



HAL
open science

Haute excitation de molécules dans les régions irradiées de formation stellaire et planétaire observées par le James Webb Space Telescope

Marion Zannese

► **To cite this version:**

Marion Zannese. Haute excitation de molécules dans les régions irradiées de formation stellaire et planétaire observées par le James Webb Space Telescope. Astrophysique galactique [astro-ph.GA]. Université Paris-Saclay, 2024. Français. NNT : 2024UPASP082 . tel-04760150

HAL Id: tel-04760150

<https://theses.hal.science/tel-04760150v1>

Submitted on 30 Oct 2024

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.

Haute excitation de molécules dans
les régions irradiées de formation
stellaire et planétaire observées par
le James Webb Space Telescope
*High excitation of molecules in irradiated star- and
planet-forming regions observed with the James Webb
Space Telescope*

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n° 127, Ecole Doctorale Astronomie et Astrophysique d'Île de
France (AAIF)

Spécialité de doctorat : Astronomie et Astrophysique
Graduate School : Physique. Référent : Faculté des Sciences d'Orsay

Thèse préparée dans la (ou les) unité(s) de recherche **Institut d'Astrophysique Spatiale
(Université Paris-Saclay, CNRS)**, sous la direction de **Emilie HABART**, Maîtresse de
conférence, le co-encadrement de **Benoît TABONE**, Chargé de recherche

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 26 septembre 2024, par

Marion ZANNESE

Composition du jury

Membres du jury avec voix délibérative

Jérôme PETY Astronome, Institut de Radioastronomie Millimétrique, France	Président
Pierre HILY-BLANT Maître de Conférence, HDR, Université Grenoble Alpes, Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble, France	Rapporteur & Examineur
Valentine WAKELAM Directrice de Recherche, Université de Bordeaux, Labora- toire d'Astrophysique de Bordeaux, France	Rapporteuse & Examinatrice
Ugo JACOVELLA Chargé de Recherche, Université Paris-Saclay, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, France	Examineur
Inga KAMP Professeure, University of Groningen, Kapteyn Astrono- mical Institute, The Netherlands	Examinatrice

Titre : Haute excitation de molécules dans les régions irradiées de formations stellaires et planétaires observées par le *James Webb Space Telescope*

Mots clés : Région de Photodissociation - Disque Protoplanétaire - JWST - Barre d'Orion - Milieu Interstellaire - Spectroscopie

Résumé : La rétroaction radiative par les étoiles massives, qui chauffe et agite le gaz du nuage environnant, est un mécanisme dominant limitant la formation stellaire et planétaire. En effet, les observations montrent que seule 1–5 % de la masse des nuages moléculaires est convertie en étoiles. Au cours de cette thèse, je me suis intéressée aux régions neutres, chaudes et irradiées entre les milieux ionisés et moléculaires froids. Plus particulièrement, j'ai étudié comment l'excitation à la formation de certaines molécules (OH, CH⁺ et CH₃⁺) permettaient d'établir des diagnostics simples et robustes pour contraindre les paramètres physiques et chimiques de ces régions. Pour ce faire, j'ai couplé un travail de modélisation détaillée du gaz, en utilisant des données de dynamique quantique, avec l'analyse des observations du *James Webb Space Telescope*. La couverture spectrale, la grande sensibilité et la résolution angulaire du JWST lui donne un accès inédit à la chimie et la microphysique des sous-structures à petites échelles des régions de photodissociation (PDR) et des régions chaudes des disques protoplanétaires (région interne ou vent photoévaporé). Ma thèse s'inscrit alors dans l'analyse des données du programme PDRs4All observant la Barre d'Orion et des disques protoplanétaires se trouvant dans la ligne de visée (en particulier d203-506).

En préparation des observations, je me suis d'abord concentrée sur les prédictions de ce que pourrait détecter le JWST. J'ai alors étudié l'émission prompte de OH produit rotationnellement excité par la photodissociation de l'eau. Pour cela, j'ai utilisé le code PDR de Meudon, qui calcule de façon auto-cohérente le transfert de rayonnement, la chimie et le bilan thermique dans les PDRs. En implémentant l'émission prompte dans ce code, nous montrons alors que seuls les milieux suffisamment denses et chauds permettent d'exciter OH à la formation. La seconde partie de ma thèse pré-

sente l'analyse des spectres obtenus avec le JWST. Les signatures des molécules très excitées à la formation présentes dans ces données et analysées avec des modèles d'excitation à zone unique, basés sur des données de dynamique quantique, ont permis de révéler une chimie particulièrement active dans les régions chaudes et irradiées. Dans la Barre d'Orion et d203-506, nous révélons la détection de OH, CH⁺ et CH₃⁺ ainsi que leur excitation à la formation, nous permettant de contraindre la chimie en action. En effet, l'émission rotationnelle de OH, modélisée auparavant et détectée dans l'infrarouge moyen, permet de révéler la photodissociation de l'eau. L'émission de OH et CH⁺, dans l'infrarouge proche trace la formation et l'excitation de ces espèces par pompage chimique via des réactions avec H₂ : X + H₂ → XH* + H. Ces raies d'émission nous permettent donc de révéler un cycle de formation et de destruction de l'eau très actif dans d203-506 (O ⇌ OH ⇌ H₂O) ainsi que le début de la chaîne de la chimie du carbone (C⁺ → CH⁺ → CH₂⁺ → CH₃⁺) dans la PDR et le disque. Les modèles d'excitation nous ont permis d'identifier les processus d'excitation observés et de traduire l'intensité des raies mesurée en taux de formation et de destruction de ces espèces. Ils permettent également de contraindre les conditions physiques du milieu et peuvent être utilisées pour déterminer localement, à partir de l'intensité des raies observées, l'intensité du champ UV (pour la photodissociation de l'eau) ou la densité du gaz (pour l'émission prompte), ingrédients essentiels déterminant les conditions initiales de la formation stellaire et planétaire. Ces nouveaux diagnostics sont alors des clés d'analyse pour de nombreuses observations du JWST puisqu'il est attendu que ces processus soient détectés dans une multitude d'objets astrophysiques qui présentent des régions chaudes et irradiées (protoétoile, *outflow*, nébuleuse planétaire...).

Title : High excitation of molecules in irradiated star- and planet-forming regions observed with the *James Webb Space Telescope*

Keywords : Photodissociation Region - Protoplanetary Disk - JWST - Orion Bar - Interstellar Medium - Spectroscopy

Abstract : Radiative feedback from massive stars, which heats and disperses the gas in the surrounding cloud, is a dominant mechanism limiting stellar and planetary formation. Indeed, observations show that only 1–5 % of the mass of molecular clouds is converted into stars. In this thesis, I focused on the neutral, warm and irradiated regions between ionized and cold molecular media. In particular, I investigated how the excitation at the formation of certain molecules (OH, CH⁺ and CH₃⁺) enabled simple and robust diagnostics to constrain the physical and chemical parameters of these regions. To do this, I coupled detailed gas modeling, using quantum dynamics data, with analysis of observations from the *James Webb Space Telescope*. The spectral coverage, high sensitivity and angular resolution of the JWST give unprecedented access to the chemistry and microphysics of the small-scale substructures of photodissociation regions (PDR) and the warm regions of protoplanetary disks (inner region or photoevaporated wind). My thesis is part of the analysis of data from the PDRs4All program observing the Orion Bar and protoplanetary disks in the line of sight (in particular d203-506).

In preparation for the observations, I first concentrated on predicting what the JWST might detect. I studied the prompt emission of rotationally excited OH produced by the photodissociation of water. To this end, I used the Meudon PDR code, which self-consistently calculates the radiative transfer, the chemistry and the heat balance in PDRs. By implementing prompt emission in this code, we then show that only sufficiently dense and warm environments allow OH excitation at formation. The second part of my thesis presents the analysis of

spectra obtained with the JWST. The signatures of highly excited molecules at formation observed in these data and analyzed with single-zone excitation models, based on quantum dynamics data, have revealed a particularly active chemistry in warm, irradiated regions. In the Orion Bar and d203-506, we reveal the detection of OH, CH⁺ and CH₃⁺ as well as their excitation at formation, allowing us to constrain the chemistry in action. Indeed, OH rotational emission, previously modeled and detected in the mid-infrared, reveals the photodissociation of water. The near-infrared emission of OH and CH⁺ traces the formation and excitation of these species by chemical pumping via reactions with H₂: $X + H_2 \rightarrow XH^* + H$. These emission lines reveal a very active water formation and destruction cycle in d203-506 ($O \rightleftharpoons OH \rightleftharpoons H_2O$), as well as the beginning of the carbon chemistry chain ($C^+ \rightarrow CH^+ \rightarrow CH_2^+ \rightarrow CH_3^+$) in the PDR and disk. Excitation models have enabled us to identify the observed excitation processes and translate the measured line intensities into formation and destruction rates of these species. They also enable us to constrain the physical conditions of the medium, and can be used to determine locally, from the intensity of the observed lines, the intensity of the UV field (for the photodissociation of water) or the density of the gas (for prompt emission), which are essential ingredients determining the initial conditions of stellar and planetary formation. These new diagnostics will be key to the analysis of many JWST observations, since these processes are expected to be detected in a multitude of astrophysical objects with warm, irradiated regions (protostars, outflow, planetary nebulae, etc.).

*À Claudette, Jean-Pierre,
Mireille et Jean-Paul.*

Remerciements

Ce manuscrit constitue le point final de trois ans de travail. Mais si ce manuscrit est tel qu'il est aujourd'hui, c'est grâce aux nombreuses personnes qui ont parcouru un bout de chemin avec moi et que je souhaite remercier à travers ces quelques mots.

Tout d'abord, je voudrais remercier chaleureusement mon jury. Merci Valentine et Pierre d'avoir accepté la lourde tâche de rapportrice et rapporteur et d'avoir lu attentivement ce manuscrit. Merci pour tous vos commentaires enrichissants qui m'ont permis d'améliorer sa forme et son fond. Thank you to Inga for coming all the way from the Netherlands to attend my PhD defense even though everything was in french. It was a pleasure finally meeting you. Merci Ugo d'avoir accepté que je sois ta première expérience de jury de thèse même si l'astrophysique n'est pas ton domaine d'expertise. Merci pour nos nombreuses discussions toujours aussi passionnantes. Enfin, merci Jérôme d'avoir présidé ce jury et d'avoir pris du temps malgré tes autres engagements pour cette semaine.

Je ne pourrai pas écrire ces mots sans remercier mille fois Emilie et Benoît pour leur encadrement sans faille. Je suis ravie que mon entrée dans le monde de la recherche s'est fait au travers de deux personnes aussi merveilleuses. Merci pour votre disponibilité, vos conseils, vos encouragements et votre bienveillance. Merci d'avoir toujours pris le temps de répondre à mes questions et de me rassurer dans les moments d'incertitudes. Merci de m'avoir aidée à m'insérer dans la communauté en me mettant en avant et en m'incitant à développer de nouvelles collaborations. Emilie, merci de ta constante positivité qui m'a convaincue que la recherche, c'était avant tout un émerveillement constant. Merci de me rappeler au quotidien pourquoi j'ai choisi de faire de l'astrophysique et de montrer que l'on peut monter de grands projets dans un environnement bienveillant. Benoît, merci de tout le temps que tu as investi ces trois années. Il est évident que cette thèse ne serait pas celle qu'elle est aujourd'hui sans tes conseils précieux sur mes articles et mes présentations. Si je n'étais pas sûre de vouloir continuer dans la recherche au début de ma thèse, travailler avec vous m'a clairement fait changer d'avis.

Je voudrais également remercier l'équipe AMIS dans son intégralité : Alain, Laurent, Ant, Nathalie, Meriem, Raphaël, Axel et Dan. Je ne pense pas qu'il puisse exister meilleure équipe. Merci pour nos nombreuses discussions et vos encouragements constants au sujet de ma thèse.

Je suis évidemment obligée de remercier les personnes de l'autre côté du couloir. Merci à l'équipe cosmologie d'avoir partagé mes midis pendant ces trois années. Merci plus particulièrement aux plus jeunes de cette équipe : Théo, Anaïs, Gaspard, Hugo, Stefano, Xavier, Valentin, Apolline C., Gabriel, Raphaël, Hubert, Danilo et Thomas. Vous m'avez accueillie comme une des vôtres dans ces heures sombres de ma thèse où j'étais (quasiment) la seule doctorante de l'équipe AMIS. Merci pour ces nombreuses parties de tarot, discussions politiques et autres. Un merci tout spécial à Valentin pour m'avoir aidée à organiser le pot et acheter les flûtes et Théo et Anaïs pour avoir géré la partie technique de ma soutenance.

Plus généralement, merci à toutes les personnes que j'ai rencontrées à l'Institut d'Astrophysique Spatiale qui ont rendu ces trois années de thèse plus douces. Merci à l'équipe d'administration (Hélène, Virginie, Rémy, Saliha) d'être aussi réactive pour les missions même quand je viens vous embêter pour aller à Cracovie en train. Merci à l'équipe Coupole pour ces trois années à râler sur la météo parisienne. Merci à tous les plus jeunes (doctorants, post-docs, jeunes permanents et CDD) de ce laboratoire pour nos soirées arrosées et nos séances de bookclub qui m'ont permis de m'échapper de l'astro quelques instants. Un infini merci à Lucie, Laura, Apolline L., Elsa, Léna, Antoine M., Antoine D., Axelle, Olga, Nicolas, Pierre, Yann L., Yann A., Tania, Barbara, Zélia, Cateline.

Je voudrais également remercier tous les collègues astrophysiciens que j'ai pu rencontrer au cours de ces trois années de thèse. Que ce soit à travers des projets de médiation scientifique comme La Guyane vers les étoiles avec Mathilde, Lise, Achrène, Raphaël, Lester, Miguel, Alain, Daniel, des conférences avec Lucas, Christian, Antoine, Vincent, Elsa etc ou des grandes collaborations scientifiques comme l'ERS PDRs4All.

Un merci tout particulier à mes professeurs de Physique et de Chimie de prépa, Mme Bessy et M. Potier, qui m'ont fait réaliser que je ne voulais me séparer d'aucune de ces deux matières et m'ont amenée vers cette thèse en "astrochimie".

Je voudrais ensuite remercier tous mes amis. Je suis ravie d'avoir pu garder du monde à chacune des étapes de ma vie.

Merci à mes amis du master rencontrés le dernier jour des cours autour d'une bière sur les quais. En particulier merci à Paul, Enya, Nathan, Alexandre, Corentin, Thomas.

Merci à mes amis de l'ENS pour, de loin, les plus belles années de ma vie. Pour nos soirées, nos karaoke, nos vacances et surtout pour nos futures aventures, qui je suis sûre seront très nombreuses. Merci en particulier aux meilleures colocataires dont j'aurais pu rêver, Marion et Cécile, la team Spammens, Leela, JX, Marie, Lucas, Victor, Louis, Alex, D'Hooge, Gaspard, Elric, Smith, Olivier, Romain, Gaël mais aussi tous les autres, Hector, Francis, Aurélia, Guiblan, Claire, Noémie, Inès, Héloïse, Jules, Maël, Lucas, Samy...

Merci à mes amis de prépa, Elise, Axel, Romain et Agathe pour nos réunions régulières de petits vieux malgré nos emplois du temps de ministres.

Merci à mes amis du lycée pour toutes ces années qu'on a partagé. En particulier merci à Rémi, Arthur E., Arthur A., Nicolas, Estelle, Antoine, Swann. Merci surtout de m'avoir rejoint en région parisienne, vous avez amené un peu de soleil de Bordeaux avec vous.

Évidemment, merci aux trois meilleures que je connais depuis quasiment toujours, Cécile, Cléa et Clara. Merci de faire encore partie de ma vie après toutes ces années, merci d'être présentes pour chaque événement important même si vous habitez loin et merci pour

toutes ces vacances shlag qui nous attendent encore !

Un merci immense à ma famille pour leur soutien constant. Merci à mes grands-parents, Mireille, Jean-Paul et Jean-Pierre pour leur gentillesse. Mamie Claudette, j'espère que tu aurais été fière de moi. Merci à mes oncles, tantes et cousins qui savent très bien faire semblant de s'intéresser à ma thèse. Merci à mes frères, Thibaut et Pierre, d'être des sources constantes d'inspiration. Merci pour tout ce que vous m'avez apporté toutes ces années. Merci Solène d'être devenue la sœur que j'ai attendue si longtemps quand j'étais petite. Évidemment, merci papa et maman pour votre soutien inconditionnel. Qui aurait cru qu'observer les étoiles ensemble dans le jardin des grands-parents à Agen m'aurait amené à devenir doctoresse en astrophysique. Merci papa de m'avoir éveillée à la science depuis que je suis petite et de m'avoir aidée en maths jusqu'à que tu ne puisses plus. Merci maman de m'avoir appris à obtenir ce que je veux et d'avoir relu tous mes rapports de stage jusqu'aux 250 pages de ce manuscrit pour y corriger les fautes d'orthographe.

Je finirai ces longs remerciements par quelques mots pour Charles. Merci d'être une source de bonheur et de rire quotidienne depuis plus de six ans. Te rencontrer fait partie des plus jolies choses qui me soient arrivées. Merci pour ton soutien sans faille et d'avoir été aussi présent pour moi lors de ces derniers mois stressants. Surtout merci d'avoir parcouru Paris pour choisir le meilleur champagne pour le pot, tout le monde a adoré.

Table des matières

Remerciements	5
I Introduction	15
1 Milieu interstellaire et rétroaction stellaire	17
1.1 Le milieu interstellaire	18
1.2 Rétroaction stellaire sur le milieu interstellaire	21
1.2.1 Rétroaction d'origine mécanique	24
1.2.1.1 Jets et <i>outflows</i>	24
1.2.1.2 Vents stellaires	25
1.2.1.3 Supernovæ	26
1.2.2 Rétroaction d'origine radiative	27
1.2.2.1 Pression radiative directe et indirecte	27
1.2.2.2 Pression du gaz ionisé	28
1.2.3 Quel mécanisme est dominant ?	29
1.2.4 Rétroaction stellaire négative ou positive ?	32
1.3 Différents observatoires pour le milieu interstellaire	33
2 Impact de la rétroaction radiative des étoiles massives sur les interfaces irradiées	41
2.1 Structure physique et chimique des interfaces irradiées	42
2.1.1 Les Régions de Photodissociation (PDR)	42
2.1.1.1 Structure générale de la PDR	43
2.1.1.2 Extinction du champ UV par la poussière	45
2.1.1.3 Emission des poussières	47
2.1.1.4 Équilibre thermique du gaz	49
2.1.1.5 Réactions chimiques et physiques dans les PDRs	53
2.1.1.6 Modélisation des régions de photodissociation	54
2.1.2 Les disques protoplanétaires irradiés	60
2.1.2.1 Une majorité de disques protoplanétaires fortement irradiés	61
2.1.2.2 Apparition d'un vent photoévaporé	62
2.1.2.3 Impact sur la formation planétaire	63
2.2 La chimie chaude des régions irradiées	66
2.2.1 La molécule de H ₂	66

2.2.1.1	Structure énergétique	66
2.2.1.2	Mécanismes de formation	68
2.2.1.3	Photodissociation et auto-écranage de H ₂	71
2.2.1.4	Excitation dans les régions irradiées	72
2.2.2	La molécule de H ₂ comme précurseur de la chimie en phase gazeuse	74
2.2.2.1	Chimie de l'oxygène	74
2.2.2.2	Chimie du carbone	76
2.2.3	Processus d'excitation hors équilibre thermodynamique local (ETL)	79
2.2.3.1	Pompage radiatif	80
2.2.3.2	Excitation à la formation	81

Objectifs de la thèse 85

II Le *James Webb Space Telescope* pour les régions irradiées 89

3 Un laboratoire interstellaire à travers les yeux du *James Webb Space Telescope* 91

3.1	Le <i>James Webb Space Telescope</i> , télescope révolutionnaire dans l'infrarouge	92
3.1.1	Histoire et objectifs	92
3.1.2	Composition de l'observatoire	95
3.1.3	Imagerie	98
3.1.3.1	NIRCam : Imageur dans l'infrarouge proche	98
3.1.3.2	MIRIm : Imageur dans l'infrarouge moyen	100
3.1.4	Spectro-imagerie	101
3.1.4.1	NIRSpec IFU : Spectro-imageur dans l'infrarouge proche	101
3.1.4.2	MIRI-MRS IFU : Spectro-imageur dans l'infrarouge moyen	102
3.2	La Barre d'Orion : véritable laboratoire interstellaire	107
3.2.1	Le programme d'observation PDRs4All	107
3.2.2	Une région de photodissociation typique : La Barre d'Orion	108
3.2.3	La Barre d'Orion à travers le JWST	112
3.2.4	Observation de la région de photodissociation	114
3.2.4.1	Données d'imagerie NIRCam et MIRI	114
3.2.4.2	Données de spectroscopie	117
3.2.5	Observation des disques protoplanétaires irradiés dans la région	130
3.2.5.1	d203-506	130
3.2.5.2	d203-504	134

III Résultats 137

4 L'émission prompte de l'hydroxyle : un traceur des régions denses et irradiées 139

4.1	Introduction	141
4.1.1	Contexte	141
4.1.2	Méthode d'analyse	142
4.1.3	Organisation de l'article	143
4.2	Modèles	143

4.2.1	Modèle thermochimique avec le code PDR de Meudon	143
4.2.2	Excitation de OH	145
4.3	Résultats	147
4.3.1	Modèle typique à haute pression et haut champ UV	147
4.3.1.1	Profil de densité de H ₂ O et champ UV	147
4.3.1.2	Prédiction des raies de OH dans l'IR moyen	151
4.3.2	Effets de la pression thermique et du champ UV	154
4.3.2.1	Dépendance à la pression	155
4.3.2.2	Dépendance au champ UV incident	157
4.3.2.3	Évolution du rapport des raies OH/H ₂	157
4.4	Application à la Barre d'Orion et à d'autres environnements	158
4.4.1	Barre d'Orion	158
4.4.1.1	Intensités prédites des raies de OH	159
4.4.1.2	Spectre prédit avec le continuum et les autres raies	161
4.4.1.3	Rapport raie sur continuum	162
4.4.1.4	Mélange possible avec d'autres raies	163
4.4.2	Application à d'autres environnements	165
4.4.2.1	Autres PDRs interstellaires	165
4.4.2.2	Propyds	165
4.5	Conclusion	166
4.A	Annexes	167
4.A.1	Chimie de H ₂ O	167
4.A.1.1	Réactions neutre–neutre	167
4.A.1.2	Réactions neutre–ion	169
4.A.2	Chimie de OH	171
5	Détection de la chimie de l'eau en action dans un disque protoplanétaire	173
5.1	Introduction	175
5.1.1	Contexte	175
5.1.2	Objet étudié et méthode d'analyse	176
5.1.3	Organisation de l'article	178
5.2	Observations et réduction de données	179
5.3	Méthode	180
5.3.1	Post-traitement des spectres JWST	180
5.3.2	GROBETA pour modéliser OH	180
5.4	Résultats	182
5.4.1	Analyse de l'émission de H ₂	182
5.4.2	Preuve de la photodissociation de H ₂ O	183
5.4.3	Preuve du pompage chimique (à la formation) par O + H ₂	187
5.4.4	La chimie en action de l'oxygène en phase gazeuse chaude	190
5.4.4.1	Estimation des taux de formation	190
5.4.4.2	Estimation de la densité de colonne d'eau chaude et de la densité du gaz local	192
5.5	Discussion	195
5.6	Conclusions	196
5.A	Annexes	197

5.A.1	Calculs dynamiques quantiques pour O + H ₂	197
5.A.2	Intensité des raies de OH et de H ₂	198
6	Détection de la chimie du carbone dans des régions irradiées	203
6.1	Introduction	206
6.1.1	Contexte	206
6.1.2	Objets étudiés et méthode d'analyse	208
6.1.3	Organisation de l'article	210
6.2	Observations et réduction des données	210
6.3	Détection et distribution spatiale de l'émission rovibrationnelle de CH ⁺ et CH ₃ ⁺	211
6.3.1	Détection de CH ⁺ et CH ₃ ⁺	211
6.3.1.1	CH ⁺	211
6.3.1.2	CH ₃ ⁺	213
6.3.2	Distribution spatiale	213
6.3.3	Dépendance de la densité du gaz	215
6.4	Analyse du processus d'excitation	216
6.4.1	Température d'excitation rotationnelle	217
6.4.1.1	CH ⁺	217
6.4.1.2	CH ₃ ⁺	219
6.4.2	Preuve du pompage chimique (à la formation) de CH ⁺	221
6.4.2.1	Le modèle	221
6.4.2.2	Application	223
6.5	Discussion	227
6.5.1	Diagnostics sur la chimie et les conditions physiques	227
6.5.1.1	Estimation du taux de formation de CH ⁺ par C ⁺ + H ₂ [*]	227
6.5.1.2	Estimation de la densité du gaz	227
6.5.2	Processus d'excitation alternatifs	229
6.5.2.1	Pompage IR	229
6.5.2.2	Collisions	230
6.5.3	Discussion sur la chimie en phase gazeuse	231
6.5.3.1	Impact de la destruction des grains de carbone	231
6.5.3.2	Recherche de CH ₂ ⁺	232
6.6	Conclusion	234
6.A	Annexes	235
6.A.1	Intensité des raies de CH ⁺ dans la PDR et dans d203-506	235
6.A.2	Spectres observés de CH ⁺ et CH ₃ ⁺ dans la PDR et dans le disque	237
6.A.2.1	CH ⁺	237
6.A.2.2	CH ₃ ⁺	238
6.A.3	Post-traitement des spectres du JWST	239
6.A.3.1	CH ⁺	239
6.A.3.2	CH ₃ ⁺	240

IV	Conclusions et perspectives	241
V	Annexes	251
A	Formule de l'intensité du champ ultraviolet	253
B	Estimation du champ UV	255
C	Intensité des raies détectées dans la Barre d'Orion	257
C.1	Intensité des raies détectées dans l'infrarouge proche avec NIRSPEC (Peeters et al. 2024)	257
C.2	Intensité des raies détectées dans l'infrarouge moyen avec MIRI-MRS (Van De Putte et al. 2024)	264
D	Articles publiés et soumis en co-auteurice	269

Introduction

Chapitre 1

Milieu interstellaire et rétroaction stellaire

1.1	Le milieu interstellaire	18
1.2	Rétroaction stellaire sur le milieu interstellaire	21
1.2.1	Rétroaction d'origine mécanique	24
1.2.2	Rétroaction d'origine radiative	27
1.2.3	Quel mécanisme est dominant ?	29
1.2.4	Rétroaction stellaire négative ou positive ?	32
1.3	Différents observatoires pour le milieu interstellaire	33

1.1 Le milieu interstellaire

Il est souvent dit que l'espace est essentiellement composé de vide. Il est vrai que la densité du milieu entre les étoiles, nommé milieu interstellaire, est en moyenne très faible, de l'ordre d'une particule (proton) par cm^3 . Cela est 10^{19} fois plus faible que la densité de l'atmosphère terrestre et 10^8 fois plus faible qu'un des vides les plus puissants que l'on peut réaliser sur Terre (par exemple au LHC, Grand Collisionneur d'Hadrons). Cependant, si 90 % de la matière baryonique visible se trouve sous forme d'étoiles (elles représentent $10^{11} M_{\odot}$ dans la Voie lactée), environ 10 % de la matière est contenue dans ce milieu interstellaire (soit environ $8 \times 10^9 M_{\odot}$ dans la Voie Lactée, Hollenbach & Tielens 1999). De plus, la matière du milieu interstellaire représente la large majorité du volume à l'intérieur des galaxies. La Figure 1.1 met en évidence ce milieu interstellaire grâce à des cartes du ciel réalisées par *Gaia* et *Planck*. Cet environnement représente une grande partie de notre ciel.

La matière interstellaire est composée essentiellement d'hydrogène (89 %), suivi de loin par l'hélium (9 %) puis d'éléments lourds (2 %) appelés, en astrophysique, métaux (carbone, oxygène, azote, silicium, fer ...). Une table présentant les abondances relatives à l'hydrogène est présentée ci-dessous. Cette matière se trouve essentiellement sous forme de gaz (atomes, molécules, ions et électrons) avec une proportion de la matière solide, composée de métaux, (grains interstellaires) seulement de 1 % de la masse du milieu interstellaire.

Élément	Abondance
He ^a	0,1
C ^b	$1,4 \times 10^{-4}$
N ^c	$7,5 \times 10^{-5}$
O ^d	$3,2 \times 10^{-4}$
S ^e	$1,9 \times 10^{-5}$

TABLE 1.1 – Abondances relatives à l'hydrogène des principaux éléments composant la matière du milieu interstellaire

Notes. Les valeurs proviennent de ^(a) Stahler & Palla (2004), ^(b) Sofia et al. (1997) mesurées vers l'étoile τ -Canis Majoris à partir de raies de C II, ^(c) Meyer et al. (1997) mesurées avec le télescope *Hubble* vers les étoiles γ Cas, λ Ori, ι Ori, κ Ori, δ Sco, and κ Sco avec des raies de N I, ^(d) Meyer et al. (1998) mesurées avec le télescope *Hubble* vers les étoiles γ Cas, ϵ Per, δ Ori, ϵ Ori, 15 Mon, τ CMa, and γ Ara avec les raies de O I, ^(e) Savage & Sembach (1996).

Pour comprendre notre Galaxie, sa structure et sa composition, il est essentiel de comprendre le cycle de la matière. On distingue alors différentes phases par lesquelles évolue la matière interstellaire qui présentent des variations importantes de températures et de densités. Elles sont décrites succinctement ci-dessous et résumées dans la Table 1.2 (voir Ferrière 2001; Draine 2011, pour plus de détails sur la description de ces phases).

Tout d'abord, 50 % du volume du milieu interstellaire est occupé par le milieu chaud ($T = 10^6$ K) et extrêmement peu dense ($n_{\text{H}} = 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$) ionisé (*Hot Ionized Medium*, HIM). Ce gaz est chauffé et ionisé par les ondes de chocs suivant les explosions de supernovæ (l'effondrement gravitationnel soudain du cœur des étoiles massives ($M_* > 8 M_{\odot}$) à la

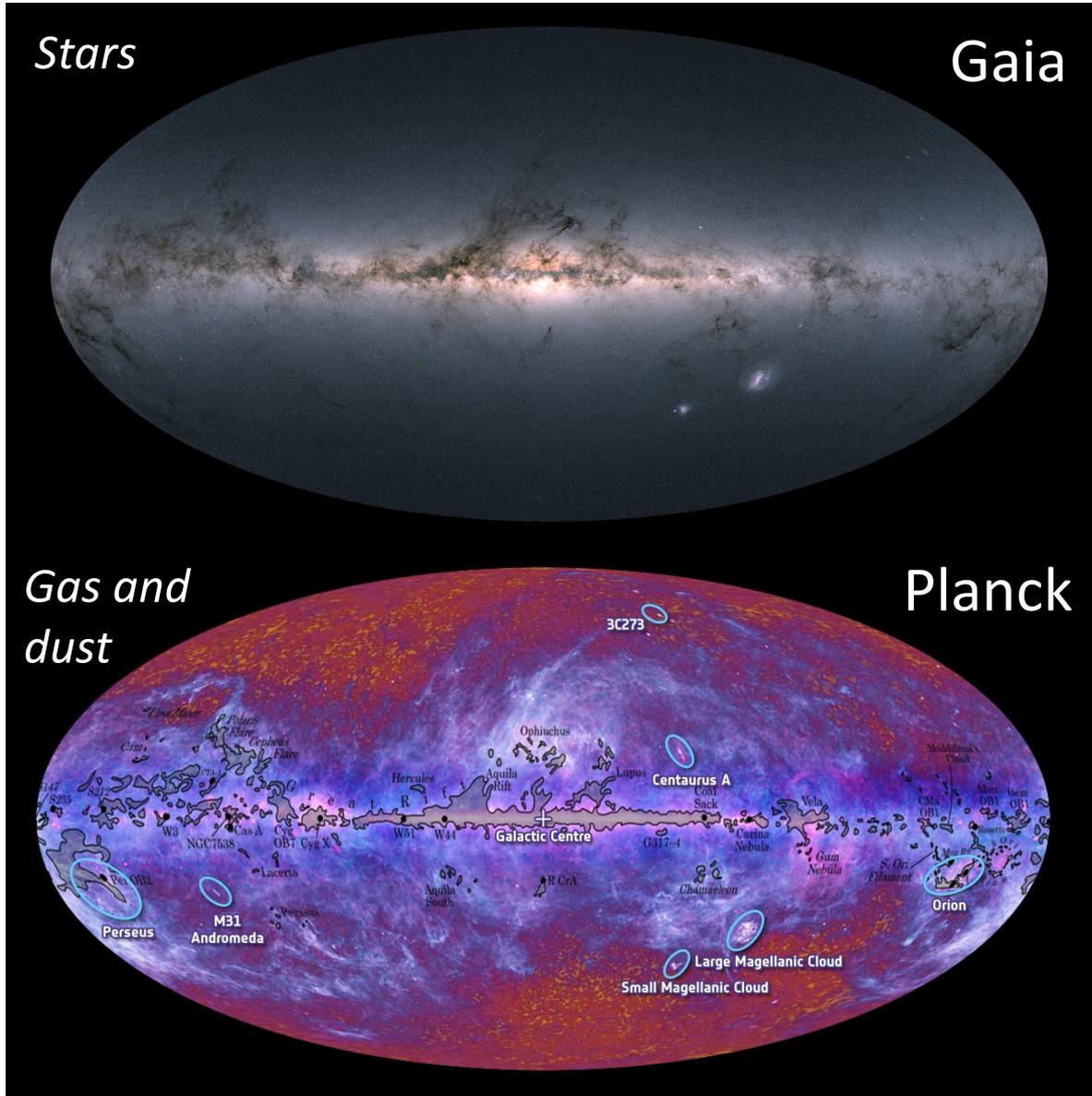


FIGURE 1.1 – Vue globale de notre galaxie, la Voie lactée et des galaxies voisines. (Haut) Luminosité totale et émission des étoiles observées par *Gaia*. (Bas) Carte en micro-onde observée par *Planck* où le milieu interstellaire cache l’émission du fond diffus cosmologique. Les principaux objets (nébuleuse, galaxie...) de notre ciel sont repérés sur la carte. Crédit *Gaia* : ESA/Gaia/DPAC ; Mans : CC BY-SA 3.0 IGO. Crédit *Planck* : ESA, HFI and LFI consortia.

Phase	T^a (K)	n_H^b (cm^{-3})	P_{gas}^c (K cm^{-3})	Φ_v^d (%)	Φ_M^e (%)	Observations (Principaux traceurs)
<i>Hot Ionized Region</i>	10^6	10^{-3}	10^3	50	-	Rayons X Émission Radio Raies d'émission/absorption de métaux ionisés
<i>Warm Ionized Region</i>	10^4	10^{-1}	10^3	25	10	Raies de recombinaison H_α Émission radio
Région $H\text{II}$	10^4	$1-10^5$	10^4-10^9	-	0,5	Raies de recombinaison H_α Raies de structure fine dans le NIR Émission radio
<i>Warm Neutral Medium</i>	10^4	1	10^4	30	30	Raies d'émission/absorption de $H\text{I}$ Raies de structure fine dans le NIR
<i>Cold Neutral Medium</i>	10-100	$100-10^6$	$10^3 - 10^8$	1	25	Raies d'émission/absorption de $H\text{I}$ Raies de structure fine dans le NIR Émission de la poussière dans l'IR
Nuage Moléculaire	10-20	10^2-10^6	10^3-10^7	0,05	10	Raies de rotation de CO

TABLE 1.2 – Caractéristiques physiques des différentes phases du milieu interstellaire. Les différents traceurs observationnels de ces régions sont énumérés dans la dernière colonne. Table adaptée de Tielens (2005).

Notes. ^(a) Température typique. ^(b) Densité typique. ^(c) Pression typique. ^(d) Pourcentage du volume total du milieu interstellaire. ^(e) Pourcentage de la masse totale du milieu interstellaire.

fin de leur vie ou une explosion stellaire violente résultant d'une instabilité thermonucléaire). Les étoiles massives permettent aussi de chauffer et d'ioniser le gaz par leur rayonnement ultraviolet (UV), à moindre échelle ($T = 10^4$ K), et ainsi de créer une phase que l'on appelle région $H\text{II}$ ($H\text{II}$ pour hydrogène ionisé). Si ces deux phases contiennent la majorité du volume du milieu interstellaire, elles n'en représentent qu'une faible masse. Ensuite, 30 % du volume du milieu interstellaire est composé d'une phase neutre nommée région $H\text{I}$ (pour hydrogène neutre), qui peut être chaude (*Warm Neutral Medium*, WNM, $T = 10^4$ K, $n_H = 1 \text{ cm}^{-3}$) ou froide (*Cold Neutral Medium*, CNM, $T = 10 - 100$ K, $n_H = 100 - 10^6 \text{ cm}^{-3}$). Plus

froides et plus denses que les régions ionisées, les régions neutres contiennent la moitié de la masse du milieu interstellaire. Enfin, une faible fraction du volume, mais une quantité importante de la masse, se trouve dans les régions froides ($T = 10-20$ K) et denses ($n_{\text{H}} = 10^2 - 10^6$ cm^{-3}), où le gaz, protégé du rayonnement UV, peut se trouver sous forme moléculaire. Ces régions moléculaires se trouvent essentiellement dans de grands complexes appelés nuages moléculaires géants (*Giant Molecular Clouds*, GMCs). Ils ont des tailles pouvant aller jusqu'à des centaines de parsecs et de masses jusqu'à $10^6 M_{\odot}$. Ainsi, seules ces régions les plus froides et les plus denses disposent des conditions physiques nécessaires et un réservoir de matière nécessaire pour que le gaz puisse s'effondrer gravitationnellement et créer une étoile.

Durant la vie de l'étoile, sa matière passe par une succession de réactions thermonucléaires, transformant ainsi l'hydrogène en éléments lourds. Une partie de cette matière est ensuite rendue au milieu interstellaire soit par de puissants vents stellaires, soit à la fin de leur vie lors d'une explosion supernova ou d'une nébuleuse planétaire. Mais l'étoile n'échange pas uniquement de la matière avec son environnement. Le passage d'une phase à l'autre du milieu interstellaire est grandement lié à l'injection d'énergie par les étoiles dans leur milieu environnant. Ces différents mécanismes de rétroaction stellaire sont décrits dans la Section 1.2. La Figure 1.2 permet de montrer cette évolution de la matière interstellaire. Ainsi, les nuages moléculaires, se fragmentant et s'effondrant sur eux-mêmes, forment des étoiles qui, par différents mécanismes, vont perturber le nuage jusqu'à produire des régions plus diffuses. Ces régions diffuses finissent par se refroidir et se condenser pour reformer des nuages moléculaires. Finalement, le milieu interstellaire n'est pas simplement un environnement passif dans lequel les étoiles évoluent. Il est en constante interaction avec elles, échangeant continuellement de la matière et de l'énergie. Les caractéristiques du milieu interstellaire (la distribution spatiale de sa matière, ses conditions physiques et chimiques ...) déterminent les lieux de formation d'étoiles et donc, à grande échelle, régissent la structure globale de la Galaxie. L'étude du milieu interstellaire est donc essentielle pour comprendre les propriétés de notre Galaxie et son évolution.

1.2 Rétroaction stellaire sur le milieu interstellaire

La première section décrit l'interaction constante entre le milieu interstellaire et les étoiles. Dans cette constante interaction, il est important de discuter l'impact des étoiles sur la formation stellaire. On appelle ce phénomène rétroaction stellaire.

On définit l'efficacité de la formation stellaire ϵ_* comme la fraction de la masse totale du nuage moléculaire qui est effectivement convertie en étoile. Obtenir cette valeur observationnellement est particulièrement difficile puisque l'efficacité n'est pas seulement le rapport de masse stellaire sur la masse du gaz M_*/M_{gas} . En effet, celui-ci varie avec le temps et tend vers l'infini quand le nuage est complètement dispersé alors que l'efficacité a une valeur comprise en 0 et 1. Il faudrait alors pouvoir observer le nuage à deux moments différents pour obtenir la masse du gaz au début de l'évolution du nuage et la masse des étoiles quand tout le nuage a été dispersé. Ainsi, la plupart des mesures observationnelles qui ont été réalisées se font sur une statistique des populations de nuages. Les premières estimations de cette efficacité ont été réalisées par McKee & Williams (1997) et Williams & McKee (1997) en comparant

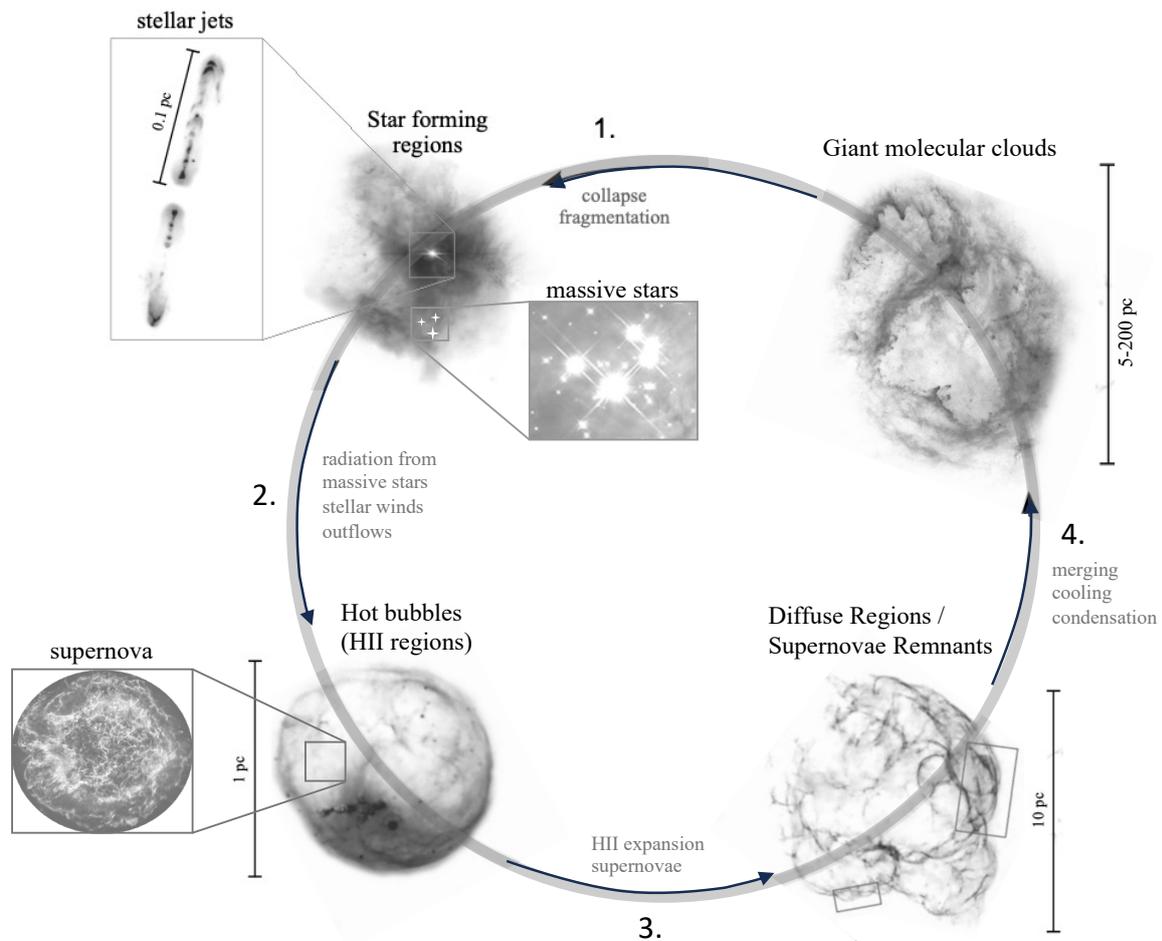


FIGURE 1.2 – Vue schématique du cycle du milieu interstellaire. Les principaux mécanismes de rétroaction, d'injection d'énergie, d'échange de matière et de retraitement sont indiqués en gris pour chaque étape correspondante. Pour les besoins de l'illustration, les images en niveaux de gris sont extraites des observations de Simeis 147 (*Supernova Remnant*), de Westerhout 3-5 (nuages moléculaires géants), de M42 (région de formation d'étoiles), de NGC-7635 (bulle chaude), des étoiles du Trapèze (étoiles massives) et de Cassiopée A (supernova). 1. Nuage moléculaire froid qui se fragmente et s'effondre pour former des étoiles. 2. Formation d'étoiles à l'intérieur de ce nuage moléculaire. Ensuite, les (proto)étoiles injectent de l'énergie en retour par le biais de jets stellaires, d'*outflows*, de vents stellaires et de rétroaction radiative, produisant des régions H II. 3. Des supernovæ peuvent exploser dans ces régions, en plus de l'action continue des autres mécanismes de rétroaction, menant à une expansion des régions H II. 4. Le milieu diffus et les rémanents de supernovæ se refroidissent et de nouveaux nuages H I et moléculaires se forment à partir des régions denses et froides de ces milieux. Figure adaptée de Dell'Ova (2021).

la distribution de masse des GMC et la luminosité des associations OB, groupe d'étoiles non gravitationnellement liées, dont une partie est de type spectral O ou B, dans la Voie lactée. Ils

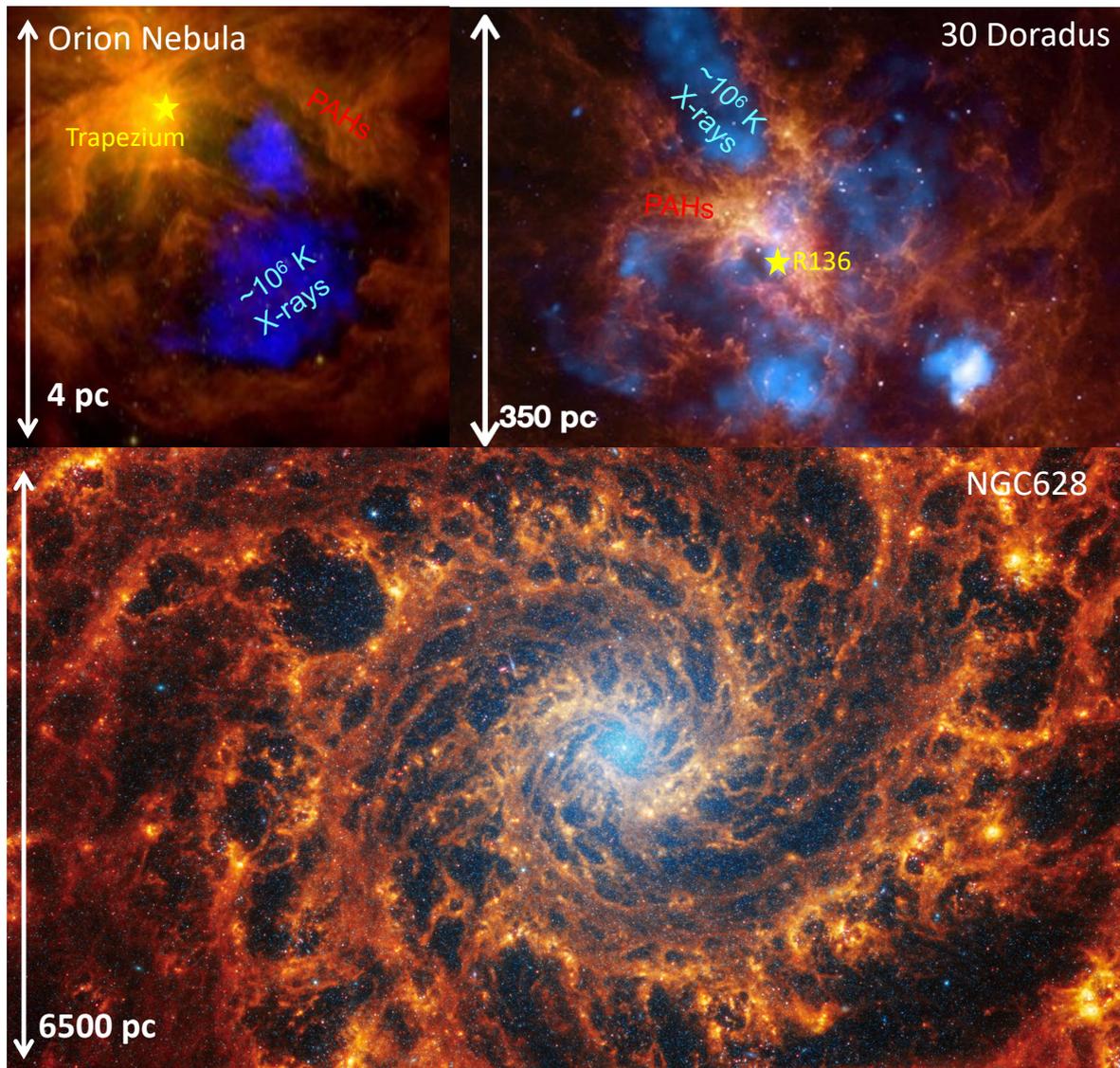


FIGURE 1.3 – Effet de la rétroaction stellaire à différentes échelles. (Haut gauche) Image composite de la Nébuleuse d’Orion réalisée avec *Spitzer* (orange) et *Chandra* (bleu) (Güdel et al. 2008). (Haut droite) Image composite de la nébuleuse de la Tarentule ou 30 Doradus réalisée avec *Spitzer* (orange) et *Chandra* (bleu). Crédit : Rayons X : NASA/CXC/PSU/Townsley et al. (2006) ; Infrarouge : NASA/JPL/PSU/Townsley et al. (2006). (Bas) Image composite de NGC-628, dites Galaxie du Fantôme réalisée avec les instruments NIRC*am* et MIR*Im* du *James Webb Space Telescope*. Crédit : NASA, ESA, CSA, STScI, J. Lee (STScI), T. Williams (Oxford), PHANGS Team. Les bulles de gaz chaud observées dans les rayons X dans la Nébuleuse d’Orion et 30 Doradus et les grandes bulles sombres visibles dans la galaxie du Fantôme sont les témoins de la rétroaction stellaire.

concluent alors que l’efficacité de la formation stellaire est d’environ $\epsilon_* \sim 5\%$. Des études plus tardives se basant sur le fait que l’efficacité de la formation stellaire peut aussi se traduire par le rapport du temps de vie du nuage sur le temps de déplétion $\epsilon_* = t_{\text{GMC}}/t_{\text{dep}}$ trouvent des valeurs entre $\epsilon_* = 0,02 - 0,10$ cohérentes avec l’estimation précédente (*e.g.*, Kruijssen

et al. 2018, 2019; Chevance et al. 2020). Ainsi, les observations s'accordent pour conclure que seul 1–2 % de la masse des GMCs est convertie en étoile (Zuckerman & Evans 1974; Krumholz & Tan 2007; Evans et al. 2009). Cette inefficacité est attribuée à différents mécanismes comme la turbulence, le champ magnétique mais également la rétroaction stellaire qui, en chauffant le gaz, empêche la "catastrophe de refroidissement" (*cooling catastrophe*). En effet, sans la rétroaction, la matière refroidit rapidement, rendant alors très efficace la formation stellaire qui consommerait la majorité du gaz de la galaxie et produirait plus de masse stellaire que ce qui est observé. La Figure 1.3 met en évidence l'effet de la rétroaction stellaire à différentes échelles. On voit apparaître des bulles de gaz chaud, observées dans les rayons X avec *Chandra*, dans les nébuleuses comme celle d'Orion ou de la Tarentule (30 Doradus). À l'échelle de la galaxie, l'impact de différentes étapes de rétroaction stellaire crée des bulles géantes où le gaz a été éjecté, ce qui est observé, par exemple, avec le *James Webb Space Telescope* (JWST) dans la galaxie du Fantôme.

Cette section discutera rapidement les différents mécanismes, mais j'invite le lecteur à lire les revues de Krumholz et al. (2014, 2019); Chevance et al. (2023) pour plus de détails. Nous séparerons la rétroaction stellaire en deux sections : la rétroaction d'origine mécanique et radiative.

1.2.1 Rétroaction d'origine mécanique

1.2.1.1 Jets et *outflows*

Lorsqu'une étoile se forme, la conservation du moment cinétique fait que la protoétoile éjecte de la matière par un *outflow* (jet ou vent). La Figure 1.4 présente un exemple de jet HH 797. Cet *outflow* injecte alors de l'énergie et de la quantité de mouvement dans le gaz environnant. Ils modifient alors leur environnement et ont un impact sur la formation stellaire. En effet, ces *outflows* pourraient éjecter environ deux tiers de la masse des cœurs protostellaires (*e.g.*, Matzner & McKee 2000; Offner & Chaban 2017), retirant ainsi du gaz disponible pour la formation stellaire. De plus, le dépôt de quantité de mouvement ajoute de la turbulence dans le nuage. Les jets protostellaires sont alors censés être efficaces comme rétroaction stellaire dans les régions où les étoiles se forment proches dans le temps et l'espace, c'est donc une rétroaction à petite échelle spatiale. Les *outflows* étant aussi efficaces pour les étoiles de faibles masses que les étoiles massives, ce mécanisme est alors particulièrement important dans les régions où les étoiles sont de faibles masses.

De nombreuses simulations numériques ont validé ces hypothèses en démontrant que ces *outflows* peuvent entraîner des turbulences dans les nuages (Li & Nakamura 2006; Cunningham et al. 2006; Matzner 2007; Nakamura & Li 2007; Cunningham et al. 2009; Carroll et al. 2009, *e.g.*). Nakamura & Li (2011) montrent également analytiquement que les *outflows* seraient suffisants pour maintenir un taux de formation stellaire assez faible ($\sim 10\%$) dans les *clumps* observés dans le voisinage du système solaire.

Différentes études ont cherché les signatures observationnelles de la rétroaction stellaire par les *outflows* (*e.g.*, Quillen et al. 2005; Arce et al. 2010; Curtis et al. 2010; Graves et al. 2010; Duarte-Cabral et al. 2012; Narayanan et al. 2012). La majorité de ces études concluent

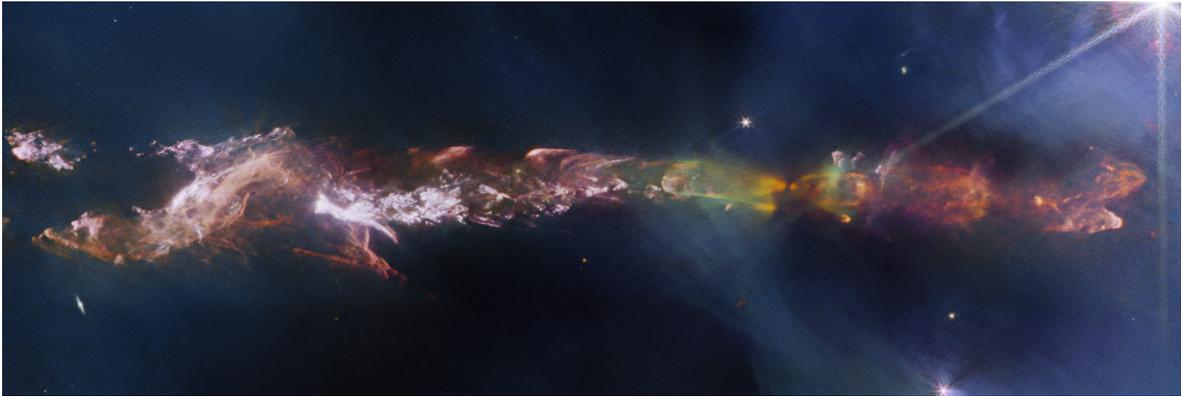


FIGURE 1.4 – Image de l’objet Herbig Haro 797 (HH 797). Les objets de Herbig-Haro sont des régions lumineuses entourant des étoiles naissantes (connues sous le nom de protoétoiles) et se forment lorsque des vents stellaires ou des jets de gaz crachés par ces étoiles naissantes forment des ondes de choc en entrant en collision avec le gaz et la poussière à proximité à des vitesses élevées. HH 797 est situé à proximité du jeune amas d’étoiles IC 348, qui se trouve près de la bordure orientale du complexe de nuages sombres de Persée. Crédit : ESA/Webb, NASA & CSA, T. Ray (Dublin Institute for Advanced Studies).

que l’action des *outflows* est suffisante pour expliquer la turbulence observée dans les protoamas. L’importance relative de ces *outflows* comme rétroaction stellaire dépend cependant des régions observées et comprendre ces différences reste une question ouverte. Des observations à l’échelle du nuage ont cependant montré que les *outflows* sont insuffisants pour maintenir les turbulences observées dans des nuages moléculaires avec des tailles de plus de 10 pc (*e.g.*, Walawender et al. 2005; Dent et al. 2009; Arce et al. 2010; Ginsburg et al. 2011; Narayanan et al. 2012). Certaines études se sont penchées sur le rôle des *outflows* dans la dispersion du gaz (*e.g.*, Knee & Sandell 2000; Swift & Welch 2008; Arce et al. 2010; Curtis et al. 2010; Graves et al. 2010; Narayanan et al. 2012; Plunkett et al. 2013). Ces études semblent montrer que, dans la plupart des régions, les *outflows* n’ont pas assez d’énergie pour disperser le nuage environnant. Seulement 5-10 % de la masse du *clump* pourrait être dispersée en prenant en compte la quantité de mouvement des *outflows* détectés (Arce et al. 2010). Ces observations sont cependant en contradiction avec des études théoriques de Matzner & McKee (2000) qui estiment que 50-70 % de la masse pourrait être éjectée. Le plus probable est alors que les *outflows* dispersent seulement une partie du gaz et que le reste est dispersé par d’autres phénomènes.

1.2.1.2 Vents stellaires

Contrairement aux *outflows* qui sont produits par toutes les protoétoiles, les forts vents stellaires sont uniquement produits par des étoiles avec des températures de surface supérieures $T = 25\,000\text{ K}$ (Vink et al. 2000), c’est-à-dire les étoiles les plus massives ($40 M_{\odot}$ pour les étoiles de la séquence principale). Ces vents stellaires apparaissent cependant très vite lors de la formation de l’étoile. Ces vents stellaires peuvent atteindre des vitesses de plusieurs milliers de km s^{-1} (*e.g.*, Castor et al. 1975b; Leitherer et al. 1992). Quand ce vent

frappe le milieu interstellaire, la température du gaz peut s'élever à plus de 10^7 K. À ces températures, le refroidissement radiatif est long (*e.g.*, Castor et al. 1975a; Weaver et al. 1977), ainsi l'énergie injectée ne peut pas se dissiper facilement. Se crée alors des bulles de gaz chaud qui poussent ou éjectent le gaz froid environnement. Cela ralentit alors l'effondrement gravitationnel du nuage (*e.g.*, Yorke et al. 1989; Harper-Clark & Murray 2009; Rogers & Pittard 2013).

