARIS are the analysis of magnetic fields by simulating polarised emission of elongated aligned dust grains and the Zeeman splitting of spectral lines. However, recent developments added circumstellar disk modelling as a new main application to POLARIS (Brauer et al. in prep.). For instance, this includes the consideration of complex structures and varying dust grain properties in circumstellar disks as well as the stochastic heating of nanometre-sized dust grains. We use POLARIS to calculate the spatial dust temperature distribution, emission maps as well as spectral energy

**Table 2.** Standard THEMIS model parameters as described in Jones et al. (2017).

Dust population	Size distribution type	Characteristic size (nm)	Density (g/cm <sup>3</sup> )	$M_X / M_{total}$ (%)
a-C1	power law	0.4-0.7	1.6	~10
a-C2	power law	0.7-1.5	1.6	~7
VSG	power law	1.5-20	1.6	~6
a-C:H/a-C	log-normal	~ 160	1.57	~8
a-Sil/a-C	log-normal	~ 140	2.19	~69



**Fig. 5.** Top panel: the 8.6  $\mu\text{m}$  (brown) and 11.3  $\mu\text{m}$  (magenta) aromatic emission bands, and the 10.4  $\mu\text{m}$  (black) continuum emission are plotted according to the distance to the star. The  $1/d^2$  function is also plotted (black dotted). Bottom panel: the 8.6  $\mu\text{m}/10.4 \mu\text{m}$  and 11.3  $\mu\text{m}/10.4 \mu\text{m}$  band ratios are plotted according to the distance to the star. The transparent grey box on the left represents the distance up to which the cavity is extended in POLARIS simulations,  $\sim 0.15''$  (13 au). At large distances, the variations in the band-to-continuum ratios are not significant. The error bars on the band-to-continuum ratio are about 5%.

distributions based on the thermal emission of dust grains, the stochastic heating of nanometre-sized dust grains and the stellar emission scattered by dust grains. The code was published on the POLARIS homepage<sup>2</sup>. For reference, the simulations in this study were performed with the version 4.02. of POLARIS.

Our theoretical model of the circumstellar disk consists of a pre-main sequence star in the centre, which is surrounded by an azimuthally symmetric density distribution. The star is characterised by its effective temperature  $T_{\text{star}} = 10\,500$  K and luminosity  $L_{\text{star}} = 32 L_{\odot}$ . For the disk density, we consider a distribution with a radial decrease based on the work of Hayashi (1981) for the minimum mass solar nebula. Combined with a vertical

distribution due to hydrostatic equilibrium similar to the work of Shakura & Sunyaev (1973), we obtain the following equation:

$$\rho_{\text{disk}} = \rho_0 \left( \frac{R_{\text{ref}}}{r} \right)^a \exp \left( -\frac{1}{2} \left[ \frac{z}{H(r)} \right]^2 \right). \quad (1)$$

Here,  $r$  is the radial distance from the central star in the disk midplane,  $z$  is the distance from the midplane of the disk,  $R_{\text{ref}}$  is a reference radius, and  $H(r)$  is the scale height. The density  $\rho_0$  is derived from the disk mass. The scale height is a function of  $r$  as follows:

$$H(r) = h_0 \left( \frac{r}{R_{\text{ref}}} \right)^b. \quad (2)$$

The parameters  $a$  and  $b$  set the radial density profile and the disk flaring, respectively. Benisty et al. (2010) found for their best disk model around HD 100546 a scale height of 1 au at a distance of 100 au, which is equivalent to a flaring angle of  $7^\circ$ . In their model, they assumed a standard flaring index ( $b = 1.125$ ). Avenhaus et al. (2014) suggests that the disk could be more strongly flared in the outer regions. In our model, we consider a scale height of 10 au at 100 au, similar to Benisty et al. (2010). For the disk flaring  $b$  we assume  $b = 9/7 \sim 1.28$  as expected from hydrostatic equilibrium models of passive flared disks (Chiang & Goldreich 1997). The extent of the disk is constrained by the inner radius  $R_{\text{in}}$  and outer radius  $R_{\text{out}}$ . For these parameters we use the results of previous studies. An overview of the assumed parameters of our disk model can be found in Tab. 3. Even though the radiative transfer simulations were performed with the full 3D disk model, only the emission along the major axis was used to compare with observations. This was done to increase transparency and to circumvent the influence of the uncertainty of the disk inclination.

Following previous studies, we will consider disk models with a continuous density distribution (model 1), a dust free cavity until 13 au (model 2), and the same cavity, which contains a low amount of dust grains (density in model 1  $\times 10^{-3}$ , model 3). Table 3 shows the differences in the assumed models 1 to 3. In all models, we assume a dust-to-gas mass ratio of  $M_{\text{dust}}/M_{\text{H}} \sim 7 \times 10^{-4}$ , e.g. 10 times lower than the standard THEMIS model for diffuse ISM. The dust-to-gas mass ratio is low compared to common literature values (e.g.,  $\sim 0.01$ ), but we consider in our simulations only the small grains with  $a \lesssim 5 \mu\text{m}$ , while due to grain growth in disks a significant amount of the mass is present in larger grains. However, since the disk is optically thick in the NaCo and VISIR wavelength range, the predicted dust emission profiles are not sensitive to the non-included larger grains, but rather to the relative mass fraction between the different nanometre- and micron-sized grain populations.

<sup>2</sup> <http://www1.astrophysik.uni-kiel.de/~polaris/>

**Table 3.** Parameters of the circumstellar disk models. Only small grains with  $a \lesssim 5 \mu\text{m}$  are considered. References : (1), (2) [Acke & van den Ancker \(2004\)](#); (3) [Gaia Collaboration et al. \(2018\)](#); (4) [Benisty et al. \(2010\)](#); [Tatulli et al. \(2011\)](#); [Mulders et al. \(2013\)](#); [Panić et al. \(2014\)](#); (5) [Augereau et al. \(2001\)](#); [Benisty et al. \(2010\)](#); (6) [Benisty et al. \(2010\)](#).

Parameter		Value	Ref.
<i>Central star</i>			
Effective temperature	$T_{\text{star}}$	10 500 K	(1)
Stellar luminosity	$L_{\text{star}}$	$32 L_{\odot}$	(2)
<i>Disk model</i>			
Distance to star	$d$	110 pc	(3)
Gas mass	$M_{\text{gas}}$	$10^{-2} M_{\odot}$	
Dust-to-gas mass ratio	$M_{\text{dust}}/M_{\text{gas}}$	$7.43\text{e-}4$	
Inner radius	$R_{\text{in}}$	0.2 au	(4)
Outer radius	$R_{\text{out}}$	350 au	(5)
Scale height	$h_0$	10 au	
Characteristic radius	$R_{\text{ref}}$	100 au	
Radial density exp.	$a$	2.357	
Disk flaring exp.	$b$	1.286	
Cells in $r$ -direction	$n_r$	100	
Step width factor in $r$	$sf$	1.03	
Cells in $z$ -direction	$n_{\theta}$	142	
Cells in $\phi$ -direction	$n_{\phi}$	1	
Cavity			
Model 1		full disk	
Model 2		cavity until 13 au	(6)
Model 3		13 au cavity filled with $10^{-3} M_{\text{dust}}/M_{\text{H}}$	

### 4.3. Model results

#### 4.3.1. Physical conditions in the upper surface layers

Figure 6 shows maps of the temperature distribution of large a-C:H/a-C at thermal equilibrium, and of the hydrogen density  $n_{\text{H}}$ , radiation field intensity  $G_0$ , and  $G_0/n_{\text{H}}$  ratio distributions from our simulations of model 1 which presents a full disk. The black lines correspond to 25, 50, and 75% of the total emission at  $3.3 \mu\text{m}$  seen from the top. The emission at  $3.3 \mu\text{m}$  is completely dominated by the upper disk layers due to the high optical depth of the model 1 disk. For the models 2 and 3, the same figure is presented in the appendix (Figs. B.1 and B.2) and shows that the emission comes from the upper disk layers. In the model 2 case, with a dust and gas free cavity until 13 au, there is no matter anymore and the temperature is not defined. In the model 3 case, the cavity is filled with dust with an abundance of hydrogen 1 000 times smaller than in the rest of the disk. Thus, the emission received by the observer comes partly from the other side of the disk.

Figure 7 presents  $G_0$ ,  $n_{\text{H}}$ , and  $G_0/n_{\text{H}}$  according to the distance to the star for model 1 for the disk layers where 25 to 75% of the total emission at  $3.3 \mu\text{m}$  are seen by the observer. The radiation field  $G_0$ , which varies as  $1/d^2$ , decreases by a factor of about 300 from 20 au to 350 au, with a minimum value slightly lower than  $10^4$  at 350 au. The gas density  $n_{\text{H}}$  decreases by a factor of 100 from 20 au to 350 au, with a minimum value of  $\sim 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$  at 350 au. Then, as both  $G_0$  and  $n_{\text{H}}$  decrease with the distance, the  $G_0/n_{\text{H}}$  ratio does not vary much at first order in the disk layer from which most of the a-C band emission comes. The  $G_0/n_{\text{H}}$  ratio decreases by a factor 3 from  $\sim 0.018$  at

20 au to  $\sim 0.006$  at 100 au and remains roughly constant up to 350 au.

#### 4.3.2. Predicted spectra between 3 and $20 \mu\text{m}$

Here, we present spectra calculated for the three disk models using POLARIS and THEMIS as a function of the distance to the star, from 1 to 100 au, in the near- and mid-IR. For more readability these spectra are presented in two steps: Fig. 8 shows the spectra calculated between 3 and  $4 \mu\text{m}$ , while Fig. 9 shows the calculated spectra between 3 and  $20 \mu\text{m}$ . In order to ease the analysis of the predicted spectra, based on THEMIS and DustEM calculations, Fig. 10 shows the emission of each dust sub-population between 3 and  $14 \mu\text{m}$  for several distances to the star.

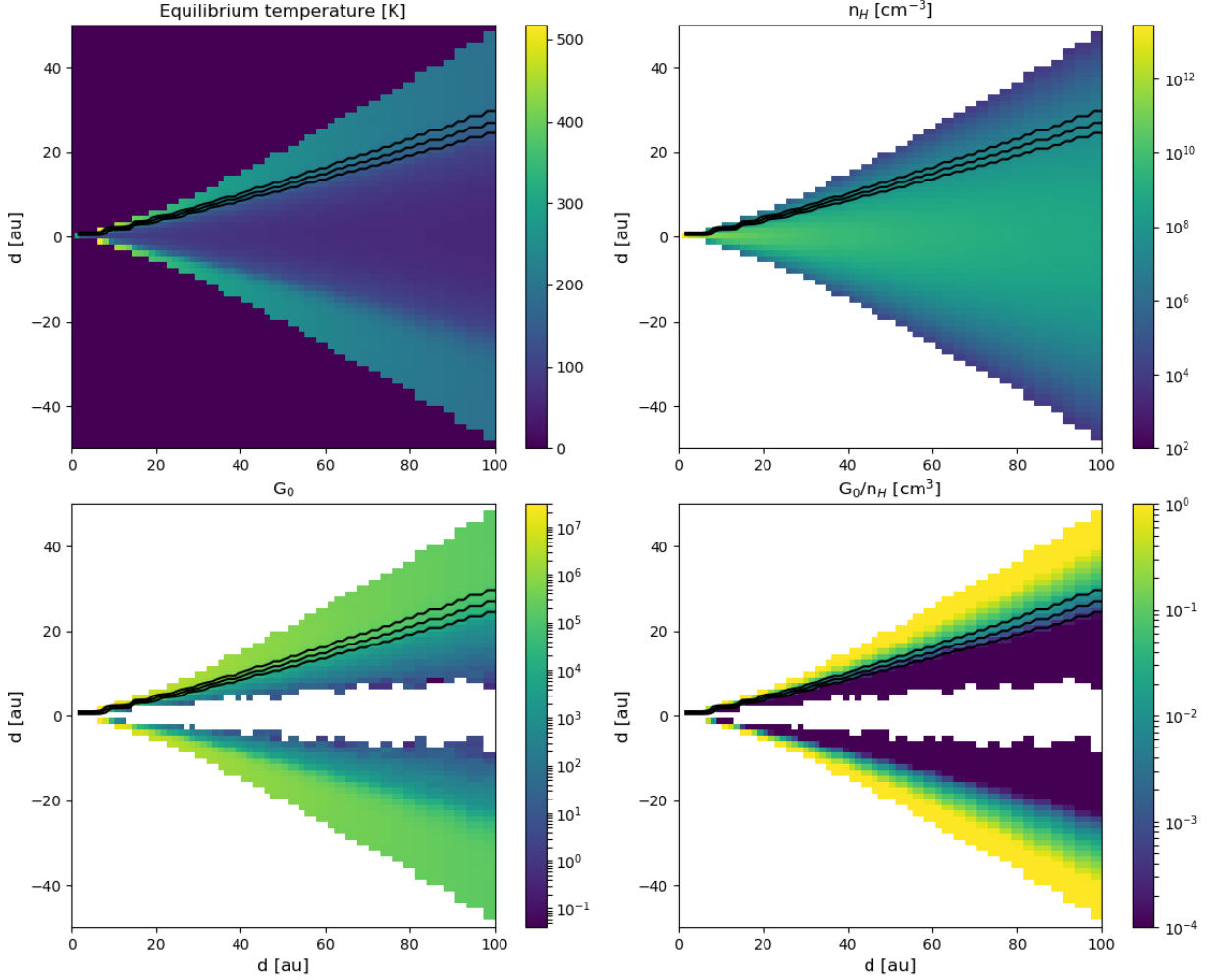
Between 3 and  $4 \mu\text{m}$ , the emission in the aromatic and aliphatic bands is highly dominated by the smallest a-C nano-particles (a-C1 & a-C2) and the contribution of the bigger VSG grains is negligible ( $a > 1.5 \text{ nm}$ ). When the radiation field intensity  $G_0$  decreases, only the emission due to the smallest a-C nano-particles, a-C1, remains. At large distance from the star, both the continuum and band emissions are due to these extremely small nano-particles ( $a < 0.7 \text{ nm}$ ). For high  $G_0$  values, the contribution of large silicates and VSG grains is significant in the  $8.6 \mu\text{m}$  band. When the radiation field intensity  $G_0$  decreases, the band emission from  $\sim 6$  to  $9 \mu\text{m}$  is due both to a-C1 and a-C2 amorphous carbon nano-particles. The shape of the  $11.3 \mu\text{m}$  band is strongly affected by the emission of big silicates for high  $G_0$  values. When the radiation field intensity  $G_0$  decreases, the band emission is then dominated by a-C nano-particles emission, whatever their sizes (a-C1, a-C2, VSG).

All aromatic bands are thus due to different combinations of grain sub-populations with a high dependence on the intensity of the radiation field:

- $3.3 \mu\text{m}$ : a-C1 at both at low and high  $G_0$ ;
- $8.6 \mu\text{m}$ : a-C1 and a-C2 at low  $G_0$ , a-C1, a-C2, VSG and a-Sil/a-C at high  $G_0$ ;
- $11.3 \mu\text{m}$ : a-C1 and a-C2 at low  $G_0$ , a-C1 and a-Sil/a-C at high  $G_0$ .

Looking at the  $10.4 \mu\text{m}$  continuum, except for the smallest  $G_0$ , the emission is a mix of the contribution of all grain populations. For  $G_0 = 2 \times 10^6$  (equivalent to a distance of 20 au), large silicates contribute to  $\sim 75\%$ , while both large carbonaceous a-C:H/a-C and VSG grains to  $\sim 10\%$ . For  $G_0 = 2 \times 10^5$  (75 au): both large silicates and VSG grains contribute to  $> 30\%$ , a-C:H/a-C grains to  $\sim 15\%$ , a-C2 to  $\sim 10\%$ , and a-C1 to  $\sim 5\%$ . For  $G_0 = 2 \times 10^4$  (200 au): VSG contribute to  $\sim 45\%$ , a-C2 to  $\sim 30\%$ , a-C1, a-C:H/a-C and silicates to  $\sim 10\%$  or less. However, it should be noted that the SEDs presented in Fig. 10 do not take into account the scattered light. In our POLARIS simulations, this scattered light can make up to about half of the continuum in the near-IR but is negligible at wavelengths larger than  $10 \mu\text{m}$ . This is true for the characteristic silicate grain size of  $140 \text{ nm}$  presented in our three models (see Tab. 2) and remains valid for sizes up to  $\sim 1 \text{ mm}$ .

Predicted spectra from models 1, 2, and 3 (Fig. 8 and 9) are similar in the outer disk parts but different in the inner parts, as expected. Very close to the star (1-5 au), the full disk model 1 shows an higher emission than models 2 and 3, since these models have an empty or near empty cavity. A little further out than the cavity (15-20 au), model 1 shows on the contrary a lower emission than models 2 and 3 since in these models the stellar light has not been absorbed by the dust in the cavity.



**Fig. 6.** Vertical cuts through the model 1 disk from our POLARIS simulation. The cuts show the temperature (K) distribution of large a-C(:H)/a-C at thermal equilibrium (*top left*), the hydrogen density  $n_H$  ( $\text{cm}^{-3}$ ) distribution (*top right*), the radiation field intensity  $G_0$  (*bottom left*) and the  $G_0/n_H$  ( $\text{cm}^3$ ) ratio (*bottom right*) of the two previous maps. The black lines correspond to 25, 50, and 75% of the total emission at  $3.3 \mu\text{m}$  seen from the top. The white area in the two lower panels is due to the fact that  $G_0$  is not defined in the most median parts of the disc because UV radiation does not penetrate.

## 5. Comparison between model predictions and observations

In this section, we compare the model predictions to the observations. We first discuss the predicted and the observed integrated fluxes in the nano-dust bands over the disk, and then the comparison between their predicted and observed spatial emission profiles by NaCo and VISIR as a function of the distance to the central star.

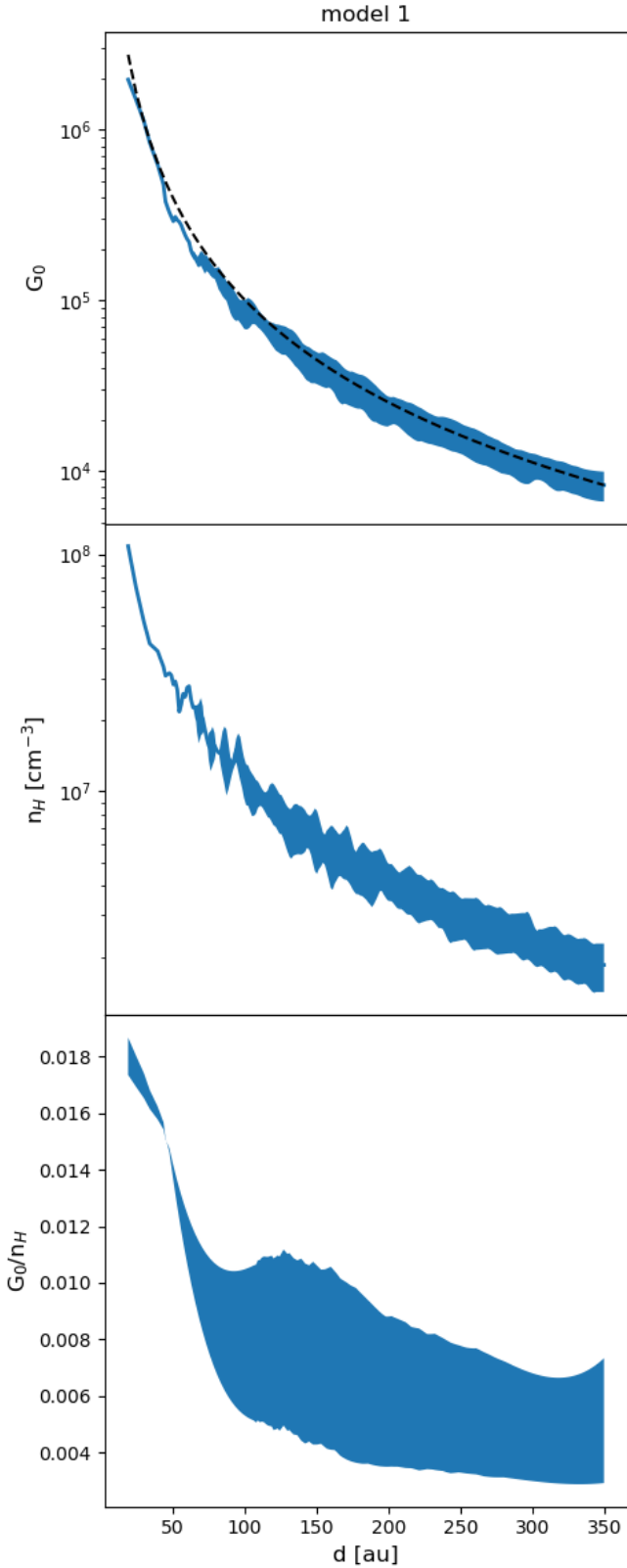
### 5.1. Predicted and observed integrated fluxes in the bands over the disk

Table 4 presents the integrated fluxes of the aromatic and aliphatic features at  $3.3$  and  $3.4 \mu\text{m}$ , as well as, the aromatic features at  $6.2$  and  $8.6 \mu\text{m}$ , as observed and as predicted by the models over the disk. For the observation of the aromatic bands, we take the fluxes as derived from the ISO spectrum (Van Kerckhoven 2002). We have not included the  $11.3 \mu\text{m}$  band since it is blended with strong silicate emission. For the observation of the aliphatic band, we take the fluxes as derived from the NaCo spectrum over the disk.

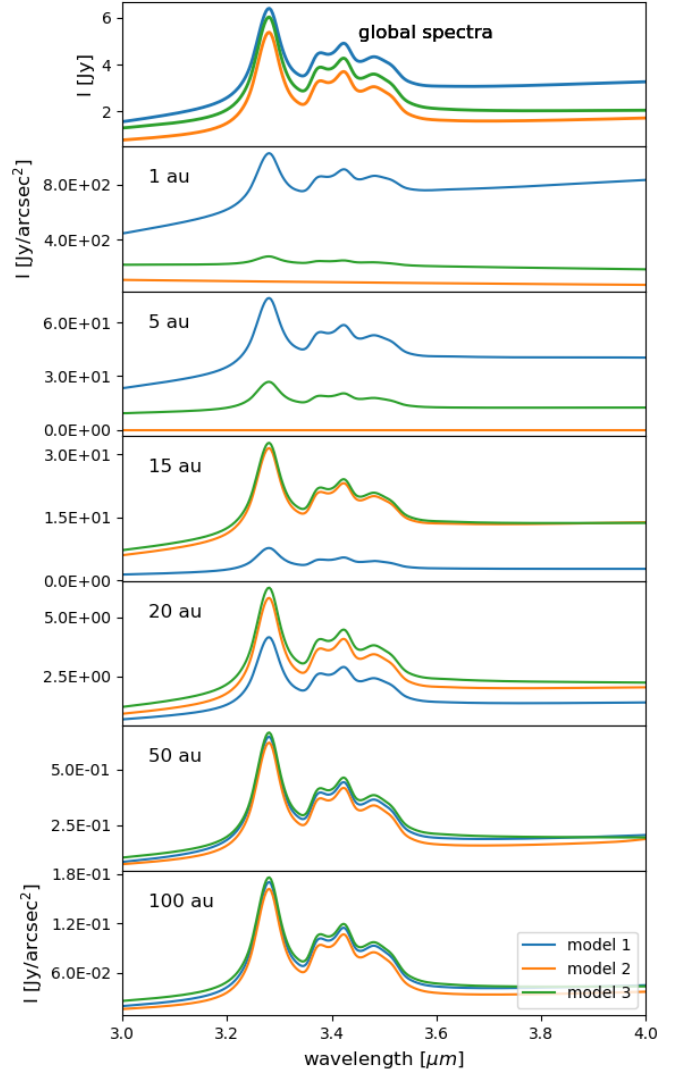
The models overestimate the integrated fluxes in the aromatic band at  $3.3 \mu\text{m}$  by a factor of 2-2.5. This difference is mainly due to the model's overestimation in the internal regions of the disk ( $r < 40 \text{ au}$ ) as suggested by the comparison of the observed and predicted profiles (see next section). The band at  $3.3 \mu\text{m}$  reaches 50% of its flux at a radius of  $r < 20 - 30 \text{ au}$ . The aliphatic-to-aromatic band ratio  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$  observed over the disk is well reproduced by the models within 20%. Models 2 and 3 reproduce to within 30% the integrated flux observed in the  $6.2$  and  $8.6 \mu\text{m}$  bands. Model 1 overestimates the integrated flux in the band at  $8.6 \mu\text{m}$  by a factor of 1.9 and underestimates the flux in the band at  $6.2 \mu\text{m}$  by a factor of 1.4.

### 5.2. Predicted spatial distribution compared to NaCo data

Figure 11 presents the predicted and the observed spatial emission profiles of the aromatic and aliphatic bands at  $3.3$  and  $3.4 \mu\text{m}$  as a function of the distance to the central star. The predicted cubes have been convolved by a Gaussian with a FWHM of  $0.1''$ . The same decomposition with ROHSA has been applied to the models to compare them with the observations. To do so, a mask must be used around the central star due to the high mag-



**Fig. 7.**  $G_0$ ,  $n_H$ ,  $G_0/n_H$  according to distances to the star for model 1.  $G_0$  is the average of  $G_0$  values between 25 and 75% of the total emission at  $3.3 \mu\text{m}$  seen by the observer (Fig. 6, bottom left panel). Idem for  $n_H$  (top right panel) and  $G_0/n_H$  (bottom left). The width of the line is for the standard dispersion of the values.  $1/d^2$  (black dotted line) is also plotted in the top panel.



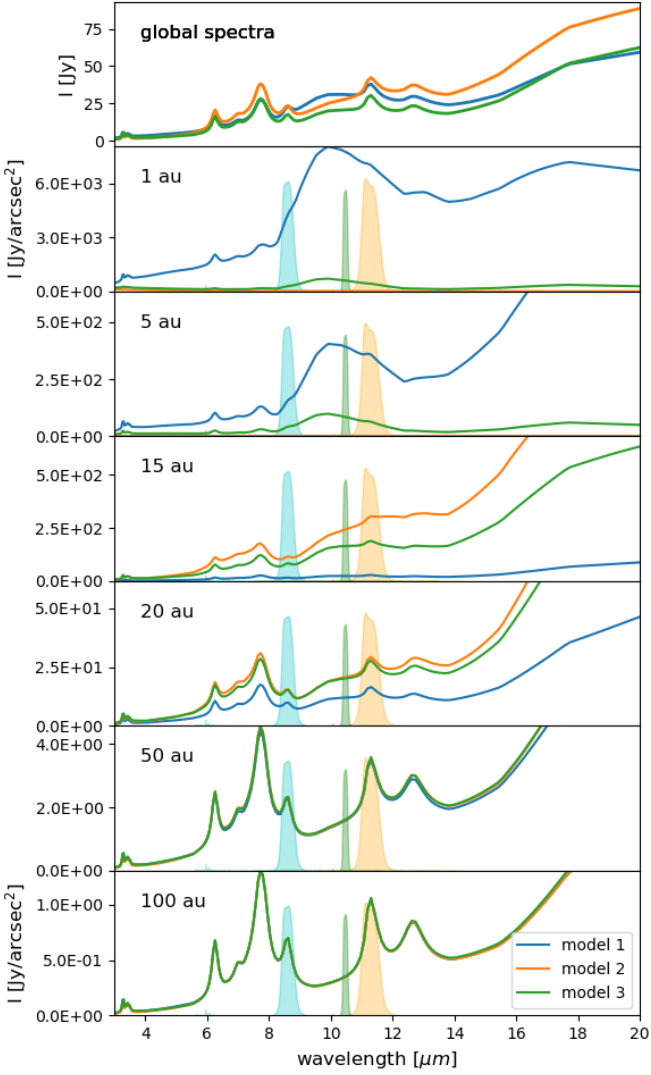
**Fig. 8.** Near-IR emission POLARIS spectra between 3 and  $4 \mu\text{m}$ . Global (Jy) (top panel) and individual emission spectra ( $\text{Jy}/\text{arcsec}^2$ ) are plotted from 1 (second panel) to 100 au (bottom) from the star for models 1 (blue), 2 (orange), and 3 (green).

**Table 4.** The integrated fluxes of the aromatic and aliphatic features as observed and as predicted by the models over the disk. Integrated fluxes (after continuum subtraction) and uncertainties are in  $10^{-14} \text{ W}/\text{m}^2$ .

Band	Observations	Model 1	Model 2	Model 3
3.3	$2.5 \pm 0.5$	5.1	6.7	6.5
3.4	$0.6 \pm 0.1$	1.6	2.0	2.1
6.2	$14.3 \pm 0.4$	10	16	13
8.6	$4.6 \pm 0.5$	8.7	6.1	4.7

nitude gradient between on-star spectra and spectra farther from the star. The predictions of the different models (1, 2, 3) do not vary much, because they differ mainly in their central regions. As a consequence, only model 1 is shown in Fig. 11.

The simulated band emission reproduces roughly the behaviour of the observed profiles, but overestimates the observation of the  $3.3 \mu\text{m}$  feature at  $1''$  by a factor of 2-3. Furthermore, close to the inner rim of the outer disk (between  $0.2$  and  $0.4''$  or 20 to 40 au), the model does not reproduce the observed plateau and overestimates the intensity by a factor of 2-3. In this region, the observed emission is flat and does not vary anymore with  $G_0$ .



**Fig. 9.** IR emission POLARIS spectra between 3 and 20  $\mu\text{m}$ . Global (Jy) (top panel) and individual emission spectra (Jy/arcsec<sup>2</sup>) are plotted from 1 au (second panel) to 100 au (bottom) from the star for models 1 (blue), 2 (orange), and 3 (green). Normalised PAH1 (filled cyan), SIV (filled green) and PAH2 (filled brown) VISIR filters are also plotted.

This could be due to disk structure effects, such as shadow of the inner edge of the outer due to puffed-up inner rim or changes in the properties of the smallest nano-particles, such as a decrease in the a-C1 mass fraction.

### 5.3. Predicted spatial distribution compared to VISIR data

Figure 12 presents the predicted and the observed spatial emission profiles in the VISIR bands centred at 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$ , and in the 10.4  $\mu\text{m}$  continuum, as a function of the distance to the central star. As in the observed emission profiles, the continuum has not been subtracted from the model profiles at 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$ . The predicted cubes have been convolved by a Gaussian with a FWHM of 0.3". Models 1 to 3 are roughly similar. The only significant difference appears in the cavity where model 2 has no emission and model 3 is two times lower than

model 1<sup>3</sup>. In the predicted emission profiles, two regimes appear: thermal emission dominates until 0.5" and then stochastically heated dust emission as  $1/d^2$  for  $d > 0.5''$  (50 au), which corresponds to the distance where the model spectra at 10  $\mu\text{m}$  are mostly due to emission of nano-particles. Between 50 and 200 au, the 10  $\mu\text{m}$  continuum emission is mostly due to the VSG ( $a \sim 10$  nm) and a-C2 ( $a \sim 1$  nm) populations, while the 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$  emission bands are mostly due to a-C1 and a-C2. In term of heating regimes:

- the a-C1 are stochastically heated;
- the a-C2 reach thermal equilibrium for  $G_0$  of about  $10^5$ . Then for  $G_0 = 10^4 - 10^5$ , they have an intermediate behaviour;
- the VSG are at thermal equilibrium (whatever the  $G_0$ ).

In the observed spatial emission profiles, the two emission mechanism regimes appear much less pronounced. At large distance, the observed profile does not scale with  $1/d^2$  but appears a bit steeper, as expected if thermal equilibrium emission cannot be neglected. The observed emission is moreover underestimated by our models. Close to the star, the difference is about a factor of 2 with little variations depending on the model. At larger distances, this difference can be as high as one order of magnitude but decreases to a factor of  $\sim 3$  at 2". Since we did not try to fit the VISIR data with our simulations, these discrepancies could be explained by the parameter choices we made. For instance, simply changing the dust mass radial distribution (keeping the total mass constant) could naturally change the radial distribution steepness if not the flux level. A change in the flux level could be obtained by increasing the mass fraction of the VSG and a-C2 populations for which we have no a priori observational constraints. Indeed, the NaCo data can only constrain the a-C1 population mass fraction (see Sect. 3.1.3). Another possible explanation could come from the fact that we do not consider dust settling and growth in our simulations, which would naturally change the grain size distribution as a function of radius and height in the disk and thus the flux level and radial distribution.

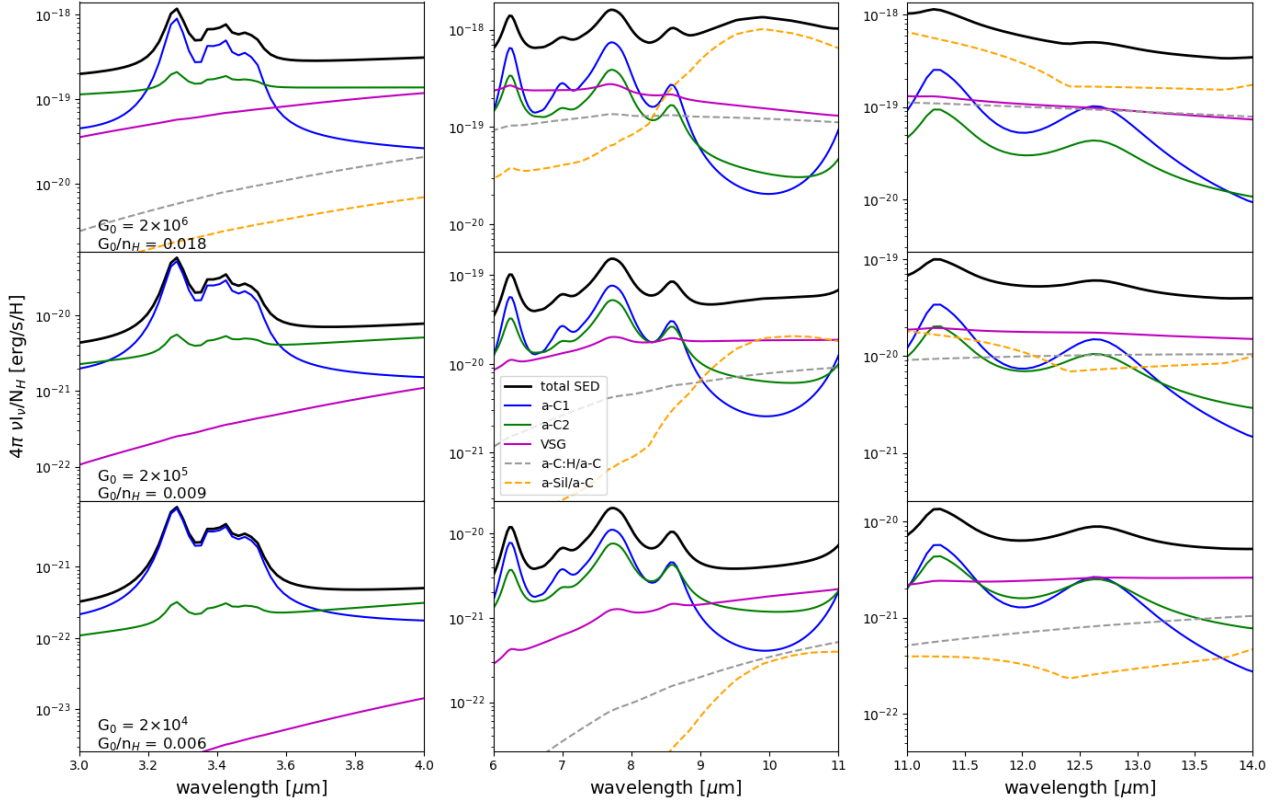
## 6. Discussion

### 6.1. Aliphatic-to-aromatic band ratio as a function of the $G_0/n_H$ ratio

In Sect. 3, we showed that the aliphatic-to-aromatic band ratio decreases when moving towards the central star. This may reflect the processing of the hydrocarbon grains a-C:H by UV photons. Indeed, laboratory experiments have shown that aliphatic CH bonds are more easily photo-destroyed than aromatic CH bonds (e.g. Muñoz Caro et al. 2001; Mennella et al. 2001; Gadhlah et al. 2012). Consequently, a decrease in the aliphatic-to-aromatic band ratio in the inner disk part is expected because the nano-particles are more irradiated. Nevertheless, we must underline that the aliphatic-to-aromatic band ratio remains quite high, about  $\sim 0.2 - 0.25$ , at 0.2" from the central star while the UV field strength is very high,  $G_0 \sim 2 \times 10^6$  (see Sect. 4). According to Jones et al. (2014), the a-C(H) photo-processing timescale  $\tau_{UV,pd}$  can be analytically expressed as:

$$\tau_{UV,pd}(a, G_0) = 10^4 G_0 \left[ 2.7 + \frac{6.5}{(a[\text{nm}])^{1.4}} + 0.04 a[\text{nm}]^{1.3} \right] [\text{yr}],$$

<sup>3</sup> The emission is only two times smaller even if the abundance is 1 000 smaller in model 3 compared to model 1, which is explained by the fact the model is optically thinner.



**Fig. 10.** Grain population emission in the IR: total emission (black), a-C1 (blue), a-C2 (green), VSG (magenta), a-C:H/a-C (grey dot), and a-Sil/a-C (orange dot). The left panels are for the NaCo range between 3 and 4  $\mu\text{m}$ , the middle and right panels correspond to the range covered by VISIR filters: 8.6, 10.4, and 11.3  $\mu\text{m}$ . From top to bottom: decrease in the  $G_0$  values which are  $2 \times 10^6$ ,  $2 \times 10^5$ , and  $2 \times 10^4$ . The corresponding distances to the star are 20, 75, and 200 au, respectively. The distance and  $G_0/n_H$  are derived from Fig. 7.

- (3) tion and composition as a function of  $G_0$  and  $n_H$ . This is however beyond the scope of the present study.

which means that the dehydrogenation timescale is expected to be less than about two months for the three populations of a-C(:H) nano-particles. However, the emission in the 3-4  $\mu\text{m}$  range depends not only on the UV flux but also on the (re-)hydrogenation rate, which in turn depends on the gas density. Thus, the observation of an aliphatic-to-aromatic band ratio that varies little may suggest a recent exposure of the carriers to the radiation field (by a continuous local replenishment at the disk surface) before their destruction or conversion, and that the  $G_0/n_H$  ratio may be a better parameter to consider, instead of the UV field strength only. Figure 13 shows the average spatial profile of the aliphatic-to-aromatic band ratio,  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$ , according to the  $G_0/n_H$  calculated with POLARIS in the disk surface zone from which most of the band emission originates (see Fig. 7 in Sect. 4). We find that the aliphatic-to-aromatic band ratio decreases from  $\sim 0.45$  to 0.22 for an increase in the  $G_0/n_H$  ratio from  $\sim 0.008$  to 0.018 as computed from model 1. This decrease for this range of  $G_0/n_H$  values appears consistent with previous studies based on spatially resolved 3-4  $\mu\text{m}$  spectra towards extended PDRs (Pillari et al. 2015) and other PPDs (Boutéraon et al. 2019).

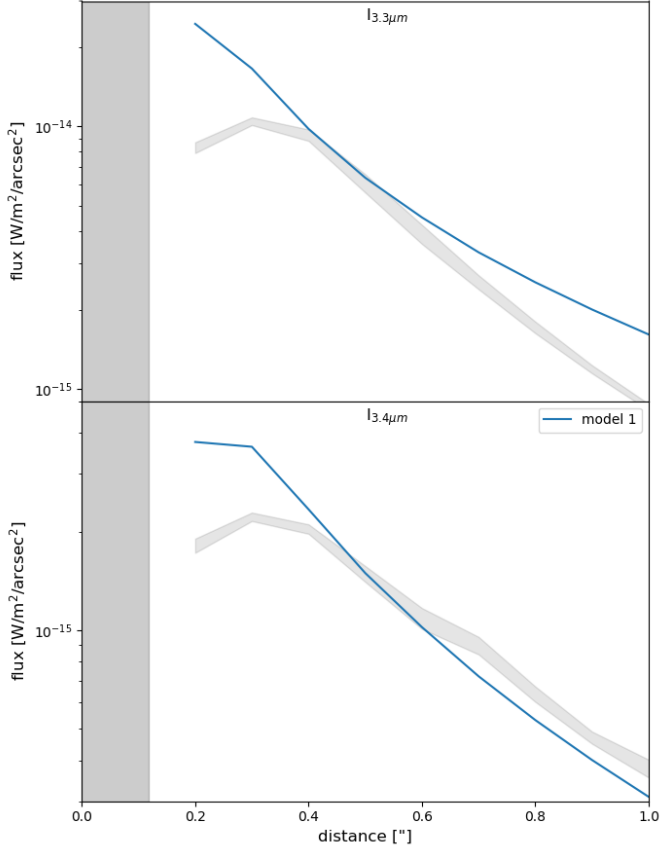
In order to interpret more accurately the dependency of the  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$  ratio as function of the local physical conditions ( $G_0$ ,  $n_H$ ) a more detailed modelling study is needed. Depending on the photon-grain interaction site and on the photon energy, heating, H atom loss, rehydrogenation and fragmentation should be characterised to determine the time dependent size distribu-

## 6.2. The 3-4 $\mu\text{m}$ spectra near the star and spatial distribution of the 3.52 $\mu\text{m}$ band

This work is mostly focused on the aromatic and aliphatic bands at 3.3 and 3.4  $\mu\text{m}$  located between 20 and 100 au from the central star. However, it should be noted that the spectra taken in the inner 20 au of the disk are quite different compared to the remaining disk. Indeed, over a strong continuum emission due to hot large grains, the NaCo spectra centred on the star ( $r < 20$  au) shows a possible faint aromatic band at 3.3  $\mu\text{m}$  as well as a faint band at 3.52  $\mu\text{m}$ . On the other hand, there is no clear evidence of aliphatic bands at 3.4, 3.43, 3.46 and 3.56  $\mu\text{m}$ . This is in accordance with the analysis of the rest of the disk showing that the  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$  ratio decreases when moving closer to the star. The detection of a faint band at 3.52  $\mu\text{m}$  in the spectra centred on the star appears also consistent with the map at 3.52  $\mu\text{m}$  obtained with ROHSA showing a more centrally concentrated emission distribution than the 3.3 and 3.4  $\mu\text{m}$  features (see Fig. A.1 in appendix).