De nombreux modèles théoriques ont été réalisés pour comprendre l'importance des vents stellaires comme rétroaction stellaire (*e.g.*, Garcia-Segura et al. 1996; Capriotti & Kozminski 2001; Freyer et al. 2003; Tenorio-Tagle et al. 2007; Toalá & Arthur 2011; Arthur 2012; Tenorio-Tagle et al. 2013). Malgré leurs incertitudes, ces études montrent que la rétroaction par vent stellaire pourrait éjecter la matière des régions de formation stellaire et être un processus dominant. Cependant, une partie de cette énergie pourrait être perdue par des "fuites" hydrodynamiques de gaz chauds à travers des canaux de faible densité (Harper-Clark & Murray 2009) et par la turbulence et le refroidissement rapide à l'interface entre la bulle chaude et le gaz environnant (Lancaster et al. 2021a,b,c). Enfin, la plupart de ces études ne la comparent pas à d'autres phénomènes de rétroaction, donc il est difficile de conclure sur ces résultats.

Des observations ont également essayé de contraindre ce mécanisme (dans les rayons X, rendues possibles par le *Chandra X-Ray Observatory*, *e.g.*, Lopez et al. (2011); Pellegrini et al. (2011) et dans le visible et l'infrarouge, *e.g.*, Yeh & Matzner (2012); Yeh et al. (2013); Verdolini et al. (2013)). Ces analyses restent très incertaines, mais elles semblent montrer que les vents stellaires sont non-dominants dans les régions de formation d'étoiles.

1.2.1.3 Supernovæ

Les supernovæ apportent la même énergie que les vents stellaires, mais, au lieu que cette énergie soit délivrée durant plusieurs millions d'années, elle est délivrée sur de plus courtes échelles de temps. Ce phénomène concerne uniquement les étoiles les plus massives. Si l'énergie injectée est considérable ($E \sim 10^{51}$ erg), les supernovæ peuvent cependant avoir un impact limité parce que la majorité des protoamas ($< 10^6 M_{\odot}$) ont des temps de vie plus courts que le temps nécessaire pour qu'une supernova explose (~ 4 Myrs après la formation de l'étoile, Krumholz & Matzner 2009; Fall et al. 2010). En l'absence de rétroaction, les amas de moins de $10^6 M_{\odot}$ auront transformé tous leur gaz en étoile avant qu'une supernova n'explose. Les supernovæ n'ont d'impact que dans les amas plus massifs ou alors dans les amas où la formation stellaire a été ralentie par d'autres mécanismes de rétroaction qui permettraient alors qu'une supernova explose avant que le protoamas n'ait disparu. Même dans le cas des GMCs qui ont un temps de dispersion (1–10 Myr) la supernova peut être trop tardive pour jouer un rôle important dans la rétroaction stellaire. Des observations montrent d'ailleurs que, dans la plupart des protoamas, peu ou aucun rémanent de supernovæ n'est observé (Lopez et al. 2011; Muno et al. 2006a,b). Cependant, les supernovæ peuvent avoir un impact fort à grande échelle (comme les galaxies ou certains GMCs) puisque les temps de vie de ces objets sont comparables ou plus grands que le temps de vie des étoiles massives (Smith et al. 2021). C'est d'ailleurs ainsi que sont expliquées les grandes bulles (plus de 1 kpc de diamètre) observées dans NGC-628 (voir Figure 1.3). La bulle aurait été initialement

créée par des mécanismes de rétroaction pré-supernovæ puis continuellement accélérée dans son expansion par l'explosion de supernovæ en son sein (Barnes et al. 2023; Mayya et al. 2023).

Dans les milieux non homogènes, comme les GMCs, l'énergie injectée par les supernovæ peuvent être réduite par le refroidissement et la turbulence à l'interface comme pour les vents stellaires. Cependant, l'injection de quantité de mouvement par les supernovæ reste importante par rapport à d'autres mécanismes de rétroaction (la quantité de mouvement d'une supernovæ est d'environ $1 - 5 \times 10^5 M_{\odot} \text{ km s}^{-1}$ d'après les observations de Koo et al. 2020).

1.2.2 Rétroaction d'origine radiative

Au-delà de ces processus mécaniques, les étoiles peuvent avoir un effet de rétroaction sur le milieu interstellaire par leur radiation.

1.2.2.1 Pression radiative directe et indirecte

La pression de radiation des étoiles peut avoir un impact sur le gaz environnant où se forment les étoiles en transférant à la fois de l'énergie et de la quantité de mouvement (Krumholz & Matzner 2009; Fall et al. 2010; Murray et al. 2010; Hopkins et al. 2011). Ce mécanisme est dominé par les étoiles les plus massives puisque les étoiles massives peuvent avoir des rapports luminosité sur masse de plus de $10^4 L_{\odot}/M_{\odot}$. Ainsi la pression de radiation d'une étoile massive est plus importante que la pression de radiation d'une masse stellaire équivalente provenant de l'association de plusieurs étoiles de faible masse. La pression de radiation devient significative quand le rapport luminosité sur masse dépasse les $1000 L_{\odot}/M_{\odot}$, ce qui correspond à des étoiles de plus de $20 M_{\odot}$ (Krumholz & Matzner 2009). Ce mécanisme est alors négligeable dans les amas d'étoiles de faibles masses. C'est également une rétroaction particulièrement efficace à petites échelles spatiales. La pression de radiation impacte surtout le gaz accréant sur l'étoile et le gaz environnant proche.

De nombreuses simulations ont été réalisées pour modéliser ce mécanisme de rétroaction stellaire à petite échelle, c'est-à-dire l'impact de la pression de radiation sur l'accrétion de la protoétoile (*e.g.*, Yorke & Sonnhalter 2002; Krumholz et al. 2005, 2007; Krumholz & Matzner 2009; Krumholz et al. 2010). Les résultats de ces études montrent que la pression de radiation n'arrête jamais l'accrétion du gaz vers l'étoile et donc ont un impact limité. Peu d'études ont été faites à grande échelle (*e.g.*, Hopkins et al. 2011, 2012a,b; Genel et al. 2012; Agertz et al. 2013; Aumer et al. 2013; Stinson et al. 2013; Bournaud et al. 2014). De plus, ces études n'incluent pas un traitement auto-cohérent de l'interaction entre la pression radiative et le milieu interstellaire et sont alors biaisées par leurs hypothèses de départ sur la quantité d'énergie de radiation piégée dans le milieu. Ainsi, l'importance de la pression de radiation dans les mécanismes de rétroaction stellaire dépend grandement de ces hypothèses.

Peu d'observations ont étudié ce phénomène. En étudiant les régions centrales de M51, Scoville et al. (2001) ont pu montrer que la pression de radiation d'amas jeunes surpassent leur gravité et a donc un impact sur la formation stellaire à petites échelles. D'autres obser-

vations telles que Pellegrini et al. (2011); Lopez et al. (2011, 2014) ont montré que si ce phénomène pouvait être pertinent, il domine rarement la rétroaction stellaire.

Le rayonnement de l'étoile peut également être absorbé et diffusé par la poussière. Ainsi les photons réémis dans l'infrarouge par la poussière peuvent être réabsorbés et peuvent déposer à nouveau de la quantité de mouvement dans le milieu (Thompson et al. 2005; Murray et al. 2010; Andrews & Thompson 2011). Les grains de poussières étant couplés au gaz, cette pression de radiation a également un impact sur la formation stellaire. Cette pression de radiation indirecte peut surpasser la pression de radiation directe si la densité de colonne de poussière est suffisamment grande. Elle est donc plus importante dans les GMCs compacts par exemple.

1.2.2.2 Pression du gaz ionisé

Enfin, les étoiles massives ($> 10 M_{\odot}$) produisent des photons étant capable d'ioniser le gaz autour d'elles, créant alors des bulles ionisées : les régions H II. Cela peut chauffer le gaz jusqu'à 10^4 K, soit une vitesse du son de 10 km s^{-1} (Osterbrock & Ferland 2006). La suppression des bulles ionisées mène à leur expansion, à la vitesse du son. Ce mécanisme retire alors de la masse aux nuages moléculaires. En effet, Williams & McKee (1997) et Matzner & McKee (2000) suggèrent qu'une population d'étoiles massives de $10^4 M_{\odot}$ peut éjecter jusqu'à 10 fois leur masse au cours de quelques millions d'années.

Il existe plusieurs études simulant l'expansion de la région H II dans les nuages turbulents (*e.g.*, Mellema et al. 2006; Mac Low et al. 2007; Tremblin et al. 2012; Dale et al. 2012, 2013) démontrant l'importance de l'énergie déposée dans le milieu environnant par ce mécanisme. De plus, Gritschneder et al. (2009) ont pu montrer que la pression du gaz ionisé était un mécanisme efficace pour générer de la turbulence dans le nuage. Ainsi, de nombreuses études ont montré que ce mécanisme devrait être efficace pour détruire les nuages et donc limiter la formation stellaire (*e.g.* Whitworth 1979; Franco et al. 1990, 1994; Matzner 2002; Krumholz et al. 2006; Goldbaum et al. 2011; Walch et al. 2012; Kim et al. 2018).

L'observation de différents objets astrophysiques a montré un fort lien entre l'intensité du champ de rayonnement local et la pression des interfaces entre gaz moléculaire et gaz ionisé, pouvant affecter par la suite la pression du gaz moléculaire où se forment les étoiles. L'intensité du champ UV est souvent définie par rapport au champ de rayonnement interstellaire (*Interstellar Radiative Field*, ISRF). Ainsi, on définit $G_0 = 1$ comme le flux intégré de l'ISRF calculé par Habing (1968) entre 91,2 et 240 nm de $1,6 \times 10^{-3} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ et l'intensité du champ de rayonnement incident est donnée en unité de G_0 . La pression thermique de la région H II s'écrit $P(\text{H II}) = 2n_e T$ en supposant que pour chaque électron, il existe un porteur de charge positive, soit H soit He. En supposant une température du gaz de 10^4 K dans la région H II et en s'appuyant sur les équations de l'Annexe A, la pression thermique de la région H II peut s'écrire en fonction de G_0 comme suit (Seo et al. 2019) :

$$P(\text{H II}) = 2,3 \times 10^4 f^{-3/4} \Phi_{51}^{-1/4} G_0^{3/4} \text{ K cm}^{-3} \quad (1.1)$$

où $\Phi_{51} = \Phi_{\text{EUV}}/10^{51} \text{ photons s}^{-1}$, Φ_{EUV} étant la luminosité des photons EUV de la source

et f_{gas} est la fraction de rayonnement EUV absorbé par le gaz de la région H II. En supposant une région H II confinée entourée d'une région de photodissociation (*Photodissociation Region*, PDR, composée de gaz atomique et moléculaire), l'équilibre de pression fait que la pression dans la PDR vaut $P(\text{PDR}) = P(\text{H II})$. Lorsque la région H II n'est pas confinée et est en photoévaporation, il existe un terme de pression additionnel causé par la photoévaporation du gaz H II de la surface de la PDR. Cette pression est équivalente à la pression thermique du gaz (Gorti & Hollenbach 2002). Ainsi, nous pouvons écrire $P(\text{PDR}) \simeq 2P(\text{H II})$. On obtient alors la pression de la PDR en fonction de G_0 :

$$P(\text{PDR}) = 3,7 \times 10^4 G_0^{3/4} \text{ K cm}^{-3} \quad (1.2)$$

Cette équation est similaire à l'équation empirique reliant la pression thermique à G_0 dans les travaux de Wu et al. (2018). Il est important de noter que cette équation présente uniquement une valeur limite supérieure de la pression thermique puisqu'elle s'appuie sur l'hypothèse que la pression thermique domine. Cependant, si la pression magnétique s'ajoute à la pression du gaz, alors $P(\text{PDR}) > P_{\text{th}}$. La Figure 1.5 met en évidence ce lien entre $P(\text{PDR})$ et G_0 avec des observations en montrant que la pression thermique des PDRs augmente linéairement avec l'intensité du champ de rayonnement. Ainsi, la pression du gaz ionisé, provenant directement du champ de rayonnement de l'étoile, a un fort impact sur la structure physique des nuages environnant puisqu'elle régit la pression thermique des PDRs. Ainsi les interfaces irradiées, que nous présenterons dans le Chapitre 2, sont le lieu où la rétroaction radiative régit les conditions physiques et chimiques de l'environnement. Leur étude est essentielle pour contraindre ce phénomène.

1.2.3 Quel mécanisme est dominant ?

Quel mécanisme de rétroaction est dominant ? La réponse à cette question reste encore partiellement inconnue. De nombreuses études ont essayé de répondre à cette question par différentes approches. Par exemple, l'étude de la rétroaction fait l'objet de grand programme d'observation comme FEEDBACK, un programme de *SOFIA* (Schneider et al. 2020) qui grâce à ses observations de la raie d'émission de C II donne des informations sur la dynamique des nuages. De plus, plusieurs études observationnelles multi-longueurs d'onde (visible, infrarouge, radio et X) ont cherché à comparer l'importance de chacun des mécanismes de rétroaction présentés plus tôt (Lopez et al. 2014; Barnes et al. 2020; McLeod et al. 2019, 2020; Olivier et al. 2021; Chevance et al. 2022). Dans l'ensemble, ces études montrent que dans la majorité des régions H II étudiées, le mécanisme de rétroaction dominant est la pression du gaz ionisé. La Figure 1.6 montre ce résultat dans lequel, dans les 32 régions H II des nuages de Magellan étudiées, la pression du gaz ionisé domine sur tous les autres mécanismes de rétroaction.

Ces études montrent tout de même quelques différences en fonction de la région étudiée. Par exemple, contrairement aux résultats de Lopez et al. (2014), Olivier et al. (2021), étudiant 106 régions H II jeunes et petites ($R < 0,5$ pc), montrent que ce n'est pas la pression du gaz ionisé qui domine dans ces environnements, mais la pression indirecte de radiation, convertie par les grains de poussières. Ces résultats sont tout de même en accord avec Lopez et al.

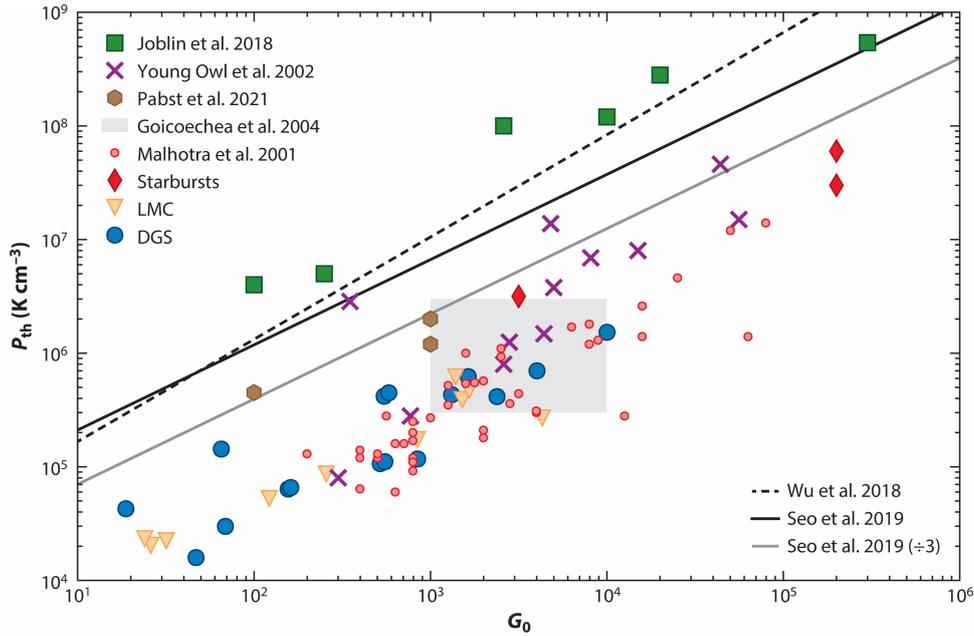


FIGURE 1.5 – Pression thermique en fonction du champ de rayonnement incident dans différents environnements. Les deux quantités sont contraintes par les modèles PDR basés sur l’émission observée des raies de structure fine ou des raies de CO. Si nécessaire, la pression thermique a été estimée comme le produit de la densité et de la température du gaz (contrainte à partir des observations ou supposée comme indiqué ci-dessous). Les points de données représentent les observations suivantes : la Voie lactée (Joblin et al. 2018; Young Owl et al. 2002; Pabst et al. 2022, et leurs références), Sagittarius B2 (en supposant une température de 300 K, Goicoechea et al. 2004), les galaxies normales et les galaxies *starburst* (Malhotra et al. 2001; Nagy et al. 2012, et leurs références), et les galaxies à faible métallicité (LMC, Chevance (2016); DGS, Cormier et al. (2019)). Pour le DGS, une température de 150 K est supposée. La ligne pointillée est l’ajustement de Wu et al. (2018); la ligne noire est le modèle de Seo et al. (2019) et la ligne grise est le même modèle divisé par trois, en tenant compte de l’équipartition de la pression (pression thermique, magnétique et turbulente). Figure extraite de Wolfire et al. (2022) qui est adaptée de Pabst et al. (2022); copyright ESO. Abréviations : DGS, *Dwarf Galaxy Survey*; LMC, *Large Magellanic Cloud*; PDR, *Photodissociation Region*.

(2014) puisqu’ils concluent que la pression du gaz ionisé domine à partir de régions de tailles > 3 pc. De plus, Barnes et al. (2020) démontrent que si la pression du gaz ionisé domine à grande échelle ($R > 0,1$ pc) et aux temps avancés après la formation de l’étoile (> 1 Myr), la pression de radiation directe domine aux plus petites échelles (0,01–0,1 pc) et aux temps courts ($< 0,1$ Myr). Finalement, même si les supernovæ apportent la plus grande énergie au milieu interstellaire ($E \sim 10^{51}$ erg), différentes études observationnelles (e.g., Barnes et al. 2020; Chevance et al. 2022) montrent que les processus pré-supernovæ (pression du gaz ionisé, vents stellaires, pression de radiation...) sont particulièrement importants dans la dispersion du nuage.

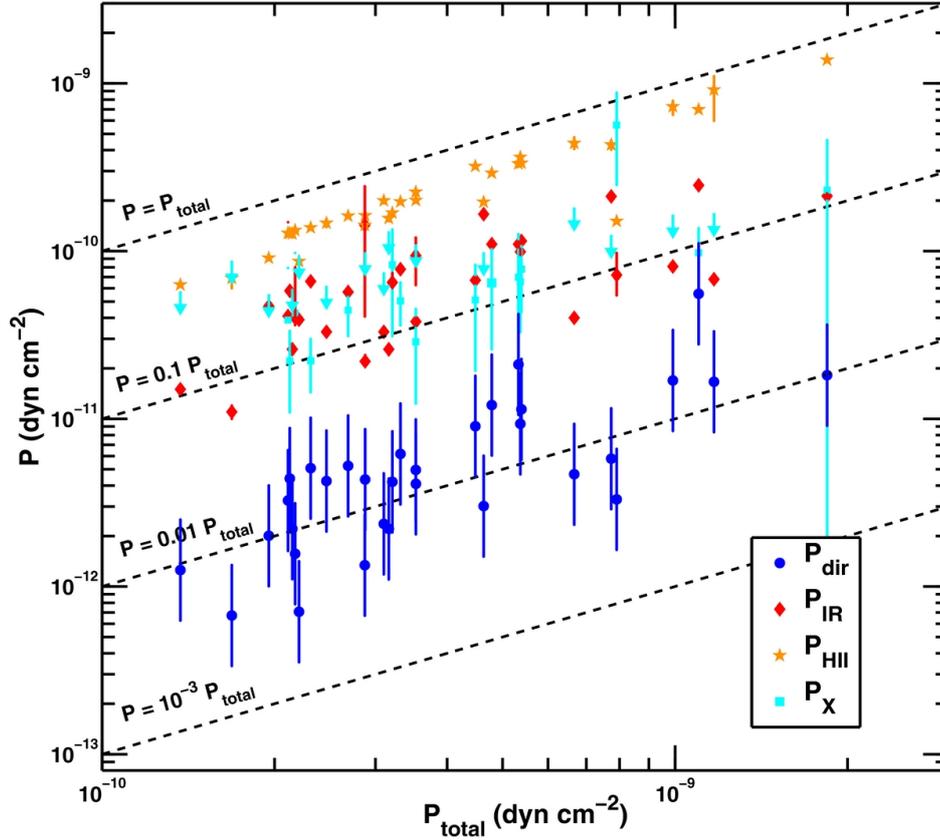


FIGURE 1.6 – Termes de pression individuels et incertitudes associées par rapport à la pression totale P_{tot} pour les 32 régions H II étudiées par Lopez et al. (2014). P_{dir} correspond à la pression directe de radiation, P_{IR} à la pression indirecte de radiation, P_{HII} la pression du gaz ionisé et P_X la pression du gaz chaud. Les lignes pointillées montrent la contribution de chaque terme à la pression totale. Les flèches bleu clair représentent les limites supérieures P_X des 15 régions H II du petit nuage de Magellan (*Small Magellan Cloud*, SMC) qui ne sont pas détectées dans les données d’archives de *XMM-Newton* et *Chandra*; pour le calcul de P_{tot} , les limites supérieures P_X du SMC sont les pressions du gaz chaud. Figure extraite de Lopez et al. (2014).

Différentes études ont réalisé des simulations prenant en compte différents types de rétroaction pour en comprendre leur importance relative. Par exemple, Suin et al. (2024) réalisent des simulations en prenant en compte à la fois les jets protostellaires et la pression du gaz ionisé. Les résultats de cette étude, se comparant bien avec les résultats observationnels de Pokhrel et al. (2021), montrent que ces deux mécanismes peuvent être suffisants pour expliquer le taux de formation stellaire. Hopkins et al. (2014) réalisent des simulations à très grandes échelles (galactiques) et démontrent, de façon cohérente avec les autres études mentionnées, que les supernovæ ne sont pas suffisantes pour expliquer le bas taux de formation stellaire et que plusieurs types de rétroaction sont nécessaires. Ils expliquent cependant que la prise en compte des supernovæ en plus des autres types de rétroaction stellaires classiques (vents stellaires, pression du gaz ionisé et pression de radiation) dans leur simulation permet de reproduire correctement les observations. Ils démontrent alors qu’aucun méca-

nisme de rétroaction ne peut expliquer, à lui seul, la rétroaction stellaire observée. Le projet SILCC (*Simulating the Life-Cycle of molecular Clouds*¹) produit également des simulations à l'échelle galactique. Comme les autres résultats, ils concluent que la pression du gaz ionisé domine ces mécanismes. Évidemment, les résultats de différentes simulations peuvent être légèrement différents en fonction des mécanismes qu'ils prennent en compte et comment ils considèrent les interactions entre eux. Ainsi, certaines études se concentrent sur les interactions entre les différents phénomènes et comment celles-ci peuvent avoir un impact sur le taux de formation stellaire (*e.g.*, Haid et al. 2018).

En résumé, les études observationnelles et les simulations tendent vers les mêmes conclusions. La rétroaction stellaire est essentielle pour expliquer les bas taux de formation stellaire. Le type de mécanisme dominant dépend alors de l'environnement local (taille du nuage, masse de l'amas, temps après la formation de l'étoile...). Par exemple, dans la Figure 1.3 en haut à droite, nous observons deux bulles de gaz chaud dans la Nébuleuse d'Orion. Les études de Pabst et al. (2019, 2020, 2022) cherchent à comprendre quel phénomène domine l'expansion de ces bulles. Ils concluent alors que si la bulle du haut est dominée par l'expansion de la région H II, la bulle du bas, elle, est dominée par les vents stellaires provenant de θ^1 Ori C. De plus, toutes les régions de formation stellaire ne forment pas d'étoiles massives, et donc l'impact de ces dernières est limité, comparé aux régions actives de formation d'étoiles massives. Ainsi, la rétroaction radiative est bien plus dominante dans des régions comme la Nébuleuse d'Orion, contenant de nombreuses étoiles massives, que dans des régions comme le nuage moléculaire du Taureau, ne formant que très peu d'étoiles massives. De façon générale, les *outflows* dominent uniquement dans les petits amas ne contenant pas d'étoiles massives, la pression de radiation domine dans les systèmes les plus massifs et les vents stellaires sont importants dans les régions avec des étoiles massives. Cependant, dans la majeure partie des amas d'étoiles, la photoionisation est le phénomène de rétroaction dominant. Même dans les régions avec peu d'étoiles massives, leur impact est important comparé aux étoiles de faibles masses. Toutefois, il est important de noter que la majorité de ces études, observations et simulations, ne prennent pas en compte la pression magnétique. Quand celle-ci est importante, les mécanismes de rétroaction peuvent être affectés et les conclusions peuvent alors différer.

Différents auteurs ont réalisé des modèles théoriques en prenant en compte ces phénomènes de rétroaction, en particulier la photoionisation, afin de calculer l'efficacité de la formation stellaire (*e.g.*, Whitworth 1979; McKee & Williams 1997; Matzner 2002; Zamora-Avilés et al. 2012; Zamora-Avilés & Vázquez-Semadeni 2014; Kim et al. 2018). Ces modèles concluent vers des valeurs d'efficacité de l'ordre de $\epsilon_* \sim 5 - 10 \%$, en accord avec les valeurs trouvées observationnellement.

1.2.4 Rétroaction stellaire négative ou positive ?

Dans la précédente section, nous avons discuté seulement l'impact négatif de la rétroaction stellaire sur la formation d'étoile. C'est-à-dire que nous avons discuté cette rétroaction seulement dans le cas où elle limite la formation. Cependant, la rétroaction stellaire peut éga-

1. <https://hera.ph1.uni-koeln.de/~silcc/>

lement avoir un impact positif, c'est-à-dire provoquer des effondrements gravitationnels et accélérer la formation stellaire. Ce genre de phénomène a été discuté dans différentes études. Par exemple, Walch et al. (2012, 2013) discutent de ce phénomène dans le cas de la pression du gaz ionisé. En effet, si celle-ci permet de disperser le nuage et donc peut limiter la formation stellaire, la pression du gaz ionisé peut aussi compresser le gaz et donc favoriser des effondrements gravitationnels. L'importance de cet effet positif dépend fortement de la structure du gaz environnant. Ce mécanisme a également été discuté dans des travaux de Elmegreen (2011) qui démontrent que ce mécanisme semble avoir un faible impact sur le taux de formation stellaire dans la plupart des régions des galaxies. On comprend alors, avec ces différents résultats, que l'impact exact de la rétroaction stellaire sur la formation stellaire est une question difficile à résoudre dans sa globalité et que celui-ci dépend largement de l'environnement étudié. Ainsi, la rétroaction stellaire reste aujourd'hui un sujet d'étude actif de la physique du milieu interstellaire.

1.3 Différents observatoires pour le milieu interstellaire

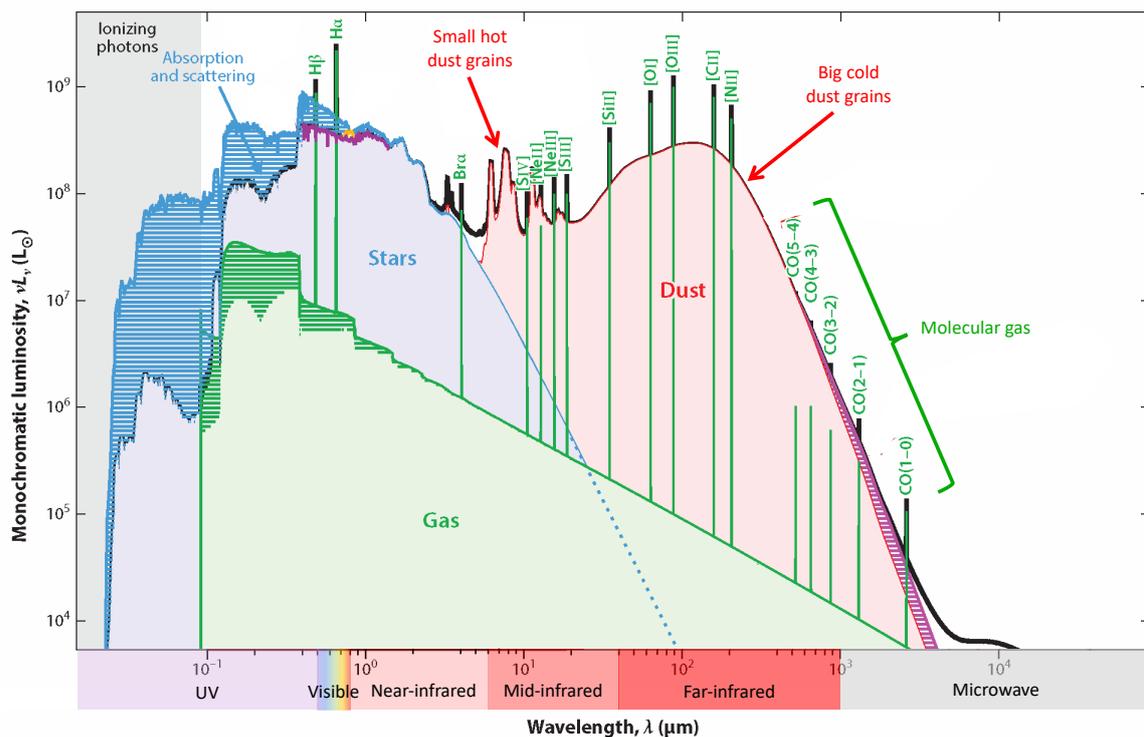


FIGURE 1.7 – Distribution spectrale de l'énergie d'une galaxie tardive typique. L'émission des étoiles est représentée en bleu. L'émission de la poussière est représentée en rouge. L'émission du gaz est représentée en vert avec les raies du gaz les plus brillantes mises en évidence. La zone hachurée en bleu montre la puissance absorbée par la poussière. Figure adaptée de Galliano et al. (2018).

Comprendre la rétroaction stellaire nécessite de nombreuses observations du milieu interstellaire à différentes longueurs d'onde. La Figure 1.7, montrant le spectre d'une galaxie

tardive typique, permet de comprendre aisément l'importance de cette étude multi-longueurs d'onde. En effet, chaque gamme de longueur d'onde observée permet de tracer différentes conditions physiques et compositions chimiques de la matière interstellaire. Ainsi, les différentes phases du milieu interstellaire présentées dans la Section 1.1 sont tracées par l'émission d'espèces à différentes longueurs d'onde. Les régions chaudes ionisées (H II) sont tracées à travers l'émission des étoiles dans l'UV-visible et à travers l'émission des raies de recombinaison de l'hydrogène ($H\alpha$, $H\beta$) et de structure fine des métaux ionisée ($O I$, $Ne II$, $S IV...$) dans l'UV-visible et l'infrarouge. Les régions neutres chaudes sont tracées à travers l'émission des petits grains de poussières chauds, les raies de structure fine du gaz atomique (par exemple C^+ et O) et les raies rovibrationnelles et rotationnelles (par exemple H_2) dans l'infrarouge proche et moyen. Les régions neutres froides et les nuages moléculaires sont tracés à travers l'émission des gros grains de poussière froide et du gaz moléculaire (par exemple les raies rotationnelles de CO) dans l'infrarouge lointain et le millimétrique. L'émission des différentes phases est liée puisque l'émission des étoiles chauffent les grains de poussières et le gaz qui se refroidissent en émettant dans l'infrarouge. Ces mécanismes sont présentés en détail dans le Chapitre 2, Section 2.1.1.3. Différents observatoires couvrant différentes gammes de longueur d'onde sont alors nécessaires pour obtenir une vue d'ensemble du milieu interstellaire. Dans cette introduction, je ne présenterai que quelques-uns des observatoires emblématiques, présentés dans la Figure 1.8, en détaillant leurs couvertures spectrales et principaux objectifs.

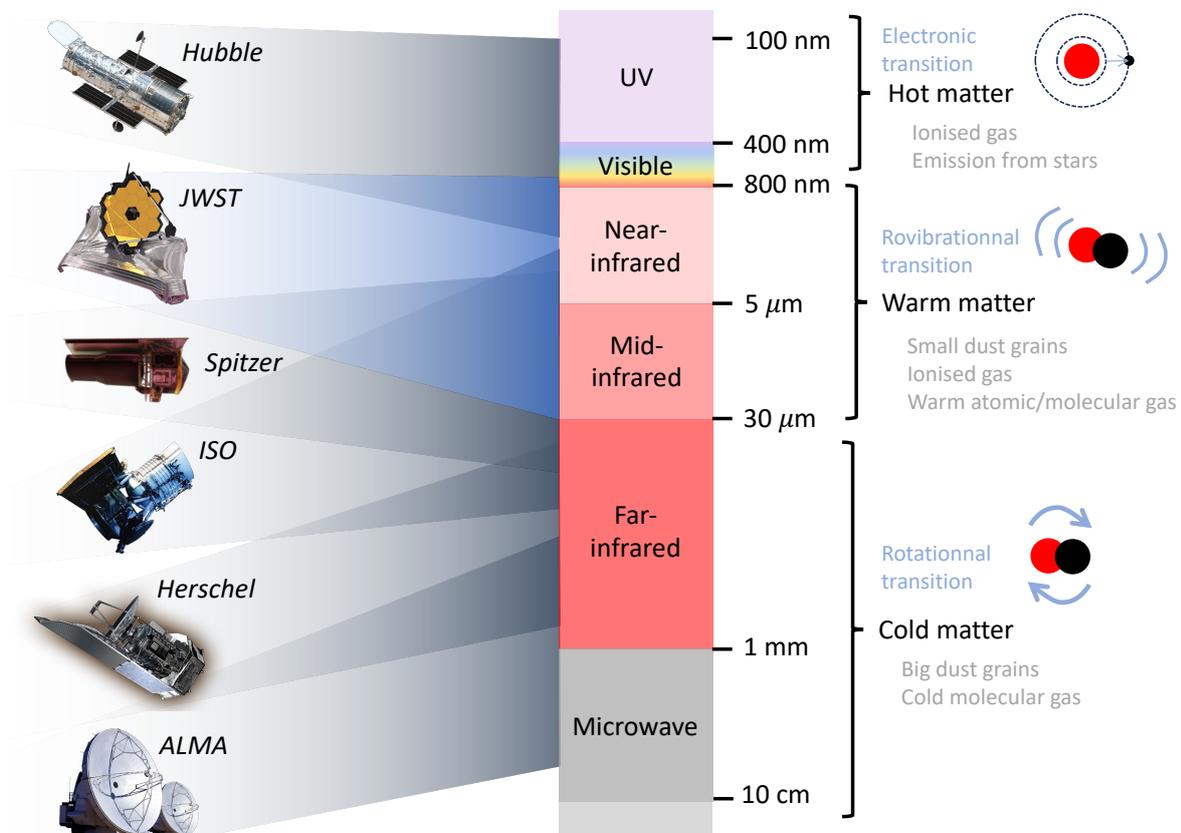


FIGURE 1.8 – Présentation de quelques télescopes spatiaux emblématiques, de leur couverture spectrale et des régions tracées ainsi que les transitions atomiques et moléculaires observées.

Dans les années 1990, le télescope spatial *Hubble* (HST) avait révolutionné l'astronomie avec ses images époustouflantes d'une grande variété d'objets de l'espace. Ce dernier est composé d'un miroir de 2,4 m, et observe principalement dans l'ultraviolet, le visible et dans l'infrarouge proche (de 115 à 2500 nm). Cette gamme de longueurs d'onde lui a permis d'observer les étoiles et les régions H II. Avec sa grande résolution spatiale dans le visible (0,1"), il a permis de révéler la complexité de nombreuses structures du gaz ionisé présent dans le milieu interstellaire, dans les galaxies, etc. Cependant, les étoiles et les systèmes planétaires naissent dans des nuages de gaz et de poussières qui absorbent la lumière visible émise par ces objets. Ces derniers étaient donc invisibles aux yeux d'*Hubble*. C'est pourquoi rapidement, le besoin d'observer dans l'infrarouge s'est fait ressentir. En effet, ces nuages de gaz sont en partie transparents à l'émission infrarouge, ce qui permet aux photons émis par ces objets enfouis d'atteindre le télescope. La Figure 1.9 montre ce phénomène grâce à l'observation dans le visible et dans l'infrarouge du nuage moléculaire sombre Barnard 68. C'est pourquoi de nombreux télescopes observant dans l'infrarouge font leur apparition pour aller sonder cette matière enfouie dans les nuages.



FIGURE 1.9 – (Gauche) Image profonde en bande B, V, I ($0,44 \mu\text{m}$, $0,55 \mu\text{m}$, $0,90 \mu\text{m}$) du nuage moléculaire sombre Barnard 68 prise avec le *Very Large Telescope* (VLT) de l'ESO situé dans les Andes chiliennes. À ces longueurs d'onde visibles, le nuage est complètement opaque en raison de l'extinction de la lumière des étoiles d'arrière-plan causée par les grains de poussière interstellaire qui imprègnent le nuage. (Droite) Image en bande B, I, K du nuage construite en combinant une image infrarouge en bande K (longueur d'onde de $2,2 \mu\text{m}$) avec les images B et I. L'image en bande K a été obtenue avec le *New Technology Telescope* (NTT) de l'ESO dans les Andes chiliennes. Aux longueurs d'onde du proche infrarouge, le nuage devient transparent et les étoiles situées derrière le nuage apparaissent clairement sur l'image. Image extraite de Alves et al. (2001).

L'infrarouge s'étend d'environ 800 nm à 1 mm et se décompose en trois sous-gammes : l'infrarouge proche (de $\sim 800 \text{ nm}$ à $\sim 5 \mu\text{m}$), l'infrarouge moyen (de $\sim 5 \mu\text{m}$ à $\sim 30 \mu\text{m}$) et l'infrarouge lointain ($\sim 30 \mu\text{m}$ à 1 mm). La Figure 1.7 montre que chacune de ces sous-

gamme de longueur d'onde permet d'atteindre différentes phases du milieu interstellaire. L'infrarouge proche et moyen permet alors d'observer la matière chaude alors que l'infrarouge lointain permet d'observer la matière froide. Ainsi, différents télescopes se sont concentrés sur chacune de ces composantes.

Un des premiers télescopes emblématiques observant dans l'infrarouge est l'*Infrared Space Observatory* (ISO), lancé en 1995. Doté d'un miroir de 60 cm, il observe de l'infrarouge proche à l'infrarouge lointain ($2,5 \mu\text{m}$ à $240 \mu\text{m}$). C'est un des premiers télescopes permettant de faire de la spectroscopie dans cette gamme de longueurs d'onde. Il a donc permis les premières observations de H_2 rotationnellement excité, des bandes aromatiques de la poussière et des principales raies de refroidissement du milieu interstellaire C II et O I (voir Chapitre 2, Section 2.1.1.4). Celui-ci est suivi par *Spitzer*, lancé en 2003. Il observe de $3,6$ à $100 \mu\text{m}$. *Spitzer* se concentre alors sur une gamme spectrale plus petite avec une résolution spectrale plus faible. Cependant, grâce au progrès technique sur les détecteurs infrarouges, *Spitzer* présente des capacités nettement supérieures à ISO d'un point de vue de la sensibilité. Cela lui a permis d'observer des disques protoplanétaires, jusqu'alors trop faibles pour être détectés par ISO. Grâce à son miroir de 85 cm donc légèrement plus grand que celui d'ISO, il a également une meilleure résolution spatiale. En effet, la résolution spatiale d'un télescope dépend proportionnellement de la taille du miroir. Ces deux télescopes sont alors complémentaires et ont permis d'observer la matière chaude du milieu interstellaire et ont été essentiels dans l'étude de l'émission des petits grains de poussières chauds (voir Figure 1.7). Pour compléter ces observations, est lancé en 2009, le télescope spatial *Herschel*, doté d'un miroir de 3,5 m et observant dans l'infrarouge lointain de 55 à $672 \mu\text{m}$. Grâce à cette gamme de longueurs d'onde, *Herschel* est alors capable d'observer l'émission thermique des grains de poussière froids et l'émission du gaz moléculaire froid (voir Figure 1.7). *Herschel* a également été essentiel, comme ISO, dans la détection de raies de refroidisseurs de gaz comme les raies de C II et O I permettant de contraindre les transferts d'énergie et les conditions physiques du milieu. L'interféromètre *Atacama Large (sub)-Millimeter Array* (ALMA), observant dans le millimétrique (après l'infrarouge) permet également d'observer le gaz moléculaire froid. Grâce à l'interférométrie, il atteint de bien meilleure résolution que *Herschel*, jusqu'à $0,05''$, et permet donc de mieux résoudre les structures de l'émission du gaz froid. De plus, sa grande résolution spectrale lui permet d'étudier la dynamique des objets observés grâce au décalage et à l'étalement Doppler des raies. Un résumé de la couverture spectrale de ces télescopes et de leurs objectifs est présenté en Figure 1.8

Ainsi l'étude combinée des observations de ces différents télescopes permet d'obtenir une vue complète des spectres de galaxies en traçant l'émission des étoiles et des régions H II (*Hubble*), du gaz et de la poussière chaude (*Spitzer* et ISO) et du gaz et de la poussière froide (*Herschel*, ALMA) comme le montre la Figure 1.10. Cependant, les observations dans l'infrarouge n'atteignent jamais la qualité des images que nous a proposées *Hubble* dans l'ultraviolet-visible. En effet, la résolution spatiale d'un télescope dépend de la taille du miroir, mais également de la longueur d'onde d'observation selon la formule $R = \lambda/D_{\text{miroir}}$. Réaliser un télescope dans l'infrarouge avec la même résolution spatiale que *Hubble* nécessite alors un très grand miroir et est donc un défi technique. Le *James Webb Space Telescope* arrive alors comme une véritable révolution dans l'observation dans l'infrarouge. En effet, grâce à son miroir de 6,5 m de diamètre, il atteint une résolution spatiale comparable à celle d'*Hubble*. Celle-ci permet alors de réaliser les images les plus détaillées jamais obtenues

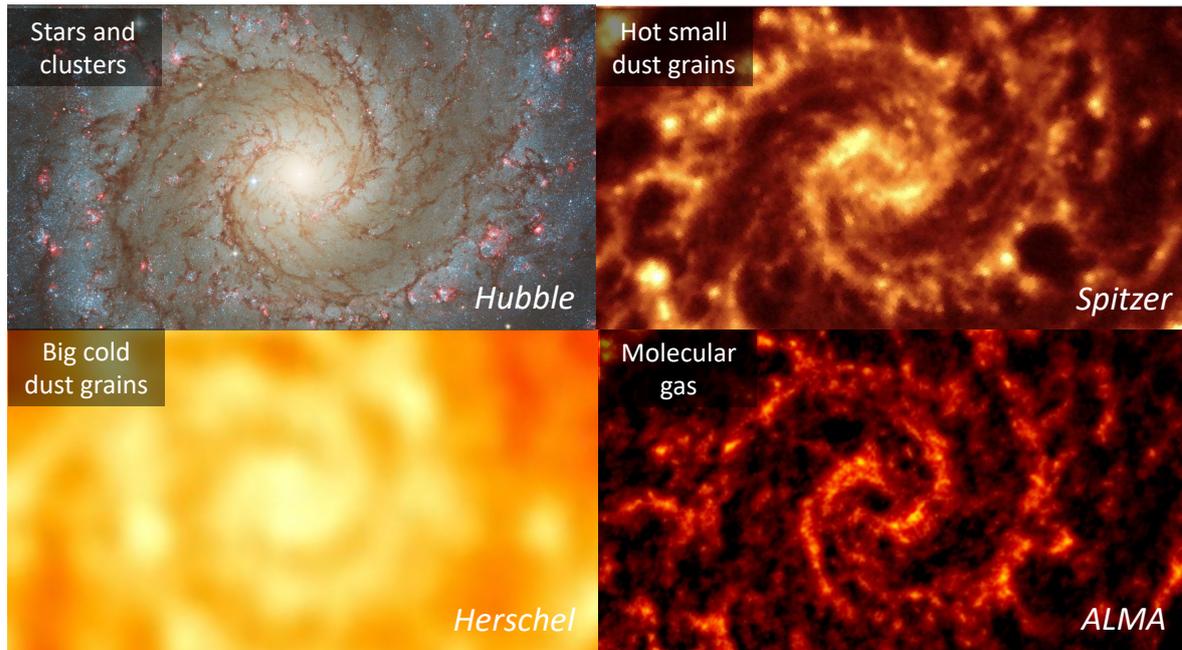


FIGURE 1.10 – Images de la Galaxie du Fantôme (NGC-628) observée par différents télescopes. (Haut gauche) Image réalisée avec *Hubble* dans les filtres F435W, F555W, F656N, F814W. Cette image trace l'émission des étoiles et du gaz ionisé. (Haut droite) Image réalisée avec *Spitzer*. Cette image trace l'émission de la poussière chaude. (Bas gauche) Image réalisée avec *Herschel* à $250\ \mu\text{m}$. Cette image trace l'émission de la poussière froide. (Bas droite) Image réalisée avec ALMA de l'émission de CO. Cette image trace le gaz moléculaire. Crédit *Hubble* : NASA, ESA, CSA, STScI, Janice Lee (STScI), Thomas Williams (Oxford), PHANGS Team. Crédit *Spitzer* : NASA/JPL-CALTECH. Crédit *Herschel* : ESA and the SPIRE Consortium. Crédit ALMA : ALMA (ESO/NAOJ/NRAO) ; NRAO/AUI/NSF, B. Saxton.

dans l'infrarouge. Véritable successeur de *Spitzer* puisqu'il observe également dans l'infrarouge proche/moyen, le JWST permet réellement de sonder les sous-structures des régions observées par ce dernier (voir Figure 1.11). Évidemment, le plus petit élément résolu dans un objet observé par le JWST dépendra de la distance de la source. La Table 1.3 montre la taille du plus petit élément résolu pour différentes sources. On remarque alors que plus la source est proche, plus on peut résoudre des structures petites, mais on ne pourra pas obtenir des cartes à grandes échelles aussi facilement que pour une source éloignée.

La très grande résolution spatiale n'est pas la seule avancée du JWST. Ce dernier a en effet de meilleures performances que *Spitzer* sur tous les fronts. La Table 1.4 présente une comparaison entre ces deux télescopes. On remarque alors que le JWST a une résolution spatiale quasiment 10 fois plus grande et est 100 fois plus sensible. La résolution spectrale est 5 à 50 fois plus grande pour le JWST que pour *Spitzer*. L'augmentation de cette résolution spectrale permet de séparer des raies qui seraient mélangées dans les données de *Spitzer* mais également permet d'augmenter le rapport signal à bruit des détections.

Le JWST est une révolution dans l'étude du milieu interstellaire. Sa grande sensibilité

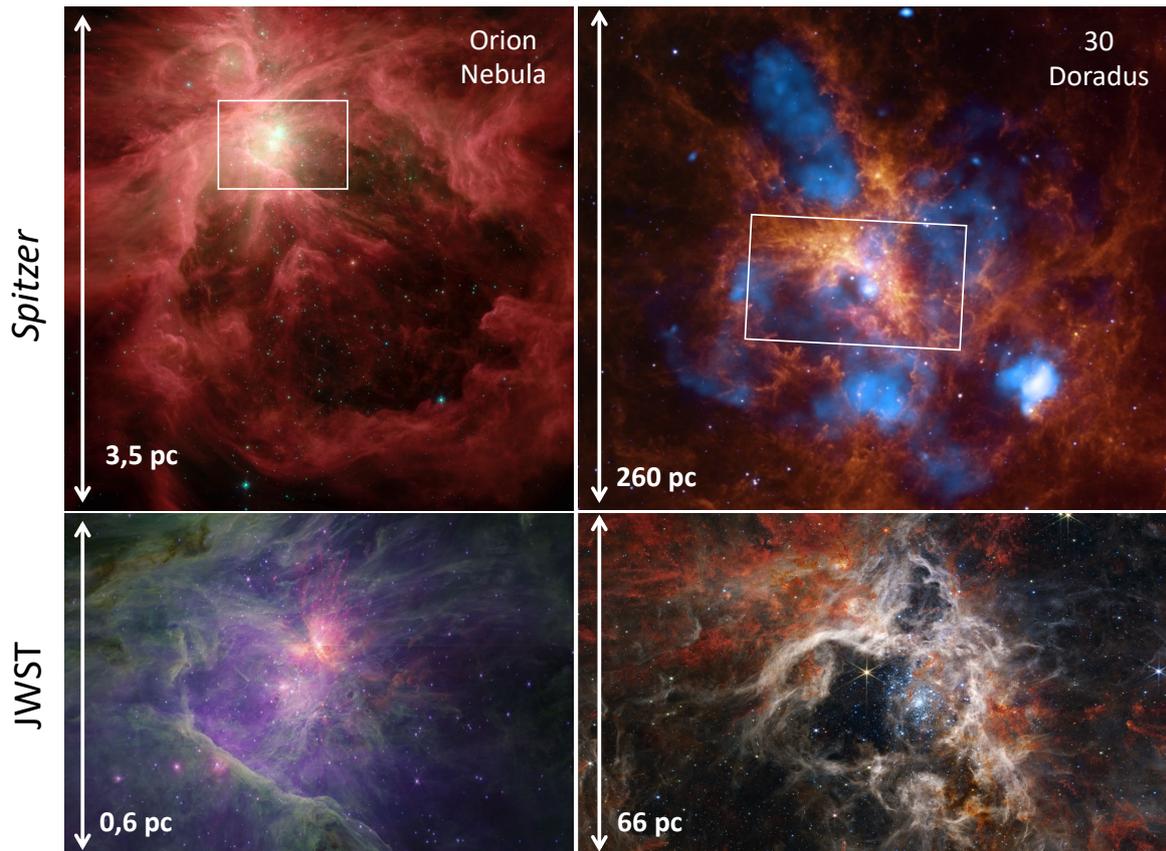


FIGURE 1.11 – Comparaison des images réalisées avec *Spitzer* (haut) et le *James Webb Space Telescope* (JWST) (bas) de la Barre d’Orion (gauche) et de la Nébuleuse de la Tarantule, aussi appelée 30 Doradus (droite). Les rectangles blancs représentent le champ de vue JWST sur les images *Spitzer*. Crédit Nébuleuse d’Orion : *Spitzer* : NASA/JPL-Caltech/T. Megeath (University of Toledo, Ohio); JWST : NASA, ESA, CSA / Science leads and image processing : M. McCaughrean, S. Pearson. Crédit 30 Doradus : *Chandra* : NASA/CXC/PSU/Townsley et al. (2006); *Spitzer* : NASA/JPL/PSU/Townsley et al. (2006); JWST : NASA, ESA, CSA, STScI, Webb ERO Production Team.

permet de détecter des sources astrophysiques très faibles qui jusqu’alors étaient inaccessibles. Elle permet également l’accès à l’émission de raies faibles de molécules et donc à la chimie des éléments les plus importants (carbone, oxygène). Ensuite, c’est le seul observatoire dans l’infrarouge qui permet d’étudier le gaz et la poussière ensemble avec une précision sans précédent. Sa gamme de longueur d’onde lui permet d’atteindre différents traceurs des régions chaudes et irradiées. Dans la phase solide, il atteint l’émission de bandes des poussières carbonées, l’émission des silicates, les bandes d’absorption des glaces et également l’émission continuum de la poussière chaude ainsi que la transition vers la diffusion de la poussière. Il détecte aussi des ions et des atomes avec les raies de structure fine, les raies de fluorescence et les raies de recombinaison qui permettent de tracer des paramètres physiques des régions chaudes (la température, la densité d’électron, les gradients de pression, la métallicité, la position du front d’ionisation...). Finalement, il atteint également l’émission de molécules avec les raies purement rotationnelles et rovibrationnelles de H_2 (qui servent de

Région de formation stellaire	IC63	Nébuleuse d'Orion	Nébuleuse de la Carène	Nébuleuse de la Tarentule
Distance à la source	$\sim 150 \text{ pc}^a$	414 pc^b	$\sim 2,5 \text{ kpc}^c$	$\sim 50 \text{ kpc}^d$
Taille d'une carte de largeur 75 pc^e	$1700' \times 1700'$	$615' \times 615'$	$100' \times 100'$	$5' \times 5'$
Résolution spatiale	$7 \times 10^{-5} \text{ pc}$ 15 au	$2 \times 10^{-4} \text{ pc}$ 40 au	1×10^{-3} 200 au	$2 \times 10^{-2} \text{ pc}$ 4000 au

TABLE 1.3 – Table présentant les caractéristiques d'une image prise avec le JWST de différents objets.

Notes. ^(a) Soam et al. (2021). ^(b) Valeur estimée par Menten et al. (2007) discutée dans le Chapitre 3, Section 3.2.2. ^(c) Kuhn et al. (2019). ^(d) Selman et al. (1999). ^(e) Valeur à comparer avec le champ de vue de NIRCcam de $2,2' \times 2,2'$ (voir Section 3.1.3.1).

	<i>Spitzer</i>		JWST	
	Résolution	Sensibilité ^a	Résolution	Sensibilité ^a
Imagerie MIR	$\sim 3,6\text{-}10''$	$\sim 100 \mu\text{Jy}$	$0,3\text{-}1''$	$1\text{-}3 \mu\text{Jy}$
Spectroscopie MIR	$\sim 60\text{-}600$	$\sim 10^{-15}$ $\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$	~ 3000	$1\text{-}10 \times 10^{-17}$ $\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

TABLE 1.4 – Comparaison de la résolution spatiale, spectrale et de la sensibilité de *Spitzer* et du JWST.

Notes. ^(a) Les sensibilités sont calculées pour une source ponctuelle à 10σ pour une exposition de 10 000 s.

thermomètre du gaz et contraignent les gradients de pression et les processus de formation de H_2 , voir Chapitre 2, Section 2.2.1), les raies rovibrationnelles de CO, les raies très excitées rotationnellement et rovibrationnellement de H_2O , OH, CH^+ , etc et enfin les raies rovibrationnelles des molécules non polaires (CH_4 , C_2H_2 , HCN...). Sa grande résolution spatiale permet de contraindre les conditions physiques et chimiques des environnements jusqu'à de très petites échelles spatiales (~ 100 au, soit un peu moins que le double de l'orbite de Neptune, pour des sources à la distance de la Nébuleuse d'Orion). Cet accès aux très petites échelles spatiales est essentiel pour étudier les zones de transition entre les différentes phases du milieu interstellaire (H^+/H et H/H_2). Elle permet alors de mieux contraindre l'évolution spatiale des propriétés des grains et d'en comprendre les conséquences sur l'émission du gaz. De plus, cette grande résolution spatiale permet de résoudre les disques protoplanétaires. Cela ouvre alors une fenêtre sur les disques fortement irradiés par les étoiles massives, beaucoup moins étudiés observationnellement que les disques isolés alors que statistiquement plus nombreux (voir Chapitre 2, Section 2.1.2.1).

Chapitre 2

Impact de la rétroaction radiative des étoiles massives sur les interfaces irradiées

2.1	Structure physique et chimique des interfaces irradiées	42
2.1.1	Les Régions de Photodissociation (PDR)	42
2.1.2	Les disques protoplanétaires irradiés	60
2.2	La chimie chaude des régions irradiées	66
2.2.1	La molécule de H ₂	66
2.2.2	La molécule de H ₂ comme précurseur de la chimie en phase gazeuse	74
2.2.3	Processus d'excitation hors équilibre thermodynamique local (ETL)	79

2.1 Structure physique et chimique des interfaces irradiées

Dans le Chapitre 1, nous avons décrit les différentes phases du milieu interstellaire, leurs différentes interactions entre elles et surtout la rétroaction stellaire sur la formation stellaire. Dans la Section 1.2, nous avons mis en évidence le fait que la rétroaction radiative par ionisation des espèces environnantes est, dans la majorité des environnements, le mécanisme dominant de rétroaction stellaire. Inoguchi et al. (2020) poussent cette analyse plus loin en étudiant, en plus de l'expansion de régions H II due aux photons ultraviolets extrêmes (EUV, $E > 13,6$ eV), l'impact des photons ultraviolet lointain (FUV, $E < 13,6$ eV) sur la formation stellaire. Le rayonnement FUV peut également réduire l'efficacité de la formation stellaire par chauffage photoélectrique des nuages. De plus, il affecte les états chimiques du gaz en photodissociant des molécules. Cette étude conclut alors que la rétroaction par les photons FUV peut être plus efficace que les photons EUV. Dans la suite de cette Section, nous décrirons alors comment le rayonnement FUV émis par les étoiles massives chamboule la structure physique et chimique des nuages environnants. Plus précisément, nous décrirons les propriétés des régions produites au bord des nuages par ce rayonnement UV : les Régions de Photodissociation. Nous décrirons également comment cet intense rayonnement UV peut impacter les propriétés physiques et chimiques des disques protoplanétaires présents dans ces régions fortement irradiées.

2.1.1 Les Régions de Photodissociation (PDR)

Les Régions de Photodissociation (PDRs) sont les environnements dans lesquels cette rétroaction par l'émission de photons FUV par les étoiles massives domine. De plus, l'effet déclencheur de formation stellaire dû à la compression du gaz par l'expansion de la région H II s'observe dans les PDRs puisqu'elles se situent à l'interface entre le gaz ionisé et moléculaire. Les PDRs sont donc les régions où ces deux processus, rétroaction négative et positive, s'affrontent. Leur étude est alors essentielle pour contraindre ce phénomène. Ces PDRs sont également présentes à la surface de disques protoplanétaires irradiés par un champ ultraviolet lointain (*e.g.*, Visser et al. 2007; Woitke et al. 2009, que l'on discutera dans la Section 2.1.2) et gouvernent la perte de masse de ces objets par photoévaporation qui limite la formation planétaire (voir Section 2.1.2.3). De plus, les observations et modèles de nébuleuses planétaires montrent qu'une large fraction du gaz éjecté par les étoiles évoluées passent par une phase sous forme de PDR avant d'être injectée dans le milieu interstellaire (Hollenbach & Natta 1995; Bernard-Salas & Tielens 2005). Du fait de la conversion du rayonnement FUV par la poussière et le gaz, ces régions dominent l'essentiel du rayonnement infrarouge proche et moyen des galaxies. Ainsi, toutes les structures brillantes révélées par le JWST dans les galaxies (voir la Galaxie du Fantôme dans la Figure 1.3) sont en réalité ces régions fortement irradiées par des étoiles massives. Étudier ces environnements est donc essentiel à la compréhension des observations des galaxies qui constituent une grande partie des cibles du JWST. En effet, il est nécessaire de comprendre les processus énergétiques et d'excitation qui produisent cette émission pour interpréter les données. La compréhension des processus physiques et chimiques dans les PDRs est un élément clé pour comprendre les galaxies.

2.1.1.1 Structure générale de la PDR

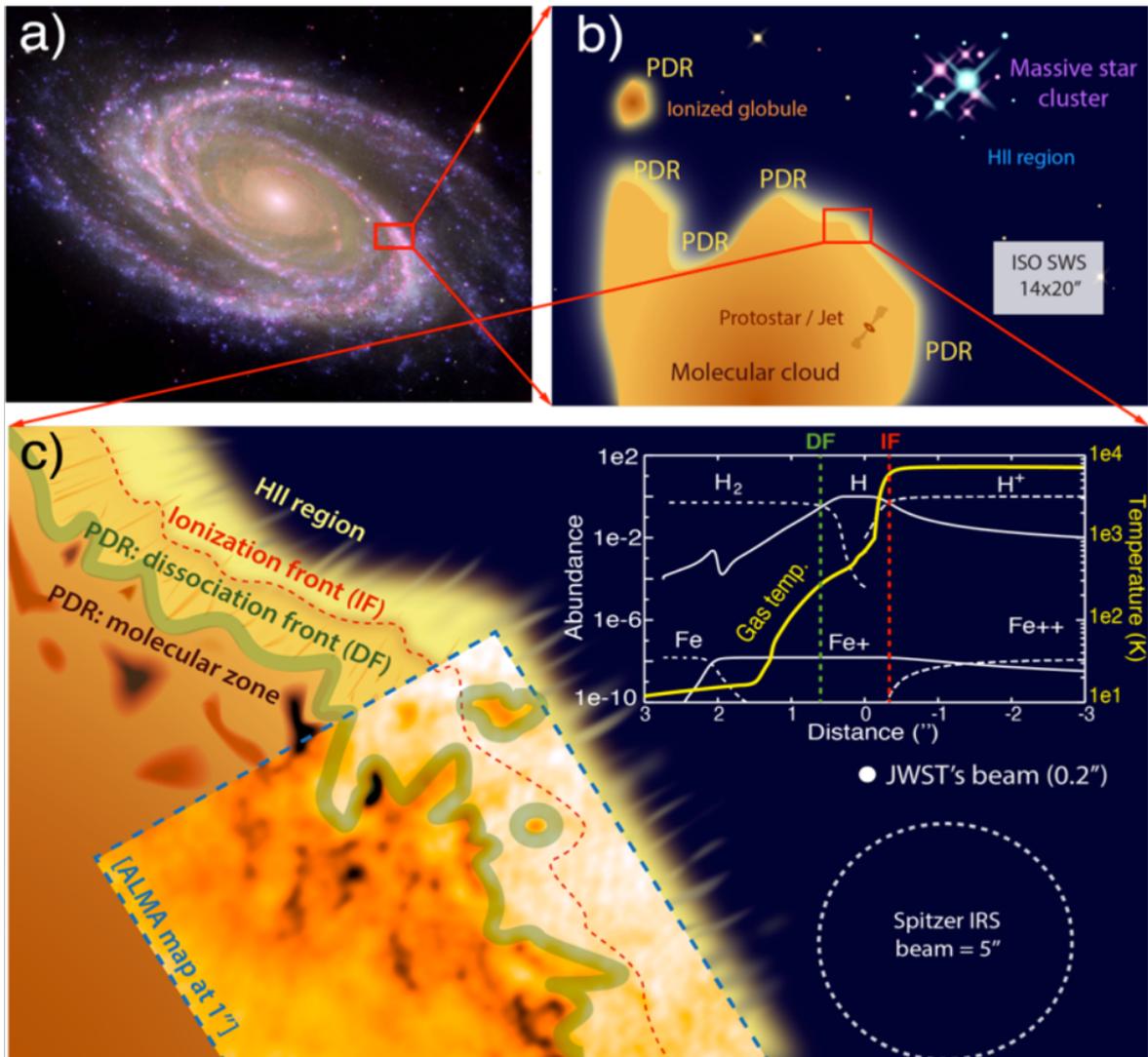


FIGURE 2.1 – Zoom sur une région de photodissociation dans une galaxie. a) Image de la galaxie M81 : étoiles massives (bleu), lumière dans le domaine visible des régions interstellaires ionisées (vert) et émission des régions de photodissociation (PDRs) (rouge). b) Schéma d'un nuage moléculaire irradié par une ou des étoiles massives. c) Zoom sur l'une des nombreuses PDRs montrant la transition complexe entre le nuage moléculaire et la région ionisée. Les données de gaz moléculaire ALMA de la barre d'Orion sont insérées à une résolution de 1'. L'encart montre un modèle de la structure physique de la PDR.

La PDR se situe à l'interface entre le gaz ionisé, *i.e.* la région H II, et le gaz moléculaire. On observe une structure en couche depuis l'étoile jusque dans le nuage moléculaire. Autour de l'étoile, dû à son champ de rayonnement UV intense, se forme une région ionisée H II. En effet, les photons ultraviolets extrêmes (EUV, $E > 13,6$ eV) émis par l'étoile sont capables d'ioniser l'hydrogène atomique. On considère que la PDR commence au front d'ionisation où tous les photons capables d'ioniser l'hydrogène atomique ont été absorbés. Une vision schématique de la PDR est présentée dans la Figure 2.1. Après le front d'ionisation (H⁺/H),

seuls les photons avec des énergies $E < 13,6$ eV peuvent pénétrer. Ainsi, la région devient globalement neutre. Seules les espèces ayant un potentiel d'ionisation inférieur à celui de l'hydrogène peuvent encore être ionisées, ce qui est le cas, par exemple, du carbone et du soufre atomique ($E_{\text{pot}} = 11,3$ eV pour le carbone et $E_{\text{pot}} = 10,4$ eV pour le soufre). Les photons ultraviolet lointain (FUV, $6 \text{ eV} < E < 13,6$ eV) peuvent dissocier la majorité des molécules expliquant leur faible abondance dans cette zone. Le rayonnement UV pénétrant dans le nuage est graduellement éteint par la poussière absorbant le rayonnement UV, phénomène décrit plus précisément dans la Section 2.1.1.2, et par le gaz, par auto-écranage de H_2 , par exemple, que nous décrirons dans la Section 2.2.1.3. Ainsi, au front de dissociation (H/H_2), le champ UV est suffisamment éteint pour que des molécules survivent. Le gaz devient progressivement moléculaire.

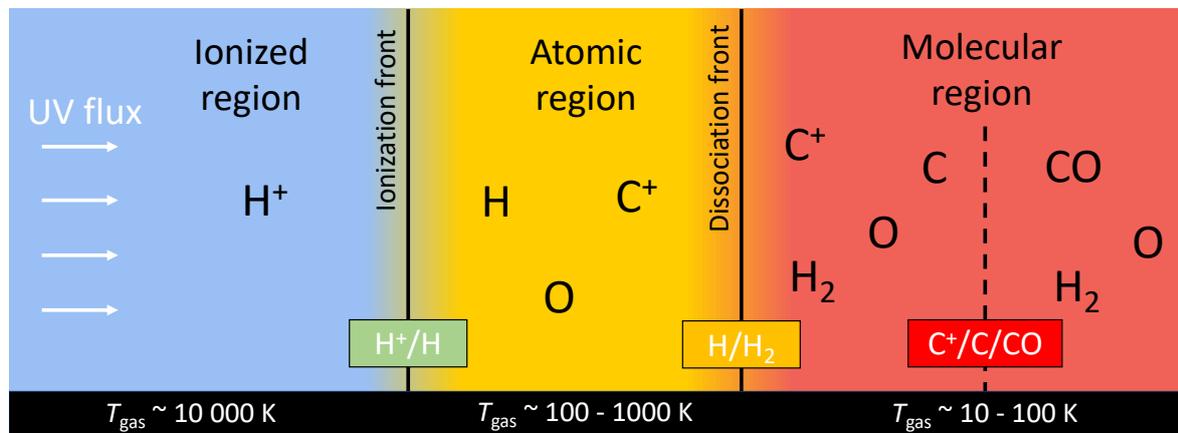


FIGURE 2.2 – Schéma d'une région de photodissociation. La région de photodissociation est éclairée par la gauche. L'extinction progressive du champ UV explique la transition progressive du gaz ionisé (H^+) vers le gaz atomique (H) vers le gaz moléculaire (H_2). Le potentiel d'ionisation du carbone étant inférieur à celui de l'hydrogène, la transition $\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}$ se produit plus profond dans le nuage.

Du fait de cette extinction progressive du rayonnement UV, la PDR comporte alors différentes couches avec des propriétés chimiques très différentes (atomique, moléculaire). Les variations de la composition chimique sont représentées dans la Figure 2.2. Cependant, ce rayonnement UV a aussi un impact conséquent dans les propriétés physiques du nuage. En effet, la température du gaz varie grandement de la région ionisée à la région moléculaire. Au bord du nuage, dans la région H II , la température peut atteindre jusqu'à $10\,000$ K alors que plus profond dans la région moléculaire, elle peut descendre jusqu'à 10 K. La densité du gaz varie aussi progressivement en pénétrant dans le nuage. La région H II est relativement diffuse alors que le gaz moléculaire est plus dense. Le profil exact de densité est fixé par les effets de dynamique présents dans ces régions (compression du gaz par l'expansion de la région H II , photoévaporation du gaz...) et l'équilibre des pressions. Ce dernier implique que la pression est relativement constante dans toute la PDR et est quasiment égale à la pression de la région H II (voir Chapitre 1, Section 1.2.2.2). Ainsi, dans des environnements dans lesquels la pression thermique domine, la diminution de la température du gaz et l'augmentation de la densité sont simultanées. Il est important de noter que si l'environnement est baigné dans un fort champ magnétique et que la pression magnétique est importante, la pression thermique

ne sera peut-être plus constante dans la PDR. Dans la suite de cette thèse, nous supposons que la pression thermique domine largement sur la pression magnétique et la pression de turbulence et que les PDRs peuvent être considérées isobares. Cette hypothèse est justifiée dans le cadre de ces travaux puisque les échelles de temps et d'espace étudiés dans le présent manuscrit sont suffisamment petites pour que les effets de dynamique puissent être négligés. De plus, le champ magnétique des sources étudiées est suffisamment faible pour négliger la pression magnétique. Enfin, la structure isobare est également en accord avec des modèles prenant en compte la dynamique (comme la photoévaporation de la PDR) puisque ceux-ci montrent que la pression varie uniquement d'un facteur 2 dans la PDR (voir Section 2.1.1.6). La chute rapide de la température au front d'ionisation explique l'augmentation brutale de densité dans la région atomique. De la même façon, la température chute brusquement au front de dissociation qui se traduit également par une augmentation de la densité dans la région moléculaire.

En raison de la structure en couches avec une forte variation des conditions physiques à travers la PDR, une étude multi-longueurs d'onde est nécessaire pour tracer chaque zone. Les raies d'émission avec des niveaux supérieurs à haute énergie des ions atomiques (*e.g.*, S⁺, Si⁺, Fe⁺, Kaufman et al. 2006) tracent le front d'ionisation. Les raies rovibrationnelles et purement rotationnelles de H₂ (*e.g.*, Parmar et al. 1991; Luhman et al. 1994; van der Werf et al. 1996; Walmsley et al. 2000; Allers et al. 2005; Habart et al. 2005, 2011; Sheffer et al. 2011; Kaplan et al. 2017; Zhang et al. 2021) sondent le front de dissociation de H⁰/H₂. Un peu plus profond dans la PDR, le gaz moléculaire excité est tracé par des raies rotationnellement excitées dans l'infrarouge lointain provenant d'espèces telles que CO (*e.g.*, Stutzki & Guesten 1990; Tauber et al. 1994; Hogerheijde et al. 1995; Nagy et al. 2017; Joblin et al. 2018; Parikka et al. 2018), CH⁺ ou OH (*e.g.*, Goicoechea et al. 2011; Parikka et al. 2017). Les signatures clés des PDRs dans l'infrarouge comprennent également des bandes aromatiques et du continuum émis par les poussières (*e.g.*, Tielens et al. 1993; Compiègne et al. 2011; Schirmer et al. 2020). L'émission des poussières dans l'infrarouge proche et moyen permet de tracer la région atomique chaude et les fronts de dissociations alors que l'émission dans l'infrarouge lointain trace les régions moléculaires plus profondes et plus froides.

2.1.1.2 Extinction du champ UV par la poussière

De cette brève introduction aux régions de photodissociation, on comprend l'importance du champ UV et de son extinction dans la structure physico-chimique du bord du nuage puisque c'est cette variation du champ UV qui explique la structure en couche. La poussière interstellaire est un élément essentiel à l'atténuation du champ UV dans les nuages moléculaires. En effet, les grains de poussières absorbent et diffusent les photons UV et réémettent ensuite dans l'infrarouge et le millimétrique. D'ailleurs, les photons réémis peuvent à leur tour chauffer le gaz dans les couches internes plus profondes. Le rayonnement entrant dans le nuage est alors atténué selon la relation :

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \times e^{-\tau_\lambda} \quad (2.1)$$

τ_λ est un paramètre s'appelant épaisseur optique qui permet de mesurer l'absorption et

la diffusion du rayonnement. Pour un nuage homogène de taille l , composé de grains de poussières sphériques de rayon r , la profondeur optique s'exprime comme suit :

$$\tau_\lambda = n_d Q_{\text{ext}}(r, \lambda) \pi r^2 l \quad (2.2)$$

où n_d est la densité de la poussière et $Q_{\text{ext}}(r, \lambda)$ est l'efficacité de l'extinction à la longueur d'onde λ pour un grain de rayon r . Puisque l'extinction est composée d'absorption et de diffusion, Q_{ext} peut être décomposé en une efficacité d'absorption Q_{abs} , et une efficacité de diffusion Q_{sca} : $Q_{\text{ext}} = Q_{\text{abs}} + Q_{\text{sca}}$. L'épaisseur optique est également reliée proportionnellement à une quantité qui mesure la diminution en magnitude apparente causée par l'extinction A_λ , par la relation :

$$A_\lambda = 1,086 \times \tau_\lambda \quad (2.3)$$

La courbe d'extinction décrit la dépendance de A_λ en fonction de la longueur d'onde. Calculer précisément cette courbe est un défi de l'astronomie moderne puisque celle-ci dépend de la composition précise, de la taille et de la forme de la poussière et peut donc varier grandement en fonction des objets, mais également de la position à l'intérieur du nuage. Ainsi, de nombreuses études ont essayé de paramétrer la courbe d'extinction, en se basant sur les propriétés des grains, afin de pouvoir l'ajuster aux observations. La courbe d'extinction est souvent normalisée à l'extinction visible A_V qui est définie à 547 nm. Cette courbe est paramétrée avec R_V , introduit par Cardelli et al. (1989), qui est défini comme le rapport de l'extinction totale sur l'extinction sélective :

$$R_V = \frac{A_V}{A_B - A_V} \quad (2.4)$$

où A_B est l'extinction dans le bleu à 440,5 nm.

Ce paramètre R_V varie en fonction de la taille des grains (Fitzpatrick & Massa 1988). Les valeurs typiques sont de $R_V = 3,1$ dans les nuages diffus (Johnson 1965; Schultz & Wiemer 1975; Whittet & van Breda 1980) et $R_V = 5,5$ dans les nuages moléculaires denses (Cardelli et al. 1989).

Des exemples de courbes d'extinction sont présentés dans la Figure 2.3. Plusieurs caractéristiques sont révélées dans cette courbe. Tout d'abord, nous observons une bosse dans l'UV à 217,5 nm. Cette bosse a été révélée pour la première fois par Stecher (1965, 1969). Si son intensité et sa largeur peuvent varier, sa position reste relativement constante (Fitzpatrick & Massa 1986). Nous attribuons généralement cette bosse à l'absorption des photons UV par les matériaux carbonés dans leurs niveaux électroniques. Cette signature est créée par des particules de tailles nanométriques, que nous nommerons nanograins dans la suite de ce manuscrit. Plusieurs études suggèrent différents porteurs : le graphite (Draine & Lee 1984), les hydrocarbures aromatiques polycycliques (PAHs, *e.g.*, Joblin et al. 1992; Steglich et al. 2011) et les carbones amorphes hydrogénés (*e.g.*, Jones 1990, 2016; Gavilan et al. 2017). Ensuite, nous pouvons observer deux bosses dans l'infrarouge à 9,7 et à 18 μm . Cette absorption est due aux silicates. Ces signatures sont liées aux modes de vibrations des liaisons Si-O et O-Si-O des silicates amorphes de type olivine et pyroxène. Ces bandes sont largement observées dans le milieu diffus (*e.g.*, Whittet et al. 1997; Chiar et al. 2000; Chiar

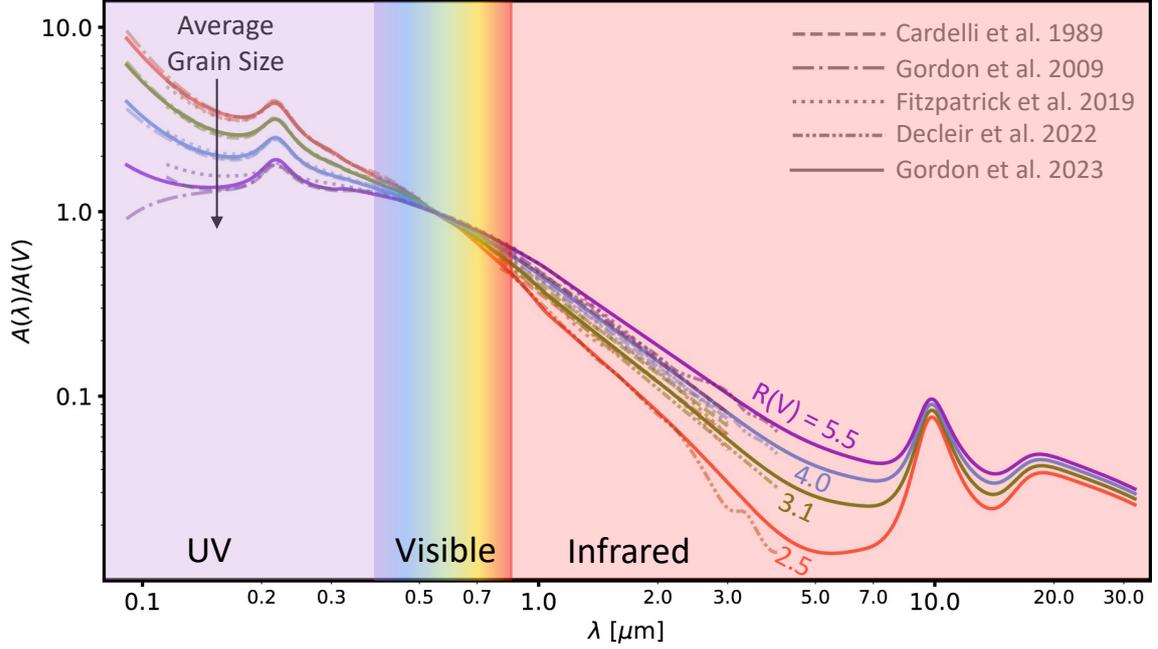


FIGURE 2.3 – Courbe d’extinction paramétrée de Gordon et al. (2023) évaluée pour quatre valeurs R_V représentatives. Celle-ci est comparée aux relations paramétrisées de la littérature pour les mêmes valeurs de R_V (Cardelli et al. 1989; Gordon et al. 2009; Fitzpatrick et al. 2019; Declair et al. 2022).

& Tielens 2006; Fogerty et al. 2016) mais également dans les nuages moléculaires (*e.g.*, van Breemen et al. 2011).

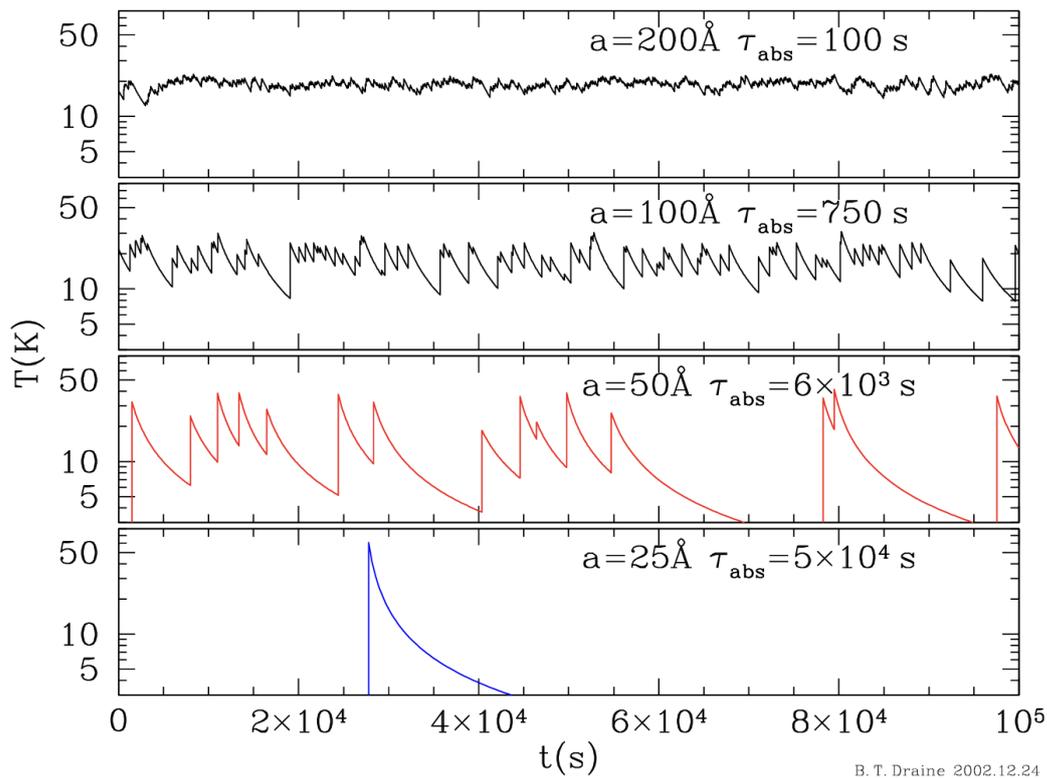
2.1.1.3 Emission des poussières

L’énergie absorbée par la poussière du rayonnement UV est alors réémise dans l’infrarouge. L’émission de la poussière domine largement le spectre de l’infrarouge moyen au submillimétrique. En effet, en absorbant le rayonnement UV, les grains de poussières sont chauffés et se refroidissent en émettant dans l’infrarouge. Chaque type de grains domine alors une partie du spectre.

La Figure 2.4 montre la variation de la température de grains en fonction du temps pour différents rayons. Ainsi, la température des gros grains (de rayon $r \gtrsim 0,02 \mu\text{m}$) varie peu avec le temps (panneau du haut). Ils sont à l’équilibre thermique avec le rayonnement incident. Leur émission est alors celle d’un corps noir modifié à la température d’équilibre :

$$I_\nu = \tau_{\nu_0} B_\nu(T) \left(\frac{\nu}{\nu_0} \right)^\beta \quad (2.5)$$

où τ_{ν_0} est l’opacité à la fréquence de référence ν_0 , B_ν est la fonction de Planck, β est l’indice spectral et T est la température de la poussière.



B. T. Draine 2002.12.24

FIGURE 2.4 – Variation de température des grains carbonés de différents rayons en fonction du temps. τ_{abs} est le temps moyen entre les absorptions de photons, c'est-à-dire le temps moyen entre deux températures maximales. Figure extraite de Draine (2003).

L'émission des gros grains domine le plus souvent l'émission dans l'infrarouge lointain comme montré dans la Figure 2.5. Cependant, le pic du corps noir dépend fortement de l'intensité du champ de rayonnement UV. Celui-ci peut se déplacer vers l'infrarouge moyen lorsque l'intensité du champ UV augmente puisque la température d'équilibre des gros grains augmente. Pour ne citer que quelques ordres de grandeur, pour un champ de rayonnement UV égal au champ de rayonnement interstellaire (ISRF) $G_0 = 1$, la température d'équilibre est de $T_{\text{eq}} \sim 18$ K et donc le corps noir pique autour de $\lambda_{\text{max}} \sim 160 \mu\text{m}$. Pour un champ de rayonnement 10^4 fois plus fort, la température d'équilibre $T_{\text{eq}} \sim 80$ K et donc le corps noir pique autour de $\lambda_{\text{max}} \sim 35 \mu\text{m}$ (Boutéraon 2019). Au contraire, les nanograins ($r \leq 0,02 \mu\text{m}$, qui sont par exemple du graphite, des PAHs, ou des carbones amorphes hydrogénés) sont chauffés stochastiquement. L'absorption d'un photon crée des pics de température autour de 50–100 K puis les grains refroidissent (voir Figure 2.4, panneau du bas). En effet, pour des nano-particules de 0,4 nm et un champ de rayonnement $G_0 = 1$, la température d'équilibre vaut $T_{\text{eq}} \sim 65$ K et pour un champ de rayonnement $G_0 = 10^4$, la température d'équilibre est supérieure à $T_{\text{eq}} \gtrsim 100$ K (Boutéraon 2019). Ces pics de température résultent en une émission d'un spectre large avec des bandes d'émission qui s'étend jusqu'à l'infrarouge proche (voir Figure 2.5). Contrairement aux gros grains, ces grains ne sont pas à l'équilibre thermique. La dureté du champ UV, c'est-à-dire la température effective de l'étoile émettrice, a un impact sur les rapports des bandes aromatiques présentes sur le spectre.

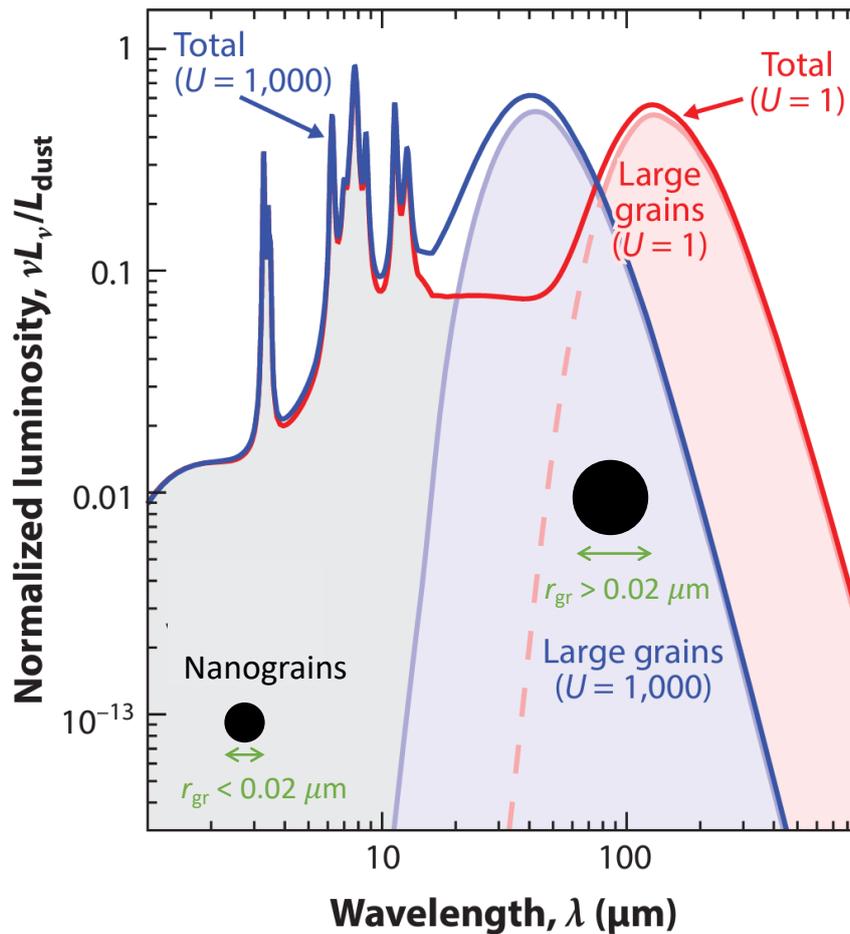


FIGURE 2.5 – Modèle THEMIS d'émission de poussières dans la Voie lactée (Jones et al. 2017), chauffées par le champ de rayonnement interstellaire (ISRF) du milieu interstellaire diffus (intensité ISRF $U = 1$; rouge) et plus intense ($U = 1000$; bleu). Ceci démontre que la forme de la distribution spectrale d'énergie (*spectral energy distribution*, SED) des petits grains hors équilibre (en gris) est indépendante de U . En revanche, la forme de la SED des gros grains, qui sont à l'équilibre avec l'ISRF, se déplace vers des longueurs d'onde plus courtes lorsque U augmente, car leur température d'équilibre augmente. Figure extraite et adaptée de Galliano et al. (2018)

2.1.1.4 Équilibre thermique du gaz

Au-delà de son impact sur la chimie du milieu, le rayonnement UV émis par les étoiles massives affecte l'équilibre thermique des bords de nuage. Différents mécanismes de chauffage vont coupler le gaz aux photons FUV. Les principaux mécanismes de chauffage et de refroidissement sont présentés dans la Figure 2.6 en utilisant des modèles PDR du code de Meudon (version 1.5.4, Le Petit et al. 2006).

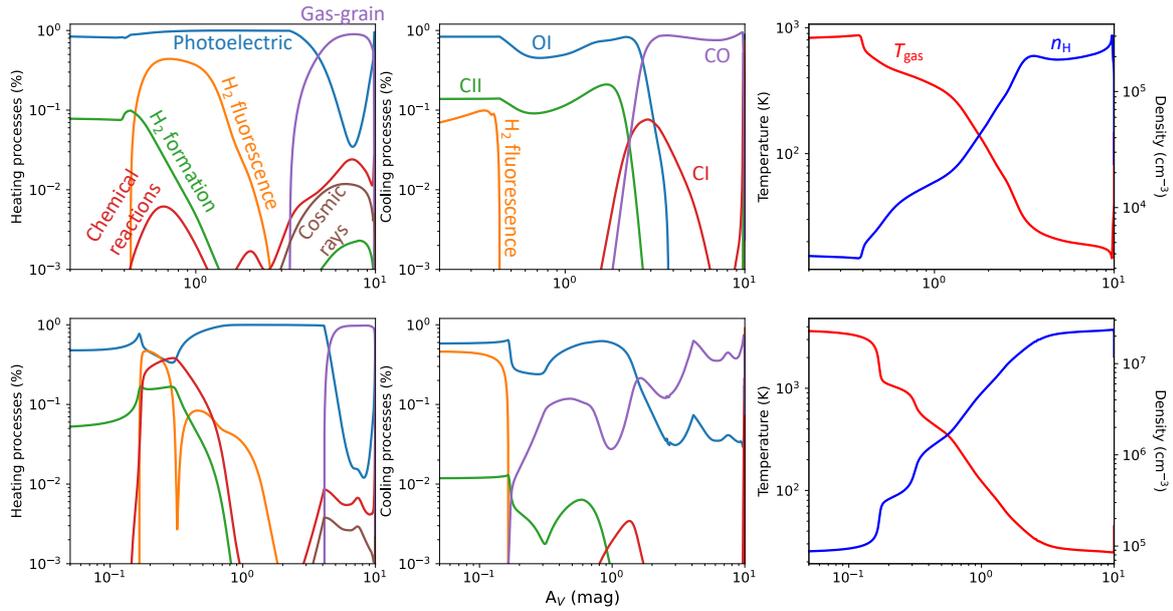


FIGURE 2.6 – Processus dominants de chauffage (gauche) et de refroidissement (milieu) et profil de température et de densité (droite) dans une PDR d’après des modèles du code PDR de Meudon (version 1.5.4, Le Petit et al. 2006) à (Haut) $P_{\text{gas}}/k_B = 3,5 \times 10^6 \text{ K cm}^{-3}$ (Bas) et $P_{\text{gas}}/k_B = 3,5 \times 10^8 \text{ K}$ et $G_0 = 10^4$.

Chauffage

Les mécanismes principaux de chauffage dans les PDRs sont l’effet photoélectrique sur les nanograins de poussières et le chauffage par les molécules de H_2 .

L’effet photoélectrique est dominé par les grains les plus petits présents dans le milieu interstellaire (Watson 1972; Jura 1976). En effet, la moitié du chauffage photoélectrique est attribuée aux espèces avec moins de 1 500 atomes de carbone ($< 15 \text{ \AA}$) et l’autre moitié est attribuée aux espèces de taille $< 100 \text{ \AA}$ (Bakes & Tielens 1994). Les photons FUV absorbés par ces grains peuvent produire des électrons avec des énergies de l’ordre de quelques eV. Ces électrons peuvent alors diffuser dans le grain, atteindre la surface et être injectés dans la phase gazeuse si leur énergie permet de dépasser le travail d’extraction W du grain. Un schéma de ce mécanisme est présenté en Figure 2.7. La probabilité qu’un photon absorbé par un grain permette l’éjection d’un électron est de l’ordre de 10 % (de Jong et al. 1980). Puisque l’énergie d’un photon FUV est de l’ordre de 10 eV et que le travail d’un grain de poussière neutre est de l’ordre de 6 eV, le photon est éjecté avec une énergie cinétique de 4 eV dans la phase gazeuse (Tielens & Hollenbach 1985a). Ainsi, l’efficacité du chauffage par effet photoélectrique est de l’ordre de $\epsilon_{\text{grain}} \sim 4\%$ pour un grain neutre. L’énergie cinétique de l’électron (quelques eV) est alors trop faible pour ioniser collisionnellement le gaz, mais suffisante pour le chauffer par collisions élastiques. Si les grains de poussières sont chargés, l’efficacité de chauffage par ce mécanisme diminue car le travail d’éjection du grain augmente et donc la probabilité qu’un électron s’échappe et l’excès d’énergie délivrée en énergie cinétique diminue. C’est en partie pourquoi, les petits grains dominent le chauffage par photoélectrique. En effet, les gros grains ont tendance à être plus chargés positivement que les petits grains puisque le taux d’ionisation versus recombinaison est proportionnel à

la taille des grains. De plus, la probabilité d'éjection des petits grains est significativement plus élevée que pour les gros grains puisque le nombre de collisions que le photoélectron subit avant d'être éjecté augmente avec la taille du grain (Watson 1972; Draine 1978; Bakes & Tielens 1994).

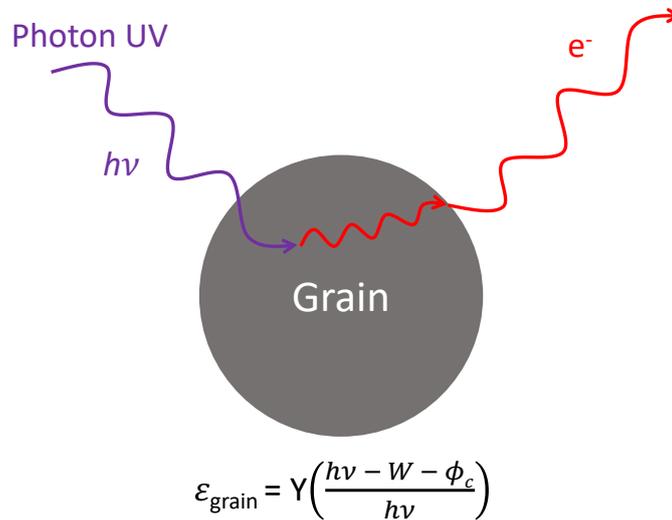


FIGURE 2.7 – Schéma du processus photoélectrique sur la surface des grains. L'efficacité du chauffage dépend de l'énergie du photon absorbé $h\nu$, du travail d'extraction du grain W et de la barrière de Coulomb Φ_c .

Les autres mécanismes dominant le chauffage sont ceux engendrés par la molécule de H_2 . En effet, celle-ci peut absorber un photon FUV qui l'excite dans un niveau électronique puis se désexcite par fluorescence vers des niveaux rovibrationnels. Lorsque la densité est assez élevée, la molécule de H_2 se désexcite par collisions, fournissant ainsi de l'énergie cinétique à son partenaire de collision (Sternberg & Dalgarno 1989; Burton et al. 1990). De plus, la photodissociation elle-même peut réchauffer le gaz puisque les atomes d'hydrogène produit dans cette réaction sont relâchés avec une énergie cinétique de 0,5 eV (Stephens & Dalgarno 1973; Abgrall et al. 2000). Enfin, la formation de H_2 sur les grains produit de l'énergie qui est distribuée de façon inconnue entre le chauffage du grain, l'énergie cinétique de H_2 et l'énergie interne de H_2 . L'énergie cinétique peut alors contribuer au chauffage du gaz par dissipation et l'énergie interne peut être convertie en énergie cinétique lors de la désexcitation collisionnelle avec d'autres espèces. Sur les bords des nuages, ces mécanismes peuvent dominer le chauffage par rapport à l'effet photoélectrique (Burton et al. 1990; Le Bourlot et al. 2012; Röllig et al. 2013). En effet, le champ UV et la température sont élevés et la formation de H_2 est rapide. Quand la densité est élevée (plus grande que les densités critiques des premiers niveaux rotationnels, $n_c \sim 10^2 \text{ cm}^{-3}$), le chauffage par pompage UV de H_2 suivi de la cascade radiative domine sur celui par formation de H_2 .

Plus profond dans le nuage, si la température du gaz diminue et devient plus faible que celle des grains, les collisions entre gaz-grains vont permettre de chauffer le gaz. Le couplage gaz-grain domine alors le chauffage dans les régions denses et profondes. D'autres processus peuvent également contribuer au chauffage du gaz comme les rayons cosmiques, particulièrement efficaces profond dans les nuages moléculaires puisqu'ils pénètrent plus profond que

les photons FUV. Enfin, les réactions chimiques exothermiques peuvent aussi avoir un large impact sur le chauffage du gaz.

Refroidissement

Ce chauffage produit par le rayonnement UV irradiant la PDR est contrebalancé par un refroidissement par émission radiative des espèces. En effet, cette énergie cinétique est convertie en émission de photons qui peuvent s'échapper du nuage. Les espèces qui sont de bons refroidisseurs du milieu ont alors de forts taux de collisions avec les espèces les plus abondantes (comme l'hydrogène, le dihydrogène, l'hélium ou les électrons) pour absorber leur énergie cinétique et de forts coefficients d'Einstein pour se désexciter par émission spontanée d'un photon. Au bord du nuage, le refroidissement est dominé par les raies de structure fine de O I à 63 et 146 μm et de C II à 158 μm et la fluorescence de H₂. La Figure 2.8 montre un diagramme des niveaux d'énergie de structure fine de O I et C II. Le carbone atomique C I avec ses raies à 609 et 370 μm permet également de refroidir le gaz de façon efficace dans les PDRs. Plus profond dans le nuage, C II et C I sont convertis en CO qui devient le refroidisseur majoritaire (Neufeld & Kaufman 1993).

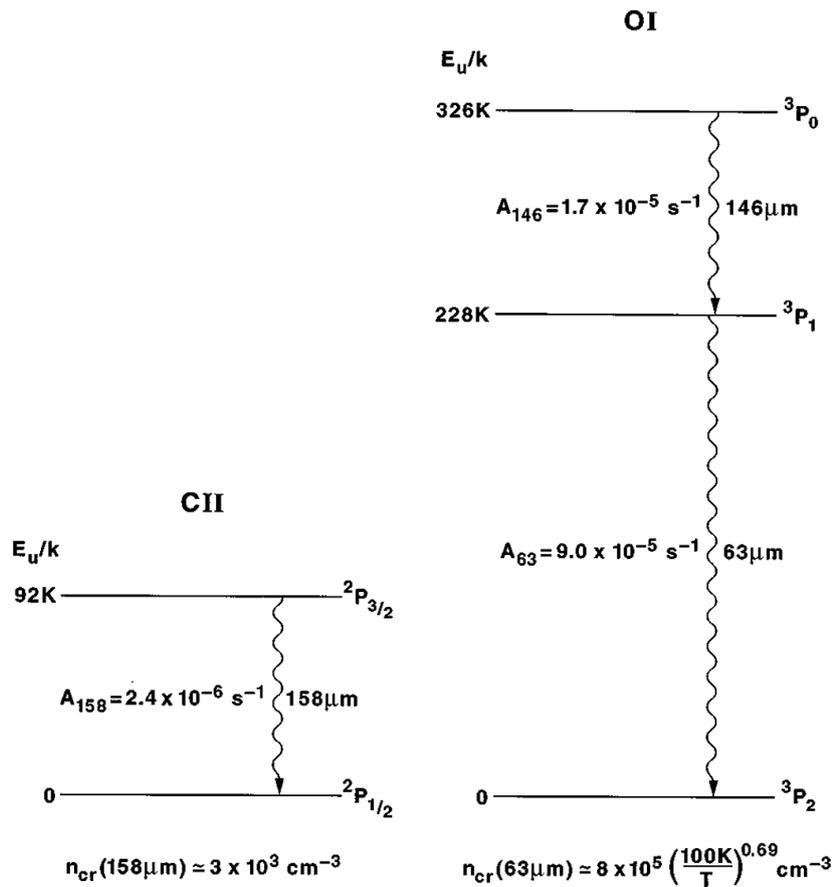


FIGURE 2.8 – Diagrammes des niveaux d'énergie pour les niveaux de structure fine de O I et C II. Les valeurs d'Einstein A et les densités critiques ($n > n_c$ signifie équilibre thermique local) pour les collisions avec l'hydrogène neutre sont également indiquées.

Les refroidisseurs dominants dépendent considérablement des conditions physiques du milieu. En effet, si les raies de structures de fine de O I et la fluorescence de H₂ dominent largement dans les PDRs denses (voir Figure 2.6), à l'échelle des galaxies, le refroidissement du milieu interstellaire est dominé par la raie de C II à 158 μm (Dalgarno & McCray 1972). Dans les PDRs denses, même si H₂ n'a pas une structure favorable au refroidissement dû au fait que les transitions entre deux niveaux vibrationnels consécutifs ($\Delta J = 1$) sont interdites et que ses transitions autorisées sont moins favorables à une émission spontanée de photons, il est suffisamment abondant pour que ses premières transitions fassent de lui un refroidisseur efficace, même dominant, au bord du nuage (Kaufman et al. 2006) (voir Figure 2.6).

2.1.1.5 Réactions chimiques et physiques dans les PDRs

L'intense rayonnement UV incident sur les PDRs permet également de déclencher une chimie particulièrement riche dans ces environnements. En effet, il chauffe le gaz permettant d'accélérer les réactions et/ou de surmonter les barrières énergétiques de celles-ci. De plus, les photons reçus peuvent aussi provoquer des changements dans la structure chimique du gaz avec les photoréactions (comme la photodissociation par exemple). Dans cette section, nous présenterons uniquement les principales réactions chimiques et les processus microphysiques ayant lieu dans les PDRs et j'invite le lecteur à lire la revue de Sternberg & Dalgarno (1995) pour une vision plus exhaustive de ces différents processus.

Les espèces peuvent se former par différents mécanismes. Ceux-ci dépendent des conditions environnementales et donc sont dominants à différentes positions de la PDR. Parmi les processus les plus courants dans les PDRs, on trouve :

- **Réaction ion–neutre** ($A^+ + B \rightarrow C^+ + D$) : La majorité de ces réactions sont exothermiques. Elles sont donc, dans la plupart des cas, rapides et ne possèdent pas de barrière énergétique (Herbst 1987). Cela permet à ces réactions d'avoir lieu même dans les régions plus froides de la PDRs.
- **Réaction neutre–neutre** ($A + B \rightarrow C + D$) : Ces réactions possèdent souvent une barrière énergétique et sont plus lentes que les réactions ion–neutre (coefficient de réaction de $k_{n-n} \sim 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ contre $k_{i-n} \sim 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$). Elles sont donc favorisées dans les régions chaudes de la PDR. Cependant, grâce à la forte abondance d'espèces neutres dans les PDRs, l'excitation de ces espèces et les fortes températures dans la région atomique et au front de dissociation, ces réactions peuvent devenir dominantes. O⁺ et N⁺ sont peu abondants dans les régions atomiques du fait de leur potentiel d'ionisation plus haut que celui de l'hydrogène, donc la chimie de l'oxygène et du nitrogène, contrairement à celle du carbone qui a un potentiel d'ionisation plus bas, sera majoritairement neutre dans ces environnements.
- **Recombinaison dissociative** ($AB^+ + e^- \rightarrow AB^* \rightarrow A + B$) : Les ions peuvent capturer un électron. La molécule neutre provenant de ce processus est alors formée dans un état électronique et peut se dissocier.

- **Association radiative** ($A + B \rightarrow AB^* \rightarrow AB + h\nu$) : Deux réactants rentrant en collisions peuvent produire une molécule excitée qui se relaxe en émettant un photon. Ce processus reste tout de même très inefficace.
- **Photo-réactions** : Les photons émis par les étoiles massives peuvent être absorbés par une espèce qui va alors en produire une autre. Les photoréactions les plus répandues dans le milieu interstellaire sont la photodissociation ($AB + h\nu \rightarrow A + B$) et la photo-ionisation ($A + h\nu \rightarrow A^+ + e^-$).
- **Réaction à la surface des grains** : Les grains de poussière présents dans les PDRs peuvent servir de catalyse de réaction. Ce processus est particulièrement important dans la formation de H_2 , mais d'autres espèces sont aussi formés sur les grains et les glaces comme H_2O et CH_3OH dans les régions éteintes des PDRs.

La Table 2.1 résume les importantes voies de formation et de destruction des espèces majoritaires dans les PDRs. Certains de ces processus sont détaillés dans les Sections 2.2.1.2 (pour la formation de H_2) et 2.2.2 (pour la chimie de l'oxygène et du carbone).

	Voie de formation majoritaire	Voie de destruction majoritaire
Chimie de l'hydrogène		
H_2	Formation sur les grains de poussières	Photodissociation Réactions avec H_2^+ ou O^+ Réactions avec O
Chimie de l'oxygène		
O^+	Échange de charge de O avec H^+	$O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$
OH	$O + H_2 \rightarrow OH + H$ Photodissociation de H_2O $H_2O^+ + e^- \rightarrow OH + H$	Photodissociation $OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$
H_2O	$OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$ $H_3O^+ + e^- \rightarrow H_2O + H$	Photodissociation Réactions avec HCO^+ et H_3^+ Réactions avec H
Chimie du carbone		
C^+	Ionisation de C	$C^+ + e^- \rightarrow C$ Réactions avec H_2O

TABLE 2.1 – Voies majoritaires de formation (colonne de gauche) et de destruction (colonne de droite) des espèces chimiques majoritaires dans les PDRs du bord du nuage à la région moléculaire. Table adaptée de Wolfire et al. (2022).

2.1.1.6 Modélisation des régions de photodissociation

Afin d'analyser l'émission des grains et des raies du gaz provenant de ces régions, le développement de modèles capables de fournir des prédictions directement comparables aux

observations est indispensable. Plusieurs approches sont alors possibles dans la modélisation des PDRs qui vont chacune avoir leurs avantages et leurs inconvénients. Nous pouvons alors séparer ces modèles en plusieurs catégories. Dans le cadre de l'étude des régions de photodissociation, je présenterai les modèles prenant en compte uniquement l'excitation des espèces, les modèles prenant en compte l'excitation et la chimie, que l'on nommera modèles thermochimiques et les modèles prenant également en compte la dynamique du gaz. Les dimensions spatiales dans ces modèles peuvent également varier de 0D (modèle à zone unique), à 1D, 2D et 3D. On comprend alors que les modèles d'excitation, souvent avec peu de dimensions spatiales et ne prenant pas en compte la dynamique, sont plus simples et rapides que les autres modèles, mais ils sont alors également moins réalistes puisqu'ils ne peuvent pas prendre en compte les variations spatiales du milieu attendues dans les PDRs qui affectent à la fois la physique et la chimie.

Modèles d'excitation

La première catégorie de modèle, et la plus simple, est alors celle modélisant uniquement l'excitation d'une molécule, prédisant alors l'émission de celle-ci. La plupart de ces modèles sont à zone unique, donc à zéro dimension. Les plus simples de ces modèles vont calculer cette émission dans le cadre de l'équilibre thermodynamique local (ETL), c'est-à-dire lorsque les espèces sont uniquement excitées par collisions et que leur température d'excitation est égale à la température du gaz. Pour les modèles ETL, les seuls paramètres d'entrée sont la densité de colonne de l'espèce et la température du gaz. D'autres modèles vont considérer également les processus d'excitation hors ETL (voir Section 2.2.3). Le code RADEX (van der Tak et al. 2007) est un code classique permettant de réaliser des analyses non-ETL rapides de raies interstellaires. Ses paramètres d'entrée sont alors la densité de colonne de l'espèce, la température du gaz, la densité du gaz et un champ de rayonnement de fond pour prendre en compte le pompage radiatif (UV et infrarouge) (voir Section 2.2.3.1). Le code GROSBETA (Tabone et al. 2021), utilisant le formalisme de RADEX, que nous utiliserons au cours de cette thèse (voir Chapitre 5), permet également de prédire l'émission d'une espèce résultant de processus hors-ETL. Contrairement à RADEX, il prend également en compte les processus d'excitation à la formation comme l'émission prompte et le pompage chimique (voir Section 2.2.3.2). L'avantage de ces codes, c'est qu'ils permettent une analyse rapide qui permet d'estimer des paramètres clés comme les densités de colonne, les densités locales ou encore, comme nous le démontrerons dans cette thèse, des quantités de molécules formées ou détruites par unité de temps. Cependant, le fait que ces modèles ne calculent pas de façon auto-cohérente la chimie et qu'ils se restreignent à zéro dimension, ne permet pas de prendre en compte les rapides variations de conditions physiques et chimiques présentes dans les PDRs. L'analyse avec ces modèles permet d'étudier l'émission d'une molécule indépendamment des autres et de contraindre les conditions physiques à une position précise seulement.

Modèles thermochimiques

Dans les PDRs, l'excitation des molécules est fortement liée à la chimie du milieu et aux variations de conditions physiques. Il est alors important de construire des modèles traitant de façon auto-cohérente l'équilibre thermique, la chimie et l'excitation dans ces régions.

L'information spatiale le long d'une PDR étant essentielle pour comprendre les processus microphysiques, la plupart de ces codes seront au moins 1D, contrairement à ceux que je viens de présenter.

Modèles 1D La géométrie exacte de la modélisation 1D dépend cependant des modèles. Certains choisissent une géométrie plan-parallèle avec une certaine épaisseur limitée par l'extinction visuelle totale du nuage. D'autres choisissent des géométries sphériques. Néanmoins, ils ne prennent pas en compte, pour la plupart, les effets de dynamiques pour des raisons de complexité de calculs. Différents codes ont alors été développés ces dernières décennies : le code Cloudy (Abel et al. 2005; Ferland et al. 2013, 2017), le code UCL_PDR (Papadopoulos et al. 2002; Bell et al. 2006; Priestley et al. 2017), le code KOSMA- τ (Röllig et al. 2013; Cubick et al. 2008), le code PDR de Meudon (Le Petit et al. 2006; Le Bourlot et al. 2012; Bron et al. 2014) que j'utiliserai dans la suite de ma thèse (voir Chapitre 4). Ces codes calculent de manière auto-cohérente l'équilibre thermique (voir Section 2.1.1.4), l'extinction du rayonnement ultraviolet par le gaz et les grains (voir Section 2.1.1.2) et les abondances des espèces chimiques ainsi que leur émissivité en fonction de la profondeur. Ces codes, calculant la structure physico-chimique de la PDR de façon auto-cohérente, ont alors des paramètres d'entrée décrivant les conditions physiques globales du nuage (et non les paramètres d'une espèce comme les codes d'excitation à zone unique). Un paramètre important dans le cadre des PDRs est le champ de rayonnement. Ainsi l'intensité de ce champ (en G_0), ainsi que sa forme (émission du corps noir d'une étoile à une certaine température, ISRF, champ de Habing (1968), champ de Mathis et al. (1983), champ de Draine (1978) ...) et sa géométrie (isotrope, unidirectionnel...), est utilisée en entrée de ces codes. Le deuxième paramètre d'entrée important de ces modèles est la densité ou la pression du gaz puisque la dynamique n'est pas calculée. La structure en densité peut être choisie en fonction des besoins du modèle. On peut alors choisir des modèles isochores, isobares ou une loi en densité définie par l'utilisateur. Dans le reste de cette thèse, nous utilisons majoritairement l'hypothèse isobare. Un autre paramètre important dans ces modèles est le taux d'ionisation par rayons cosmiques puisqu'il a un impact sur la chimie initiée par les ions. Finalement, l'abondance en phase gazeuse des nanograins, des métaux et la distribution de taille des poussières sont également des paramètres d'entrée puisqu'ils font varier l'équilibre thermique, l'extinction du champ ultraviolet et la chimie de surface.

Ces modèles sont donc plus complexes, mais plus réalistes que les modèles d'excitation à zone unique. Ils permettent de reproduire l'émission de plusieurs espèces de manière cohérente et contraindre l'évolution des conditions physiques et chimiques à l'intérieur de la PDR. Cependant, pour être auto-cohérents, ces modèles se basent sur certaines hypothèses : le choix du réseau chimique, les abondances élémentaires des espèces, la prise en compte des processus de chauffage et de refroidissement, etc. Par exemple, le choix du modèle pour le chauffage photoélectrique peut avoir un impact important sur le calcul de la température du gaz. Chacun de ces codes se basent sur des hypothèses différentes et présentent alors des prédictions parfois différentes. Une analyse détaillée de la comparaison de différents codes PDR pour essayer de comprendre les déviations entre ceux-ci est présentée par Röllig et al. (2007). Une différence marquante est que, même lorsque le choix de la microphysique et les paramètres d'entrée sont les mêmes, la température du gaz peut varier d'un facteur 2–3 à $A_V = 1$ entre les différents codes PDR. Cette variation de température peut avoir un véritable

effet sur la prédiction des raies d'émission. Ainsi, si ces codes nous permettent d'avoir accès à une vision globale de la structure de la PDR, leurs prédictions sont dépendantes du modèle et donc amènent des incertitudes difficiles à évaluer sur les paramètres qu'ils permettent de contraindre.

Modèles 2D La géométrie 1D est suffisante dans la plupart des cas pour contraindre la structure globale des PDR. Cependant, dans le cas de la modélisation de l'atmosphère des disques protoplanétaires, l'information spatiale selon la largeur et la hauteur du disque s'avère importante puisque les conditions physiques évoluent différemment selon les deux axes. Ainsi, des modèles thermo-chimiques ont été développés en 2D pour reproduire, de façon auto-cohérente, l'équilibre thermique, la chimie et l'excitation des espèces à chaque position horizontale et verticale du disque. Tout comme les codes thermo-chimiques modélisant les PDRs, ils permettent de prédire l'extinction du rayonnement ultraviolet, l'abondance des espèces ainsi que leur émissivité en fonction de la position dans le disque. Différents codes ont été développés ces dernières années comme le code DALI (Bruderer et al. 2012) et le code ProDiMo (*e.g.*, Woitke et al. 2009; Kamp et al. 2010).

Modèles 3D La modélisation en 3D peut s'avérer nécessaire pour décrire des régions où la géométrie 3D est complexe. Ainsi, certains codes ont été développés pour modéliser les PDRs en 3D (*e.g.*, KOSMA- τ , Röllig et al. (2013); 3D-PDR, Bisbas et al. (2012)). Pour cela, ils peuvent considérer une distribution de *clumps* sphériques 1D ou alors utiliser des simulations magnétohydrodynamiques retraités ensuite dans un code PDR pour obtenir les abondances et l'équilibre thermique (*e.g.*, Levrier et al. 2012). La chimie étant traitée séparément des simulations magnétohydrodynamiques, ces modèles ne prennent pas en compte l'impact de la chimie sur la dynamique du système.

Modèles de dynamique

Nous avons présenté précédemment uniquement des modèles ne prenant pas en compte les effets dynamiques. Cependant, nous avons vu dans le Chapitre 1, Section 1.2 que les mécanismes de rétroaction stellaire peuvent mener à l'expansion de la région H II et la perturbation du nuage. Ainsi, la pression du gaz ionisé, la pression de radiation, les supernovæ et les vents stellaires peuvent mener à des chocs entre la région H II et la région moléculaire qui vont compresser et/ou photoévaporer le gaz au bord du nuage et provoquer la propagation du front d'ionisation, et par incidence du front de dissociation. De plus, la compression du gaz peut expliquer les sous-structures complexes observées dans les PDRs (voir Chapitre 3, Section 3.2.4.1). Pour analyser les régions perturbées par ces mécanismes, il peut être nécessaire d'utiliser des codes prenant en compte la dynamique du gaz. Dans la plupart des cas, les modèles statiques sont suffisants puisque les temps dynamiques sont beaucoup plus longs que les temps chimiques, ce qui fait que la dynamique a un impact limité sur la structure globale de la PDR. En effet, le gaz dans les PDRs a rarement des vitesses dépassant les 10 km s^{-1} ce qui correspond à un temps dynamique de $\tau_{\text{dyn}} = 10\text{-}30 \text{ Myr}$ pour des nuages d'une centaine de pc. En comparaison, le temps pour atteindre l'équilibre chimique de H_2 est bien plus court (de l'ordre de 10^3 années dans la plupart des régions atomiques, *e.g.*, Bialy et al. 2017).

Ainsi, le nuage a le temps d'atteindre l'équilibre chimique bien avant qu'il ne soit dispersé. Cependant, localement, l'effet dynamique peut être important. En effet, une particule avec une vitesse de 10 km s^{-1} peut traverser le front de dissociation, d'une largeur d'environ 400 au, en 200 ans, ce qui est plus court que le temps chimique. Il existe alors plusieurs cas où prendre en compte la dynamique est nécessaire. Par exemple, s'il y a un transport de matière rapide vers un environnement avec un champ de rayonnement ou une densité différents. Cela peut se produire dans le cas d'advection vers le front d'ionisation ou le front de dissociation. La dynamique est aussi nécessaire lorsque les conditions physiques (champ de rayonnement, densité) changent plus rapidement que l'évolution chimique. Cela peut être le cas dans les nébuleuses planétaires en expansion ou dans la compression d'un nuage atomique. Enfin, elle est importante quand les échelles de temps chimique sont particulièrement longues par rapport au temps de vie du nuage. Cela peut être le cas pour la chimie à la surface des grains.