The 3.52  $\mu\text{m}$  band could be emission from nano-diamonds, such as suggested in the HD 97048 and Elias 1 PPD system, where strong emission features at 3.4-3.5  $\mu\text{m}$  have been detected and are found to be more centrally concentrated than the aromatic emission (Habart et al. 2004; Goto et al. 2009). However, higher angular resolution observations probing the carbon dust features in the innermost regions are needed. The Multi



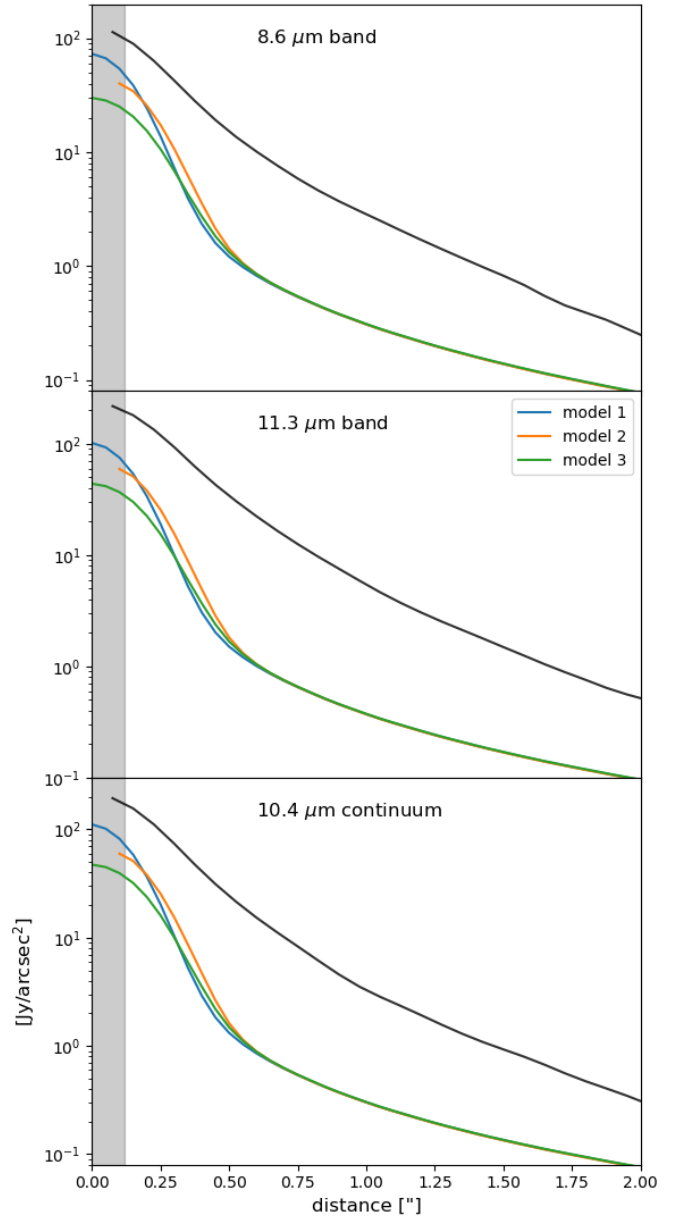


**Fig. 11.**  $I_{3.3\mu m}$  (top panel) and  $I_{3.4\mu m}$  (bottom panel) as observed by NaCo (grey) and as predicted by model 1 (blue). The fluxes are the sum of the integrals of the Gaussians related to each feature and averaged for different distances from the star in 0.1" steps. The transparent grey box on the left represents the distance up to which the cavity is extended in the POLARIS simulations:  $\sim 0.15''$  (13 au). The models have been convolved with a 0.1" Gaussian. A mask must be used around the central star due to the high magnitude gradient between on-star spectra and others.

AperTure mid-Infrared SpectroScopic Experiment (MATISSE) instrument offers from 2019 on the possibility to perform interferometric observations with a medium spectral resolution in the 3-4 and 8-13  $\mu m$  domain. It will teach us about the spatial distribution and dust properties in the scale of 0.1-10 au.

## 7. Conclusions

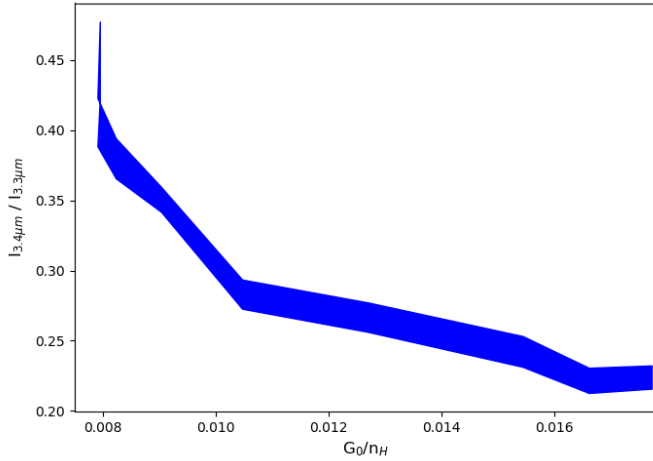
We have investigated the nano-grain emission in the (pre-)transitional disk HD 100546 by comparing high angular spectroscopic observations with model predictions. We analyse adaptive optics spectroscopic data (VLT/NAOS-CONICA, 3-4  $\mu m$ , angular resolution 0.1") as well as imaging and spectroscopic data (VLT/VISIR, 8-12  $\mu m$ , angular resolution 0.3"). The NaCo spectral cube is decomposed using a tool for hyper-spectral analysis (ROHSA) in order to produce the first emission maps in both the aromatic and aliphatic features in the 3-4  $\mu m$  range. In our modelling, the THEMIS dust model is integrated into the radiative transfer code POLARIS to calculate the thermal and stochastic heating of micro- and nanometric dust grains inside a disk structure. In the THEMIS model, the carbon grains with sizes from 0.4 to 20 nm have continuous size-dependent optical properties as well as a continuous size distribution contrary to



**Fig. 12.** The 8.6  $\mu m$  (top panel), 11.3  $\mu m$  (middle panel), and 10.4  $\mu m$  (bottom panel) VISIR bands (grey) vs. models 1 (blue), 2 (orange), and 3 (green). The predicted profiles have been convolved with a Gaussian of 0.3" similar to the spatial resolution of VISIR and integrated using VISIR filters to compare to the observations. The transparent grey box on the left represents the distance up to which the cavity is extended in the POLARIS simulations:  $\sim 0.15''$  (13 au).

most dust models. This allows us to model the sub- and main features characterising bonds between carbon and hydrogen atoms in the 3-4  $\mu m$  range. These features strongly depend on the grain size distribution and the hydrogen-to-carbon ratio in the grains, depending on their more or less aromatic or aliphatic nature. They also vary with the local environment properties:  $G_0$  and  $n_H$ . Our main results derived from both observations and model predictions can be summarised as follows.

1. The aromatic and aliphatic features between 3.3 and 3.5  $\mu m$  are spatially extended with each band showing a unique morphology.



**Fig. 13.** Spatial profile of the aliphatic-to-aromatic band ratio,  $I_{3.4\mu m}/I_{3.3\mu m}$ , according to the  $G_0/n_H$  ratio calculated with POLARIS for model 1 in the disk surface zone from which most of the band emission originates. The highest values of  $G_0/n_H$  correspond to the regions closest to the star.

2. The aliphatic-to-aromatic band ratio, 3.4/3.3, increases with the distance to the star from  $\sim 0.2$  (at  $0.2''$  or 20 au) to  $\sim 0.45$  (at  $1''$  or 100 au). This is in agreement with previous studies and argues for an evolution of the composition of nano-materials which are more aromatic in the disk parts close to the star, where the UV field ( $G_0$ ) is high.
3. The model predicts that the aromatic and aliphatic bands are due to different combinations of grain sub-populations with a high dependence on the intensity of the UV radiation field ( $G_0$ ). The 3.3 and  $3.4 \mu m$  features are mainly due the extremely small nano-particles with  $a \leq 0.7$  nm both at low and high  $G_0$ . On the other hand, the 8.6 and  $11.3 \mu m$  features are mainly due to the larger nano-particles with  $a \leq 1.5$  nm at low  $G_0$ , and a mix of the contribution of several grain populations at high  $G_0$ . The  $10.4 \mu m$  continuum is mainly due to the sub-micronic grains near the star, while at large distance, the largest nano-particles ( $a \geq 1.5$  nm) contribute to  $\sim 50\%$ , and nano-particles with  $a \leq 1.5$  nm and  $a \leq 0.7$  nm to  $\sim 40\%$  and  $\sim 10\%$  respectively.
4. In the observed spectra in the 8-12  $\mu m$  range, several features characteristic of crystalline silicates are detected at the star location and up to a distance of  $1''$ . The emission in the  $11.3 \mu m$  band increases between  $0.5''$  and  $1.5''$ , and finally dominates the spectrum at  $2''$ , in agreement with our model.
5. The observed continuum emission at  $10 \mu m$  is spatially extended, as in the bands at 8.6 and  $11.3 \mu m$ . This is in agreement with the model, which predicts that at large distance the continuum emission is mainly caused by nano-particles of extremely small to larger sizes.
6. We investigated models with a full disk, a cavity, and a cavity with a low amount of dust grains. The models reproduce well the spatial emission profiles of the 3.3 and  $3.4 \mu m$  bands, except for the inner 20-40 au where the observed emission is, unlike the predictions, flat and does not increase anymore with the UV field. The possible explanations are disk structure effects (e.g. shadow of the inner edge of the outer disk) or a decrease of the mass fraction in the nano-particles with  $a \leq 0.7$  nm mainly responsible for the 3.3 and  $3.4 \mu m$  features.
7. The models reproduce well the integrated fluxes in the mid-IR aromatic bands. However, the spatial distribution and in-

tensity of the observed continuum emission is not well reproduced by the model with the observed emission being steeper and under-estimated by the model. These discrepancies could be explained by changing the dust mass radial/vertical distribution or the mass fraction of the nano-particles with  $a > 0.7$  nm for which we have no a priori observational constraints from NaCo.

Our understanding of the evolution of carbonaceous nano-grains in PPDs is expected to make significant progress by constraints imposed by very upcoming spatially resolved spectroscopic observations of the carbon nano-grains in protoplanetary disks with the VLT/MATISSE and JWST. Interferometric observations could be used to constrain the spatial distribution and properties of carbonaceous material in the terrestrial planet forming region. On the other hand, observations with the JWST covering a complete spectral domain between 0.6 and  $28 \mu m$  will mainly probe the warm gas and small dust content with a spatial resolution of 10-100 au and for distances up to 500 au. Spatially resolved spectroscopy of the sub-features from aromatic/PAHs, aliphatics will be obtained and permit to better identify the nature of the band carriers and the main processes.

*Acknowledgements.* This work was based on observations collected at the European Southern Observatory, Chile (ESO proposal number: 075.C-0624(A)), and was supported by P2IO LabEx (ANR-10-LABX-0038) in the framework of the "Investissements d'Avenir" (ANR-11-IDEX-0003-01) managed by the Agence Nationale de la Recherche (ANR, France), P2IO LabEx (A-JWST-01-02-01+LABEXP2IOPDO), and Programme National "Physique et Chimie du Milieu Interstellaire" (PCMI) of CNRS/INSU with INC/INP co-funded by CEA and CNES.

## References

- Acke, B., Bouwman, J., Juhász, A., et al. 2010, *ApJ*, 718, 558  
Acke, B. & van den Ancker, M. E. 2004, 426, 151  
Ardila, D. R., Golimowski, D. A., Krist, J. E., et al. 2007, *ApJ*, 665, 512  
Augereau, J. C., Lagrange, A. M., Mouillet, D., & Ménard, F. 2001, *A&A*, 365, 78  
Avenhaus, H., Quanz, S. P., Meyer, M. R., et al. 2014, *ApJ*, 790, 56  
Benisty, M., Tatulli, E., Ménard, F., & Swain, M. R. 2010, *A&A*, 511, A75  
Boccaletti, A., Pantin, E., Lagrange, A. M., et al. 2013, *A&A*, 560, A20  
Bocchio, M., Jones, A. P., & Slavin, J. D. 2014, *A&A*, 570, A32  
Boutéraon, T., Habart, E., Ysard, N., et al. 2019, *A&A*, 623, A135  
Bouwman, J., de Koter, A., Dominik, C., & Waters, L. B. F. M. 2003, *A&A*, 401, 577  
Brauer, R., Wolf, S., Reissl, S., & Ober, F. 2017, *A&A*, 601, A90  
Brittain, S. D., Najita, J. R., & Carr, J. S. 2009, *ApJ*, 702, 85  
Brooke, T. Y., Tokunaga, A. T., & Strom, S. E. 1993, *AJ*, 106, 656  
Carmona, A., van der Plas, G., van den Ancker, M. E., et al. 2011, *A&A*, 533, A39  
Chasteney, J., Bot, C., Gordon, K. D., et al. 2017, *A&A*, 601, A55  
Chiang, E. I. & Goldreich, P. 1997, *ApJ*, 490, 368  
Compiègne, M., Verstraete, L., Jones, A., et al. 2011, *A&A*, 525, A103  
Croiset, B. A., Candian, A., Berné, O., & Tielens, A. G. G. M. 2016, *A&A*, 590, A26  
Currie, T., Cloutier, R., Brittain, S., et al. 2015, *ApJ*, 814, L27  
Desert, F. X., Boulanger, F., & Puget, J. L. 1990, *A&A*, 500, 313  
Draine, B. T. & Li, A. 2001, *The Astrophysical Journal*, 551, 807  
Draine, B. T. & Li, A. 2007, *The Astrophysical Journal*, 657, 810  
Follette, K. B., Rameau, J., Dong, R., et al. 2017, *AJ*, 153, 264  
Gadallah, K. A. K., Mutschke, H., & Jäger, C. 2012, *A&A*, 544, A107  
Gaia Collaboration, Brown, A. G. A., Vallenari, A., et al. 2018, *A&A*, 616, A1  
Garufi, A., Quanz, S. P., Schmid, H. M., et al. 2016, *A&A*, 588, A8  
Geers, V. C., Pontoppidan, K. M., van Dishoeck, E. F., et al. 2007, *A&A*, 469, L35  
Gorti, U. & Hollenbach, D. 2008, *ApJ*, 683, 287  
Goto, M., Henning, T., Kouchi, A., et al. 2009, *ApJ*, 693, 610  
Grady, C. A., Polomski, E. F., Henning, T., et al. 2001, *AJ*, 122, 3396  
Grady, C. A., Woodgate, B., Heap, S. R., et al. 2005, *ApJ*, 620, 470  
Habart, E., Natta, A., & Krügel, E. 2004, *A&A*, 427, 179  
Habart, E., Natta, A., Testi, L., & Carillet, M. 2006, *A&A*, 449, 1067  
Habing, H. J. 1968, *Bull. Astron. Inst. Netherlands*, 19, 421

- Hayashi, C. 1981, *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 70, 35
- Hu, J. Y., The, P. S., & de Winter, D. 1989, *A&A*, 208, 213
- Jones, A. P., Fanciullo, L., Köhler, M., et al. 2013, *A&A*, 558, A62
- Jones, A. P., Köhler, M., Ysard, N., Bocchio, M., & Verstraete, L. 2017, *A&A*, 602, A46
- Jones, A. P., Ysard, N., Köhler, M., et al. 2014, *Faraday Discussions*, 168, 313
- Klarermann, L., Benisty, M., Min, M., et al. 2017, *A&A*, 599, A80
- Kluska, J., Kraus, S., Davies, C. L., et al. 2018, *ApJ*, 855, 44
- Köhler, M., Jones, A., & Ysard, N. 2014, *A&A*, 565, L9
- Köhler, M., Ysard, N., & Jones, A. P. 2015, *A&A*, 579, A15
- Kraus, S., Ireland, M. J., Sitko, M. L., et al. 2013, *ApJ*, 768, 80
- Lagage, P.-O., Doucet, C., Pantin, E., et al. 2006, *Science*, 314, 621
- Li, A. & Draine, B. T. 2001, *ApJ*, 554, 778
- Liu, W. M., Hinz, P. M., Meyer, M. R., et al. 2003, *ApJ*, 598, L111
- Maaskant, K. M., Honda, M., Waters, L. B. F. M., et al. 2013, *A&A*, 555, A64
- Malfait, K., Waelkens, C., Waters, L. B. F. M., et al. 1998, *A&A*, 332, L25
- Marchal, A., Miville-Deschênes, M.-A., Orioux, F., et al. 2019, *A&A*, 626, A101
- Meeus, G., Montesinos, B., Mendigutía, I., et al. 2012, *A&A*, 544, A78
- Meeus, G., Salyk, C., Bruderer, S., et al. 2013, *A&A*, 559, A84
- Meeus, G., Waters, L. B. F. M., Bouwman, J., et al. 2001, *A&A*, 365, 476
- Mennella, V., Muñoz Caro, G. M., Ruitkamp, R., et al. 2001, *A&A*, 367, 355
- Miley, J. M., Panić, O., Haworth, T. J., et al. 2019, *MNRAS*, 485, 739
- Muñoz Caro, G. M., Ruitkamp, R., Schutte, W. A., Greenberg, J. M., & Mennella, V. 2001, *A&A*, 367, 347
- Mulders, G. D., Paardekooper, S.-J., Panić, O., et al. 2013, *A&A*, 557, A68
- Panić, O., Ratzka, T., Mulders, G. D., et al. 2014, *A&A*, 562, A101
- Pantin, E., Waelkens, C., & Lagage, P. O. 2000, *A&A*, 361, L9
- Pérez, S., Casassus, S., Hales, A., et al. 2019, *arXiv e-prints*, arXiv:1906.06305
- Pilleri, P., Joblin, C., Boulanger, F., & Onaka, T. 2015, *A&A*, 577, A16
- Pineda, J. E., Szulágyi, J., Quanz, S. P., et al. 2019, *ApJ*, 871, 48
- Quanz, S. P., Amara, A., Meyer, M. R., et al. 2015, *ApJ*, 807, 64
- Rameau, J., Follette, K. B., Pueyo, L., et al. 2017, *AJ*, 153, 244
- Reissl, S., Wolf, S., & Brauer, R. 2016, *A&A*, 593, A87
- Seok, J. Y. & Li, A. 2017, *ApJ*, 835, 291
- Shakura, N. I. & Sunyaev, R. A. 1973, *A&A*, 500, 33
- Sturm, B., Bouwman, J., Henning, T., et al. 2010, *A&A*, 518, L129
- Tatulli, E., Benisty, M., Ménard, F., et al. 2011, *A&A*, 531, A1
- Thi, W. F., Ménard, F., Meeus, G., et al. 2011, *A&A*, 530, L2
- van Boekel, R., Waters, L. B. F. M., Dominik, C., et al. 2004, *A&A*, 418, 177
- van der Plas, G., van den Ancker, M. E., Acke, B., et al. 2009, *A&A*, 500, 1137
- Van Kerckhoven, C. 2002, PhD thesis, Institute of Astronomy, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium
- Viaene, S., Sarzi, M., Zabel, N., et al. 2019, *A&A*, 622, A89
- Ysard, N., Köhler, M., Jones, A., et al. 2016, *A&A*, 588, A44
- Ysard, N., Köhler, M., Jones, A., et al. 2015, *A&A*, 577, A110

## Appendix A: ROHSA decomposition

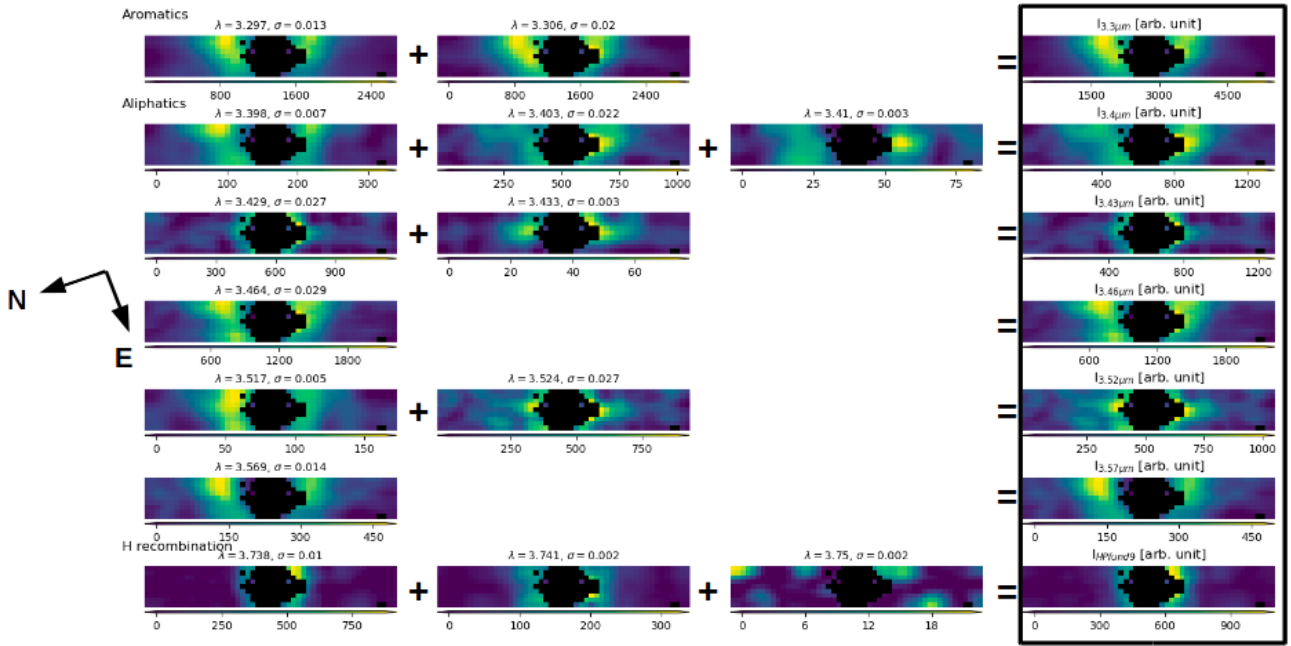
Figure A.1 shows Gaussians related to the main features in the NaCo observations. They are gathered according to their central wavelength and summed up (last column). Similarly to [Boutéraon et al. \(2019\)](#), we consider six features related to carbonaceous materials at 3.3, 3.4, 3.43, 3.46, 3.52, and 3.56  $\mu\text{m}$ . Each feature presents a spatial structured distribution.

The 3.52  $\mu\text{m}$  band peaks close to the central regions. As we discuss in Sect. 6.2, this feature is seen close to the star. The 3.43  $\mu\text{m}$  band distribution is quite similar to the 3.52  $\mu\text{m}$  one. These two features are usually attributed to nano-diamonds ([Goto et al. 2009](#)).

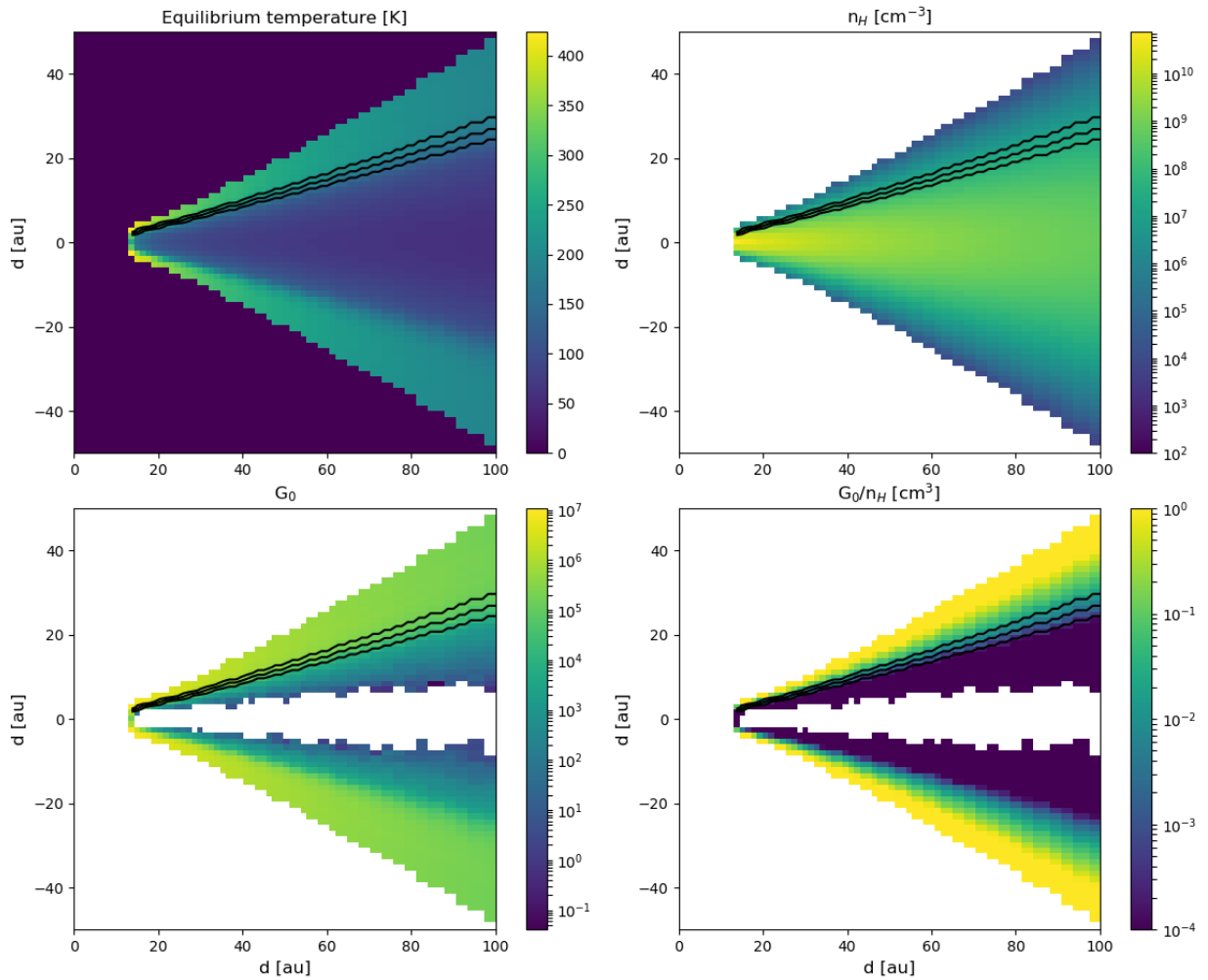
To note, around 3.74  $\mu\text{m}$ , there is the hydrogen recombination line Pfund 8 which corresponds to a Lorentzian mechanism. In this decomposition, we only use Gaussian functions. That is why two Gaussians are needed to reproduce the signature.

## Appendix B: POLARIS maps

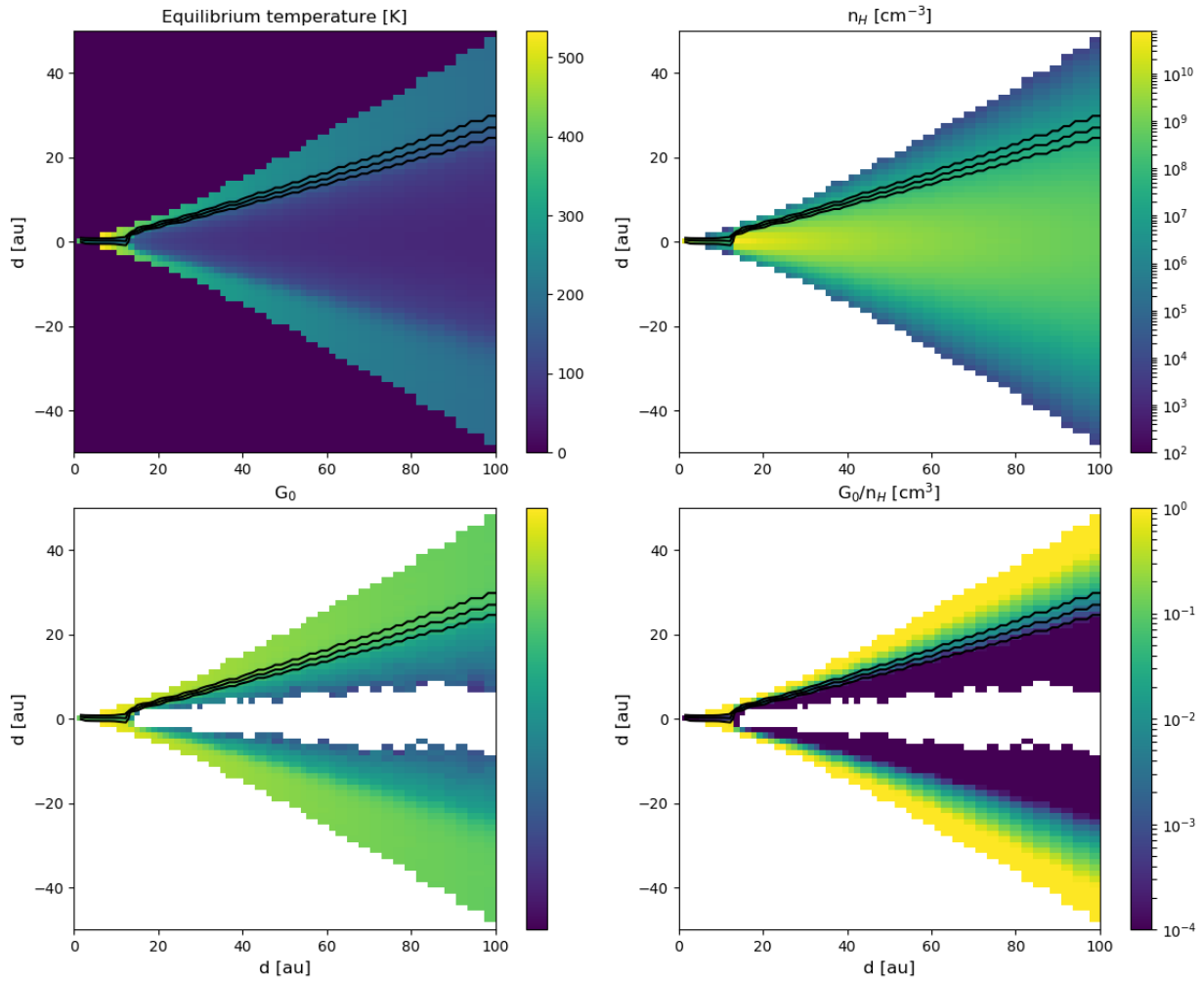
Here are the temperature,  $n_H$ ,  $G_0$  and  $G_0/n_H$  maps related to models 2 and 3.



**Fig. A.1.** Main feature maps from the ROHSA decomposition of NaCo data. The last column is the sum of the first ones. As seen in Fig. 2, several Gaussians are sometimes needed to reproduce the features.



**Fig. B.1.** Same as Fig. 6 for model 2 POLARIS simulation.



**Fig. B.2.** Same as Fig. 6 for model 3 POLARIS simulation.

### 4.3 Analyse des spectres dans les régions proches de l'étoile

Dans cette section, nous discutons l'émission des nano-particules dans les régions internes du disque de HD 100546. Celle-ci est difficilement observable du fait de l'émission importante de l'étoile. La figure 4.2 montre les spectres obtenus proche de l'étoile. On remarque que les spectres présentent une raie de recombinaison de l'hydrogène Pfund 8 à  $3.74 \mu\text{m}$  très intense. La bande à  $3.52 \mu\text{m}$  est observée sur l'ensemble des spectres. La bande aromatique à  $3.3 \mu\text{m}$  n'est pas observée sur les spectres les plus centraux mais l'est à mesure qu'on s'éloigne de l'étoile. Par contre, il n'y pas d'évidences claires de bandes aliphatiques et ce d'autant plus que les spectres sont très bruités.

Ceci est en accord avec l'analyse du reste du cube :

- le rapport de bandes  $I_{3.4\mu\text{m}}/I_{3.3\mu\text{m}}$  diminue en se rapprochant de l'étoile (Fig. 3 du papier).
- la carte à  $3.52 \mu\text{m}$  montre une émission plus piquée sur les bords internes du disque (Fig. A.1 du papier).

Ce résultat va dans le sens d'une évolution de la matière quand on se rapproche de l'étoile avec dans les régions très irradiées la présence de porteurs des bandes à  $3.3$  et  $3.52 \mu\text{m}$  plus résistants au photons UV. Le spectre total dans la région interne (Fig. 4.1) montre bien la présence des deux bandes à  $3.3$  et  $3.52 \mu\text{m}$ .

On notera que le rapport d'intensités bande aromatique à  $3.3 \mu\text{m}$  / raie du HI diminue fortement en se rapprochant de l'étoile. Il passe de  $\sim 8$  vers  $30 \text{ au}$  à  $\sim 0.5$  dans la région centrale.

De plus, une estimation de l'amplitude au pic de la bande à  $3.3 \mu\text{m}$  est de  $\sim 0.9 \text{ Jy}$ . Ainsi, une fraction non négligeable de l'émission à  $3.3 \mu\text{m}$  semble provenir des régions centrales dans lesquelles le gap s'étend jusqu'à  $13 \text{ au}$  (BENISTY et al. 2010) et indiquerait ainsi la présence des nano-particules dans ces régions.

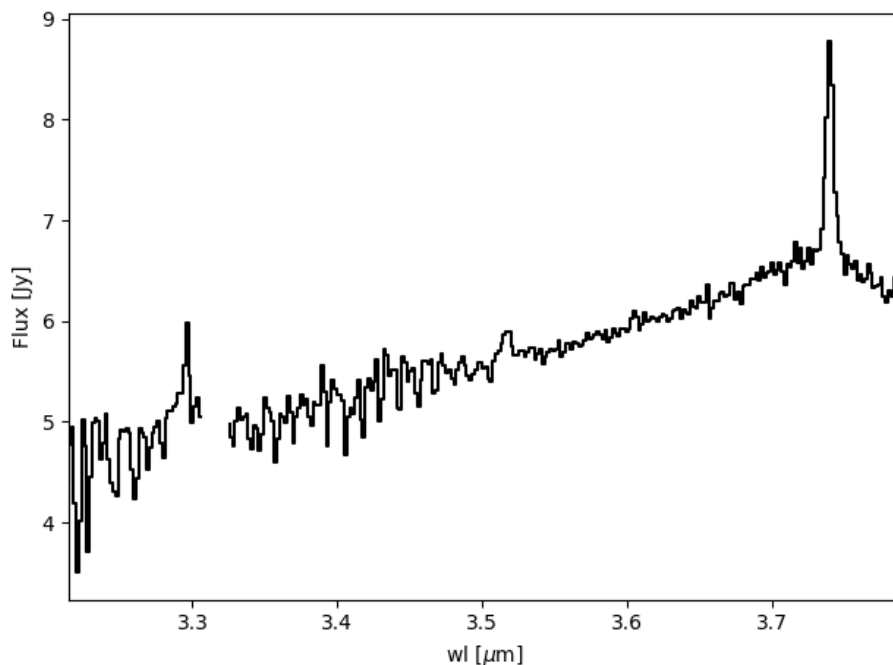


FIGURE 4.1 – Spectre global de la région interne du disque ( $d < 0.15''$ )

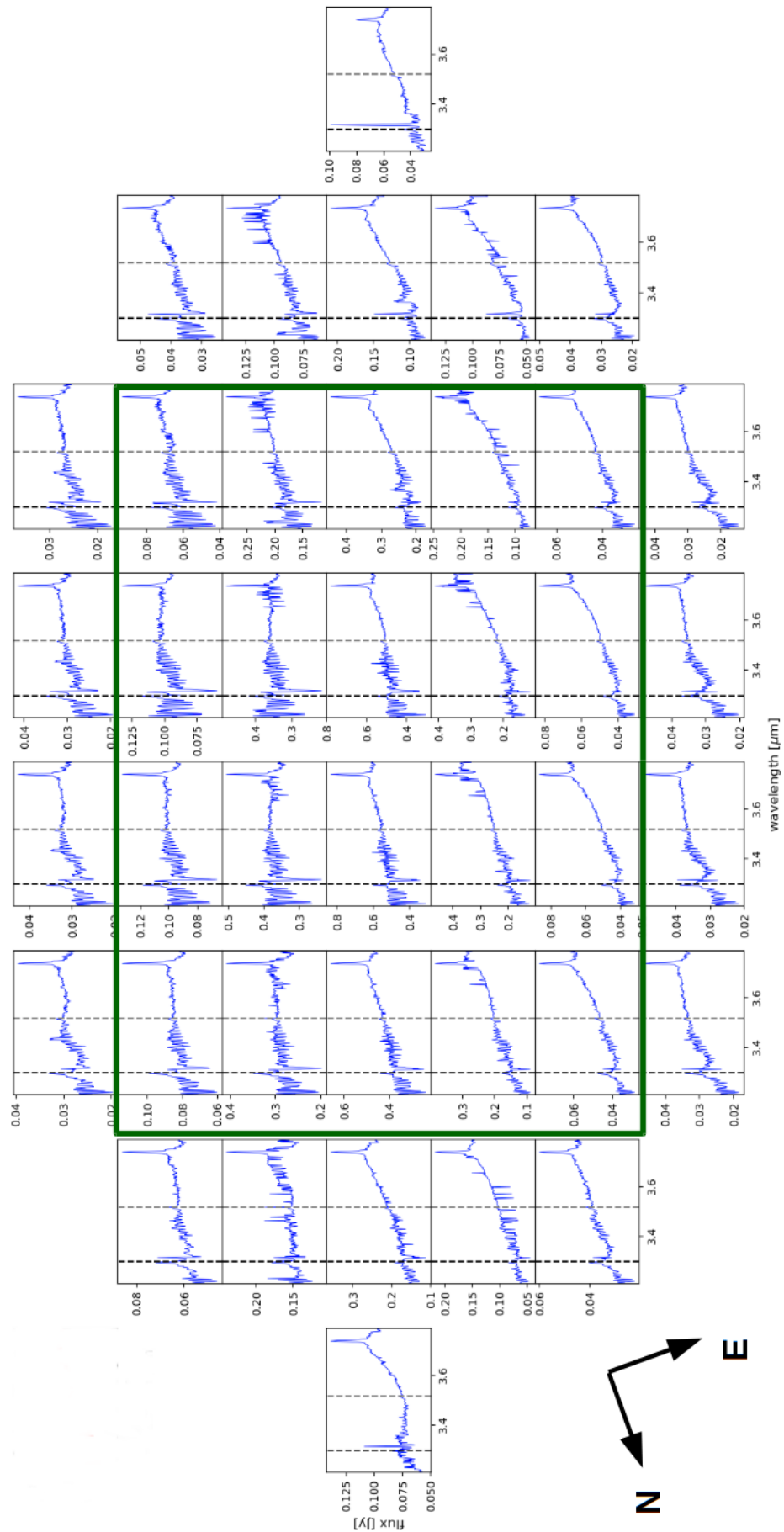


FIGURE 4.2 – Spectres des régions internes du disque pour une distance à l'étoile inférieure à 0.15". Les lignes verticales sont tracées pour les longueurs d'onde à 3.3 (noir) et 3.52  $\mu\text{m}$  (gris). Le cadre vert représente une zone de rayon 0.11" autour de l'étoile. Les spectres sont sur-échantillonnés car la résolution angulaire est de 0.1".





# Conclusion et perspectives

*« Le silence éternel des espaces m'effraie.  
Et la seule chose qu'on puisse lui opposer,  
C'est la poésie ou la musique. »*

---

Alexandre Astier

Accès direct aux chapitres [1](#), [2](#), [3](#), [4](#), [conclusion](#)

Au cours de cette thèse, je me suis intéressé à la poussière carbonée dans les disques protoplanétaires d'étoiles Herbig. Plus particulièrement, mon travail a porté sur la caractérisation et l'évolution des signatures spectroscopiques dans l'infrarouge proche associées aux nano-particules carbonées dont l'émission provient essentiellement de la surface des disques. Ces grains, constitués d'atomes de carbone et d'hydrogène forment différents types de liaisons, dont les liaisons aromatiques et aliphatiques, auxquelles sont associées des signatures spectroscopiques spécifiques. Ce travail reposait sur :

- d'une part, le traitement et l'analyse de données d'observations spectroscopiques résolues spatialement,
- d'autre part, la modélisation de la poussière dans les conditions des disques protoplanétaires.

## Principaux résultats

A travers l'analyse d'observations résolues spatialement dans le proche infrarouge, nous avons montré que l'émission des bandes aromatiques et aliphatiques sont étendues dans les disques. Notamment, le rapport d'intensités des bandes à  $3.4 \mu\text{m}$  et à  $3.3 \mu\text{m}$  montre que celles-ci sont portées par des particules sub-nanométriques fortement aromatiques avec une composante aliphatique. La diminution du rapport 3.4/3.3 en se rapprochant de l'étoile met en évidence l'aromatization des grains par dé-hydrogénation. Via notre modélisation des disques et la prise en compte du transfert radiatif, nous avons pu relier cette diminution à l'augmentation du rapport de l'intensité du champ de radiation ultraviolet,  $G_0$ , à la densité du gaz,  $n_{\text{H}}$ . Les variations du rapport 3.4/3.3 permettent donc de sonder l'évolution de la composition et de la taille des nano-poussières ainsi que les conditions physiques à la surface des disques.

D'autre part, le renouvellement des nano-particules est suggéré par le fait qu'elles sont observées dans les régions fortement irradiées de plusieurs disques où elles doivent être détruites

rapidement. Ce renouvellement peut être expliqué par différents mécanismes comme la photo-fragmentation ou la collision de grains plus gros. La caractérisation de ces mécanismes dans les conditions particulières des disques représente un enjeu majeur pour notre compréhension des disques. Notamment, la photo-fragmentation doit être particulièrement efficace dans les régions très irradiées du disque. C'est d'ailleurs une piste que j'ai commencée à explorer durant cette thèse mais qui doit être poursuivie.

De plus, l'analyse des données basée sur une décomposition en gaussiennes des observations proche infrarouge nous a permis de réaliser les premières cartes d'émission dans les bandes aromatique à 3.3  $\mu\text{m}$  et aliphatique à 3.4  $\mu\text{m}$ . Celles-ci montrent une émission structurée avec un maximum d'émission entre 20 et 50 au pour le disque emblématique HD 100546.

Enfin, la modélisation du disque et de la poussière met en évidence les contributions des différentes populations de poussière à l'émission selon la longueur d'onde et les conditions d'irradiation du disque. Notamment, notre modèle prédit que les bandes aromatique et aliphatique dans le proche infrarouge sont dues uniquement aux particules sub-nanométriques quelle que soit l'intensité du champ de rayonnement. Dans le moyen infrarouge, la contribution à l'émission est dépendante de l'intensité du champ de rayonnement et le modèle prédit que l'émission continuum étendue observée s'explique par la contribution des nano-particules chauffées stochastiquement loin de l'étoile. Près de l'étoile, le continuum est dominé par l'émission thermique des grains sub-microniques. Cette prédiction va dans le sens de l'observation des bandes aromatiques à 8.6 et 11.3  $\mu\text{m}$  et du continuum à 10.4  $\mu\text{m}$  qui montrent une émission spatialement étendue.

## Perspectives

**Les observations.** Comme on l'a vu, les signatures des nano-particules sont le reflet de leur composition, de leur taille et évoluent avec les conditions physiques. Or, celles-ci varient très rapidement dans le disque à la fois radialement et verticalement. Pour contraindre les propriétés de la poussière, il est donc essentiel d'avoir accès à des observations à haute résolution spatiale sur une large gamme de longueur d'onde. Notamment, l'instrument de spectro-imagerie MATISSE en combinant la lumière de quatre télescopes au VLT permet depuis peu de sonder les régions internes des disques protoplanétaires par interférométrie jusqu'à des résolutions spatiales de 3.5 mas en bande L (3-4  $\mu\text{m}$ ) et 5 mas en bande N (8-13  $\mu\text{m}$ ). L'observation spatialement résolue des signatures des nano-particules carbonées présente un intérêt majeur pour comprendre les conditions et les mécanismes de formation des planètes dans les gaps et cavités des régions internes. J'ai d'ailleurs participé à une proposition d'observation du disque HD 100546 avec MATISSE. Malheureusement, celle-ci n'a pas été sélectionnée mais le programme d'observation actuel au VLT accorde une part belle aux disques protoplanétaires avec MATISSE, notamment en imagerie et concerne les disques étudiés dans cette thèse.

D'autre part, d'ici 2021-2022, le James Webb Space Telescope (JWST), équipé de ses quatre instruments d'imagerie et de spectroscopie, permettra de sonder la gamme infrarouge entre 0.6 et 28  $\mu\text{m}$ . Sa sensibilité 100 fois plus grande que son prédécesseur Spitzer permettra notamment l'observation des naines brunes et des régions les plus externes des disques protoplanétaires. Sa résolution angulaire de l'ordre de 0.1" dans le proche infrarouge est similaire à celle de NaCo. Les observations présentées dans cette thèse donnent ainsi un aperçu des futures observations qui seront réalisées avec le JWST. Surtout, le JWST permettra de s'affranchir des bandes telluriques perturbant les observations depuis le sol dans le proche infrarouge.

**La modélisation.** Si la compréhension de la poussière nécessite des observations à haute résolution spatiale sur une large gamme de longueur d'onde, ces observations impliquent aussi de faire évoluer nos modèles pour prendre en compte la diversité de composition, de taille et de forme des grains de poussière. Le fait que la poussière soit sensible aux conditions locales et évolue avec elles pose le défi d'une description cohérente de ses propriétés, spatialement et temporellement. Le modèle THEMIS répond à cette exigence de cohérence en proposant un cadre dans

lequel la composition, la distribution de taille et les propriétés optiques des grains de poussière sont contraintes par un scénario d'évolution de la poussière au travers des différentes phases du milieu interstellaire. De plus, l'une des forces du modèle THEMIS est d'apporter une description continue et cohérente des propriétés de la poussière carbonée pour une large gamme de tailles et de compositions.

Une des pistes à explorer dans la continuité de cette thèse est la caractérisation de la transformation, de la destruction et de la reformation des nano-particules exposées aux conditions des disques. D'une part, ces différents mécanismes sont liés à l'intensité du champ de rayonnement UV,  $G_0$ , qui reflète l'aromatisation progressive de la poussière carbonée due à la destruction des liaisons C-H par les photons énergétiques. L'action des photons énergétiques contribuent également à la destruction des grains lorsque des liaisons C-C sont détruites et que la continuité du grain n'est plus assurée. D'autre part, la densité de gaz  $n_H$  est un indicateur de la ré-hydrogénation des grains qui tend à s'opposer à leur aromatisation. L'évaluation des temps caractéristiques de ces mécanismes en fonction des conditions dans le disque, tracées par  $G_0/n_H$ , apporte donc des contraintes sur les propriétés de la poussière. A partir de là, il est alors possible de considérer la distribution radiale et verticale des grains de poussière selon leur composition et leur taille dans les disques. Il s'agit là d'un paramètre d'entrée important et contraignant pour les modèles de chimie.

Si les observations contraignent les modèles qui en retour permettent d'interpréter les observations, les expériences de laboratoire sur les analogues de poussière restent indispensables pour identifier la nature précise des porteurs des signatures observées. Les matériaux carbonés amorphes hydrogénés a-C(:H) présentent une diversité de composition et de structures (îlots aromatiques, chaînes aliphatiques) et l'exploration expérimentale des propriétés des a-C(:H) et de leurs dérivés contenant des hétéro-atomes est importante pour la modélisation des propriétés optiques et la photo-transformation des grains de poussière.







# Liste des figures

1.1	Abondance des éléments chimiques dans la photosphère solaire. Figure adaptée de ASPLUND et al. (2009), Fig. 4. Les abondances sont normalisées à celle de l'hydrogène dont la valeur est fixée à $10^{12}$ .	6
1.2	Nuage moléculaire sombre Barnard 68. Image composite en trois couleurs, bleu, vert, IR, obtenus avec les instruments ANTU et FORS1 au VLT au petit matin du 27 mars 1999. Le champ mesure $6.8 \times 6.8''^2$ . Crédit : ESO	7
1.3	Courbes d'extinction pour $2.4 < R_V < 3.6$ . Les zones grisées montrent la variance des courbes en fonction de la longueur d'onde. (Source : FITZPATRICK et MASSA 2007; Fig. 9).	10
1.4	Albédos mesurés pour le milieu diffus (noir) et des milieux denses (rouge et bleu). Les albedos prédits pour différentes populations de grains par le modèle THEMIS (Chap. 2) et KÖHLER et al. (2015) sont tracés (lignes) pour aider la lecture. (Source : JONES et al. 2016; Fig. 11).	11
1.5	Spectres illustrant l'absorption IR de sources en direction du centre galactique. Certaines signatures sont associées aux a-C:H (HAC) dans le milieu diffus, d'autres le sont aux glaces présentes dans les nuages moléculaires. (Source : TIELENS 2005; Fig. 5.8).	12
1.6	Bandes interstellaires diffuses (DIB) dans la région 550-667 nm. L'extinction est normalisée à celle de la bande I. (Source : DRAINE 2003; Fig. 5).	14
1.7	Spectre d'émission du milieu interstellaire diffus à haute latitude galactique. Les données d'observation viennent des spectres $\sim 5$ -15 $\mu\text{m}$ ISOCAM/CVF d'ISO et $\sim 100$ -1000 $\mu\text{m}$ de FIRAS/COBE, de la mesure AROME à 3.3 $\mu\text{m}$ en bande étroite (triangle) et de la photométrie DIRBE/COBE (carrés). Le trait plein noir est le spectre prédit par le modèle de COMPIÈGNE et al. (2011). La figure est adaptée de COMPIÈGNE et al. (2011), Fig. 2.	15
1.8	Spectres ISO-SWS dans l'IR où les AIB sont observées. Les spectres sont ceux de la protonébuleuse planétaire du Rectangle Rouge (HD 44179), de la nébuleuse planétaire NGC 7027 et deux positions dans la nébuleuse diffuse d'Orion. (Source : BOERSMA 2009; Fig. 1.1).	16
1.9	Spectres d'émission IR entre 3 et 4 $\mu\text{m}$ où les signatures aliphatiques sont observées. Le spectre est celui de la nébuleuse planétaire 21282+5050. (Source : JOURDAIN DE MUIZON et al. 1990; Fig. 1).	16
1.10	Variations de position et de profils des bandes IR. Les signatures à 3 $\mu\text{m}$ et à 10-15 $\mu\text{m}$ ne montrent que des variations mineures, contrairement à la gamme 6-9 $\mu\text{m}$ . (Source : TIELENS (2008), Fig. 4, adaptée de VAN DIEDENHOVEN et al. (2004)).	18
1.11	(a) Spectres Spitzer entre 5 et 20 $\mu\text{m}$ de NGC 7023 et NGC 2023 montrant les signatures des fullerènes. Leurs positions à 7.0, 8.5, 17.4 et 18.9 $\mu\text{m}$ sont indiquées par les traits mauves. (Source : SELLGREN et al. 2010; Fig. 1). (b) Spectres à 3 $\mu\text{m}$ de Elias 1 et HD 97048 montrant les signatures des diamants à 3.43 et 3.53 $\mu\text{m}$ . Les spectres des mesures de laboratoires sur nano-cristaux de diamants sont aussi tracés. (Source : GUILLOIS et al. 1999; Fig. 2).	19



1.12 Spectres moyen IR d'environnements où sont observés les silicates cristallins : étoile jeune Herbig (en haut à gauche), étoile évoluée (en haut à droite). Les spectres de la comète Hale-Bopp (en bas à gauche) montre aussi les signatures de silicates cristallins. Les spectres de la forsterite et de l'enstatite présentent des signatures permettant d'expliquer celles observées. (Source : MOLSTER et KEMPER 2005; Fig. 2). . . . .	20
1.13 Cartes du ciel complet des paramètres issus de l'ajustement des données Planck à 353, 545 et 857 GHz et IRAS à 100 $\mu\text{m}$ par un corps noir modifié. Gauche : profondeur optique à 353 GHz, $\tau_{353}$ , à une résolution de 5'. Milieu : température de la poussière observée, $T_{obs}$ , à une résolution de 5'. Droite : indice spectral de poussière observé, $\beta_{obs}$ , à une résolution de 30'. La figure est adaptée de PLANCK COLLABORATION et al. (2014), Fig. 9. . . . .	21
1.14 Spectre de l'ERE dans le Rectangle Rouge (SCHMIDT et al. 1980). Le trait fin représente le spectre de son étoile centrale HD 44179, normalisé à 5000Å. La figure est adaptée de GODARD (2011), Fig. 2.8. . . . .	22
1.15 Carte Planck de la polarisation en émission dans le sub-millimétrique. Les lignes de champs magnétiques sont en sur-impression. (Crédit : Planck collaboration) . . . . .	22
1.16 Distribution spectrale d'énergie typique d'une galaxie de type tardif. Les principales sources d'émission et la partie du spectre associée sont représentées : étoiles (bleu), gaz (vert), poussière (rouge). Les principaux types d'émission sont indiqués : DIB (mauve), ERE (orange), bandes IR et émission thermique (rouge), émission de freinage ( <i>free-free</i> ) et synchrontron (vert) et AME (orange). L'énergie absorbée par la poussière est en bleu barré. L'encart montre la fraction de la lumière polarisée. (Source : GALLIANO et al. 2018; Fig. 1). . . . .	23
1.17 Hybridation des orbitales atomiques de l'atome de carbone. (Source de l'image : Wikipédia) . . . . .	24
1.18 Les formes allotropiques de la matière carbonée. (Source des images : EHRENFREUND et CHARNLEY (2000). . . . .	25
1.19 Représentation des types de liaisons dans la matière carbonée : aromatique (rouge), oléfinique (jaune), aliphatique (vert). . . . .	26
1.20 Diagramme de phase des a-C( :H) selon le type de liaisons en leur sein. (Source : DARTOIS 2011; Fig. 3). . . . .	26
1.21 Tétraèdre de $\text{SiO}_4$ (Source : HENNING 2010; Fig. 1). . . . .	27
1.22 Représentation des structures amorphes (gauche) et cristallines (droite) des silicates. (La figure est adaptée de MOLSTER et KEMPER 2005; Fig. 1). . . . .	27
1.23 Représentation schématique des manteaux de glaces sur les grains à travers différentes phases denses et illustrant les processus physiques et chimiques à la surface des grains. Les phases 3 à 6 pourraient être celles des conditions dans les enveloppes et les disques autour des YSO. La taille des grains et l'épaisseur des manteaux sont nanométriques. (Source : BOOGERT et al. 2015; Fig. 10). . . . .	28
1.24 Niveaux énergétiques moléculaires aux fréquences (ou énergies) des différents domaines spectraux de photons. (Source : HUMBERT et al. 2012; Fig. 1) . . . . .	29
1.25 Spectres d'absorption IR pour trois échantillons de nano'particules (suies) produites en laboratoire, des plus aromatiques (sample 1), aux plus aliphatiques (sample 3). Source : PINO et al. (2008) . . . . .	30
1.26 Modes de vibration $\text{CH}_2$ d'une chaîne carbonée. Source : AKBAR (2016) . . . . .	30
1.27 Représentation des énergies de vibration pour un oscillateur harmonique (vert) ou anharmonique (bleu) en fonction de la distance inter-atomique. (Image : CC-By-SA-3.0; Created by Mark Somoza March 26 2006) . . . . .	31
1.28 Liste des principales bandes attribuées aux silicates (Source : DEMYK 2011; Table 1). . . . .	33
1.29 Variations de la température sur une journée de grains graphitiques selon leur taille pour deux intensités du champ d'irradiation local du MIS (ISRF). (Source : DRAINE 2010; Fig. 24.5). . . . .	34

1.30	Représentation schématique des principaux mécanismes d'excitation/désexcitation dans une particule. L'excitation électronique est due à l'absorption d'un photon UV/visible. La désexcitation via la fluorescence et la conversion interne conduisent à l'émission IR. . . . .	35
1.31	Distribution de probabilité de la température $dP/dT$ pour quatre tailles de grains de 1 à 25 nm (Source : BOCCHIO 2014; Fig. 3.6) . . . . .	36
1.32	Classes des matériaux selon leur énergie de gap. Les métaux n'ont pas de gap, les isolants ont gap élevé et les semi-conducteurs un gap intermédiaire. . . . .	37
1.33	Exemple de détermination du gap de Tauc $E_g$ ( $E_{Tauc}$ (rouge) sur la figure). $E_g$ est alors donnée par l'intersection entre l'axe des énergies et la prolongation de la partie affine de la courbe $\sqrt{E\alpha}$ . (Source : GODARD 2011; Fig. 6.5) . . . . .	38
1.34	Représentation schématique de la structure des étoiles AGB. (Source : J. Hron, Inst. for Astronomy, Univ of Vienna). . . . .	41
1.35	Vue schématique du cycle de vie de la poussière interstellaire en termes de pistes d'évolution : Les pistes de "transformation parallèle" qui mènent à une évolution en douceur sont horizontales (c.-à-d. l'accrétion et la photo-transformation) et les pistes "croisées" qui mènent à un transfert de masse important entre les tailles de grains (c.-à-d. la coagulation et la désagrégation) sont diagonales et verticales. Qualitativement, l'ombrage rouge reflète la densité, $n_H$ et l'ombrage violet, à l'extrême droite, représente des champs de rayonnement $G_0$ élevés. (Source : JONES et al. 2013; Fig. 16) . . . . .	42
1.36	Représentation des classes 0, I, II et III de formation stellaire des YSO et du spectre associé. (Source : PERICAUD 2016; Fig. 2.1) . . . . .	43
1.37	Représentation du cycle de la poussière interstellaire. (Source : JONES (2004) adaptée dans GODARD (2011)) . . . . .	44
1.38	SED de disques selon leur classe : pré-transitionnel (gauche), transitionnel (milieu), de débris (droite). (Source : figure adaptée de ESPAILLAT et al. 2014; Fig. 1 et 2)) . . .	45
1.39	. . . . .	47
1.40	Observations des disques protoplanétaires HD 100546 (gauche), HD 100453 (milieu) et HD 169142 (droite) avec ALMA (haut) et SPHERE et GPI (bas). Ces disques sont étudiés dans le chapitre 3. Les figures de la mosaïque sont tirées, avec de gauche à droite et de haut en bas, de PINEDA et al. (2018), AVENHAUS et al. (2014a), BENISTY et al. (2017), VAN DER PLAS et al. (2019), FEDELE et al. (2017), MONNIER et al. (2017) .	48
1.41	Représentation de la structure d'un disque protoplanétaire. A gauche : Les différents mécanismes de transport sont représentés : turbulence (1), sédimentation (2), freinage radial (3) ; ainsi que les interactions grain-grain (4) conduisant à leur collage (a), leur rebond avec échange ou non de matière (b), et la fragmentation avec (c) ou non (d) transfert de masse. La longueur des flèches représentent la vitesse des grains. A droite : les différentes parties accessibles du disque selon la longueur d'onde sont représentées. (Source : TESTI et al. 2014; Fig. 1) . . . . .	50
1.42	Spectres d'émission IR de disques protoplanétaires. Les spectres ISO/SWS (1ère et 3ème rangées) sont tirés de ACKE et VAN DEN ANCKER (2004). Les spectres continuum soustrait mettant en évidence les signatures des AIB sont tirées de SEOK et LI (2017). Les disques de HD 100546 (en haut à gauche), de HD 100453 (en haut au milieu), de HD 169142 (en haut à droite) et de HD 179218 (en bas à gauche) sont étudiés dans le chapitre 3. . . . .	52
1.43	Imagerie des AIB dans les disques protoplanétaires. En haut à gauche : Structure verticale du Hamburger de Gomez et candidat planétaire (BERNÉ et al. 2015). En bas à gauche : distribution spatiale de l'AIB à 11.3 $\mu\text{m}$ et du continuum à 18.7 $\mu\text{m}$ dans IRS 48 (GEERS et al. 2007b). A droite : observation de l'AIB à 11.3 $\mu\text{m}$ dans HD 97048 et comparaison avec trois inclinaisons du disque modélisé (LAGAGE et al. 2006). . . . .	53

2.1 Réseau de modèle DG. Les cercles remplis (ouverts) représentent des atomes de carbone (hydrogène) dans un réseau aromatique. Les cercles en pointillés indiquent des cycles au caractère aromatique. (source : JONES 2012a; Fig. 12) . . . . .	59
2.2 Les spectres eRCN et DG prédits, présentés sous forme de coefficient d'absorption, $\alpha$ , dans la région 2.5-13.5 $\mu\text{m}$ en fonction de $E_g$ . Les spectres sont tracés pour différentes valeurs d'énergies de gap $E_g$ allant de 0 eV (gris) à 2.5 eV (violet) par pas de 0.25 eV. Les spectres pour les valeurs -0.1 eV (noir), 0.1 eV (gris clair) et 2.67 eV (violet) sont également tracés. Les positions centrales des bandes à droite de la ligne grise verticale ( $\lambda > 7.3 \mu\text{m}$ ) ne sont pas encore bien déterminées par les mesures en laboratoire. (Source : JONES 2012a; Fig. 13) . . . . .	62
2.3 Graphique de Tauc. Les données sont celles utilisées dans JONES (2012b). L'énergie de gap $E_g$ décroît de bas (vert) en haut (gris clair). (Source : JONES 2012b; Fig. 2) . . .	63
2.4 Partie imaginaire de l'indice optique, $k$ pour des a-C(:H) avec $E_g = 0, 0.5, 1.5$ et $2.67$ eV (gris foncé, rose, jaune-et violettes, respectivement). Les lignes pointillées verticales marquent le centre des bandes $\pi - \pi^*$ , $C_6$ et $\sigma - \sigma^*$ à 4.0, 6.5 et 13 eV, respectivement. (Source : JONES 2012b; Fig. 7) . . . . .	64
2.5 Parties imaginaire $k$ (haut) et réelle $n$ de l'indice optique complexe pour des énergies de gap $E_g$ allant de 0.1 eV (noir) à 2.67 eV (mauve). (Source : JONES 2012b; Fig. 9) . .	65
2.6 Énergie de gap selon la taille du grain de poussière pour différentes proportions d'hydrogène $X_H$ (Source : JONES 2012a; Fig. 2) . . . . .	66
2.7 $\lambda Q_{abs}/a$ et $\lambda Q_{ext}/a$ en fonction de la longueur d'onde pour un grain de rayon $a=100$ nm (haut) et $a=0.5$ nm (bas) (Source : JONES 2012b; Fig. 10,13) . . . . .	67
2.8 Les populations de poussières en coupe transversale. Dans la partie supérieure, les grains a-C :H/a-C sont représentés, où le noir représente la matière riche en aromatiques et le blanc la matière riche en aliphatiques. Dans la partie inférieure, les grains de silicate amorphe (vert) sont représentés avec un manteau a-C coagulé/accrété de 5 nm d'épaisseur. Les rayons des particules sont indiqués sur une échelle logarithmique. (Source : JONES et al. 2013; Fig. 1) . . . . .	69
2.9 Modèle standard THEMIS pour $N_H = 10^{20} \text{ H cm}^{-2}$ et $G_0=1$ pour l'ISRF : distribution de taille (en haut à gauche), extinction proche IR-UV (en haut à droite), extinction IR (en bas à gauche), et la SED de la poussière complète (en bas à gauche). Les totaux sont indiqués par les lignes pleines (rouges). Les données sur l'extinction sont tirées de MATHIS (1990). Les données d'observation dans le graphique en bas à gauche sont : les spectres $\sim 5\text{-}15 \mu\text{m}$ ISOCAM/CVF d'ISO et $\sim 100\text{-}1000 \mu\text{m}$ de FIRAS/COBE, la mesure AROME à $3.3 \mu\text{m}$ en bande étroite (triangle) et photométrie DIRBE/COBE (carrés) (JONES et al. 2013). . . . .	70
2.10 Contributions relatives des composantes à la SED : a-C (tirets simples pointillés), a-C :H/a-C (tirets triples pointillés), a-Sil/a-C (pointillés). On peut noter que la population de petits grains a-C(:H) contribue pour $\approx 45\%$ de l'émission totale à $60 \mu\text{m}$ et $\approx 13\%$ de l'émission totale à $100 \mu\text{m}$ . (Source : JONES et al. 2013; Fig. 4) . . . . .	70
2.11 Spectres de bande d'émission à $3\text{-}14 \mu\text{m}$ (gauche) et $3.1\text{-}3.7 \mu\text{m}$ (droite) en fonction de la bande interdite a-C(:H) du matériau, $E_g$ (eV). (Source : JONES et al. 2013; Fig. 11) 71	71
2.12 Vue schématique du cycle de vie de la poussière interstellaire en termes de pistes d'évolution : Les pistes de "transformation parallèle" qui mènent à une évolution en douceur sont horizontales (c.-à-d. l'accrétion et la photo-transformation) et les pistes "croisées" qui mènent à un transfert de masse important entre les tailles de grains (c.-à-d. la coagulation et la désagrégation) sont diagonales et verticales. Qualitativement, l'ombrage rouge reflète la densité, $n_H$ et l'ombrage violet, à l'extrême droite, représente des champs de rayonnement $G_0$ élevés. (Source : JONES et al. 2013; Fig. 16) . . . . .	72

2.13 SED de la poussière dans l'IR. De gauche à droite, $a_{min}$ vaut 0.4, 0.6, 1 nm. De haut en bas, $G_0$ vaut 1, $10^2$ , $10^4$ puis $10^8$ . Sur chaque graphique, $\alpha$ prend les valeurs -2 (bleu), -5 (noir) et -6 (rouge). Les contributions des petits a-C (trait plein), des gros a-C :H/a-C (pointillés) et a-Sil <sub>Fe/FeS</sub> /a-C (pointillés-tirets-longs) sont distinguées. L'émission totale est en trait plein épais. . . . .	74
2.14 Comparaison des SED de la poussière dans l'IR pour THEMIS (noir) à d'autres modèles COMPIÈGNE et al. (2011) (tirets gris), DESERT et al. (1990) (pointillés gris), DRAINE et LI (2001) (tirets pointillés gris). Les distributions de tailles sont présentées dans la figure 2.18. . . . .	75
2.15 Températures d'équilibre $T_{eq}$ (trait plein) et moyenne $T_{moy}$ (tirets) pour des a-C de rayon $a=4$ nm (bleu), $\sim 1.3$ nm (cyan), $\sim 10$ nm (magenta), un a-C :H/a-C (gris) et a-Sil (vert) de $\sim 150$ nm en fonction de $G_0$ . Pour les grains à l'équilibre thermique, on a $T_{eq}=T_{moy}$ . . . . .	76
2.16 SED de la poussière dans l'IR. De gauche à droite, la température du corps noir irradiant vaut 5000, 10000 et 30000 K. De haut en bas, $G_0$ vaut 1, $10^2$ , $10^4$ puis $10^8$ . Les contributions des petits a-C (trait plein), des gros a-C :H/a-C (pointillés) et gris a-Sil <sub>Fe/FeS</sub> (pointillés-tirets-longs). L'émission totale est en trait plein épais. . . . .	78
2.17 SED de la poussière entre 3 et 4 $\mu m$ . De gauche à droite, et de haut en bas, $E_g$ augmente de 0 eV à 2.4 eV. Pour chaque graphique la SED est tracée pour $a_{min}=0.4$ nm (bleu), 0.7 nm (vert), 1 nm (rouge). Les centres des bandes associées aux liaisons aromatiques (tirets pointillés noirs), oléfiniques (tirets gris) et aliphatiques (pointillés mauves) sont représentés. (Source : BOUTÉRAON et al. 2019; Fig. 8) . . . . .	79
2.18 Comparaison des distributions de taille des différentes populations de poussière pour THEMIS (noir) aux modèles de COMPIÈGNE et al. (2011) (cyan), DESERT et al. (1990) (rouge) et DRAINE et LI (2001) (vert-jaune). Un style de ligne est attribué aux populations dont la taille et la composition sont similaires : a-C <sub>e/tp</sub> /PAH (trait continu), a-C <sub>p</sub> /VSG/graphite (tirets), a-C :H/graphite (pointillés), a-Sil/Gros grains (tirets-pointillés). . . . .	81
2.19 SED de la poussière entre 3 et 14 $\mu m$ . De gauche à droite, et de haut en bas, $E_g$ augmente de 0 eV à 2.4 eV. De haut en bas, $G_0$ vaut 1, $10^2$ , $10^4$ puis $10^8$ . Sur chaque graphique, les émissions des a-C <sub>ep</sub> (bleu), a-C <sub>tp</sub> (cyan), a-C <sub>p</sub> (magenta), a-C :H/a-C (pointillés gris) et a-Sil (tirets pointillés verts) sont tracées. L'émission totale est en trait noir plein épais. . . . .	82
2.20 Deux exemples de formes d'agrégats (échelles arbitraires). A gauche : agrégat composé de $N = 12$ monomères sphériques compacts avec un $\sigma = 0.1 \mu m$ . A droite : agrégat composé de $N = 16$ monomères sphéroïdes allongés compacts avec un $\sigma = 0.05 \mu m$ et un rapport d'aspect de 2. (Source : YSARD et al. 2018; Fig. 2) . . . . .	85
2.21 Opacités massiques à 250 $\mu m$ normalisées des a-Sil <sub>Fe/FeS</sub> (gauche), a-C (milieu) et a-C :H (droite) en fonction du nombre de monomères $N$ composant les agrégats. Haut : $\kappa(a_0, N)$ pour des sphères de rayon $a_0 = 0.05$ (rouge), 0.1 (orange), 0.5 (brun) et 1 $\mu m$ (pourpre) normalisé à $\kappa(a_0, 1)$ . Milieu : $\kappa(a_0 = 0.1 \mu m, N, P = 20\%)$ normalisé à $\kappa(a_0 = 0.1 \mu m, N, P = 0\%)$ . Bas : $\kappa(\text{monomères aplatis}, N)$ en bleu et $\kappa(\text{monomères allongés}, N)$ en rose normalisé à $\kappa(\text{monomères sphériques}, N)$ . Les zones remplies montrent la dispersion des opacités massiques pour dix formes d'agrégats choisies au hasard. (Source : YSARD et al. 2018; Fig. 11) . . . . .	86

2.22	Positions des centres de bandes à 10 et 18 $\mu\text{m}$ , $\lambda_{10}$ et $\lambda_{18}$ (première et troisième rangées), largeurs à mi-hauteur, $\text{FWHM}_{10}$ et $\text{FWHM}_{18}$ (deuxième et quatrième rangées), et rapports des opacités massiques des a-Sil dans l'IR, $R_{10/18}$ (rangée inférieure), pour des grains isolés (gauche) et des agrégats (droite). $\lambda$ , FWHM et $R_{10/18}$ sont tracés pour des sphères compactes (cercles noirs), des sphères poreuses (carrés fuchsia), des grains allongés (triangles bleus), des grains aplatis (triangles corail) et des agrégats de sphères compactes avec $a_0 = 0.05$ (cercles rouges), 0.1 (cercles orange), 0.5 (cercles bruns), 1 $\mu\text{m}$ (cercles violets), agrégats de sphères poreuses avec $P = 20\%$ et $a_0 = 0.1 \mu\text{m}$ (carrés fuchsia), agrégats de monomères avec $a_0 = 0.05 \mu\text{m}$ , allongés (triangles bleus) et aplatis (triangles corail). Les lignes pointillées horizontales noires indiquent les valeurs de $\lambda$ , FWHM et $R_{10/18}$ de la plus petite sphère compacte isolée. (Source : YSARD et al. 2018; Fig. 12)	87
3.1	Représentation de la projection de la longue fente sur le ciel. Dans le cas de HD 100546 comme ici, la fente est alignée selon le grand axe du disque. Trois différentes positions de fentes sont représentées en transparence par les rectangles. Credit : ESO/NASA/ESA/Ardila et al.	91
3.2	Modèle de la transmission atmosphérique entre 3 et 4 $\mu\text{m}$ pour une densité de colonne de vapeur d'eau de 1.6 mm et de masse d'air 1. Source : Fig. 3.2 du manuel utilisateur NaCo <sup>(a)</sup> basé sur le travail de LORD (1992).	94
3.3	Cycle de ABBA de la réduction des données. <i>Gauche</i> : Image des données brutes. L'axe vertical $\lambda$ correspond à la dimension spectrale de l'image. L'axe horizontal $x$ est pour la dimension spatiale. La trace de l'étoile est la indiqué par le cadre jaune. <i>Milieu</i> : Combinaison A - B. Les traces de l'étoile apparaissent en positif (clair) et négatif (sombre). <i>Droite</i> : Combinaison ABBA des traces positives. Deux traces en négatif persistent.	94
3.4	Spectre combiné, réduit et corrigé de HD 100546 (avec continuum).	95
3.5	Variation du rapport 3.4/3.3 en fonction de $G_0/n_H$	113
4.1	Spectre global de la région interne du disque ( $d < 0.15''$ )	136
4.2	Spectres des régions internes du disque pour une distance à l'étoile inférieure à 0.15". Les lignes verticales sont tracées pour les longueurs d'onde à 3.3 (noir) et 3.52 $\mu\text{m}$ (gris). Le cadre vert représente une zone de rayon 0.11" autour de l'étoile. Les spectres sont sur-échantillonnés car la résolution angulaire est de 0.1".	137

# Liste des tableaux

1.1	Phases du milieu interstellaire. Adapté de DRAINE (2010), Table 1.3. $f_v$ est le facteur de remplissage volumique . . . . .	7
1.2	Densités énergétiques dans le MIS. Adapté de DRAINE (2010), Table 1.5 (voir pour références des valeurs) . . . . .	8
1.3	Signatures et assignation des modes CH et CC considérés pour les a-C(:H) dans le cadre du modèle THEMIS (JONES et al. 2017). Pour la signature à 3.3 $\mu\text{m}$ , la gamme de variations de sa position basée sur la compilation de BOUTÉRAON et al. (2019) est entre parenthèse. (Source : adapté de JONES et al. 2013) . . . . .	32
2.1	Désignation et formules des liaisons dans le modèle eRCN . . . . .	58
2.2	Les modes C-H et C-C considérés pour les modèles eRCN/DG pour les solides a-C(:H) : centre de bande ( $\nu_0$ ), largeur ( $\delta$ ) et section efficace intégrée( $\sigma$ ). (Source : adapté de JONES et al. 2013) . . . . .	61
2.3	Distribution et taille caractéristique des populations de poussière. . . . .	80



# Bibliographie

## Chapitre 1

- ACKE, B. et M. E. VAN DEN ANCKER. 2004, «ISO spectroscopy of disks around Herbig Ae/Be stars», vol. 426, n° 1, doi :10.1051/0004-6361:20040400, p. 151–170, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.edpsciences.org/10.1051/0004-6361:20040400>. 51, 52, V
- ACKE, B. et M. E. VAN DEN ANCKER. 2006, «Resolving the disk rotation of HD 97048 and HD 100546 in the [O I] 6300 Å line : Evidence for a giant planet orbiting HD 100546», vol. 449, n° 1, p. 267–279. URL <http://www.aanda.org/articles/aa/ps/2006/13/aa4330-05.ps.gz>. 51
- ACKE, B., J. BOUWMAN, A. JUHÁSZ, T. HENNING, M. E. VAN DEN ANCKER, G. MEEUS, A. TIELENS et L. WATERS. 2010, «Spitzer’s view on aromatic and aliphatic hydrocarbon emission in Herbig Ae stars», vol. 718, n° 1, p. 558. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0004-637X/718/1/558/meta>. 51
- ADAMSON, A. J., D. C. B. WHITTET et W. W. DULEY. 1990, «The 3.4-micron interstellar absorption feature in CYG OB2 no. 12», vol. 243, p. 400–404. 11
- AKBAR, D. A. 2016, «Chapitre 1 : Spectroscopie infrarouge», URL <http://brussels-scientific.com/?p=6159>. 30, IV
- ALEXANDER, R. D. et P. J. ARMITAGE. 2007, «Dust dynamics during protoplanetary disc clearing», vol. 375, n° 2, doi :10.1111/j.1365-2966.2006.11341.x, p. 500–512, ISSN 0035-8711. URL <http://academic.oup.com/mnras/article/375/2/500/1441736>. 49
- ALHARBI. 2018, «Mass Loss in Evolved Stars», URL [https://www.research.manchester.ac.uk/portal/files/87763395/FULL\\_TEXT.PDF](https://www.research.manchester.ac.uk/portal/files/87763395/FULL_TEXT.PDF). 40
- ALLAMANDOLA, L. J., D. M. HUDGINS et S. A. SANDFORD. 1999, «Modeling the Unidentified Infrared Emission with Combinations of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons», vol. 511, n° 2, doi : 10.1086/311843, p. L115, ISSN 1538-4357. URL <http://stacks.iop.org/1538-4357/511/i=2/a=L115>. 40
- ALLAMANDOLA, L. J., S. A. SANDFORD, A. G. TIELENS et T. M. HERBST. 1993, «Diamonds in dense molecular clouds : A challenge to the standard interstellar medium paradigm», vol. 260, n° 5104, doi :10.1126/science.11538059, p. 64–66, ISSN 0036-8075, 1095-9203. URL <https://science.sciencemag.org/content/260/5104/64>. 11, 19
- ALLAMANDOLA, L. J., S. A. SANDFORD, A. G. G. M. TIELENS et T. M. HERBST. 1992, «Infrared spectroscopy of dense clouds in the C-H stretch region - Methanol and 'diamonds'», vol. 399, doi : 10.1086/171909, p. 134–146. 11, 19
- ALLAMANDOLA, L. J., A. TIELENS et J. R. BARKER. 1989, «Interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons-The infrared emission bands, the excitation/emission mechanism, and the astrophysical implications», vol. 71, p. 733–775. URL <http://articles.adsabs.harvard.edu/full/1989ApJS...71..733A/0000733.000.html>. 15, 34, 40



- ALLAMANDOLA, L. J., A. G. G. M. TIELENS et J. R. BARKER. 1985, «Polycyclic aromatic hydrocarbons and the unidentified infrared emission bands - Auto exhaust along the Milky Way», vol. 290, doi :10.1086/184435, p. L25, ISSN 0004-637X, 1538-4357. URL <http://adsabs.harvard.edu/doi/10.1086/184435>. 15, 39
- ALMA PARTNERSHIP, C. L. BROGAN, L. M. PÉREZ, T. R. HUNTER, W. R. F. DENT, A. S. HALES, R. E. HILLS, S. CORDER, E. B. FOMALONT, C. VLAHAKIS, Y. ASAKI, D. BARKATS, A. HIROTA, J. A. HODGE, C. M. V. IMPELLIZZERI, R. KNEISSL, E. LIUZZO, R. LUCAS, N. MARCELINO, S. MATSUSHITA, K. NAKANISHI, N. PHILLIPS, A. M. S. RICHARDS, I. TOLEDO, R. ALADRO, D. BROGUIERE, J. R. CORTES, P. C. CORTES, D. ESPADA, F. GALARZA, D. G. APPADOO, L. G. RAMIREZ, E. M. HUMPHREYS, T. JUNG, S. KAMENO, R. A. LAING, S. LEON, G. MARCONI, A. MIGNANO, B. NIKOLIC, L.-A. NYMAN, M. RADISZCZ, A. REMIJAN, J. A. RODÓN, T. SAWADA, S. TAKAHASHI, R. P. J. TILANUS, B. V. VILARO, L. C. WATSON, T. WIKLIND, E. AKIYAMA, E. CHAPILLON, I. D. G. MONSALVO, J. D. FRANCESCO, F. GUETH, A. KAWAMURA, C.-F. LEE, Q. N. LUONG, J. MANGUM, V. PIETU, P. SANHUEZA, K. SAIGO, S. TAKAKUWA, C. UBACH, T. VAN KEMPEN, A. WOOTTEN, A. C. CARRIZO, H. FRANCKE, J. GALLARDO, J. GARCIA, S. GONZALEZ, T. HILL, T. KAMINSKI, Y. KURONO, H.-Y. LIU, C. LOPEZ, F. MORALES, K. PLARRE, G. SCHIEVEN, L. TESTI, L. VIDELA, E. VILLARD, P. ANDREANI, J. E. HIBBARD et K. TATEMATSU. 2015, «THE 2014 ALMA LONG BASELINE CAMPAIGN : FIRST RESULTS FROM HIGH ANGULAR RESOLUTION OBSERVATIONS TOWARD THE HL TAU REGION», vol. 808, n° 1, doi :10.1088/2041-8205/808/1/L3, p. L3, ISSN 2041-8213. URL <http://stacks.iop.org/2041-8205/808/i=1/a=L3?key=crossref.0cdb0b64a903e132363c375ddb3d53d2>. 45, 46, 47
- ANDREWS, S. M. et J. P. WILLIAMS. 2005, «Circumstellar Dust Disks in Taurus-Auriga : The Submillimeter Perspective», vol. 631, n° 2, doi :10.1086/432712, p. 1134, ISSN 0004-637X. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/432712/meta>. 46
- ANDREWS, S. M. et J. P. WILLIAMS. 2007, «A Submillimeter View of Circumstellar Dust Disks in Ophiuchi», vol. 671, n° 2, doi :10.1086/522885, p. 1800, ISSN 0004-637X. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/522885/meta>. 46
- ANDREWS, S. M., D. J. WILNER, Z. ZHU, T. BIRNSTIEL, J. M. CARPENTER, L. M. PÉREZ, X.-N. BAI, K. I. ÖBERG, A. M. HUGHES, A. ISELLA et L. RICCI. 2016, «RINGED SUBSTRUCTURE AND A GAP AT 1 au IN THE NEAREST PROTOPLANETARY DISK», vol. 820, n° 2, doi :10.3847/2041-8205/820/2/L40, p. L40, ISSN 2041-8205. URL <https://doi.org/10.3847%2F2041-8205%2F820%2F2%2F140>. 45, 47
- ANGUS, J. C. et F. JANSEN. 1988, «Dense “diamondlike” hydrocarbons as random covalent networks», vol. 6, p. 1778–1782. 26
- ANSDELL, M., J. P. WILLIAMS, N. VAN DER MAREL, J. M. CARPENTER, G. GUIDI, M. HOGERHEIJDE, G. S. MATHEWS, C. F. MANARA, A. MIOTELLO, A. NATTA, I. OLIVEIRA, M. TAZZARI, L. TESTI, E. F. VAN DISHOCK et S. E. VAN TERWISGA. 2016, «ALMA SURVEY OF LUPUS PROTOPLANETARY DISKS. I. DUST AND GAS MASSES», vol. 828, n° 1, doi :10.3847/0004-637X/828/1/46, p. 46, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.3847%2F0004-637x%2F828%2F1%2F46>. 46
- ARENDRT, R. G., E. DWEK, W. P. BLAIR, P. GHAVAMIAN, U. HWANG, K. S. LONG, R. PETRE, J. RHO et P. F. WINKLER. 2010, «SPITZER OBSERVATIONS OF DUST DESTRUCTION IN THE PUPPIS A SUPERNOVA REMNANT», vol. 725, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/725/1/585, p. 585–597, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088%2F0004-637x%2F725%2F1%2F585>. 40
- ASPLUND, M., N. GREVESSE, A. J. SAUVAL et P. SCOTT. 2009, «The Chemical Composition of the Sun», vol. 47, n° 1, doi :10.1146/annurev.astro.46.060407.145222, p. 481–522. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.astro.46.060407.145222>. 5, 6, 41, III