La dynamique du gaz et, plus précisément, la propagation des fronts d'ionisation et des fronts de dissociations sur les PDRs a été étudiée par différents auteurs (*e.g.*, Hollenbach & Natta 1995; Bertoldi & Draine 1996; Störzer & Hollenbach 1998). Ces études ont alors montré l'impact de ces effets sur la population vibrationnelle de H_2 qui affecte le chauffage et la chimie dans la PDR. Ces effets dynamiques pourraient même mener vers une fusion des fronts de dissociation et d'ionisation si le temps dynamique est plus court que le temps de dissociation, c'est-à-dire lorsque $G_0/n_{\text{H}} < 0,1v_{\text{adv}}$ où v_{adv} est la vitesse d'advection du gaz au front d'ionisation. Bron et al. (2018) ont alors développé le code PDR Hydra, modélisant les PDRs selon une géométrie 1D plan-parallèle en prenant en compte les effets hydrodynamiques de la photoévaporation des PDRs. Ce code produit un traitement détaillé de la physico-chimie analogue aux modèles thermo-chimiques.

La Figure 2.9 montre le profil de la PDR au temps final de modélisation. On remarque que les effets dynamiques impliquent un fort gradient de densité et un faible gradient de pression. Cette pression n'augmente que d'un facteur 2 entre le front d'ionisation et de dissociation, ce que nous avons déjà discuté dans le Chapitre 1, Section 1.2.2.2. Ils montrent alors que la prise en compte de ces effets permet d'expliquer les observations de fines couches comprimées à haute pression thermique à la surface des PDRs. Leurs résultats permettent aussi d'expliquer la corrélation entre la pression thermique et l'intensité du champ de rayonnement présentée en Figure 1.5.

Le code TORUS-3DPDR (Bisbas et al. 2015) est également largement utilisé dans la modélisation des disques irradiés (*e.g.*, Haworth et al. 2018, 2023a). En effet, le taux de perte de masse due à la photoévaporation dépend du couplage entre la physico-chimie et la dynamique puisque c'est un vent "thermique" (c'est-à-dire lancé par la pression thermique elle-même). Ces modèles permettent alors de faire des estimations de ce taux de perte de masse du disque. Différents codes ont également combiné des modèles de régions H II dynamiques avec des modèles PDR pour prédire ces effets (*e.g.*, Hosokawa & Inutsuka (2006); le code WARPFIELD-EMP, Pellegrini et al. (2020); le code MARION, Kirsanova et al. (2020)). D'autres codes se sont concentrés sur des effets de dynamiques particuliers, comme le code de chocs Paris-Durham (*e.g.*, Flower & Pineau des Forêts 2015; Godard et al. 2019) qui se concentre uniquement sur l'impact des chocs interstellaires sur les conditions physiques et chimiques du milieu interstellaire dans un régime stationnaire. Celui-ci calcule alors, dans une géométrie 0D, la structure dynamique, physique et chimique du choc.

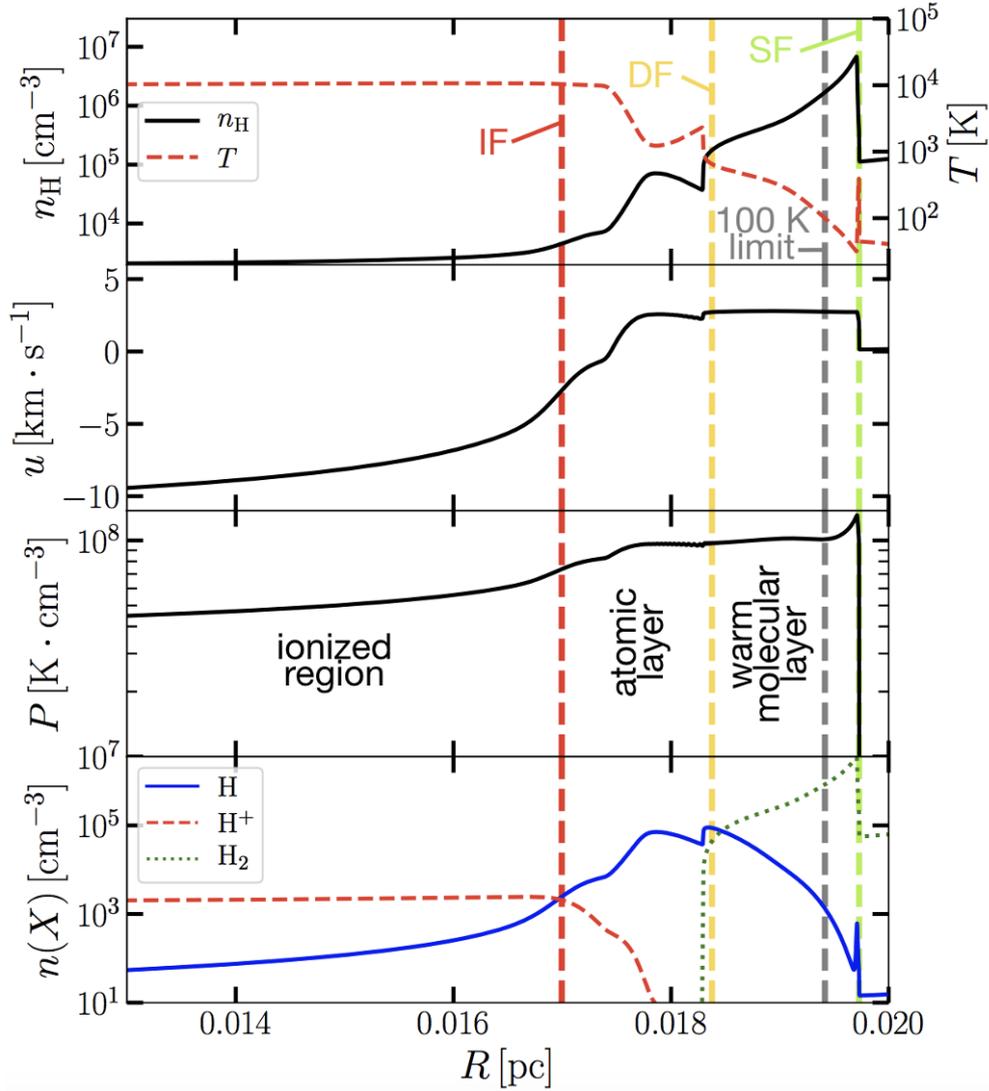


FIGURE 2.9 – Structure d’une PDR en photoévaporation pour un modèle à $n_0 = 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $G_0 = 10^4$, $T_* = 4 \times 10^4 \text{ K}$ au temps final de la modélisation Hydra (5 048 ans). Les profils de densité et de température (panneau supérieur, ligne noire et rouge respectivement), le profil de vitesse (deuxième panneau), le profil de pression (troisième panneau), et la structure chimique (panneau inférieur) sont montrés. Sont également représentés le front d’ionisation (IF, ligne verticale pointillée rouge), le front de dissociation (DF, ligne verticale pointillée jaune), la limite de 100 K (ligne verticale pointillée grise) et le front de choc (SF, ligne verticale pointillée verte). Figure extraite de Bron et al. (2018).

Très peu de comparaisons existent entre les modèles dynamiques de régions irradiées (comme Hydra) et les observations. Ainsi, il est possible que les désaccords soulevés entre les modèles stationnaires statiques et les observations proviennent de la non prise en compte de ces effets dynamiques hors équilibre. Néanmoins, dans cette thèse, nous ne prendrons pas en compte la dynamique dans nos modèles et supposons, qu’au premier ordre, dans la Barre d’Orion, les effets de dynamiques soient négligeables sur les processus étudiés.

L'utilité des modèles d'excitation simples

Nous comprenons alors qu'il existe de nombreuses manières de modéliser l'émission des PDRs afin d'analyser les observations. Nous comprenons également que plus le modèle se complexifie, plus il se base sur un nombre croissant d'hypothèses et de paramètres libres pour réaliser ces calculs. Ses incertitudes sont alors difficiles à estimer. Ainsi, si un code complet, 3D et prenant en compte la dynamique, par exemple, permet de prendre en compte plus de processus et de prédire de façon auto-cohérente la structure de la PDR, ses résultats seront biaisés par les choix faits dans la modélisation et la comparaison aux observations nécessiterait une exploration complète de l'espace des paramètres. De plus, plus le code est complet et complexe, plus son temps de calcul et sa nécessité de stockage sera importante. Dans cette thèse, je vais donc mettre en avant l'avantage d'utiliser des modèles robustes de moins en moins complexes pour s'abstraire de ces inconvénients. Dans le Chapitre 4, j'utilise dans mon analyse un modèle 1D indépendant du temps auto-cohérent (le code PDR de Meudon). Dans le Chapitre 5, j'utilise pour analyser les données du JWST un code d'excitation à zone unique (le code GROSBETA). Enfin, dans le Chapitre 6, j'utilise seulement un modèle analytique, qui est en réalité un modèle d'excitation simplifié, pour étudier les données. Tout d'abord, je montre que ces modèles simples sont essentiels pour identifier un processus d'excitation en s'affranchissant des incertitudes des modèles auto-cohérents. Ensuite, j'utilise l'exemple du pompage chimique pour démontrer la puissance des modèles d'excitation simples face aux modèles auto-cohérents pour contraindre les conditions physiques et chimiques d'une PDR à une position donnée. Ils sont en effet plus rapides que des codes traditionnels et leurs incertitudes sont plus facilement identifiables et ne dépendent pas de choix dans la modélisation. Ces modèles d'excitation à zone unique permettent de prendre des processus d'excitation spécifique en compte de manière contrôlée puisqu'il y a peu de paramètres d'entrée. Ils sont particulièrement performants pour analyser des régions où les variations physiques sont résolues spatialement puisqu'ils permettent de sonder uniquement une position de la PDR. Dans les régions non résolues, ces modèles pourront être insuffisants et devront s'associer à des modèles à plusieurs dimensions, auto-cohérents, pour analyser les observations.

2.1.2 Les disques protoplanétaires irradiés

Dans ces régions fortement irradiées, nous observons de nombreux disques protoplanétaires soumis à ce même champ de rayonnement. Si l'importance de l'étude des régions de photodissociation a été démontrée dans les sections précédentes, nous pouvons nous demander pourquoi s'intéresser particulièrement aux disques irradiés. Tout d'abord, il est important de noter que le temps caractéristique de formation d'une étoile massive (OB) est de quelques 10^5 années, ce qui est largement plus petit que le temps d'évolution d'un disque isolé du rayonnement UV (d'environ 3 millions d'années, Alexander et al. 2014). Ainsi, on s'attend à ce que les disques présents dans les régions où se forment des étoiles OB aient été irradiés pendant leur temps de vie. La question qui reste suspendue est sur la quantité de disques présents dans ces régions. En effet, la plupart des disques étudiés jusqu'à maintenant se trouvent dans les régions d'étoiles de faible masse, sans étoiles OB. Les disques irradiés seraient alors plus rares ?

2.1.2.1 Une majorité de disques protoplanétaires fortement irradiés

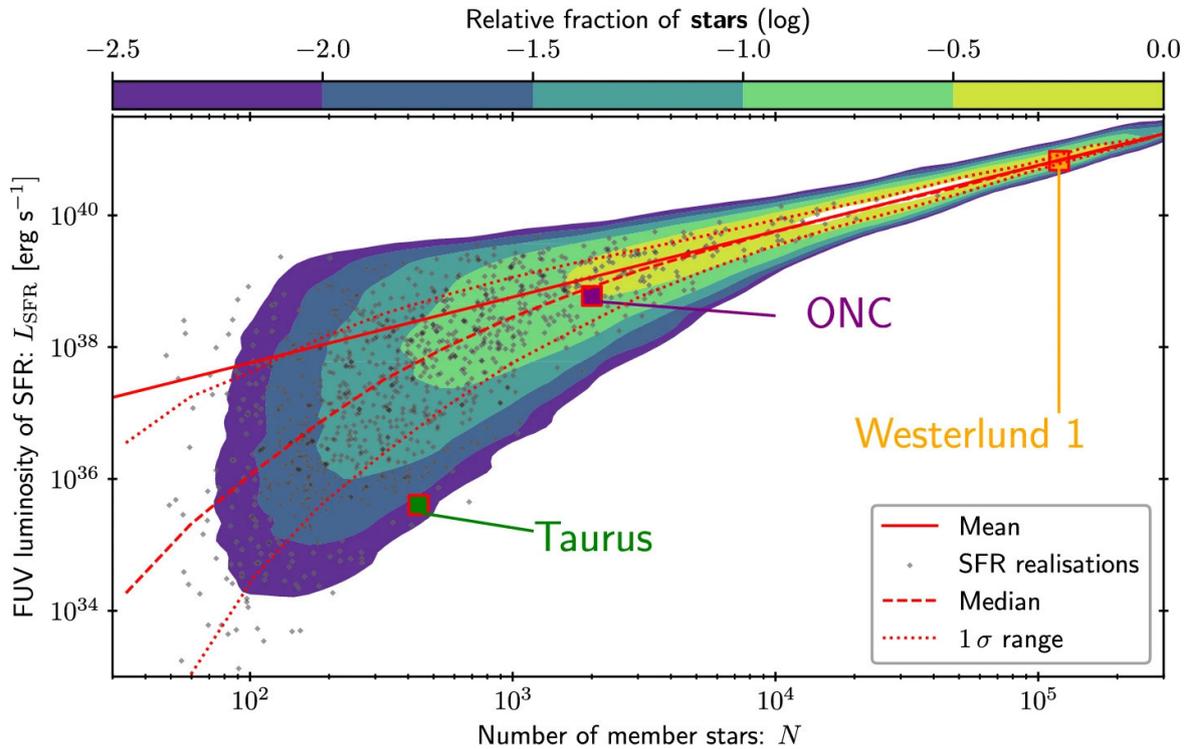


FIGURE 2.10 – Les luminosités en FUV à un âge de 1 Myr de 6×10^4 modélisations de régions de formation d'étoiles (*Star Forming Region*, SFR) (Fatuzzo & Adams 2008). Les points noirs représentent un sous-ensemble de 1 000 SFRs synthétiques. La barre de couleur montre une estimation de la densité relative des étoiles (c'est-à-dire la densité des SFR multipliée par le nombre N de membres). Nous estimons le nombre d'étoiles et la luminosité totale de trois SFRs locales : Taurus (vert), l'ONC (violet) et Westerlund 1 (orange). Figure extraite de Winter & Haworth (2022).

La Figure 2.10 permet de visualiser la distribution des régions de formation d'étoile et la fraction relative d'étoiles en fonction du champ de rayonnement UV local d'après une simulation réalisée par Winter & Haworth (2022). Cette Figure montre alors qu'une fraction majoritaire d'étoiles se situent dans des régions irradiées (zone jaune sur la Figure). Elle montre alors que les régions formant des étoiles de faibles masses (et sans étoiles OB formées simultanément) sont plus communes (comme Taurus) mais ne contiennent pas une majorité des étoiles (et donc de disques protoplanétaires). En effet, les régions de formation d'étoiles massives (comme Westerlund), qui sont alors plus lumineuses en FUV, sont moins nombreuses mais contiennent plus de membres. On remarque alors que Westerlund possède environ 100 fois plus de membres que Taurus. Ainsi, nous observons plus de disques protoplanétaires isolés parce que les régions de formations d'étoiles de faibles masses sont plus nombreuses et donc la probabilité qu'il y en ait proches de nous est plus grande. Cependant, il est attendu que la majorité des disques protoplanétaires résident dans des environnements beaucoup plus irradiés que ceux observés majoritairement (Winter & Haworth 2022). Ainsi, si l'on veut étudier la formation planétaire typique dans la Voie lactée, étudier les disques irradiés est essentiel pour être représentatif.

2.1.2.2 Apparition d'un vent photoévaporé

Désormais que l'on comprend l'importance de l'étude de ces objets, il est intéressant de comprendre leur différence avec les disques isolés. Soumis à un rayonnement UV intense, ces disques vont alors subir ce que l'on appelle une "photoévaporation externe" par chauffage et dispersion du gaz par le rayonnement UV provenant de l'étoile. Ce mécanisme est très similaire à la photoévaporation des nuages moléculaires, par la photodissociation des molécules et l'ionisation des espèces, expliquée dans la Section 2.1.1, mais dans un environnement plus dense. Un vent photoévaporé se crée alors autour du disque sous forme d'enveloppe gazeuse comme présenté dans la Figure 2.11. Ce vent photoévaporé présente des caractéristiques très similaires à celles de la PDR. Il est, la plupart du temps, délimité par un front d'ionisation et des espèces atomiques et moléculaires sont présentes à l'intérieur. Ce type de disque est alors rapidement qualifié de *proplyd* (O'Dell et al. 1993) même si la définition a été précisée depuis : **un disque circumstellaire avec un vent photoévaporé entraîné par une irradiation externe, composé d'une région de photodissociation et d'un front d'ionisation extérieur avec une morphologie cométaire** (Winter & Haworth 2022).

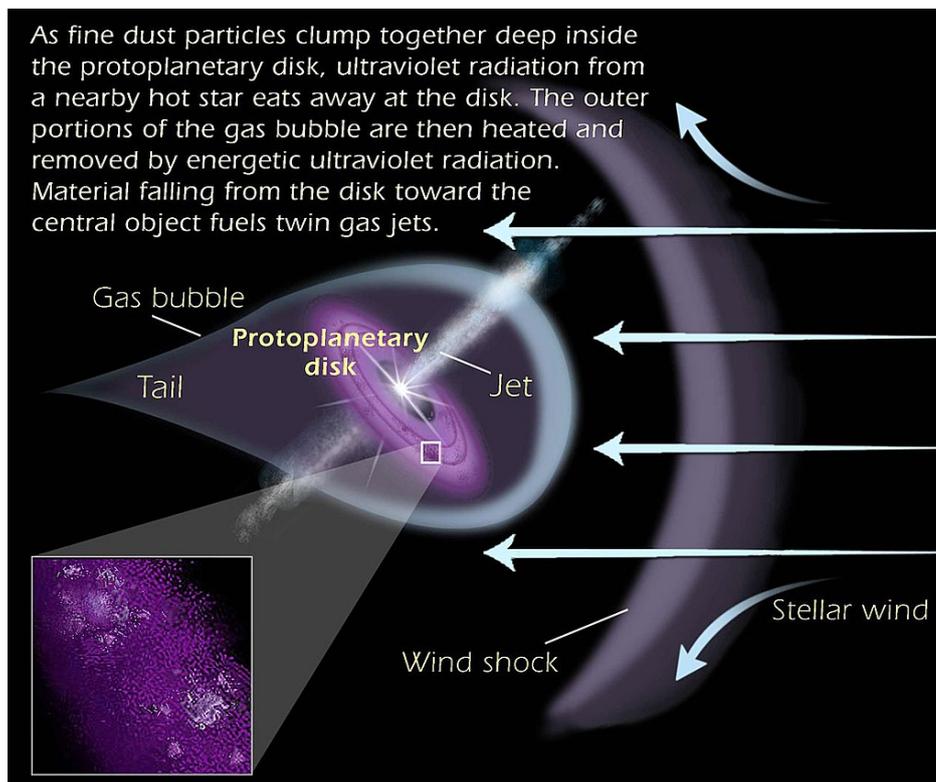


FIGURE 2.11 – Schéma d'un disque protoplanétaire irradié de manière externe.

Modèle basique de photoévaporation externe

Pour mieux comprendre le mécanisme de photoévaporation, nous pouvons introduire la grandeur de rayon gravitationnel. Pour savoir si la matière est liée au disque, il suffit de comparer la vitesse thermique moyenne des particules (*i.e.* la vitesse du son) dans le disque

à la vitesse de libération du disque (liée à la force de gravité). On peut définir alors le rayon gravitationnel comme :

$$R_g = \frac{GM_*}{c_s^2} \quad (2.6)$$

où G est la constante gravitationnelle, M_* la masse de l'étoile centrale et c_s la vitesse du son. Le disque est alors gravitationnellement lié si le rayon de ce dernier est inférieur au rayon gravitationnel $R_d < R_g$. Si maintenant, le disque est irradié par une étoile massive externe, la température du gaz augmente et donc la vitesse du son augmente. Le rayon gravitationnel diminue : $R_d > R_g$ et les parties externes du disque ne sont plus liées gravitationnellement au disque : le vent photoévaporé est créé. Cette vision basique de la photoévaporation externe est présentée dans la Figure 2.12. A long terme, la partie externe du disque est tronquée et la partie interne accrète sur l'étoile. Cela précipite la dispersion du gaz sur des échelles de temps inférieures à quelques millions d'années en fonction de la taille initiale du disque et de l'intensité du champ de rayonnement.

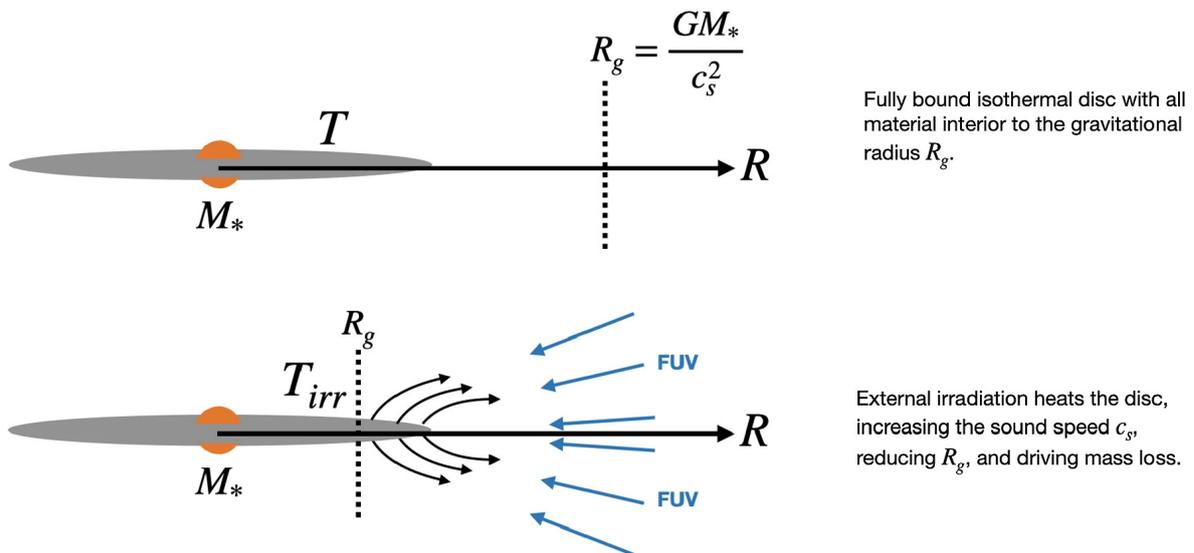


FIGURE 2.12 – Schéma de la vision basique de la photoévaporation externe en termes de rayon gravitationnel. Le rayon gravitationnel est celui au-delà duquel les vitesses thermiques moyennes de particules (se propageant à la vitesse du son) dépassent la vitesse de libération et les particules ne sont pas liées. Dans ce schéma, un disque plus petit que le rayon gravitationnel ne perdra donc pas de masse. L'irradiation UV externe chauffe le disque, entraînant des vitesses thermiques moyennes plus rapides (une vitesse du son plus élevée), ce qui réduit le rayon gravitationnel et libère la matière du disque. Figure extraite de Winter & Haworth (2022).

2.1.2.3 Impact sur la formation planétaire

Ces disques irradiés ont été observés pour la première fois avec le télescope spatial *Hubble* dans l'amas de la nébuleuse d'Orion (*Orion Nebula Cluster* (ONC)) (O'Dell et al.

1993; Bally et al. 2000). La Figure 2.13 présente les principaux proplyds détectés dans cette région.



FIGURE 2.13 – Image de la Nébuleuse d’Orion avec les principaux proplyds observés avec le télescope *Hubble*.

Dans ces disques, le taux de perte de masse due à la photoévaporation externe est estimé aller jusqu’à $\dot{M}_{\text{ext}} \sim 10^{-6} M_{\odot} \text{ an}^{-1}$ (Churchwell et al. 1987; Henney & Arthur 1998; Henney & O’Dell 1999). Ce taux de perte de masse est plus rapide que l’accrétion stellaire $\dot{M}_{\text{acc}} \sim 10^{-8} M_{\odot} \text{ an}^{-1}$ (*e.g.*, Manara et al. 2012) et que la photoévaporation interne (évaporation du disque provoquée le rayonnement UV de l’étoile centrale, *e.g.*, Owen et al. 2010) et donc a une influence primordiale sur l’évolution du disque dont son temps de vie et le temps de formation des planètes (*e.g.*, Clarke 2007; Owen et al. 2011; Facchini et al. 2016). La Figure 2.14 montre un exemple de l’impact du champ ultraviolet sur la structure et l’évolution des disques de σ -Orionis. Dans cette Figure, on observe que lorsque l’intensité du champ UV dépasse $G_0 > 4 \times 10^3$, la masse de poussière des disques est en moyenne beaucoup plus faible que celle des disques moins irradiés (Maucó et al. 2023). La photoévaporation externe pourrait d’alors limiter le temps d’accrétion des planétésimaux en planète et donc empêcher,

par exemple, la formation d’une géante gazeuse (les géantes gazeuses sont d’ailleurs peu nombreuses dans les analyses statistiques des exoplanètes, voir par exemple Winn & Fabrycky 2015). Au-delà de la perte de masse directe, la hausse de température dans les régions externes du disque provoquée par le rayonnement UV externe (Haworth 2021) réduit l’efficacité de l’accrétion des planétésimaux et de la formation des cœurs de géantes gazeuses dans ces régions (Ndugu et al. 2018). Enfin, l’augmentation de la température peut aussi avoir un impact sur la formation des planètes de faibles masses puisqu’elle peut avoir un impact sur leur migration dans le disque (Coleman & Nelson 2014).

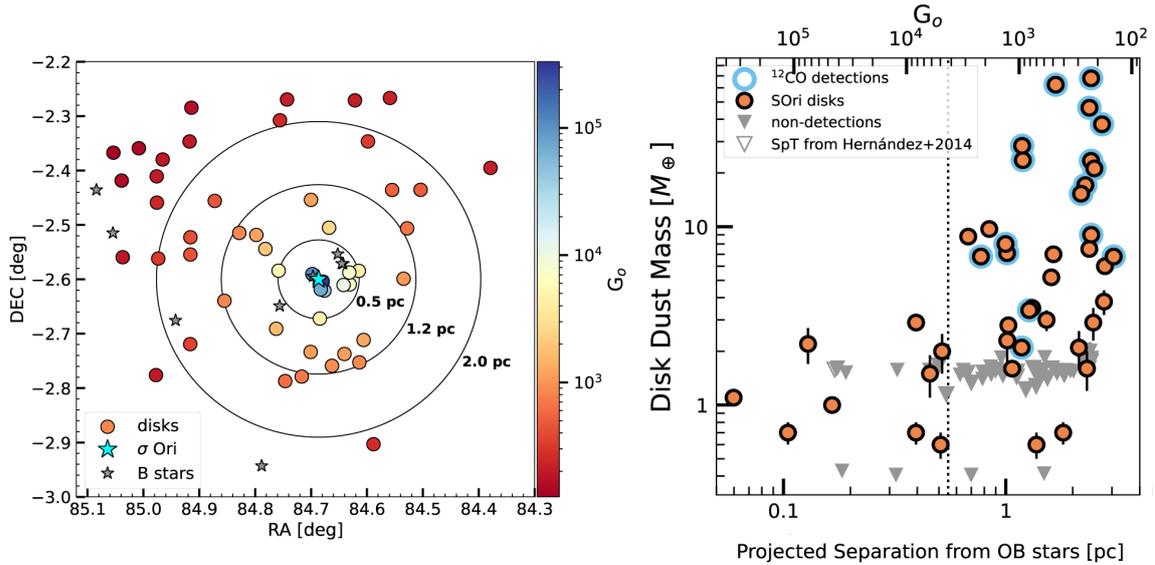


FIGURE 2.14 – (Gauche) Distribution spatiale des sources σ -Orionis (points) et des étoiles massives OB (symboles d’étoiles) dans l’amas. Le système massif et multiple σ -Oriis est indiqué en cyan et le reste des étoiles de type B en gris. La barre de couleur montre l’intensité du champ FUV incident (en termes de G_0) dû aux étoiles massives. Les cercles noirs indiquent les distances projetées de 0,5, 1,2 et 2,0 pc. (Droite) Masse de la poussière du disque (M_{dust}) en fonction de la séparation projetée de σ -Ori en considérant l’ensemble de l’échantillon de disques observés par ALMA. Les lignes pointillées montrent la médiane de M_{dust} à l’intérieur et à l’extérieur de 0,5 pc pour l’échantillon X-Shooter (orange) et incluant également les limites supérieures avec types spectraux rapportés dans Hernández et al. (2014) (gris). Les points orange sont des détections du continuum, les triangles vers le bas sont des limites supérieures à 3σ et les détections de $^{12}\text{CO}(3\sigma)$ sont indiquées par un cercle bleu supplémentaire. Figure extraite de Maucó et al. (2023).

La modélisation des disques protoplanétaires a atteint de hauts degrés de précision ces dernières années (structure 2D ou 3D, transfert radiatif des raies et du continuum, réseau chimique complexe, rayonnement EUV et FUV externe, etc.). Il est en effet désormais possible de modéliser la structure d’un proplyd avec une grande précision, notamment avec le code ProDiMo (*e.g.*, Woitke et al. 2009; Kamp et al. 2010) et TORUS-3DPDR (*e.g.*, Bisbas et al. 2015; Haworth et al. 2016, 2023a). Cependant, l’observation des disques protoplanétaires irradiés a longtemps été limité par leurs petites échelles angulaires ($\sim 0,5 - 2''$) et

leur faible luminosité. En effet, la trop faible sensibilité et résolution spatiale des télescopes avant le JWST font que les disques irradiés ont été beaucoup moins étudiés observationnellement que les disques isolés. Comme démontré dans la Section 2.1.2.1, les disques les plus proches de la Terre, donc plus optimaux pour les observations, sont isolés du rayonnement extérieur. Dans le cadre des disques irradiés, le télescope spatial *Hubble* a permis de mettre en évidence le front d'ionisation de ces objets (car surtout sensible au gaz ionisé). ALMA a permis l'étude du gaz moléculaire froid et dense dans le disque (*e.g.*, Champion et al. 2017; Boyden & Eisner 2020). La sensibilité du JWST permet maintenant l'accès à ces disques irradiés jusqu'alors non détectés dans l'infrarouge (avec *Spitzer* ou ISO), résolvant alors le gaz moléculaire et atomique chaud et l'émission des poussières. Combiné aux observations d'ALMA et du VLT (*Very Large Telescope*), ces données nous donnent une nouvelle fenêtre d'étude sur les disques irradiés pour en comprendre leurs conditions physiques et chimiques et l'impact du rayonnement UV sur la formation stellaire.

2.2 La chimie chaude des régions irradiées

2.2.1 La molécule de H₂

La molécule de dihydrogène est la molécule la plus abondante du milieu interstellaire. Elle est alors également abondante dans les régions fortement irradiées et son excitation dans ces régions joue un rôle crucial dans la chimie. L'étude de H₂ est incontournable dans le cadre des observations JWST puisque son émission rotationnelle et rovibrationnelle se trouve dans la gamme d'observation de ce télescope. Dans cette section, nous décrirons alors en détail cette molécule, sa formation, sa destruction et ses processus d'excitation.

2.2.1.1 Structure énergétique

Dans la suite de ce manuscrit, nous nous intéressons essentiellement aux niveaux rotationnels et vibrationnels, donc nous nous concentrons sur la structure énergétique de H₂ dans son niveau électronique fondamental.

Le noyau de H₂ peut tourner autour de l'axe perpendiculaire à la molécule et vibrer selon l'axe de la molécule. Le fait que la molécule soit bimoléculaire implique que la rotation selon l'axe de la molécule ne provoque pas de changement de niveau d'énergie (symétrie axiale) et seul un mode de vibration est possible : l'étirement de la liaison. Ainsi, nous pouvons définir ses niveaux rovibrationnels par seulement deux paramètres : un nombre quantique pour la rotation J et un nombre quantique pour la vibration v . Les niveaux rovibrationnels de la molécule de H₂ dans le niveau électronique fondamental sont présentés dans la Figure 2.15.

Dans le niveau électronique fondamental, les énergies de ces premiers niveaux sont quantifiées selon la relation :

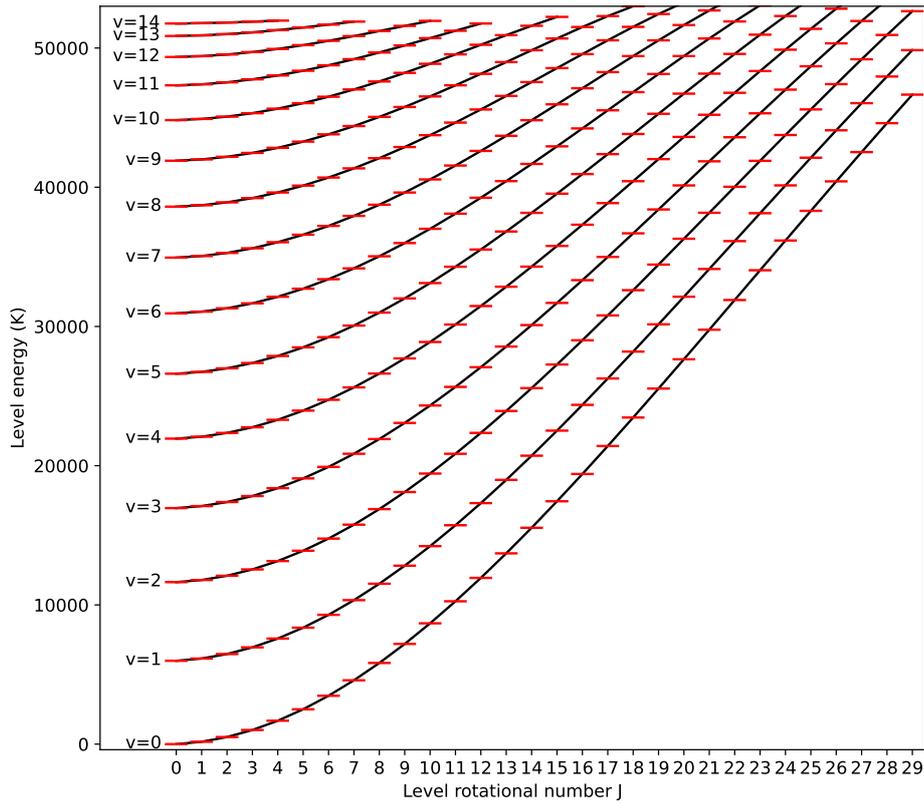


FIGURE 2.15 – Représentation des premiers niveaux rovibrationnels de H_2 . L'énergie du niveau est calculée en Kelvin par E/k_B . Les états vibrationnels sont représentés par les lignes continues noires.

$$E(v, J) = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + v \right) + B_0 J(J + 1) \quad (2.7)$$

où \hbar est la constante de Planck réduite ($h/(2\pi)$), $h = 6,626 \times 10^{-34}$ J est la constante de Planck, ω est la pulsation de vibration caractéristique de la liaison H-H et B_0 est la constante de rotation. ω peut être exprimée comme la pulsation du ressort :

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (2.8)$$

où $\mu = \frac{1}{2}m_H$ est la masse réduite de la molécule de dihydrogène et k est la constante de force du ressort de la loi de Hooke. B_0 est lié au moment d'inertie de la molécule I_0 :

$$B_0 = \frac{\hbar}{2cI_0} \quad (2.9)$$

Comme la molécule de H_2 est légère, sa constante de rotation est élevée $B_0/k_B = 85,25$ K. Les niveaux rotationnels sont alors assez espacés : $\Delta E = 510$ K entre le niveau $v = 0$ $J = 2$ et le niveau $v = 0$ $J = 0$. Ainsi l'excitation rotationnelle de H_2 devient importante pour

des températures de $T > 100$ K. Le premier niveau vibrationnel se place à $E/k_B \sim 6000$ K, ainsi l'excitation vibrationnelle de H_2 devient importante pour des températures $T > 1000$ K. Ainsi, même si H_2 est très abondant dans les régions atomiques et moléculaires, ses premiers niveaux tracent uniquement le gaz chaud. Contrairement à CO, H_2 ne peut être détecté dans les régions froides.

La molécule de H_2 est une molécule mononucléaire, ainsi le barycentre des charges électriques coïncide avec le centre de masse de la molécule. Ainsi, la molécule de H_2 n'a pas de moment dipolaire permanent. Ses transitions rovibrationnelles sont donc des transitions quadripolaires électriques interdites. Chaque proton de la molécule possède de plus un spin nucléaire de $S = \frac{1}{2}$. En fonction de l'orientation respective de ces spins, la molécule de H_2 existe alors sous deux formes différentes :

- **Para- H_2** : $S = 0$, les deux protons ont des directions de spin opposées (anti-parallèle). Cela correspond aux valeurs de J paires.
- **Ortho- H_2** : $S = 1$, les deux protons ont des directions de spin parallèles. Cela correspond aux valeurs de J impaires.

Du fait de l'absence de moment dipolaire permanent, les transitions rovibrationnelles au sein de l'état électronique fondamental se produisent par rayonnement quadripolaire électronique ($\Delta J = 0, \pm 2$). Ces transitions ne permettent pas de passer d'une forme H_2 à une autre (de l'ortho au para).

La dégénérescence des niveaux d'énergie de H_2 dépend de la forme dans laquelle est la molécule :

$$g_J = 2J + 1 \quad \text{pour les niveaux para} \quad (2.10)$$

$$= 3 \times (2J + 1) \quad \text{pour les niveaux ortho} \quad (2.11)$$

2.2.1.2 Mécanismes de formation

La formation de H_2 reste encore aujourd'hui un sujet actif de recherche. Plusieurs voies de formation sont proposées, soit dans la phase gazeuse, soit à la surface des grains.

Formation de H_2 dans la phase gazeuse

La réaction la plus simple pour former H_2 serait l'association radiative de deux atomes d'hydrogène :



Cependant, pour stabiliser ce système, il faudrait que l'énergie produite par cette association ($E = 4,48$ eV) soit émise par un photon. Cependant, H_2 peut difficilement libérer cette énergie puisqu'il n'a pas de dipôle permanent. Ainsi, il est plus probable que la molécule se

dissocie dès sa formation plutôt qu'elle se stabilise après cette association radiative. H_2 ne peut donc pas être formé selon cette voie.

Dans un milieu dans lequel l'abondance d'ions et d'électrons est suffisante, les réactions ion-atome peuvent être efficaces. H_2 peut alors se former selon plusieurs réactions. L'une d'entre elles forme H_2^+ par association radiative suivi d'un échange de charge :



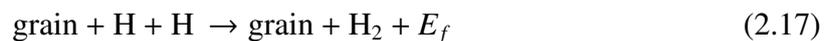
Une autre possibilité est la formation de H^- par attachement radiatif suivi d'un détachement associatif :



Cependant, ces réactions nécessitent de fortes densités pour être probables. De plus, H^- est un ion très réactif et il est détruit par réactions avec des cations bien plus rapidement que sa destruction avec l'hydrogène atomique. Il est également détruit par des photons visibles par photo-détachement : $H^- + h\nu \rightarrow H + e^-$. Ainsi, la formation de H_2 en phase gazeuse ne permet pas d'expliquer sa présence dans le milieu interstellaire.

Formation de H_2 sur les grains de poussières interstellaires

Si H_2 n'est pas formé en phase gazeuse, seule la formation sur les grains de poussières peut expliquer sa présence dans le milieu interstellaire. Ce mécanisme a été proposé pour la première fois par Gould & Salpeter (1963) puis étendu par Hollenbach & Salpeter (1971) et Jura (1975). Pour une description précise et détaillée sur la formation sur les grains, j'invite le lecteur à lire la revue de Wakelam et al. (2017). Dans ce mécanisme, le grain joue le rôle de catalyseur de la formation de H_2 en prenant une partie de l'énergie ($E_f = 4,48$ eV) libérée lors de la réaction et stabilisant H_2 :



L'énergie E_f libérée par la réaction est alors répartie entre le chauffage du grain, l'énergie interne de H_2 et l'énergie cinétique de H_2 . La répartition exacte entre ces trois éléments est inconnue. Pour former H_2 , il faut cependant que l'énergie cinétique donnée à H_2 soit suffisante pour surmonter la force de liaison entre la molécule et le grain. Deux mécanismes, présentés dans la Figure 2.16, existent pour expliquer la catalyse hétérogène sur solide. Le premier est le mécanisme de Langmuir-Hinshelwood. Dans celui-ci, H_2 est formé par physisorption. Deux atomes d'hydrogène sont adsorbés sur la surface du grain avec une faible énergie de liaison. Ainsi, ils peuvent se déplacer sur la surface du grain d'un site à un autre

(grâce à leur excitation thermique ou par effet tunnel) jusqu'à se rencontrer et à former la molécule de H_2 . Le deuxième mécanisme est celui d'Eley-Rideal, favorisé à hautes températures. Dans celui-ci, H_2 est formé par chimisorption. Un hydrogène adsorbé sur la surface du grain est alors frappé par un hydrogène de la phase gazeuse produisant la molécule de H_2 .

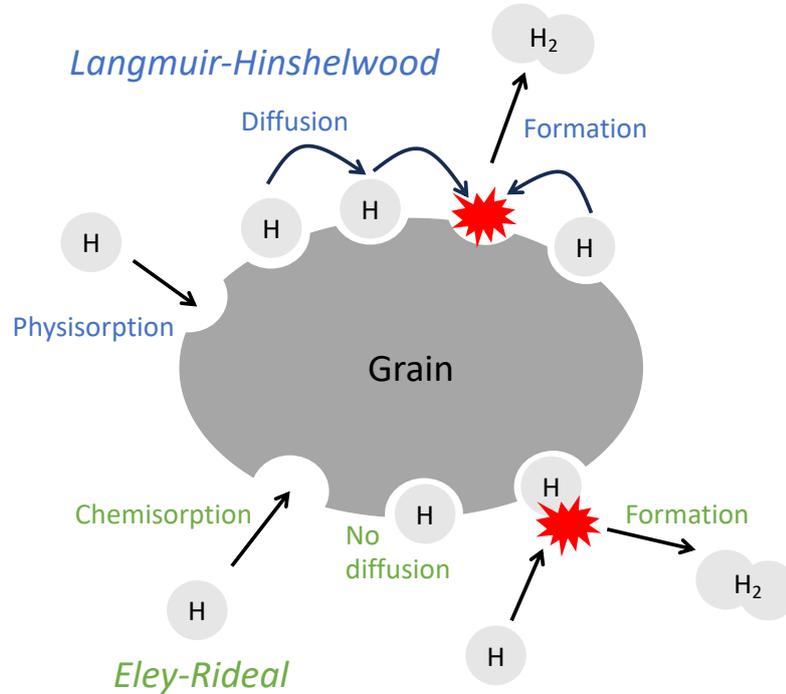


FIGURE 2.16 – Présentation schématique des deux mécanismes de formation de H_2 sur la surface des grains de poussières.

Si la formation de H_2 sur les grains dans le milieu interstellaire est globalement admise, déduire un taux de formation reste néanmoins difficile. En effet, celui-ci dépend alors de l'abondance des grains, de leur composition (silicates, PAHs, graphites...), de leur distribution de tailles, de la forme de leur surface... Le taux de formation par unité de volume de H_2 s'écrit :

$$F(H_2) = \frac{1}{2} \times S(T) \times f \times \eta \times n(H) \times v_H \times \sigma_{gr} \times n_{gr} \quad (2.18)$$

où $S(T)$ est la probabilité qu'un atome d'hydrogène s'adsorbe sur la surface d'un grain, f est la probabilité que l'hydrogène incident reste sur le grain et qu'il migre vers un autre hydrogène adsorbé, η est la probabilité de recombinaison pour former H_2 , $n(H)$ est la densité d'hydrogène gazeux, $v_H = \left(\frac{8k_B T}{\pi m_H}\right)^{1/2}$ est la vitesse de l'hydrogène, $\sigma_{gr} = 2\pi r_{gr}$ est la section efficace moyenne d'interaction entre les atomes d'hydrogène et les grains et n_{gr} est la densité des grains. Typiquement, $n_{gr}\sigma_{gr} \approx n_H(10^{-21} \text{cm}^2)$. Donc le taux de formation par unité de volume de H_2 peut s'écrire :

$$F(H_2) = R_f \times n(H) \times n_H \quad (2.19)$$

où R_f ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$) est le taux de formation de H_2 , s'écrivant alors :

$$R_f = \frac{10^{-21} \text{cm}^2}{2} \times S(T) \times f \times \eta \times \nu_{\text{H}} \quad (2.20)$$

Dans les nuages interstellaires diffus, le taux de formation est estimé à $R_f = 3 \times 10^{-17} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ à $T = 70 \text{K}$ par Jura (1975) en utilisant des observations dans l'ultraviolet avec le satellite *Copernicus*. Des études, utilisant des observations ISO, ont montré que ce taux de formation est plus grand dans les PDRs (Habart et al. 2004). La gamme de longueur d'onde du JWST permet une analyse combinée de l'émission de H_2 et de l'émission des poussières. Cette analyse permet alors de mieux contraindre la formation de H_2 sur les grains (type de mécanismes, rapport ortho-sur-para...) et le lien entre H_2 et les propriétés des petits grains, c'est-à-dire comment l'évolution des propriétés des grains dans la PDRs influe la formation de H_2 sur ceux-ci.

2.2.1.3 Photodissociation et auto-écranage de H_2

Exposées au fort rayonnement UV, les molécules de H_2 sont photodissociées par raies : les transitions de Lyman et de Werner. Ainsi, la molécule de H_2 ne peut se dissocier que par absorption de photons avec des longueurs d'onde spécifiques qui puissent déclencher des transitions de Lyman ou de Werner. À chaque molécule de H_2 photodissociée, il y a un photon de moins capable de détruire une nouvelle molécule de H_2 . Lorsque la densité de colonne de H_2 dépasse 10^{14}cm^{-2} , les raies d'absorption des photons FUV deviennent optiquement épaisses. Dans ce régime, il n'y a plus de photons disponibles avec des énergies équivalentes au centre de la raie ni aux ailes de la raie : la dissociation n'est plus possible. Ainsi le rayonnement UV est éteint autour des raies de Lyman et de Werner protégeant de la photodissociation les molécules de H_2 même lorsque l'atténuation par les grains est minime. Ce phénomène s'appelle auto-écranage. Ce phénomène peut apparaître pour les molécules H_2 et CO et est particulièrement observé pour H_2 puisque sa densité de colonne est quasiment toujours suffisante pour déclencher ce processus dans les objets étudiés.

Le taux de photodissociation par unité de volume est donné par (Draine & Bertoldi 1996; Hollenbach & Tielens 1999) :

$$R_{\text{diss}} = f_{\text{shield}}(N(\text{H}_2)) e^{-\tau_{\text{gr},1000}} I_{\text{diss}}(0) n(\text{H}_2) \quad (2.21)$$

où $n(\text{H}_2)$ est la densité de H_2 , $I_{\text{diss}}(0) \simeq 4 \times 10^{11} G_0 \text{s}^{-1}$ est le taux de dissociation non écrané par molécule de H_2 , $\tau_{\text{gr},1000}$ est l'épaisseur optique de la poussière à 1000\AA , $N(\text{H}_2)$ est la densité de colonne de H_2 dans la PDR, et f_{shield} est le facteur d'auto-écranage donné approximativement par :

$$f_{\text{shield}} = 1 \text{ lorsque } N(\text{H}_2) \lesssim 10^{14} \text{cm}^{-2} = N_0 \quad (2.22)$$

$$f_{\text{shield}} = \left(\frac{N(\text{H}_2)}{N_0} \right)^{-0,75} \text{ lorsque } N_0 \lesssim N(\text{H}_2) \lesssim 10^{21} \text{cm}^{-2} \quad (2.23)$$

Nous supposons $N_0 \lesssim N(\text{H}_2) \lesssim 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ et $N_{\text{H}} \lesssim 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ qui nous permet de négliger l'opacité de la poussière. En égalant le taux de formation (Équation (2.19)) et le taux de photodissociation de H_2 (Équation (2.21)), nous pouvons montrer que l'abondance de H_2 ($x(\text{H}_2) = n(\text{H}_2)/n_{\text{H}}$) dépend de n_{H}/G_0 (Hollenbach & Tielens 1999) :

$$R_f n(\text{H}) n_{\text{H}} = \left(\frac{N(\text{H}_2)}{N_0} \right)^{-3/4} I_{\text{diss}}(0) n(\text{H}_2) \quad (2.24)$$

$$x(\text{H}_2) = \left(\frac{R_f n_{\text{H}}}{I_{\text{diss}}(0)} \right)^4 \left(\frac{N_{\text{H}}}{4N_0} \right)^3 \quad (2.25)$$

On trouve alors la relation de proportionnalité :

$$x(\text{H}_2) \propto \left(\frac{n_{\text{H}}}{G_0} \right)^4 \left(\frac{N_{\text{H}}}{N_0} \right)^3 \quad (2.26)$$

Au front de dissociation $x(\text{H}_2) = 1/4$. On obtient alors, à partir de l'Équation (2.25), une densité de colonne au front de dissociation de :

$$N_{\text{HDF}} \simeq 4^{2/3} \left(\frac{I_{\text{diss}}(0)}{R_f n_{\text{H}}} \right)^{4/3} N_0 \simeq 4^{2/3} \left(\frac{4 \times 10^{-11}}{R_f} \right)^{4/3} N_0 \left(\frac{G_0}{n_{\text{H}}} \right)^{4/3} \quad (2.27)$$

L'extinction due à la poussière devient importante lorsque $N_{\text{HDF}} \gtrsim 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$ soit, d'après l'Équation (2.27), lorsque $G_0/n_{\text{H}} \gtrsim 4 \times 10^{-2} \text{ cm}^3$. A l'inverse, l'auto-écranage de H_2 domine la protection de la dissociation de H_2 et donc la position de la transition H/H_2 lorsque $G_0/n_{\text{H}} \lesssim 4 \times 10^{-2} \text{ cm}^3$. Pour les PDRs fortement irradiées, ce rapport est souvent autour de 1 cm^3 . Par exemple, dans la Barre d'Orion, ce rapport vaut environ $G_0/n_{\text{H}} \sim 0,1 - 1 \text{ cm}^3$. Ainsi, dans ces régions, la position de la transition H/H_2 est dominée par l'extinction par la poussière. Elle se situe généralement autour de $A_V \simeq 2$ où l'extinction par la poussière a suffisamment réduit le taux de photodissociation de H_2 pour que la molécule soit devenue suffisamment abondante afin que l'auto-écranage apparaisse. Dans les PDRs moins irradiées, comme la Tête-de-Cheval où le rapport vaut $G_0/n_{\text{H}} \sim 10^{-2} \text{ cm}^3$, l'auto-écranage a de plus en plus d'influence.

2.2.1.4 Excitation dans les régions irradiées

Ce qui nous intéresse tous particulièrement dans la suite de cette thèse n'est pas simplement la molécule de H_2 , mais lorsque celle-ci est excitée. Il existe différents processus d'excitation de H_2 dans ses niveaux rovibrationnels. Nous nous concentrerons ici sur les principaux mécanismes effectifs dans les régions irradiées. Trois mécanismes semblent dominer l'excitation de cette molécule : l'excitation collisionnelle, l'excitation radiative par pompage ultraviolet et l'excitation à la formation de la molécule.

Excitation par collisions

Dans les régions chaudes, H_2 peut être excité par collisions. Cela concerne souvent les premiers niveaux rotationnels de H_2 . Les partenaires de collisions de H_2 peuvent être des atomes, des molécules ou des électrons. Les partenaires majoritaires sont les atomes et molécules légers et abondants comme l'hydrogène atomique H, l'hélium He et le dihydrogène H_2 . Le calcul des taux de collisions de H_2 est particulièrement compliqué puisque cela nécessite des calculs de mécanique quantique de potentiel d'interaction entre les partenaires de collisions et la cible. Ces processus sont détaillés dans le livre de Flower (2007). Les premiers niveaux de H_2 étant thermalisés dans les régions chaudes, H_2 agit comme un véritable thermomètre du gaz. Ainsi, sa détection avec le JWST est essentielle pour diagnostiquer les conditions physiques du gaz.

Excitation radiative par pompage ultraviolet

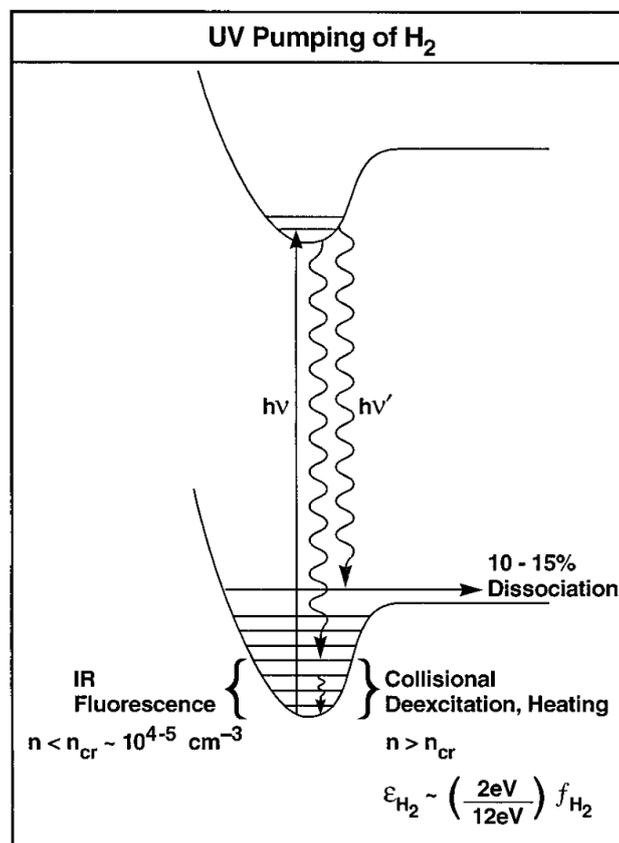


FIGURE 2.17 – Schéma des mécanismes de pompage ultraviolet lointain, de dissociation et de chauffage de H_2 dans les PDRs. La fluorescence dans l'ultraviolet lointain peut mener à une molécule de H_2 vibrationnellement excitée dans l'état électronique fondamental. La désexcitation collisionnelle de cette molécule excitée peut alors chauffer le gaz. Dans environ 10-15 % des cas, la cascade va jusqu'au continuum vibrationnel de l'état électronique fondamental, ce qui conduit à la photodissociation de la molécule H_2 . Figure extraite de Hollenbach & Tielens (1999).

Dans les régions irradiées, un des mécanismes d'excitation principaux est le pompage ultraviolet. En effet, H_2 peut être excité dans un état électronique (Black & Dalgarno 1973; Black & van Dishoeck 1987) par absorption d'un photon ultraviolet via les transitions de Lyman et de Werner, puis se désexciter par fluorescence vers des niveaux rovibrationnels dans l'état électronique fondamental. Suite à ce pompage ultraviolet, dans 10–15 % des cas, la molécule fluoresce vers le continuum vibrationnel de l'état électronique fondamental, et conduit à la photodissociation de la molécule de H_2 . Dans 85–90 % des cas, la molécule fluoresce vers un état vibrationnellement excité dans l'état électronique fondamental et transite par une cascade au sein des niveaux rovibrationnels (produite par fluorescence ou désexcitation collisionnelle). Un schéma explicatif de ce mécanisme est présenté en Figure 2.17.

Excitation à la formation de H_2

Comme énoncé plus tôt, lors de la formation de H_2 , l'énergie de liaison ($E_f = 4,48$ eV) est libérée et est répartie entre le chauffage du grain, l'énergie cinétique de H_2 et l'énergie interne de H_2 . Ainsi, en fonction de la répartition exacte de cette énergie, qui est toujours une question ouverte, H_2 peut être formé directement rovibrationnellement excité lors de sa formation. Communément, il est choisi de répartir équitablement cette énergie entre les trois branches ; ainsi un tiers de l'énergie de liaison est transmise à l'énergie interne de H_2 (soit 1,49 eV).

2.2.2 La molécule de H_2 comme précurseur de la chimie en phase gazeuse

Dans les régions chaudes et irradiées, la molécule de H_2 joue un rôle crucial dans l'activation de la chimie en phase gazeuse. En effet, l'énergie interne obtenue grâce aux différents processus d'excitation présentés plus tôt lui permet d'être particulièrement réactive. Cet excès d'énergie peut ainsi être utilisé à l'activation de réactions avec une forte barrière énergétique ou de réactions endergoniques, *i.e.* nécessitant un apport énergétique.

2.2.2.1 Chimie de l'oxygène

Ainsi, dans la phase gazeuse, H_2 est à l'origine de la chimie de l'oxygène. Il est impliqué dans cette chimie à la fois dans la voie ion–neutre, favorisée à basse température ($T \lesssim 300$ K) et la voie neutre–neutre, favorisée à haute température. Ces deux voies sont présentées dans la Figure 2.18.

Dans les régions denses irradiées, et plus particulièrement au front de dissociation, qui nous intéressent dans la suite de ce manuscrit, la chimie de l'oxygène est dominée par les réactions neutre–neutre puisque la température du gaz est suffisante pour surmonter leur barrière d'énergie et l'abondance des espèces neutres est importante au front de dissociation. En effet, en réagissant avec l'oxygène atomique, H_2 produit successivement OH et H_2O :

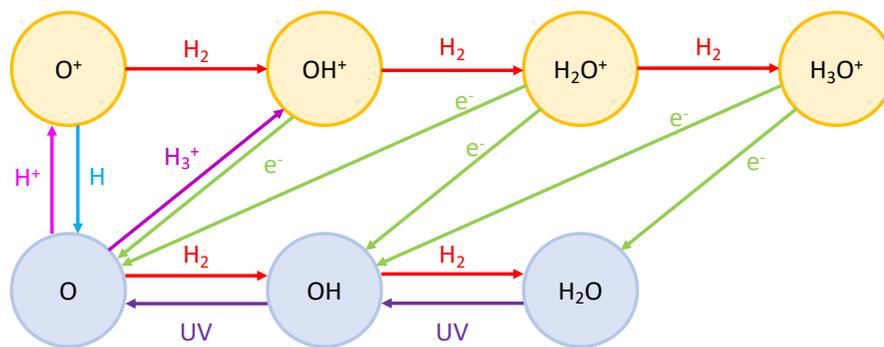
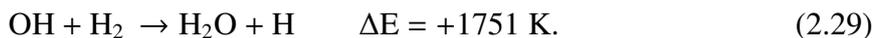
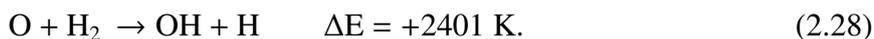


FIGURE 2.18 – Schéma simplifié des réactions initiées par le dihydrogène impliqué dans la chimie de l’oxygène. Deux voies sont possibles : la voie ion–neutre initiée par l’oxygène ionisé et la voie neutre–neutre initiée par l’oxygène atomique.