- AVENHAUS, H., S. P. QUANZ, A. GARUFI, S. PEREZ, S. CASASSUS, C. PINTE, G. H.-M. BERTRANG, C. CACERES, M. BENISTY et C. DOMINIK. 2018, «Disks around T Tauri Stars with SPHERE (DARTTS-S). I. SPHERE/IRDIS Polarimetric Imaging of Eight Prominent T Tauri Disks», vol. 863, n° 1, doi :10.3847/1538-4357/aab846, p. 44, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.3847%2F1538-4357%2Faab846>. 46
- AVENHAUS, H., S. P. QUANZ, M. R. MEYER, S. D. BRITAIN, J. S. CARR et J. R. NAJITA. 2014a, «HD100546 MULTI-EPOCH SCATTERED LIGHT OBSERVATIONS», vol. 790, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/790/1/56, p. 56, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088%2F0004-637x%2F790%2F1%2F56>. 46, 48, V
- AVENHAUS, H., S. P. QUANZ, H. M. SCHMID, M. R. MEYER, A. GARUFI, S. WOLF et C. DOMINIK. 2014b, «STRUCTURES IN THE PROTOPLANETARY DISK OF HD142527 SEEN IN POLARIZED SCATTERED LIGHT», vol. 781, n° 2, doi :10.1088/0004-637X/781/2/87, p. 87, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088%2F0004-637x%2F781%2F2%2F87>. 46
- BALLY, J., C. R. O'DELL et M. J. MCCAUGHREAN. 2000, «Disks, Microjets, Windblown Bubbles, and Outflows in the Orion Nebula», vol. 119, n° 6, doi :10.1086/301385, p. 2919, ISSN 1538-3881. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/301385/meta>. 46
- BARENFIELD, S. A., J. M. CARPENTER, A. I. SARGENT, L. RICCI et A. ISELLA. 2017, «The End of Protoplanetary Disk Evolution : An ALMA Survey of Upper Scorpius», p. 327.01. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2017AAS...22932701B>. 46
- BARNARD, E. E. 1907, «On a nebulous groundwork in the constellation Taurus.», vol. 25, doi : 10.1086/141434, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1907ApJ...25..218B>. 5
- BARNARD, E. E. 1910, «On a great nebulous region and the question of absorbing matter in space and the transparency of the nebulae.», vol. 31, doi :10.1086/141719, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1910ApJ...31...8B>. 5
- BARNARD, E. E. 1922, «Some Remarkable Small Black Spots in the Milky Way», p. 10. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1922PAAS...4R..10B>. 5
- BAUSCHLICHER, C. W., A. RICCA, C. BOERSMA et L. J. ALLAMANDOLA. 2018, «The NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database : Computational Version 3.00 with Updated Content and the Introduction of Multiple Scaling Factors», vol. 234, n° 2, doi :10.3847/1538-4365/aaa019, p. 32, ISSN 0067-0049. URL <https://doi.org/10.3847%2F1538-4365%2Faaa019>. 40
- BAUSCHLICHER, C. W., JR., C. BOERSMA, A. RICCA, A. L. MATTIODA, J. CAMI, E. PEETERS, F. SÁNCHEZ DE ARMAS, G. PUERTA SABORIDO, D. M. HUDGINS et L. J. ALLAMANDOLA. 2010, «The NASA Ames Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Infrared Spectroscopic Database : The Computed Spectra», vol. 189, doi :10.1088/0067-0049/189/2/341, p. 341–351, ISSN 0067-0049. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2010ApJS..189..341B>. 17
- BECKWITH, S. V. W., A. I. SARGENT, R. S. CHINI et R. GUESTEN. 1990, «A Survey for Circumstellar Disks around Young Stellar Objects», vol. 99, doi :10.1086/115385, p. 924, ISSN 0004-6256. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1990AJ...99..924B/abstract>. 46
- BENISTY, M., T. STOLKER, A. POHL, J. DE BOER, G. LESUR, C. DOMINIK, C. P. DULLEMOND, M. LANGLOIS, M. MIN, K. WAGNER, T. HENNING, A. JUHASZ, P. PINILLA, S. FACCHINI, D. APAI, R. VAN BOEKEL, A. GARUFI, C. GINSKI, F. MÉNARD, C. PINTE, S. P. QUANZ, A. ZURLO, A. BOCCALETTI, M. BONNEFOY, J. L. BEUZIT, G. CHAUVIN, M. CUDEL, S. DESIDERA, M. FELDT, C. FONTANIVE, R. GRATTON, M. KASPER, A.-M. LAGRANGE, H. LECOROLLER, D. MOUILLET, D. MESA, E. SISSA, A. VIGAN, J. ANTICHI, T. BUEY, T. FUSCO, D. GISLER, M. LLORED, Y. MAGNARD, O. MOELLER-NILSSON, J. PRAGT, R. ROELFSEMA, J.-F. SAUVAGE et F. WILDI. 2017, «Shadows and spirals in

- the protoplanetary disk HD 100453», vol. 597, doi :10.1051/0004-6361/201629798, p. A42, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201629798>. 48, V
- BERGIN, E. A., L. I. CLEEVES, U. GORTI, K. ZHANG, G. A. BLAKE, J. D. GREEN, S. M. ANDREWS, N. J. EVANS II, T. HENNING, K. ÖBERG, K. PONTOPPIDAN, C. QI, C. SALYK et E. F. VAN DISHOECK. 2013, «An old disk still capable of forming a planetary system», vol. 493, n° 7434, doi :10.1038/nature11805, p. 644–646, ISSN 1476-4687. URL <https://www.nature.com/articles/nature11805>. 46
- BERNSTEIN, R. A., W. L. FREEDMAN et B. F. MADORE. 2002, «The First Detections of the Extragalactic Background Light at 3000, 5500, and 8000 Å (I) : Results», vol. 571, n° 1, doi :10.1086/339422, p. 56–84, ISSN 0004-637X, 1538-4357. URL <http://arxiv.org/abs/astro-ph/0112153>. 14
- BERNÉ, O., N. L. J. COX, G. MULAS et C. JOBLIN. 2017, «Detection of buckminsterfullerene emission in the diffuse interstellar medium», vol. 605, doi :10.1051/0004-6361/201630325, p. L1, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201630325>. 17
- BERNÉ, O., A. FUENTE, E. PANTIN, V. BUJARRABAL, C. BARUTEAU, P. PILLERI, E. HABART, F. MÉNARD, J. CERNICARO, A. G. G. M. TIELENS et C. JOBLIN. 2015, «Very Large Telescope observations of Gomez’s Hamburger : Insights into a young protoplanet candidate», vol. 578, doi :10.1051/0004-6361/201526041, p. L8, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2015A%26A...578L...8B>. 52, 53, V
- BERNÉ, O., C. JOBLIN, A. FUENTE et F. MÉNARD. 2009, «What can we learn about protoplanetary disks from analysis of mid-infrared carbonaceous dust emission?», vol. 495, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:200810559, p. 827. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2009A%26A...495..827B/abstract>. 53
- BERNÉ, O., C. JOBLIN, M. RAPACIOLI, J. THOMAS, J.-C. CUILLANDRE et Y. DEVILLE. 2008, «Extended Red Emission and the evolution of carbonaceous nanograins in NGC 7023», vol. 479, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20079158, p. L41–L44, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2008/09/aa9158-07/aa9158-07.html>. 21
- BERNÉ, O., G. MULAS et C. JOBLIN. 2013, «Interstellar C<sub>60</sub><sup>+</sup>», vol. 550, doi :10.1051/0004-6361/201220730, p. L4. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2013A%26A...550L...4B/abstract>. 17
- BERTRANG, G. H.-M., H. AVENHAUS, S. CASASSUS, M. MONTESINOS, F. KIRCHSCHLAGER, S. PEREZ, L. CIEZA et S. WOLF. 2018, «HD 169142 in the eyes of ZIMPOL/SPHERE», vol. 474, n° 4, doi :10.1093/mnras/stx3052, p. 5105–5113, ISSN 0035-8711. URL <https://academic.oup.com/mnras/article/474/4/5105/4668417>. 46
- BIANCHI, S. et R. SCHNEIDER. 2007, «Dust formation and survival in supernova ejecta», vol. 378, n° 3, doi :10.1111/j.1365-2966.2007.11829.x, p. 973–982, ISSN 0035-8711. URL <http://academic.oup.com/mnras/article/378/3/973/1053458>. 40
- BILLER, B. A., J. MALES, T. RODIGAS, K. MORZINSKI, L. M. CLOSE, A. JUHÁSZ, K. B. FOLLETTE, S. LACOUR, M. BENISTY, A. SICILIA-AGUILAR, P. M. HINZ, A. WEINBERGER, T. HENNING, J.-U. POTT, M. BONNEFOY et R. KÖHLER. 2014, «An Enigmatic Point-like Feature within the HD 169142 Transitional Disk», vol. 792, doi :10.1088/2041-8205/792/1/L22, p. L22, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2014ApJ...792L..22B>. 48
- BIRNSTIEL, T., C. P. DULLEMOND et F. BRAUER. 2009, «Dust retention in protoplanetary disks», vol. 503, n° 1, p. L5–L8. 49
- BIRNSTIEL, T., C. P. DULLEMOND et F. BRAUER. 2010, «Gas- and dust evolution in protoplanetary disks», vol. 513, doi :10.1051/0004-6361/200913731, p. A79, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/200913731>. 49

- BLADES, J. C. et D. C. B. WHITTET. 1980, «Observations of unidentified infrared features in the pre-main sequence star HD 97048», vol. 191, n° 4, p. 701–709. 51
- BLUM, J. et G. WURM. 2000, «Experiments on Sticking, Restructuring, and Fragmentation of Pre-planetary Dust Aggregates», vol. 143, n° 1, doi :10.1006/icar.1999.6234, p. 138–146, ISSN 0019-1035. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001910359962346>. 49
- BOCCHIO, M. 2014, «Modelling Dust Processing and Evolution in Extreme Environments as seen by Herschel Space Observatory», URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01126887/>. 33, 36, V
- BOCCHIO, M., A. P. JONES et J. D. SLAVIN. 2014, «A re-evaluation of dust processing in supernova shock waves», vol. 570, doi :10.1051/0004-6361/201424368, p. A32. 41
- VAN BOEKEL, R., L. B. F. M. WATERS, C. DOMINIK, C. P. DULLEMOND, A. G. G. M. TIELENS et A. DE KOTER. 2004, «Spatially and spectrally resolved 10  $\mu\text{m}$  emission in Herbig Ae/Be stars», vol. 418, n° 1, doi :10.1051/0004-6361:20034331, p. 177–184, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20034331>. 19, 51
- BOERSMA, C. 2009, «Infrared emission features : Probing the interstellar PAH population and circumstellar environment of Herbig Ae/Be stars», OCLC : 463604178. 16, III
- BOERSMA, C., C. W. BAUSCHLICHER, A. RICCA, A. L. MATTIODA, J. CAMI, E. PEETERS, F. S. DE ARMAS, G. P. SABORIDO, D. M. HUDGINS et L. J. ALLAMANDOLA. 2014, «THE NASA AMES PAH IR SPECTROSCOPIC DATABASE VERSION 2.00 : UPDATED CONTENT, WEB SITE, AND ON(OFF)LINE TOOLS», vol. 211, n° 1, doi :10.1088/0067-0049/211/1/8, p. 8, ISSN 0067-0049. URL <https://doi.org/10.1088%2F0067-0049%2F211%2F1%2F8>. 40
- BOHLIN, R. C., B. D. SAVAGE et J. F. DRAKE. 1978, «A survey of interstellar H I from L-alpha absorption measurements. II», vol. 224, doi :10.1086/156357, p. 132–142. 21
- BOHREN, C. F. et D. R. HUFFMAN. 1998, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley and Sons : New York – Chichester – Brisbane – Toronto – Singapore. 37
- BOOGERT, A. C. A., P. A. GERAKINES et D. C. B. WHITTET. 2015, «Observations of the icy universe.», vol. 53, p. 541–581. 13, 28, IV
- BORKOWSKI, K. J. et E. DWEK. 1995, «The Fragmentation and Vaporization of Dust in Grain-Grain Collisions», vol. 454, doi :10.1086/176480, p. 254. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1995ApJ...454..254B/abstract>. 40
- BOUTÉRAON, T., E. HABART, N. YSARD, A. P. JONES, E. DARTOIS et T. PINO. 2019, «Carbonaceous nano-dust emission in proto-planetary discs : The aliphatic-aromatic components», vol. 623, doi :10.1051/0004-6361/201834016, p. A135. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019A%26A...623A.135B/abstract>. 31, 32, IX
- BOUWMAN, J., A. DE KOTER, C. DOMINIK et L. B. F. M. WATERS. 2003, «The origin of crystalline silicates in the Herbig Be star HD 100546 and in comet Hale-Bopp», vol. 401, n° 2, doi :10.1051/0004-6361:20030043, p. 577–592, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361:20030043>. 44
- BOUWMAN, J., G. MEEUS, A. DE KOTER, S. HONY, C. DOMINIK et L. B. F. M. WATERS. 2001, «Processing of silicate dust grains in Herbig Ae/Be systems», vol. 375, doi :10.1051/0004-6361:20010878, p. 950–962, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2001A%26A...375..950B>. 19

- BRAUER, R., S. REISSL, E. PANTIN et E. HABART. «The radiative transfer code POLARIS - Capabilities and how to use them», , p. 41. [51](#)
- BRAUER, R., S. WOLF, S. REISSL et F. OBER. 2017, «Magnetic fields in molecular clouds : Limitations of the analysis of Zeeman observations», vol. 601, doi :10.1051/0004-6361/201629001, p. A90, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2017/05/aa29001-16/aa29001-16.html>. [51](#)
- VAN BREEMEN, J. M., M. MIN, J. E. CHIAR, L. B. F. M. WATERS, F. KEMPER, A. C. A. BOOGERT, J. CAMI, L. DECIN, C. KNEZ, G. C. SLOAN et A. G. G. M. TIELENS. 2011, «The 9.7 and 18  $\mu\text{m}$  silicate absorption profiles towards diffuse and molecular cloud lines-of-sight», vol. 526, doi :10.1051/0004-6361/200811142, p. A152. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2011A%26A...526A.152V/abstract>. [13](#)
- BRON, E., J. LE BOURLLOT et F. LE PETIT. 2014, «Surface chemistry in the interstellar medium. II. H<sub>2</sub> formation on dust with random temperature fluctuations», vol. 569, doi :10.1051/0004-6361/201322101, p. A100. [51](#)
- BROOKE, T. Y., A. T. TOKUNAGA et S. E. STROM. 1993, «Dust emission features in 3-micron spectra of Herbig Ae/Be stars», vol. 106, p. 656–671. [51](#)
- BROWN, J. M., G. A. BLAKE, C. P. DULLEMOND, B. MERÍN, J. C. AUGEREAU, A. C. A. BOOGERT, N. J. E. II, V. C. GEERS, F. LAHUIS, J. E. KESSLER-SILACCI, K. M. PONTOPPIDAN et E. F. VAN DISHOECK. 2007, «Cold Disks :SpitzerSpectroscopy of Disks around Young Stars with Large Gaps», vol. 664, n° 2, doi :10.1086/520808, p. L107–L110, ISSN 1538-4357. URL <https://doi.org/10.1086%2F520808>. [44](#)
- CAMI, J., J. BERNARD-SALAS, E. PEETERS et S. E. MALEK. 2010, «Detection of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> in a Young Planetary Nebula», vol. 329, n° 5996, doi :10.1126/science.1192035, p. 1180–1182, ISSN 0036-8075, 1095-9203. URL <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.1192035>. [17](#)
- CAMPBELL, E. K., M. HOLZ, D. GERLICH et J. P. MAIER. 2015, «Laboratory confirmation of C<sub>60</sub>+ as the carrier of two diffuse interstellar bands», vol. 523, n° 7560, doi :10.1038/nature14566, p. 322–323, ISSN 0028-0836. URL <http://www.nature.com/nature/journal/v523/n7560/abs/nature14566.html>. [13](#)
- CARDELLI, J. A., G. C. CLAYTON et J. S. MATHIS. 1989, «The Relationship between Infrared, Optical, and Ultraviolet Extinction», vol. 345, doi :10.1086/167900, p. 245, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1989ApJ...345..245C/abstract>. [9](#)
- CASTELLANOS, P., O. BERNÉ, Y. SHEFFER, M. G. WOLFIRE et A. G. G. M. TIELENS. 2014, «C<sub>60</sub> in Photodissociation Regions», vol. 794, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/794/1/83, p. 83. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2014ApJ...794...83C/abstract>. [17](#)
- CAZAUX, S. et A. G. G. M. TIELENS. 2004, «H<sub>2</sub> Formation on Grain Surfaces», vol. 604, n° 1, doi :10.1086/381775, p. 222. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2004ApJ...604..222C/abstract>. [51](#)
- CECCHI-PESTELLINI, C., A. CACCIOLA, M. A. IATÌ, R. SAIJA, F. BORGHESE, P. DENTI, A. GIUSTO et D. A. WILLIAMS. 2010, «Stratified dust grains in the interstellar medium - II. Time-dependent interstellar extinction», vol. 408, doi :10.1111/j.1365-2966.2010.17138.x, p. 535–541. [40](#)
- CECCHI-PESTELLINI, C., S. CASU, G. MULAS et A. ZONCA. 2014, «Observational Evidence of Dust Evolution in Galactic Extinction Curves», vol. 785, doi :10.1088/0004-637X/785/1/41, p. 41. [40](#)

- CHAMPION, J., O. BERNÉ, S. VICENTE, I. KAMP, F. L. PETIT, A. GUSDORF, C. JOBLIN et J. R. GOICOECHEA. 2017, «Herschel survey and modelling of externally-illuminated photoevaporating protoplanetary disks», vol. 604, doi :10.1051/0004-6361/201629404, p. A69, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2017/08/aa29404-16/aa29404-16.html>. 48
- CHANG, H.-C., K. CHEN et S. KWOK. 2006, «Nanodiamond as a Possible Carrier of Extended Red Emission», vol. 639, n° 2, doi :10.1086/502677, p. L63, ISSN 1538-4357. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/502677/meta>. 22
- CHEN, C. H., B. A. SARGENT, C. BOHAC, K. H. KIM, E. LEIBENSPERGER, M. JURA, J. NAJITA, W. J. FORREST, D. M. WATSON et G. C. SLOAN. 2006, «Spitzer IRS spectroscopy of IRAS-discovered debris disks», vol. 166, n° 1, p. 351. 51
- CHIANG, E. I. et P. GOLDREICH. 1997, «Spectral Energy Distributions of T Tauri Stars with Passive Circumstellar Disks», vol. 490, n° 1, doi :10.1086/304869, p. 368–376, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1086%2F304869>. 45
- CHIAR, J. E. et A. G. G. M. TIELENS. 2006, «Pixie Dust : The Silicate Features in the Diffuse Interstellar Medium», vol. 637, n° 2, doi :10.1086/498406, p. 774. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2006ApJ...637..774C/abstract>. 11
- CHIAR, J. E., A. G. G. M. TIELENS, D. C. B. WHITTET, W. A. SCHUTTE, A. C. A. BOOGERT, D. LUTZ, E. F. VAN DISHOCK et M. P. BERNSTEIN. 2000, «The Composition and Distribution of Dust along the Line of Sight toward the Galactic Center», vol. 537, doi :10.1086/309047, p. 749–762. 11
- CHURCHWELL, E., M. FELLI, D. O. S. WOOD et M. MASSI. 1987, «Solar System-sized Condensations in the Orion Nebula», vol. 321, doi :10.1086/165648, p. 516, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1987ApJ...321..516C/abstract>. 46
- CIESLA, F. J. 2009, «Two-dimensional transport of solids in viscous protoplanetary disks», vol. 200, n° 2, doi :10.1016/j.icarus.2008.12.009, p. 655–671, ISSN 0019-1035. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103508004272>. 49
- CIEZA, L. A., S. CASASSUS, J. TOBIN, S. P. BOS, J. P. WILLIAMS, S. PEREZ, Z. ZHU, C. CACERES, H. CANOVAS, M. M. DUNHAM, A. HALES, J. L. PRIETO, D. A. PRINCIPE, M. R. SCHREIBER, D. RUIZ-RODRIGUEZ et A. ZURLO. 2016, «Imaging the water snow-line during a protostellar outburst», vol. 535, n° 7611, doi :10.1038/nature18612, p. 258–261, ISSN 1476-4687. URL <https://www.nature.com/articles/nature18612>. 47
- COHEN, M. 1975, «Infrared Observations of Young Stars—VIA 2- TO 4-Micron Search for Molecular Features», vol. 173, n° 2, doi :10.1093/mnras/173.2.279, p. 279–293, ISSN 0035-8711. URL <http://academic.oup.com/mnras/article/173/2/279/2896078>. 13
- COHEN, M., C. M. ANDERSON, A. COWLEY, G. V. COYNE, W. FAWLEY, T. R. GULL, E. A. HARLAN, G. H. HERBIG, F. HOLDEN, H. S. HUDSON, R. O. JAKOUBEK, H. M. JOHNSON, K. M. MERRILL, F. H. SCHIFFER, B. T. SOIFER et B. ZUCKERMAN. 1975, «The peculiar object HD 44179 ("The red rectangle").», vol. 196, doi :10.1086/153403, p. 179. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1975ApJ...196..179C/abstract>. 21
- COMPIÈGNE, M., L. VERSTRAETE, A. JONES, J.-P. BERNARD, F. BOULANGER, N. FLAGEY, J. LE BOURLOT, D. PARADIS et N. YSARD. 2011, «The global dust SED : Tracing the nature and evolution of dust with DustEM», vol. 525, doi :10.1051/0004-6361/201015292, p. A103, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2011A%26A...525A.103C>. 15, 21, 39, III
- CRINKLAW, G., S. R. FEDERMAN et C. L. JOSEPH. 1994, «The depletion of calcium in the interstellar medium», vol. 424, doi :10.1086/173927, p. 748–753. 39

- CURRIE, T., R. CLOUTIER, S. BRITAIN, C. GRADY, A. BURROWS, T. MUTO, S. J. KENYON et M. J. KUCHNER. 2015, «Resolving the HD 100546 Protoplanetary System with the Gemini Planet Imager : Evidence for Multiple Forming, Accreting Planets», vol. 814, doi :10.1088/2041-8205/814/2/L27, p. L27, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2015ApJ...814L..27C.48>
- DARBON, S., A. ZAVAGNO, J.-M. PERRIN, C. SAVINE, V. DUCCI et J.-P. SIVAN. 2000, «Extended red emission and unidentified infrared bands in the galactic compact H II region Sh 152», vol. 364, p. 723. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2000A%26A...364..723D/abstract.21>
- DARTOIS, E. 2011, «Observations of Interstellar Carbon Compounds», vol. 46, doi :10.1051/eas/1146039, p. 381–391, ISSN 1633-4760, 1638-1963. URL <http://dx.doi.org/10.1051/eas/1146039.26,IV>
- DARTOIS, E., G. M. M. CARO, D. DEBOFFLE, G. MONTAGNAC et L. D' HENDECOURT. 2005, «Ultra-violet photoproduction of ISM dust - Laboratory characterisation and astrophysical relevance», vol. 432, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20042094, p. 895–908, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20042094.17>
- DARTOIS, E., C. ENGRAND, R. BRUNETTO, J. DUPRAT, T. PINO, E. QUIRICO, L. REMUSAT, N. BARDIN, G. BRIANI, S. MOSTEFAOUI et al.. 2014, «Interstellar and interplanetary carbonaceous solids in the laboratory», vol. 48, n° 6, p. 511–518. URL [https://www.jstage.jst.go.jp/article/geochemj/48/6/48\\_2.0330/\\_article/-char/ja/.17](https://www.jstage.jst.go.jp/article/geochemj/48/6/48_2.0330/_article/-char/ja/.17)
- DARTOIS, E., T. R. GEBALLE, T. PINO, A.-T. CAO, A. JONES, D. DEBOFFLE, V. GUERRINI, P. BRÉCHIGNAC et L. D' HENDECOURT. 2007, «IRAS 08572+3915 : Constraining the aromatic versus aliphatic content of interstellar HACs», vol. 463, doi :10.1051/0004-6361:20066572, p. 635–640. 11
- DARTOIS, E., O. MARCO, G. M. MUÑOZ-CARO, K. BROOKS, D. DEBOFFLE et L. D' HENDECOURT. 2004a, «Organic matter in Seyfert 2 nuclei : Comparison with our Galactic center lines of sight», vol. 423, n° 2, doi :10.1051/0004-6361:20047067, p. 549–558, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2004/32/aa0067-04/aa0067-04.html.11,31>
- DARTOIS, E. et G. M. MUÑOZ-CARO. 2007, «Carbonaceous dust grains in luminous infrared galaxies. Spitzer/IRS reveals a-C :H as an abundant and ubiquitous ISM component», vol. 476, doi :10.1051/0004-6361:20077798, p. 1235–1242. 11
- DARTOIS, E., G. M. MUÑOZ CARO, D. DEBOFFLE et L. D' HENDECOURT. 2004b, «Diffuse interstellar medium organic polymers», vol. 423, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:200400032, p. L33–L36, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361:200400032.31>
- DEMYK, K. 2011, «Interstellar dust within the life cycle of the interstellar medium», vol. 18, doi :10.1051/epjconf/20111803001, p. 03 001. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2011EPJWC...1803001D/abstract.33,IV>
- DEMYK, K., C. MENY, X.-H. LU, G. PAPTAEODOROU, M. J. TOPLIS, H. LEROUX, C. DEPECKER, J.-B. BRUBACH, P. ROY, C. NAYRAL, W.-S. OJO, F. DELPECH, D. PARADIS et V. GROMOV. 2017, «Low temperature MIR to submillimeter mass absorption coefficient of interstellar dust analogues. I. Mg-rich glassy silicates», vol. 600, doi :10.1051/0004-6361/201629711, p. A123. 9
- DESERT, F.-X., F. BOULANGER et J. L. PUGET. 1990, «Interstellar dust models for extinction and emission», vol. 237, p. 215–236, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1990A%26A...237..215D.39>
- D' HENDECOURT, L. B., A. LEGER, G. OLOFSSON et W. SCHMIDT. 1986, «The Red Rectangle : A possible case of visible luminescence from polycyclic aromatic hydrocarbons.», vol. 170,

- p. 91, ISSN 0004-6361. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1986A%26A...170...91D/abstract>. 21
- VAN DIEDENHOVEN, B., E. PEETERS, C. V. KERCKHOVEN, S. HONY, D. M. HUDGINS, L. J. ALLAMANDOLA et A. G. G. M. TIELENS. 2004, «The Profiles of the 3–12 Micron Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Features», vol. 611, n° 2, doi :10.1086/422404, p. 928–939, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1086%2F422404>. 17, 18, III
- DISCHLER, B., A. BUBENZER et P. KOIDL. 1983a, «Bonding in hard carbon coatings studied by optical spectroscopy», vol. 48, p. 105–108. 17
- DISCHLER, B., A. BUBENZER et P. KOIDL. 1983b, «Hard carbon coatings with low optical absorption», vol. 42, doi :10.1063/1.94056, p. 636–638. 17
- DOUCET, C. 2006, «Disques protoplanétaires autour d'étoiles de masse intermédiaire : Apport de l'imagerie en infrarouge moyen», URL <http://www.theses.fr/2006PA112299>. 52
- DRAINE, B. 2003, «Interstellar Dust Grains», vol. 41, n° 1, doi :10.1146/annurev.astro.41.011802.094840, p. 241–289, ISSN 0066-4146, 1545-4282. URL <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev.astro.41.011802.094840>. 14, III
- DRAINE, B. T. 1988, «The Discrete-Dipole Approximation and Its Application to Interstellar Graphite Grains», vol. 333, doi :10.1086/166795, p. 848, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1988ApJ...333..848D/abstract>. 37
- DRAINE, B. T. 2006, «On the Submillimeter Opacity of Protoplanetary Disks», vol. 636, n° 2, doi :10.1086/498130, p. 1114. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2006ApJ...636.1114D/abstract>. 49
- DRAINE, B. T. 2010, *Physics of the Interstellar and Intergalactic Medium*, Princeton University Press, ISBN 978-1-4008-3908-7. 5, 6, 7, 8, 14, 33, 34, IV, IX
- DRAINE, B. T. et P. J. FLATAU. 1994, «Discrete-dipole approximation for scattering calculations», vol. 11, n° 4, doi :10.1364/JOSAA.11.001491, p. 1491, ISSN 0740-3232. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1994JOSAA..11.1491D/abstract>. 37
- DRAINE, B. T. et A. A. FRAISSE. 2009, «Polarized Far-Infrared and Submillimeter Emission from Interstellar Dust», vol. 696, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/696/1/1, p. 1. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2009ApJ...696....1D/abstract>. 22
- DRAINE, B. T. et H. M. LEE. 1984, «Optical properties of interstellar graphite and silicate grains», vol. 285, p. 89–108. URL <http://adsabs.harvard.edu/full/1984apj...285...89d>. 10, 39
- DRAINE, B. T. et A. LI. 2001, «Infrared emission from interstellar dust. I. Stochastic heating of small grains», vol. 551, n° 2, p. 807. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/320227/meta>. 17, 39
- DRAINE, B. T. et A. LI. 2007, «Infrared Emission from Interstellar Dust. IV. The Silicate-Graphite-PAH Model in the Post-Spitzer Era», vol. 657, doi :10.1086/511055, p. 810–837, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2007ApJ...657..810D>. 21
- DUBRULLE, B., G. MORFILL et M. STERZIK. 1995, «The dust subdisk in the protoplanetary nebula.», vol. 114, n° 2, doi :10.1006/icar.1995.1058, p. 237, ISSN 0019-1035. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/#abs/1995Icar..114..237D/abstract>. 49
- DULEY, W. W. 1987, «Interstellar extinction and the composition of dust grains», vol. 229, doi :10.1093/mnras/229.2.203, p. 203–212. 39



- DULEY, W. W. 2009, «Excitation of Extended Red Emission and Near-Infrared Continuum Radiation in the Interstellar Medium», vol. 705, doi :10.1088/0004-637X/705/1/446, p. 446–453. 21
- DULEY, W. W., A. P. JONES et D. A. WILLIAMS. 1989, «Hydrogenated amorphous carbon-coated silicate particles as a source of interstellar extinction», vol. 236, doi :10.1093/mnras/236.4.709, p. 709–725. 39
- DULEY, W. W. et D. A. WILLIAMS. 1981, «The infrared spectrum of interstellar dust : Surface functional groups on carbon», vol. 196, n° 2, doi :10.1093/mnras/196.2.269, p. 269–274, ISSN 0035-8711. URL <http://academic.oup.com/mnras/article/196/2/269/963498>. 15
- DULEY, W. W. et D. A. WILLIAMS. 1983, «A 3.4  $\mu\text{m}$  absorption band in amorphous carbon : Implications for interstellar dust», vol. 205, n° 1, doi :10.1093/mnras/205.1.67P, p. 67P–70P, ISSN 0035-8711, 1365-2966. URL <http://mnras.oxfordjournals.org/content/205/1/67P>. 11, 15
- DULLEMOND, C. P. 2002, «The 2-D structure of dusty disks around Herbig Ae/Be stars. I. Models with grey opacities», vol. 395, doi :10.1051/0004-6361:20021300, p. 853. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2002A%26A...395..853D/abstract>. 45
- DULLEMOND, C. P. et C. DOMINIK. 2005, «Dust coagulation in protoplanetary disks : A rapid depletion of small grains», vol. 434, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20042080, p. 971–986, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2005/18/aa2080/aa2080.html>. 49
- DUTREY, A., S. GUILLOTEAU, G. DUVERT, L. PRATO, M. SIMON, K. SCHUSTER et F. MENARD. 1996, «Dust and gas distribution around T Tauri stars in Taurus-Auriga. I. Interferometric 2.7mm continuum and  $\text{J}=1-0$  observations», vol. 309, p. 493–504, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1996A%26A...309..493D>. 46
- DUTREY, A., S. GUILLOTEAU et M. SIMON. 1994, «Images of the GG Tauri rotating ring», vol. 286, p. 149. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1994A%26A...286..149D/abstract>. 45, 48
- DUVERT, G., A. DUTREY, S. GUILLOTEAU, F. MENARD, K. SCHUSTER, L. PRATO et M. SIMON. 1998, «Disks in the UY Aurigae binary», vol. 332, p. 867. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1998A%26A...332..867D/abstract>. 48
- DWEK, E., R. G. ARENDT, P. BOUCHET, D. N. BURROWS, P. CHALLIS, I. J. DANZIGER, J. M. D. BUIZER, R. D. GEHRZ, R. P. KIRSHNER, R. MCCRAY, S. PARK, E. F. POLOMSKI et C. E. WOODWARD. 2008, «Infrared and X-Ray Evidence for Circumstellar Grain Destruction by the Blast Wave of Supernova 1987A», vol. 676, n° 2, doi :10.1086/529038, p. 1029, ISSN 0004-637X. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/529038/meta>. 40
- DWEK, E., R. G. ARENDT, D. J. FIXSEN, T. J. SODROSKI, N. ODEGARD, J. L. WEILAND, W. T. REACH, M. G. HAUSER, T. KELSALL, S. H. MOSELEY, R. F. SILVERBERG, R. A. SHAFER, J. BALLESTER, D. BAZELL et R. ISAACMAN. 1997, «Detection and Characterization of Cold Interstellar Dust and Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission, from COBE Observations», vol. 475, doi :10.1086/303568, p. 565. 39
- EHRENFREUND, P. et S. B. CHARNLEY. 2000, «Organic molecules in the interstellar medium, comets, and meteorites : A voyage from dark clouds to the early Earth», vol. 38, n° 1, p. 427–483. URL <http://annualreviews.org/doi/abs/10.1146/annurev.astro.38.1.427>. 25, IV
- ELYAJOURI, M. et R. LALLEMENT. 2019, «Updated extraction of the APOGEE 1.5273  $\mu\text{m}$  diffuse interstellar band : A Planck view on the carrier depletion in dense cores», URL <http://arxiv.org/abs/1903.11707>. 13

- ELYAJOURI, M., R. LALLEMENT, N. L. J. COX, J. CAMI, M. A. CORDINER, J. V. SMOKER, A. FARHANG, P. J. SARRE et H. LINNARTZ. 2018, «The EDIBLES survey. III. C<sub>2</sub>-DIBs and their profiles», vol. 616, doi :10.1051/0004-6361/201833105, p. A143. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2018A%26A...616A.143E/abstract>. 13
- ESPAILLAT, C., N. CALVET, P. DTEXTQUOTESINGLEALESSIO, J. HERNÁNDEZ, C. QI, L. HARTMANN, E. FURLAN et D. M. WATSON. 2007, «On the Diversity of the Taurus Transitional Disks : UX Tauri A and LkCa 15», vol. 670, n° 2, doi :10.1086/524360, p. L135–L138, ISSN 1538-4357. URL <https://doi.org/10.1086%2F524360>. 44
- ESPAILLAT, C., J. MUZEROLLE, J. NAJITA, S. ANDREWS, Z. ZHU, N. CALVET, S. KRAUS, J. HASHIMOTO, A. KRAUS et P. D’ALESSIO. 2014, «An observational perspective of transitional disks», URL <http://arxiv.org/abs/1402.7103>. 44, 45, V
- FALCO, E. E., C. D. IMPEY, C. S. KOCHANÉK, J. LEHÁR, B. A. MCLEOD, H.-W. RIX, C. R. KEETON, J. A. MUÑOZ et C. Y. PENG. 1999, «Dust and Extinction Curves in Galaxies with  $z > 0$  : The Interstellar Medium of Gravitational Lens Galaxies», vol. 523, n° 2, doi :10.1086/307758, p. 617, ISSN 0004-637X. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/307758/meta>. 9
- FAN, H., D. E. WELTY, D. G. YORK, P. SONNENTRUCKER, J. A. DAHLSTROM, N. BASKES, S. D. FRIEDMAN, L. M. HOBBS, Z. JIANG, B. RACHFORD, T. P. SNOW, R. SHERMAN et G. ZHAO. 2017, «The Behavior of Selected Diffuse Interstellar Bands with Molecular Fraction in Diffuse Atomic and Molecular Clouds», vol. 850, n° 2, doi :10.3847/1538-4357/aa9480, p. 194, ISSN 1538-4357. URL <http://arxiv.org/abs/1710.06547>. 13
- FANCIULLO, L., V. GUILLET, G. ANIANO, A. P. JONES, N. YSARD, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, F. BOULANGER et M. KÖHLER. 2015, «Dust models post-Planck : Constraining the far-infrared opacity of dust in the diffuse interstellar medium», vol. 580, doi :10.1051/0004-6361/201525677, p. A136, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2015/08/aa25677-15/aa25677-15.html>. 21
- FANCIULLO, L., V. GUILLET, F. BOULANGER et A. P. JONES. 2017, «Interplay of dust alignment, grain growth, and magnetic fields in polarization : Lessons from the emission-to-extinction ratio», vol. 602, doi :10.1051/0004-6361/201630373, p. A7, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2017/06/aa30373-16/aa30373-16.html>. 22
- FEDELE, D., M. CARNEY, M. R. HOGERHEIJDE, C. WALSH, A. MIOTELLO, P. KLAASSEN, S. BRUDERER, T. HENNING et E. F. VAN DISHOECK. 2017, «ALMA unveils rings and gaps in the protoplanetary system HD 169142 : Signatures of two giant protoplanets», vol. 600, doi :10.1051/0004-6361/201629860, p. A72, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2017A%26A...600A..72F>. 48, V
- FITZPATRICK, E. L. et D. MASSA. 1986, «An Analysis of the Shapes of Ultraviolet Extinction Curves. I. The 2175 Angstrom Bump», vol. 307, doi :10.1086/164415, p. 286, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1986ApJ...307..286F/abstract>. 10
- FITZPATRICK, E. L. et D. MASSA. 2007, «An Analysis of the Shapes of Interstellar Extinction Curves. V. The IR-through-UV Curve Morphology», vol. 663, doi :10.1086/518158, p. 320–341, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2007ApJ...663..320F>. 9, 10, III
- FLAGEY, N., F. BOULANGER, L. VERSTRAETE, M. A. M. DESCHÊNES, A. N. CRESPO et W. T. REACH. 2006, «Spitzer/IRAC and ISOCAM/CVF insights on the origin of the near to mid-IR Galactic diffuse emission», vol. 453, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20053949, p. 969–978, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2006/27/aa3949-05/aa3949-05.html>. 17

- FOGERTY, S., W. FORREST, D. M. WATSON, B. A. SARGENT et I. KOCH. 2016, «Silicate Composition of the Interstellar Medium», vol. 830, n° 2, doi :10.3847/0004-637X/830/2/71, p. 71. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2016ApJ...830...71F/abstract>. 11
- FORREST, W. J., B. SARGENT, E. FURLAN, P. D'ALESSIO, N. CALVET, L. HARTMANN, K. I. UCHIDA, J. D. GREEN, D. M. WATSON, C. H. CHEN, F. KEMPER, L. D. KELLER, G. C. SLOAN, T. L. HERTER, B. R. BRANDL, J. R. HOUCK, D. J. BARRY, P. HALL, P. W. MORRIS, J. NAJITA et P. C. MYERS. 2004, «Mid-infrared Spectroscopy of Disks around Classical T Tauri Stars», vol. 154, n° 1, doi : 10.1086/423138, p. 443, ISSN 0067-0049. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/423138/meta>. 19
- FOSTER, J. B. et A. A. GOODMAN. 2006, «Cloudshine : New Light on Dark Clouds», vol. 636, doi : 10.1086/500131, p. L105–L108. 21
- FURLAN, E., L. HARTMANN, N. CALVET, P. D'ALESSIO, R. FRANCO-HERNÁNDEZ, W. J. FORREST, D. M. WATSON, K. I. UCHIDA, B. SARGENT, J. D. GREEN, L. D. KELLER et T. L. HERTER. 2006, «A Survey and Analysis of Spitzer Infrared Spectrograph Spectra of T Tauri Stars in Taurus», vol. 165, doi :10.1086/505468, p. 568–605, ISSN 0067-0049. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2006ApJS...165..568F>. 51
- FURTON, D. G. et A. N. WITT. 1990, «The Spatial Distribution of Extended Red Emission in the Planetary Nebula NGC 7027», vol. 364, doi :10.1086/185871, p. L45, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1990ApJ...364L..45F/abstract>. 21
- GALLIANO, F., M. GALAMETZ et A. P. JONES. 2018, «The Interstellar Dust Properties of Nearby Galaxies», vol. 56, n° 1, doi :10.1146/annurev-astro-081817-051900, p. 673–713. URL <https://doi.org/10.1146/annurev-astro-081817-051900>. 13, 23, IV
- GALLIANO, F., S. HONY, J.-P. BERNARD, C. BOT, S. C. MADDEN, J. ROMAN-DUVAL, M. GALAMETZ, A. LI, M. MEIXNER, C. W. ENGELBRACHT, V. LEBOUTEILLER, K. MISSELT, E. MONTIEL, P. PANUZZO, W. T. REACH et R. SKIBBA. 2011, «Non-standard grain properties, dark gas reservoir, and extended submillimeter excess, probed by Herschel in the Large Magellanic Cloud», vol. 536, doi :10.1051/0004-6361/201117952, p. A88. 39
- GARCÍA-HERNÁNDEZ, D. A., A. MANCHADO, P. GARCÍA-LARIO, L. STANGHELLINI, E. VILLAVER, R. A. SHAW, R. SZCZERBA et J. V. PEREA-CALDERÓN. 2010, «Formation of Fullerenes in H-containing Planetary Nebulae», vol. 724, doi :10.1088/2041-8205/724/1/L39, p. L39–L43. 17
- GARUFI, A., M. BENISTY, T. STOLKER, H. AVENHAUS, J. DE BOER, A. POHL, S. P. QUANZ, C. DOMINIK, C. GINSKI, C. THALMANN, R. VAN BOEKEL, A. BOCCALETTI, T. HENNING et S. CONSORTIUM. 2017, «Three years of SPHERE : The latest view of the morphology and evolution of protoplanetary discs», doi :10.18727/0722-6691/5036. URL <http://arxiv.org/abs/1710.02795>. 46
- GARUFI, A., S. P. QUANZ, H. M. SCHMID, G. D. MULDER, H. AVENHAUS, A. BOCCALETTI, C. GINSKI, M. LANGLOIS, T. STOLKER, J.-C. AUGEREAU, M. BENISTY, B. LOPEZ, C. DOMINIK, R. GRATTON, T. HENNING, M. JANSON, F. MÉNARD, M. R. MEYER, C. PINTE, E. SISSA, A. VIGAN, A. ZURLO, A. BAZZON, E. BUENZLI, M. BONNEFOY, W. BRANDNER, G. CHAUVIN, A. CHEETHAM, M. CUDEL, S. DESIDERA, M. FELDT, R. GALICHER, M. KASPER, A.-M. LAGRANGE, J. LANNIER, A. L. MAIRE, D. MESA, D. MOUILLET, S. PERETTI, C. PERROT, G. SALTER et F. WILDI. 2016, «The SPHERE view of the planet-forming disk around HD 100546», vol. 588, doi :10.1051/0004-6361/201527940, p. A8, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201527940>. 48
- GAVILAN, L., K. C. LE, T. PINO, I. ALATA, A. GIULIANI et E. DARTOIS. 2017, «Polyaromatic disordered carbon grains as carriers of the UV bump : Far-UV to mid-IR spectroscopy of laboratory analogs», vol. 607, doi :10.1051/0004-6361/201730712, p. A73. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2017A%26A...607A..73G/abstract>. 10

- GEBALLE, T. R., K. S. NOLL, D. C. B. WHITTET et L. B. F. M. WATERS. 1989, «Unusual Features of the 1–4 Micron Spectrum of HR 4049», vol. 340, doi :10.1086/185431, p. L29, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1989ApJ...340L..29G/abstract>. 17
- GEBALLE, T. R., A. G. G. M. TIELENS, S. KWOK et B. J. HRIVNAK. 1992, «Unusual 3 micron emission features in three proto-planetary nebulae», vol. 387, doi :10.1086/186312, p. L89–L91, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1992ApJ...387L..89G>. 15
- GEERS, V. C., J.-C. AUGEREAU, K. M. PONTOPPIDAN, C. P. DULLEMOND, R. VISSER, J. E. KESSLER-SILACCI, N. J. EVANS, II, E. F. VAN DISHOCK, G. A. BLAKE, A. C. A. BOOGERT, J. M. BROWN, F. LAHUIS et B. MERÍN. 2006, «C2D Spitzer-IRS spectra of disks around T Tauri stars. II. PAH emission features», vol. 459, doi :10.1051/0004-6361:20064830, p. 545–556, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2006A%26A...459..545G>. 51
- GEERS, V. C., E. F. VAN DISHOCK, R. VISSER, K. M. PONTOPPIDAN, J.-C. AUGEREAU, E. HABART et A. M. LAGRANGE. 2007a, «Spatially extended polycyclic aromatic hydrocarbons in circumstellar disks around T Tauri and Herbig Ae stars», vol. 476, doi :10.1051/0004-6361:20078466, p. 279–289, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2007A%26A...476..279G>. 51
- GEERS, V. C., K. M. PONTOPPIDAN, E. F. VAN DISHOCK, C. P. DULLEMOND, J.-C. AUGEREAU, B. MERÍN, I. OLIVEIRA et J. W. PEL. 2007b, «Spatial separation of small and large grains in the transitional disk around the young star IRS 48», vol. 469, doi :10.1051/0004-6361:20077524, p. L35–L38, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2007A%26A...469L..35G>. 51, 52, 53, V
- GIRART, J. M., M. FERNÁNDEZ-LÓPEZ, Z.-Y. LI, H. YANG, R. ESTALELLA, G. ANGLADA, N. ÁÑEZ LÓPEZ, G. BUSQUET, C. CARRASCO-GONZÁLEZ, S. CUIEL, R. GALVAN-MADRID, J. F. GÓMEZ, I. DE GREGORIO-MONSALVO, I. JIMÉNEZ-SERRA, R. KRASNOPOLSKY, J. MARTÍ, M. OSORIO, M. PADOVANI, R. RAO, L. F. RODRÍGUEZ et J. M. TORRELLES. 2018, «Resolving the Polarized Dust Emission of the Disk around the Massive Star Powering the HH 80-81 Radio Jet», vol. 856, n° 2, doi :10.3847/2041-8213/aab76b, p. L27. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2018ApJ...856L..27G/abstract>. 49
- GODARD, M. 2011, «Les carbones amorphes hydrogènes : Observations, synthèse et caractérisation en laboratoire de poussières interstellaires», URL <http://www.theses.fr/2011PA112134>. 11, 22, 26, 38, 44, IV, V
- GODARD, M., T. R. GEBALLE, E. DARTOIS et G. M. MUÑOZ CARO. 2012, «The deep 3.4  $\mu\text{m}$  interstellar absorption feature toward the IRAS 18511+0146 cluster», vol. 537, doi :10.1051/0004-6361/201117197, p. A27. 11
- GOLDBERG, L., E. A. MULLER et L. H. ALLER. 1960, «The Abundances of the Elements in the Solar Atmosphere.», vol. 5, doi :10.1086/190053, p. 1, ISSN 0067-0049. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1960ApJS....5....1G>. 39
- GONZALEZ, J.-F., G. LAIBE et S. T. MADDISON. 2017, «Self-induced dust traps : Overcoming planet formation barriers», doi :10.1093/mnras/stx016, p. stx016, ISSN 0035-8711, 1365-2966. URL <https://academic.oup.com/mnras/article-lookup/doi/10.1093/mnras/stx016>. 49
- GORTI, U., C. P. DULLEMOND et D. HOLLENBACH. 2009, «TIME EVOLUTION OF VISCOUS CIRCUMSTELLAR DISKS DUE TO PHOTOEVAPORATION BY FAR-ULTRAVIOLET, EXTREME-ULTRAVIOLET, AND X-RAY RADIATION FROM THE CENTRAL STAR», vol. 705, n° 2, doi : 10.1088/0004-637X/705/2/1237, p. 1237–1251, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088/0004-637x/705/2/1237>. 48

- GORTI, U., R. LISEAU, Z. SÁNDOR et C. CLARKE. 2016, «Disk Dispersal : Theoretical Understanding and Observational Constraints», vol. 205, n° 1-4, doi :10.1007/s11214-015-0228-x, p. 125. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2016SSRv..205..125G/abstract>. 48
- GOTO, M., T. HENNING, A. KOUCHI, H. TAKAMI, Y. HAYANO, T. USUDA, N. TAKATO, H. TERADA, S. OYA, C. JÄGER et al. 2009, «SPATIALLY RESOLVED 3  $\mu\text{m}$  SPECTROSCOPY OF ELIAS 1 : ORIGIN OF DIAMONDS IN PROTOPLANETARY DISKS Based on data collected at Subaru Telescope, which is operated by the National Astronomical Observatory of Japan.», vol. 693, n° 1, p. 610. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0004-637X/693/1/610/meta>. 17, 19, 51
- GRASDALEN, G. L., S. E. STROM, K. M. STROM, R. W. CAPPS, D. THOMPSON et M. CASTELAZ. 1984, «High spatial resolution IR observations of young stellar objects : A possible disk surrounding HL Tauri.», vol. 283, doi :10.1086/184333, p. L57, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1984ApJ...283L..57G/abstract>. 44
- GREENBERG, J. M. 1986, «The role of grains in molecular chemical evolution», vol. 128, doi :10.1007/BF00656015, p. 17–29. 39
- GREENBERG, J. M. et A. LI. 1996, «What are the true astronomical silicates?», vol. 309, p. 258–266. 39
- GRENIER, I. A., J.-M. CASANDJIAN et R. TERRIER. 2005, «Unveiling Extensive Clouds of Dark Gas in the Solar Neighborhood», vol. 307, n° 5713, doi :10.1126/science.1106924, p. 1292–1295, ISSN 0036-8075, 1095-9203. URL <https://science.sciencemag.org/content/307/5713/1292>. 5
- GUILLET, V., L. FANCIULLO, L. VERSTRAETE, F. BOULANGER, A. P. JONES, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, N. YSARD, F. LEVRIER et M. ALVES. 2017, «Dust models compatible with Planck intensity and polarization data in translucent lines of sight», URL <http://arxiv.org/abs/1710.04598>. 22
- GUILLOIS, O., G. LEDOUX et C. REYNAUD. 1999, «Diamond Infrared Emission Bands in Circumstellar Media», vol. 521, n° 2, doi :10.1086/312199, p. L133, ISSN 1538-4357. URL <http://stacks.iop.org/1538-4357/521/i=2/a=L133>. 17, 19, 51, III
- GUILLOTEAU, S., A. DUTREY, V. PIÉTU et Y. BOEHLER. 2011, «A dual-frequency sub-arcsecond study of proto-planetary disks at mm wavelengths : First evidence for radial variations of the dust properties», vol. 529, doi :10.1051/0004-6361/201015209, p. A105. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2011A%26A...529A.105G/abstract>. 49
- GUNDLACH, B. et J. BLUM. 2015, «The Stickiness of Micrometer-sized Water-ice Particles», vol. 798, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/798/1/34, p. 34. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2015ApJ...798...34G/abstract>. 49
- HABART, E., F. BOULANGER, L. VERSTRAETE, C. M. WALMSLEY et G. PINEAU DES FORÊTS. 2004a, «Some empirical estimates of the H<sub>2</sub> formation rate in photon-dominated regions», vol. 414, doi :10.1051/0004-6361:20031659, p. 531–544, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2004A%26A...414..531H>. 51
- HABART, E., A. NATTA et E. KRÜGEL. 2004b, «PAHs in circumstellar disks around Herbig Ae/Be stars», vol. 427, n° 1, doi :10.1051/0004-6361:20035916, p. 179–192, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361:20035916>. 51
- HABART, E., A. NATTA, L. TESTI et M. CARBILLET. 2006, «Spatially resolved PAH emission in the inner disks of Herbig Ae/Be stars», vol. 449, n° 3, p. 1067–1075. URL <http://www.aanda.org/articles/aa/ps/2006/15/aa2994-05.ps.gz>. 51

- HABART, E., L. TESTI, A. NATTA et M. CARBILLET. 2004c, «Diamonds in HD 97048 : A closer look», vol. 614, n° 2, p. L129. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/425867/meta>. 17
- HASHIMOTO, J., M. TAMURA, T. MUTO, T. KUDO, M. FUKAGAWA, T. FUKUE, M. GOTO, C. A. GRADY, T. HENNING, K. HODAPP, M. HONDA, S. INUTSUKA, E. KOKUBO, G. KNAPP, M. W. McELWAIN, M. MOMOSE, N. OHASHI, Y. K. OKAMOTO, M. TAKAMI, E. L. TURNER, J. WISNIEWSKI, M. JANSON, L. ABE, W. BRANDNER, J. CARSON, S. EGNER, M. FELDT, T. GOLOTA, O. GUYON, Y. HAYANO, M. HAYASHI, S. HAYASHI, M. ISHII, R. KANDORI, N. KUSAKABE, T. MATSUO, S. MAYAMA, S. MIYAMA, J.-I. MORINO, A. MORO-MARTIN, T. NISHIMURA, T.-S. PYO, H. SUTO, R. SUZUKI, N. TAKATO, H. TERADA, C. THALMANN, D. TOMONO, M. WATANABE, T. YAMADA, H. TAKAMI et T. USUDA. 2011, «DIRECT IMAGING OF FINE STRUCTURES IN GIANT PLANET-FORMING REGIONS OF THE PROTOPLANETARY DISK AROUND AB AURIGAE», vol. 729, n° 2, doi :10.1088/2041-8205/729/2/L17, p. L17, ISSN 2041-8205. URL <https://doi.org/10.1088%2F2041-8205%2F729%2F2%2F17>. 46
- HAWORTH, T. J., J. D. ILEE, D. H. FORGAN, S. FACCHINI, D. J. PRICE, D. M. BONEBERG, R. A. BOOTH, C. J. CLARKE, J.-F. GONZALEZ, M. A. HUTCHISON et al.. 2016, «Grand challenges in protoplanetary disc modelling», URL <https://arxiv.org/abs/1608.01315>. 50
- HEGER, M. L. 1922, «Further study of the sodium lines in class B stars», vol. 10, n° 337, doi : 10.5479/ADS/bib/1922LicOB.10.141H, p. 141. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1922LicOB..10..141H/abstract>. 13
- HENNING, T. 2010, «Cosmic Silicates», vol. 48, n° 1, doi :10.1146/annurev-astro-081309-130815, p. 21–46, ISSN 0066-4146, 1545-4282. URL <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-astro-081309-130815>. 13, 27, IV
- HENSLEY, B., P. ASHTON, F. BOULANGER, D. T. CHUSS, S. E. CLARK, J. DELABROUILLE, B. T. DRAINE, H. K. ERIKSEN, L. FISSEL, R. FLAUGER, A. FRAISSE, V. GUILLET, A. KOGUT, C. R. LAWRENCE, A. LAZARIAN, D. LENZ, G. NOVAK, M. REMAZEILLES, I. STEPHENS, I. WEHUS et A. ZONCA. 2019, «Determining the Composition of Interstellar Dust with Far-Infrared Polarimetry», vol. 51, n° 3, p. 224. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019BAAS...51c.224H/abstract>. 22
- HERBIG, G. H. 1995, «The Diffuse Interstellar Bands», vol. 33, doi :10.1146/annurev.aa.33.090195.000315, p. 19–74. 13
- HERBST, E. et E. F. VAN DISHOECK. 2009, «Complex Organic Interstellar Molecules», vol. 47, n° 1, doi :10.1146/annurev-astro-082708-101654, p. 427–480. URL <https://doi.org/10.1146/annurev-astro-082708-101654>. 27
- HERNÁNDEZ, J., N. CALVET, C. BRICEÑO, L. HARTMANN, A. K. VIVAS, J. MUZEROLLE, J. DOWNES, L. ALLEN et R. GUTERMUTH. 2007, «Spitzer Observations of the Orion OB1 Association : Disk Census in the Low-Mass Stars», vol. 671, n° 2, doi :10.1086/522882, p. 1784, ISSN 0004-637X. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/522882/meta>. 48
- HOBBS, L. M., D. G. YORK, J. A. THORBURN, T. P. SNOW, M. BISHOP, S. D. FRIEDMAN, B. J. McCALL, T. OKA, B. RACHFORD, P. SONNENTRUCKER et D. E. WELTY. 2009, «Studies of the Diffuse Interstellar Bands. III. HD 183143», vol. 705, doi :10.1088/0004-637X/705/1/32, p. 32–45. 13
- HOYLE, F. et N. C. WICKRAMASINGHE. 1962, «On graphite particles as interstellar grains», vol. 124, doi :10.1093/mnras/124.5.417, p. 417. 39
- HOYLE, F. et N. C. WICKRAMASINGHE. 1969, «Interstellar Grains», vol. 223, doi :10.1038/223459a0, p. 459–462. 39

- HRIVNAK, B. J., T. R. GEBALLE et S. KWOK. 2007, «A Study of the 3.3 and 3.4  $\mu\text{m}$  Emission Features in Proto-Planetary Nebulae», vol. 662, n° 2, doi :10.1086/518109, p. 1059, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/662/i=2/a=1059>. 15
- VAN DE HULST, H. C. 1943, «De vorming van vaste deeltjes in het interstellair gas. 6. De aangroeiing van de rookdeeltjes», vol. 10, p. 251–255. 39
- HUMBERT, B., J.-Y. MEVELLEC, J. GRAUSEM, M. DOSSOT et C. CARTERET. 2012, «Spectrométrie d'absorption dans l'infrarouge», URL <https://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/mesures-analyses-th1/spectrometries-42390210/spectrometrie-d-absorption-dans-l-infrarouge-p2850/>. 29, IV
- HÖFNER, S. et H. OLOFSSON. 2018, «Mass loss of stars on the asymptotic giant branch», vol. 26, n° 1, doi :10.1007/s00159-017-0106-5, p. 1, ISSN 1432-0754. URL <https://doi.org/10.1007/s00159-017-0106-5>. 40
- IATÌ, M. A., R. SAIJA, F. BORGHESE, P. DENTI, C. CECCHI-PESTELLINI et D. A. WILLIAMS. 2008, «Stratified dust grains in the interstellar medium - I. An accurate computational method for calculating their optical properties», vol. 384, doi :10.1111/j.1365-2966.2007.12673.x, p. 591–598. 40
- ISELLA, A., J. M. CARPENTER et A. I. SARGENT. 2010, «INVESTIGATING PLANET FORMATION IN CIRCUMSTELLAR DISKS : CARMA OBSERVATIONS OF RY Tau AND DG Tau», vol. 714, n° 2, doi :10.1088/0004-637X/714/2/1746, p. 1746–1761, ISSN 0004-637X, 1538-4357. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/714/i=2/a=1746?key=crossref.0cdf28d59a68387d2b06adf214dc857b>. 49
- ISELLA, A., G. GUIDI, L. TESTI, S. LIU, H. LI, S. LI, E. WEAVER, Y. BOEHLER, J. M. CARPENTER, I. DE GREGORIO-MONSALVO, C. F. MANARA, A. NATTA, L. M. PÉREZ, L. RICCI, A. SARGENT, M. TAZZARI et N. TURNER. 2016, «Ringed Structures of the HD 163296 Protoplanetary Disk Revealed by ALMA», vol. 117, n° 25, doi :10.1103/PhysRevLett.117.251101, p. 251 101. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2016PhRvL.117y1101I/abstract>. 45, 47
- ISELLA, A., J. HUANG, S. M. ANDREWS, C. P. DULLEMOND, T. BIRNSTIEL, S. ZHANG, Z. ZHU, V. V. GUZMÁN, L. M. PÉREZ, X.-N. BAI, M. BENISTY, J. M. CARPENTER, L. RICCI et D. J. WILNER. 2018, «The Disk Substructures at High Angular Resolution Project (DSHARP). IX. A High-definition Study of the HD 163296 Planet-forming Disk», vol. 869, n° 2, doi :10.3847/2041-8213/aaf747, p. L49, ISSN 2041-8205. URL <https://doi.org/10.3847/2F2041-8213%2Faaf747>. 48
- JENKINS, E. B. 2009, «A Unified Representation of Gas-Phase Element Depletions in the Interstellar Medium», vol. 700, doi :10.1088/0004-637X/700/2/1299, p. 1299–1348. 27, 39
- JOBLIN, C., P. BOISSEL, A. LEGER, L. D'HENDECOURT et D. DEFURNEAU. 1995, «Infrared spectroscopy of gas-phase PAH molecules. II. Role of the temperature.», vol. 299, p. 835. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1995A%26A...299..835J/abstract>. 17
- JOBLIN, C., L. D'HENDECOURT, A. LEGER et D. DEFURNEAU. 1994a, «Infrared spectroscopy of gas-phase PAH molecules. I : Role of the physical environment», vol. 281, p. 923–936. 31
- JOBLIN, C., L. D'HENDECOURT, A. LEGER et D. DEFURNEAU. 1994b, «Infrared spectroscopy of gas-phase PAH molecules. I. Role of the physical environment.», vol. 281, p. 923, ISSN 0004-6361. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1994A%26A...281..923J/abstract>. 17
- JOBLIN, C., A. LEGER et P. MARTIN. 1992, «Contribution of polycyclic aromatic hydrocarbon molecules to the interstellar extinction curve», vol. 393, doi :10.1086/186456, p. L79–L82, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1992ApJ...393L..79J>. 10

- JOHANSEN, A., J. S. OISHI, M.-M. M. LOW, H. KLAHR, T. HENNING et A. YOUNDIN. 2007, «Rapid planetesimal formation in turbulent circumstellar disks», vol. 448, n° 7157, doi :10.1038/nature06086, p. 1022–1025, ISSN 1476-4687. URL <https://www.nature.com/articles/nature06086>. 49
- JONES. 2012a, «Variations on a theme – the evolution of hydrocarbon solids - I. Compositional and spectral modelling—the eRCN and DG models», vol. 540, p. A1. URL [http://www.aanda.org/articles/aa/full\\_html/2012/04/aa17623-11/aa17623-11.html](http://www.aanda.org/articles/aa/full_html/2012/04/aa17623-11/aa17623-11.html). 38
- JONES. 2012b, «Variations on a theme – the evolution of hydrocarbon solids - II. Optical property modelling – the optEC(s) model», vol. 540, doi :10.1051/0004-6361/201117624, p. A2, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201117624>. 38
- JONES, A. P. 1988, «Modelling interstellar extinction. I - Porous grains», vol. 234, doi :10.1093/mnras/234.2.209, p. 209–218. 39
- JONES, A. P. 1990, «Carbon atom clusters in random covalent networks : PAHs as an integral component of interstellar HAC», vol. 247, p. 305–310, ISSN 0035-8711. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1990MNRAS.247..305J>. 10, 26, 40
- JONES, A. P. 2000, «Depletion patterns and dust evolution in the interstellar medium», vol. 105, doi :10.1029/1999JA900264, p. 10 257–10 268. 27, 39
- JONES, A. P. 2004, «Dust Destruction Processes», vol. 309, p. 347. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2004ASPC..309..347J/abstract>. 44, V
- JONES, A. P. 2016a, «Dust evolution, a global view : II. Top-down branching, nanoparticle fragmentation and the mystery of the diffuse interstellar band carriers», vol. 3, n° 12, doi :10.1098/rsos.160223, p. 160 223, ISSN 2054-5703. URL <http://rsos.royalsocietypublishing.org/content/3/12/160223>. 10
- JONES, A. P. 2016b, «Dust evolution, a global view : III | Open Science», URL <http://rsos.royalsocietypublishing.org/content/3/12/160224>. 27
- JONES, A. P. 2018, «Dust evolution, a global view : IV. Tying up a few loose ends», URL <http://arxiv.org/abs/1804.10628>. 17
- JONES, A. P., W. W. DULEY et D. A. WILLIAMS. 1990, «The structure and evolution of hydrogenated amorphous carbon grains and mantles in the interstellar medium», vol. 31, p. 567–582. 39
- JONES, A. P., L. FANCIULLO, M. KÖHLER, L. VERSTRAETE, V. GUILLET, M. BOCCHIO et N. YSARD. 2013, «The evolution of amorphous hydrocarbons in the ISM : Dust modelling from a new vantage point», vol. 558, doi :10.1051/0004-6361/201321686, p. A62, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201321686>. 32, 41, 42, V, IX
- JONES, A. P. et E. HABART. 2015, «H<sub>2</sub> formation via the UV photo-processing of a-C :H nanoparticles», vol. 581, doi :10.1051/0004-6361/201526487, p. A92, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2015/09/aa26487-15/aa26487-15.html>. 51
- JONES, A. P., L. B. D' HENDECOURT, S.-Y. SHEU, H.-C. CHANG, C.-L. CHENG et H. G. M. HILL. 2004, «Surface C–H stretching features on meteoritic nanodiamonds», vol. 416, n° 1, doi :10.1051/0004-6361:20031708, p. 235–241, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361:20031708>. 19
- JONES, A. P., M. KOEHLER, N. YSARD, M. BOCCHIO et L. VERSTRAETE. 2017, «The global dust modelling framework THEMIS (The Heterogeneous dust Evolution Model for Interstellar Solids)», URL <http://arxiv.org/abs/1703.00775>. 32, 38, 40, 41, IX



- JONES, A. P., M. KÖHLER, N. YSARD, E. DARTOIS, M. GODARD et L. GAVILAN. 2016, «Mantle formation, coagulation, and the origin of cloud/core shine - I. Modelling dust scattering and absorption in the infrared», vol. 588, doi :10.1051/0004-6361/201527488, p. A43, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201527488>. 11, III
- JONES, A. P. et J. A. NUTH. 2011, «Dust destruction in the ISM : A re-evaluation of dust lifetimes», vol. 530, doi :10.1051/0004-6361/201014440, p. A44. 41
- JONES, A. P., A. TIELENS et D. J. HOLLENBACH. 1996, «Grain shattering in shocks : The interstellar grain size distribution», vol. 469, p. 740. URL <http://articles.adsabs.harvard.edu/full/gif/1996ApJ...469..740J/0000740.000.html>. 40, 41
- JONES, A. P., A. G. G. M. TIELENS, D. J. HOLLENBACH et C. F. MCKEE. 1994, «Grain destruction in shocks in the interstellar medium», vol. 433, doi :10.1086/174689, p. 797–810. 41
- JONES, A. P., D. A. WILLIAMS et W. W. DULEY. 1987, «Interstellar extinction correlations», vol. 229, doi :10.1093/mnras/229.2.213, p. 213–221. 39
- JONES, A. P. et N. YSARD. 2019, «The essential elements of dust evolution - A viable solution to the interstellar oxygen depletion problem?», vol. 627, doi :10.1051/0004-6361/201935532, p. A38, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2019/07/aa35532-19/aa35532-19.html>. 41
- JONES, R. V. et L. SPITZER. 1967, «Magnetic Alignment of Interstellar Grains», vol. 147, doi :10.1086/149086, p. 943. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1967ApJ...147..943J/abstract>. 27
- JUVELA, M., V. GUILLET, T. LIU, I. RISTORCELLI, V.-M. PELKONEN, D. ALINA, L. BRONFMAN, D. J. EDEN, K. T. KIM, P. M. KOCH, W. KWON, C. W. LEE, J. MALINEN, E. MICELOTTA, J. MONTILLAUD, M. G. RAWLINGS, P. SANHUEZA, A. SOAM, A. TRAFICANTE, N. YSARD et C.-P. ZHANG. 2018, «Dust spectrum and polarisation at 850  $\mu$ m in the massive IRDC G035.39-00.33», vol. 620, doi :10.1051/0004-6361/201833245, p. A26. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2018A%26A...620A..26J/abstract>. 22
- JUVELA, M., I. RISTORCELLI, V.-M. PELKONEN, D. J. MARSHALL, L. A. MONTIER, J.-P. BERNARD, R. PALADINI, T. LUNTTILA, A. ABERGEL, P. ANDRÉ, C. DICKINSON, X. DUPAC, J. MALINEN, P. MARTIN, P. MCGEHEE, L. PAGANI, N. YSARD et A. ZAVAGNO. 2011, «Galactic cold cores - II. Herschel study of the extended dust emission around the first Planck detections», vol. 527, doi :10.1051/0004-6361/201015916, p. A111, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2011/03/aa15916-10/aa15916-10.html>. 21
- KARL E. HAISCH, J., E. A. LADA et C. J. LADA. 2001, «Disk Frequencies and Lifetimes in Young Clusters», vol. 553, n° 2, doi :10.1086/320685, p. L153–L156, ISSN 1538-4357. URL <https://doi.org/10.1086%2F320685>. 48
- KATAOKA, A., T. MUTO, M. MOMOSE, T. TSUKAGOSHI, M. FUKAGAWA, H. SHIBAI, T. HANAWA et K. MURAKAWA. 2015, «Expected Polarization at Sub-mm Wavelengths from Lopsided Protoplanetary Disks», vol. 499, p. 279. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2015ASPC..499..279K/abstract>. 49
- KATAOKA, A., T. TSUKAGOSHI, M. MOMOSE, H. NAGAI, T. MUTO, C. P. DULLEMOND, A. POHL, M. FUKAGAWA, H. SHIBAI, T. HANAWA et K. MURAKAWA. 2016, «SUBMILLIMETER POLARIZATION OBSERVATION OF THE PROTOPLANETARY DISK AROUND HD 142527», vol. 831, n° 2, doi :10.3847/2041-8205/831/2/L12, p. L12, ISSN 2041-8205. URL <https://doi.org/10.3847%2F2041-8205%2F831%2F2%2FL12>. 47, 49

- KELLER, C. et H.-P. GAIL. 2004, «Radial mixing in protoplanetary accretion disks - VI. Mixing by large-scale radial flows», vol. 415, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20034629, p. 1177–1185, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2004/09/aah4397/aah4397.html>. 49
- KELLER, L. D., G. C. SLOAN, W. J. FORREST, S. AYALA, P. D’ALESSIO, S. SHAH, N. CALVET, J. NAJITA, A. LI, L. HARTMANN et al.. 2008, «PAH emission from Herbig Ae/Be stars», vol. 684, n° 1, p. 411. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/589818/meta>. 51
- KEMPER, F., W. J. VRIEND et A. G. G. M. TIELENS. 2004, «The Absence of Crystalline Silicates in the Diffuse Interstellar Medium», vol. 609, n° 2, doi :10.1086/421339, p. 826. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2004ApJ...609..826K/abstract>. 13
- KENYON, S. J. et L. W. HARTMANN. 1987, «Spectral energy distributions of T Tauri stars-Disk flaring and limits on accretion», vol. 323, p. 714–733. URL <http://adsabs.harvard.edu/full/1987ApJ...323..714K>. 45
- KLARMANN, L., M. BENISTY, M. MIN, C. DOMINIK, J.-P. BERGER, L. B. F. M. WATERS, J. KLUSKA, B. LAZAREFF et J.-B. LE BOUQUIN. 2017, «Interferometric evidence for quantum heated particles in the inner region of protoplanetary disks around Herbig stars», vol. 599, doi : 10.1051/0004-6361/201628820, p. A80, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2017A%26A...599A..80K>. 51, 53
- KLUSKA, J., S. KRAUS, C. L. DAVIES, T. HARRIES, M. WILLSON, J. D. MONNIER, A. AARNIO, F. BARON, R. MILLAN-GABET et T. TEN BRUMMELAAR. 2018, «A Multi-instrument and Multi-wavelength High Angular Resolution Study of MWC 614 : Quantum Heated Particles Inside the Disk Cavity», vol. 855, n° 1, p. 44. 53
- KOERNER, D. W., A. I. SARGENT et S. V. W. BECKWITH. 1993, «A Rotating Gaseous Disk around the T Tauri Star GM Aurigae», vol. 106, n° 1, doi :10.1006/icar.1993.1154, p. 2–10, ISSN 0019-1035. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103583711541>. 48
- KRAUS, S., M. J. IRELAND, M. L. SITKO, J. D. MONNIER, N. CALVET, C. ESPAILLAT, C. A. GRADY, T. J. HARRIES, S. F. HÖNIG, R. W. RUSSELL, J. R. SWEARINGEN, C. WERREN et D. J. WILNER. 2013, «Resolving the Gap and AU-scale Asymmetries in the Pre-transitional Disk of V1247 Orionis», vol. 768, doi :10.1088/0004-637X/768/1/80, p. 80, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2013ApJ...768...80K>. 51, 52
- KWOK, S., K. VOLK et B. J. HRIVNAK. 1999, «Chemical evolution of carbonaceous materials in the last stages of stellar evolution», vol. 350, p. L35–L38, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1999A%26A...350L..35K>. 15
- KWOK, S. et Y. ZHANG. 2011, «Mixed aromatic–aliphatic organic nanoparticles as carriers of unidentified infrared emission features», vol. 479, n° 7371, doi :10.1038/nature10542, p. 80–83, ISSN 0028-0836, 1476-4687. URL <http://www.nature.com/doifinder/10.1038/nature10542>. 17
- KÖHLER, M., A. JONES et N. YSARD. 2014, «A hidden reservoir of Fe/FeS in interstellar silicates?», vol. 565, doi :10.1051/0004-6361/201423985, p. L9, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2014/05/aa23985-14/aa23985-14.html>. 27, 40
- KÖHLER, M., N. YSARD et A. P. JONES. 2015, «Dust evolution in the transition towards the denser ISM : Impact on dust temperature, opacity, and spectral index», vol. 579, doi :10.1051/0004-6361/201525646, p. A15, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201525646>. 11, 41, III

- LADA, C. J. 1999, «The Formation of Low Mass Stars : An Observational Overview», vol. 540, p. 143. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/1999ASIC...540...143L/abstract>. 42
- LADA, C. J. et B. A. WILKING. 1984, «The nature of the embedded population in the Rho Ophiuchi dark cloud - Mid-infrared observations», vol. 287, doi :10.1086/162719, p. 610–621, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1984ApJ...287...610L>. 42
- LAGAGE, P.-O., C. DOUCET, E. PANTIN, E. HABART, G. DUCHÊNE, F. MÉNARD, C. PINTE, S. CHARNOZ et J.-W. PEL. 2006, «Anatomy of a Flaring Proto-Planetary Disk Around a Young Intermediate-Mass Star», vol. 314, doi :10.1126/science.1131436, p. 621–623, ISSN 0036-8075. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2006Sci...314...621L>. 51, 52, 53, V
- LAIBE, G., J.-F. GONZALEZ et S. T. MADDISON. 2012, «Revisiting the “radial-drift barrier” of planet formation and its relevance in observed protoplanetary discs», vol. 537, doi :10.1051/0004-6361/201015349, p. A61, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2012/01/aa15349-10/aa15349-10.html>. 49
- LANGER, W. D., T. VELUSAMY, J. L. PINEDA, K. WILLACY et P. F. GOLDSMITH. 2014, «A Herschel [C ii] Galactic plane survey-II. CO-dark H<sub>2</sub> in clouds», vol. 561, p. A122. 5
- LEDoux, G., M. EHBRECHT, O. GUILLOIS, F. HUISKEN, B. KOHN, M. A. LAGUNA, I. NENNER, V. PAILLARD, R. PAPOULAR, D. PORTERAT et C. REYNAUD. 1998, «Silicon as a candidate carrier for ERE», vol. 333, p. L39–L42. 22
- LEGER, A. et J. L. PUGET. 1984, «Identification of the ‘unidentified’ IR emission features of interstellar dust?», vol. 137, p. L5–L8, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1984A%26A...137L...5L>. 15, 39, 40
- LENZ, D., B. S. HENSLEY et O. DORÉ. 2017, «A New, Large-scale Map of Interstellar Reddening Derived from H i Emission», vol. 846, n° 1, doi :10.3847/1538-4357/aa84af, p. 38, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.3847%2F1538-4357%2Faa84af>. 21
- LI, A. et B. T. DRAINE. 2001, «Infrared emission from interstellar dust. II. The diffuse interstellar medium», vol. 554, n° 2, p. 778. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/323147/meta>. 13, 39
- LI, A. et B. T. DRAINE. 2002, «Infrared Emission from Interstellar Dust. III. The Small Magellanic Cloud», vol. 576, doi :10.1086/341796, p. 762–772. 39
- LI, A. et J. M. GREENBERG. 1997, «A unified model of interstellar dust.», vol. 323, p. 566–584, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1997A%26A...323...566L>. 40
- LISZT, H. 2014, « $E(B - V)$ ,  $N(\text{HI})$ , AND  $N(\text{H}_2)$ », vol. 783, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/783/1/17, p. 17, ISSN 0004-637X, 1538-4357. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/783/i=1/a=17?key=crossref.9003f6662235bd01a23370534d3ba34a>. 21
- LOREK, S., P. LACERDA et J. BLUM. 2018, «Local growth of dust- and ice-mixed aggregates as cometary building blocks in the solar nebula», vol. 611, doi :10.1051/0004-6361/201630175, p. A18, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201630175>. 49
- MAASKANT, K. M., M. HONDA, L. B. F. M. WATERS, A. G. G. M. TIELENS, C. DOMINIK, M. MIN, A. VERHOEFF, G. MEEUS et M. E. VAN DEN ANCKER. 2013, «Identifying gaps in flaring Herbig Ae/Be disks using spatially resolved mid-infrared imaging. Are all group I disks transitional?», vol. 555, doi :10.1051/0004-6361/201321300, p. A64, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2013A%26A...555A...64M>. 51

- MAASKANT, K. M., M. MIN, L. B. F. M. WATERS et A. G. G. M. TIELENS. 2014, «Polycyclic aromatic hydrocarbon ionization as a tracer of gas flows through protoplanetary disk gaps», vol. 563, doi : 10.1051/0004-6361/201323137, p. A78, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201323137>. 51
- MALLOCI, G., C. JOBLIN et G. MULAS. 2007, «On-line database of the spectral properties of polycyclic aromatic hydrocarbons», vol. 332, doi :10.1016/j.chemphys.2007.01.001, p. 353–359, ISSN 0301-0104. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2007CP....332..353M>. 17
- MANARA, C. F., A. MORBIDELLI et T. GUILLOT. 2018, «Why do protoplanetary disks appear not massive enough to form the known exoplanet population?», vol. 618, doi :10.1051/0004-6361/201834076, p. L3. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2018A%26A...618L...3M/abstract>. 46
- MARSH, K. A. et M. J. MAHONEY. 1992, «Evidence for Unseen Companions around T Tauri Stars», vol. 395, doi :10.1086/186501, p. L115, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1992ApJ...395L.115M/abstract>. 44
- MARSH, K. A. et M. J. MAHONEY. 1993, «Do the Spectral Energy Distributions of GK Tauri and HK Tauri Indicate the Presence of Planetary Companions?», vol. 405, doi :10.1086/186768, p. L71, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1993ApJ...405L..71M/abstract>. 44
- MATHIS, J. S. 1990, «Interstellar dust and extinction», vol. 28, doi :10.1146/annurev.aa.28.090190.000345, p. 37–70. 9
- MATHIS, J. S., W. RUMPL et K. H. NORDSIECK. 1977, «The size distribution of interstellar grains», vol. 217, doi :10.1086/155591, p. 425–433, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1977ApJ...217..425M>. 39
- MATHIS, J. S. et G. WHIFFEN. 1989, «Composite interstellar grains», vol. 341, doi :10.1086/167538, p. 808–822. 39
- MAURY, A. J., P. ANDRÉ, L. TESTI, S. MARET, A. BELLOCHE, P. HENNEBELLE, S. CABRIT, C. COSELLA, F. GUETH, L. PODIO, S. ANDERL, A. BACMANN, S. BONTEMPS, M. GAUDEL, B. LADJELATE, C. LEFÈVRE, B. TABONE et B. LEFLOCH. 2019, «Characterizing young protostellar disks with the CALYPSO IRAM-PdBI survey : Large Class 0 disks are rare», vol. 621, doi :10.1051/0004-6361/201833537, p. A76, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2019/01/aa33537-18/aa33537-18.html>. 46
- MCCAUGHREAN, M. J. 1997/ed, «Direct Imaging of Circumstellar Disks in the Orion Nebula», vol. 163, doi :10.1017/S0252921100043177, p. 546–548, ISSN 0252-9211. URL <https://www.cambridge.org/core/journals/international-astronomical-union-colloquium/article/direct-imaging-of-circumstellar-disks-in-the-orion-nebula/DD3F96F13AEC91BE06BCEAE3348035B7>. 46
- MCCLURE, M. 2009, «Observational 5-20  $\mu$ m Interstellar Extinction Curves Toward Star-Forming Regions Derived From Spitzer IRS Spectra», vol. 693, n° 2, doi :10.1088/0004-637X/693/2/L81, p. L81. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2009ApJ...693L..81M/abstract>. 9
- MCCLURE, M. K., E. A. BERGIN, L. I. CLEEVES, E. F. VAN DISHOCK, G. A. BLAKE, N. J. E. II, J. D. GREEN, T. HENNING, K. I. ÖBERG, K. M. PONTOPPIDAN et C. SALYK. 2016, «MASS MEASUREMENTS IN PROTOPLANETARY DISKS FROM HYDROGEN DEUTERIDE», vol. 831, n° 2, doi :10.3847/0004-637X/831/2/167, p. 167, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.3847/2F0004-637x%2F831%2F2%2F167>. 46