Ces deux réactions ont de fortes barrières énergétiques (voir Figure 2.19). Elles sont donc possibles seulement dans les milieux chauds et dans les milieux dans lesquels H₂ est excité. Son énergie interne est alors utilisée pour surmonter ces barrières énergétiques.

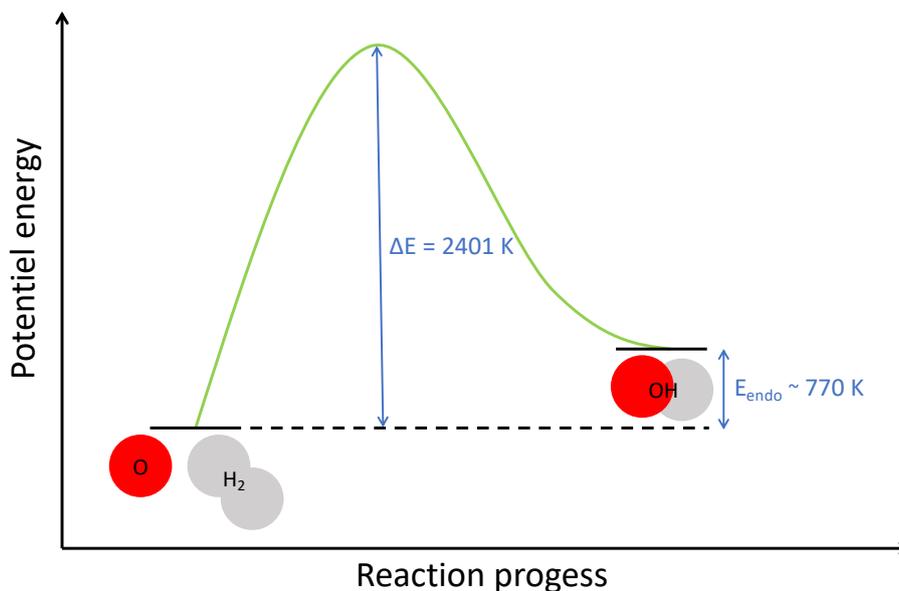


FIGURE 2.19 – Vision schématique de la réaction de formation de OH par O + H₂. La réaction est endothermique de $E_{\text{endo}} \sim 770 \text{ K}$ (Huber & Herzberg 1979) et possède une grande barrière énergétique $\Delta E = 2401 \text{ K}$ (Veselinova et al. 2021).

2.2.2.2 Chimie du carbone

H_2 peut aussi être à l'origine de la chimie du carbone. De la même façon que pour la chimie de l'oxygène, les voies ion–neutre et neutre–neutre sont possibles. Elles sont présentées de façon simplifiée dans la Figure 2.20.

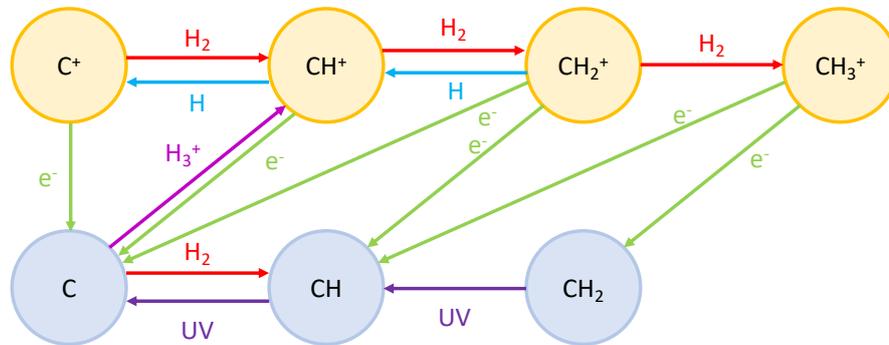
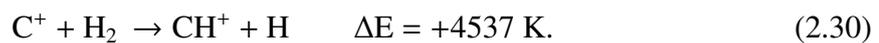


FIGURE 2.20 – Schéma simplifié des réactions initiées par le dihydrogène impliquées dans la chimie du carbone. Deux voies sont possibles : la voie ion–neutre initiée par le carbone ionisé et la voie neutre–neutre initiée par le carbone atomique.

Dans les régions denses et irradiées, contrairement à la chimie de l'oxygène, la voie ion–neutre domine les premières réactions de la chimie du carbone. En effet, dans ces régions, C^+ est plus abondant et plus réactif que le carbone atomique. Dans la suite de ce manuscrit, nous nous intéresserons particulièrement à la suite de réaction :



La première réaction de cette chaîne n'a pas de barrière mais est fortement endothermique (voir Figure 2.21). Ainsi, elle nécessite de hautes températures et/ou H_2 excité pour être déclenchée. Les deux réactions qui suivent sont exothermiques. Ainsi, lorsque CH^+ est formé, la formation de CH_3^+ se fait très rapidement par cette voie.

Par la formation de CH_3^+ , un grand nombre de réactions est déclenché permettant la création d'une multitude d'espèces carbonées dans le gaz irradié. Un schéma récapitulatif des réactions provenant de CH_3^+ est présenté en Figure 2.22.

En effet, il est communément admis que CH_3^+ est à l'origine de la plupart des hydrocarbures présents dans ces régions (Smith 1992; Herbst 2021). CH_3^+ peut subir une recombinaison dissociative produisant CH ou CH_2 qui peut réagir à nouveau avec CH^+ ou CH_3^+ pour produire des molécules contenant deux carbones (par exemple C_2H , Goicoechea et al. en préparation). Ensuite, la chaîne chimique se déploie : les ions hydrocarbures insaturés réagissant avec de petites molécules d'hydrocarbures peuvent donner naissance à divers hydrocarbures

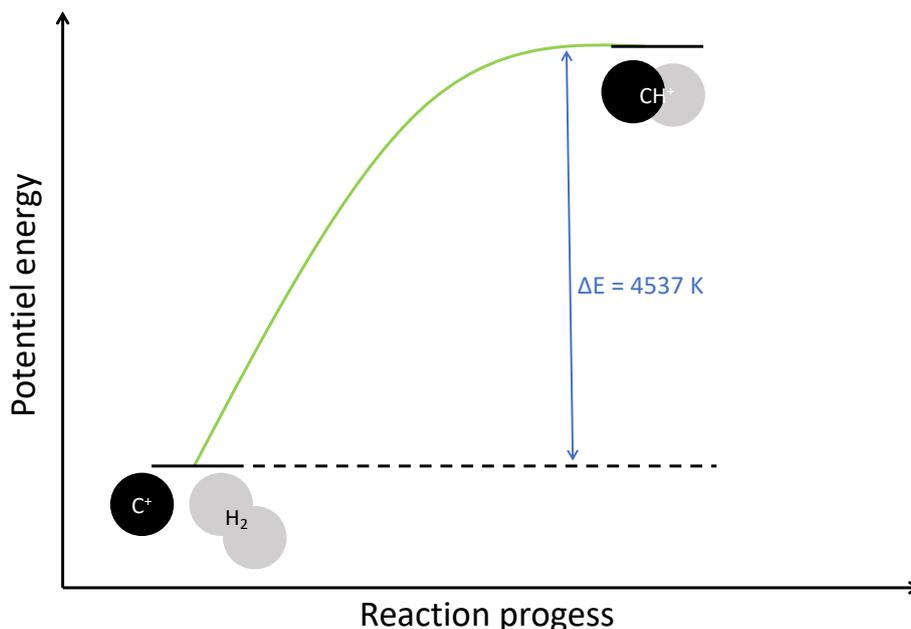


FIGURE 2.21 – Vision schématique de la réaction de formation de CH⁺ par C⁺ + H₂. La réaction est endothermique de ΔE = 4537 K (Hierl et al. 1997; Agúndez et al. 2010).

à longue chaîne (C₃H, C₃H₂, C₄H₄, C₄H₂, C₅H, C₆H...). Il est aussi pensé que CH₃⁺ est à l'origine de nombreuses espèces carbonées non-hydrocarbures. Par exemple, lorsqu'il réagit avec l'azote, il permet de produire l'acide cyanhydrique HCN :



Une suite de réactions débutant par la réaction entre CH₃⁺ et l'acide cyanhydrique (HCN) permet de produire d'autres espèces cyanure (CH₃CN, C₂H₅CN...). CH₃⁺ peut aussi réagir avec l'ammoniac (NH₃) pour produire des espèces aminées (CH₂NH, CH₃NH₂...).

CH₃⁺ est aussi particulièrement réactif avec les espèces comportant de l'oxygène. Sa réaction avec l'oxygène atomique permet de former HCO⁺ :



Il réagit aussi avec CO pour produire des espèces carboxyles comme CH₂CO :



Ainsi, nous comprenons alors le rôle clé de CH₃⁺ dans l'initiation de la chimie du carbone et l'impact essentiel de H₂ et de son excitation dans la formation de CH₃⁺.

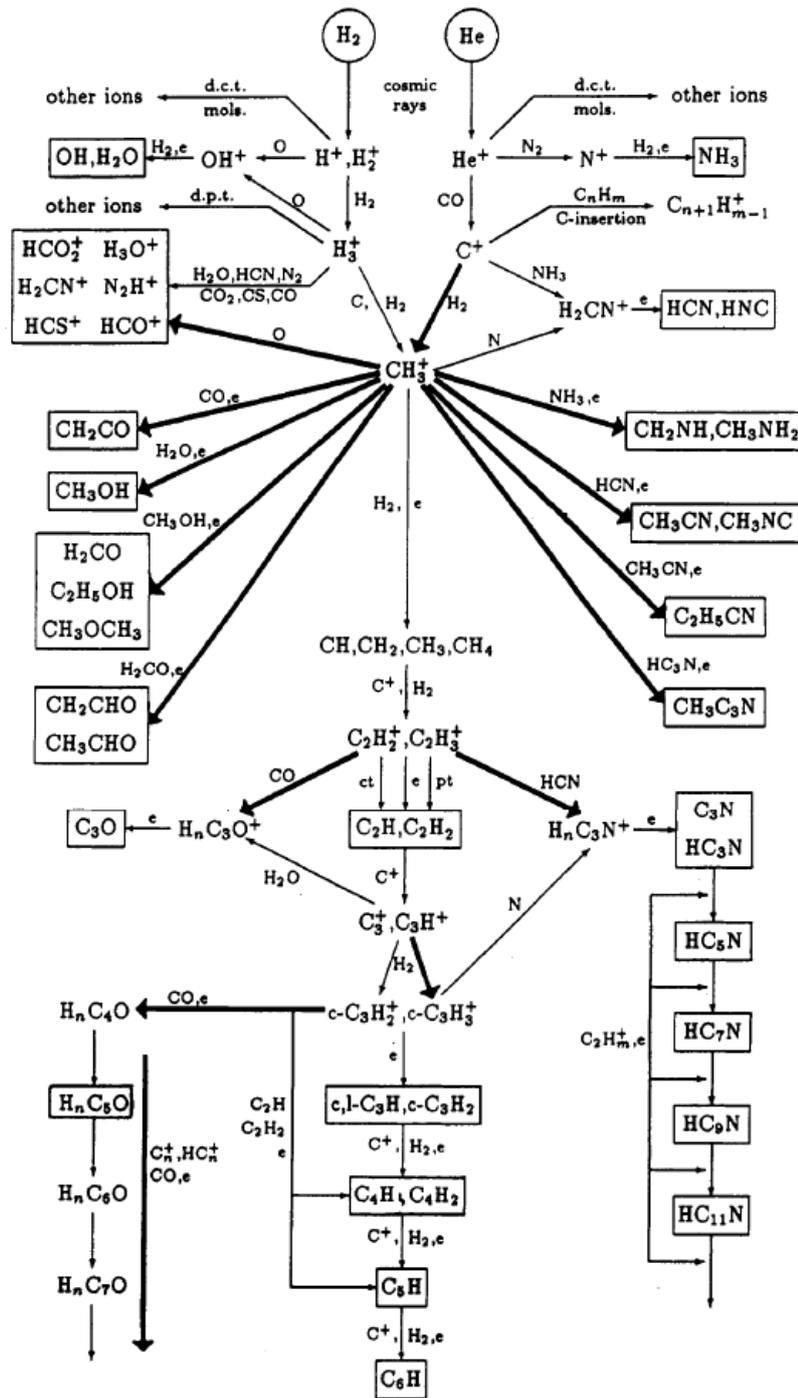


FIGURE 2.22 – Schéma des réactions chimiques initiées par CH_3^+ . Lorsqu’une espèce neutre (par exemple CO) et e sont associés à une flèche, cela signifie qu’une réaction ion–neutre se produit d’abord, puis que l’ion produit de la réaction subit une recombinaison dissociative avec un électron pour produire les neutres indiqués à la tête de la flèche. Les flèches épaisses indiquent qu’une association radiative se produit. Les autres symboles le long des flèches indiquent les éléments suivants : ct, transfert de charge ; pt, transfert de protons ; dct, transfert de charge dissociatif ; dpt, transfert de protons dissociatif. Figure extraite de Smith (1992).

2.2.3 Processus d'excitation hors équilibre thermodynamique local (ETL)

Dans le milieu interstellaire, différents processus permettent d'exciter les espèces. Dans cette Section, j'aborderai les principaux mécanismes d'excitation présents dans les régions chaudes et irradiées. Un résumé des différents types d'excitation est présenté dans la Figure 2.23.

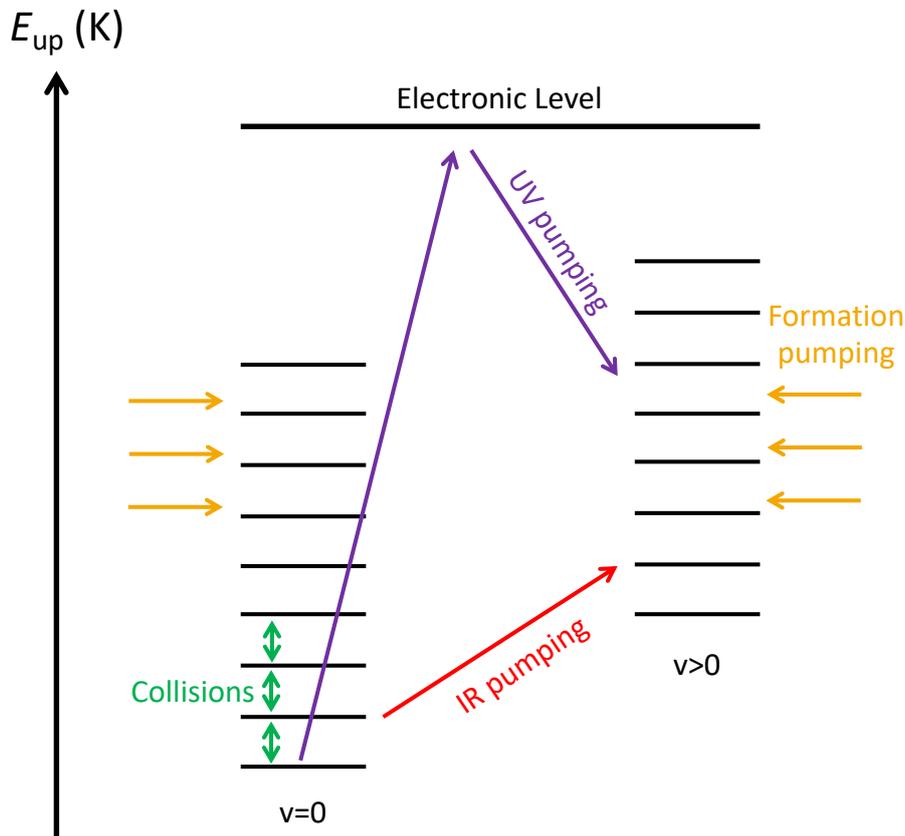


FIGURE 2.23 – Représentation schématisée des différents processus d'excitation dans les régions irradiées.

A l'équilibre thermodynamique local (ETL), la population des niveaux d'une espèce suit une loi de Boltzmann à la température du gaz. Ainsi, l'espèce est excitée et se désexcite essentiellement par collisions. Cet ETL n'est possible que lorsque la désexcitation collisionnelle d'un niveau est plus rapide que sa désexcitation radiative. On définit alors une densité critique à partir de laquelle on atteint l'ETL :

$$n_{c_i} = \frac{\sum_{i>j} A_{ij}}{\sum_{i>j} k_{ij}} \quad (2.38)$$

où A_{ij} est le coefficient d'Einstein et k_{ij} le taux de collisions de la transition $i \rightarrow j$. Les partenaires de collisions majoritaires, pour la plupart des espèces, sont l'hydrogène atomique H, l'hélium He, le dihydrogène H_2 et les électrons. L'importance de ces partenaires de collisions et la valeur des taux de collisions dépendent de l'abondance du collisionneur

et du détail de l'interaction entre l'espèce et le partenaire de collision. Néanmoins, pour de nombreuses espèces, la densité doit être élevée pour que l'excitation par collisions soit importante. L'émission d'espèces excitées par collisions donne alors des informations sur l'abondance de cette espèce et sur la température du gaz.

Cependant, dans les régions irradiées où les conditions physiques sont complexes (haute température, champ de rayonnement UV intense, champ de rayonnement IR émis par la poussière...), des espèces peuvent être peuplées en dehors de l'équilibre thermodynamique local. D'ailleurs, la grande sensibilité du *James Webb Space Telescope* donne accès à des raies très faibles provenant souvent de processus d'excitation non thermiques. Il est alors important de comprendre ces processus pour correctement identifier et analyser les raies observées avec ce télescope.

2.2.3.1 Pompage radiatif

L'excitation hors-ETL la plus courante est l'excitation par pompage radiatif. En effet, l'absorption d'un photon émis par le milieu environnant peut exciter une espèce, même à basse densité. Dans les régions irradiées, on distingue deux types de pompage radiatif prédominant : le pompage UV et le pompage IR.

Pompage UV

Les étoiles massives proches des PDRs émettent un fort champ ultraviolet. Ce rayonnement ultraviolet peut-être absorbé par les espèces qui vont alors être excitées dans des états électroniques. Cette excitation est particulièrement importante pour les métaux comme l'oxygène, le fer... mais également pour H_2 comme nous l'avons mentionné dans la Section 2.2.1.4. Ces espèces se dés excitent ensuite par fluorescence vers des niveaux rovibrationnels moins excités. Les raies provenant du pompage UV sont particulièrement utiles pour contraindre l'intensité du champ de rayonnement puisque leur intensité est proportionnelle à celui-ci.

Pompage IR

Dans les PDRs, les poussières absorbent le rayonnement UV et réémettent dans l'infrarouge. Les photons émis dans l'infrarouge peuvent alors par la suite être absorbés par une espèce. L'absorption d'un photon infrarouge mène souvent vers une excitation de l'espèce dans un état vibrationnellement excité avec un faible niveau de rotation. La population des premiers niveaux d'un état vibrationnellement excité pompés par infrarouge reflètent alors la population des premiers niveaux de l'état vibrationnel fondamental. Lors du pompage infrarouge, la température d'excitation vibrationnelle est alors proche de la température du champ infrarouge local. Ce processus peut être particulièrement important dans des environnements dans lesquels le rayonnement infrarouge de la poussière est intense. De nombreuses espèces peuvent-être affectées par ce pompage infrarouge, comme l'eau par exemple.

2.2.3.2 Excitation à la formation

Dans le reste de ce manuscrit, je m'intéresse à des processus spécifiques d'excitation directement à la formation. Peu de travaux ont été réalisés sur ces processus et peu d'évidences de ces mécanismes dans les observations ont été révélées. La prise en compte de ces mécanismes est cependant essentielle lorsque les niveaux d'énergie étudiés sont difficilement peuplés par collisions ou pompage radiatif. Ils seront alors particulièrement pertinents pour les molécules très réactives, qui ont des temps caractéristiques chimiques plus courts que les temps caractéristiques collisionnel. Deux catégories se distinguent dans l'excitation à la formation : le pompage chimique provenant directement de la réaction chimique et l'émission prompte provenant d'une excitation suite à la photodissociation d'une espèce.

Pompage chimique

Nous avons vu que l'excitation de H_2 peut être utilisée pour lancer des réactions chimiques avec de fortes barrières énergétiques ou de forte endothermités. Elle permet alors de déclencher des chaînes de réactions menant à des molécules complexes. Néanmoins, cet excès d'énergie peut également être utilisé dans l'excitation de la molécule formée par des processus spécifiques. En effet, lorsque H_2 réagit avec une espèce, il peut produire une molécule directement excitée dans un niveau rotationnel ou rovibrationnel :



L'état d'excitation de la molécule dépend alors de l'état d'excitation de H_2 . Ce processus, nommé pompage chimique, peut exciter très fortement les molécules bien au-delà de l'excitation thermique par collisions. Ce processus a déjà été utilisé des nombreuses fois pour expliquer l'émission de certaines espèces dans les observations, par exemple CH^+ (*e.g.*, Godard & Cernicharo 2013; Neufeld et al. 2021), que j'étudierai dans le Chapitre 6, OH^+ (*e.g.*, van der Tak et al. 2013) et OH (*e.g.*, Tabone et al. 2021), que j'étudierai dans le Chapitre 5. De plus, l'excitation par pompage chimique a été longuement étudiée par des physiciens moléculaires à travers des calculs de dynamique quantique. Par exemple, pour l'excitation de OH , on peut noter les travaux de Weck et al. (2006); Veselinova et al. (2021) et pour CH^+ , les travaux de Zanchet et al. (2013); Faure et al. (2017). Ces travaux permettent alors de calculer la chimie état-état (*state-to-state*), à travers les coefficients de réaction d'un niveau d'énergie de H_2 vers un niveau d'énergie de la molécule considérée. Le pompage chimique de OH a également été étudié avec des expériences de laboratoire (*e.g.*, Liu et al. 2000).

Emission prompte

Le pompage chimique n'est pas le seul mécanisme d'excitation permettant de former des molécules dans des états d'excitation avancés. En effet, des processus physiques peuvent aussi être à l'origine de ce phénomène. Par exemple, la photodissociation de certaines espèces peut former des produits dans un état fortement excité. Les processus les plus connus concernent la photodissociation de H_2O , OH et CO_2 :



L'excitation précise de ces espèces, c'est-à-dire la population de leurs niveaux énergétiques, dépend alors du champ de rayonnement et de l'énergie des niveaux dissociatifs de l'espèce parent. Ces espèces se dés excitent ensuite par une cascade radiative, que l'on appelle émission prompte.

La photodissociation de l'eau, processus qui nous intéressera particulièrement au cours de cette thèse (voir Chapitre 4 et 5), a fait l'objet de nombreuses études. L'excitation de OH suivant ce processus a été mesuré expérimentalement (*e.g.*, Andresen et al. 1985; Häusler et al. 1987; Brouard et al. 1994; Hwang et al. 1999; Yang et al. 2000; Harich et al. 2000; Fillion et al. 2001, 2004) mais a aussi été prédite de nombreuses fois par des études basées sur des calculs de dynamique quantique (*e.g.*, Segev & Shapiro 1982; L.J. Dunne & Murrell 1987; Weide & Schinke 1987; Engel et al. 1988; Guo & Murrell 1988; Weide et al. 1989; Engel et al. 1992; von Dirke et al. 1994; van Harrevelt & van Hemert 2000b; Harich et al. 2001; van Harrevelt & van Hemert 2001). Quelques années après ces expériences et ces calculs théoriques, cette émission a enfin été détectée avec *Spitzer* (Tappe et al. 2008, 2012; Carr & Najita 2014) dans un *outflow* et une protoétoile. Ces observations ont soulevé la question de la modélisation de l'émission prompte de OH pour les analyser, ce qui a été entrepris par Tabone et al. (2021) et que j'ai poursuivie dans mon travail de thèse (voir Chapitre 4). Toutes ces études ont permis de montrer que OH peut-être excité différemment en fonction de l'état électronique de dissociation par lequel H₂O est excité. Ainsi, OH est alors fortement rotationnellement excité (principalement) lorsque la molécule H₂O se photodissocie par son état électronique \tilde{B} (*e.g.*, Harich et al. 2000; van Harrevelt & van Hemert 2000b) et vibrationnellement excité mais rotationnellement froid lorsque H₂O se photodissocie par son état électronique \tilde{A} (*e.g.*, Hwang et al. 1999; Yang et al. 2000; van Harrevelt & van Hemert 2001). La distribution d'état de OH suivant ce processus est montrée dans la Figure 2.24. Nous discuterons de la modélisation et de l'observation de ce processus dans les Chapitres 4 et 5.

Je ne décrirai pas en détail les autres processus d'émission prompte puisque nous ne les aborderons pas dans cette thèse, mais il est tout de même important de souligner, que tout comme la photodissociation de l'eau, ils attirent l'intérêt des scientifiques : la photodissociation de CO₂ (*e.g.*, Lawrence 1972; Judge & Lee 1973; Lee & Judge 1973; Weaver et al. 1994; Feldman et al. 1997; Kalogerakis et al. 2012; Raghuram & Bhardwaj 2012) et la photodissociation de OH (*e.g.*, van Dishoeck & Dalgarno 1984; Störzer & Hollenbach 1998) ont également fait l'objet de différentes études.

Un processus permettant de puissants diagnostics du milieu

Ces processus d'excitation à la formation peuvent être utilisés comme des diagnostics robustes du milieu étudié. En effet, contrairement au processus d'excitation collisionnel ou

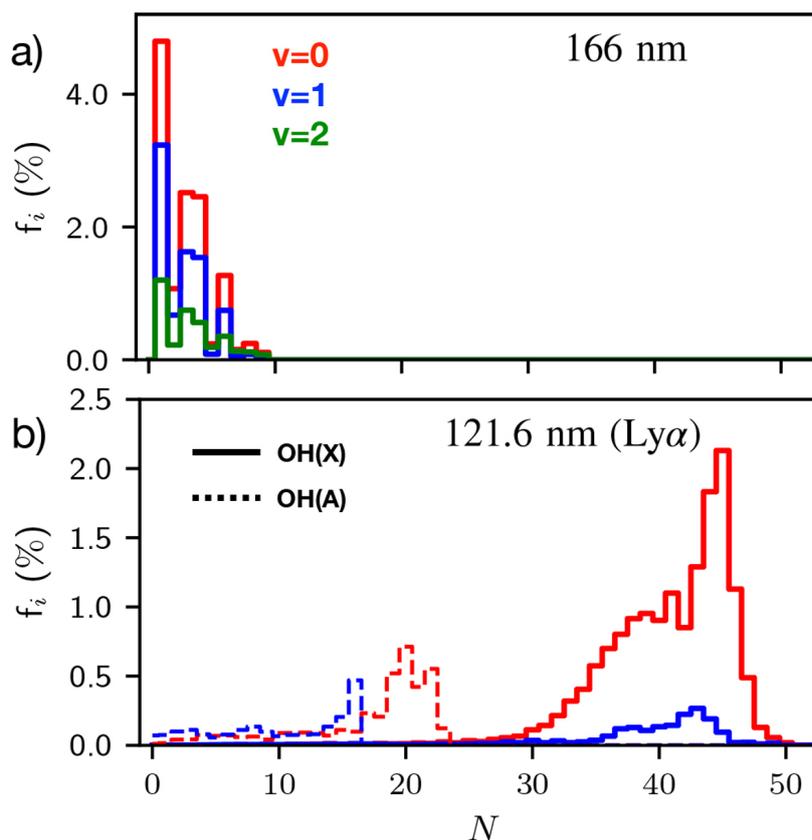


FIGURE 2.24 – Distribution des états du OH produit suite à la photodissociation de H_2O à deux longueurs d’onde. (a) À $\lambda = 166$ nm, H_2O se dissocie via son premier état électronique excité \tilde{A} et produit OH dans des états rotationnellement froids mais vibrationnellement chauds. (b) À $\lambda = 121,6$ nm, H_2O se dissocie via son deuxième état électronique excité \tilde{B} et produit OH dans des états rotationnellement chauds mais vibrationnellement froids. Les nombres quantiques vibrationnels sont codés en couleur comme indiqué dans le panneau supérieur. Les distributions au sein de $\text{OH}(X^2\Pi, \nu)$ et $\text{OH}(A^2\Sigma^+, \nu)$ sont représentées par des lignes pleines et pointillées, respectivement, en fonction du nombre quantique de rotation N . Seuls les niveaux vibrationnels qui contribuent au moins à hauteur de 1,5 % à la population de OH naissants sont représentés. Figure extraite de Tabone et al. (2021).

par pompage radiatif, ils ne dépendent pas de l’abondance de l’espèce. L’excitation des molécules suivant ce mécanisme reflète uniquement le taux de formation par unité de temps de la molécule. Ainsi, l’émission de ces molécules permet de tracer la formation et/ou la destruction d’une espèce en action. De plus, l’excitation à la formation de la molécule dépend fortement des paramètres physiques dont dépend la réaction chimique ou physique lui donnant lieu. Par exemple, dans le cas du pompage chimique, l’émission observée donne des contraintes sur la densité du milieu puisque l’efficacité de la collision réactive entre deux corps dépend de celle-ci. Dans le cas de l’émission prompte par photodissociation, l’émission observée donne des contraintes sur l’intensité du champ UV ou sur l’abondance de l’espèce parent (par exemple l’eau dans le cas de la photodissociation de l’eau). Nous montrerons, au cours de cette thèse, comment l’émission observée suivant ces processus spécifiques permet

de développer des diagnostics des conditions physiques et chimiques de l'environnement sans avoir recours à des modèles auto-cohérents.

Le JWST amène une nouvelle ère à l'observation astrophysique. En effet, sa grande résolution spatiale et sensibilité permettent la détection de multiples espèces excitées par des processus hors ETL. Les comprendre et savoir les analyser est essentiel pour étudier l'ensemble du spectre observé. Cette thèse met aussi en avant l'importance de la collaboration entre astrophysiciens, physiciens moléculaires, expérimentateurs pour analyser ces processus physiques et chimiques spécifiques observés dans les spectres du JWST.

Objectifs de la thèse

La plupart des systèmes planétaires se situent dans des régions fortement irradiées (voir Section 2.1.2.1). De plus, la rétroaction radiative par les étoiles massives est le mécanisme dominant limitant la formation des étoiles et des planètes (voir Chapitre 1, Section 1.2.3). L'étude des régions irradiées, c'est-à-dire des PDRs et des disques irradiés, est donc centrale pour comprendre la formation stellaire et planétaire. La structure en température, en densité, en composition chimique de ces régions sont des ingrédients essentiels déterminant les conditions initiales de la formation stellaire et planétaire ainsi que le devenir des protoétoiles et des protoplanètes encore enfouies dans le cocon de gaz et de poussières. Ce sont également les ingrédients essentiels pour comprendre la rétroaction stellaire limitant la formation de ces objets. L'objectif de ma thèse est alors de contraindre les conditions physiques mais également la chimie présentes dans ces régions, en utilisant comme objet d'étude la Barre d'Orion. Plus précisément, j'étudie les régions chaudes où la chimie est particulièrement active grâce au fort rayonnement ultraviolet et aux hautes températures. Pour cela, j'ai travaillé à la fois sur la modélisation détaillée du gaz dans les régions irradiées et sur l'analyse des données du *James Webb Space Telescope*.

Cette thèse permet de mettre en évidence la force du JWST dans l'observation de ces objets. Tout d'abord, comme le montre la Figure 2.25, sa gamme de longueurs d'onde, dans l'infrarouge proche et moyen, lui permet d'observer les raies rotationnelles et rovibrationnelles de H_2 traçant les régions chaudes et irradiées. De plus, il permet d'observer, non pas les raies purement rotationnelles traçant le gaz froid (qui étaient observées avec *Herschel*) mais l'émission des raies rovibrationnelles très excitées du gaz chaud provenant d'espèces comme OH et CH^+ , qui s'avèreront, au cours de cette thèse être des diagnostics puissants des régions irradiées. Sa grande résolution spatiale permet la détection d'objets à petites échelles comme les disques protoplanétaires ou les sous-structures d'une PDR (front de dissociation). Sa grande sensibilité permet l'accès à l'émission de raies très faible jusqu'alors jamais détectée. Ma thèse s'inscrit dans le programme d'observation PDRs4All dédié à l'étude des PDRs et des disques irradiés. Mes travaux se sont alors intéressés à l'analyse de ces données en utilisant les différents instruments du JWST (les imageurs NIRCAM et MIRIm et les spectro-imageurs NIRSpec et MIRI-MRS). La complémentarité de ces instruments (l'infrarouge proche et moyen ainsi que l'imagerie et la spectroscopie) m'ont permis d'analyser en profondeur l'émission de ces régions chaudes et irradiées. L'utilisation de la spectro-imagerie

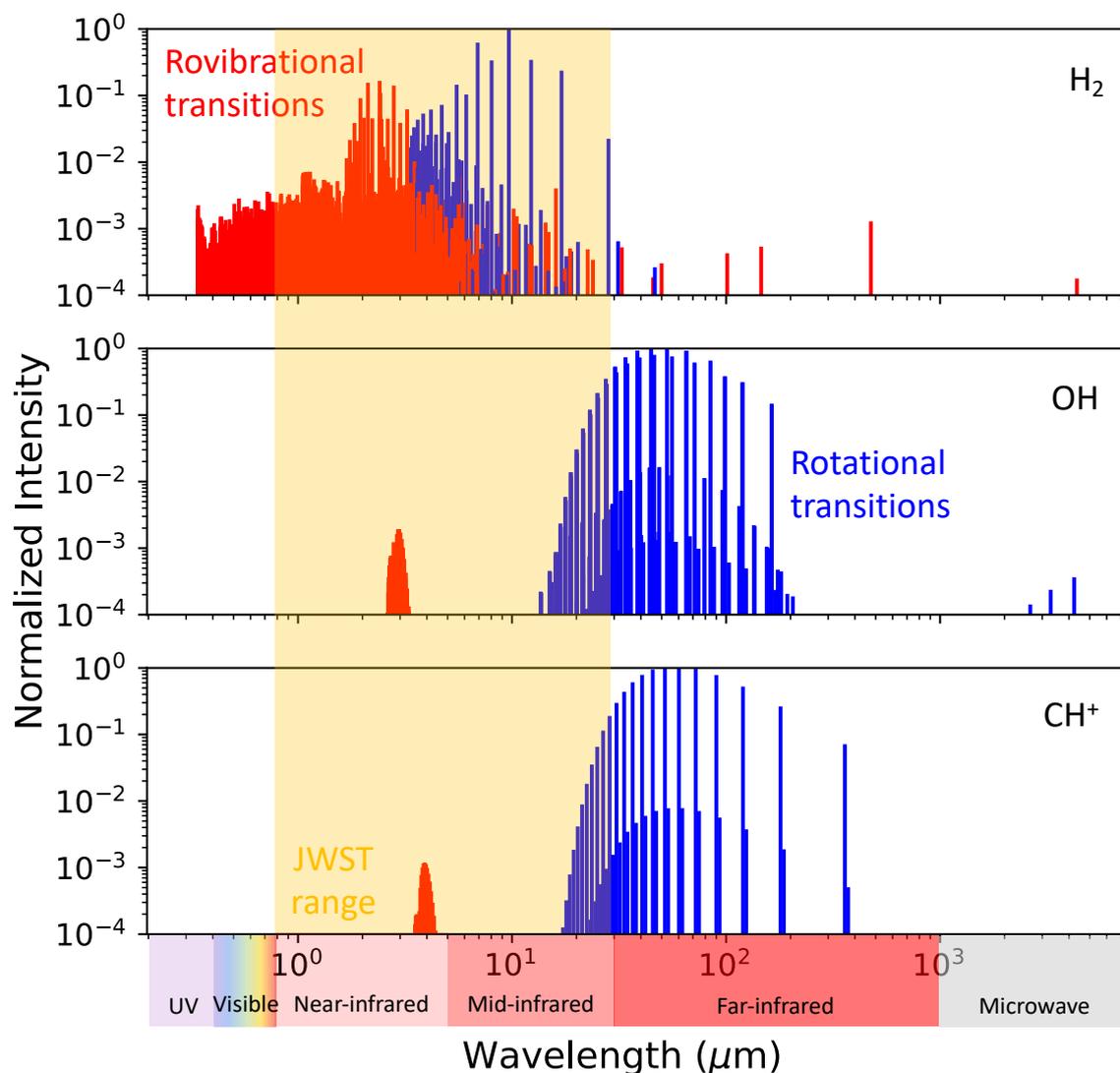


FIGURE 2.25 – Exemple de spectre normalisé de H_2 , CH^+ et OH . (Haut) Spectre de H_2 calculé à partir d'un modèle PDR à $P_{\text{gas}}/k_B = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0 = 10^4$. (Milieu) Spectre ETL de OH à $T = 800 \text{ K}$. (Bas) Spectre ETL de CH^+ à $T = 800 \text{ K}$. Les raies bleues sont les transitions purement rotationnelles et les raies rouges sont les transitions rovibrationnelles.

permet également d'analyser cette émission dans différents environnements de conditions physiques et chimiques différents (disque protoplanétaire, région ionisée, région atomique, front de dissociation). Je présente alors dans le Chapitre 3 les différents instruments du JWST utilisés dans le programme PDRs4All ainsi que les principaux résultats de ce programme sur la contrainte de paramètres physiques et chimiques de la Barre d'Orion et des disques protoplanétaires présents dans la ligne de visée des observations.

Analyser les spectres du JWST a soulevé l'importance de la collaboration avec des physiciens et des chimistes moléculaires. En effet, les calculs de dynamique quantique produits par ces scientifiques se sont révélés essentiels pour identifier les processus d'excitation à la formation observés dans les spectres. Ainsi, l'utilisation couplée des données du JWST et

de ces calculs de dynamique quantique m'a permis de révéler la chimie chaude en action présente dans ces régions grâce à l'émission d'espèces fortement excitées dans cet environnement. Je présente dans le Chapitre 5, la détection de la chimie de l'eau (et de l'oxygène) en action dans un disque protoplanétaire irradié déclenchée par le fort rayonnement ultraviolet incident. Dans le Chapitre 6, je m'intéresse alors à la chimie du carbone, elle aussi déclenchée par l'intense champ ultraviolet. L'utilisation de la spectro-imagerie permet d'ailleurs de révéler cette chimie active dans différents environnements (disque et PDR) et d'étudier ces variations. En détectant cette chimie en action, mes travaux permettent de tester la photochimie prédite par des modèles mais jusqu'alors jamais observée.

Au-delà de contraindre la chimie, mes travaux révèlent que les processus d'excitation à la formation peuvent être utilisés pour diagnostiquer le milieu (densité du gaz, intensité du champ de rayonnement, taux de formation de molécules...). Ces diagnostics permettent de comprendre les processus régissant la formation stellaire et planétaire. Par exemple, déterminer la densité et le champ de rayonnement UV sur une PDR permet de contraindre la rétroaction stellaire sur le milieu. Déterminer la densité dans les vents photoéaporés de disques irradiés permet de déterminer le taux de perte de masse et donc l'impact du champ ultraviolet sur la formation planétaire.

Cette thèse met en avant la complémentarité des modèles auto-cohérents qui modélisent dans son entièreté la structure de la PDR (comme le code PDR de Meudon que j'utilise pour modéliser le gaz dans le Chapitre 4) et des modèles analytiques. En effet, les modèles auto-cohérents permettent de modéliser la PDR en prenant en compte les variations rapides de conditions physiques (température, densité...). Cependant, je montre, dans les Chapitres 5 et 6, comment l'analyse de l'intensité des raies sans modèles auto-cohérents peut suffire pour contraindre de façon rapide et robuste certains paramètres physiques et chimiques du gaz à une position donnée. Évidemment, lorsque les variations physiques ne sont pas résolues dans les données d'observation, ces diagnostics devront s'associer à des modèles auto-cohérents pour contraindre précisément les conditions du milieu. A nouveau, il est important de noter que ces diagnostics ont pu être réalisés grâce à la connaissance avancée des paramètres moléculaires régissant l'émission des molécules. Ainsi, à l'ère du JWST, la collaboration avec des physiciens et chimistes moléculaires est essentielle pour analyser les spectres observés.

Plus encore, cette thèse a pour objectif de démontrer l'universalité de ces diagnostics. En effet, la Barre d'Orion peut être utilisée comme un laboratoire interstellaire, mais les processus observés dans cette région pourraient être observés dans une multitude d'autres objets astrophysiques comme les protoétoiles, les *outflows*, les disques, les galaxies, les nébuleuses planétaires... Il est attendu que de nombreuses signatures provenant de ces molécules très excitées lors de la formation soit alors largement détectées dans les données du JWST grâce à sa grande sensibilité. Mes travaux peuvent être servis comme des clés d'analyse des données du JWST pour des observateurs de différents domaines.

***Le James Webb Space Telescope* pour les
régions irradiées**

Chapitre 3

Un laboratoire interstellaire à travers les yeux du *James Webb Space Telescope*

3.1	Le <i>James Webb Space Telescope</i>, télescope révolutionnaire dans l'infrarouge	92
3.1.1	Histoire et objectifs	92
3.1.2	Composition de l'observatoire	95
3.1.3	Imagerie	98
3.1.4	Spectro-imagerie	101
3.2	La Barre d'Orion : véritable laboratoire interstellaire	107
3.2.1	Le programme d'observation PDRs4All	107
3.2.2	Une région de photodissociation typique : La Barre d'Orion	108
3.2.3	La Barre d'Orion à travers le JWST	112
3.2.4	Observation de la région de photodissociation	114
3.2.5	Observation des disques protoplanétaires irradiés dans la région	130

3.1 Le *James Webb Space Telescope*, télescope révolutionnaire dans l'infrarouge

Dans le Chapitre 2, nous avons montré comment la rétroaction radiative par les étoiles massives impacte la surface des nuages moléculaires et des disques protoplanétaires pour former des interfaces irradiées, comme les régions de photodissociation. Nous avons décrit la structure ainsi que les principaux mécanismes chimiques et microphysiques observés dans ces régions. Dans la suite de cette Section, nous détaillerons en quoi le *James Webb Space Telescope* est un télescope révolutionnaire pour l'étude de ces régions irradiées. Nous présenterons alors les différents instruments à bord de ce télescope et comment ceux-ci peuvent être utilisés pour analyser l'émission des PDRs.

3.1.1 Histoire et objectifs

Les premiers résultats du *Hubble Space Telescope* (HST) ont appelé à de nouvelles données pour voir plus loin, plus ancien, plus profond que le spectacle que nous offrait le HST. Cependant, l'insatiabilité des astrophysiciens en termes d'observations font que les premières discussions autour d'un successeur du HST datent d'avant même que ce dernier ne soit lancé en 1990. En 1989, se lancent alors les premiers ateliers pour préparer l'après HST. À la suite de cet atelier, l'idée est de concevoir un télescope constitué d'un diamètre de 8 mètres fonctionnant dans l'infrarouge proche. Celui-ci est imaginé en orbite haute ou sur la Lune pour s'affranchir du rayonnement thermique de la Terre. Le premier objectif du télescope était alors d'observer les galaxies à grandes distances. Il fut tout d'abord surnommé *New Generation Space Telescope* (NGST). Les réflexions sur ce projet sont momentanément arrêtées pour la gestion de la mission *Hubble*, notamment à cause de ses problèmes de focalisation. En 1995, la NASA encourage à nouveau la communauté à penser "*Plus vite, Meilleur et Moins Cher*" pour développer des projets de télescopes de 8 mètres à un coût inférieur à celui des télescopes précédents. C'est donc dès l'année suivante que la NASA décide de financer un projet de télescope avec un miroir qui pourrait se déployer dans l'espace pour une somme de 500 millions de dollars. En 1997, l'Agence Spatiale Européenne (ESA) et l'Agence Spatiale Canadienne (CSA) rejoignent le projet et les grands objectifs du télescope sont définis dans les trois années qui suivent. En 2001, pour des raisons budgétaires, le diamètre du miroir du NGST est réduit à 6 mètres. L'année suivante, la réalisation des instruments est distribuée entre les différentes équipes et le télescope est renommé *James Webb Space Telescope* (JWST).

Le projet est rattaché au programme *Origins* qui regroupe les missions astronomiques aériennes et spatiales de la NASA dont l'objectif est d'étudier les origines de l'Univers. Il sert donc à répondre aux grandes questions au cœur de l'astronomie moderne. Le JWST examine alors toutes les phases de l'histoire de l'Univers : de l'Univers primitif en étudiant les premières étoiles et galaxies qui sont apparues après le Big Bang à l'étude des systèmes planétaires du système solaire ou extérieurs à celui-ci (exoplanètes) en passant par l'évolution des galaxies de leur formation à nos jours et la formation des étoiles depuis les premières étapes jusqu'à la formation des systèmes planétaires. Pour cela, le JWST utilise une gamme

de longueur d'onde plus longue que le HST : l'infrarouge. Tout d'abord, cela permet un nouveau prisme d'étude de l'évolution de l'Univers. L'observation dans l'infrarouge permet alors d'observer des galaxies plus lointaines et donc plus anciennes que ce qui était possible avec le HST. En effet, la lumière émise par les galaxies primordiales lorsqu'elle atteint la Terre est décalée vers le rouge, par effet Doppler du fait de l'expansion de l'Univers. Ensuite, cela permet de sonder les régions enfouies dans les nuages de poussières puisque la lumière dans le visible émise par celles-ci est absorbée par les poussières. Le JWST a permis alors une vue inédite des structures déjà observées par le HST, comme les galaxies présentées dans la Figure 3.1.

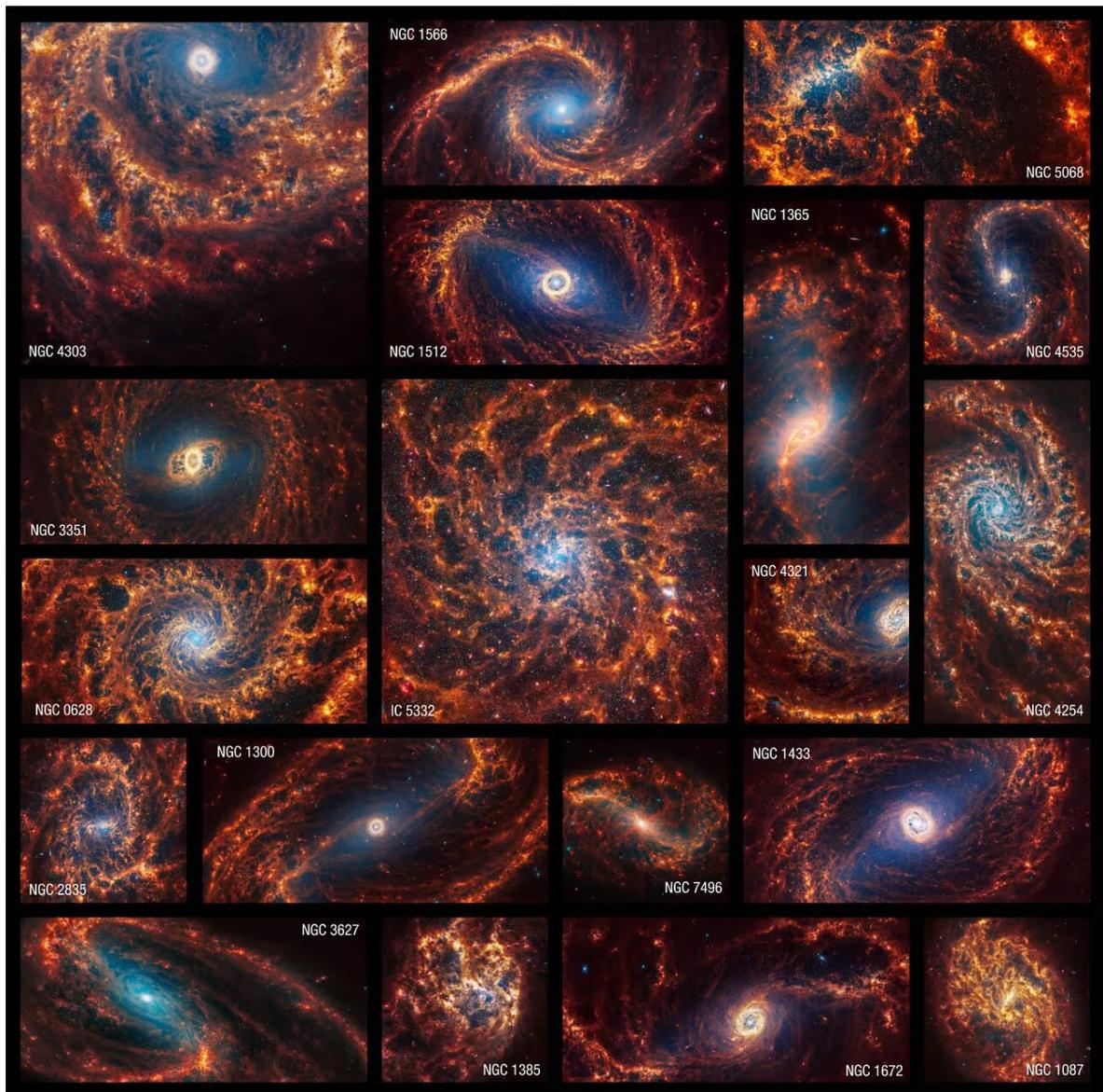


FIGURE 3.1 – Images de 19 galaxies spirales observées par le JWST. Crédits : NASA, ESA, CSA, STScI, Janice Lee (STScI), Thomas Williams (Oxford), Phangs Team, Elizabeth Wheatley (STScI).

Le télescope spatial *James Webb*, un des plus grands télescopes jamais envoyés dans

l'espace, a été lancé depuis la base spatiale européenne de Kourou en Guyane le 25 décembre 2021 sur une fusée Ariane 5 ECA (Figure 3.2).



FIGURE 3.2 – Lancement du télescope spatial *James Webb* par une fusée Ariane 5 ECA depuis la base spatiale européenne de Kourou en Guyane. Crédit : Andrew Hara/La Guyane vers les étoiles.

Après son lancement, le JWST voyage quatre semaines pour atteindre sa destination finale : le deuxième point de Lagrange Soleil-Terre. Ce point, stratégiquement choisi pour que le JWST suive la Terre dans son orbite autour du soleil, est situé à 1,5 million de kilomètres de la Terre. Lors de ce voyage, le télescope, jusqu'alors plié pour pouvoir entrer dans la coiffe d'Ariane 5, s'est déployé. Des centaines de mécanismes ont été mis en action pour ouvrir le miroir et déployer le bouclier solaire. Une fois le télescope déployé et installé au deuxième point de Lagrange Soleil-Terre, vient alors une période de *commissioning*, c'est-à-dire de mise en service, qui dura environ six mois. Pendant celle-ci, les instruments sont calibrés et sont effectuées les premières évaluations des performances, qui excèdent d'ailleurs les exigences initiales (Rigby et al. 2023). En effet, les optiques sont mieux alignées, les performances optiques plus stables, le pointage est plus précis, la sensibilité est meilleure pour la plupart des instruments (de 10 % environ)... Les opérations de programme d'observations scientifiques commencent en juillet 2022 suite aux premières images publiées par la NASA le 12 juillet.

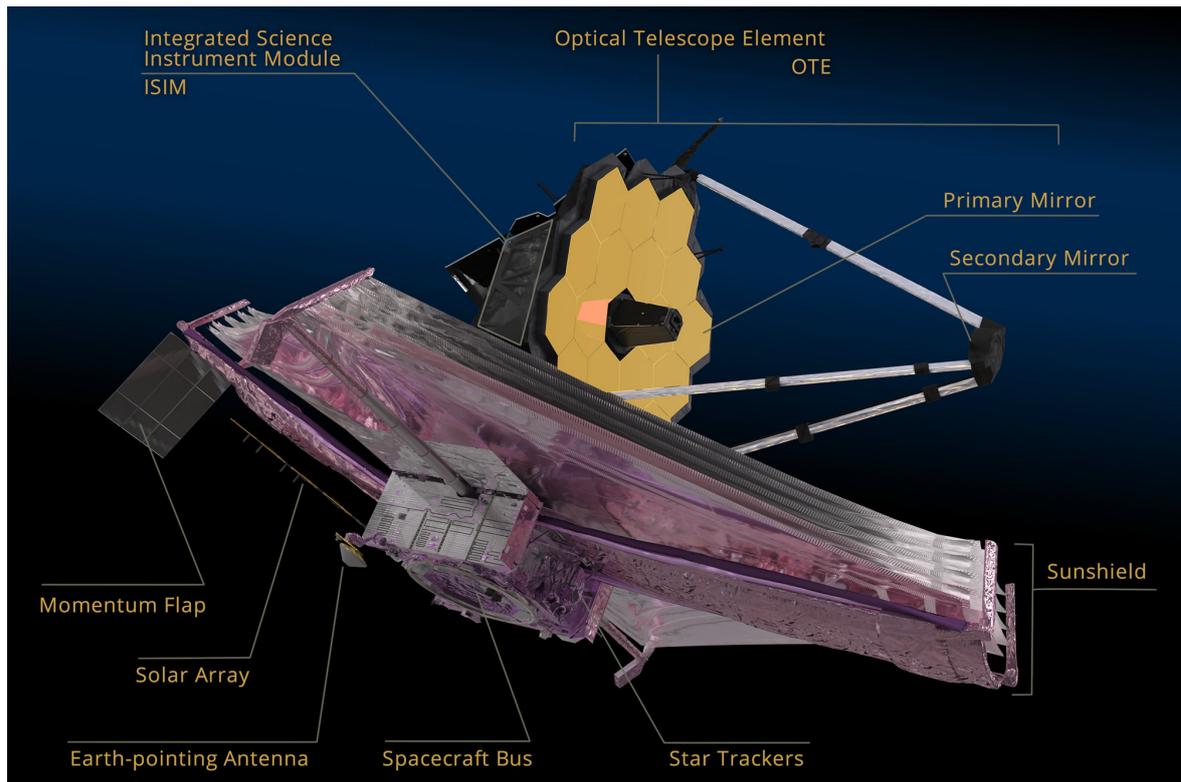


FIGURE 3.3 – Les différents éléments du *James Webb Space Telescope*. Crédits : NASA

3.1.2 Composition de l'observatoire

Système optique (*Optical Telescope Element (OTE)*)

Le JWST est un télescope de type Cassegrain. Son miroir primaire est composé de 18 segments hexagonaux de 1,4 m de diamètre. Ces segments alignés permettent de constituer un grand miroir de 6,5 m de diamètre. Chaque segment est doté d'actionneurs à l'arrière permettant de contrôler l'orientation avec une précision inférieure à 10 nm. Un dernier actionneur permet de contrôler le rayon de courbure du segment. Le miroir secondaire est un miroir circulaire convexe de 0,74 mètre de diamètre. Son orientation est également contrôlée par six actionneurs.

Bouclier thermique

Le JWST observe dans l'infrarouge proche et moyen. Ainsi, pour que ses observations ne soient pas perturbées par un rayonnement thermique, le télescope et les instruments sont refroidis. Pour se protéger du rayonnement du soleil, le JWST est doté d'un bouclier thermique d'environ la taille d'un terrain de tennis (22 m de long et 12 m de large). Ce bouclier est composé de cinq couches d'un film polyimide recouvert d'aluminium appelé kapton. Ce bouclier permet d'intercepter le rayonnement du soleil et de la Terre. Les instruments peuvent alors se refroidir passivement jusqu'à des températures cryogéniques ($T \sim 40$ K), sans avoir recours à des cryogènes consommables.

Les instruments à bords (*Integrated Science Instrument Module (ISIM)*)

Le module scientifique est composé de quatre instruments observant dans l'infrarouge : NIRC*am*, MIRI, NIR*Spec* et NIR*ISS*. La Figure 3.4 présente les différents modes d'observation de ces instruments et la Figure 3.5 présente les différents champs de vue de ces instruments. Trois instruments observent dans l'infrarouge proche (de 0,5 à 5 μm) et un, MIRI, dans l'infrarouge moyen (de 5 à 28 μm). Tous les instruments produisent de la spectroscopie et trois d'entre eux, NIRC*am*, MIRI et NIR*ISS*, produisent également de l'imagerie.

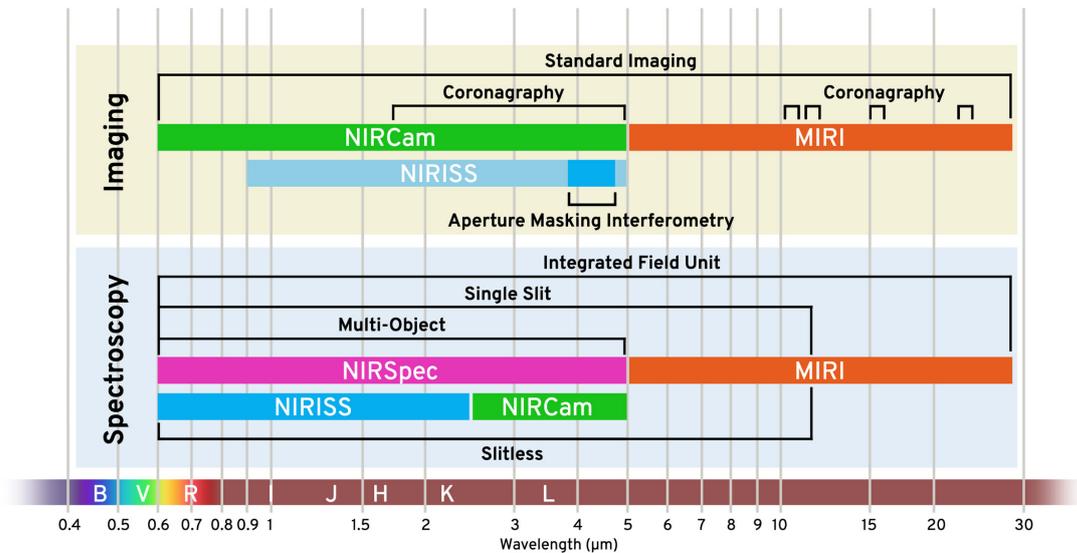


FIGURE 3.4 – Modes d'observation du *James Webb Space Telescope* en imagerie et en spectroscopie.