- McFADZEAN, A. D., D. C. B. WHITTET, A. J. LONGMORE, M. F. BODE et A. J. ADAMSON. 1989, «Infrared studies of dust and gas towards the Galactic Centre : 3–5  $\mu\text{m}$  spectroscopy», vol. 241, n° 4, doi:10.1093/mnras/241.4.873, p. 873–882, ISSN 0035-8711. URL <http://academic.oup.com/mnras/article/241/4/873/991760>. 11
- McKEE, C. F. et E. C. OSTRIKER. 2007, «Theory of Star Formation», vol. 45, n° 1, doi :10.1146/annurev.astro.45.051806.110602, p. 565–687. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.astro.45.051806.110602>. 42
- McKEE, C. F. et J. P. OSTRIKER. 1977, «A theory of the interstellar medium : Three components regulated by supernova explosions in an inhomogeneous substrate.», vol. 218, doi :10.1086/155667, p. 148. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1977ApJ...218..148M/abstract>. 5
- MEEUS, G., B. MONTESINOS, I. MENDIGUTÍA, I. KAMP, W. F. THI, C. EIROA, C. A. GRADY, G. MATHEWS, G. SANDELL, C. MARTIN-ZAÏDI, S. BRITAIN, W. R. F. DENT, C. HOWARD, F. MÉNARD, C. PINTE, A. ROBERGE, B. VANDENBUSSCHE et J. P. WILLIAMS. 2012, «Observations of Herbig Ae/Be stars with Herschel/PACS. The atomic and molecular contents of their protoplanetary discs», vol. 544, doi :10.1051/0004-6361/201219225, p. A78, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2012A%26A...544A..78M>. 51
- MEEUS, G., C. SALYK, S. BRUDERER, D. FEDELE, K. MAASKANT, N. J. EVANS, E. F. VAN DISHOECK, B. MONTESINOS, G. HERCZEG, J. BOUWMAN, J. D. GREEN, C. DOMINIK, T. HENNING et S. VICENTE. 2013, «DIGIT survey of far-infrared lines from protoplanetary discs. II. CO», vol. 559, doi :10.1051/0004-6361/201321122, p. A84, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2013A%26A...559A..84M>. 51
- MEEUS, G., L. B. F. M. WATERS, J. BOUWMAN, M. E. VAN DEN ANCKER, C. WAELKENS et K. MALFAIT. 2001, «ISO spectroscopy of circumstellar dust in 14 Herbig Ae/Be systems : Towards an understanding of dust processing», vol. 365, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20000144, p. 476–490, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20000144>. 51
- MENNELLA, V. 2008, «Activation of the 3.47  $\mu\text{m}$  Band by H Atom Irradiation of Carbon Grains Covered with a Water Ice Layer at 12 K», vol. 682, n° 2, doi :10.1086/591051, p. L101, ISSN 1538-4357. URL <http://stacks.iop.org/1538-4357/682/i=2/a=L101>. 31
- MICELOTTA, E. R., A. P. JONES et A. G. G. M. TIELENS. 2010, «Polycyclic aromatic hydrocarbon processing in interstellar shocks», vol. 510, doi :10.1051/0004-6361/200911682, p. A36, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2010A%26A...510A..36M>. 40
- MICELOTTA, E. R., M. MATSUURA et A. SARANGI. 2018, «Dust in Supernovae and Supernova Remnants II : Processing and Survival», vol. 214, n° 2, doi :10.1007/s11214-018-0484-7, p. 53, ISSN 1572-9672. URL <https://doi.org/10.1007/s11214-018-0484-7>. 40
- MOLSTER, F. et C. KEMPER. 2005, «Crystalline Silicates», vol. 119, n° 1-4, doi :10.1007/s11214-005-8066-x, p. 3. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2005SSRv...119...3M/abstract>. 20, 27, IV
- MOLSTER, F., L. WATERS et F. KEMPER. 2010, «The Mineralogy of Interstellar and Circumstellar Dust in Galaxies», dans *Astromineralogy*, édité par T. Henning, Lecture Notes in Physics, Springer Berlin Heidelberg, ISBN 978-3-642-13259-9, p. 143–201, doi :10.1007/978-3-642-13259-9\_3. URL [https://doi.org/10.1007/978-3-642-13259-9\\_3](https://doi.org/10.1007/978-3-642-13259-9_3). 13
- MONNIER, J. D., T. J. HARRIES, A. AARNIO, F. C. ADAMS, S. ANDREWS, N. CALVET, C. ESPAILLAT, L. HARTMANN, S. HINKLEY, S. KRAUS, M. MCCLURE, R. OPPENHEIMER, M. PERRIN et D. WILNER. 2017, «Polarized Disk Emission from Herbig Ae/Be Stars Observed Using Gemini Planet Imager : HD 144432, HD 150193, HD 163296, and HD 169142», vol. 838, n° 1, doi :10.3847/

- 1538-4357/aa6248, p. 20, ISSN 1538-4357. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/838/i=1/a=20?key=crossref.bb3ac5cdf270cf544c2f8e68cb1f8e5>. 46, 48, V
- MORDASINI, C., Y. ALIBERT, W. BENZ, H. KLAHR et T. HENNING. 2012, «Extrasolar planet population synthesis - IV. Correlations with disk metallicity, mass, and lifetime», vol. 541, doi : 10.1051/0004-6361/201117350, p. A97, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2012/05/aa17350-11/aa17350-11.html>. 46
- JOURDAIN DE MUIZON, M., L. B. D' HENDECOURT et T. R. GEBALLE. 1990, «Three micron spectroscopy of IRAS sources-Observed and laboratory signatures of PAHs», vol. 235, p. 367. 15, 16, III
- MURRAY, C. E., J. E. G. PEEK, M.-Y. LEE et S. STANIMIROVIĆ. 2018, «Optically Thick H i Does Not Dominate Dark Gas in the Local ISM», vol. 862, n° 2, doi :10.3847/1538-4357/aaccfe, p. 131, ISSN 0004-637X. URL <https://iopscience.iop.org/article/10.3847/1538-4357/aaccfe/meta>. 6, 21
- MUTSCHKE, H. et P. MOHR. 2019, «Far-infrared continuum absorption of forsterite and enstatite at low temperatures», vol. 625, doi :10.1051/0004-6361/201834805, p. A61. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019A%26A...625A...61M/abstract>. 9
- NATTA, A. et L. TESTI. 2004, «Grain Growth in Circumstellar Disks», vol. 323, p. 279. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2004ASPC...323..279N/abstract>. 49
- NATTA, A., L. TESTI, N. CALVET, T. HENNING, R. WATERS et D. WILNER. 2007, «Dust in Protoplanetary Disks : Properties and Evolution», , p. 767 URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2007prpl.conf..767N/abstract>. 49
- NGUYEN, H., J. R. DAWSON, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, N. TANG, D. LI, C. HEILES, C. E. MURRAY, S. STANIMIROVIĆ, S. J. GIBSON, N. M. MCCLURE-GRIFFITHS, T. TROLAND, L. BRONFMAN et R. FINGER. 2018, «Dust-Gas Scaling Relations and OH Abundance in the Galactic ISM», vol. 862, n° 1, doi :10.3847/1538-4357/aac82b, p. 49, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.3847%2F1538-4357%2Faac82b>. 21
- OKUZUMI, S., H. TANAKA, H. KOBAYASHI et K. WADA. 2012, «RAPID COAGULATION OF POROUS DUST AGGREGATES OUTSIDE THE SNOW LINE : A PATHWAY TO SUCCESSFUL ICY PLANETESIMAL FORMATION», vol. 752, n° 2, doi :10.1088/0004-637X/752/2/106, p. 106, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088%2F0004-637x%2F752%2F2%2F106>. 49
- OORT, J. H. et H. C. VAN DE HULST. 1946, «Gas and smoke in interstellar space», vol. 10, p. 187. 39
- OSORIO, M., G. ANGLADA, C. CARRASCO-GONZÁLEZ, J. M. TORRELLES, E. MACÍAS, L. F. RODRÍGUEZ, J. F. GÓMEZ, P. D'ALESSIO, N. CALVET, E. NAGEL et al. 2014, «Imaging the Inner and Outer Gaps of the Pre-Transitional Disk of HD 169142 at 7 mm», vol. 791, n° 2, p. L36. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/2041-8205/791/2/L36/meta>. 48
- OSTERLOH, M. et S. V. W. BECKWITH. 1995, «Millimeter-Wave Continuum Measurements of Young Stars», vol. 439, doi :10.1086/175172, p. 288, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1995ApJ...439..288O/abstract>. 46
- PADGETT, D. L., W. BRANDNER, K. R. STAPELFELDT, S. E. STROM, S. TEREBEY et D. KOERNER. 1999, «HST/NICMOS Imaging of Disks and Envelopes Around Very Young Stars», vol. 117, n° 3, doi :10.1086/300781, p. 1490-1504, ISSN 00046256. URL <http://arxiv.org/abs/astro-ph/9902101>. 45, 46
- PAGANI, L., J. STEINACKER, A. BACMANN, A. STUTZ et T. HENNING. 2010, «The Ubiquity of Micrometer-Sized Dust Grains in the Dense Interstellar Medium», vol. 329, doi :10.1126/science.1193211, p. 1622-. 21

- PAGE, V. L., T. P. SNOW et V. M. BIERBAUM. 2003, «Hydrogenation and Charge States of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Diffuse Clouds. II. Results», vol. 584, n° 1, doi :10.1086/345595, p. 316–330, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1086%2F345595>. 17
- PARADIS, D., K. DOBASHI, T. SHIMOIKURA, A. KAWAMURA, T. ONISHI, Y. FUKUI et J.-P. BERNARD. 2012, «Dark gas in the solar neighborhood from extinction data», vol. 543, doi :10.1051/0004-6361/201118740, p. A103, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2012/07/aa18740-11/aa18740-11.html>. 5
- PARVATHI, V. S., U. J. SOFIA, J. MURTHY et B. R. S. BABU. 2012, «Probing the Role of Carbon in Ultraviolet Extinction along Galactic Sight Lines», vol. 760, doi :10.1088/0004-637X/760/1/36, p. 36. 39
- PEETERS, E., S. HONY, C. VAN KERCKHOVEN, A. G. G. M. TIELENS, L. J. ALLAMANDOLA, D. M. HUDGINS et C. W. BAUSCHLICHER. 2002, «The rich 6 to 9  $\mu\text{m}$  spectrum of interstellar PAHs», vol. 390, doi :10.1051/0004-6361:20020773, p. 1089. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2002A%26A...390.1089P/abstract>. 17, 51
- PENDLETON, Y. J. et L. J. ALLAMANDOLA. 2002, «The Organic Refractory Material in the Diffuse Interstellar Medium : Mid-Infrared Spectroscopic Constraints», vol. 138, doi :10.1086/322999, p. 75–98. 11
- PENDLETON, Y. J., S. A. SANDFORD, L. J. ALLAMANDOLA, A. G. G. M. TIELENS et K. SELLGREN. 1994, «Near-Infrared Absorption Spectroscopy of Interstellar Hydrocarbon Grains», vol. 437, doi :10.1086/175031, p. 683, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1994ApJ...437..683P/abstract>. 11
- PERICAUD, J. 2016, «Des disques proto-planétaires aux disques de débris : Étude des disques hybrides : Observations dans le domaine millimétrique», URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01394384/>. 43, V
- PILLERI, P., C. JOBLIN, F. BOULANGER et T. ONAKA. 2015, «Mixed aliphatic and aromatic composition of evaporating very small grains in NGC 7023 revealed by the 3.4/3.3  $\mu\text{m}$  ratio», vol. 577, doi :10.1051/0004-6361/201425590, p. A16, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201425590>. 17
- PILLERI, P., J. MONTILLAUD, O. BERNÉ et C. JOBLIN. 2012, «Evaporating very small grains as tracers of the UV radiation field in photo-dissociation regions», vol. 542, doi :10.1051/0004-6361/201015915, p. A69. 40
- PINEDA, J. E., J. SZULÁGYI, S. P. QUANZ, E. F. VAN DISHOCK, A. GARUFI, F. MERU, G. D. MULDER, L. TESTI, M. R. MEYER et M. REGGIANI. 2018, «High-Resolution ALMA Observations of HD100546 : Asymmetric Circumstellar Ring, and Circumplanetary Disk Upper Limits», URL <http://arxiv.org/abs/1811.10365>. 48, V
- PINO, T., E. DARTOIS, A.-T. CAO, Y. CARPENTIER, T. CHAMAILLÉ, R. VASQUEZ, A. P. JONES, L. D' HENDECOURT et P. BRÉCHIGNAC. 2008, «The 6.2  $\mu\text{m}$  band position in laboratory and astrophysical spectra : A tracer of the aliphatic to aromatic evolution of interstellar carbonaceous dust», vol. 490, n° 2, doi :10.1051/0004-6361:200809927, p. 665–672, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:200809927>. 17, 30, IV
- PINTE, C., F. MÉNARD, G. DUCHÊNE, T. HILL, W. R. F. DENT, P. WOITKE, S. MARET, G. VAN DER PLAS, A. HALES, I. KAMP, W. F. THI, I. DE GREGORIO-MONSALVO, C. RAB, S. P. QUANZ, H. AVENHAUS, A. CARMONA et S. CASASSUS. 2018, «Direct mapping of the temperature and velocity gradients in discs - Imaging the vertical CO snow line around IM Lupi», vol. 609, doi :10.1051/0004-6361/201731377, p. A47, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://articles/aa/abs/2018/01/aa31377-17/aa31377-17.html>. 45

- PINTE, C., G. VAN DER PLAS, F. MÉNARD, D. J. PRICE, V. CHRISTIAENS, T. HILL, D. MENTIPLAY, C. GINSKI, E. CHOQUET, Y. BOEHLER, G. DUCHÊNE, S. PEREZ et S. CASASSUS. 2019, «Kinematic detection of a planet carving a gap in a protoplanetary disk», doi :10.1038/s41550-019-0852-6, p. 419. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019NatAs.tmp..419P/abstract>. 48
- PIRALI, O., M. VERVOLET, J. E. DAHL, R. M. K. CARLSON, A. G. G. M. TIELENS et J. OOMENS. 2007, «Infrared Spectroscopy of Diamondoid Molecules : New Insights into the Presence of Nanodiamonds in the Interstellar Medium», vol. 661, n° 2, doi :10.1086/516731, p. 919, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/661/i=2/a=919>. 11, 19
- PIÉTU, V., S. GUILLOTEAU, E. DI FOLCO, A. DUTREY et Y. BOEHLER. 2014, «Faint disks around classical T Tauri stars : Small but dense enough to form planets», vol. 564, doi :10.1051/0004-6361/201322388, p. A95, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201322388>. 46
- PLANCK COLLABORATION, A. ABERGEL, P. A. R. ADE, N. AGHANIM, M. I. R. ALVES, G. ANIANO, C. ARMITAGE-CAPLAN, M. ARNAUD, M. ASHDOWN, F. ATRIO-BARANDELA, J. AUMONT, C. BACCIGALUPI, A. J. BANDAY, R. B. BARREIRO, J. G. BARTLETT, E. BATTANER, K. BENABED, A. BENOÎT, A. BENOIT-LÉVY, J.-P. BERNARD, M. BERSANELLI, P. BIELEWICZ, J. BOBIN, J. J. BOCK, A. BONALDI, J. R. BOND, J. BORRILL, F. R. BOUCHET, F. BOULANGER, M. BRIDGES, M. BUCHER, C. BURIGANA, R. C. BUTLER, J.-F. CARDOSO, A. CATALANO, A. CHAMBALLU, R.-R. CHARY, H. C. CHIANG, L.-Y. CHIANG, P. R. CHRISTENSEN, S. CHURCH, M. CLEMENS, D. L. CLEMENTS, S. COLOMBI, L. P. L. COLOMBO, C. COMBET, F. COUCHOT, A. COULAIS, B. P. CRILL, A. CURTO, F. CUTTAIA, L. DANESE, R. D. DAVIES, R. J. DAVIS, P. DE BERNARDIS, A. DE ROSA, G. DE ZOTTI, J. DELABROUILLE, J.-M. DELOUIS, F.-X. DÉSERT, C. DICKINSON, J. M. DIEGO, H. DOLE, S. DONZELLI, O. DORÉ, M. DOUSPIS, B. T. DRAINE, X. DUPAC, G. EFSTATHIOU, T. A. ENSSLIN, H. K. ERIKSEN, E. FALGARONE, F. FINELLI, O. FORNI, M. FRAILIS, A. A. FRAISSE, E. FRANCESCHI, S. GALEOTTA, K. GANGA, T. GHOSH, M. GIARD, G. GIARDINO, Y. GIRAUD-HÉRAUD, J. GONZÁLEZ-NUEVO, K. M. GÓRSKI, S. GRATTON, A. GREGORIO, I. A. GRENIER, A. GRUPPUSO, V. GUILLET, F. K. HANSEN, D. HANSON, D. L. HARRISON, G. HELOU, S. HENROT-VERSILLÉ, C. HERNÁNDEZ-MONTEAGUDO, D. HERRANZ, S. R. HILDEBRANDT, E. HIVON, M. HOBSON, W. A. HOLMES, A. HORNSTRUP, W. HOVEST, K. M. HUFFENBERGER, A. H. JAFFE, T. R. JAFFE, J. JEWELL, G. JONCAS, W. C. JONES, M. JUVELA, E. KEIHÄNEN, R. KESKITALO, T. S. KISNER, J. KNOCHE, L. KNOX, M. KUNZ, H. KURKISUONIO, G. LAGACHE, A. LÄHTEENMÄKI, J.-M. LAMARRE, A. LASENBY, R. J. LAUREIJS, C. R. LAWRENCE, R. LEONARDI, J. LEÓN-TAVARES, J. LESGOURGUES, F. LEVRIER, M. LIGUORI, P. B. LILJE, M. LINDEN-VÖRNLE, M. LÓPEZ-CANIEGO, P. M. LUBIN, J. F. MACÍAS-PÉREZ, B. MAFFEI, D. MAINO, N. MANDOLESI, M. MARIS, D. J. MARSHALL, P. G. MARTIN, E. MARTÍNEZ-GONZÁLEZ, S. MASI, M. MASSARDI, S. MATARRESE, F. MATTHAI, P. MAZZOTTA, P. MCGEHEE, A. MELCHIORRI, L. MENDES, A. MENNELLA, M. MIGLIACCIO, S. MITRA, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, A. MONETTI, L. MONTIER, G. MORGANTE, D. MORTLOCK, D. MUNSHI, J. A. MURPHY, P. NASELSKY, F. NATI, P. NATOLI, C. B. NETTERFIELD, H. U. NØRGAARD-NIELSEN, F. NOVIELLO, D. NOVIKOV, I. NOVIKOV, S. OSBORNE, C. A. OXBORROW, F. PACI, L. PAGANO, F. PAJOT, R. PALADINI, D. PAOLETTI, F. PASIAN, G. PATANCHON, O. PERDEREAU, L. PEROTTO, F. PERROTTA, F. PIACENTINI, M. PIAT, E. PIERPAOLI, D. PIETROBON, S. PLASZCZYNSKI, E. POINTECOUTEAU, G. POLENTA, N. PONTHEIU, L. POPA, T. POUTANEN, G. W. PRATT, G. PRÉZEAU, S. PRUNET, J.-L. PUGET, J. P. RACHEN, W. T. REACH, R. REBOLO, M. REINECKE, M. REMAZEILLES, C. RENAULT, S. RICCIARDI, T. RILLER, I. RISTORCELLI, G. ROCHA, C. ROSSET, G. ROUDIER, M. ROWAN-ROBINSON, J. A. RUBIÑO-MARTÍN, B. RUSHOLME, M. SANDRI, D. SANTOS, G. SAVINI, D. SCOTT, M. D. SEIFFERT, E. P. S. SHELLARD, L. D. SPENCER, J.-L. STARCK, V. STOLYAROV, R. STOMPOR, R. SUDIWALA, R. SUNYAEV, F. SUREAU, D. SUTTON, A.-S. SUUR-USKI, J.-F. SYGNET, J. A. TAUBER, D. TAVAGNACCO, L. TERENCEZI, L. TOFFOLATTI, M. TOMASI, M. TRISTRAM, M. TUCCI, J. TUOVINEN, M. TÜRLER, G. UMANA, L. VALENZIANO, J. VALIVIITA, B. VAN TENT, L. VERSTRAETE, P. VIELVA, F. VILLA, N. VITTORIO, L. A. WADE, B. D. WANDELT, N. WELIKALA, N. YSARD, D. YVON, A. ZACCHEI et A. ZONCA. 2014, «Planck 2013 results. XI. All-sky model of thermal dust emis-



sion», vol. 571, doi :10.1051/0004-6361/201323195, p. A11, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201323195>. 21, IV

PLANCK COLLABORATION, P. A. R. ADE, N. AGHANIM, M. I. R. ALVES, G. ANIANO, M. ARNAUD, M. ASHDOWN, J. AUMONT, C. BACCIGALUPI, A. J. BANDAY, R. B. BARREIRO, N. BARTOLO, E. BATTANER, K. BENABED, A. BENOIT-LÉVY, J.-P. BERNARD, M. BERSANELLI, P. BIELEWICZ, A. BONALDI, L. BONAVERA, J. R. BOND, J. BORRILL, F. R. BOUCHET, F. BOULANGER, C. BURIGANA, R. C. BUTLER, E. CALABRESE, J.-F. CARDOSO, A. CATALANO, A. CHAMBALLU, H. C. CHIANG, P. R. CHRISTENSEN, D. L. CLEMENTS, S. COLOMBI, L. P. L. COLOMBO, F. COUCHOT, B. P. CRILL, A. CURTO, F. CUTTAIA, L. DANESE, R. D. DAVIES, R. J. DAVIS, P. DE BERNARDIS, A. DE ROSA, G. DE ZOTTI, J. DELABROUILLE, C. DICKINSON, J. M. DIEGO, H. DOLE, S. DONZELLI, O. DORÉ, M. DOUSPIS, B. T. DRAINE, A. DUCOUT, X. DUPAC, G. EFSTATHIOU, F. ELSNER, T. A. ENSSLIN, H. K. ERIKSEN, E. FALGARONE, F. FINELLI, O. FORNI, M. FRAILIS, A. A. FRAISSE, E. FRANCESCHI, A. FREJSEL, S. GALEOTTA, S. GALLI, K. GANGA, T. GHOSH, M. GIARD, E. GJERLØW, J. GONZÁLEZ-NUEVO, K. M. GÓRSKI, A. GREGORIO, A. GRUPPUSO, V. GUILLET, F. K. HANSEN, D. HANSON, D. L. HARRISON, S. HENROT-VERSILLÉ, C. HERNÁNDEZ-MONTEAGUDO, D. HERRANZ, S. R. HILDEBRANDT, E. HIVON, W. A. HOLMES, W. HOVEST, K. M. HUFFENBERGER, G. HURIER, A. H. JAFFE, T. R. JAFFE, W. C. JONES, E. KEIHÄNEN, R. KESKITALO, T. S. KISNER, R. KNEISSL, J. KNOCHE, M. KUNZ, H. KURKI-SUONIO, G. LAGACHE, J.-M. LAMARRE, A. LASENBY, M. LATTANZI, C. R. LAWRENCE, R. LEONARDI, F. LEVRIER, M. LIGUORI, P. B. LILJE, M. LINDENVØRNLE, M. LÓPEZ-CANIEGO, P. M. LUBIN, J. F. MACÍAS-PÉREZ, B. MAFFEI, D. MAINO, N. MANDOLESI, M. MARIS, D. J. MARSHALL, P. G. MARTIN, E. MARTÍNEZ-GONZÁLEZ, S. MASI, S. MATTARESE, P. MAZZOTTA, A. MELCHIORRI, L. MENDES, A. MENNELLA, M. MIGLIACCIO, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, A. MONETI, L. MONTIER, G. MORGANTE, D. MORTLOCK, D. MUNSHI, J. A. MURPHY, P. NASELSKY, P. NATOLI, H. U. NØRGAARD-NIELSEN, D. NOVIKOV, I. NOVIKOV, C. A. OXBORROW, L. PAGANO, F. PAJOT, R. PALADINI, D. PAOLETTI, F. PASIAN, O. PERDEREAU, L. PEROTTO, F. PERROTTA, V. PETTORINO, F. PIACENTINI, M. PIAT, S. PLASZCZYNSKI, E. POINTECOUTEAU, G. POLENTA, N. PONTHEIU, L. POPA, G. W. PRATT, S. PRUNET, J.-L. PUGET, J. P. RACHEN, W. T. REACH, R. REBOLO, M. REINECKE, M. REMAZEILLES, C. RENAULT, I. RISTORCELLI, G. ROCHA, G. ROUDIER, J. A. RUBIÑO-MARTÍN, B. RUSHOLME, M. SANDRI, D. SANTOS, D. SCOTT, L. D. SPENCER, V. STOLYAROV, R. SUDIWALA, R. SUNYAEV, D. SUTTON, A.-S. SUUR-USKI, J.-F. SYGNET, J. A. TAUBER, L. TERENCEZI, L. TOFFOLATTI, M. TOMASI, M. TRISTRAM, M. TUCCI, G. UMANA, L. VALENZIANO, J. VALIVIITA, B. VAN TENT, P. VIELVA, F. VILLA, L. A. WADE, B. D. WANDELT, I. K. WEHUS, N. YSARD, D. YVON, A. ZACCHEI et A. ZONCA. 2016a, «*Planck* intermediate results : XXIX. All-sky dust modelling with *Planck* , IRAS, and WISE observations», vol. 586, doi :10.1051/0004-6361/201424945, p. A132, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201424945>. 21

PLANCK COLLABORATION, P. A. R. ADE, N. AGHANIM, M. ARNAUD, M. ASHDOWN, J. AUMONT, C. BACCIGALUPI, A. BALBI, A. J. BANDAY, R. B. BARREIRO, J. G. BARTLETT, E. BATTANER, K. BENABED, A. BENOÎT, J.-P. BERNARD, M. BERSANELLI, R. BHATIA, J. J. BOCK, A. BONALDI, J. R. BOND, J. BORRILL, F. R. BOUCHET, F. BOULANGER, M. BUCHER, C. BURIGANA, P. CABELLA, J.-F. CARDOSO, A. CATALANO, L. CAYÓN, A. CHALLINOR, A. CHAMBALLU, L.-Y. CHIANG, C. CHIANG, P. R. CHRISTENSEN, D. L. CLEMENTS, S. COLOMBI, F. COUCHOT, A. COULAIS, B. P. CRILL, F. CUTTAIA, T. M. DAME, L. DANESE, R. D. DAVIES, R. J. DAVIS, P. DE BERNARDIS, G. DE GASPERIS, A. DE ROSA, G. DE ZOTTI, J. DELABROUILLE, J.-M. DELOUIS, F.-X. DÉSERT, C. DICKINSON, K. DOBASHI, S. DONZELLI, O. DORÉ, U. DÖRL, M. DOUSPIS, X. DUPAC, G. EFSTATHIOU, T. A. ENSSLIN, H. K. ERIKSEN, E. FALGARONE, F. FINELLI, O. FORNI, P. FOSALBA, M. FRAILIS, E. FRANCESCHI, Y. FUKUI, S. GALEOTTA, K. GANGA, M. GIARD, G. GIARDINO, Y. GIRAUD-HÉRAUD, J. GONZÁLEZ-NUEVO, K. M. GÓRSKI, S. GRATTON, A. GREGORIO, I. A. GRENIER, A. GRUPPUSO, F. K. HANSEN, D. HARRISON, G. HELOU, S. HENROT-VERSILLÉ, D. HERRANZ, S. R. HILDEBRANDT, E. HIVON, M. HOBSON, W. A. HOLMES, W. HOVEST, R. J. HOYLAND, K. M. HUFFENBERGER, A. H. JAFFE, W. C. JONES, M. JUVELA, A. KAWAMURA, E. KEIHÄNEN, R. KESKITALO, T. S. KIS-

NER, R. KNEISSL, L. KNOX, H. KURKI-SUONIO, G. LAGACHE, J.-M. LAMARRE, A. LASENBY, R. J. LAUREIJS, C. R. LAWRENCE, S. LEACH, R. LEONARDI, C. LEROY, P. B. LILJE, M. LINDEN-VØRNLE, M. LÓPEZ-CANIEGO, P. M. LUBIN, J. F. MACÍAS-PÉREZ, C. J. MACTAVISH, B. MAFFEI, D. MAINO, N. MANDOLESI, R. MANN, M. MARIS, P. MARTIN, E. MARTÍNEZ-GONZÁLEZ, S. MASI, S. MATARRESE, F. MATTHAI, P. MAZZOTTA, P. MCGEHEE, P. R. MEINHOLD, A. MELCHIORRI, L. MENDES, A. MENNELLA, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, A. MONETI, L. MONTIER, G. MORGANTE, D. MORTLOCK, D. MUNSHI, A. MURPHY, P. NASELSKY, P. NATOLI, C. B. NETTERFIELD, H. U. NØRGAARD-NIELSEN, F. NOVIELLO, D. NOVIKOV, I. NOVIKOV, I. J. O'DWYER, T. ONISHI, S. OSBORNE, F. PAJOT, R. PALADINI, D. PARADIS, F. PASIAN, G. PATANCHON, O. PERDEREAU, L. PEROTTO, F. PERROTTA, F. PIACENTINI, M. PIAT, S. PLASZCZYNSKI, E. POINTECOUTEAU, G. POLENTA, N. PONTTHIEU, T. POUTANEN, G. PRÉZEAU, S. PRUNET, J.-L. PUGET, W. T. REACH, M. REINECKE, C. RENAULT, S. RICCIARDI, T. RILLER, I. RISTORCELLI, G. ROCHA, C. ROSSET, M. ROWAN-ROBINSON, J. A. RUBIÑO-MARTÍN, B. RUSHOLME, M. SANDRI, D. SANTOS, G. SAVINI, D. SCOTT, M. D. SEIFFERT, P. SHELLARD, G. F. SMOOT, J.-L. STARCK, F. STIVOLI, V. STOLYAROV, R. STOMPOR, R. SUDIWALA, J.-F. SYGNET, J. A. TAUBER, L. TEREZI, L. TOFFOLATTI, M. TOMASI, J.-P. TORRE, M. TRISTRAM, J. TUOVINEN, G. UMANA, L. VALENZIANO, P. VIELVA, F. VILLA, N. VITTORIO, L. A. WADE, B. D. WANDELT, A. WILKINSON, D. YVON, A. ZACCHEI et A. ZONCA. 2011, «*Planck* early results. XIX. All-sky temperature and dust optical depth from *Planck* and IRAS. Constraints on the “dark gas” in our Galaxy», vol. 536, doi :10.1051/0004-6361/201116479, p. A19, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201116479>. 5

PLANCK COLLABORATION, P. A. R. ADE, N. AGHANIM, M. ARNAUD, M. ASHDOWN, J. AUMONT, C. BACCIGALUPI, A. J. BANDAY, R. B. BARREIRO, N. BARTOLO, S. BASAK, E. BATTANER, K. BENABED, A. BENOÎT, A. BENOIT-LÉVY, J.-P. BERNARD, M. BERSANELLI, P. BIELEWICZ, J. J. BOCK, A. BONALDI, L. BONAVERA, J. R. BOND, J. BORRILL, F. R. BOUCHET, M. BUCHER, C. BURIGANA, R. C. BUTLER, E. CALABRESE, J.-F. CARDOSO, B. CASAPONSA, A. CATALANO, A. CHALLINOR, A. CHAMBALLU, H. C. CHIANG, P. R. CHRISTENSEN, S. CHURCH, D. L. CLEMENTS, S. COLOMBI, L. P. L. COLOMBO, C. COMBET, F. COUCHOT, A. COULAIS, B. P. CRILL, A. CURTO, F. CUTAIA, L. DANESE, R. D. DAVIES, R. J. DAVIS, P. DE BERNARDIS, A. DE ROSA, G. DE ZOTTI, J. DELABROUILLE, F.-X. DÉSERT, J. M. DIEGO, H. DOLE, S. DONZELLI, O. DORÉ, M. DOUSPIS, A. DUCOUT, X. DUPAC, G. EFSTATHIOU, F. ELSNER, T. A. ENSSLIN, H. K. ERIKSEN, J. FERGUSON, R. FERNANDEZ-COBOS, F. FINELLI, O. FORNI, M. FRAILIS, A. A. FRAISSE, E. FRANCESCHI, A. FREJSEL, S. GALEOTTA, S. GALLI, K. GANGA, R. T. GÉNOVA-SANTOS, M. GIARD, Y. GIRAUD-HÉRAUD, E. GJERLØW, J. GONZÁLEZ-NUOVO, K. M. GÓRSKI, S. GRATTON, A. GREGORIO, A. GRUPPUSO, J. E. GUDMUNDSSON, F. K. HANSEN, D. HANSON, D. L. HARRISON, S. HENROT-VERSILLÉ, C. HERNÁNDEZ-MONTEAGUDO, D. HERRANZ, S. R. HILDEBRANDT, E. HIVON, M. HOBSON, W. A. HOLMES, A. HORNSTRUP, W. HOVEST, K. M. HUFFENBERGER, G. HURIER, S. ILIĆ, A. H. JAFFE, T. R. JAFFE, W. C. JONES, M. JUVELA, E. KEIHÄNEN, R. KESKITALO, T. S. KISNER, R. KNEISSL, J. KNOCHE, M. KUNZ, H. KURKI-SUONIO, G. LAGACHE, A. LÄHTEENMÄKI, J.-M. LAMARRE, M. LANGER, A. LASENBY, M. LATTANZI, C. R. LAWRENCE, R. LEONARDI, J. LESGOURGUES, F. LEVRIER, M. LIGUORI, P. B. LILJE, M. LINDEN-VØRNLE, M. LÓPEZ-CANIEGO, P. M. LUBIN, Y.-Z. MA, J. F. MACÍAS-PÉREZ, G. MAGGIO, D. MAINO, N. MANDOLESI, A. MANGILLI, A. MARCOS-CABALLERO, M. MARIS, P. G. MARTIN, E. MARTÍNEZ-GONZÁLEZ, S. MASI, S. MATARRESE, P. MCGEHEE, P. R. MEINHOLD, A. MELCHIORRI, L. MENDES, A. MENNELLA, M. MIGLIACCIO, S. MITRA, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, A. MONETI, L. MONTIER, G. MORGANTE, D. MORTLOCK, A. MOSS, D. MUNSHI, J. A. MURPHY, P. NASELSKY, F. NATI, P. NATOLI, C. B. NETTERFIELD, H. U. NØRGAARD-NIELSEN, F. NOVIELLO, D. NOVIKOV, I. NOVIKOV, C. A. OXBORROW, F. PACI, L. PAGANO, F. PAJOT, D. PAOLETTI, F. PASIAN, G. PATANCHON, O. PERDEREAU, L. PEROTTO, F. PERROTTA, V. PETTORINO, F. PIACENTINI, M. PIAT, E. PIERPAOLI, D. PIETROBON, S. PLASZCZYNSKI, E. POINTECOUTEAU, G. POLENTA, L. POPA, G. W. PRATT, G. PRÉZEAU, S. PRUNET, J.-L. PUGET, J. P. RACHEN, W. T. REACH, R. REBOLO, M. REINECKE, M. REMAZEILLES, C. RENAULT, A. RENZI, I. RISTORCELLI, G. ROCHA, C. ROSSET, M. ROSSETTI, G. ROUDIER, J. A. RUBIÑO-MARTÍN, B. RUSHOLME, M. SANDRI, D. SANTOS, M. SAVALAINEN, G. SAVINI,

- B. M. SCHAEFER, D. SCOTT, M. D. SEIFFERT, E. P. S. SHELLARD, L. D. SPENCER, V. STOLYAROV, R. STOMPOR, R. SUDIWALA, R. SUNYAEV, D. SUTTON, A.-S. SUUR-USKI, J.-F. SYGNET, J. A. TAUBER, L. TERENCEZI, L. TOFFOLATTI, M. TOMASI, M. TRISTRAM, M. TUCCI, J. TUOVINEN, L. VALENZIANO, J. VALIVIITA, F. VAN TENT, P. VIELVA, F. VILLA, L. A. WADE, B. D. WANDEL, I. K. WEHUS, D. YVON, A. ZACCHEI et A. ZONCA. 2016b, «*Planck* 2015 results : XXI. The integrated Sachs-Wolfe effect», vol. 594, doi :10.1051/0004-6361/201525831, p. A21, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201525831>. 22
- VAN DER PLAS, G., F. MÉNARD, J.-F. GONZALEZ, S. PEREZ, L. RODET, C. PINTE, L. CIEZA, S. CASSASSUS et M. BENISTY. 2019, «ALMA study of the HD 100453 AB system and the tidal interaction of the companion with the disk», vol. 624, doi :10.1051/0004-6361/201834134, p. A33. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019A%26A...624A...33V/abstract>. 48, V
- PRZYBILLA, N., M.-F. NIEVA et K. BUTLER. 2008, «A Cosmic Abundance Standard : Chemical Homogeneity of the Solar Neighborhood and the ISM Dust-Phase Composition», vol. 688, doi : 10.1086/595618, p. L103. 41
- PURCELL, E. M. et C. R. PENNYPACKER. 1973, «Scattering and Absorption of Light by Nonspherical Dielectric Grains», vol. 186, doi :10.1086/152538, p. 705. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1973ApJ...186..705P/abstract>. 37
- PÉREZ, L. M., J. M. CARPENTER, S. M. ANDREWS, L. RICCI, A. ISELLA, H. LINZ, A. I. SARGENT, D. J. WILNER, T. HENNING, A. T. DELLER, C. J. CHANDLER, C. P. DULLEMOND, J. LAZIO, K. M. MENTEN, S. A. CORDER, S. STORM, L. TESTI, M. TAZZARI, W. KWON, N. CALVET, J. S. GREAVES, R. J. HARRIS et L. G. MUNDY. 2016, «Spiral density waves in a young protoplanetary disk», vol. 353, n° 6307, doi :10.1126/science.aaf8296, p. 1519–1521, ISSN 0036-8075, 1095-9203. URL <https://science.sciencemag.org/content/353/6307/1519>. 45, 47
- PÉREZ, L. M., J. M. CARPENTER, C. J. CHANDLER, A. ISELLA, S. M. ANDREWS, L. RICCI, N. CALVET, S. A. CORDER, A. T. DELLER, C. P. DULLEMOND, J. S. GREAVES, R. J. HARRIS, T. HENNING, W. KWON, J. LAZIO, H. LINZ, L. G. MUNDY, A. I. SARGENT, S. STORM, L. TESTI et D. J. WILNER. 2012, «CONSTRAINTS ON THE RADIAL VARIATION OF GRAIN GROWTH IN THE AS 209 CIRCUMSTELLAR DISK», vol. 760, n° 1, doi :10.1088/2041-8205/760/1/L17, p. L17, ISSN 2041-8205. URL <https://doi.org/10.1088/2041-8205/760/1/L17>. 49
- QUANZ, S. P., A. AMARA, M. R. MEYER, J. H. GIRARD, M. A. KENWORTHY et M. KASPER. 2015, «Confirmation and Characterization of the Protoplanet HD 100546 b—Direct Evidence for Gas Giant Planet Formation at 50 AU», vol. 807, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/807/1/64, p. 64, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/807/i=1/a=64>. 48
- RAPACIOLI, M., C. JOBLIN et P. BOISSEL. 2005, «Spectroscopy of polycyclic aromatic hydrocarbons and very small grains in photodissociation regions», vol. 429, n° 1, doi :10.1051/0004-6361:20041247, p. 193–204, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2005/01/aa1247/aa1247.html>. 17
- RAWLINGS, M. G., A. J. ADAMSON et D. C. B. WHITTET. 2003, «Infrared and visual interstellar absorption features towards heavily reddened field stars», vol. 341, n° 4, doi :10.1046/j.1365-8711.2003.06389.x, p. 1121–1140, ISSN 0035-8711. URL <http://academic.oup.com/mnras/article/341/4/1121/1035274>. 11
- REACH, W. T., J.-P. BERNARD, T. H. JARRETT et C. HEILES. 2017, «Variations between Dust and Gas in the Diffuse Interstellar Medium. III. Changes in Dust Properties», vol. 851, n° 2, doi :10.3847/1538-4357/aa9b85, p. 119, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.3847/1538-4357/aa9b85>. 21