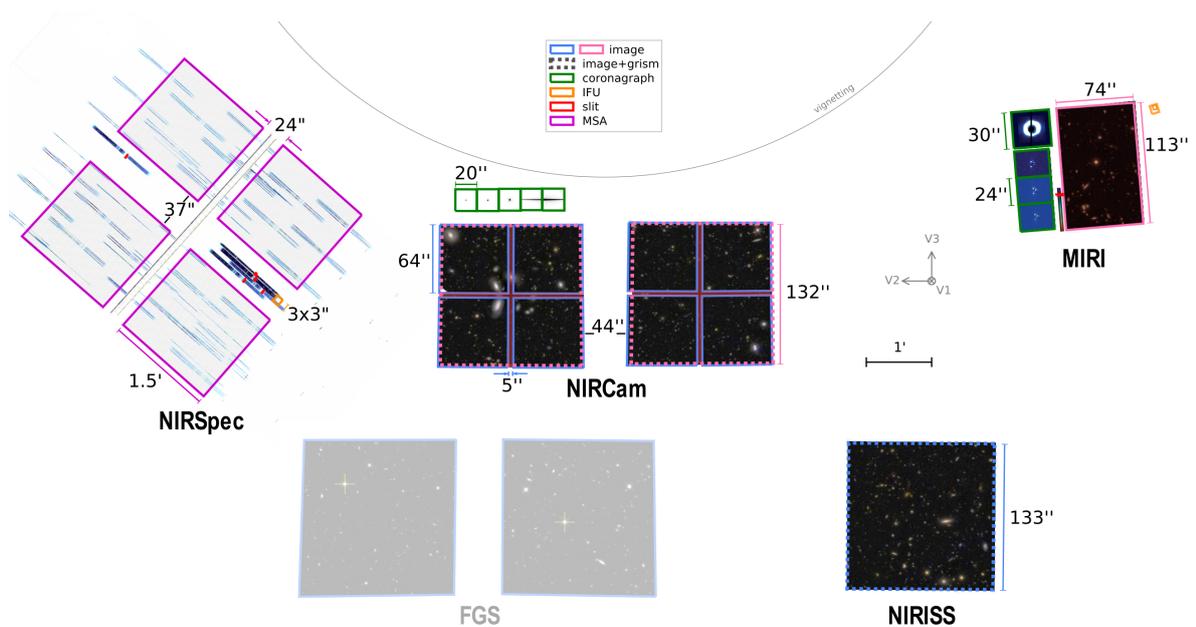


FIGURE 3.5 – Illustration des observations dans le champ de vision du JWST.

La caméra NIRCam (*Near Infrared Camera*, voir Section 3.1.3.1) est l'imageur principal dans l'infrarouge. NIRCam possède cinq modes d'observation. Le premier mode est de l'imagerie avec deux champs de $2,2' \times 2,2'$ fonctionnant en parallèle séparés par un espace de $44''$. Ce mode est composé de 29 filtres couvrant la gamme de longueur d'onde de $0,5$ à $5 \mu\text{m}$ avec deux canaux de longueur d'onde observant simultanément ($0,6\text{--}2,3 \mu\text{m}$ et $2,4\text{--}5,0 \mu\text{m}$). Le deuxième mode est de l'imagerie en coronagraphie avec cinq différents masques pour les différentes longueurs d'onde. Le troisième mode est de la spectroscopie grand champ sans fente de $2,4$ à $5 \mu\text{m}$. Le quatrième mode est de l'imagerie en série temporelle. Enfin, le cinquième mode est de la spectroscopie rapide en série temporelle avec des grismes. NIRCam présente une très grande résolution spatiale (jusqu'à $0,1''$) et une excellente sensibilité permettant de produire des images avec une précision exceptionnelle.

L'instrument NIRISS (*Near-Infrared Imager and Slitless Spectrograph*) possède quatre modes d'observation sur une gamme de longueur d'onde de $0,6$ à $5 \mu\text{m}$ et dans un champ de vue de $2,2' \times 2,2'$. Le premier mode est la spectroscopie sans fente à grand champ. Le deuxième mode est la spectroscopie sans fente à objet unique. Le troisième mode est l'interférométrie à masquage de pupille à travers des filtres spécifiques grâce à un masque avec sept sous-ouvertures. Le dernier mode est de l'imagerie dans douze filtres entre $0,9$ et $5,0 \mu\text{m}$.

L'instrument NIRSpec (*Near-Infrared Spectrograph*, voir Section 3.1.4.1) observe dans un champ de vue de $3,4' \times 3,6'$ sur une gamme de longueur d'onde de $0,5$ à $5,0 \mu\text{m}$. NIRSpec possède quatre modes d'observation : la spectroscopie multi-objets utilisant le MSA, la spectroscopie IFU (*Integral Field Unit*) qui produit de la spectro-imagerie spatialement résolue sur des régions carrées de $3'' \times 3''$, la spectroscopie d'objet unique avec cinq fentes fixes pour de la spectroscopie à haute sensibilité et la spectroscopie en série temporelle d'objets brillants.

L'instrument MIRI (*Mid-InfraRed Instrument*, voir Sections 3.1.3.2 et 3.1.4.2) est le seul instrument qui observe dans l'infrarouge moyen de 5 à $28 \mu\text{m}$. MIRI propose une large variété de modes d'observation. Il produit de l'imagerie dans un champ de vue de $74'' \times 113''$ avec neuf filtres différents, de la coronagraphie avec quatre filtres associés à quatre coronagraphes. Il produit également de la spectroscopie à basse résolution avec ou sans fente de 5 à $14 \mu\text{m}$, et de la spectro-imagerie IFU à moyenne résolution dans un champ de vue dépendant de la longueur d'onde (allant de $3,2'' \times 3,7''$ à $6,7'' \times 7,7''$).

Lors de cette thèse, j'ai particulièrement utilisé l'imagerie produite par NIRCam et MIRI et la spectro-imagerie produite par les modes IFU de NIRSpec et de MIRI-MRS. Ces instruments seront donc décrits en détail dans les deux prochaines sections. Ces modes sont particulièrement complémentaires puisque les imageurs délivrent des données multispectrales à haute résolution spatiale mais elles ont une basse résolution spectrale. Les spectro-imageurs ont une plus basse résolution spatiale mais amènent l'information à haute résolution spectrale manquante des données d'imagerie.

3.1.3 Imagerie

3.1.3.1 NIRCam : Imageur dans l'infrarouge proche

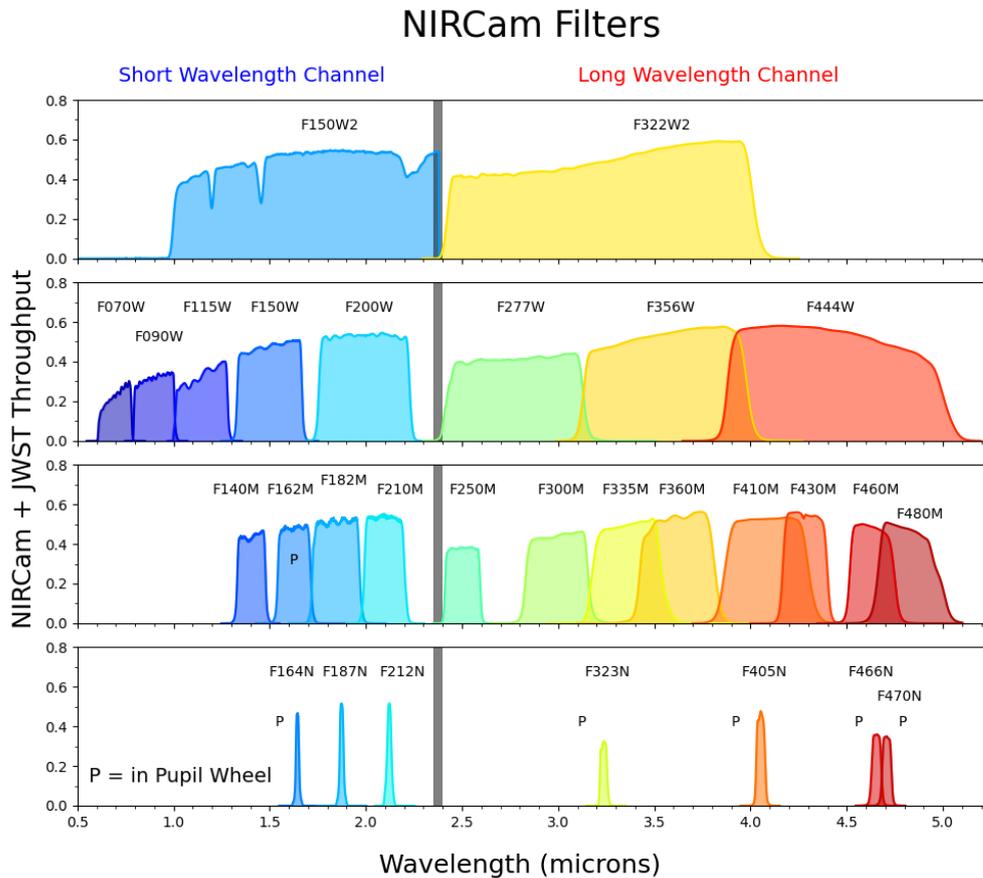


FIGURE 3.6 – Débit total du système pour chaque filtre NIRCam, y compris les contributions de l'élément optique du télescope (OTE) du JWST, du train optique NIRCam, des dichroïques, des filtres et de l'efficacité quantique (QE) du détecteur. Le débit correspond à l'efficacité de la conversion photon-électron. La barre verticale grise marque la coupure dichroïque approximative entre les canaux de courtes et de grandes longueurs d'onde. Les filtres marqués « P » sont situés dans la roue pupillaire, nécessitant une transmission à travers un second filtre dans la roue filtrante, soit F150W2, F322W2, ou F444W. Dans ces cas, les transmissions combinées sont tracées.

NIRCam est l'imageur principal du JWST observant dans l'infrarouge proche de $0,5 \mu\text{m}$ à $5 \mu\text{m}$ dans deux champs de $2,2' \times 2,2'$. Le premier mode de fonctionnement est composé de 29 filtres présentés dans la Figure 3.6. Chacun de ces filtres permet de tracer une composante de la source astronomique. Certains de ces filtres sont essentiels dans l'étude des régions irradiées. Plusieurs filtres fins permettent de tracer l'émission d'une raie. Par exemple, le filtre F164N sélectionne la raie ionisée du Fe II qui trace le front d'ionisation. Le filtre F187N sélectionne la raie Pa α qui trace la région ionisée. Les filtres F212N et F470N sélectionnent deux raies du H₂, la 1-0 S(1) et la 0-0 S(9) qui tracent les fronts de dissociation. Le filtre

F323N sélectionne aussi une raie de H_2 (1-0 O(5)) mais est inutilisable dans l'étude des régions irradiées car contaminée par les bandes aromatiques. Le filtre large F335M sélectionne pour sa part l'émission des PAHs et permet de tracer les régions atomiques des PDRs. Le filtre F480M sert à tracer l'émission du continuum. L'accès à ce grand nombre de filtres est un atout particulier par rapport à la spectro-imagerie parce qu'elle permet de mesurer les variations d'extinction et d'émission de la poussière sur des champs de vue plus larges que les IFU (le champ de vue de NIRCcam est presque 2 000 fois plus grand que le champ de vue de NIRSpec). Cela a été fait, par exemple, dans la Tête-de-Cheval par Abergel et al. (2024).

NIRCcam est particulièrement utile pour imager des objets avec une très grande précision angulaire. En effet, sa résolution spatiale atteint des valeurs inférieures à $0,1''$. La résolution spatiale diminue évidemment avec la longueur d'onde et cette dépendance est montrée dans la Figure 3.7. On remarque alors que même aux plus grandes longueurs d'onde, la résolution spatiale reste exceptionnelle. La résolution spatiale de NIRCcam est largement suffisante pour résoudre les sous-structures de la Barre d'Orion, objet qui nous intéresse dans la suite de cette thèse, puisque la plupart de celles-ci font plus de 60 au, ce qui correspond à $0,15''$ à 400 pc, la distance de la Barre d'Orion.

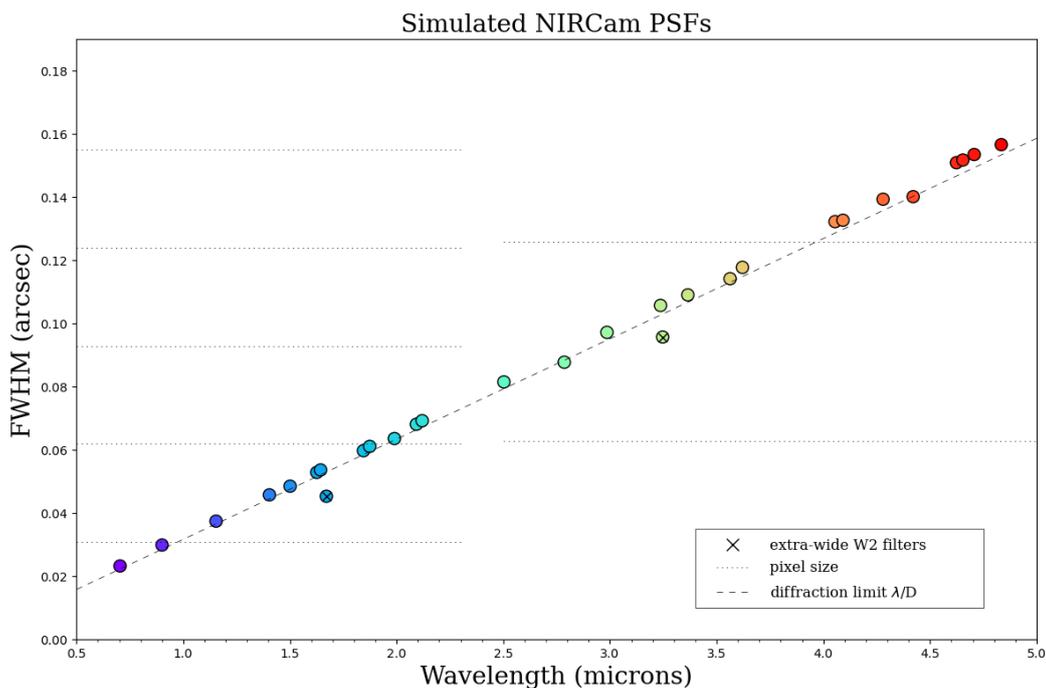


FIGURE 3.7 – Largeur à mi-hauteur (*Full Width at Half Maximum*, FWHM) mesurée pour chacune des fonctions d'étalement de point (*Point Spread Function*, PSFs) simulées par WebbPSF. Chaque point, codé en couleur par longueur d'onde, correspond à l'un des 29 filtres NIRCcam. La PSF est sous-échantillonnée en dessous de $2 \mu\text{m}$ dans le canal à courtes longueurs d'onde et en dessous de $4 \mu\text{m}$ dans le canal longues longueurs d'onde.

3.1.3.2 MIRIm : Imageur dans l'infrarouge moyen

MIRI-Imageur est l'imageur du JWST observant dans l'infrarouge moyen de 5,6 à 25,5 μm . Il observe dans un champ de vue de $74'' \times 113''$ à travers 9 filtres présentés dans la Figure 3.8. Tout comme pour NIRCam, chacun de ces filtres permet de tracer une composante particulière de la source. MIRIm est complémentaire de NIRCam puisque la combinaison des deux permet de faire de la spectrophotométrie sur tout le domaine observable avec le JWST.

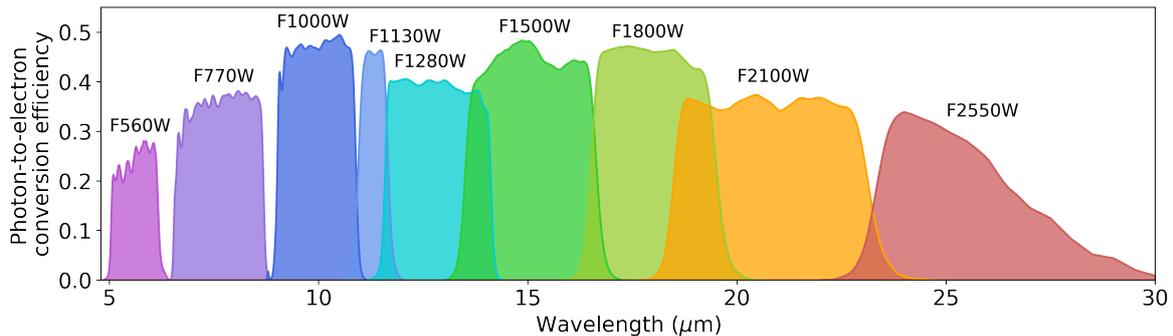


FIGURE 3.8 – Efficacité de la conversion photon-électron de chaque filtre MIRIm.

Dans le cadre de l'observation des régions irradiées, MIRIm est essentiel pour étudier l'émission de la poussière (continuum et AIBs). Par exemple, les filtres F770W et F1130W permettent de tracer l'émission des AIBs (PAH). Les filtres F1500W et F2550W permettent, eux, de tracer l'émission continuum de la poussière.

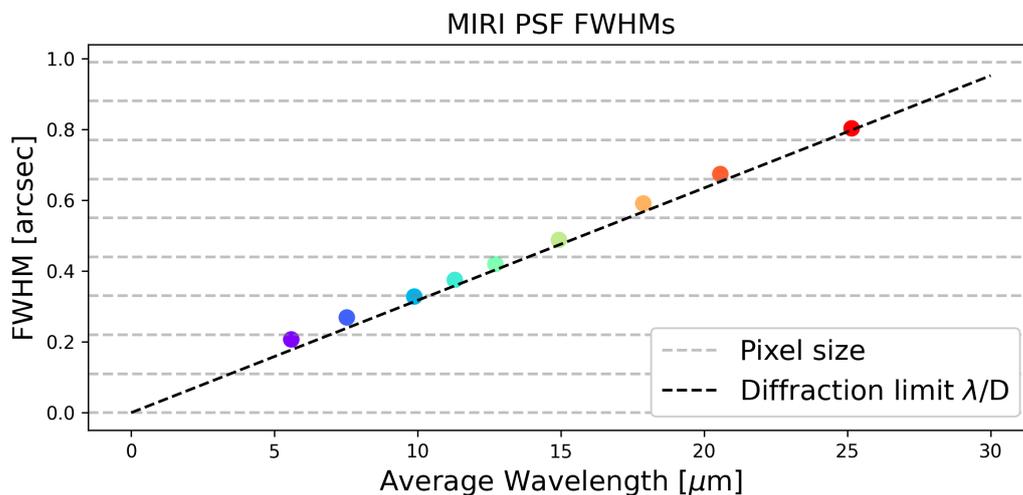


FIGURE 3.9 – Largeur à mi-hauteur (FWHM) dans chaque filtre, tel que mesurée dans les PSFs réalisées avec les données de mise en service (*commissioning*). Chaque point, codé en couleur par longueur d'onde, correspond à l'un des neuf filtres.

Observant dans l'infrarouge, MIRIm a une résolution spatiale légèrement inférieure à celle de NIRCam. Celle-ci diminue de $0,2''$ à $0,8''$ avec l'augmentation de la longueur d'onde.

Cette dépendance est montrée dans la Figure 3.9. La résolution spatiale reste, dans l'ensemble, suffisante pour résoudre les structures de la Barre d'Orion mais devient limitante à grandes longueurs d'onde pour résoudre des objets de plus faibles tailles présents dans le champ de vue des observations comme les disques protoplanétaires (qui ont des diamètres de $\sim 50\text{--}500$ au soit $\sim 0,12''\text{--}1,25''$ à 400 pc).

3.1.4 Spectro-imagerie

3.1.4.1 NIRSpec IFU : Spectro-imageur dans l'infrarouge proche

La spectroscopie à intégral de champ (IFU) de NIRSpec permet l'étude dans l'infrarouge proche de sources astronomiques étendues. Le champ de vue de $3'' \times 3''$ est découpé en trente tranches. Les différents filtres et réseaux permettent d'obtenir des spectres de $0,6$ à $5,3 \mu\text{m}$ à moyenne et haute résolution et le prisme permet d'obtenir un spectre à basse résolution. Les caractéristiques des différents réseaux sont présentées dans la table 3.1.

Nom	Longueurs d'onde (μm)	Résolution ($\Delta\lambda / \lambda$)
G140M/F070LP	0,90–1,27	$\sim 1\,000$
G140M/F100LP	0,97–1,89	
G235M/F170LP	1,66–3,17	
G395M/F290LP	2,87–5,27	
G140H/F070LP	0,90–1,27	$\sim 2\,700$
G140H/F100LP	0,97–1,89	
G235H/F170LP	1,66–3,17	
G395H/F290LP	2,87–5,27	
PRISM/CLEAR	0,6–5,3	~ 100

TABLE 3.1 – Caractéristiques des réseaux de l'instrument NIRSpec.

Il y a un espace physique entre les deux détecteurs de NIRSpec. Cela affecte les observations avec les réseaux à haute résolution car les spectres sont assez longs pour atteindre l'intégralité des deux détecteurs. Les longueurs d'onde qui tombent dans cet espace ne sont pas récupérables. Chaque tranche de l'IFU ont des trous en longueurs d'onde légèrement différents.

La sensibilité de NIRSpec dépend des filtres et des réseaux utilisés. La Figure 3.10 montre l'évolution de cette sensibilité dans tous les modes d'observation de NIRSpec IFU. Plus la résolution du réseau est élevée, plus sa sensibilité est faible. Le choix du mode d'observation dépend alors de la cible et de l'objectif scientifique. Dans l'ensemble, la sensibilité de NIRSpec est très bonne sur toutes les longueurs d'onde.

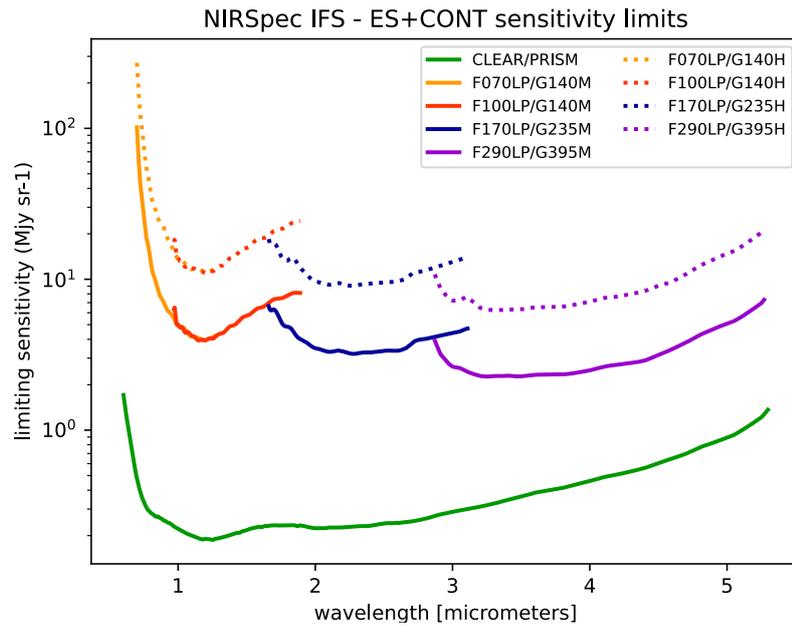


FIGURE 3.10 – Sensibilité à 10σ en considérant une exposition de 10 000 s de NIRSpec pour la détection d’une source étendue uniforme. Figure extraite de Böker et al. (2022).

3.1.4.2 MIRI-MRS IFU : Spectro-imageur dans l’infrarouge moyen

MIRI-MRS est un spectrographe à moyenne résolution qui observe dans l’infrarouge moyen. Il est composé de quatre canaux qui couvrent les longueurs d’onde de $4,9\ \mu\text{m}$ à $27,9\ \mu\text{m}$. La Figure 3.11 montre que les champs de vue des quatre canaux sont différents.

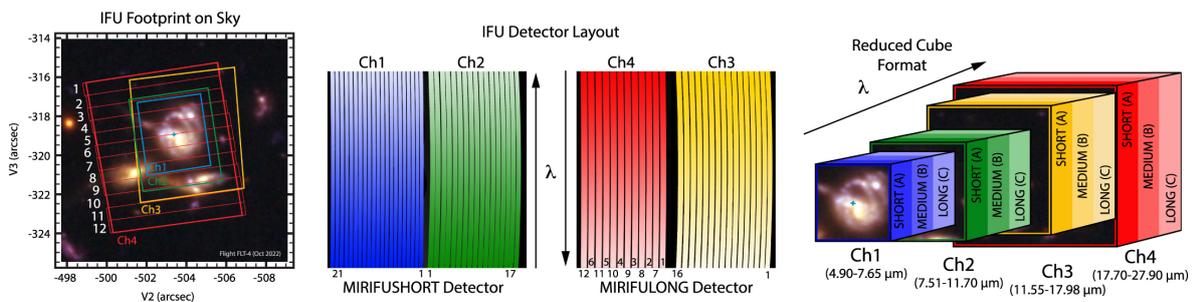


FIGURE 3.11 – Vue d’ensemble du spectrographe à moyenne résolution de MIRI. (Gauche) L’empreinte effective de chacun des quatre canaux du MRS projetée sur le ciel selon les coordonnées du télescope (V2, V3). Les canaux 1, 2, 3 et 4 sont présentés respectivement en bleu, en vert, en jaune et en rouge. La position des tranches est présentée pour le canal 4. (Milieu) Les spectres du MRS sur les quatre canaux sont dispersés simultanément sur les deux détecteurs pour une seule exposition. Les rayures représentent les spectres "longue-fente" sur une tranche. (Droite) Le *pipeline* du JWST corrige les données du MRS pour les mettre en forme dans un cube 3D à échantillonnage régulier. Il combine les informations des quatre canaux et des trois bandes (SHORT, MEDIUM et LONG). Figure extraite de Law et al. (2023).

Le canal 1, couvrant les longueurs d'onde les plus courtes, a le plus petit champ de vue $3,2'' \times 3,7''$ et le canal 4, couvrant les longueurs d'onde les plus grandes, a le plus grand champ de vue $6,6'' \times 7,7''$. Les champs de vue sont découpés en plusieurs tranches spatiales qui produisent chacune un spectre. Le *pipeline* servira à traiter ces données pour combiner toutes les informations du plan détecteur afin de produire un cube final en trois dimensions.

Chaque canal est composé de trois sous-bandes (SHORT, MEDIUM, LONG) qui observent à tour de rôle sur un tiers de la gamme de longueur d'onde du canal. Une exposition permet donc d'observer quatre intervalles de longueurs d'onde discontinus et il faut observer selon les trois sous-bandes pour une couverture totale. Les caractéristiques de chaque canal et sous-bandes sont présentées dans la Table 3.2.

Nom	Sous-bandes	Longueurs d'onde (μm)	Résolution ($\lambda/\Delta\lambda$)	Taille du pixel
Canal 1	SHORT (A)	4,90–5,74	3 320–3 710	0,196''
	MEDIUM (B)	5,66–6,63	3 190–3 750	
	LONG (C)	6,53–7,65	3 100–3 610	
Canal 2	SHORT (A)	7,51–8,77	2 990–3 110	0,196''
	MEDIUM (B)	8,67–10,13	2 750–3 170	
	LONG (C)	10,02–11,70	2 860–3 300	
Canal 3	SHORT (A)	11,55–13,47	2 530–2 880	0,245''
	MEDIUM (B)	13,34–15,57	1 790–2 640	
	LONG (C)	15,41–17,98	1 980–2 790	
Canal 4	SHORT (A)	17,70–20,95	1 460–1 930	0,273''
	MEDIUM (B)	20,69–24,48	1 680–1 770	
	LONG (C)	24,19–27,90	1 630–1 330	

TABLE 3.2 – Caractéristiques des canaux et des sous-bandes de l'instrument MIRI-MRS.

La résolution spectrale diminue avec la longueur d'onde (Labiano et al. 2021) comme montré dans la Figure 3.12.

La résolution spatiale réduit également avec la longueur d'onde, donc la taille du pixel des différents canaux augmentent du canal 1 au canal 4. La résolution spatiale varie de $0,3''$ à $5 \mu\text{m}$ à $1''$ à $25 \mu\text{m}$. Cette variation est présentée dans la Figure 3.13.

La sensibilité à 10σ en considérant une exposition de 10 000 s de MIRI-MRS est présentée en Figure 3.14 à gauche. Elle est particulièrement performante jusqu'à $15 \mu\text{m}$ puis elle décroît progressivement. Cette chute de sensibilité explique l'inexploitation de la deuxième partie du canal 4C qui s'étend de $27,9 \mu\text{m}$ à $28,7 \mu\text{m}$. L'inexploitation de cette gamme de longueurs d'onde pose un réel problème dans l'étude des PDRs puisqu'elle empêche la détection de la raie de H_2 0-0 S(0). Or, cette raie est essentielle pour dériver la température du gaz et la densité de colonne de H_2 dans ces régions. En effet, le niveau $\nu = 0 J = 2$ de H_2 peut être excité à plus basse température que le niveau $\nu = 0 J = 1$ et donc cette raie peut tracer des régions plus profondes et plus froides que les autres raies de H_2 . Ce niveau peut donc être beaucoup plus peuplé que les autres. Ainsi, due à la non-exploitation de cette transition, il est possible que la densité de colonne totale de H_2 soit sous-estimée. De plus, cette raie permettrait de mieux contraindre la variation de température dans la PDR.

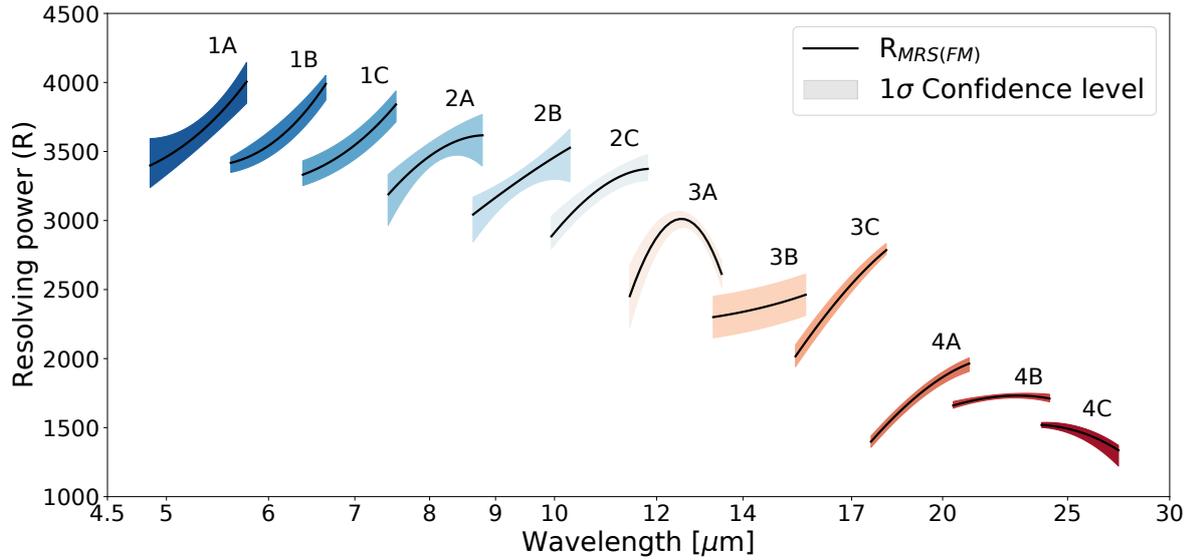


FIGURE 3.12 – Résolution spectrale de l'instrument MIRI-MRS en fonction de la longueur d'onde et des différents canaux et des sous-bandes. Figure extraite de Labiano et al. (2021).

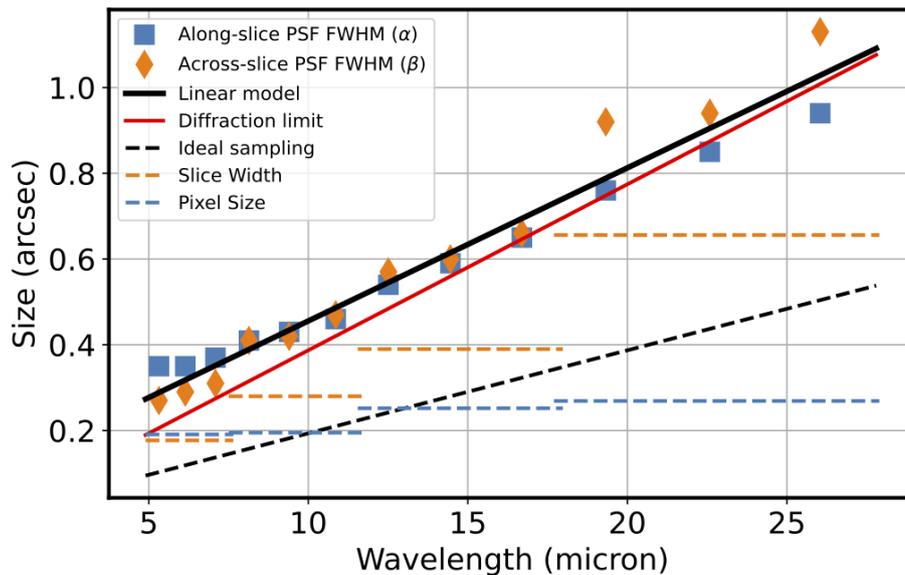


FIGURE 3.13 – Résolution spatiale du MRS et échantillonnage idéal par rapport à l'échantillonnage réel en fonction de la longueur d'onde. FWHM de la PSF du MRS dans les directions *along-slice* (dans le sens de la tranche, carrés bleus) et *across-slice* (perpendiculaire à la tranche, losanges orange) mesurées pendant la mise en service. La ligne noire pleine représente un ajustement linéaire aux données observées. La ligne rouge continue représente la limite de diffraction théorique, tandis que la ligne noire en pointillés représente l'échantillonnage idéal de Nyquist (défini comme la moitié de la limite de diffraction). Les lignes pointillées bleue et orange représentent l'échantillonnage fourni *along-slice* et *across-slide*. Figure extraite de Law et al. (2023).

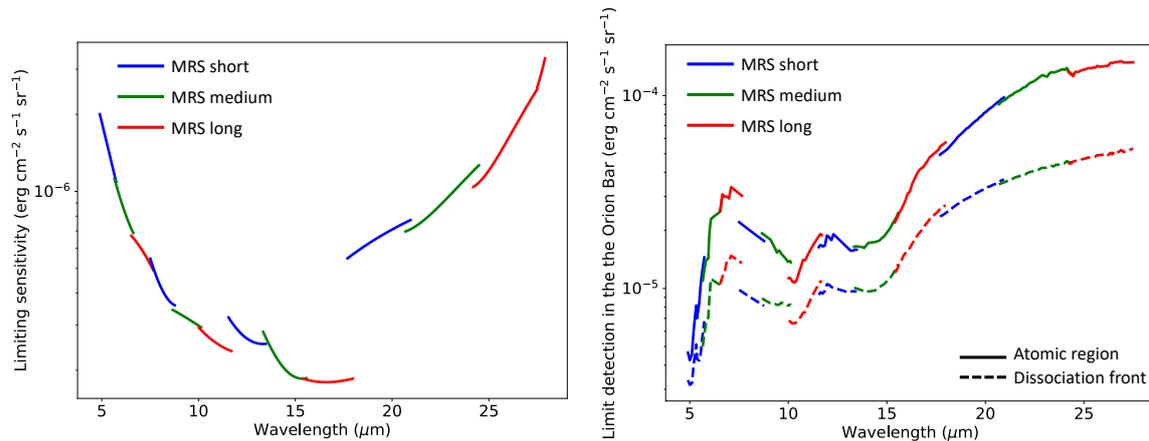


FIGURE 3.14 – Limite de détection théorique versus pratique du MIRI-MRS. (Gauche) Sensibilité à 10σ en considérant une exposition de 10 000 s de MIRI-MRS pour la détection de source étendue (Glasse et al. 2015). (Droite) Limite de détection à 3σ pour une exposition de 521,7 s, due aux résidus de franges de l'ordre de 1 % du continuum dans la Barre d'Orion en considérant la résolution spectrale moyenne de chaque canal. Le trait plein correspond à la région atomique, le trait pointillé au front de dissociation.

MIRI-MRS est fortement affecté par des franges d'interférence (voir Argyriou et al. (2020) pour une description détaillée des franges et des méthodes de correction). Le détecteur des MIRI-MRS est composé de couches de Si :AS IBC comme montré dans la Figure 3.15. Ces couches possèdent des propriétés de réfraction qui dépendent de la longueur d'onde et de la température. La température est maintenue constante très précisément dans les détecteurs de MIRI-MRS, ainsi seule la longueur d'onde entrante a une conséquence sur les propriétés de réfraction. Celles-ci affectent la façon dont la lumière se propage dans les détecteurs. L'interférence cohérente des réflexions entre les interfaces de réfraction donne lieu au phénomène appelé franges. Ainsi, les couches internes du détecteur fonctionnent comme des interféromètres de Fabry-Pérot. La résolution spectrale de MIRI-MRS est suffisamment élevée pour résoudre les motifs de franges. Ces franges affectent alors l'interprétation des spectres observés avec le JWST. En effet, elles peuvent cacher des raies faibles, modifier la forme des raies, compliquer l'estimation du continuum...

Il existe plusieurs méthodes pour corriger les franges des images de détecteurs mais deux sont couramment utilisées. La première méthode consiste à utiliser un champ plat de franges "*fringe flat*". Celui-ci peut-être mesuré au sol ou à l'aide d'une source d'étalonnage embarquée sur le JWST, juste avant ou après une observation scientifique. Pour le MRS, celui-ci a été mesuré au sol pour chaque bande spectrale en utilisant une source de corps noir étendue et spatialement uniforme. Pour corriger les franges, il suffit alors de diviser les données par ce champ plat. La seconde méthode, souvent appliquée après la première, est une méthode empirique. Les franges (résiduelles) sont alors ajustées par une série de sinusoides (Labiano et al. 2016). Puis, les données sont divisées par ces franges ajustées. Ces deux méthodes présentent tout de même des limites. Tout d'abord, chaque source produit des motifs de franges différents sur le détecteur. Ainsi, la correction des franges par le "*fringe flat*" mesuré au sol introduit un bruit systématique. Ensuite, la méthode d'ajustement par des sinusoides traitent

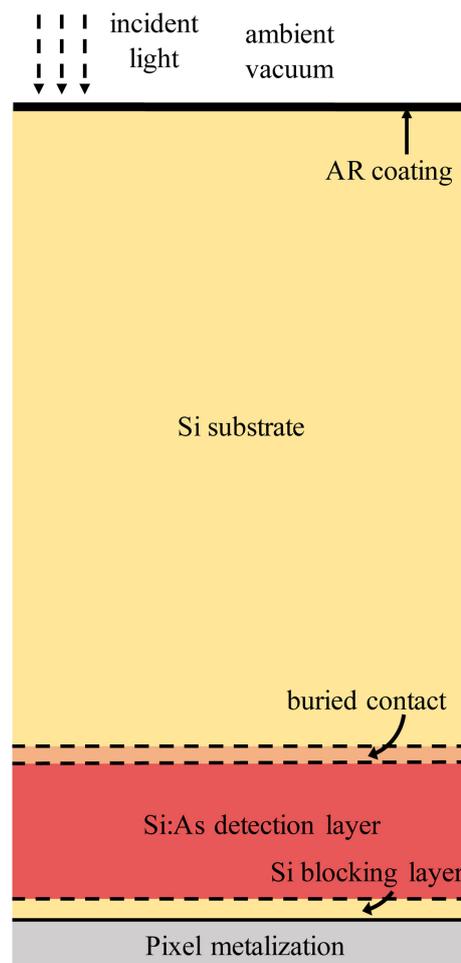


FIGURE 3.15 – Représentation schématique de la structure du détecteur IBC de MIRI-MRS. Les épaisseurs relatives des couches ne sont pas à l'échelle. Figure extraite de Argyriou et al. (2020)

indifféremment les franges des signatures spectrales de la source astrophysique. Ainsi, les caractéristiques spectrales qui présentent des périodicités proches de la période des franges peuvent être interprétées à tort comme une signature de franges et pourrait être modifiées ou supprimées par la correction de frange.

Ainsi, même si les franges sont corrigées par le *pipeline* du JWST, les résidus peuvent atteindre 1 % du continuum. Dans les régions avec un fort continuum, la détection des raies n'est pas limitée par la sensibilité mais par les résidus de frange sur le continuum. La Figure 3.14 montre que pour la Barre d'Orion la limite de détection peut être réduite par jusqu'à un facteur 50 à $15 \mu\text{m}$ à cause du bruit sur le continuum de 1 % par rapport à la sensibilité à 3σ pour un temps d'exposition de 521,7 s (temps d'exposition de MIRI-MRS pour ces observations) qui vaut environ $2,4 \times 10^{-7} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$. Van De Putte et al. (2024) estiment le bruit sur le continuum au front de dissociation autour de $15 \mu\text{m}$ de $\sigma = 4 \times 10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ donc les franges ont bien été réduites à 1 % du continuum.

3.2 La Barre d'Orion : véritable laboratoire interstellaire

3.2.1 Le programme d'observation PDRs4All

Il existe trois différents programmes d'observations avec le JWST :

- *General Observers (GO)* : programmes avec embargo d'un an destinés à toute la communauté scientifique,
- *Guaranteed Time Observers (GTO)* : programmes avec embargo d'un an destinés aux scientifiques qui ont aidé au développement du JWST,
- *Director's Discretionary Time (DDT)* : programmes qui peuvent être demandés pour des observations critiques qui ne peuvent pas être programmées durant les cycles de demandes de temps.

Lors du cycle 1, un autre type de programme existe : l'*Early Release Science*. Ce type de programme a pour but de produire du matériel pour que la communauté scientifique apprenne à utiliser les différents instruments ainsi que faire un état de l'art des capacités du JWST. Ils ont donc été pris lors de la première année d'observations et les données ont été immédiatement publiques. Treize programmes ont été sélectionnés en novembre 2017. Ainsi, le programme "*Radiative Feedback from Massive Stars as Traced by Multiband Imaging and Spectroscopic Mosaics*" renommé PDRs4All a été sélectionné parmi deux cents déclarations d'intention. Ce programme est dirigé par Olivier Berné, Emilie Habart et Els Peeters (*Principal Investigators (PIs)*). Ce programme international regroupe 19 personnes dans la *Core-Team* à laquelle s'ajoutent 26 personnes dans l'*Extended Core-Team*. En tout, le programme compte une centaine de collaborateurs provenant de 18 pays. Cette collaboration comporte des observateurs, des théoriciens et des expérimentateurs afin de pouvoir analyser dans leur entièreté les données du JWST. La répartition est présentée dans la Figure 3.16.

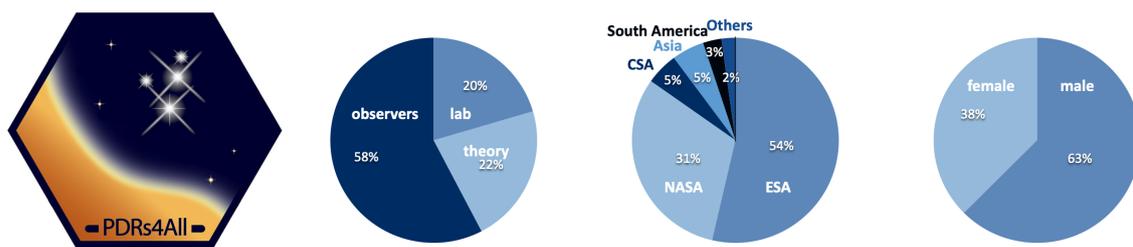


FIGURE 3.16 – Composition de l'équipe internationale PDRs4All.

Ce programme a pour but d'étudier en détail les régions fortement irradiées et plus particulièrement la rétroaction radiative des étoiles massives sur la formation stellaire et planétaire (Berné et al. 2022). Nous avons démontré dans le Chapitre 1, Section 1.2, l'importance de la rétroaction de ces étoiles massives sur l'évolution de la matière interstellaire dans l'Univers. Ce processus de rétroaction est particulièrement observé dans les PDRs. Comme l'émission de ces régions domine l'émission infrarouge des galaxies, les observations galactiques et extragalactiques obtenus par le JWST proviendront, dans la majorité des cas, des PDRs.

Elles constituent alors un excellent outil pour étudier les processus physico-chimiques d'une variété d'objets astrophysiques.

L'objectif principal de ce programme est de donner des outils d'analyse pour les communautés galactiques et extra-galactiques. Les travaux de ce programme évaluent les capacités du JWST et développent des outils aidant à la réduction et le traitement des données. Ces études développent également des outils pour l'interprétation de l'émission d'une PDR. Les premiers travaux caractérisent alors le spectre complet de 0,6 à 28 μm de chaque région (ionisée, atomique, moléculaire) et déterminent les conditions physiques et chimiques de ces environnements. Pour mener à bien ces objectifs, le programme PDRs4All observe une PDR emblématique : la Barre d'Orion. C'est une des régions de formation d'étoiles massives les plus proches de la Terre, située à environ 400 pc, soit environ 1 000 années-lumière. La géométrie de la Barre d'Orion, inclinée par rapport à l'observateur, fait d'elle une cible idéale pour observer avec une grande résolution spatiale les différents environnements présents dans cette région.

3.2.2 Une région de photodissociation typique : La Barre d'Orion

La Barre d'Orion est un prototype de région de photodissociation localisée dans la Nébuleuse d'Orion, une des régions de formation d'étoiles massives les plus proches de la Terre. La distance de la Barre généralement considérée dans la littérature est de 414 ± 7 pc. Cette distance est basée sur l'étude de Menten et al. (2007) utilisant l'interférométrie radio. Des observations plus récentes, comme celle de *Gaia*, indiquent des valeurs légèrement inférieures ou similaires. Des mesures réalisées avec le *Very Large Baseline Array* (VLBA) par Kounkel et al. (2017) donnent une valeur plus faible de 388 ± 5 pc. En utilisant *Gaia* DR2, Kounkel et al. (2018) mesurent une distance de 386 ± 3 pc. Cependant, d'autres études basées sur les parallaxes de *Gaia* DR2 telles que Binder & Povich (2018), Großschedl et al. (2018) et Kuhn et al. (2019) donnent plutôt des distances de 410 pc, 400-410 pc et 403^{+7}_{-6} pc, respectivement. En outre, il convient de noter que ces distances correspondent aux distances des étoiles et non à celle du nuage moléculaire et donc de la Barre. Ainsi, la mesure exacte de la distance à la Barre d'Orion reste incertaine. Nous utiliserons dans la suite de ce manuscrit la valeur déterminée par Menten et al. (2007) puisque la différence entre les valeurs mentionnées plus tôt a peu d'importance dans les résultats de cette thèse.

La Figure 3.17 montre des images composites de la Nébuleuse d'Orion réalisées dans le visible à gauche et avec *Herschel* à droite. Le centre de la Nébuleuse est irradié par l'amas du Trapèze, qui illumine alors le centre de l'image. Cette Figure montre l'importance d'observer cet objet sous plusieurs gammes de longueurs d'onde. En effet, dans le visible, on observe le gaz chaud, majoritairement ionisé, proche de l'amas du Trapèze et les étoiles. Au contraire, le télescope *Herschel*, en observant dans l'infrarouge lointain, trace les filaments de gaz et de poussière froids. On peut alors observer des structures beaucoup plus étendues à des longueurs d'onde plus grandes que 160 μm . A ces longueurs d'onde, l'émission de poussières est dominée par ce que l'on appelle l'*integral-shaped filament* (ISF, Johnstone & Bally 1999). L'ISF est une structure froide et dense qui traverse l'ensemble de la nébuleuse d'Orion et s'est fragmentée en noyaux moléculaires, OMC1, 2, 3 et 4, qui sont des sites de formation active d'étoiles. Dans le visible, l'ISF est un élément sombre et opaque, cachant le réservoir

de matière à partir duquel les étoiles se forment (voir Figure 3.17 à gauche).

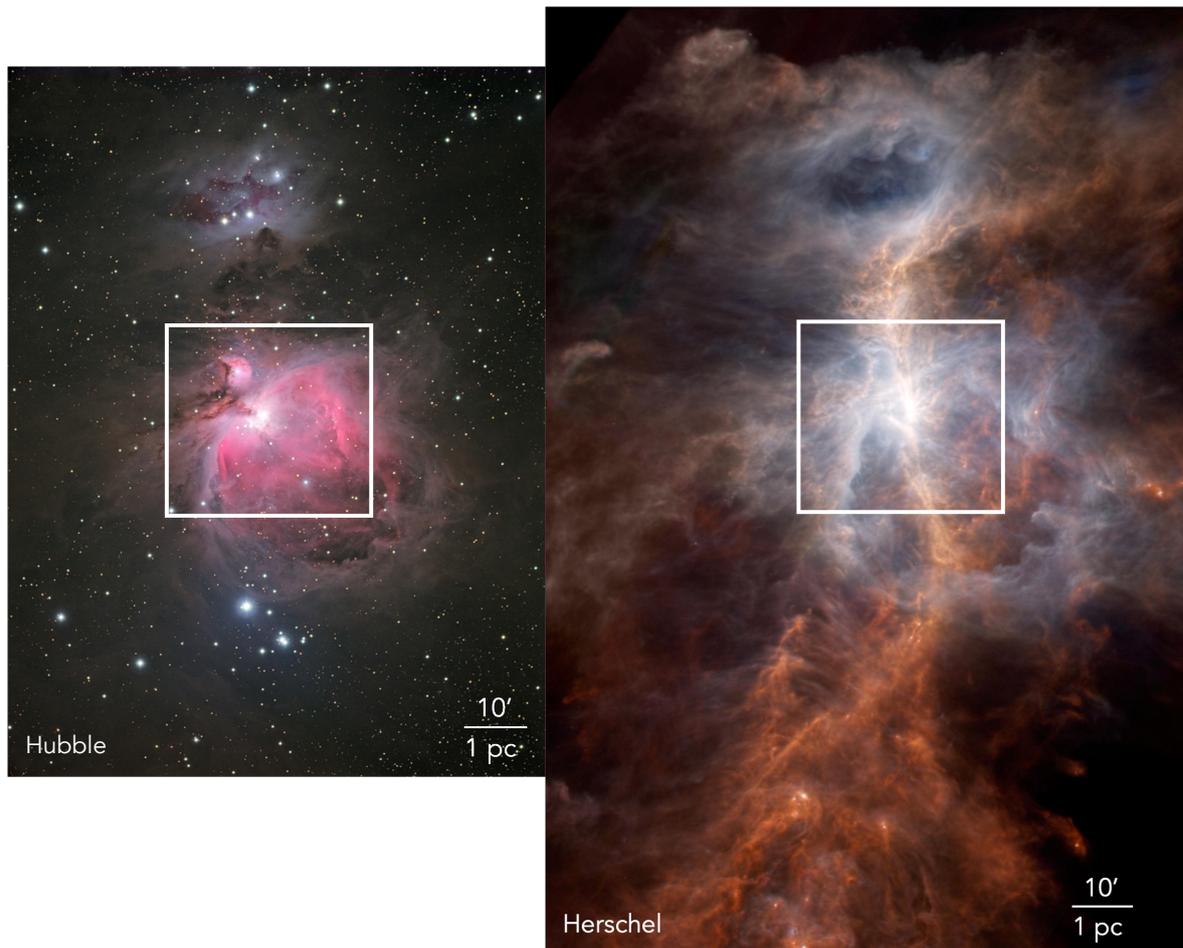


FIGURE 3.17 – Images composites dans le visible avec des filtres L-RGB (droite) et avec *Herschel* (gauche) de la Nébuleuse d'Orion. Le carré blanc correspond au champ de vue de la Figure 3.18. L'image dans le visible met en évidence le gaz chaud, majoritairement ionisé alors que l'image par *Herschel* dans l'infrarouge lointain trace le gaz froid, majoritairement moléculaire. Crédit pour l'image dans le visible : Christoph Kaltseis(lightstorm.at) & the ESA/ESO/NASA Photoshop FITS Liberator. Crédit pour l'image *Herschel* : ESA/NASA/JPL-Caltech. Les filtres RGB sont centrés autour des longueurs d'onde 455 nm, 535 nm et 642 nm. Les longueurs d'onde utilisées pour l'image *Herschel* sont 70 μm (bleu), 160 μm (vert) and 250 μm (rouge).

La Barre d'Orion se trouve au centre de cette nébuleuse. Elle trouve son nom dû à sa forme ; une structure linéaire fortement illuminée par l'amas du Trapèze. La Figure 3.18 présente des images composites de *Hubble* et *Spitzer* plus zoomées sur cet objet. Le rayonnement UV provenant de l'amas du Trapèze est dominé par l'étoile θ^1 Ori C de type O7, située à environ 0,3 pc de la Barre d'Orion (Salgado et al. 2016). Cette étoile est la plus massive de l'amas (environ $33 M_{\odot}$ et avec un rayon d'environ $10 R_{\odot}$) et possède une température effective de $T_{\text{eff}} \sim 40\,000$ K. Ainsi, proche du cluster du Trapèze, le gaz est complètement ionisé, créant la région H II d'Huygens. Le rayonnement ultraviolet lointain incident au front

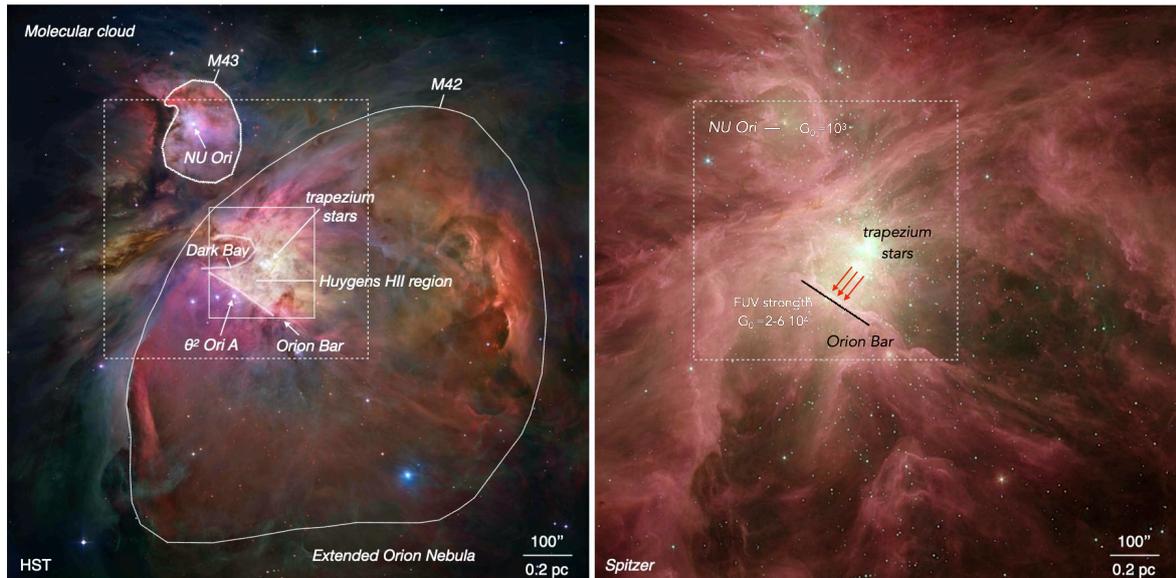


FIGURE 3.18 – Image composite par *Hubble* (gauche) et *Spitzer* (droite) de M42 et M43 dans le complexe de la nébuleuse d’Orion. Les lignes blanches continues délimitent M42 et M43, la Barre, la région H II d’Huygens, et la *Dark Bay*. Les flèches indiquent les positions des étoiles les plus massives dans chaque région : les étoiles du Trapèze dans M42 et NU Ori dans M43. La position de l’étoile θ^2 Ori A près du centre de la Barre est également indiquée. Le grand rectangle en pointillé montre les limites du panneau supérieur de la Figure 3.20. Crédit pour *Hubble* : NASA/ESA/M. Robberto (Space Telescope Science Institute/ESA)/Hubble Space Telescope Orion Treasury Project Team. Crédits pour *Spitzer* : NASA/JPL-Caltech/Université de Toledo. Les longueurs d’onde des images composites en couleur correspondent à 435, 555, 658, 775 et 850 nm pour *Hubble* et 3,6, 4,5, 5,8 et 8 μm pour *Spitzer*. Image extraite de Habart et al. (2024).

d’ionisation est estimé par Marconi et al. (1998) autour de $G_0 = 1 - 4 \times 10^4$ fois le rayonnement du champ interstellaire dans les unités d’Habing (Habing 1968). Ce fort champ UV façonne les bords du nuage du *Orion Molecular Core 1* (OMC-1) en ionisant et chauffant le gaz. En s’enfonçant dans le nuage, le champ ultraviolet est éteint par les poussières et le gaz. Après le front d’ionisation, seuls les photons ultraviolet lointain avec une énergie inférieure à 13,6 eV pénètrent le nuage. À environ 15" du front d’ionisation et à une extinction visuelle de $A_V \sim 1 - 2$, le rayonnement ultraviolet est assez atténué et la plupart de l’hydrogène devient moléculaire.

Les observations par les différents télescopes de la Barre d’Orion ont permis de révéler la complexité physique et chimique de cette région. En effet, *Hubble* a pu révéler la structure de la Barre d’Orion grâce à sa grande résolution spatiale mais il a aussi permis la détection de nombreux disques protoplanétaires irradiés dans cette région (O’Dell et al. 1993; Bally et al. 2000). De plus, il a permis de caractériser la région H II de la Nébuleuse d’Orion avec la détection de nombreuses raies ionisées tel que l’émission de raies de l’hydrogène ionisé, l’oxygène ionisé, du fer ionisé, de l’azote ionisé, etc. (e.g., O’Dell & Harris 2010; Robberto et al. 2013). Au contraire, le télescope *Herschel*, observant dans l’infrarouge lointain, a per-

mis de caractériser l'émission du gaz moléculaire. De nombreuses espèces ont été détectées dans la Barre d'Orion (Habart et al. 2010) : CO (Parikka et al. 2018; Joblin et al. 2018), CH⁺ (Naylor et al. 2010; Nagy et al. 2013; Parikka et al. 2017), OH (Goicoechea et al. 2011; Parikka et al. 2017), H₂O (Choi et al. 2014; Putaud et al. 2019), OH⁺ (van der Tak et al. 2013), HF (Kavak et al. 2019), des raies de structure fine comme C II, O I, Ni II (Bernard-Salas et al. 2012; Ossenkopf et al. 2013; Pabst et al. 2022)... *Herschel* a permis aussi de tracer l'émission des gros grains de la poussière et donc de pouvoir contraindre la température d'équilibre de ceux-ci dans la Barre d'Orion en étudiant leur émission de corps noir (Arab et al. 2012). *Spitzer*, observant dans l'infrarouge moyen, a permis la détection de nombreuses raies ionisées mais également la détection de raies de H₂ (Rubin et al. 2011). Cependant, *Spitzer* a surtout été un tournant dans l'étude des nanograins de poussières émettant en bandes dans cette gamme de longueurs d'onde (Galliano et al. 2008; Boersma et al. 2012; Knight et al. 2021, 2022; Murga et al. 2022; Schirmer et al. 2022).

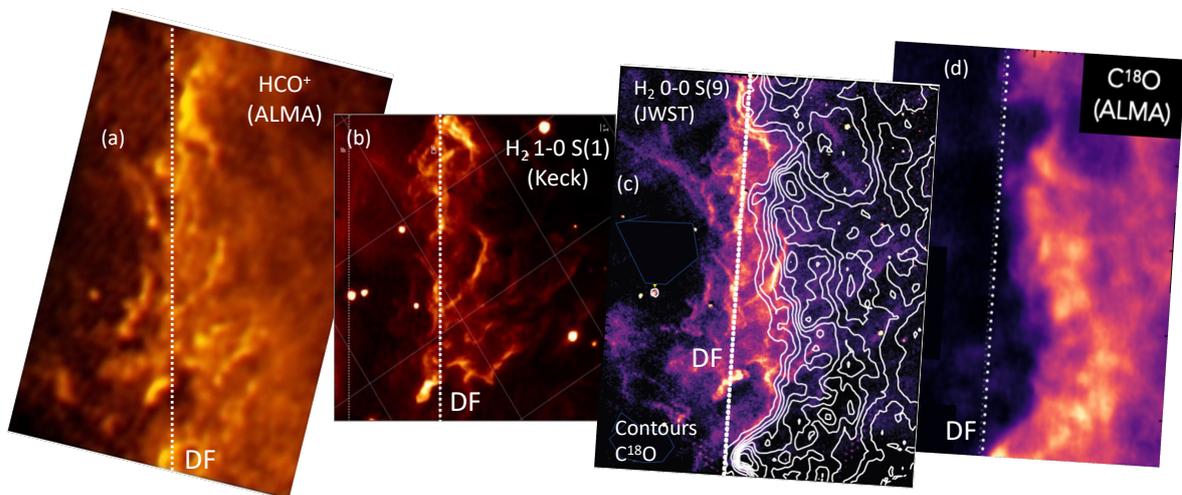


FIGURE 3.19 – Images de la Barre d'Orion à travers l'émission de différentes molécules. (a) Carte de HCO⁺ $J = 4 - 3$ obtenue avec ALMA (Goicoechea et al. 2016). (b) Carte de H₂ 1-0 S(1) soustraite du continuum obtenue avec *Keck* (Habart et al. 2023). (c) Carte de H₂ 0-0 S(9) soustraite du continuum obtenue avec le JWST avec des contours de C¹⁸O (Goicoechea et al. en préparation). (d) Carte de C¹⁸O $J = 3 - 2$ obtenue avec ALMA (Goicoechea et al. en préparation). L'émission de HCO⁺ et de H₂ trace le front de dissociation alors que l'émission de CO trace la région moléculaire.

De récentes observations à haute résolution spatiale avec ALMA (1") (Goicoechea et al. 2016) et le *Keck* telescope (0.1") (Habart et al. 2023) ont montré une structure de la Barre d'Orion beaucoup plus complexe qu'une PDR homogène où les zones de transitions H/H₂ et C⁺/C/CO seraient bien définies et séparées spatialement. La Figure 3.19 présente ces observations. Tout d'abord, ces cartes démontrent que les zones de transitions sont en fait des structures filamentaires à petites échelles de l'ordre de 1". De plus, on observe la forte corrélation entre l'émission de HCO⁺ détectée avec ALMA (traçant la transition C⁺/C/CO) et l'émission de H₂ 1-0 S(1) détectée avec *Keck* (traçant la transition H/H₂) et une émission de CO (traçant la région moléculaire) proche du front de dissociation (Goicoechea en préparation). Ainsi, les portions denses de la Barre d'Orion se situent très proches des fronts

de dissociation. En conséquence, la transition $C^+/C/CO$ doit être très proche de la transition H/H_2 .

3.2.3 La Barre d'Orion à travers le JWST

Le programme PDRs4All utilise trois des instruments à bord du JWST : NIRC*am*, NIRS*pec* et MIRI. Du fait d'un dysfonctionnement de MIRI-MRS lors des premiers mois d'observations du JWST, les observations ont été réalisées en deux fois. Les observations avec NIRC*am*, NIRS*pec* et MIRI imageur (MIRI*m*) ont été réalisées le 10 et 11 septembre 2022. Les observations MIRI-MRS ont été réalisées à leur tour le 30 et 31 janvier 2023. Le programme comporte une quarantaine d'heures d'observations : 15,5 h pour NIRS*pec*, 22,5 h pour MIRI et 2,7 h pour NIRC*am*. Ces données combinent alors des données d'imagerie avec des données spectroscopiques. Des mosaïques ont été choisies afin de sonder les différentes régions de la Barre d'Orion (ionisée, atomique et moléculaire) ainsi que les disques protoplanétaires présents dans le champ de vue.

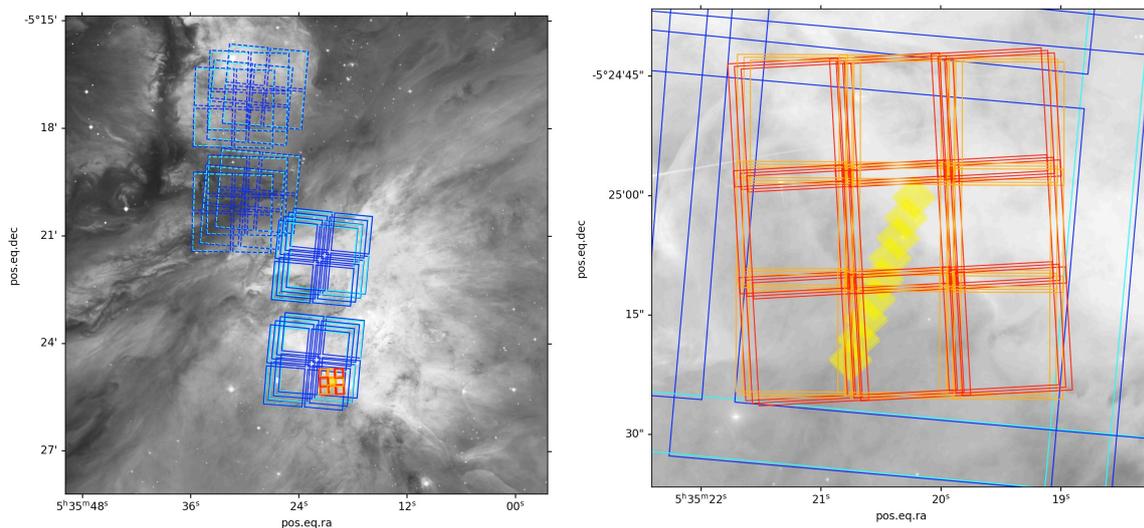


FIGURE 3.20 – Superposition du champ de vue NIRC*am* (bleu) et MIRI (rouge) du JWST et du champ de vue NIRS*pec* (jaune) sur l'image du télescope spatial *Hubble* de la Barre d'Orion à $1,3 \mu\text{m}$ (Robberto et al. 2020). (Gauche) Ensemble des observations NIRC*am* et MIRI. Pour NIRC*am*, le module B couvre la Barre d'Orion et le module A couvre au nord de la *Dark Bay*. La position de pointage est située entre ces deux modules à $RA=05\text{h}35\text{m}20\text{s}1963$, $DEC=-05^\circ23'10,45''$. Les champs de vue en pointillés correspondent aux observations parallèles du NIRC*am*. (Droite) Les observations MIRI sont centrées sur la position $RA=05\text{h}35\text{m}20\text{s}3448$, $DEC=-05^\circ25'4,01''$. Le champ de vue de NIRS*pec* (jaune) est une bande orientée perpendiculairement au front d'ionisation. Le champ de vue MIRI-MRS n'est pas représenté sur cette Figure mais recouvre globalement la même surface du champ de vue de NIRS*pec*. Figure extraite de Habart et al. (2024).

La Figure 3.20 présente les mosaïques réalisées avec les différents instruments. Les observations NIRC*am* permettent de faire des images avec un grand champ de vue de la Barre

d'Orion, mais également des images d'autres régions de la nébuleuse d'Orion grâce au module A et aux observations parallèles. Le champ de vue de MIRIm est plus petit dans les observations de PDRs4All ($14,1'' \times 14,1''$) pour éviter de saturer le détecteur. En effet, lire seulement un sous-réseau du champ de vue total réduit le temps d'intégration et augmente la limite de saturation. Il se concentre alors sur une zone partielle de la Barre d'Orion où on peut tout de même observer les différents fronts de transitions. Enfin, les observations NIRSpec et MIRI-MRS ont été obtenues en réalisant une mosaïque le long d'une bande perpendiculaire au front d'ionisation et recouvrant toute la PDR, de la région ionisée au front de transition H/H₂. Cette position a été choisie puisqu'elle permet à la fois l'observation de la PDR ainsi que deux disques protoplanétaires présents dans le champ de vue.

Premières images



FIGURE 3.21 – La région interne de la nébuleuse d'Orion vue par l'instrument NIRCam du JWST. Crédit : NASA, ESA, CSA, PDRs4All ERS Team, S. Fuenmayor & O. Berné.

Les premières images obtenues avec ce programme sont époustouflantes. La Figure 3.21 présente une image composite NIRCam de la Barre d'Orion. Dans le champ de vue NIRCam, on retrouve la Barre d'Orion irradiée par les étoiles du Trapèze (hors champ en haut à droite). Dans cette région, la grande résolution spatiale du JWST (2×10^{-4} pc, ou 40 au à la distance de la Barre d'Orion, $d = 414$ pc) permet de résoudre des structures à petite échelle comme des étoiles en formation dans leur cocon, des disques protoplanétaires, les fronts de transitions ("filament") de la PDR, etc. La Figure 3.22 permet de mettre en évidence cette résolution spatiale spectaculaire en comparant une image du JWST à une image du télescope *Spitzer*, considéré comme le véritable prédécesseur du JWST (et non *Hubble*) puisqu'il observe dans une gamme de longueur d'onde similaire à celle du JWST. Doté d'un miroir de 85 cm, c'est-à-dire environ 8 fois plus petit que celui du JWST, sa résolution spatiale ne permettait pas de résoudre tous les objets décrits plus haut.

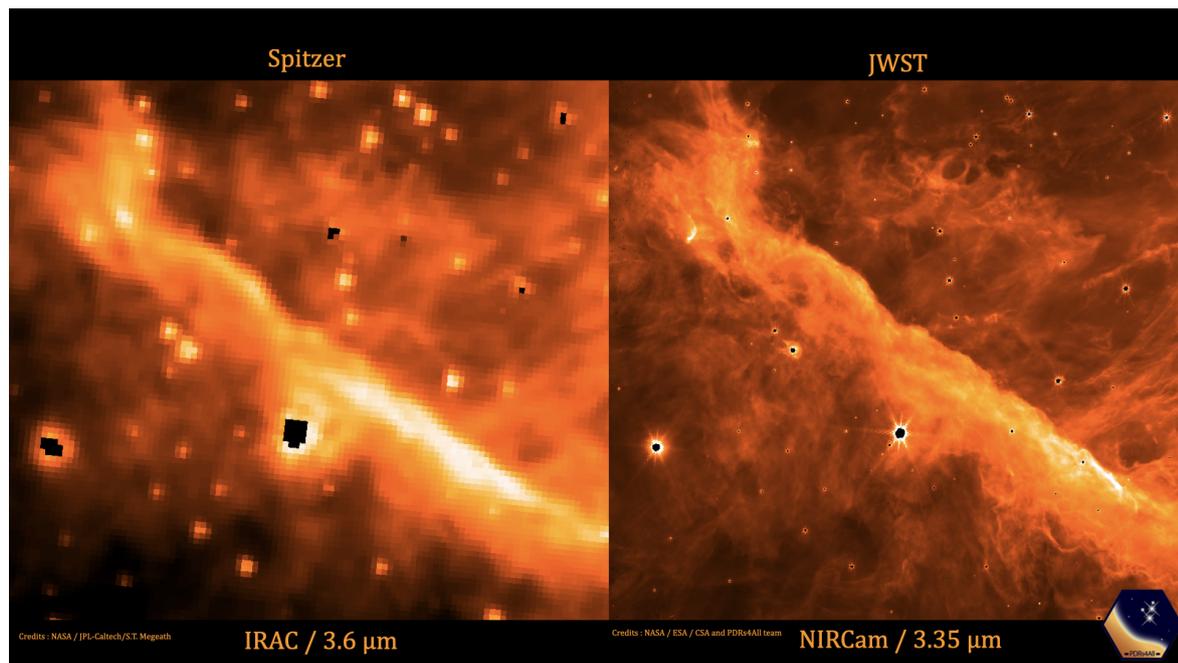


FIGURE 3.22 – Comparaison d’une image *Spitzer*-IRAC avec une image JWST-NIRCam autour de $3,5 \mu\text{m}$. Crédit pour l’image *Spitzer* : NASA/JPL-Caltech/S.T. Megeath. Crédit pour l’image JWST : NASA/ESA/CSA/PDRs4All.

3.2.4 Observation de la région de photodissociation

3.2.4.1 Données d’imagerie NIRCam et MIRI

Les données d’imagerie NIRCam et MIRI ont alors mis en évidence de nombreuses structures dans la Barre d’Orion mais aussi dans toute la région environnante, faisant apparaître des chocs, des crénelations, des jeunes objets stellaires (*Young Stellar Object*, YSO). En se concentrant sur la Barre d’Orion, la structure graduelle de cet objet en s’éloignant de l’étoile excitatrice est évidente. Nous observons alors les couches d’émission des AIBs et de H_2 successives en accord avec les observations précédentes. Cependant, la haute résolution spatiale du JWST permet de résoudre les structures de transitions à petite échelle, effaçant alors la vision ancestrale d’une PDR homogène. La Figure 3.23 présente quelques résultats clés obtenus avec ces observations.

Ces données permettent de mettre en évidence la forte augmentation de l’émission des AIBs au front d’ionisation suivie d’une diminution en s’enfonçant dans le nuage (voir Figure 3.23, panneau de droite). Cette variation est expliquée par une augmentation de la densité de colonne de poussières au front d’ionisation. Ce gradient rapide de densité, lui, est expliqué par une diminution drastique de la température à cette position. En effet, la température diminue due à l’extinction de rayonnement UV en pénétrant dans la PDR. Cependant, il y a un équilibre de pression thermique entre la région H II et la région atomique, d’où l’augmentation rapide de la densité. Nous avons vu dans le Chapitre 1, Section 1.2.2.2 que l’équilibre des pressions entre le gaz ionisé et la PDR, en prenant en compte la photoévaporation du gaz H II de la surface de la PDR, qui ajoute un terme additionnel de pression, fait que

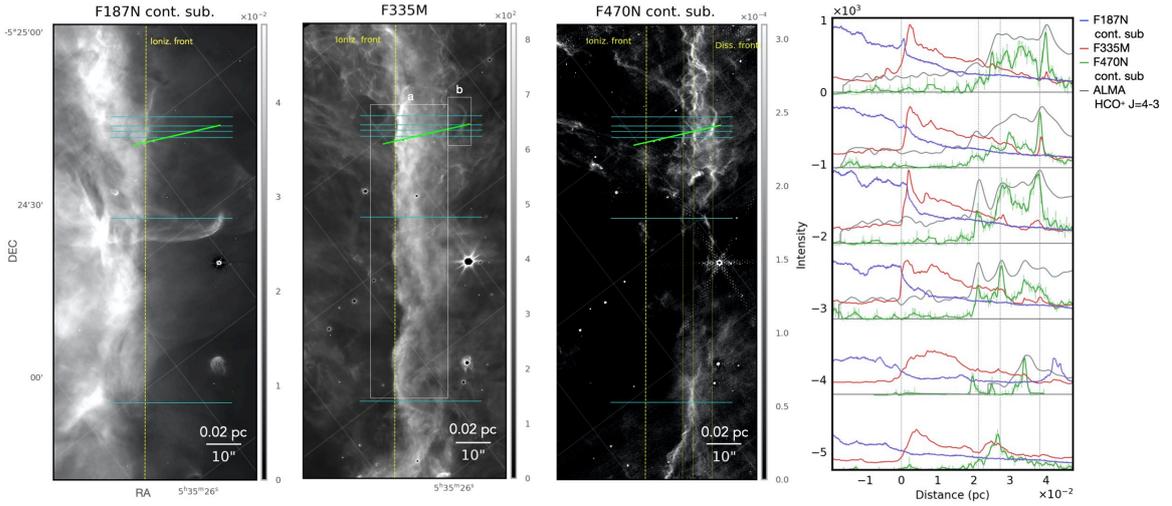


FIGURE 3.23 – Distribution spatiale du gaz ionisé, de la poussière et du gaz moléculaire excité. (Gauche) Cartes dans le filtre F187N (raie $\text{Pa } \alpha$), dans le filtre F335M (AIBs) et dans le filtre F470N soustrait du continuum (raie H_2 0-0 S(9)). Les lignes verticales en pointillés indiquent la position moyenne du front d’ionisation et des fronts de dissociation. Les lignes horizontales (en cyan) donnent la position de 6 coupes, perpendiculaires à la barre. (Droite) Profils de l’intensité de la raie $\text{Pa } \alpha$ (en bleu), des AIBs (en rouge) et de la raie de H_2 0-0 S(9) (en vert) en fonction de la distance au front d’ionisation. Les profils des raies sont normalisés par rapport aux profils de luminosité de surface du filtre F335M (en rouge). Les intensités n’ont pas été corrigées pour l’extinction de la poussière. Le profil d’intensité intégrée de la raie HCO^+ J=4-3 observé avec ALMA est représenté en gris. Figure adaptée de Habart et al. (2024).

$P(\text{PDR}) \simeq 2P(\text{H II})$. La pression de la région H II peut s’écrire $P(\text{H II}) = 2n_e T$, en supposant qu’à chaque électron, il existe un porteur de charge positif (H ou He). Ainsi, la pression dans la PDR vaut $P(\text{PDR}) = 4n_e T$. Au bord de la Barre d’Orion, la densité d’électron et la température du gaz ionisé ont été dérivés par Weillbacher et al. (2015) grâce à l’instrument MUSE du *Very Large Telescope* (VLT) et valent $n_e \sim 5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ et $T = 10\,000 \text{ K}$. On trouve alors une estimation de la pression dans la PDR de $P(\text{PDR}) = 2 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$. Au bord de la PDR, la densité augmente d’un facteur 20 : $n_{\text{H}} = 20 \times n_e = 10^5 \text{ cm}^{-3}$. Cette augmentation de densité est fortement contrainte par l’étude du profil d’émission de la poussière (Elyajouri et al. 2024) que nous présentons dans la Section 3.2.4.2. Au contraire, la température diminue d’un facteur 5, et vaut, au bord de la PDR, environ $T_{\text{gas}} = 2\,000 \text{ K}$. La diminution progressive de l’émission des AIBs est, elle, due à l’extinction du rayonnement UV par les poussières en progressant dans le nuage.

Contrairement au front d’ionisation, les fronts de transitions H/H_2 sont extrêmement structurés (voir Figure 3.23, troisième panneau en partant de la gauche). Nous observons plusieurs crêtes brillantes ainsi que des sous-structures à petites échelles complexes et irrégulières. L’émission de H_2 dans ces fronts augmente, elle aussi, très rapidement, l’épaisseur de ces fronts est de 80–400 au (soit 0,2"–1" à 400 pc). Ces fronts correspondent aux couches minces de matière où la densité du gaz commence à augmenter rapidement et sont, dans

l'ensemble, parallèles à la Barre. L'émission de H_2 augmente environ $10''$ après le front d'ionisation mais dû à cette structure irrégulière, la distance entre le front d'ionisation et le front de dissociation va jusqu'à $20''$. Pour expliquer la présence de trois pics de H_2 brillants dans les observations de spectro-imagerie et qui sont successivement de plus en plus éloignées du IF (que l'on nommera par la suite DF1, DF2 et DF3, voir Figure 3.25), une géométrie en champ-terrasse, présentée dans la Figure 3.24, a été proposée par Habart et al. (2024) et Peeters et al. (2024). Dans cette géométrie, chaque bord brillant correspond à une portion du front de dissociation vu de côté. Cette géométrie est justifiée par la différence d'extinction visuelle A_V , le long de la ligne de visée, mesurée à partir des raies rovibrationnelles de H_2 (voir Section 3.2.4.2). L'extinction mesurée est en effet plus élevée au DF1 que sur les DF2 et DF3. Cela montre que DF1 est plus loin le long de la ligne de visée. La densité de colonne le long de la ligne de visée est également plus grande pour le DF1 et DF2 qui sont plus éloignés de l'observateur. En outre, les sous-structures également observées avec ALMA au DF1 ont une vitesse d'émission ($v_{\text{LSR}} = 8\text{--}9 \text{ km s}^{-1}$) plus cohérentes avec l'émission provenant du fond (OMC-1) que celle de la Barre ($v_{\text{LSR}} = 10,5 \text{ km s}^{-1}$). De plus, le DF1 n'est plus perceptible dans les filtres à courtes longueurs d'onde dû à la lumière diffusée par la poussière. Cela confirme qu'il y a plus de matière le long de la ligne de visée à la position du DF1. Finalement, on peut aussi remarquer que le long de la surface courbée d'émission de H_2 , les profils des raies de H_2 rotationnellement et rovibrationnellement excitées concordent remarquablement. Les rapports des raies de H_2 sensibles aux conditions locales (T , n_{H}) et non à l'extinction, sont quasi constants. La température et la densité restent donc similaires le long de la surface courbée du DF.

La partie sud-ouest de la Barre d'Orion, qui correspond à la partie supérieure droite des cartes présentées dans la Figure 3.23, est beaucoup plus structurée que les autres régions de la Barre d'Orion. Cela est en accord avec les observations au sol précédentes qui ont montré que la partie sud-ouest apparaît fragmentée en plusieurs condensations moléculaires alors que la partie nord-est de la Barre d'Orion présente une seule condensation moléculaire principale (e.g., Lis & Schilke 2003; Lee et al. 2013).

Ces structures brillantes observées en H_2 par le JWST pourraient provenir de structures à haute densité préexistantes comprimées par l'intense rayonnement FUV (voir Chapitre 1, Section 1.2.4). La région peut également être exposée aux vents stellaires et aux *outflows* protostellaires, qui déclencheraient de la turbulence. Les observations de *SOFIA* de C^+ , à grandes échelles, révèlent que ces vents et *outflows* façonnent le nuage et injectent de l'énergie mécanique (Pabst et al. 2020). Le fait que les crêtes soient régulièrement espacées et parallèles au front de dissociation peut suggérer que les champs magnétiques à grande échelle sont dynamiquement importants (Mackey & Lim 2011). Chaque crête serait alors associée à des pics de densité d'origine magnétique. Dans la Barre d'Orion, la pression thermique du gaz est très élevée. Pour que l'hypothèse précédente soit pertinente, il faudrait des puissants champs magnétiques (par exemple, pour $P_{\text{gas}}/k_B = 2 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$, il faut $800 \mu\text{G}$, Pellegrini et al. 2009; Goicoechea et al. 2016). Dans la Barre d'Orion, le champ magnétique a été mesuré à environ $300 \mu\text{G}$ grâce aux observations *SOFIA HAWC+* de la polarisation de la poussière (Chuss et al. 2019; Guerra et al. 2021). Ces valeurs sont à confirmer avec des observations à haute résolution angulaire de la polarisation de la poussière. Enfin, soulignons que Berné et al. (2010) ont observé des structures similaires (en forme de crête) dans une autre partie de la nébuleuse d'Orion et également à l'interface entre le nuage molé-

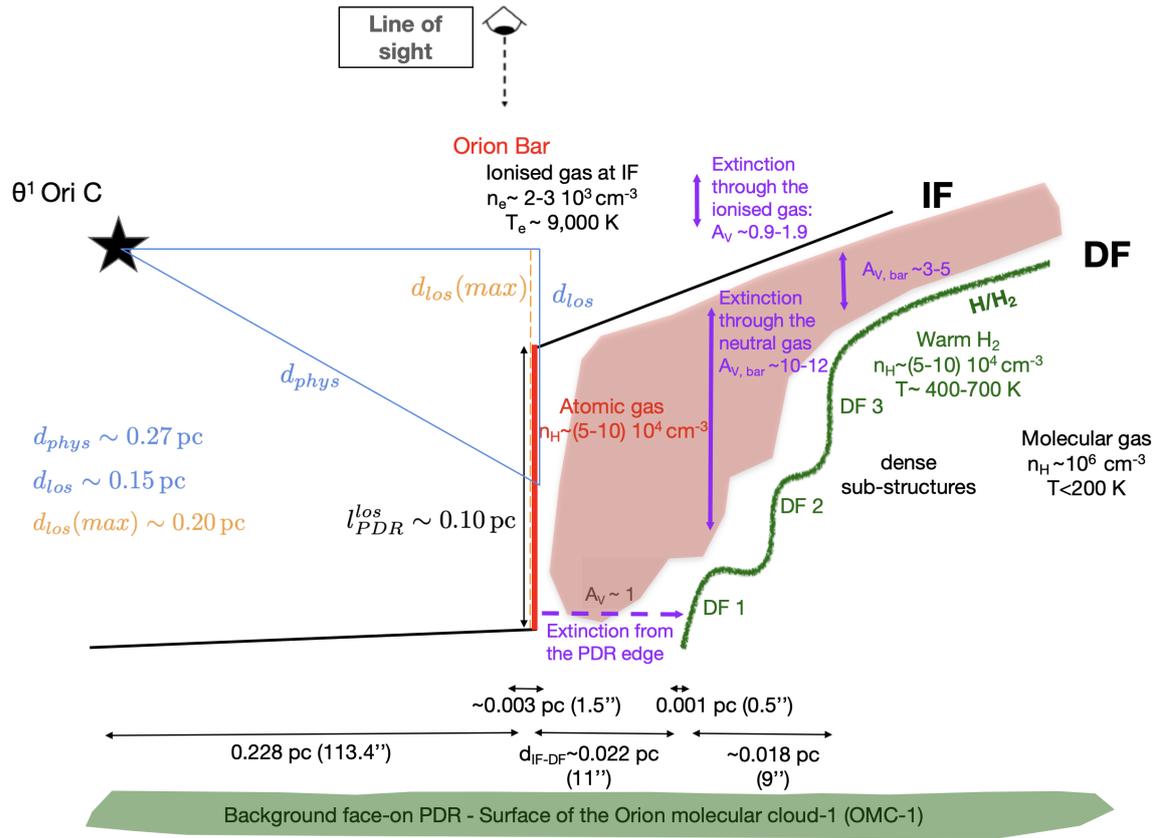


FIGURE 3.24 – Vue schématique de la Barre inférée à partir des observations du JWST et des observations précédentes du visible au millimètre. Les dimensions perpendiculaires à la Barre ne sont pas à l'échelle. Figure extraite de Habart et al. (2024) et Peeters et al. (2024).

laire et la région H II. Ces structures ont été interprétées comme le résultat de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz due au cisaillement du gaz à l'interface.

De nombreuses structures observées en H_2 coïncident également avec l'émission de HCO^+ , observée avec ALMA (Goicoechea et al. 2016). Ces deux espèces, probablement liées chimiquement, trace alors le bord des structures denses. De plus, la comparaison entre l'émission de HCO^+ et de CO observées par ALMA et les observations de H_2 avec le JWST indique que les transitions H/H_2 et $\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}$ sont quasiment cospatiales. L'étude de l'émission du carbone atomique C I détecté avec ALMA par la transition à 592 Hz sont également en accord avec ces résultats puisque la position de l'émission se trouve très proche de la position du front de dissociation (Goicoechea et al. en préparation).

3.2.4.2 Données de spectroscopie

Comme énoncé plus tôt, les données de spectroscopie de NIRSpec et MIRI-MRS ont été prises en établissant une mosaïque perpendiculaire au front d'ionisation. La Figure 3.25 montre les mosaïques de NIRSpec et MIRI-MRS en empreinte sur une image composite de NIRCам. Dans cette mosaïque, chaque région de la Barre d'Orion est visible : la région

ionisée H II, la région atomique et les fronts de dissociation. Comme présentée dans la section sur l'imagerie, la présence de "trois" fronts de dissociations (nommé DF1, DF2, DF3) est due à la géométrie en trois dimensions de la PDR (voir Figure 3.24).

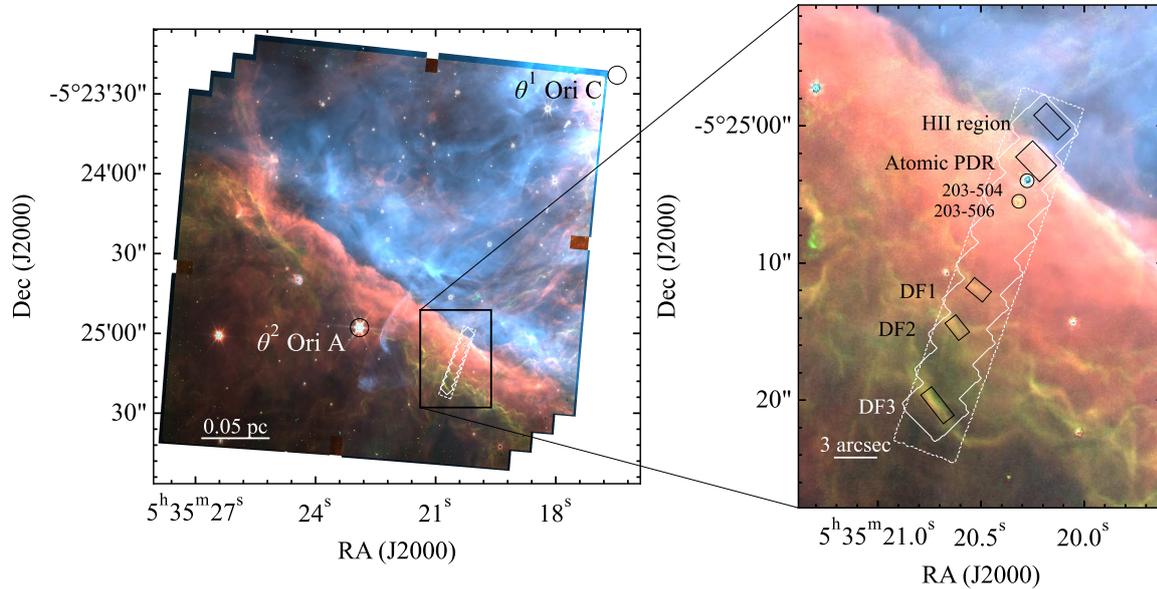


FIGURE 3.25 – Image composite NIRCам de la Barre montrant le champ de vue de la mosaïque NIRSpec (trait plein blanc) et MIRI-MRS (trait pointillé blanc). L'image composite est composée de F335M (émission AIB) en rouge, F470N-F480M (émission H₂) en vert, et F187N (émission Paschen α) en bleu (Habart et al. 2024). Les étoiles brillantes θ^1 Ori C et θ^2 Ori A sont indiquées par des cercles noirs dans le panneau de gauche. Les disques proto-planétaires 203-504 et 203-506 sont indiqués par des cercles noirs. Figure extraite de Chown et al. (2024).

Les spectres dans l'infrarouge proche et moyen des différentes régions observées par NIRSpec et MIRI-MRS sont particulièrement riches comme le démontrent les Figures 3.26 et 3.27. De nombreuses raies spectrales, plus de 800 seulement dans NIRSpec, ainsi que des bandes aromatiques et aliphatiques, sont observées sur un fort continuum. La spectro-imagerie de NIRSpec et MIRI-MRS permet d'ailleurs de réaliser des cartes d'émission de ces raies spectrales. La Figure 3.28 révèle d'ailleurs les capacités de la spectro-imagerie de NIRSpec dans des traceurs principaux du front d'ionisation, de la région atomique et des fronts de dissociation. Face à cette richesse, la première étape d'analyse a été de réaliser un état de l'art de ce qui est détecté dans ces données et d'en contraindre des paramètres physiques simples. Cette vue d'ensemble est présentée par Peeters et al. (2024) pour l'émission du gaz observée par NIRSpec, Van De Putte et al. (2024) pour l'émission du gaz observée par MIRI-MRS et par Chown et al. (2024) et Elyajouri et al. (2024) pour l'émission des bandes et du continuum de poussières et sera l'objet de la suite de cette section.

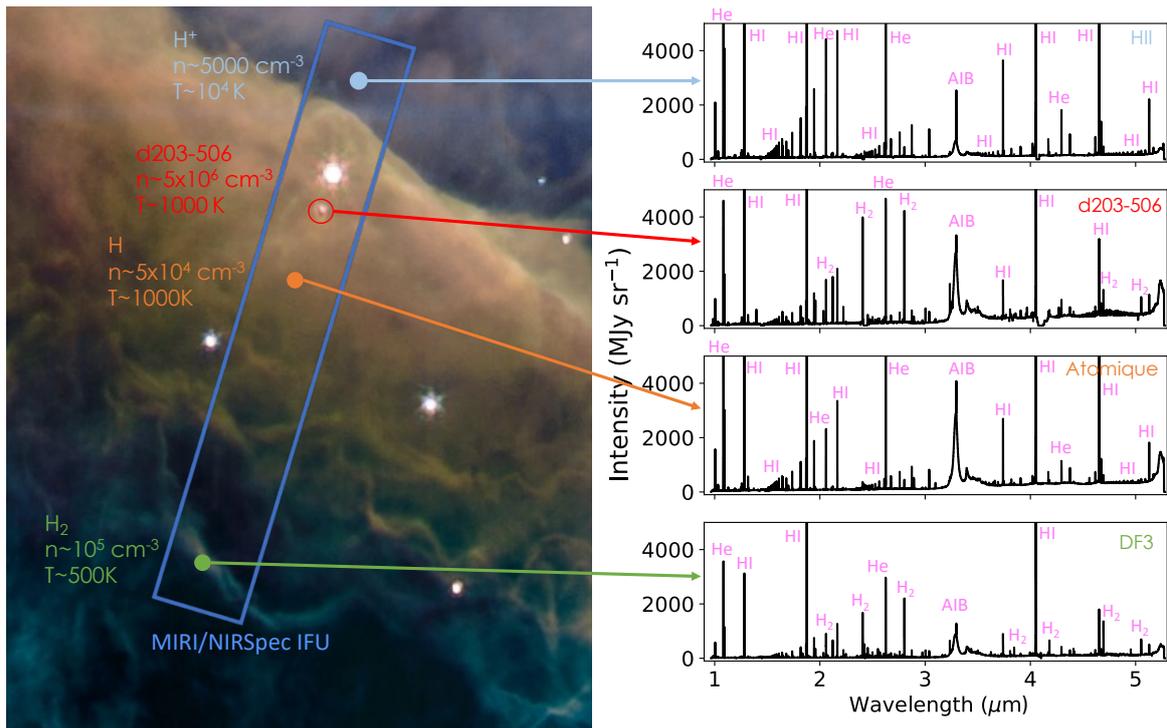


FIGURE 3.26 – Spectres complets observés par NIRSpec des différentes régions de la Barre d’Orion.

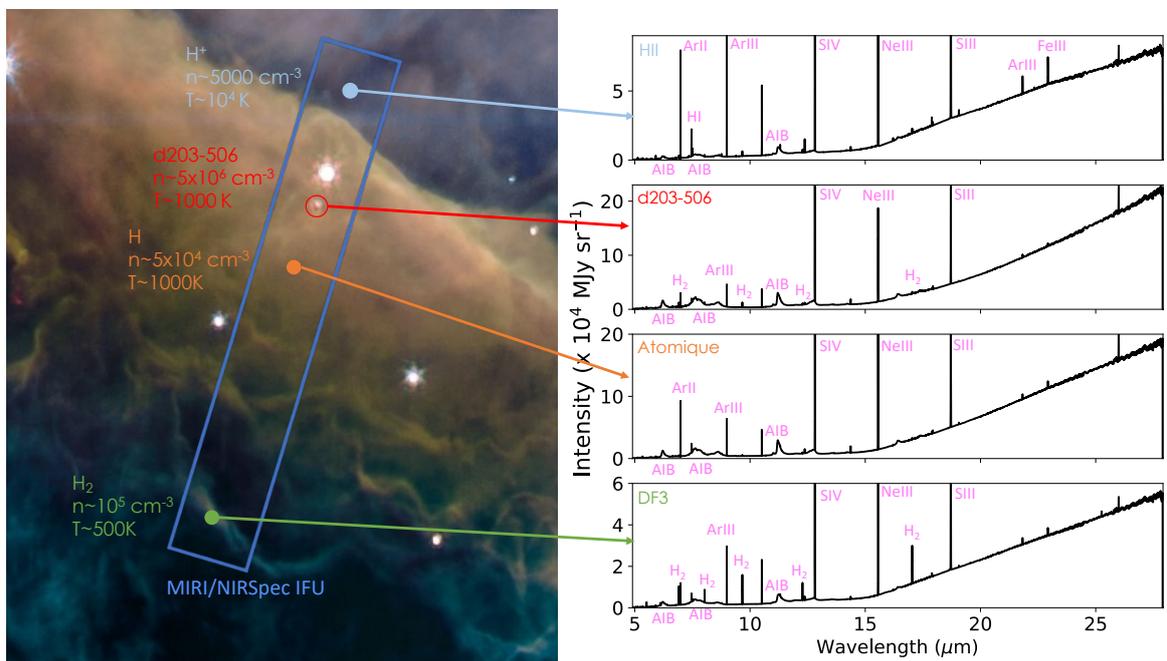


FIGURE 3.27 – Spectres complets observés par MIRI-MRS des différentes régions de la Barre d’Orion.

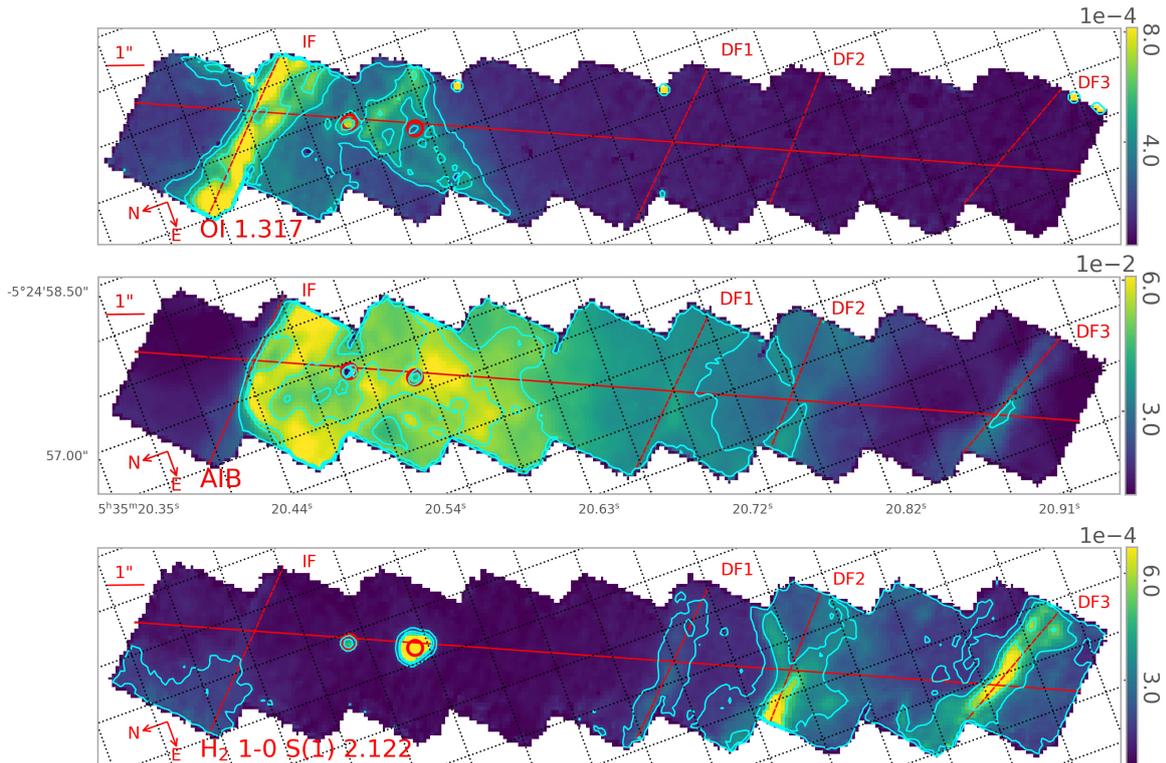


FIGURE 3.28 – La Barre d’Orion telle qu’elle est observée dans les transitions sélectionnées observées avec NIRSpect en unités de $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{sr}^{-1}$. Aucune correction d’extinction n’est appliquée. (Haut) Image de l’émission de O I à $1,317 \mu\text{m}$. (Milieu) Image de l’émission totale des AIBs (c’est-à-dire la somme de toutes les composantes des AIB dans la gamme $3,2 - 3,7 \mu\text{m}$). (Bas) Image de l’émission de H_2 1-0 S(1). La ligne rouge presque horizontale indique la coupe NIRSpect et les lignes rouges presque verticales indiquent de gauche à droite le front d’ionisation et les fronts de dissociation (DF1, DF2, DF3). Les deux disques protoplanétaires sont indiqués par les cercles. Sur l’ensemble de la mosaïque NIRSpect, les contours indiquent les niveaux d’intensité de 77,9, 90,2, 96 % des niveaux d’intensité pour O I – $1,317 \mu\text{m}$, de 52, 75 et 90 % pour les AIBs, et 60, 90, 98 % pour H_2 1-0 S(1). Figure adaptée de Peeters et al. (2024).

Émission des poussières

La première chose que l’on remarque en observant ces spectres est le continuum et les différentes bandes spectrales, caractéristiques de l’émission des nanograins dans ce milieu. L’analyse de cette émission est essentielle pour mes travaux puisque le continuum et les bandes affectent la détection des molécules que j’étudie dans les Chapitres 5 et 6. En effet, des AIBs sont présentes dans la gamme de longueurs d’onde où l’on détecte OH et CH^+ (autour de $3 \mu\text{m}$ et $10 \mu\text{m}$) et l’émission de CH_3^+ se trouve dans l’aile de la bande à $7 \mu\text{m}$. Dans l’infrarouge proche, l’émission continuum est relativement faible. Cette émission augmente avec la longueur d’onde particulièrement rapidement après $15 \mu\text{m}$. Dans l’infrarouge moyen, l’émission continuum devient tellement intense qu’après $20 \mu\text{m}$, elle domine l’émission et la détection de raies du gaz devient quasiment impossible. À courtes longueurs

d'onde, le continuum n'augmente pas, ce qui exclut une forte contribution de la diffusion. Ajoutées à ce continuum, de nombreuses bandes spectrales sont observées partout sur la mosaïque. Nous nommons l'émission des bandes aliphatiques et des aromatiques AIB indifféremment dans la suite de ce manuscrit. Plusieurs modèles de poussières existent pour expliquer cette émission. Une première approche considère des carbones amorphes, composés de sous-structures faites d'îlots aromatiques reliés par des chaînes aliphatiques. Dans cette approche, ces nanocarbones sont alors responsables de l'émission globale (continuum et bandes). La deuxième approche considère une matière carbonée essentiellement composée de PAHs qui se complexifie par l'ajout de groupements aliphatiques. Dans cette approche, seule l'émission de AIBs leur est attribuée et on considère en plus un continuum émis par des petits grains sans bande spectrale appelé "*Very Small Grain*". Dans l'article de Chown et al. (2024), les AIBs sont étudiées après soustraction du continuum, en accord avec la seconde approche. Les AIBs les plus brillantes se trouvent à 3,3, 6,2, 7,7, 8,6 et 11,2 μm . Une vue d'ensemble de ces bandes aromatiques est présentée dans la Figure 3.29. Ces bandes aromatiques sont particulièrement intenses dans la région atomique et sont donc des bons traceurs de cet environnement. Ceci est mis en évidence dans la Figure 3.28 (panneau du milieu) qui montre une carte d'émission des AIBs observées avec NIRSPEC. La transition entre la région ionisée et la région atomique est particulièrement marquée dans l'émission dans ces bandes aromatiques.

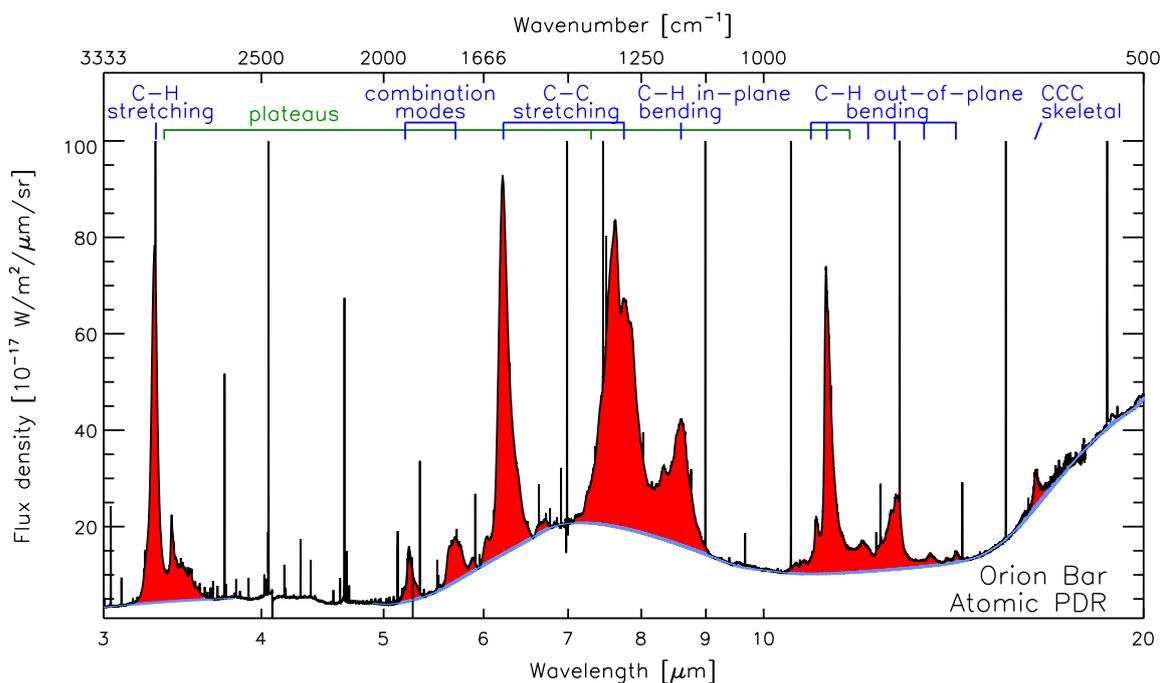


FIGURE 3.29 – Spectre des AIBs tel qu'observé par le JWST dans la région atomique de la Barre d'Orion. Les régions colorées en rouge indiquent l'émission des AIBs, tandis que les courbes bleues indiquent le continuum sous-jacent. Figure extraite de Chown et al. (2024).

Dans le spectre infrarouge, le spectre autour de 3 μm est dominé par les AIBs à 3,3 μm et 3,4 μm . La bande à 3,3 μm est caractéristique du mode d'étirement de la liaison CH dans les groupes aromatiques. La bande à 3,4 μm est caractéristique du mode d'étirement de la liaison CH dans les groupes aliphatiques. Ainsi, le rapport 3,3 / 3,4 μm est un traceur

de l'aromaticité des porteurs des AIBs (aussi appelé "hydrogénation"). La position de ces deux pics dépend des résonances entre les modes CC et les modes CH. La bande à $6,2 \mu\text{m}$ est une des AIBs les plus brillantes du spectre. Cette dernière est caractéristique de modes d'étirement des liaisons CC purement aromatiques. La position des différentes bandes provenant de ces modes dépend de la charge, de la structure moléculaire, de la taille et de l'hétérogénéité du grain. Autour de $7,7 \mu\text{m}$, l'AIB est un mélange des différents modes. Dans cette gamme de longueurs d'onde, les bandes sont dues à des modes d'étirement des liaisons CC et des modes de flexion dans le plan des liaisons CH. La bande à $8,6 \mu\text{m}$ est due à la flexion dans le plan des liaisons CH mais est mélangée avec des modes d'étirement des liaisons CC. Les bandes observées entre 11 et $14 \mu\text{m}$ sont attribuées à la flexion en dehors du plan des liaisons CH. La position de ces bandes est particulièrement caractéristique de la structure moléculaire au bord de PAHs. Les intensités intégrées des AIBs détectées dans NIRSpec sont répertoriées dans l'Annexe C.

Si ces bandes sont présentes sur toute la mosaïque, nous observons cependant des variations entre les différents environnements. La variation la plus frappante des données est l'intensité relative des bandes principales. Par exemple, le rapport $3,4$ sur $3,3 \mu\text{m}$ est 2 fois plus grand dans le DF3 que dans la région atomique et le rapport $3,3 \mu\text{m}$ sur $11,2 \mu\text{m}$ est 40 % plus grand dans le DF3 que dans la région atomique. D'autres variations sont aussi visibles mais à plus petites échelles (de l'ordre de 10–20 %). Les processus de photo-transformation dus à l'intense champ UV peuvent avoir un impact sur la distribution de taille des PAHs ce qui affecterait les intensités relatives des AIBs. Par exemple, le rapport $3,3/11,2$ a longtemps été utilisé comme indicateurs de la taille de l'espèce qui émet. L'augmentation de ce rapport dans les observations de la région ionisée à la région moléculaire indique une augmentation de la taille typique des grains vers la surface. La variation du rapport $3,3/3,4$ peut aussi être expliquée par le champ de rayonnement UV car le rapport aliphatique/aromatique décroît lorsque le champ UV augmente, reflétant le fait que les liaisons aliphatiques sont moins stables que les liaisons aromatiques. Ces résultats sont en faveur d'une élimination des hydrocarbures fragiles près de la surface de la PDR sujette à champ UV plus intense.

Cette identification des AIBs et analyse observationnelle des variations ont été suivies d'une modélisation réalisée dans Elyajouri et al. (2024) afin de réaliser une étude plus quantitative. Dans cette étude, les auteurs ont choisi de modéliser de façon cohérente l'émission continuum et les bandes aromatiques en utilisant le modèle THEMIS (*Heterogeneous dust Evolution Model for Interstellar Solids*, Jones et al. 2017). Celui-ci s'appuie sur les propriétés mesurées en laboratoire de matériaux analogues à la poussière interstellaire. Ce modèle prend alors en compte la famille des carbones amorphes hydrogénés, des matériaux pauvres en hydrogène ou riches en hydrogène ainsi que les silicates amorphes de type olivine et pyroxène avec des inclusions de fer et de sulfure de fer. Dans ce modèle, les petits grains ($r < 20 \text{ nm}$) sont entièrement composés de carbones amorphes, riches en hydrogène et riches en structures aromatiques. Leur distribution de taille suit une loi de puissance. Ces grains sont à l'origine des AIBs (généralement attribuées au PAHs) et du continuum dans l'infrarouge proche. Les gros grains sont composés de carbones amorphes riches ou pauvres en hydrogène ou de silicates amorphes entourés d'un manteau de carbones amorphes pauvre en hydrogène. La distribution de taille de ces grains suit une loi log-normale qui pique entre 100 et $200 \mu\text{m}$.

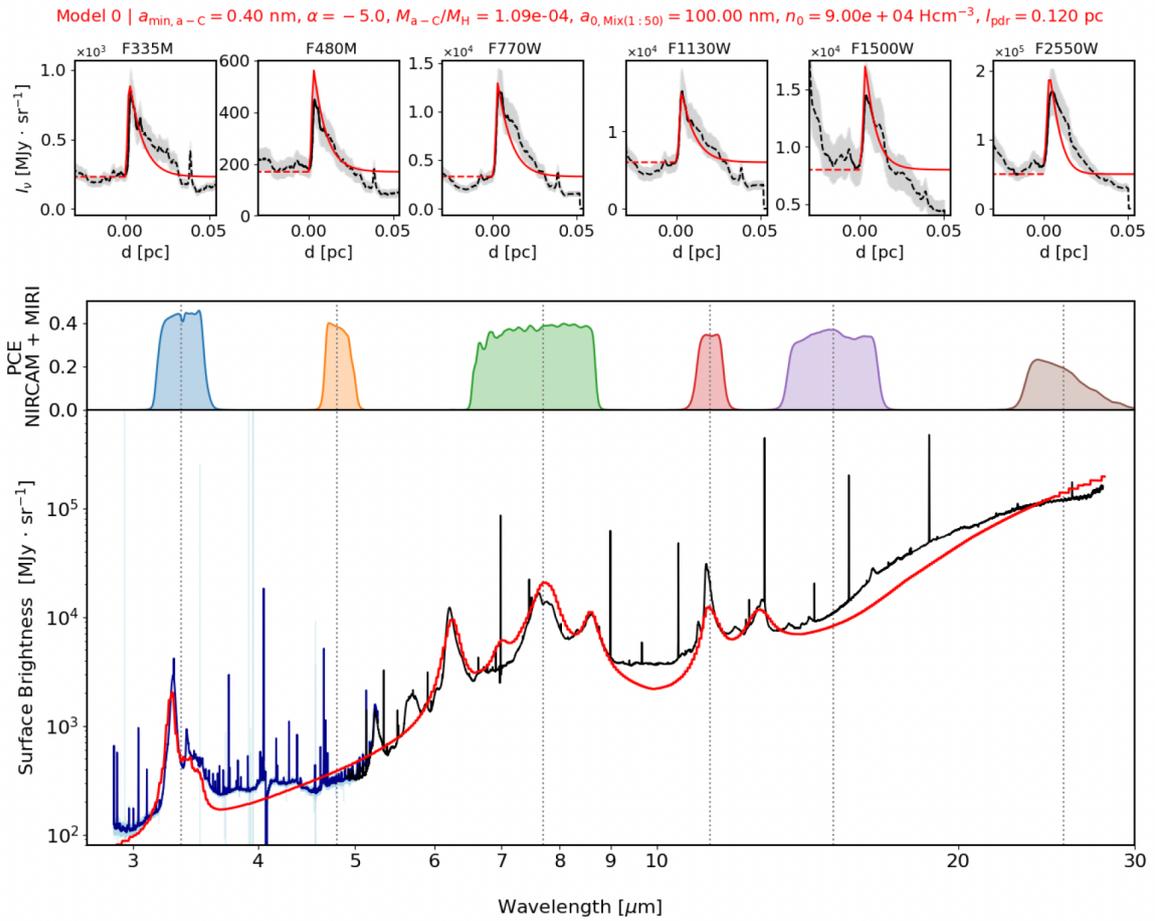


FIGURE 3.30 – Comparaison de l’émission de la poussière observée (JWST) et modélisée dans la région atomique de la Barre d’Orion. (Haut) Comparaison des profils d’émission de la poussière observés dans six bandes photométriques (3,3 et 4,8 μm ; filtres NIRCAM, et 7,7, 11,3, 15, et 25,5 μm ; filtres MIRIm) et modélisés dans la région atomique de la Barre d’Orion en utilisant le meilleur ensemble de paramètres des poussières. L’émission de la poussière observée est représentée en noir et l’ajustement du modèle en rouge, avec des incertitudes de 20 % affichées en gris. La coupe est perpendiculaire à la Barre d’Orion. (Milieu) Couverture en longueurs d’onde et efficacité de conversion photon-électron (PCE) des filtres des imageurs NIRCAM et MIRI utilisés dans notre étude. (Bas) Comparaison de la distribution spectrale d’énergie (SED) de l’émission de la poussière calculée en utilisant le modèle de transfert radiatif au pic d’émission de l’AIB à une distance de 0,003 pc (représentée par la ligne rouge), avec le spectre de la région atomique dans la Barre d’Orion (en bleu foncé pour NIRSpec et en noir pour MIRI-MRS).

L’étude de Elyajouri et al. (2024) couple les données d’imagerie par NIRCAM et MIRIm, et de spectroscopie par NIRSpec et MIRI-MRS afin de reproduire le plus précisément possible les profils d’émission de la poussière sur le bord de la PDR et les spectres observés (voir Figure 3.30). Tout d’abord, ils utilisent le code `DustEm` (Compiègne et al. 2011) pour produire la densité d’énergie spectrale (*Spectral Energy Distribution*, SED) d’une grille de modèles THEMIS. Ils peuvent ainsi faire varier les différents paramètres de la distribution

des grains (taille minimale, la pente de la loi de puissance, l'état d'hydrogénation ...). Cette étape permet d'ajuster ces différents paramètres aux observations NIRSpec et MIRI-MRS dans les différentes zones (H II, atomique et fronts de dissociation). Ainsi, ils trouvent une taille de grains minimale de plus en plus petite en profondeur dans le nuage ($a_{\min} = 0,55$ nm dans la région H II, $a_{\min} = 0,475$ nm dans la région atomique et $a_{\min} = 0,425$ nm au front de dissociation) et un état d'hydrogénation de plus en plus grand ($E_g = 0,03$ eV dans la région H II et atomique et $E_g = 0,07$ eV au front de dissociation). Cela indique qu'en s'approchant de l'étoile excitatrice, la teneur en hydrogène de la structure des grains diminue et que les grains sont légèrement plus gros car les plus petits sont plus faciles à détruire dans les régions fortement irradiées.

Dans la suite de l'étude, Elyajouri et al. (2024) se concentrent ensuite sur le bord de la PDR, c'est-à-dire la transition entre la région H II et la région atomique. En utilisant ces paramètres dérivés, ils utilisent ensuite le code SOC (*Scattering with OpenCL*) pour réaliser des simulations 3D de transfert radiatif de l'émission de la poussière afin de reproduire les profils d'émission des poussières observés avec MIRIm et NIRCам. En reproduisant la montée et la descente du profil d'intensité, ils ont pu contraindre l'abondance des petits grains ($r < 20$ nm) par rapport au gaz. Ainsi, ils concluent que cette abondance est 15 fois plus faible que dans le milieu diffus. Leurs travaux permettent aussi de contraindre la loi de puissance suivie par la distribution des petits grains ($\alpha = -5$) dans la région atomique. Enfin, ils obtiennent aussi des estimations de la densité dans cette région ($n_H = 9 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ en accord avec les valeurs trouvées par Habart et al. (2024); Peeters et al. (2024)). Notamment, ils arrivent pour la première fois à reproduire les profils photométriques de tous les filtres NIRCам et MIRIm utilisés. Ainsi, ils reproduisent simultanément les caractéristiques du spectre provenant des aromatiques, des aliphatiques et le continuum.