- REACH, W. T., C. HEILES et J.-P. BERNARD. 2015, «VARIATIONS BETWEEN DUST AND GAS IN THE DIFFUSE INTERStELLAR MEDIUM», vol. 811, n° 2, doi :10.1088/0004-637X/811/2/118, p. 118, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088/0004-637x/2F811%2F2%2F118>. 21
- REBOUSSIN, L., V. WAKELAM, S. GUILLOTEAU, F. HERSANT et A. DUTREY. 2015, «Chemistry in protoplanetary disks : The gas-phase CO/H<sub>2</sub> ratio and the carbon reservoir», vol. 579, doi : 10.1051/0004-6361/201525885, p. A82, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2015/07/aa25885-15/aa25885-15.html>. 46
- REGGIANI, M., S. P. QUANZ, M. R. MEYER, L. PUEYO, O. ABSIL, A. AMARA, G. ANGLADA, H. AVENHAUS, J. H. GIRARD, C. CARRASCO GONZALEZ, J. GRAHAM, D. MAWET, F. MERU, J. MILLI, M. OSORIO, S. WOLFF et J.-M. TORRELLES. 2014, «Discovery of a Companion Candidate in the HD 169142 Transition Disk and the Possibility of Multiple Planet Formation», vol. 792, doi : 10.1088/2041-8205/792/1/L23, p. L23, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2014ApJ...792L..23R>. 48
- REISSL, S., S. WOLF et R. BRAUER. 2016, «Radiative transfer with POLARIS : I. Analysis of magnetic fields through synthetic dust continuum polarization measurements», vol. 593, doi :10.1051/0004-6361/201424930, p. A87, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201424930>. 51
- REMY, Q., I. A. GRENIER, D. J. MARSHALL et J. M. CASANDJIAN. 2018, «Cosmic-rays, gas, and dust in nearby anticentre clouds. II. Interstellar phase transitions and the dark neutral medium», vol. 611, doi :10.1051/0004-6361/201730797, p. A51. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2018A%26A...611A..51R/abstract>. 21
- RIBAS, , H. BOUY et B. MERÍN. 2015, «Protoplanetary disk lifetimes vs. stellar mass and possible implications for giant planet populations», vol. 576, doi :10.1051/0004-6361/201424846, p. A52, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2015/04/aa24846-14/aa24846-14.html>. 48
- RICCA, A., C. W. BAUSCHLICHER et L. J. ALLAMANDOLA. 2013, «THE INFRARED SPECTROSCOPY OF NEUTRAL POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBON CLUSTERS», vol. 776, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/776/1/31, p. 31, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088/2F0004-637x/2F776%2F1%2F31>. 17
- RISTEIN, J. 1998, «A comparative analysis of a-C :H by infrared spectroscopy and mass selected thermal effusion», vol. 84, n° 7, doi :10.1063/1.368563, p. 3836–3847, ISSN 0021-8979. URL <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.368563>. 31
- ROBERTS, K. R. G., K. T. SMITH et P. J. SARRE. 2012, «Detection of C<sub>60</sub> in embedded young stellar objects, a Herbig Ae/Be star and an unusual post-asymptotic giant branch star», vol. 421, n° 4, doi :10.1111/j.1365-2966.2012.20552.x, p. 3277–3285, ISSN 0035-8711. URL <https://academic.oup.com/mnras/article/421/4/3277/1093522/Detection-of-C60-in-embedded-young-stellar-objects>. 17, 51
- ROBERTSON, J. 1986, «Amorphous carbon», vol. 35, n° 4, doi :10.1080/00018738600101911, p. 317–374, ISSN 0001-8732. URL <http://dx.doi.org/10.1080/00018738600101911>. 17, 25, 31, 37
- ROBERTSON, J. 2002, «Diamond-like amorphous carbon», vol. 37, n° 4, doi :10.1016/S0927-796X(02)00005-0, p. 129–281, ISSN 0927-796X. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927796X02000050>. 17, 25
- ROY, A., P. G. MARTIN, D. POLYCHRONI, S. BONTEMPS, A. ABERGEL, P. ANDRÉ, D. ARZOUMANIAN, J. D. FRANCESCO, T. HILL, V. KONYVES, Q. NGUYEN-LUONG, S. PEZZUTO, N. SCHNEIDER, L. TESTI et G. WHITE. 2013, «CHANGES OF DUST OPACITY WITH DENSITY IN THE ORION A

- MOLECULAR CLOUD», vol. 763, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/763/1/55, p. 55, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088/0004-637X/763/1/55>. 21
- SADJADI, S., Y. ZHANG et S. KWOK. 2015, «A THEORETICAL STUDY ON THE VIBRATIONAL SPECTRA OF POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBON MOLECULES WITH ALIPHATIC SIDEGROUPS», vol. 801, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/801/1/34, p. 34, ISSN 0004-637X. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0004-637X/801/1/34/meta>. 17
- SANDFORD, S. A., L. J. ALLAMANDOLA, A. G. G. M. TIELENS, K. SELLGREN, M. TAPIA et Y. PENDLETON. 1991, «The interstellar C-H stretching band near 3.4 microns - Constraints on the composition of organic material in the diffuse interstellar medium», vol. 371, doi :10.1086/169925, p. 607, ISSN 0004-637X, 1538-4357. URL <http://adsabs.harvard.edu/doi/10.1086/169925>. 11
- SARANGI, A., M. MATSUURA et E. R. MICELOTTA. 2018, «Dust in Supernovae and Supernova Remnants I: Formation Scenarios», vol. 214, n° 3, doi :10.1007/s11214-018-0492-7, p. 63, ISSN 1572-9672. URL <https://doi.org/10.1007/s11214-018-0492-7>. 40
- SARGENT, B. A., W. J. FORREST, C. TAYRIEN, M. K. MCCLURE, D. M. WATSON, G. C. SLOAN, A. LI, P. MANOJ, C. J. BOHAC, E. FURLAN, K. H. KIM et J. D. GREEN. 2009, «Dust Processing and Grain Growth in Protoplanetary Disks in the Taurus-Auriga Star-Forming Region», vol. 182, doi :10.1088/0067-0049/182/2/477, p. 477–508, ISSN 0067-0049. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2009ApJS...182..477S>. 19
- SAVAGE, B. D. et R. C. BOHLIN. 1979, «The depletion of interstellar gaseous iron.», vol. 229, doi :10.1086/156938, p. 136. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1979ApJ...229..136S/abstract>. 27
- SAVAGE, B. D. et J. S. MATHIS. 1979, «Observed properties of interstellar dust», vol. 17, doi :10.1146/annurev.aa.17.090179.000445, p. 73–111. 9
- SAVAGE, B. D. et K. R. SEMBACH. 1996, «Interstellar Abundances from Absorption-Line Observations with the Hubble Space Telescope», vol. 34, doi :10.1146/annurev.astro.34.1.279, p. 279–330. 39
- SCHALÉN, C. 1929, «Zur Frage einer allgemeinen Absorption des Lichtes im Weltraum», vol. 236, doi :10.1002/asna.19292361602, p. 249. 38
- SCHALÉN, C. 1931, «Note on space-reddening in Cassiopeia (abstract)», dans *Publications of the American Astronomical Society, Publications of the American Astronomical Society*, vol. 6, p. 376. 38
- SCHMIDT, G. D., M. COHEN et B. MARGON. 1980, «Discovery of optical molecular emission from the bipolar nebula surrounding HD 44179.», vol. 239, doi :10.1086/183309, p. L133. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1980ApJ...239L.133S/abstract>. 21, 22, IV
- SCHOENBERG, E. et B. JUNG. 1934, «Über die Lichtzerstreuung im interstellaren Raum durch Wolken metallischer partikel», vol. 253, doi :10.1002/asna.19342531402, p. 261. 38
- SCHUTTE, W. A., K. A. VAN DER HUHT, D. C. B. WHITTET, A. C. A. BOOGERT, A. G. G. M. TIELENS, P. W. MORRIS, J. M. GREENBERG, P. M. WILLIAMS, E. F. VAN DISHOECK, J. E. CHIAR et T. DE GRAAUW. 1998, «ISO-SWS observations of infrared absorption bands of the diffuse interstellar medium : The 6.2 MU M feature of aromatic compounds», vol. 337, p. 261. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1998A%26A...337..261S/abstract>. 11
- SELLEGREN, K., M. W. WERNER, J. G. INGALLS, J. D. T. SMITH, T. M. CARLETON et C. JOBLIN. 2010, «C60 in Reflection Nebulae», vol. 722, n° 1, doi :10.1088/2041-8205/722/1/L54, p. L54, ISSN 2041-8205. URL <http://stacks.iop.org/2041-8205/722/i=1/a=L54>. 17, 19, III

- SEOK, J. Y. et A. LI. 2017, «Polycyclic Aromatic Hydrocarbon in Protoplanetary Disks around Herbig Ae/Be and T Tauri Stars», vol. 835, n° 2, doi :10.3847/1538-4357/835/2/291, p. 291, ISSN 1538-4357. URL <http://arxiv.org/abs/1612.09454>. 51, 52, 53, V
- SHAKURA, N. I. et R. A. SUNYAEV. 1973, «Reprint of 1973A&A...24..337S. Black holes in binary systems. Observational appearance.», vol. 500, p. 33. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1973A%26A...24..337S/abstract>. 51
- SHU, F. H., F. C. ADAMS et S. LIZANO. 1987, «Star Formation in Molecular Clouds : Observation and Theory», vol. 25, n° 1, doi :10.1146/annurev.aa.25.090187.000323, p. 23–81. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.aa.25.090187.000323>. 42
- SHU, F. H., H. SHANG, M. GOUNELLE, A. E. GLASSGOLD et T. LEE. 2001, «The Origin of Chondrules and Refractory Inclusions in Chondritic Meteorites», vol. 548, n° 2, doi :10.1086/319018, p. 1029, ISSN 0004-637X. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/319018/meta>. 49
- SICILIA-AGUILAR, A., L. W. HARTMANN, D. WATSON, C. BOHAC, T. HENNING et J. BOUWMAN. 2007, «Silicate Dust in Evolved Protoplanetary Disks : Growth, Sedimentation, and Accretion», vol. 659, doi :10.1086/512121, p. 1637–1660, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2007ApJ...659.1637S>. 19
- SIEBENMORGEN, R. et E. KRUEGEL. 1992, «Dust model containing polycyclic aromatic hydrocarbons in various environments», vol. 259, p. 614–626. 39
- SIEBENMORGEN, R. et E. KRÜGEL. 2010, «The destruction and survival of polycyclic aromatic hydrocarbons in the disks of T Tauri stars», vol. 511, doi :10.1051/0004-6361/200912035, p. A6, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/200912035>. 53
- SIEBENMORGEN, R., N. V. VOSHCHINNIKOV et S. BAGNULO. 2014, «Dust in the diffuse interstellar medium. Extinction, emission, linear and circular polarisation», vol. 561, doi :10.1051/0004-6361/201321716, p. A82. 22, 39
- SIMON, M. et S. GUILLOTEAU. 1992, «Dusty Disks in the Multiple Systems UZ Tauri and GG Tauri», vol. 397, doi :10.1086/186541, p. L47, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1992ApJ...397L..47S/abstract>. 45
- SISSA, E., J. OLOFSSON, A. VIGAN, J. C. AUGEREAU, V. D’ORAZI, S. DESIDERA, R. GRATTON, M. L. E. RIGLIACO, A. BOCCALETTI, Q. KRAL, C. LAZZONI, D. MESA, S. MESSINA, E. SEZESTRE, P. THÉBAULT, A. ZURLO, T. BHOWMIK, M. BONNEFOY, G. CHAUVIN, M. FELDT, J. HAGELBERG, A.-M. LAGRANGE, M. JANSON, A.-L. MAIRE, F. MÉNARD, J. SCHLIEDER, T. SCHMIDT, J. SZULÁGYI, E. STADLER, D. M. A. DEBOULBÉ, P. FEAUTRIER, J. RAMOS et R. RIGAL. 2018, «New disk discovered with VLT/SPHERE around the M star GSC 07396-00759», vol. 613, doi :10.1051/0004-6361/201832740, p. L6, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://arxiv.org/abs/1804.02882>. 46
- SKRUTSKIE, M. F., D. DUTKEVITCH, S. E. STROM, S. EDWARDS, K. M. STROM et M. A. SHURE. 1990, «A Sensitive 10-Micron Search for Emission Arising from Circumstellar Dust Associated with Solar-Type Pre-Main-Sequence Stars», vol. 99, doi :10.1086/115407, p. 1187, ISSN 0004-6256. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1990AJ.....99.1187S/abstract>. 44
- SLOAN, G. C., J. D. BREGMAN, T. R. GEBALLE, L. J. ALLAMANDOLA et C. E. WOODWARD. 1997, «Variations in the 3 Micron Spectrum across the Orion Bar : Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Related Molecules», vol. 474, doi :10.1086/303484, p. 735. 51
- SLOAN, G. C., L. D. KELLER, W. J. FORREST, E. LEIBENSPERGER, B. SARGENT, A. LI, J. NAJITA, D. M. WATSON, B. R. BRANDL, C. H. CHEN, J. D. GREEN, F. MARKWICK-KEMPER, T. L. HERTER, P. D’ALESSIO, P. W. MORRIS, D. J. BARRY, P. HALL, P. C. MYERS et J. R. HOUCK. 2005,

- «Mid-Infrared Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission in Herbig Ae/Be Stars», vol. 632, n° 2, doi :10.1086/444371, p. 956, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/632/i=2/a=956>. 51
- SLOAN, G. C., K. E. KRAEMER, P. R. WOOD, A. A. ZIJLSTRA, J. BERNARD-SALAS, D. DEVOST et J. R. HOUCK. 2008, «The Magellanic Zoo : Mid-Infrared Spitzer Spectroscopy of Evolved Stars and Circumstellar Dust in the Magellanic Clouds», vol. 686, n° 2, doi :10.1086/591437, p. 1056–1081, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1086%2F591437>. 40
- SNOW, T. P. et J. D. DESTREE. 2011, «The Diffuse Interstellar Bands in History and in the UV», vol. 46, doi :10.1051/eas/1146035, p. 341–347, ISSN 1633-4760, 1638-1963. URL <https://www.eas-journal.org/articles/eas/abs/2011/01/eas1146035/eas1146035.html>. 13
- SOIFER, B. T., R. W. RUSSELL et K. M. MERRILL. 1976, «2-4 micron spectrophotometric observations of the galactic center», vol. 207, p. L83–L85. 11
- SORRELL, W. H. 1991, «Annealed HAC mantles in diffuse dust clouds», vol. 248, doi :10.1093/mnras/248.3.439, p. 439–443. 40
- SPOON, H. W., L. ARMUS, J. CAMI, A. TIELENS, J. E. CHIAR, E. PEETERS, J. V. KEANE, V. CHARMAN-DARIS, P. N. APPLETON et H. I. TEPLITZ. 2004, «Fire and ice : Spitzer infrared spectrograph (IRS) mid-infrared spectroscopy of IRAS F00183–7111», vol. 154, n° 1, p. 184. 11
- STECHEER, T. P. 1965, «Interstellar Extinction in the Ultraviolet.», vol. 142, doi :10.1086/148462, p. 1683. 10, 39
- STECHEER, T. P. 1969, «Interstellar Extinction in the Ultraviolet. II», vol. 157, p. L125–. 10, 39
- STECHEER, T. P. et B. DONN. 1965, «On Graphite and Interstellar Extinction», vol. 142, p. 1681–. 39
- STEGLICH, M., J. BOUWMAN, F. HUISKEN et T. HENNING. 2011, «Can Neutral and Ionized Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Be Carriers of the Ultraviolet Extinction Bump and the Diffuse Interstellar Bands?», vol. 742, doi :10.1088/0004-637X/742/1/2, p. 2. 10
- STEPNIK, B., A. ABERGEL, J.-P. BERNARD, F. BOULANGER, L. CAMBRÉSY, M. GIARD, A. P. JONES, G. LAGACHE, J.-M. LAMARRE, C. MENY, F. PAJOT, F. LE PEINTRE, I. RISTORCELLI, G. SERRA et J.-P. TORRE. 2003, «Evolution of dust properties in an interstellar filament», vol. 398, doi :10.1051/0004-6361:20021309, p. 551–563. 21
- STROM, K. M., S. E. STROM, S. EDWARDS, S. CABRIT et M. F. SKRUTSKIE. 1989, «Circumstellar Material Associated with Solar-Type Pre-Main-Sequence Stars : A Possible Constraint on the Timescale for Planet Building», vol. 97, doi :10.1086/115085, p. 1451, ISSN 0004-6256. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1989AJ....97.1451S/abstract>. 44
- STROM, S. E., K. M. STROM, J. YOST, L. CARRASCO et G. GRASDALEN. 1972, «The Nature of the Herbig Ae- and Be-TYPE Stars Associated with Nebulosity», vol. 173, doi :10.1086/151425, p. 353. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1972ApJ...173..353S/abstract>. 44
- SUGERMAN, B. E. K., B. ERCOLANO, M. J. BARLOW, A. G. G. M. TIELENS, G. C. CLAYTON, A. A. ZIJLSTRA, M. MEIXNER, A. SPECK, T. M. GLEDHILL, N. PANAGIA, M. COHEN, K. D. GORDON, M. MEYER, J. FABBRI, J. E. BOWEY, D. L. WELCH, M. W. REGAN et R. C. KENNICUTT. 2006, «Massive-Star Supernovae as Major Dust Factories», vol. 313, n° 5784, doi :10.1126/science.1128131, p. 196–200, ISSN 0036-8075, 1095-9203. URL <https://science.sciencemag.org/content/313/5784/196>. 40
- TAKEUCHI, T. et D. N. C. LIN. 2005, «Attenuation of Millimeter Emission from Circumstellar Disks Induced by the Rapid Dust Accretion», vol. 623, n° 1, doi :10.1086/428378, p. 482–492, ISSN 0004-637X, 1538-4357. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/623/i=1/a=482>. 49

- TAMOR, M. A. et C. H. WU. 1990, «Graphitic network models of “diamondlike” carbon», vol. 67, doi :10.1063/1.345808, p. 1007–1012. 37
- TAPPE, A., J. RHO et W. T. REACH. 2006, «Shock Processing of Interstellar Dust and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Supernova Remnant N132D», vol. 653, n° 1, doi :10.1086/508741, p. 267–279, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1086%2F508741>. 40
- TAUC, J., R. GRIGOROVICI et A. VANCU. 1966, «Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium», vol. 15, doi :10.1002/pssb.19660150224, p. 627–637. 38
- TEAGUE, R., J. BAE, E. A. BERGIN, T. BIRNSTIEL et D. FOREMAN-MACKEY. 2018, «A Kinematical Detection of Two Embedded Jupiter-mass Planets in HD 163296», vol. 860, n° 1, doi : 10.3847/2041-8213/aac6d7, p. L12. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2018ApJ...860L..12T/abstract>. 48
- TESTI, L., T. BIRNSTIEL, L. RICCI, S. ANDREWS, J. BLUM, J. CARPENTER, C. DOMINIK, A. ISELLA, A. NATTA, J. P. WILLIAMS et al.. 2014, «Dust evolution in protoplanetary disks», vol. 1, p. 339–361. 48, 50, V
- TESTI, L., A. NATTA, A. SCHOLZ, M. TAZZARI, L. RICCI et I. DE GREGORIO MONSALVO. 2016, «Brown dwarf disks with ALMA : Evidence for truncated dust disks in Ophiuchus», vol. 593, doi :10.1051/0004-6361/201628623, p. A111. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2016A%26A...593A.111T/abstract>. 46
- THALMANN, C., G. D. MULDER, M. JANSON, J. OLOFSSON, M. BENISTY, H. AVENHAUS, S. P. QUANZ, H. M. SCHMID, T. HENNING, E. BUENZLI, F. MÉNARD, J. C. CARSON, A. GARUFI, S. MESSINA, C. DOMINIK, J. LEISENRING, G. CHAUVIN et M. R. MEYER. 2015, «OPTICAL IMAGING POLARIMETRY OF THE LkCa 15 PROTOPLANETARY DISK WITH SPHERE ZIMPOL», vol. 808, n° 2, doi :10.1088/2041-8205/808/2/L41, p. L41, ISSN 2041-8205. URL <https://doi.org/10.1088%2F2041-8205%2F808%2F2%2F141>. 46
- TIELENS, A. G. G. M. 2005, *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*, Cambridge University Press, ISBN 978-1-139-44565-8. 12, III
- TIELENS, A. G. G. M. 2008, «Interstellar Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Molecules», vol. 46, doi : 10.1146/annurev.astro.46.060407.145211, p. 289–337. 15, 18, 40, III
- TIELENS, A. G. G. M., M. M. MEIXNER, P. P. VAN DER WERF, J. BREGMAN, J. A. TAUBER, J. STUTZKI et D. RANK. 1993, «Anatomy of the Photodissociation Region in the Orion Bar», vol. 262, n° 5130, doi :10.1126/science.262.5130.86, p. 86–89, ISSN 0036-8075, 1095-9203. URL <https://science.sciencemag.org/content/262/5130/86>. 15
- TRUMPLER, R. J. 1930, «Absorption of Light in the Galactic System», vol. 42, doi :10.1086/124039, p. 214. 5, 38
- UEDA, Y., K. MITSUDA, H. MURAKAMI et K. MATSUSHITA. 2005, «Study of the Galactic Interstellar Medium from High-Resolution X-Ray Spectroscopy : X-Ray Absorption Fine Structure and Abundances of O, Mg, Si, S, and Fe», vol. 620, n° 1, doi :10.1086/426933, p. 274–286, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1086%2F426933>. 27
- VAN KERCKHOVEN, C., A. G. G. M TIELENS et C. WAELKENS. 2002, «Nanodiamonds around HD 97048 and Elias 1», vol. 384, n° 2, doi :10.1051/0004-6361:20011814, p. 568–584, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361:20011814>. 17, 51
- VERSTRAETE, L., C. PECH, C. MOUTOU, K. SELLGREN, C. M. WRIGHT, M. GIARD, A. LÉGER, R. TIMMERMANN et S. DRAPATZ. 2001, «The Aromatic Infrared Bands as seen by ISO-SWS : Probing the PAH model», vol. 372, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20010515, p. 981–997, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20010515>. 31



- VICENTE, S. M. et J. ALVES. 2005, «Size distribution of circumstellar disks in the Trapezium cluster», vol. 441, n° 1, doi :10.1051/0004-6361:20053540, p. 195–205, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2005/37/aa3540-05/aa3540-05.html>. 46
- VIJH, U. P., A. N. WITT et K. D. GORDON. 2005, «Blue Luminescence and the Presence of Small Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Interstellar Medium», vol. 633, doi :10.1086/447763, p. 262–271. 21
- WANG, J., P. B. HALL, J. GE, A. LI et D. P. SCHNEIDER. 2004, «Detections of the 2175 Å Dust Feature at  $1.4 < z < 1.5$  from the Sloan Digital Sky Survey», vol. 609, n° 2, p. 589. 9
- WANG, S., J. GAO, B. W. JIANG, A. LI et Y. CHEN. 2013, «THE MID-INFRARED EXTINCTION LAW AND ITS VARIATION IN THE COALSACK NEBULA», vol. 773, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/773/1/30, p. 30, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088/0004-637X/773/1/30>. 9
- WANG, S., A. LI et B. W. JIANG. 2015, «VERY LARGE INTERSTELLAR GRAINS AS EVIDENCED BY THE MID-INFRARED EXTINCTION», vol. 811, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/811/1/38, p. 38, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088/0004-637X/811/1/38>. 9
- WATERS, L. B. F. M., F. J. MOLSTER, T. DE JONG, D. A. BEINTEMA, C. WAELENS, A. C. A. BOOGERT, D. R. BOXHOORN, T. DE GRAAUW, S. DRAPATZ, H. FEUCHTGRUBER, R. GENZEL, F. P. HELMICH, A. M. HERAS, R. HUYGEN, H. IZUMIURA, K. JUSTTANONT, D. J. M. KESTER, D. KUNZE, F. LAHUIS, H. J. G. L. M. LAMERS, K. J. LEECH, C. LOUP, D. LUTZ, P. W. MORRIS, S. D. PRICE, P. R. ROELFSEMA, A. SALAMA, S. G. SCHAEIDT, A. G. G. M. TIELENS, N. R. TRAMS, E. A. VALENTIJN, B. VANDENBUSSCHE, M. E. VAN DEN ANCKER, E. F. VAN DISHOECK, H. VAN WINCKEL, P. R. WESSELIUS et E. T. YOUNG. 1996, «Mineralogy of oxygen-rich dust shells.», vol. 315, p. L361. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1996A%26A...315L.361W/abstract>. 19
- WEBSTER, A. 1993, «The extended red emission and the fluorescence of C60.», vol. 264, doi : 10.1093/mnras/264.1.L1, p. L1. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1993MNRAS.264L...1W/abstract>. 22
- WEIDENSCHILLING, S. J. 1977, «Aerodynamics of solid bodies in the solar nebula», vol. 180, n° 2, doi :10.1093/mnras/180.2.57, p. 57–70, ISSN 0035-8711, 1365-2966. URL <http://mnras.oxfordjournals.org/content/180/2/57>. 48, 49
- WELTY, D. E., E. B. JENKINS, J. C. RAYMOND, C. MALLOURIS et D. G. YORK. 2002, «Intermediate and High-Velocity Ionized Gas toward Orionis», vol. 579, doi :10.1086/342755, p. 304–326. 39
- WEXLER, A. 1967, «Integrated Intensities of Absorption Bands in Infrared Spectroscopy», vol. 1, doi :10.1080/05704926708547581, p. 29–98. 31
- WHITTET, D. C. B., A. C. A. BOOGERT, P. A. GERAKINES, W. SCHUTTE, A. G. G. M. TIELENS, T. DE GRAAUW, T. PRUSTI, E. F. VAN DISHOECK, P. R. WESSELIUS et C. M. WRIGHT. 1997, «Infrared Spectroscopy of Dust in the Diffuse Interstellar Medium toward Cygnus OB2 No. 12», vol. 490, n° 2, p. 729–734. 11
- WHITTET, D. C. B., P. A. GERAKINES, J. H. HOUGH et S. S. SHENOY. 2001, «Interstellar Extinction and Polarization in the Taurus Dark Clouds : The Optical Properties of Dust near the Diffuse/Dense Cloud Interface», vol. 547, n° 2, p. 872–884. 9
- WICKRAMASINGHE, D. T. et D. A. ALLEN. 1980, «The 3.4- $\mu$ m interstellar absorption feature», vol. 287, n° 5782, doi :10.1038/287518a0, p. 518, ISSN 1476-4687. URL <https://www.nature.com/articles/287518a0>. 11
- WICKRAMASINGHE, N. C. 1963, «On graphite particles as interstellar grains, II», vol. 126, doi :10.1093/mnras/126.1.99, p. 99. 39

- WICKRAMASINGHE, N. C. 1970/ed, «Extinction curves for graphite-silicate grain mixtures», vol. 36, doi :10.1017/S0074180900101822, p. 42–49, ISSN 0074-1809. URL <https://www.cambridge.org/core/journals/symposium-international-astronomical-union/article/extinction-curves-for-graphitesilicate-grain-mixtures/96B013EA8B20B86E460C7C0E7A5DB0AE>. 39
- WILLIAMS, J. P. et W. M. J. BEST. 2014, «A Parametric Modeling Approach to Measuring the Gas Masses of Circumstellar Disks», vol. 788, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/788/1/59, p. 59, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/788/i=1/a=59>. 46
- WILLIAMS, J. P. et L. A. CIEZA. 2011, «Protoplanetary Disks and Their Evolution», vol. 49, n° 1, doi :10.1146/annurev-astro-081710-102548, p. 67–117, ISSN 0066-4146, 1545-4282. URL <http://arxiv.org/abs/1103.0556>. 46
- WINN, J. N. et D. C. FABRYCKY. 2015, «The Occurrence and Architecture of Exoplanetary Systems», vol. 53, n° 1, doi :10.1146/annurev-astro-082214-122246, p. 409–447. URL <https://doi.org/10.1146/annurev-astro-082214-122246>. 44
- WITT, A. N. et T. A. BOROSON. 1990, «Spectroscopy of Extended Red Emission in Reflection Nebulae», vol. 355, doi :10.1086/168752, p. 182, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1990ApJ...355..182W/abstract>. 21, 22
- WITT, A. N., K. D. GORDON, U. P. VIJH, P. H. SELL, T. L. SMITH et R.-H. XIE. 2006, «The Excitation of Extended Red Emission : New Constraints on Its Carrier from Hubble Space Telescope Observations of NGC 7023», vol. 636, doi :10.1086/498052, p. 303–315. 21
- WITT, A. N., S. MANDEL, P. H. SELL, T. DIXON et U. P. VIJH. 2008, «Extended Red Emission in High Galactic Latitude Interstellar Clouds», vol. 679, n° 1, doi :10.1086/587131, p. 497–511, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1086%2F587131>. 21
- WOITKE, P. 2006, «Too little radiation pressure on dust in the winds of oxygen-rich AGB stars», vol. 460, n° 2, doi :10.1051/0004-6361:20066322, p. L9–L12, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2006/47/aa6322-06/aa6322-06.html>. 40
- WRIGHT, C. M., T. DO DUY et W. LAWSON. 2016, «Absorption at 11  $\mu$ m in the interstellar medium and embedded sources : Evidence for crystalline silicates», vol. 457, n° 2, doi :10.1093/mnras/stw041, p. 1593. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2016MNRAS.457.1593W/abstract>. 13
- YAMAGISHI, M., H. KANEDA, D. ISHIHARA, T. KONDO, T. ONAKA, T. SUZUKI et Y. C. MINH. 2012, «AKARI near-infrared spectroscopy of the aromatic and aliphatic hydrocarbon emission features in the galactic superwind of M 82», vol. 541, doi :10.1051/0004-6361/201218904, p. A10. 15
- VAN ZADELHOFF, G.-J., E. F. VAN DISHOECK, W.-F. THI et G. A. BLAKE. 2001, «Submillimeter lines from circumstellar disks around pre-main sequence stars», vol. 377, n° 2, doi :10.1051/0004-6361:20011137, p. 566–580, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2001/38/aa10460/aa10460.html>. 46
- ZASOWSKI, G., F. KEMPER, D. M. WATSON, E. FURLAN, C. J. BOHAC, C. HULL et J. D. GREEN. 2009, «SPITZERINFRARED SPECTROGRAPH OBSERVATIONS OF CLASS I/II OBJECTS IN TAURUS : COMPOSITION AND THERMAL HISTORY OF THE CIRCUMStELLAR ICES», vol. 694, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/694/1/459, p. 459–478, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088%2F0004-637x%2F694%2F1%2F459>. 13
- ZONCA, A., C. CECCHI-PESTELLINI, G. MULAS et G. MALLOCI. 2011, «Modelling peculiar extinction curves», vol. 410, doi :10.1111/j.1365-2966.2010.17571.x, p. 1932–1938. 40

- ZSOM, A., C. W. ORMEL, C. GÜTTLER, J. BLUM et C. P. DULLEMOND. 2010, «The outcome of protoplanetary dust growth : Pebbles, boulders, or planetesimals? - II. Introducing the bouncing barrier», vol. 513, doi :10.1051/0004-6361/200912976, p. A57, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/200912976>. 49
- ZUBKO, V., E. DWEK et R. G. ARENDT. 2004, «Interstellar Dust Models Consistent with Extinction, Emission, and Abundance Constraints», vol. 152, doi :10.1086/382351, p. 211–249, ISSN 0067-0049. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2004ApJS..152..211Z>. 39
- ÖBERG, K. I., C. QI, J. K. J. FOGEL, E. A. BERGIN, S. M. ANDREWS, C. ESPAILLAT, T. A. VAN KEMPEN, D. J. WILNER et I. PASCUCCI. 2010, «THE DISK IMAGING SURVEY OF CHEMISTRY WITH SMA. I. TAURUS PROTOPLANETARY DISK DATA», vol. 720, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/720/1/480, p. 480–493, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088/0004-637X/720/1/480>. 45

## Chapitre 2

- ADEL, M. E., O. AMIR, R. KALISH et L. C. FELDMAN. 1989, «Ion-beam-induced hydrogen release from a-C:H : A bulk molecular recombination model», vol. 66, doi :10.1063/1.344116, p. 3248–3251. 59, 66
- ANGUS, J. C. et F. JANSEN. 1988, «Dense “diamondlike” hydrocarbons as random covalent networks», vol. 6, p. 1778–1782. 57
- BOCCHIO, M., A. P. JONES et J. D. SLAVIN. 2014, «A re-evaluation of dust processing in supernova shock waves», vol. 570, doi :10.1051/0004-6361/201424368, p. A32. 56
- BOHREN, C. F. et D. R. HUFFMAN. 1998, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley and Sons : New York – Chichester – Brisbane – Toronto – Singapore. 85
- BOUTÉRAON, T., E. HABART, N. YSARD, A. P. JONES, E. DARTOIS et T. PINO. 2019, «Carbonaceous nano-dust emission in proto-planetary discs : The aliphatic-aromatic components», vol. 623, doi :10.1051/0004-6361/201834016, p. A135. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019A%26A...623A.135B/abstract>. 77, 79, VII
- COMPIÈGNE, M., L. VERSTRAETE, A. JONES, J.-P. BERNARD, F. BOULANGER, N. FLAGEY, J. LE BOURLOT, D. PARADIS et N. YSARD. 2011, «The global dust SED : Tracing the nature and evolution of dust with DustEM», vol. 525, doi :10.1051/0004-6361/201015292, p. A103, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2011A%26A...525A.103C>. 68, 73, 75, 80, 81, VII
- DARTOIS, E., O. MARCO, G. M. MUÑOZ-CARO, K. BROOKS, D. DEBOFFLE et L. D’ HENDECOURT. 2004a, «Organic matter in Seyfert 2 nuclei : Comparison with our Galactic center lines of sight», vol. 423, n° 2, doi :10.1051/0004-6361:20047067, p. 549–558, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2004/32/aa0067-04/aa0067-04.html>. 60
- DARTOIS, E., G. M. MUÑOZ CARO, D. DEBOFFLE et L. D’ HENDECOURT. 2004b, «Diffuse interstellar medium organic polymers», vol. 423, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:200400032, p. L33–L36, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361:200400032>. 60
- DESERT, F.-X., F. BOULANGER et J. L. PUGET. 1990, «Interstellar dust models for extinction and emission», vol. 237, p. 215–236, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1990A%26A...237..215D>. 73, 75, 80, 81, VII
- DESERT, F. X., F. BOULANGER et S. N. SHORE. 1986, «Grain temperature fluctuations - A key to infrared spectra», vol. 160, p. 295–300, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1986A%26A...160..295D>. 68

- DRAINE, B. T. 1988, «The Discrete-Dipole Approximation and Its Application to Interstellar Graphite Grains», vol. 333, doi :10.1086/166795, p. 848, ISSN 0004-637X. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1988ApJ...333..848D/abstract>. 85
- DRAINE, B. T. et P. J. FLATAU. 1994, «Discrete-dipole approximation for scattering calculations», vol. 11, n° 4, doi :10.1364/JOSAA.11.001491, p. 1491, ISSN 0740-3232. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1994JOSAA..11.1491D/abstract>. 85
- DRAINE, B. T. et A. LI. 2001, «Infrared emission from interstellar dust. I. Stochastic heating of small grains», vol. 551, n° 2, p. 807. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/320227/meta>. 73, 75, 80, 81, VII
- DÖHLER, G. H., R. DANDOLOFF et H. BILZ. 1980, «A topological-dynamical model of amorphycity», vol. 42, n° 1, doi :10.1016/0022-3093(80)90010-1, p. 87–95, ISSN 0022-3093. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022309380900101>. 57
- FANCIULLO, L., V. GUILLET, G. ANIANO, A. P. JONES, N. YSARD, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, E. BOULANGER et M. KÖHLER. 2015, «Dust models post-Planck : Constraining the far-infrared opacity of dust in the diffuse interstellar medium», vol. 580, doi :10.1051/0004-6361/201525677, p. A136, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2015/08/aa25677-15/aa25677-15.html>. 69
- GODARD, M., G. FÉRAUD, M. CHABOT, Y. CARPENTIER, T. PINO, R. BRUNETTO, J. DUPRAT, C. ENGRAND, P. BRÉCHIGNAC et L. D' HENDECOURT. 2011, «Ion irradiation of carbonaceous interstellar analogues-Effects of cosmic rays on the 3.4  $\mu\text{m}$  interstellar absorption band», vol. 529, p. A146. 59, 66
- HABING, H. J. 1968, «The interstellar radiation density between 912 Å and 2400 Å», vol. 19, p. 421, ISSN 0365-8910. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1968BAN....19..421H>. 73
- JENA. 2008, «Databases of Dust Optical Properties», URL <https://www.astro.uni-jena.de/Laboratory/Database/databases.html>. 62
- JOBLIN, C., L. D' HENDECOURT, A. LEGER et D. DEFOURNEAU. 1994, «Infrared spectroscopy of gas-phase PAH molecules. 1 : Role of the physical environment», vol. 281, p. 923–936. 60
- JONES. 2012a, «Variations on a theme – the evolution of hydrocarbon solids - I. Compositional and spectral modelling–the eRCN and DG models», vol. 540, p. A1. URL [http://www.aanda.org/articles/aa/full\\_html/2012/04/aa17623-11/aa17623-11.html](http://www.aanda.org/articles/aa/full_html/2012/04/aa17623-11/aa17623-11.html). 56, 57, 59, 60, 62, 64, 68, VI
- JONES. 2012b, «Variations on a theme – the evolution of hydrocarbon solids - II. Optical property modelling – the optEC(s) model», vol. 540, doi :10.1051/0004-6361/201117624, p. A2, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201117624>. 56, 60, 63, 64, 65, 68, VI
- JONES, A. 2015, «Interstellar dust modelling : Interfacing laboratory, theoretical and observational studies (The THEMIS model)», . 56
- JONES, A. P. 1990, «Carbon atom clusters in random covalent networks : PAHs as an integral component of interstellar HAC», vol. 247, p. 305–310, ISSN 0035-8711. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1990MNRAS.247..305J>. 57
- JONES, A. P. 2012a, «Variations on a theme - the evolution of hydrocarbon solids. III. Size-dependent properties - the optEC(s)(a) model», vol. 542, doi :10.1051/0004-6361/201118483, p. A98, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2012A%26A...542A..98J>. 56, 64, 66, 68, VI

- JONES, A. P. 2012b, «Variations on a theme – the evolution of hydrocarbon solids (Corrigendum) - III. Size-dependent properties – the optEC(s)(a) model», vol. 545, doi :10.1051/0004-6361/201118483e, p. C3, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201118483e>. 67, VI
- JONES, A. P. 2014, «A framework for resolving the origin, nature and evolution of the diffuse interstellar band carriers?», vol. 100, doi :10.1016/j.pss.2013.11.011, p. 26–31. 56, 69
- JONES, A. P. 2016, «Dust evolution, a global view I. Nanoparticles, nascence, nitrogen and natural selection ... joining the dots», vol. 3, n° 12, doi:10.1098/rsos.160221, p. 160 221, ISSN 2054-5703. URL <http://rsos.royalsocietypublishing.org/content/3/12/160221>. 69
- JONES, A. P., L. FANCIULLO, M. KÖHLER, L. VERSTRAETE, V. GUILLET, M. BOCCHIO et N. YSARD. 2013, «The evolution of amorphous hydrocarbons in the ISM : Dust modelling from a new vantage point», vol. 558, doi :10.1051/0004-6361/201321686, p. A62, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201321686>. 56, 61, 69, 70, 71, 72, VI, IX
- JONES, A. P. et E. HABART. 2015, «H2 formation via the UV photo-processing of a-C :H nanoparticles», vol. 581, doi :10.1051/0004-6361/201526487, p. A92, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2015/09/aa26487-15/aa26487-15.html>. 56
- JONES, A. P., M. KÖHLER, N. YSARD, M. BOCCHIO et L. VERSTRAETE. 2017, «The global dust modelling framework THEMIS», vol. 602, doi :10.1051/0004-6361/201630225, p. A46. 56, 84
- JONES, A. P., M. KÖHLER, N. YSARD, E. DARTOIS, M. GODARD et L. GAVILAN. 2016, «Mantle formation, coagulation, and the origin of cloud/core shine - I. Modelling dust scattering and absorption in the infrared», vol. 588, doi :10.1051/0004-6361/201527488, p. A43, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201527488>. 56
- JONES, A. P., N. YSARD, M. KÖHLER, L. FANCIULLO, M. BOCCHIO, E. MICELOTTA, L. VERSTRAETE et V. GUILLET. 2014, «The cycling of carbon into and out of dust», vol. 168, n° 0, doi :10.1039/C3FD00128H, p. 313–326, ISSN 1364-5498. URL <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/fd/c3fd00128h>. 68, 69
- KASSAVETIS, S., P. PATSALAS, S. LOGOTHETIDIS, J. ROBERTSON et S. KENNOU. 2007, «Dispersion relations and optical properties of amorphous carbons», vol. 16, p. 1813–1822. 63
- KLARMANN, L., M. BENISTY, M. MIN, C. DOMINIK, J.-P. BERGER, L. B. F. M. WATERS, J. KLUSKA, B. LAZAREFF et J.-B. LE BOUQUIN. 2017, «Interferometric evidence for quantum heated particles in the inner region of protoplanetary disks around Herbig stars», vol. 599, doi : 10.1051/0004-6361/201628820, p. A80, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2017A%26A...599A..80K>. 73
- KÖHLER, M., V. GUILLET et A. JONES. 2011, «Aggregate dust connections and emissivity enhancements», vol. 528, doi :10.1051/0004-6361/201016379, p. A96. 68
- KÖHLER, M., A. JONES et N. YSARD. 2014, «A hidden reservoir of Fe/FeS in interstellar silicates?», vol. 565, doi :10.1051/0004-6361/201423985, p. L9, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2014/05/aa23985-14/aa23985-14.html>. 56, 68, 84
- KÖHLER, M., B. STEPNIK, A. P. JONES, V. GUILLET, A. ABERGEL, I. RISTORCELLI et J.-P. BERNARD. 2012, «Dust coagulation processes as constrained by far-infrared observations», vol. 548, doi : 10.1051/0004-6361/201218975, p. A61. 68
- KÖHLER, M., N. YSARD et A. P. JONES. 2015, «Dust evolution in the transition towards the denser ISM : Impact on dust temperature, opacity, and spectral index», vol. 579, doi :10.1051/0004-6361/201525646, p. A15, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201525646>. 69, 71

- MATHIS, J. S. 1990, «Interstellar dust and extinction», vol. 28, doi :10.1146/annurev.aa.28.090190.000345, p. 37–70. 70, VI
- MATHIS, J. S., P. G. MEZGER et N. PANAGIA. 1983, «Interstellar radiation field and dust temperatures in the diffuse interstellar matter and in giant molecular clouds.», vol. 128. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/#abs/1983A&A...128..212M/abstract>. 73, 80
- MENNELLA, V., L. COLANGELI, E. BUSSOLETTI, G. MONACO, P. PALUMBO et A. ROTUNDI. 1995, «On the Electronic Structure of Small Carbon Grains of Astrophysical Interest», vol. 100, doi :10.1086/192212, p. 149–+. 62
- ORDAL, M. A., R. J. BELL, R. W. ALEXANDER, L. L. LONG et M. R. QUERRY. 1985, «Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared : Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Mo, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, V, and W.», vol. 24, n° 24, doi :10.1364/AO.24.004493, p. 4493–4499, ISSN 1539-4522. URL <https://www.osapublishing.org/abstract.cfm?uri=ao-24-24-4493>. 68
- ORDAL, M. A., R. J. BELL, R. W. ALEXANDER, L. A. NEWQUIST et M. R. QUERRY. 1988, «Optical properties of Al, Fe, Ti, Ta, W, and Mo at submillimeter wavelengths», vol. 27, n° 6, doi : 10.1364/AO.27.001203, p. 1203–1209, ISSN 1539-4522. URL <https://www.osapublishing.org/abstract.cfm?uri=ao-27-6-1203>. 68
- PARADIS, D., C. MÉNY, M. JUVELA, A. NORIEGA-CRESPO et I. RISTORCELLI. 2019, «Revisiting the dust properties in the molecular clouds of the Large Magellanic Cloud», , p. arXiv :1905.09622URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019arXiv190509622P/abstract>. 73
- PHILLIPS, J. C. 1979, «Structure of amorphous (Ge,Si)<sub>1-x</sub> alloys», vol. 42, doi :10.1103/PhysRevLett.42.1151, p. 1151–1154. 57
- PLANCK COLLABORATION, A. ABERGEL, P. A. R. ADE, N. AGHANIM, M. ARNAUD, M. ASHDOWN, J. AUMONT, C. BACCIGALUPI, A. BALBI, A. J. BANDAY et E. AL. 2011a, «Planck early results. XXIV. Dust in the diffuse interstellar medium and the Galactic halo», vol. 536, doi :10.1051/0004-6361/201116485, p. A24. 68
- PLANCK COLLABORATION, A. ABERGEL, P. A. R. ADE, N. AGHANIM, M. ARNAUD, M. ASHDOWN, J. AUMONT, C. BACCIGALUPI, A. BALBI, A. J. BANDAY, R. B. BARREIRO, J. G. BARTLETT, E. BATTANER, K. BENABED, A. BENOÎT, J.-P. BERNARD, M. BERSANELLI, R. BHATIA, J. J. BOCK, A. BONALDI, J. R. BOND, J. BORRILL, F. R. BOUCHET, F. BOULANGER, M. BUCHER, C. BURIGANA, P. CABELLA, J.-F. CARDOSO, A. CATALANO, L. CAYÓN, A. CHALLINOR, A. CHAMBALLU, L.-Y. CHIANG, C. CHIANG, P. R. CHRISTENSEN, D. L. CLEMENTS, S. COLOMBI, F. COUCHOT, A. COULAIS, B. P. CRILL, F. CUTTAIA, L. DANESE, R. D. DAVIES, R. J. DAVIS, P. DE BERNARDIS, G. DE GASPERIS, A. DE ROSA, G. DE ZOTTI, J. DELABROUILLE, J.-M. DELOUIS, F.-X. DÉSSERT, C. DICKINSON, K. DOBASHI, S. DONZELLI, O. DORÉ, U. DÖRL, M. DOUSPIS, X. DUPAC, G. EFSTATHIOU, T. A. ENS SLIN, H. K. ERIKSEN, F. FINELLI, O. FORNI, M. FRAILIS, E. FRANCESCHI, S. GALEOTTA, K. GANGA, M. GIARD, G. GIARDINO, Y. GIRAUD-HÉRAUD, J. GONZÁLEZ-NUEVO, K. M. GÓRSKI, S. GRATTON, A. GREGORIO, A. GRUPPUSO, V. GUILLET, F. K. HANSEN, D. HARRISON, S. HENROT-VERSILLÉ, D. HERRANZ, S. R. HILDEBRANDT, E. HIVON, M. HOBSON, W. A. HOLMES, W. HOVEST, R. J. HOYLAND, K. M. HUFFENBERGER, A. H. JAFFE, A. JONES, W. C. JONES, M. JUVELA, E. KEIHÄNEN, R. KESKITALO, T. S. KISNER, R. KNEISSL, L. KNOX, H. KURKI-SUONIO, G. LAGACHE, J.-M. LAMARRE, A. LASENBY, R. J. LAUREIJS, C. R. LAWRENCE, S. LEACH, R. LEONARDI, C. LEROY, M. LINDEN-VÖRNLE, M. LÓPEZ-CANIEGO, P. M. LUBIN, J. F. MACÍAS-PÉREZ, C. J. MACTAVISH, B. MAFFEI, N. MANDOLESI, R. MANN, M. MARIS, D. J. MARSHALL, P. MARTIN, E. MARTÍNEZ-GONZÁLEZ, S. MASI, S. MATARRESE, F. MATTHAI, P. MAZZOTTA, P. MCGEHEE, P. R. MEINHOLD, A. MELCHIORRI, L. MENDES, A. MENNELLA, S. MITRA, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, A. MONETI, L. MONTIER, G. MORGANTE, D. MORTLOCK, D. MUNSHI, A. MURPHY, P. NASELSKY,

- P. NATOLI, C. B. NETTERFIELD, H. U. NØRGAARD-NIELSEN, F. NOVIELLO, D. NOVIKOV, I. NOVIKOV, S. OSBORNE, F. PAJOT, R. PALADINI, F. PASIAN, G. PATANCHON, O. PERDEREAU, L. PEROTTO, F. PERROTTA, F. PIACENTINI, M. PIAT, S. PLASZCZYNSKI, E. POINTECOUTEAU, G. POLENTA, N. PONTHEIU, T. POUTANEN, G. PRÉZEAU, S. PRUNET, J.-L. PUGET, W. T. REACH, R. REBOLO, M. REINECKE, C. RENAULT, S. RICCIARDI, T. RILLER, I. RISTORCELLI, G. ROCHA, C. ROSSET, J. A. RUBIÑO-MARTÍN, B. RUSHOLME, M. SANDRI, D. SANTOS, G. SAVINI, D. SCOTT, M. D. SEIFFERT, P. SHELLARD, G. F. SMOOT, J.-L. STARCK, F. STIVOLI, V. STOLYAROV, R. SUDIWALA, J.-F. SYGNET, J. A. TAUBER, L. TERENCE, L. TOFFOLATTI, M. TOMASI, J.-P. TORRE, M. TRISTRAM, J. TUOVINEN, G. UMANA, L. VALENZIANO, L. VERSTRAETE, P. VIELVA, F. VILLA, N. VITTORIO, L. A. WADE, B. D. WANDELT, D. YVON, A. ZACCHEI et A. ZONCA. 2011b, «Planck early results. XXV. Thermal dust in nearby molecular clouds», vol. 536, doi :10.1051/0004-6361/201116483, p. A25. 68
- POLLACK, J. B., D. HOLLENBACH, S. BECKWITH, D. P. SIMONELLI, T. ROUSH et W. FONG. 1994, «Composition and radiative properties of grains in molecular clouds and accretion disks», vol. 421, doi :10.1086/173677, p. 615–639, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1994ApJ...421..615P>. 68
- PURCELL, E. M. et C. R. PENNYPACKER. 1973, «Scattering and Absorption of Light by Nonspherical Dielectric Grains», vol. 186, doi :10.1086/152538, p. 705. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1973ApJ...186..705P/abstract>. 85
- RISTEIN, J. 1998, «A comparative analysis of a-C :H by infrared spectroscopy and mass selected thermal effusion», vol. 84, n° 7, doi :10.1063/1.368563, p. 3836–3847, ISSN 0021-8979. URL <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.368563>. 60
- ROBERTSON, J. 1986, «Amorphous carbon», vol. 35, n° 4, doi :10.1080/00018738600101911, p. 317–374, ISSN 0001-8732. URL <http://dx.doi.org/10.1080/00018738600101911>. 60, 62
- ROBERTSON, J. et E. P. O'REILLY. 1987, «Electronic and atomic structure of amorphous carbon», vol. 35, doi :10.1103/PhysRevB.35.2946, p. 2946–2957. 60
- ROULEAU, F. et P. G. MARTIN. 1991, «Shape and clustering effects on the optical properties of amorphous carbon», vol. 377, doi :10.1086/170382, p. 526–540, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1991ApJ...377..526R>. 62
- SCOTT, A. et W. W. DULEY. 1996, «Ultraviolet and Infrared Refractive Indices of Amorphous Silicates», vol. 105, doi :10.1086/192321, p. 401. 68
- SMITH. 1984, «Optical constants of a hydrogenated amorphous carbon film», vol. 55, n° 3, doi : 10.1063/1.333135, p. 764–771, ISSN 0021-8979. URL <http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.333135>. 62
- STAUFFER, D. et A. AHARONY. 1994, *Introduction to Percolation Theory*, revised second éd., CRC Press. 59
- TAMOR, M. A. et C. H. WU. 1990, «Graphitic network models of “diamondlike” carbon», vol. 67, doi :10.1063/1.345808, p. 1007–1012. 59, 60
- TAUC, J., R. GRIGOROVICI et A. VANCU. 1966, «Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium», vol. 15, doi :10.1002/pssb.19660150224, p. 627–637. 62
- THORPE, M. 1983, «Continuous deformations in random networks», vol. 57, doi :10.1016/0022-3093(83)90424-6, p. 355–370. 57
- VERSTRAETE, L., C. PECH, C. MOUTOU, K. SELLGREN, C. M. WRIGHT, M. GIARD, A. LÉGER, R. TIMMERMANN et S. DRAPATZ. 2001, «The Aromatic Infrared Bands as seen by ISO-SWS : Probing the PAH model», vol. 372, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20010515, p. 981–997, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20010515>. 60

- WEINGARTNER, J. C. et B. T. DRAINE. 2001, «Dust Grain Size Distributions and Extinction in the Milky Way, LMC, and SMC», vol. 548, n° 1, doi :10.1086/318651, p. 296–309, ISSN 0004-637X, 1538-4357. URL <http://arxiv.org/abs/astro-ph/0008146>. 80
- WEXLER, A. 1967, «Integrated Intensities of Absorption Bands in Infrared Spectroscopy», vol. 1, doi :10.1080/05704926708547581, p. 29–98. 60
- YSARD, N., A. P. JONES, K. DEMYK, T. BOUTÉRAON et M. KOEHLER. 2018, «The optical properties of dust : The effects of composition, size, and structure», vol. 617, doi :10.1051/0004-6361/201833386, p. A124, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2018A%26A...617A.124Y>. 84, 85, 86, 87, VII, VIII
- YSARD, N., M. KÖHLER, A. JONES, E. DARTOIS, M. GODARD et L. GAVILAN. 2016a, «Mantle formation, coagulation, and the origin of cloud/core shine. II. Comparison with observations», vol. 588, doi :10.1051/0004-6361/201527487, p. A44, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2016A%26A...588A..44Y>. 56, 69, 71
- YSARD, N., M. KÖHLER, A. JONES, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, A. ABERGEL et L. FANCIULLO. 2015, «Dust variations in the diffuse interstellar medium : Constraints on Milky Way dust from Planck-HFI observations», vol. 577, doi :10.1051/0004-6361/201425523, p. A110, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2015A%26A...577A.110Y>. 56, 68, 69
- YSARD, N., M. KÖHLER, A. JONES, M.-A. MIVILLE-DESCHÊNES, A. ABERGEL et L. FANCIULLO. 2016b, «Dust variations in the diffuse interstellar medium : Constraints on Milky Way dust from Planck-HFI observations (Corrigendum)», vol. 593, doi :10.1051/0004-6361/201425523e, p. C4, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2016A%26A...593C...4Y>. 56
- ZUBKO, V. G., V. MENNELLA, L. COLANGELI et E. BUSSOLETTI. 1996, «Optical constants of cosmic carbon analogue grains — I. Simulation of clustering by a modified continuous distribution of ellipsoids», vol. 282, n° 4, doi :10.1093/mnras/282.4.1321, p. 1321–1329, ISSN 0035-8711. URL <https://academic.oup.com/mnras/article/282/4/1321/1049227/Optical-constants-of-cosmic-carbon-analogue-grains>. 62

## Chapitre 3

- ACKE, B. et M. E. VAN DEN ANCKER. 2004, «ISO spectroscopy of disks around Herbig Ae/Be stars», vol. 426, n° 1, doi :10.1051/0004-6361:20040400, p. 151–170, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.edpsciences.org/10.1051/0004-6361:20040400>. 90
- ACKE, B., J. BOUWMAN, A. JUHÁSZ, T. HENNING, M. E. VAN DEN ANCKER, G. MEEUS, A. TIELENS et L. WATERS. 2010, «Spitzer’s view on aromatic and aliphatic hydrocarbon emission in Herbig Ae stars», vol. 718, n° 1, p. 558. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0004-637X/718/1/558/meta>. 90
- BERNÉ, O., C. JOBLIN, A. FUENTE et F. MÉNARD. 2009, «What can we learn about protoplanetary disks from analysis of mid-infrared carbonaceous dust emission?», vol. 495, n° 3, doi : 10.1051/0004-6361:200810559, p. 827. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2009A%26A...495..827B/abstract>. 112
- BILLER, B. A., J. MALES, T. RODIGAS, K. MORZINSKI, L. M. CLOSE, A. JUHÁSZ, K. B. FOLLETTE, S. LACOUR, M. BENISTY, A. SICILIA-AGUILAR, P. M. HINZ, A. WEINBERGER, T. HENNING, J.-U. POTT, M. BONNEFOY et R. KÖHLER. 2014, «An Enigmatic Point-like Feature within the HD 169142 Transitional Disk», vol. 792, doi :10.1088/2041-8205/792/1/L22, p. L22, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2014ApJ...792L..22B>. 90



- VAN BOEKEL, R., M. MIN, L. B. F. M. WATERS, A. DE KOTER, C. DOMINIK, M. E. VAN DEN ANCKER et J. BOUWMAN. 2005, «A 10  $\mu\text{m}$  spectroscopic survey of Herbig Ae star disks : Grain growth and crystallization», vol. 437, doi :10.1051/0004-6361:20042339, p. 189–208, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2005A%26A...437..189V>. 90
- BOUTÉRAON, T., E. HABART, N. YSARD, A. P. JONES, E. DARTOIS et T. PINO. 2019, «Carbonaceous nano-dust emission in proto-planetary discs : The aliphatic-aromatic components», vol. 623, doi :10.1051/0004-6361/201834016, p. A135. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019A%26A...623A.135B/abstract>. 112
- BOUWMAN, J., G. MEEUS, A. DE KOTER, S. HONY, C. DOMINIK et L. B. F. M. WATERS. 2001, «Processing of silicate dust grains in Herbig Ae/Be systems», vol. 375, doi :10.1051/0004-6361:20010878, p. 950–962, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2001A%26A...375..950B>. 90
- BRAUER, R., S. WOLF, S. REISSL et F. OBER. 2017, «Magnetic fields in molecular clouds : Limitations of the analysis of Zeeman observations», vol. 601, doi :10.1051/0004-6361/201629001, p. A90, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2017/05/aa29001-16/aa29001-16.html>. 112
- CURRIE, T., R. CLOUTIER, S. BRITAIN, C. GRADY, A. BURROWS, T. MUTO, S. J. KENYON et M. J. KUCHNER. 2015, «Resolving the HD 100546 Protoplanetary System with the Gemini Planet Imager : Evidence for Multiple Forming, Accreting Planets», vol. 814, doi :10.1088/2041-8205/814/2/L27, p. L27, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2015ApJ...814L..27C>. 90
- GEERS, V. C., E. F. VAN DISHOCK, R. VISSER, K. M. PONTOPPIDAN, J.-C. AUGEREAU, E. HABART et A. M. LAGRANGE. 2007, «Spatially extended polycyclic aromatic hydrocarbons in circumstellar disks around T Tauri and Herbig Ae stars», vol. 476, doi :10.1051/0004-6361:20078466, p. 279–289, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2007A%26A...476..279G>. 90
- HABART, E., A. NATTA, L. TESTI et M. CARBILLET. 2006, «Spatially resolved PAH emission in the inner disks of Herbig Ae/Be stars», vol. 449, n° 3, p. 1067–1075. URL <http://www.aanda.org/articles/aa/ps/2006/15/aa2994-05.ps.gz>. 90
- HU, J. Y., P. S. THE et D. DE WINTER. 1989, «Photometric and spectroscopic study of three candidate Herbig Ae/Be stars - HD 37411, HD 100546, and HD 104237», vol. 208, p. 213–218, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1989A%26A...208..213H>. 90
- KELLER, L. D., G. C. SLOAN, W. J. FORREST, S. AYALA, P. D’ALESSIO, S. SHAH, N. CALVET, J. NAJITA, A. LI, L. HARTMANN et al.. 2008, «PAH emission from Herbig Ae/Be stars», vol. 684, n° 1, p. 411. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/589818/meta>. 90
- KÖHLER, M., E. HABART, H. ARAB, J. BERNARD-SALAS, H. AYASSO, A. ABERGEL, A. ZAVAGNO, E. POLEHAMPTON, M. H. D. VAN DER WIEL, D. A. NAYLOR, G. MAKIWA, K. DASSAS, C. JOBLIN, P. PILLERI, O. BERNÉ, A. FUENTE, M. GERIN, J. R. GOICOECHEA et D. TEYSSIER. 2014, «Physical structure of the photodissociation regions in NGC 7023 - Observations of gas and dust emission with Herschel», vol. 569, doi :10.1051/0004-6361/201322711, p. A109, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <https://www.aanda.org/articles/aa/abs/2014/09/aa22711-13/aa22711-13.html>. 112
- LORD, S. D. 1992, «A new software tool for computing Earth’s atmospheric transmission of near- and far-infrared radiation», URL <https://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=19930010877>. 94, VIII

- MARCHAL, A., M.-A. MIVILLE-DESCHENES, F. ORIEUX, N. GAC, C. SOUSSEN, M.-J. LESOT, A. R. D'ALLONNES et Q. SALOME. 2019, «ROHSA : Regularized Optimization for Hyper-Spectral Analysis - Application to phase separation of 21 cm data», URL <http://arxiv.org/abs/1905.00658>. 112
- MEEUS, G., L. B. F. M. WATERS, J. BOUWMAN, M. E. VAN DEN ANCKER, C. WAELKENS et K. MALFAIT. 2001, «ISO spectroscopy of circumstellar dust in 14 Herbig Ae/Be systems : Towards an understanding of dust processing», vol. 365, n° 3, doi :10.1051/0004-6361:20000144, p. 476–490, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20000144>. 90
- OSORIO, M., G. ANGLADA, C. CARRASCO-GONZÁLEZ, J. M. TORRELLES, E. MACÍAS, L. F. RODRÍGUEZ, J. F. GÓMEZ, P. D'ALESSIO, N. CALVET, E. NAGEL et al.. 2014, «Imaging the Inner and Outer Gaps of the Pre-Transitional Disk of HD 169142 at 7 mm», vol. 791, n° 2, p. L36. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/2041-8205/791/2/L36/meta>. 90
- PILLERI, P., C. JOBLIN, F. BOULANGER et T. ONAKA. 2015, «Mixed aliphatic and aromatic composition of evaporating very small grains in NGC 7023 revealed by the 3.4/3.3  $\mu$  m ratio», vol. 577, doi :10.1051/0004-6361/201425590, p. A16, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201425590>. 112
- QUANZ, S. P., A. AMARA, M. R. MEYER, J. H. GIRARD, M. A. KENWORTHY et M. KASPER. 2015, «Confirmation and Characterization of the Protoplanet HD 100546 b—Direct Evidence for Gas Giant Planet Formation at 50 AU», vol. 807, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/807/1/64, p. 64, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/807/i=1/a=64>. 90
- REGGIANI, M., S. P. QUANZ, M. R. MEYER, L. PUEYO, O. ABSIL, A. AMARA, G. ANGLADA, H. AVENHAUS, J. H. GIRARD, C. CARRASCO GONZALEZ, J. GRAHAM, D. MAWET, F. MERU, J. MILLI, M. OSORIO, S. WOLFF et J.-M. TORRELLES. 2014, «Discovery of a Companion Candidate in the HD 169142 Transition Disk and the Possibility of Multiple Planet Formation», vol. 792, doi : 10.1088/2041-8205/792/1/L23, p. L23, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2014ApJ...792L..23R>. 90
- REISSL, S., S. WOLF et R. BRAUER. 2016, «Radiative transfer with POLARIS : I. Analysis of magnetic fields through synthetic dust continuum polarization measurements», vol. 593, doi :10.1051/0004-6361/201424930, p. A87, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361/201424930>. 112
- SCHÜTZ, O., G. MEEUS et M. F. STERZIK. 2005, «Mid-IR observations of circumstellar disks. I. Pre-main sequence objects», vol. 431, doi :10.1051/0004-6361:20041489, p. 165. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/#abs/2005A&A...431..165S/abstract>. 90
- SEOK, J. Y. et A. LI. 2017, «Polycyclic Aromatic Hydrocarbon in Protoplanetary Disks around Herbig Ae/Be and T Tauri Stars», vol. 835, n° 2, doi :10.3847/1538-4357/835/2/291, p. 291, ISSN 1538-4357. URL <http://arxiv.org/abs/1612.09454>. 90, 112
- SLOAN, G. C., L. D. KELLER, W. J. FORREST, E. LEIBENSPERGER, B. SARGENT, A. LI, J. NAJITA, D. M. WATSON, B. R. BRANDL, C. H. CHEN, J. D. GREEN, F. MARKWICK-KEMPER, T. L. HERTER, P. D'ALESSIO, P. W. MORRIS, D. J. BARRY, P. HALL, P. C. MYERS et J. R. HOUCK. 2005, «Mid-Infrared Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission in Herbig Ae/Be Stars», vol. 632, n° 2, doi :10.1086/444371, p. 956, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/632/i=2/a=956>. 90
- WOITKE, P., M. MIN, C. PINTE, W.-F. THI, I. KAMP, C. RAB, F. ANTHONIOZ, S. ANTONELLINI, C. BALDOVIN-SAAVEDRA, A. CARMONA et al.. 2016, «Consistent dust and gas models for protoplanetary disks-I. Disk shape, dust settling, opacities, and PAHs», vol. 586, p. A103. URL <http://www.aanda.org/articles/aa/pdf/forth/aa26538-15.pdf>. 112

## Chapitre 4

- ACKE, B., J. BOUWMAN, A. JUHÁSZ, T. HENNING, M. E. VAN DEN ANCKER, G. MEEUS, A. TIELENS et L. WATERS. 2010, «Spitzer's view on aromatic and aliphatic hydrocarbon emission in Herbig Ae stars», vol. 718, n° 1, p. 558. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0004-637X/718/1/558/meta>. 116
- ARDILA, D. R., D. A. GOLIMOWSKI, J. E. KRIST, M. CLAMPIN, H. C. FORD et G. D. ILLINGWORTH. 2007, «Hubble space telescope advanced camera for surveys coronagraphic observations of the dust surrounding HD 100546», vol. 665, n° 1, p. 512. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1086/519296/meta>. 116
- AUGEREAU, J. C., A. M. LAGRANGE, D. MOUILLET et F. MÉNARD. 2001, «HST/NICMOS2 coronagraphic observations of the circumstellar environment of three old PMS stars : HD 100546, SAO 206462 and MWC 480», vol. 365, n° 2, p. 78–89. URL <http://www.aanda.org/articles/aa/ps/2001/02/aa10197.ps.gz>. 116
- AVENHAUS, H., S. P. QUANZ, M. R. MEYER, S. D. BRITAIN, J. S. CARR et J. R. NAJITA. 2014, «HD100546 MULTI-EPOCH SCATTERED LIGHT OBSERVATIONS», vol. 790, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/790/1/56, p. 56, ISSN 0004-637X. URL <https://doi.org/10.1088/0004-637X/790/1/56>. 116
- BENISTY, M., E. TATULLI, F. MÉNARD et M. R. SWAIN. 2010, «The complex structure of the disk around HD 100546 - The inner few astronomical units», vol. 511, doi :10.1051/0004-6361/200913590, p. A75, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/200913590>. 116, 136
- BOCCALETTI, A., E. PANTIN, A.-M. LAGRANGE, J.-C. AUGEREAU, H. MEHEUT et S. P. QUANZ. 2013, «Multiple spiral patterns in the transitional disk of HD 100546», vol. 560, p. A20. URL [http://www.aanda.org/articles/aa/full\\_html/2013/12/aa22365-13/aa22365-13.html](http://www.aanda.org/articles/aa/full_html/2013/12/aa22365-13/aa22365-13.html). 116
- VAN BOEKEL, R., L. B. F. M. WATERS, C. DOMINIK, C. P. DULLEMOND, A. G. G. M. TIELENS et A. DE KOTER. 2004, «Spatially and spectrally resolved 10  $\mu$ m emission in Herbig Ae/Be stars», vol. 418, n° 1, doi :10.1051/0004-6361:20034331, p. 177–184, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20034331>. 116
- BOUTÉRAON, T., E. HABART, N. YSARD, A. P. JONES, E. DARTOIS et T. PINO. 2019, «Carbonaceous nano-dust emission in proto-planetary discs : The aliphatic-aromatic components», vol. 623, doi :10.1051/0004-6361/201834016, p. A135. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019A%26A...623A.135B/abstract>. 116
- BRITAIN, S. D., J. R. NAJITA et J. S. CARR. 2009, «Tracing the inner edge of the disk around HD 100546 with rovibrational CO emission lines», vol. 702, n° 1, p. 85. URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0004-637X/702/1/85/meta>. 116
- CURRIE, T., R. CLOUTIER, S. BRITAIN, C. GRADY, A. BURROWS, T. MUTO, S. J. KENYON et M. J. KUCHNER. 2015, «Resolving the HD 100546 Protoplanetary System with the Gemini Planet Imager : Evidence for Multiple Forming, Accreting Planets», vol. 814, doi :10.1088/2041-8205/814/2/L27, p. L27, ISSN 0004-637X. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2015ApJ...814L..27C>. 116
- FOLLETTE, K. B., J. RAMEAU, R. DONG, L. PUEYO, L. M. CLOSE, G. DUCHENE, J. FUNG, C. LEONARD, B. MACINTOSH, J. R. MALES, C. MAROIS, M. A. MILLAR-BLANCHAER, K. M. MORZINSKI, W. MULLEN, M. PERRIN, E. SPIRO, J. WANG, S. M. AMMONS, V. P. BAILEY, T. BARMAN, J. BULGER, J. CHILCOTE, T. COTTEN, R. J. DE ROSA, R. DOYON, M. P. FITZGERALD, S. J. GOODSSELL, J. R. GRAHAM, A. Z. GREENBAUM, P. HIBON, L.-W. HUNG, P. INGRAHAM, P. KALAS, Q. KONOPACKY,

- J. E. LARKIN, J. MAIRE, F. MARCHIS, S. METCHEV, E. L. NIELSEN, R. OPPENHEIMER, D. PALMER, J. PATIENCE, L. POYNEER, A. RAJAN, F. T. RANTAKYRO, D. SAVRANSKY, A. C. SCHNEIDER, A. SIVARAMAKRISHNAN, I. SONG, R. SOUMMER, S. THOMAS, D. VEGA, J. K. WALLACE, K. WARD-DUONG, S. WIKTOROWICZ et S. WOLFF. 2017, «Complex Spiral Structure in the HD 100546 Transitional Disk as Revealed by GPI and MagAO», URL <http://arxiv.org/abs/1704.06260>. 116
- GAIA COLLABORATION, A. G. A. BROWN, A. VALLENARI, T. PRUSTI, J. H. J. DE BRUIJNE, C. BABUSIAUX et C. A. L. BAILER-JONES. 2018, «Gaia Data Release 2. Summary of the contents and survey properties», vol. 1804, p. arXiv :1804.09365. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2018arXiv180409365G>. 116
- GARUFI, A., S. P. QUANZ, H. M. SCHMID, G. D. MULDER, H. AVENHAUS, A. BOCCALETTI, C. GINSKI, M. LANGLOIS, T. STOLKER, J.-C. AUGEREAU, M. BENISTY, B. LOPEZ, C. DOMINIK, R. GRATTON, T. HENNING, M. JANSON, F. MÉNARD, M. R. MEYER, C. PINTE, E. SISSA, A. VIGAN, A. ZURLO, A. BAZZON, E. BUENZLI, M. BONNEFOY, W. BRANDNER, G. CHAUVIN, A. CHEETHAM, M. CUDEL, S. DESIDERA, M. FELDT, R. GALICHER, M. KASPER, A.-M. LAGRANGE, J. LANNIER, A. L. MAIRE, D. MESA, D. MOUILLET, S. PERETTI, C. PERROT, G. SALTER et F. WILD. 2016, «The SPHERE view of the planet-forming disk around HD 100546», vol. 588, doi :10.1051/0004-6361/201527940, p. A8, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201527940>. 116
- GRADY, C. A., E. F. POLOMSKI, T. HENNING, B. STECKLUM, B. E. WOODGATE, C. M. TELESCO, R. K. PIÑA, T. R. GULL, A. BOGGESS, C. W. BOWERS, F. C. BRUHWEILER, M. CLAMPIN, A. C. DANKS, R. F. GREEN, S. R. HEAP, J. B. HUTCHINGS, E. B. JENKINS, C. JOSEPH, M. E. KAISER, R. A. KIMBLE, S. KRAEMER, D. LINDLER, J. L. LINSKY, S. P. MARAN, H. W. MOOS, P. PLAIT, F. ROESLER, J. G. TIMOTHY et D. WEISTROP. 2001, «The Disk and Environment of the Herbig Be Star HD 100546», vol. 122, n° 6, doi :10.1086/324447, p. 3396, ISSN 1538-3881. URL <http://stacks.iop.org/1538-3881/122/i=6/a=3396>. 116
- GRADY, C. A., G. SCHNEIDER, K. HAMAGUCHI, M. L. SITKO, W. J. CARPENTER, D. HINES, K. A. COLLINS, G. M. WILLIGER, B. E. WOODGATE, T. HENNING, F. MÉNARD, D. WILNER, R. PETRE, P. PALUNAS, A. QUIRRENBACH, J. A. N. III, M. D. SILVERSTONE et J. S. KIM. 2007, «The Disk and Environment of a Young Vega Analog : HD 169142», vol. 665, n° 2, doi :10.1086/519757, p. 1391, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/665/i=2/a=1391>. 116
- HABART, E., A. NATTA, L. TESTI et M. CARBILLET. 2006, «Spatially resolved PAH emission in the inner disks of Herbig Ae/Be stars», vol. 449, n° 3, p. 1067–1075. URL <http://www.aanda.org/articles/aa/ps/2006/15/aa2994-05.ps.gz>. 116
- HU, J. Y., P. S. THE et D. DE WINTER. 1989, «Photometric and spectroscopic study of three candidate Herbig Ae/Be stars - HD 37411, HD 100546, and HD 104237», vol. 208, p. 213–218, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1989A%26A...208..213H>. 116
- LIU, W. M., P. M. HINZ, M. R. MEYER, E. E. MAMAJEK, W. F. HOFFMANN et J. L. HORA. 2003, «A Resolved Circumstellar Disk around the Herbig Ae Star HD 100546 in the Thermal Infrared», vol. 598, n° 2, doi :10.1086/380827, p. L111, ISSN 1538-4357. URL <http://stacks.iop.org/1538-4357/598/i=2/a=L111>. 116
- MALFAIT, K., C. WAELEKENS, L. WATERS, B. VANDENBUSSCHE, E. HUYGEN et M. S. DE GRAAUW. 1998, «The spectrum of the young star HD 100546 observed with the Infrared Space Observatory», vol. 332, p. L25–L28. URL <http://articles.adsabs.harvard.edu/full/1998A&A...332L..25M>. 116
- MARCHAL, A., M.-A. MIVILLE-DESCHENES, F. ORIEUX, N. GAC, C. SOUSSEN, M.-J. LESOT, A. R. D'ALLONNES et Q. SALOME. 2019, «ROHSA : Regularized Optimization for Hyper-Spectral Analysis - Application to phase separation of 21 cm data», URL <http://arxiv.org/abs/1905.00658>. 116

- MILEY, J. M., O. PANIĆ, T. J. HAWORTH, I. PASCUCCHI, M. WYATT, C. CLARKE, A. M. S. RICHARDS et T. RATZKA. 2019, «Asymmetric mid-plane gas in ALMA images of HD 100546», vol. 485, n° 1, doi : 10.1093/mnras/stz426, p. 739–752, ISSN 0035-8711. URL <http://academic.oup.com/mnras/article/485/1/739/5318641>. 116
- MULDERS, G. D., M. MIN, C. DOMINIK, J. H. DEBES et G. SCHNEIDER. 2013, «Why circumstellar disks are so faint in scattered light : The case of HD 100546», vol. 549, doi :10.1051/0004-6361/201219522, p. A112, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201219522>. 116
- PANIĆ, O., T. RATZKA, G. D. MULDER, C. DOMINIK, R. VAN BOEKEL, T. HENNING, W. JAFFE et M. MIN. 2014, «Resolving HD 100546 disc in the mid-infrared : Small inner disc and asymmetry near the gap», vol. 562, doi :10.1051/0004-6361/201219223, p. A101, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201219223>. 116
- PINEDA, J. E., J. SZULÁGYI, S. P. QUANZ, E. F. VAN DISHOCK, A. GARUFI, F. MERU, G. D. MULDER, L. TESTI, M. R. MEYER et M. REGGIANI. 2019, «High-resolution ALMA Observations of HD 100546 : Asymmetric Circumstellar Ring and Circumplanetary Disk Upper Limits», vol. 871, n° 1, doi :10.3847/1538-4357/aaf389, p. 48. URL <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019ApJ...871...48P/abstract>. 116
- VAN DER PLAS, G., M. E. VAN DEN ANCKER, B. ACKE, A. CARMONA, C. DOMINIK, D. FEDELE et L. B. F. M. WATERS. 2009, «Evidence for CO depletion in the inner regions of gas-rich protoplanetary disks», vol. 500, doi :10.1051/0004-6361/200811148, p. 1137–1141, ISSN 0004-6361. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/2009A%26A...500.1137V>. 116
- QUANZ, S. P., A. AMARA, M. R. MEYER, J. H. GIRARD, M. A. KENWORTHY et M. KASPER. 2015, «Confirmation and Characterization of the Protoplanet HD 100546 b—Direct Evidence for Gas Giant Planet Formation at 50 AU», vol. 807, n° 1, doi :10.1088/0004-637X/807/1/64, p. 64, ISSN 0004-637X. URL <http://stacks.iop.org/0004-637X/807/i=1/a=64>. 116
- RAMEAU, J., K. B. FOLLETTE, L. PUEYO, C. MAROIS, B. MACINTOSH, M. MILLAR-BLANCHAER, J. J. WANG, D. VEGA, R. DOYON, D. LAFRENIÈRE, E. L. NIELSEN, V. BAILEY, J. K. CHILCOTE, L. M. CLOSE, T. M. ESPOSITO, J. R. MALES, S. METCHEV, K. M. MORZINSKI, J.-B. RUFFIO, S. G. WOLFF, S. M. AMMONS, T. S. BARMAN, J. BULGER, T. COTTEN, R. J. D. ROSA, G. DUCHENE, M. P. FITZGERALD, S. GOODSSELL, J. R. GRAHAM, A. Z. GREENBAUM, P. HIBON, L.-W. HUNG, P. INGRAHAM, P. KALAS, Q. KONOPACKY, J. E. LARKIN, J. MAIRE, F. MARCHIS, R. OPPENHEIMER, D. PALMER, J. PATIENCE, M. D. PERRIN, L. POYNEER, A. RAJAN, F. T. RANTAKYRÖ, M. S. MARLEY, D. SAVRANSKY, A. C. SCHNEIDER, A. SIVARAMAKRISHNAN, I. SONG, R. SOUMMER, S. THOMAS, J. K. WALLACE, K. WARD-DUONG et S. WIKTOROWICZ. 2017, «An Optical/Near-infrared Investigation of HD 100546 b with the Gemini Planet Imager and MagAO», vol. 153, n° 6, doi :10.3847/1538-3881/aa6cae, p. 244, ISSN 1538-3881. URL <https://doi.org/10.3847%2F1538-3881%2Faa6cae>. 116
- SEOK, J. Y. et A. LI. 2017, «Polycyclic Aromatic Hydrocarbon in Protoplanetary Disks around Herbig Ae/Be and T Tauri Stars», vol. 835, n° 2, doi :10.3847/1538-4357/835/2/291, p. 291, ISSN 1538-4357. URL <http://arxiv.org/abs/1612.09454>. 116
- TATULLI, E., M. BENISTY, F. MÉNARD, P. VARNIÈRE, C. MARTIN-ZAÏDI, W.-F. THI, C. PINTE, F. MASSI, G. WEIGELT, K.-H. HOFMANN et R. G. PETROV. 2011, «Constraining the structure of the planet-forming region in the disk of the Herbig Be star HD 100546», vol. 531, doi : 10.1051/0004-6361/201016165, p. A1, ISSN 0004-6361, 1432-0746. URL <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201016165>. 116



**Titre :** Nano-poussières carbonées dans les disques protoplanétaires

**Mots clés :** nano-poussière carbonée, disque protoplanétaire, spectroscopie IR, modélisation

**Résumé :** Cette thèse s'intéresse aux signatures spectroscopiques des nano-particules carbonées dans l'infrarouge proche et moyen dans les disques protoplanétaires. Ces signatures sont largement observées dans le milieu interstellaire et les galaxies et représentent ainsi un outil essentiel pour étudier les conditions physiques qui y règnent. Notamment, leur étude dans les environnements circumstellaires d'étoiles de type Herbig contribue à notre connaissance de la formation des systèmes planétaires et du cycle de la matière dans la Voie lactée. Même si la poussière ne représente qu'un faible pourcentage de la matière galactique, elle est essentielle dans la formation d'espèces chimiques complexes, le chauffage photo-électrique du gaz, la balance énergétique ou la dynamique des structures. Ainsi, elle participe directement à l'évolution des disques protoplanétaires.

Ce travail s'appuie notamment sur les données d'observations spectroscopiques résolues spatialement obtenues avec l'instrument NaCo au VLT dans l'infrarouge proche entre 3 et 4  $\mu\text{m}$ . Le modèle THEMIS fournit un cadre d'interprétation pour les observations en proposant un modèle physique de la poussière dans lequel les propriétés optiques sont

calculées en considérant la composition, la structure et la taille de populations de grains. THEMIS propose un scénario d'évolution de celle-ci au travers des différentes phases du milieu interstellaire.

Les résultats obtenus montrent que des particules carbonées sub-nanométriques ayant une forte aromaticité sont présentes de manière étendue et structurée à la surface des disques protoplanétaires. Leur degré d'aromaticité augmente avec l'intensité du champ de rayonnement de l'étoile. De plus, l'observation de ces particules près de l'étoile suggère leur renouvellement continu. La modélisation de l'émission de la poussière dans les conditions des disques met en évidence les contributions des différentes populations selon la longueur d'onde et les conditions d'irradiation.

Ce travail s'inscrit dans la préparation de la mission du James Webb Space Telescope qui permettra d'observer notamment les disques protoplanétaires sur une large gamme infrarouge (0.6-28  $\mu\text{m}$ ). Ce travail a également conduit à la production de deux articles, un publié et l'autre soumis dans la revue *Astronomy & Astrophysics*.

**Title :** Carbonaceous nano-dust in protoplanetary disks

**Keywords :** carbonaceous nano-dust, protoplanetary disk, IR spectroscopy, modelling

**Abstract :** This thesis focuses on spectroscopic signatures of carbon nanoparticles in the near and mid-infrared in protoplanetary disks. These signatures are widely observed in the interstellar medium and galaxies and thus represent an essential tool for studying their physical conditions. In particular, their study in the circumstellar environments of Herbig stars contributes to our knowledge of the formation of planetary systems and the dust cycle in the Milky Way. Even if dust represents only a small percentage of galactic matter, it is key to the formation of complex chemical species, photoelectric gas heating, energy balance or structural dynamics. Thus, it participates directly in the evolution of protoplanetary disks.

This work is based in particular on spatially resolved spectroscopic observation data obtained with the NaCo instrument at the VLT in the near infrared between 3 and 4  $\mu\text{m}$ . The THEMIS model provides an interpretative framework for observations by proposing a physical dust model in which optical properties are calculated by considering the composition, structure

and size of grain populations. THEMIS proposes a scenario of its evolution through the different phases of the interstellar medium.

The results obtained show that carbon sub-nanoparticles with high aromaticity are present in a widespread and structured manner at the surface of protoplanetary disks. Their degree of aromaticity increases with the intensity of the stellar radiation field. Moreover, the observation of these particles close to the star suggests their continuous replenishment. Modelling the dust emission under disk conditions highlights the contributions of dust populations according to the wavelength and the radiation field.

This work is related to the preparation of the James Webb Space Telescope mission which will allow to observe protoplanetary disks over a wide infrared range (0.6-28  $\mu\text{m}$ ) with a resolution of 0.1". This work also led to the production of two articles, one published and the other submitted to the journal *Astronomy & Astrophysics*.