La déplétion des nanograins dans les régions atomiques, déterminée dans cette étude, peut avoir un fort impact sur la physique et la chimie de l'environnement et notamment sur le gaz. En effet, les nanograins contrôlent différents processus, à savoir le chauffage photo-électrique (voir Chapitre 2, Section 2.1.1.4), l'extinction du rayonnement UV (voir Chapitre 2, Section 2.1.1.2) et ils représentent également une majorité de la surface des grains sur laquelle se forme H₂. En conséquence, l'appauvrissement en nanograins peut bouleverser le bilan thermique. Le profil en température au bord de la PDR devrait alors être affecté. De plus, cela devrait aussi modifier considérablement la forme de la courbe d'extinction dans l'UV (voir Figure B.1 de Elyajouri et al. 2024). Cette modification de l'extinction du rayonnement UV par la poussière modifie l'étendue spatiale de la région atomique puisque celle-ci dépend essentiellement de l'atténuation du champ UV par la poussière et de la densité du gaz.

Émission du gaz ionisé et des raies de recombinaison

Concernant les signatures du gaz, les raies du gaz ionisé et des raies de recombinaison sont les plus brillantes du spectre. Dans l'ensemble de la mosaïque, de nombreuses raies de recombinaison de H I sont détectées. Elles représentent quasiment la moitié des raies observées avec MIRI-MRS. Ces raies proviennent de la région ionisée. L'émission de H I (ainsi que d'autres espèces ionisées) est détectée partout sur la mosaïque due à l'émission au premier plan d'une région H II entre la Barre d'Orion et l'observateur. Dans l'infrarouge proche, les raies de recombinaison de H I proviennent des séries de Paschen ($n_l = 3, n_u \leq 7$),

de Brackett ($n_l = 4$), Pfund ($n_l = 5$), Humphreys ($n_l = 6$) et $n_l = 7$ ($n_u \leq 45 - 50$). Dans l'infrarouge moyen, seules les raies avec un nombre quantique principal inférieur $n_l \geq 5$ sont détectées. La raie Pfund α est la raie de H I la plus brillante. Les raies de Humphreys sont détectées de $n_u = 7 - 10$. 15 raies provenant de $n_l = 7$ sont observées de $n_u = 8 - 23$. Les raies avec des $n_l = 8 - 10$ sont beaucoup plus faibles mais les raies de 8-29 à 8-10, de 9-27 à 9-11 et de 10-20 à 10-15 sont détectées. Les intensités des raies du gaz ionisé sont présentées dans l'Annexe C.

Les raies de H I sont utilisées pour estimer l'extinction au premier plan en comparant le rapport des raies Paschen δ et Brackett γ à celui du cas B de la théorie de recombinaison (Prozesky & Smits 2018, considérant une température d'électron $T_e = 10\,000$ K, une densité d'électron $n_e = 1\,000\text{ cm}^{-3}$ et pas de champ de rayonnement). En adoptant, la courbe d'extinction de Gordon et al. (2023) avec un $R_V = 5,5$, on estime une extinction visuelle au premier plan de $A_V \simeq 0,8 - 1,9$. Ces calculs d'extinction sont utilisés pour mes travaux présentés dans le Chapitre 6. Dans l'ensemble, les raies de H I sont bien reproduites par le cas B de la théorie de recombinaison avec les paramètres évoqués. Cette théorie ne fait aucune supposition géométrique ou sur la composition des poussières. C'est pourquoi, les raies de H I ont aussi été comparées à un modèle basé sur Cloudy (Ferland et al. 2017) qui modélise le gaz et son émission en fonction de la profondeur dans le milieu. Ce modèle utilise les paramètres dérivés de l'ajustement des raies optiques provenant du gaz ionisé par Shaw et al. (2009) et Pellegrini et al. (2009). La comparaison permet un bon ajustement entre le modèle et les observations. Les écarts peuvent être expliqués par les hypothèses sur la distribution spatiale des poussières dans l'environnement.

Dans les spectres NIRSPEC, plusieurs raies de recombinaison de He I sont détectées et permettent également de tracer la région ionisée. Dans le spectre MIRI-MRS, la plupart de ces raies sont beaucoup plus faibles que les raies de H I et mélangées avec ces dernières. La haute résolution spatiale du JWST a permis de mettre en évidence la séparation entre les fronts d'ionisation de H et de He. Le front d'ionisation de He semble piquer 5×10^{-3} pc (ou 2,5" à la distance de Barre d'Orion) devant le front d'ionisation de H. Cette séparation est en accord avec les modèles Cloudy présentés au-dessus.

La détection dans l'infrarouge proche de l'émission des raies de fluorescence de Fe II et O I permet de tracer le front d'ionisation. Dans les spectres, nous ne remarquons pas d'augmentation de l'émission de O I vers l'étoile θ^2 Ori A (localisée à l'est de la mosaïque), suggérant que dans cette région θ^1 Ori C est la source majoritaire de rayonnement UV. Ces raies de fluorescence (O I) permettent d'estimer l'intensité du champ UV dans la région. En effet, les niveaux supérieurs de ces transitions sont excités par pompage UV donc l'intensité de ces raies est directement proportionnelle à l'intensité du champ UV (voir Annexe B). La valeur dérivée est de $G_0 = (2,2 - 7,1) \times 10^4$ au front d'ionisation. Le calcul de cette valeur est essentiel à l'analyse des résultats présentés dans les Chapitres 5 et 6. Ce résultat est en accord avec des observations précédentes provenant de l'analyse d'émission de O I et C II (Tielens & Hollenbach 1985b; Marconi et al. 1998, utilisant la raie à $1,317\ \mu\text{m}$ de O I). Ces valeurs d'intensité de champ UV peuvent être utilisées pour contraindre la géométrie de la Barre d'Orion. En effet, l'émission infrarouge totale est le produit de l'intensité du champ UV et de la surface absorbante de l'émission stellaire. Ainsi, on peut calculer cette surface et en déterminer une taille transversale de la PDR. La détermination de la surface absorbante

permet également de mesurer la distance de la Barre d'Orion à l'étoile θ^1 Ori C ($d \sim 0,27$ pc).

Finalement, dans la région ionisée, particulièrement dans l'infrarouge moyen, de nombreuses raies de structure fine des métaux (Argon, Néon, Fer, Soufre, Magnésium, Phosphore, Krypton) sont observées. De nouvelles raies ont été détectées en comparaison aux données ISO telles que Ni II, Ni III et Cl II.

Des raies du C I sont également détectées. Cette émission est tout à fait particulière car elle a un profil relativement plat sur toute la PDR avec un maximum local juste derrière le front d'ionisation, C I semble donc provenir de la région atomique. On remarque également une augmentation de l'émission au niveau du DF3. Différents mécanismes d'excitation peuvent expliquer l'émission de C I. Tout d'abord, la recombinaison radiative du carbone ionisé avec un électron ainsi que la cascade radiative suivant ce mécanisme peut expliquer l'excitation de ces niveaux. Ensuite, ces niveaux peuvent également être excités par pompage ultraviolet avec fluorescence vers les transitions observées, par une excitation par impact direct d'un électron et également par la photodissociation de CO. Ces différents mécanismes d'excitation garantissent alors que les raies de C I détectées dans le proche infrarouge peuvent être excitées non seulement dans la zone de la PDR atomique où le carbone est ionisé, mais aussi à travers la couche dans laquelle le carbone est neutre. Ces excitations permettent aussi une détection jusque dans la région moléculaire où le CO est photodissocié. Goicoechea (en préparation) présente, par ailleurs, la détection de C I avec ALMA qui semble provenir de la région moléculaire. Cependant, cette émission se situe très proche de l'émission de H₂ observée avec le JWST et est plus diffuse dans la région moléculaire. L'émission de C I n'est alors pas confinée à la transition C⁺/C/CO.

Émission du gaz moléculaire

Finalement, après avoir identifié les AIBs et l'émission du gaz ionisé, les principales raies restantes sur le spectre proviennent du gaz moléculaire. L'émission moléculaire est dominée par une forêt de raies de H₂. Dans l'ensemble du spectre NIRSpec et MIRI-MRS, nous observons des raies purement rotationnelles allant jusqu'à de niveaux très excités de H₂ ($\nu = 0, J = 3 - 21; E_{\text{up}} \sim 1\,000 - 30\,000$ K). Les intensités intégrées de H₂ détectée dans la Barre d'Orion sont répertoriés dans l'Annexe C. Les raies purement rotationnelles détectées par MIRI-MRS (0-0 S(1) - 0-0 S(8)) sont pour la plupart (jusqu'à 0-0 S(6)) peuplées par collisions alors que les autres niveaux (détectés par MIRI-MRS et NIRSpec) sont peuplés grâce au pompage UV et par la cascade radiative suivant ce phénomène. Ces niveaux se désexcitent ensuite radiativement ou collisionnellement. Des raies rotationnelles à l'intérieur d'un niveau vibrationnel sont aussi observées ($\nu = 1 - 1, J \leq 21$ et $\nu = 2 - 2, J \leq 11$). Finalement, la majorité des raies de H₂ observées avec NIRSpec proviennent de transitions rovibrationnelles détectées jusqu'à $\nu = 6$. Quelques-unes des raies rovibrationnelles $\nu = 1 - 0$ sont aussi détectées par MIRI-MRS. Les raies de H₂ sont détectées dans toute la mosaïque mais sont particulièrement intenses dans les trois fronts de dissociation. La détection et l'analyse de ces raies est particulièrement nécessaire dans le cadre de mes travaux présentés dans les Chapitres 5 et 6 puisque la distribution exacte de H₂ a un impact sur l'excitation des molécules étudiées.

Les raies de H_2 sont des outils puissants pour sonder les conditions physiques de la région émettrice ainsi que l'extinction le long de la ligne de visée dans la partie neutre. Pour cela, nous utilisons le rapport des raies 1-0 S(1) et 1-0 O(5) qui ont le même niveau supérieur. En effet, les raies de H_2 sont optiquement fines donc leur intensité est proportionnelle à la densité de colonne du niveau supérieure :

$$I_{ij} = \frac{1}{4\pi} \frac{hc}{\lambda_{ij}} A_{ij} N_{\text{up}} \quad (3.1)$$

Ainsi, le rapport de leur intensité dépend uniquement de la longueur d'onde et du coefficient d'Einstein de la transition :

$$\frac{I_{1-0S(1)}}{I_{1-0O(5)}} = \frac{A_{1-0S(1)} \lambda_{1-0O(5)}}{A_{1-0O(5)} \lambda_{1-0S(1)}} \quad (3.2)$$

Dans l'introduction, nous avons montré que l'intensité est éteinte par la poussière selon la relation :

$$I_{\text{obs}} = I \times e^{-1,086 \times \frac{A_{\lambda}}{A_V} A_V} \quad (3.3)$$

Ainsi l'extinction visuelle se calcule par la formule :

$$A_V = \log \left(\frac{I_{1-0S(1)\text{obs}} \times A_{1-0O(5)} \times \lambda_{1-0S(1)}}{I_{1-0O(5)\text{obs}} \times A_{1-0S(1)} \times \lambda_{1-0O(5)}} \right) \times \frac{1}{1,086} \frac{1}{\frac{A_{\lambda_{1-0O(5)}}}{A_V} - \frac{A_{\lambda_{1-0S(1)}}}{A_V}} \quad (3.4)$$

Dans le papier de Peeters et al. (2024), les valeurs $\frac{A_{\lambda_{1-0S(1)}}}{A_V}$ et $\frac{A_{\lambda_{1-0O(5)}}}{A_V}$ sont estimées à partir de la courbe paramétrée de Gordon et al. (2023) calculée avec un $R_V = 5,5$. L'estimation de A_V révèle que l'extinction augmente du DF3 au DF1 ($A_V(\text{DF3}) \simeq 2$, $A_V(\text{DF2}) \simeq 5$, $A_V(\text{DF1}) \simeq 10$), confirmant la géométrie démontrée par Habart et al. (2024). Ces calculs d'extinction sont utilisés pour mes travaux présentés dans le Chapitre 6. Contraindre l'extinction est particulièrement difficile puisqu'elle dépend de la composition des poussières (distribution de taille) qui comme l'a été démontré plus tôt varie en fonction de la position dans la PDR. Une analyse poussée réalisée par Meshaka et al. (en préparation) est en cours pour contraindre cette extinction. Pour cela, grâce au grand nombre de raies de H_2 détectées, ils utilisent de nombreux rapports de transition de H_2 provenant du même niveau supérieur pour ajuster une courbe d'extinction aux observations. Ses résultats sont en accord avec l'estimation de A_V déterminée par Peeters et al. (2024). Cependant, ils démontrent également une dégénérescence entre le A_V et le R_V complexifiant encore l'analyse.

Les raies de H_2 peuvent également contraindre la densité locale de l'environnement. Le rapport H_2 1-0 S(1) / H_2 2-1 S(1) est un traceur de la densité dans des PDRs denses et fortement irradiées. Dans ces conditions, l'excitation collisionnelle du niveau $v = 1$ $J = 3$ devient compétitive quand la densité augmente. Le rapport des raies 1-0 S(1) / 2-1 S(1) passe alors d'une valeur de cascade radiative pure (environ 2) à une valeur d'excitation collisionnelle (de l'ordre de 10). Ce rapport a une valeur de 3–5 à travers la mosaïque et augmente derrière

le DF3. Pour avoir une mesure quantitative de la densité, les raies de H_2 corrigées de l'extinction de l'avant-plan (mesurée avec les raies de $H I$) et de l'extinction interne de la PDR (mesurée avec les raies de H_2) ainsi que le rapport des raies H_2 de 1-0 S(1) / 2-1 S(1) observées dans les trois fronts de dissociation sont ajustés à des modèles du code PDR de Meudon (Le Petit et al. 2006). Nous estimons alors une densité de $n_H \sim 10^4 - 3,5 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ dans les trois fronts de dissociation à l'aide des raies détectées dans l'infrarouge proche. L'estimation de cette densité est toutefois assez incertaine puisqu'elle se base sur une ancienne version du Code PDR (1.5.4) qui ne prend pas en compte les derniers calculs de taux de collisions de H_2 et la mesure exacte de l'extinction reste très incertaine. Une étude menée par Meshaka et al. (en préparation) est en cours pour améliorer l'ajustement des données H_2 avec un modèle PDR. Ces travaux développent un modèle PDR isobare utilisant la dernière version du code de Meudon (7), prenant en compte un champ de rayonnement incident reproduisant le corps noir émis par θ^1 Ori C à la distance observée entre elle et la Barre d'Orion ($d \sim 0,3 \text{ pc}$). Dans ce modèle, la courbe d'extinction est choisie afin de reproduire au mieux les observations. En prenant en compte toutes les raies observées de H_2 avec un rapport signal à bruit suffisant, le modèle réalisant le meilleur ajustement se situe autour de $P_{\text{gaz}}/k_B \sim 5 \times 10^7 - 10^8 \text{ K cm}^{-3}$. Ce modèle reproduit à la fois correctement les intensités de H_2 mais également la géométrie observée de la Barre d'Orion, notamment la distance entre le front d'ionisation et les fronts de dissociation. L'estimation précise de la densité locale dans la PDR reste tout de même encore difficile et dépend de nombreux paramètres. Toutefois, nous comparerons nos résultats du Chapitre 6 avec ces valeurs (Peeters et al. 2024, Meshaka et al. en préparation).

Les raies purement rotationnelles détectées dans MIRI-MRS permettent de déterminer la température du gaz et la densité de colonne de H_2 grâce au diagramme d'excitation présenté dans la Figure 3.31.

En effet, si la distribution de H_2 suit une loi de Boltzmann, la quantité $Y = \ln(N_u/g_u)$, où N_u est la densité de colonne du niveau et g_u la dégénérescence, constitue une droite en fonction de E_{up} selon l'équation :

$$Y = \ln\left(\frac{N}{Q(T_{\text{ex}})}\right) - \frac{E_{\text{up}}}{k_B T_{\text{ex}}}, \quad (3.5)$$

Les transitions de H_2 sont optiquement minces donc la quantité Y est proportionnelle à l'intensité de la transition :

$$\frac{N_u}{g_u} = \ln\left(\frac{4\pi I}{h\nu_0 A_{ul} g_u}\right). \quad (3.6)$$

Puisque les premiers niveaux sont à l'équilibre thermodynamique local, la température d'excitation est égale à la température du gaz. Les diagrammes d'excitation dans les fronts de dissociation des premiers niveaux rotationnels sont légèrement courbés, ce qui est caractéristique d'un gradient de température. Nous pouvons tout de même extraire une température moyenne de l'environnement de $T \sim 600 - 700 \text{ K}$. De plus, l'ordonnée à l'origine du diagramme d'excitation donne une estimation de la densité de colonne qui est de l'ordre de $N(H_2) = 10^{20} - 10^{21} \text{ cm}^{-2}$. Les diagrammes d'excitation de raies rovibrationnellement excitées présentent des températures d'excitation beaucoup plus élevées de l'ordre de $T \sim 3\,000 \text{ K} \gg T_{\text{gaz}}$ dû à l'excitation par pompage UV.

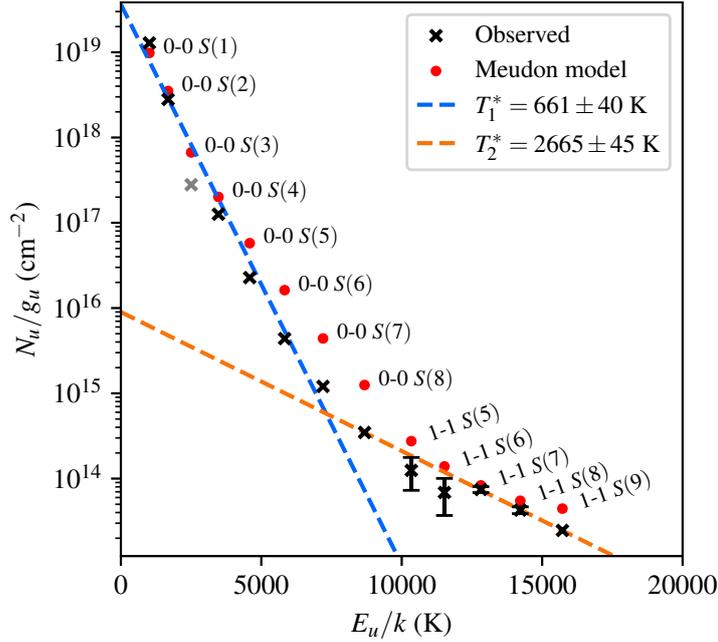


FIGURE 3.31 – Diagramme d’excitation H_2 pour DF3, avec ajustements linéaires et comparaison avec le modèle de Meudon. Croix noires : densité de colonne des populations de niveaux supérieurs dérivée des données, en fonction de l’énergie du niveau supérieur par rapport à l’état fondamental. Les barres d’erreur sont indiquées lorsqu’elles dépassent 5 % (y compris 3 % d’incertitude systématique). Cercles rouges : densités de colonne dérivées de notre modèle PDR de Meudon. Ligne bleue : ajustement incluant les lignes jusqu’à 0-0 S(7), excluant la ligne 0-0 S(3) (grise) car elle est sujette à l’extinction par les silicates autour de $10 \mu\text{m}$. Ligne orange : ajustement incluant 0-0 S(8) et 1-1 S(5) jusqu’à 1-1 S(9). Figure extraite de Van De Putte et al. (2024).

La comparaison avec des modèles du code PDR de Meudon permet de confirmer les différences d’excitation entre ces niveaux. La transition 0-0 S(1) pique à une position à laquelle la température est égale à $T = 450 \text{ K}$ alors que la température vaut $T = 600 \text{ K}$ là où piquent les transitions 0-0 S(2) et S(3). Ces valeurs sont en bon accord avec la température dérivée des observations et avec le possible gradient aperçu dans la courbure du diagramme d’excitation. Ce résultat confirme donc le fait que ces niveaux sont excités par collisions. Les raies rovibrationnellement excités piquent à des positions auxquelles la température est légèrement plus élevée $T \sim 1000 \text{ K}$ mais toujours inférieure à 3000 K . Cela souligne bien le fait que ces niveaux ne sont pas excités thermiquement mais par pompage UV. Ainsi, dans le diagramme d’excitation, nous observons le passage des niveaux excités par collisions aux niveaux excités par pompage UV autour de $J = 7 - 9$.

L’étude de Peeters et al. (2024) et Van De Putte et al. (2024) présente une première analyse de l’émission de H_2 mais une analyse plus poussée en cours dans les articles en préparation de Sidhu et al. (en préparation) et Meshaka et al. (en préparation). Sidhu et al. (en préparation) étudient la morphologie spatiale des raies de H_2 dans la PDR, les diagrammes d’excitation à différentes positions de la PDR et comment H_2 peut être utilisé pour contraindre des paramètres physiques de la Barre d’Orion (A_V , T_{gas} , $N(\text{H}_2)$...). Meshaka et al.

(en préparation) réalisent une étude poussée de la comparaison entre les données du JWST et le code PDR de Meudon afin de contraindre, à partir des modèles, la température, la densité et la pression thermique de la région observée. Ils étudient, dans ces modèles, précisément l'impact de la distribution de taille des grains sur la formation de H_2 , sur l'émission de H_2 , etc.

Finalement, dans les trois fronts de dissociations, le reste des transitions observées, parfois très faibles, provient d'autres espèces moléculaires comme CH^+ , CO, HD... Ces transitions à bas rapport signal à bruit relèvent parfois de processus d'excitation spécifiques qui peuvent être de puissants diagnostics comme présenté dans la suite de ce manuscrit.

3.2.5 Observation des disques protoplanétaires irradiés dans la région

Dans la région atomique, le long de la ligne de visée, on aperçoit également deux disques protoplanétaires d203-504 et d203-506. Le spectre du disque d203-504 étant plus bruité, l'analyse de d203-506 a été beaucoup plus avancée que celle de d203-504. La vue d'ensemble de d203-506 est décrite dans Berné et al. (2024) et celle de d203-504 dans Schroetter et al. (en préparation).

3.2.5.1 d203-506

La Figure 3.32 présente la position du disque et une vue schématique de sa structure. Le disque d203-506 est photoévaporé par le champ UV provenant de l'amas du Trapèze, ce qui crée une enveloppe de gaz tout autour du disque. Cette enveloppe est particulièrement brillante en H_2 . Le disque protoplanétaire est caché par le vent photoévaporé dans les données de spectroscopie et est vu en absorption dans les données d'imagerie visible/proche-infrarouge. En travers du disque, est détecté un jet brillant en $[Fe II]$. Ce jet interagit avec le vent photoévaporé et produit une tache d'émission brillante dans la partie nord est du disque. Ce disque ne présente pas de front d'ionisation donc seulement des photons ultraviolet lointain atteignent le disque.

La Figure 3.33 permet de révéler la structure du disque selon plusieurs traceurs. Le disque est vu en absorption sur les transitions $H\alpha$ observées avec le *Hubble Space Telescope* et $Pa\alpha$ avec le JWST mais en émission avec le continuum de poussière et l'émission de HCN observés par ALMA. Le vent photoévaporé est visible dans l'émission de H_2 et des AIBs observés par le JWST mais également dans l'émission de HCO^+ détecté par ALMA. Finalement, le jet est particulièrement visible dans l'émission de $[Fe II]$.

Les observations ALMA ont été particulièrement utiles pour mesurer les caractéristiques physiques du disque. En mesurant l'émission du continuum de poussières, le rayon estimé du disque de poussières est de $R_d = 98 \pm 1$ au et une épaisseur de $E_d = 54 \pm 1$ au. En utilisant la carte de HCN, le rayon du disque de gaz est estimé à $R_g = 124$ au. L'émission continuum observée par ALMA permet également, en supposant un rapport gaz sur poussières de 100, d'estimer la masse du disque d'environ $M_d = 4,4 - 18,7 M_{Jup}$ où $M_{Jup} = 1,87 \times 10^{27}$ kg. Les observations de HCN par ALMA ont permis de réaliser une estimation de la

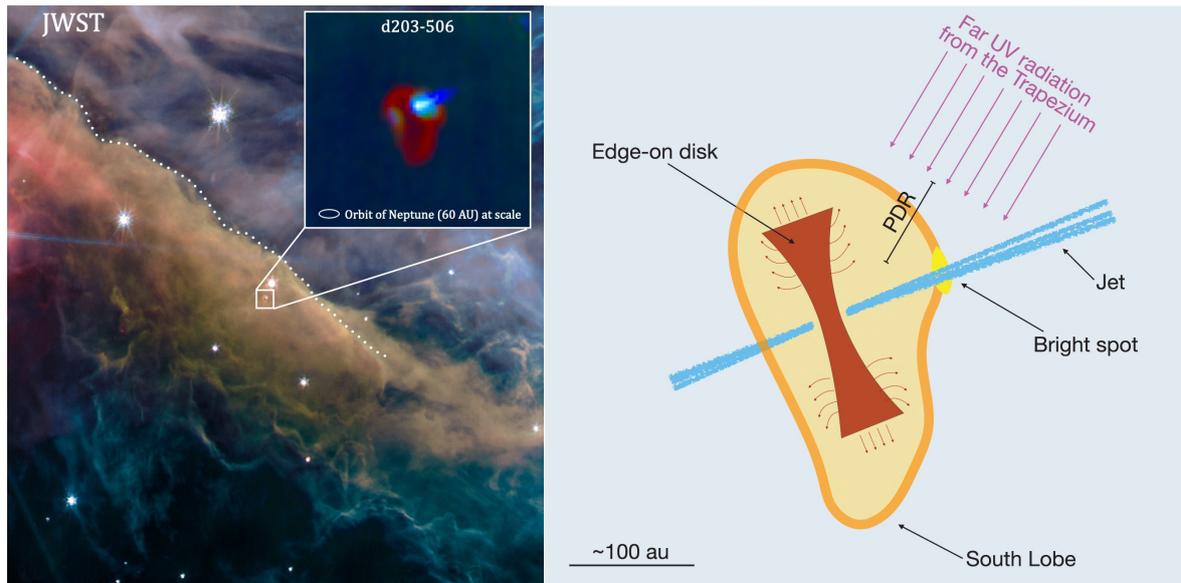


FIGURE 3.32 – (Gauche) Vue zoomée du disque d203-506. Image composite du filtre à $2,12 \mu\text{m}$ qui trace l'hydrogène moléculaire (en rouge), du filtre à $1,64 \mu\text{m}$ qui trace les raies d'émission du [Fe II] (en bleu) et du filtre à large bande à $1,40 \mu\text{m}$ qui trace la lumière diffusée. (Droite) Vue schématique du disque d203-506. Le marron est le disque de gaz moléculaire froid qui apparaît en absorption dans les images NIRCcam. Les flèches marron indiquent que du gaz moléculaire s'échappe de ce disque, qui alimente le flux de photoévaporation. Ce dernier produit une enveloppe autour du disque (en jaune clair), qui est délimitée par le front de dissociation (en orange), où l'hydrogène moléculaire est dissocié en atomes d'hydrogène par les photons FUV (flèches roses) provenant de l'amas du Trapèze. Le bleu montre le jet de l'étoile centrale, qui correspond à l'émission de [Fe II]. Le jet interagit avec l'enveloppe, produisant une zone d'émission brillante (en jaune). Figure extraite de Berné et al. (2024).

masse de l'étoile, qui n'est pas visible dans les observations, par des études de dynamique du disque. Les vitesses de rotation Keplerienne permettent de prédire que la masse de l'étoile est inférieure à $M_* < 0,3 M_\odot$.

Le spectre dans l'infrarouge proche et moyen du JWST présente également une composition chimique très riche avec des caractéristiques similaires à ce qui est observé dans les différents environnements de la région de photodissociation comme observé dans les Figures 3.26 et 3.27. On observe alors de nombreuses raies rotationnelles et rovibrationnelles de H_2 dans le vent photoévaporé. Les bandes aromatiques sont également observées avec un fort continuum augmentant à hautes longueurs d'onde. De nombreuses raies moléculaires sont observées dans la région telle que provenant de CO, CH^+ et OH.

Tout comme pour la région de photodissociation, l'étude de l'émission des raies de fluorescence de O I permettent de contraindre l'intensité du champ UV qui est équivalent à celle observée au front d'ionisation $G_0 \sim 2 \times 10^4$. Cette valeur est en accord avec des considérations géométriques de la position du disque par rapport à l'étoile excitatrice. d203-506 est situé à environ 0,25 pc (en distance projetée) de l'étoile θ^1 Ori C. En utilisant un spectre d'une étoile O7 et en appliquant une dilution sphérique du champ UV à la distance séparant

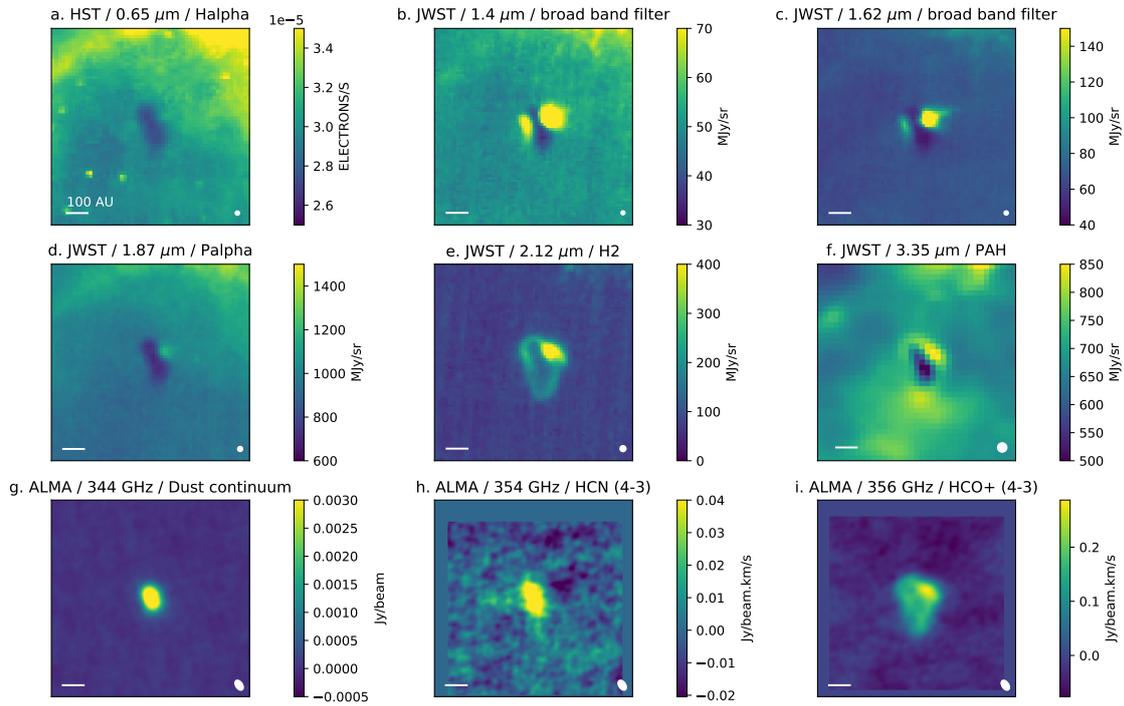


FIGURE 3.33 – Images multi-longueurs d’onde du disque d203-506. (a) Image du HST dans un filtre $H\alpha$ (O’Dell & Wen 1994). (b) à (c) Images du JWST dans le proche infrarouge. (g à i) Images submillimétriques d’ALMA. Dans tous les panneaux, l’ellipse remplie de blanc indique la taille et la forme de la fonction d’étalement ou du faisceau reconstruit du télescope et la barre horizontale représente 100 au. Figure extraite de Berné et al. (2024).

l’étoile et le disque, nous obtenons une valeur de $G_0 = 4 \times 10^4$. Au vu de la position du disque dans la Barre d’Orion, d203-506 pourrait également être irradié par l’étoile θ^2 Ori A appartenant à un amas proche de celui du Trapèze. La distance projetée entre θ^2 Ori A et d203-506 est de 0,08 pc. En effectuant le même raisonnement, nous dérivons un champ ultraviolet de $G_0 = 8 \times 10^4$. Puisque les distances entre les étoiles et le disque sont certainement plus grandes que les distances projetées sur le plan du ciel, les intensités calculées ici sont des valeurs limites supérieures. Ainsi, la valeur limite supérieure du champ ultraviolet arrivant sur le disque est de $G_0 = 1,2 \times 10^5$. Ces estimations du champ UV seront utilisées dans mes travaux présentés Chapitre 5.

La position exacte de d203-506 le long de la ligne de visée est difficile à contraindre. Il est donc difficile de savoir laquelle des deux étoiles domine l’irradiation de d203-506. Le fait que ce disque ne présente pas de front de dissociation pourrait faire penser que celui-ci est enfoui dans la région atomique de la Barre d’Orion. De plus, la vitesse dans le référentiel au repos local (*local standard of rest*, LSR) de la raie d’émission de C I est de $v_{\text{LSR}}(\text{C I}) = 9,5 \pm 0,1 \text{ km s}^{-1}$ (Goicoechea et al. 2024) qui est cohérente avec le fait que d203-506 est enfoui dans

la Barre d'Orion. Cependant, l'extinction mesurée à partir des raies de H_2 dans le disque est proche de zéro (Peeters et al. 2024), suggérant que ce disque n'est en fait pas enfoui. L'étude de Haworth et al. (2023b) réalisée avec l'instrument MUSE du VLT avance l'argument que d203-506 est vu en silhouette sur l'émission de $H\alpha$ et de $S\ II$ à $6\ 732\ \text{\AA}$ du gaz ionisé, ce qui implique qu'il doit être en avant-plan de cette région ionisée. Pour expliquer l'absence du front d'ionisation, d203-506 serait alors placé dans une région atomique et donc derrière un deuxième front de dissociation (*Near Ionised Layer*, NIL) plus proche de l'observateur. La position de d203-506, d'après Haworth et al. (2023b), est présentée dans la Figure 3.34. La vitesse LSR du NIL est très différente de celle de d203-506 $v_{\text{LSR}} = -12 \pm 2\ \text{km}^{-1}$ (O'Dell et al. 2020). Cela montre que cette région n'est certainement pas le lieu de naissance de d203-506 qui pourrait s'être formé dans un globule moléculaire (Goicoechea et al. 2020) ou avoir migré (e.g. Winter et al. 2019).

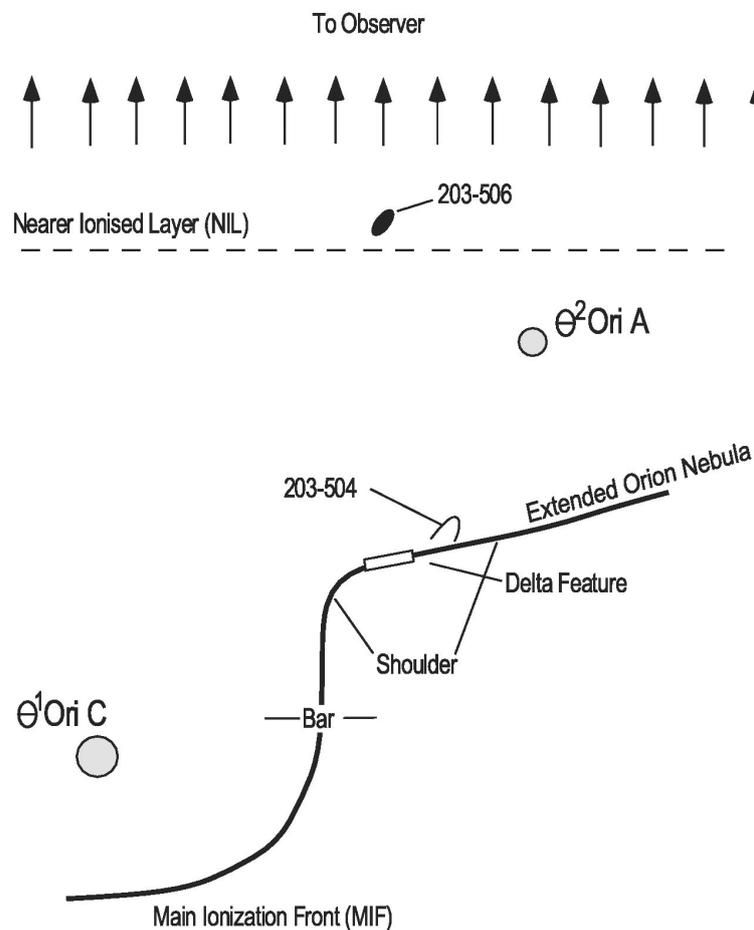


FIGURE 3.34 – Schéma (pas à l'échelle) de la région de Huygens. θ^1 Ori C se trouve à l'intérieur d'une surface concave. L'orientation de cette surface le long de la ligne de visée correspond au front d'ionisation de la Barre d'Orion. Les deux disques d203-504 et d203-506, se trouvent dans la direction de la région de l'épaule, où le rayonnement de θ^1 Ori C commence à être éteint. Le front d'ionisation proche (*Near Ionised Layer*, NIL) se trouve quelque part au premier plan de θ^1 Ori C, mais la distance exacte n'est pas bien connue, en particulier près de θ^2 Ori A (O'Dell et al. 2020).

La comparaison des 30 raies rovibrationnelles détectées avec le JWST et un code thermo-chimique auto-cohérent, le code PDR de Meudon (Le Petit et al. 2006), a permis de contraindre la densité du vent photoévaporé. Le modèle permettant le meilleur ajustement avec les observations présente une densité de $n_{\text{H}} = 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Cependant, une gamme de densité de $n_{\text{H}} = 5 \times 10^5$ à 10^7 cm^{-3} permet d'obtenir de bons résultats lors de la comparaison. Les estimations de densité que je réalise dans les Chapitres 5 et 6 seront comparées à cette valeur.

Le rayon d'émission de H_2 est de $R_{\text{H}_2} = 132 \pm 13$ au supérieur au rayon de gravitation. Cela implique que la matière dans cette couche n'est pas liée au disque par gravitation et s'échappe vers l'extérieur. Tous ces résultats permettent de contraindre le taux de perte de masse de cet objet qui est d'environ $\dot{M} = 1,4 \times 10^{-7} - 4,6 \times 10^{-6} M_{\odot} \text{ an}^{-1}$. Cette valeur est en accord avec des modèles 1D de photoévaporation externe. Puisque le gaz est la matière première dans la formation des planètes, cette photoévaporation, arrachant le gaz au disque, pourrait limiter le temps de formation des planètes. Ici, le temps de déplétion du disque est estimé à 0,13 million d'années, ce qui est plus court que le temps de formation d'une géante gazeuse.

Des raies de C I sont également détectées dans ce disque avec le JWST et ALMA. La raie de C I à $609 \mu\text{m}$ détectée par ALMA, dû à sa faible densité critique $n_c \sim 10^3 \text{ cm}^{-3}$, est optiquement fine et thermalisée dans d203-506. Ainsi, elle est excitée par collisions et dépend fortement de la densité de colonne du carbone atomique. À partir de l'intensité de la raie, nous pouvons déterminer l'abondance du carbone atomique dans la phase gazeuse du disque. Celle-ci est similaire à l'abondance du carbone interstellaire, c'est-à-dire $x_{\text{C}} = 1,4 \times 10^{-4}$. Ce résultat montre que dans d203-506, nous n'observons pas de déplétion du carbone et que l'abondance du carbone atomique est similaire à celle du nuage parent (Goicoechea et al. 2024). Puisque cette déplétion évolue avec le temps, cela implique que le disque est relativement jeune. L'émission de C I à $609 \mu\text{m}$ pique juste derrière l'émission de H_2 au front de dissociation où la température vaut environ 700 K, ainsi le carbone atomique trace essentiellement les régions chaudes du disque. L'absence de déplétion d'espèces carbonés volatiles ouvre la possibilité d'une chimie chaude produisant de nombreux hydrocarbures. Les processus induits par le rayonnement UV pourraient alors produire une complexité d'hydrocarbures similaire à ce qui est détecté dans les PDRs interstellaires (*e.g.*, Cuadrado et al. 2015), dans les régions externes du disque.

3.2.5.2 d203-504

Le disque protoplanétaire d203-504 est situé dans le même champ de vue que la nébuleuse d'Orion, à environ 700 au (soit $1,7''$ à 414 pc) au nord du disque protoplanétaire d203-506 (O'Dell & Wen 1994) (voir Figure 3.25). Contrairement au disque d203-506, il est essentiellement irradié par θ^2 Ori A (Bally et al. 2000; O'Dell et al. 2017). Ce disque est également fortement irradié avec un champ UV incident d'environ $G_0 = 8 \times 10^4$ et subit également une forte photoévaporation estimée à $\dot{M} \sim 2 - 3 \times 10^{-7} M_{\odot} \text{ an}^{-1}$ (Haworth et al. 2023b; Aru et al. 2024). Le disque de d203-504 est plus petit ($r_{\text{d}} \sim 30$ au) et moins massif ($M_{\text{d}} \sim 1 - 6 M_{\text{Jup}}$) que d203-506 (Schroetter et al. en préparation).

Étonnamment, le spectre de d203-504 est radicalement différent de celui de d203-506. Tout d'abord, il présente un front d'ionisation, le localisant alors dans une région ionisée contrairement à d203-506. Ensuite, si certaines raies sont communes aux deux disques (comme CO, H I, H₂, raie du gaz ionisé...), beaucoup d'espèces détectées dans d203-506 ne le sont pas dans d203-504 (OH, CH⁺...). En revanche, l'eau qui n'était pas détectée dans d203-506 est détectée en absorption/émission dans d203-504 (Schroetter et al. en préparation). De plus, contrairement à l'autre disque, d203-504 présente plusieurs bandes des silicates prononcées autour de 10 μm et autour de 20 μm .

Résultats

Chapitre 4

L'émission prompte de l'hydroxyle : un traceur des régions denses et irradiées

4.1	Introduction	141
4.1.1	Contexte	141
4.1.2	Méthode d'analyse	142
4.1.3	Organisation de l'article	143
4.2	Modèles	143
4.2.1	Modèle thermochimique avec le code PDR de Meudon	143
4.2.2	Excitation de OH	145
4.3	Résultats	147
4.3.1	Modèle typique à haute pression et haut champ UV	147
4.3.2	Effets de la pression thermique et du champ UV	154
4.4	Application à la Barre d'Orion et à d'autres environnements	158
4.4.1	Barre d'Orion	158
4.4.2	Application à d'autres environnements	165
4.5	Conclusion	166
4.A	Annexes	167
4.A.1	Chimie de H ₂ O	167
4.A.2	Chimie de OH	171

Ce chapitre est basé essentiellement sur une traduction de l'article :

"OH mid-infrared emission as a diagnostic of H₂O UV photodissociation — II. Application to interstellar photodissociation regions."

M. Zannese, B. Tabone, E. Habart, F. Le Petit, E.F. van Dishoeck, E. Bron
Astronomy & Astrophysics, Volume **671**, id.A41 (2023)

L'introduction a été modifiée pour mieux intégrer le chapitre dans le contexte du manuscrit de thèse.

OH mid-infrared emission as a diagnostic of H₂O UV photodissociation

II. Application to interstellar photodissociation regions

M. Zannese¹, B. Tabone¹, E. Habart¹, F. Le Petit², E. F. van Dishoeck^{3,4}, and E. Bron²

¹ Université Paris-Saclay, CNRS, Institut d'Astrophysique Spatiale, 91405 Orsay, France
e-mail: marion.zannese@universite-paris-saclay.fr

² LERMA, Observatoire de Paris, PSL Research University, CNRS, Sorbonne Université, 92190 Meudon, France

³ Leiden Observatory, Leiden University, 2300 RA Leiden, The Netherlands

⁴ Max-Planck Institut für Extraterrestrische Physik (MPE), Giessenbachstr. 1, 85748 Garching, Germany

Received 7 July 2022 / Accepted 17 October 2022

ABSTRACT

Context. Water photodissociation in the 114–143 nm UV range forms excited OH which emits at mid-infrared (MIR) wavelengths via highly excited rotational lines. These lines have only been detected with *Spitzer* in proto-planetary disks and shocks. Previous studies have shown that they are a unique diagnostic for water photodissociation. Thanks to its high sensitivity and angular resolution, the *James Webb* Space Telescope (JWST) could be able to detect them in other environments such as interstellar photodissociation regions (PDRs).

Aims. Our goal is to predict OH MIR lines for a large range of thermal pressures and UV fields in PDRs.

Methods. We use the Meudon PDR Code to compute the thermal and chemical structure of PDRs. In order to predict the emerging spectrum of OH, we amended the code to include prompt emission induced by H₂O photodissociation between 114 and 143 nm. We performed a detailed study of the influence of thermal pressure ($P_{\text{th}}/k = n_{\text{H}}T_{\text{K}}$) and UV field strength on the integrated intensities and their detectability with the JWST.

Results. OH MIR emission is predicted to originate very close to the H⁰/H₂ transition and is directly proportional to the column density of water photodissociated in that layer. Because gas-phase neutral–neutral reactions forming water require relatively high temperatures ($T_{\text{K}} \gtrsim 300$ K), the resulting OH MIR lines are primarily correlated with the temperature at this position, and are therefore brighter in regions with high pressure. This implies that these lines are predicted to be only detectable in strongly irradiated PDRs ($G_0^{\text{incident}} > 10^3$) with high thermal pressure ($P_{\text{th}}/k \gtrsim 5 \times 10^7$ K cm⁻³). In the latter case, OH MIR lines are less dependent on the strength of the incident UV field. The detection of such lines in PDRs such as the Orion bar – which should be possible – is also investigated and we show that the line-to-continuum ratio could be a major limitation for detection because of instrumental limitations.

Conclusions. OH MIR lines observable by JWST are a promising diagnostic for dense and strongly irradiated PDRs and proplyds. Their intensities are directly proportional to the amount of water photodissociated and they are therefore an indirect but sensitive probe of the gas temperature at the H⁰/H₂ transition.

Key words. photon-dominated region – ISM: molecules – molecular processes – astrochemistry – stars: formation – infrared: ISM

1. Introduction

Photodissociation regions (PDRs) are places where radiative feedback is dominant, with intense stellar far-ultraviolet (FUV) radiation playing a dominant role in the physics and chemistry (for a review, see e.g., Hollenbach & Tielens 1999; Wolfire et al. 2022). Stellar feedback is one of the major mechanisms that limit star formation (e.g., Inoguchi et al. 2020) by contributing to dispersal of the cloud due to gas heating and addition of angular momentum. Studying these regions is therefore essential in order to gain a better understanding of star formation and evolution of the interstellar matter. As a consequence of the intense UV field (up to a few 10⁵ in units of the Mathis field corresponding to 1.9×10^{-3} erg s⁻¹ cm⁻², Mathis et al. 1983), PDRs act as a cradle of very active chemistry, which is even more enhanced in dense star forming regions (with densities of around $n_{\text{H}} \sim 10^6$ cm⁻³). Moreover, emission from PDRs, which reprocess a significant part of the radiation energy emitted by

young stars, dominates the infrared (IR) spectra from the galaxies in which they are located. It is therefore crucial to understand how the observed mid-infrared (MIR) emission is linked with physical conditions, and how these observations can constrain astrophysical environments.

The study of interstellar PDRs, such as the Orion Bar, NGC 7023, or the Horsehead nebula, is also important for understanding the still unknown UV-driven processes in other interstellar and circumstellar media. Observations and models of planetary nebulae indicate that a large fraction of the gas ejected by evolved stars goes through a PDR phase before being injected into the interstellar medium (ISM; Hollenbach & Natta 1995; Bernard-Salas & Tielens 2005). Infrared spectroscopy can provide information on the initial physical and chemical properties of the PDR phase (e.g., Bernard-Salas et al. 2009; Cox et al. 2016) and probe the photo-chemical evolution of molecules, nanoparticles, and grains. Dense and highly irradiated PDRs are also present in the FUV-illuminated surfaces of protoplanetary

4.1 Introduction

4.1.1 Contexte

Le Chapitre 2 a démontré l'importance de l'étude des régions de photodissociation (PDR) puisqu'elles sont l'endroit où la rétroaction radiative domine. Leur étude est donc essentielle pour mieux comprendre la formation des étoiles et l'évolution de la matière interstellaire. Nous avons également montré dans le Chapitre 2 que les PDRs, en conséquence du champ ultraviolet (UV) intense (jusqu'à quelques $G_0 = 10^5$), servent de berceau à une chimie très active et peuvent être utilisées comme un véritable laboratoire interstellaire pour comprendre les processus induits par le rayonnement UV dans de nombreux milieux inter- et circumstellaires. En effet, une grande partie du gaz éjecté par les étoiles évoluées passe par une phase PDR avant d'être injectée dans le milieu interstellaire (Hollenbach & Natta 1995; Bernard-Salas & Tielens 2005) et des PDRs denses et fortement irradiées sont également présentes sur les surfaces des disques protoplanétaires illuminées par rayonnement ultraviolet lointain (FUV) (*e.g.*, Visser et al. 2007; Woitke et al. 2009). La spectroscopie infrarouge (IR) peut fournir des informations sur les propriétés physiques et chimiques des PDRs (*e.g.*, Bernard-Salas et al. 2009; Cox et al. 2016) et sonder l'évolution photochimique des molécules, des nanoparticules et des grains.

Parmi toutes les différentes raies dans l'IR moyen, les raies de OH rotationnellement excitées dans la gamme $\lambda = 9 - 15 \mu\text{m}$ apparaissent comme un diagnostic prometteur pour dévoiler les processus induits par les UV dans les PDRs. En effet, le champ UV incident sur le nuage conduit à la photodissociation de H_2O qui produit principalement des molécules de OH dans différents états quantiques. Il est intéressant de noter que lorsque la photodissociation est provoquée par des photons de courtes longueurs d'onde ($114 \leq \lambda \leq 143 \text{ nm}$, c'est-à-dire via l'état \tilde{B} de H_2O), OH est formé dans des états fortement rotationnellement excités ($\sim 40\,000 \text{ K}$, correspondant à $N > 35$, van Harrevelt & van Hemert 2000b). La désexcitation ultérieure de ces OH naissants, via une cascade radiative, produit des raies dans l'IR moyen, un processus appelé "émission prompt". Une modélisation plus poussée à l'aide d'un modèle à zéro dimension montre que les flux de raies donnent un accès unique à la quantité d'eau photodissociée par unité de temps (Tabone et al. 2021). Par conséquent, dans les PDR, les raies de OH dans l'IR moyen pourraient constituer un diagnostic unique pour contraindre les conditions physiques auxquelles la quantité d'eau photodissociée est sensible, typiquement la température à la transition H^0/H_2 . Bien que des études antérieures aient dérivé les densités de colonne de H_2O en utilisant les raies d'émission observées par *Herschel* (*e.g.*, Choi et al. 2014; Putaud et al. 2019), ces données sondent principalement les régions froides de la PDR où H_2O est très faiblement photodissocié. Par conséquent, ces derniers résultats donnent accès à des contraintes différentes de celles provenant de l'émission de OH dans l'infrarouge moyen. Jusqu'à présent, ces raies de OH rotationnellement excitées par la rotation n'ont été détectées avec *Spitzer* que dans les disques protoplanétaires et les chocs protostellaires puissants (*e.g.*, Tappe et al. 2008, 2012; Carr & Najita 2014). Dans les PDRs et les proplyds, seules les raies de OH moins excitées ($E_{\text{up}}/k \sim 100\text{-}300 \text{ K}$), qui sont plus probablement excitées par des collisions, ont été détectées dans l'IR lointain (*e.g.* Goicoechea et al. 2011; Parikka et al. 2018). Par conséquent, la détectabilité et le potentiel des raies de OH dans l'IR moyen dans les PDRs nécessitent l'utilisation d'une modélisation

détaillée.

Ce Chapitre présente alors mes travaux réalisés sur la modélisation détaillée du gaz dans les PDRs et plus précisément sur la modélisation de l'émission prompte de OH. Cette étude a été réalisée antérieurement à la réception des premières données du JWST afin de préparer leur analyse, s'inscrivant particulièrement dans l'attente des observations de deux programmes : l'*Early Release Science PDRs4All* (1288) (Berné et al. 2022) se concentrant sur la Barre d'Orion et le GTO "*Physics and Chemistry of PDR Fronts*" (1192) axé sur la nébuleuse de la Tête-de-Cheval et NGC-7023. Jusqu'à présent, la résolution spatiale atteinte dans le domaine de l'IR moyen (*Spitzer*, ISO...) était trop limitée pour résoudre la transition nette entre le gaz diffus ionisé chaud et le gaz dense moléculaire froid. La sensibilité était également trop basse pour détecter des raies d'émission très faibles. L'arrivée du *James Webb Space Telescope (JWST)*, avec sa grande sensibilité et résolution spatiale, a appelé à prédire les émissions d'espèces pouvant être présentes dans les PDRs mais jusqu'alors non détectées (trop faibles ou localisées). L'émission prompte de OH étant détectée dans des disques et des chocs protostellaires, nous avons voulu étudier la capacité de ces PDRs (Barre d'Orion, Nébuleuse de la Tête-de-Cheval et NGC-7023) à produire cette émission puisqu'elles possèdent les conditions essentielles à ce processus (champ ultraviolet intense et haute température pour produire de l'eau). Pour ce faire, j'ai étudié l'impact des variations physiques (pression du gaz et intensité du champ de rayonnement) sur l'émission de OH provenant de la photodissociation afin de prédire la détectabilité de celle-ci dans les différentes régions. Si cette étude s'est concentrée sur la modélisation dans les PDRs, ses résultats sont adaptables à différents objets astrophysiques (disques, jets, protoétoiles...) tant que la microphysique ne diffère pas trop de celle d'une PDR.

4.1.2 Méthode d'analyse

Pour réaliser ce projet, j'ai utilisé le code PDR de Meudon que je décris plus précisément dans la Section 4.2.1. Celui-ci permet de calculer la structure d'une PDR de façon auto-cohérente en prenant comme paramètres d'entrée la pression thermique du gaz et l'intensité du champ de rayonnement. L'émission prompte de OH n'étant pas dans la version 1.5.4 du code, j'ai d'abord travaillé en retraitant les sorties du code PDR de Meudon avec le code GROSBETA, modèle à zéro dimension prédisant l'émission d'une molécule et dont l'émission prompte de OH avait déjà été implémentée par Tabone et al. (2021) se basant sur les travaux de van Harrevelt & van Hemert (2000b). En effet, le code GROSBETA, à lui seul, ne peut pas prédire le spectre de OH en fonction des paramètres physiques du nuage comme la densité ou l'intensité du champ de rayonnement UV. Calculant uniquement l'excitation de OH et non la chimie, il peut uniquement prédire ce spectre pour un certain taux de formation de OH par photodissociation de l'eau. Or ce taux de formation dépend des conditions physiques du nuage. Le code PDR, calculant de façon auto-cohérente la chimie, peut alors calculer ce taux de formation. À partir de cette sortie, le code GROSBETA pouvait alors calculer le spectre exact de OH en fonction de ces paramètres physiques. A la suite de ce travail, Benoît Tabone a implémenté de façon auto-cohérente le processus d'émission prompte dans le code PDR et Franck Le Petit a implémenté de nouveaux taux de formation état-état de OH. J'ai alors fait tourner ce nouveau code pour pouvoir prédire le spectre de l'émission prompte de OH sans

utiliser GROSBETA.

Lors de ce travail, j'ai également comparé la modélisation du gaz réalisé avec le code PDR avec des modèles analytiques que je présente dans l'Annexe 4.A.1. Ces modèles analytiques se basent sur la cinétique chimique considérant uniquement les taux thermiques. Nous montrons alors que les modèles analytiques sont suffisants pour reproduire qualitativement les abondances de H_2O et de OH à un ordre de grandeur près. Ils sont également suffisants pour contraindre les processus dominants de formation entre les réactions neutre–neutre et les réactions ion–neutre à partir des conditions physiques du milieu (température et intensité du champ de rayonnement).

Ainsi, dans cette étude, nous mettons en évidence la force du code PDR pour prédire à la fois l'impact des conditions physiques du nuage sur l'intensité des raies de OH mais également la variation spatiale de leur émission au sein de la PDR. L'utilisation du code PDR permet une vision globale de la structure de la PDR et donc nous permet de mieux comprendre et comparer l'importance des éléments essentiels à la production de raies de OH (température du gaz, abondance de l'eau, intensité du champ de rayonnement...). Les modèles analytiques ne permettent pas une analyse aussi avancée. Cependant, ils peuvent être utiles pour réaliser des prédictions rapides.

4.1.3 Organisation de l'article

Dans cet article, nous prédisons l'intensité des raies de OH dans l'IR moyen dans les PDRs en calculant la chimie, l'équilibre thermique et l'excitation de OH de manière cohérente à l'aide du code PDR de Meudon. Nous étudions ensuite comment les paramètres physiques clés d'une PDR – à savoir, dans notre cadre de modélisation, la pression thermique et l'intensité du champ UV incident – affectent les intensités. L'article est organisé comme suit. Dans la Section 4.2, nous résumons les principaux ingrédients du code PDR de Meudon et les mises à jour effectuées pour modéliser l'émission prompte de OH . Dans la Section 4.3, nous présentons nos principaux résultats sur la chimie de H_2O et OH et sur les raies de OH dans l'IR moyen qui en résultent pour une grille de modèles. Dans la Section 4.4, notre modèle est appliqué à la Barre d'Orion où nous discutons de leur détectabilité avec le JWST en prenant en compte le continuum, les bandes et les autres raies. Enfin, nous discutons de la détectabilité des raies de OH dans l'infrarouge moyen dans d'autres environnements. Nos principaux résultats sont résumés dans la Section 4.5.

4.2 Modèles

4.2.1 Modèle thermochimique avec le code PDR de Meudon

Dans ce travail, nous avons calculé les profils de densité de H_2O et OH et l'intensité du champ UV local en fonction de la profondeur dans la PDR en utilisant le code PDR de Meudon.

don (version 1.5.4¹, Le Petit et al. 2006). Le code simule la structure thermique et chimique du gaz de manière auto-cohérente, en considérant une géométrie 1D et un état stationnaire, dans une couche de gaz et de poussière irradiée parallèle au plan. Ce code prend en entrée la forme du champ UV incident. Nous utilisons ici la prescription de Mathis et al. (1983) pour la grille de modèles (voir Section 4.3), et un champ de rayonnement représentatif d'une étoile O7 pour notre application à la Barre d'Orion (voir Section 4.4). Le code inclut l'atténuation progressive du champ UV due à l'extinction des grains et du gaz. Dans ce travail, nous utilisons une courbe d'extinction galactique moyenne avec la paramétrisation de Fitzpatrick & Massa (1988) pour la grille de modèles (voir Section 4.3) et une courbe d'extinction plus plate pour la Barre d'Orion (voir Section 4.4 pour plus de détails). La chimie de la PDR est calculée en prenant en compte des centaines d'espèces et des milliers de réactions chimiques. L'excitation de plusieurs espèces clés est prise en compte dans le calcul du bilan thermique car le refroidissement repose sur l'émission de raies. L'effet photoélectrique et le couplage thermique entre le gaz et la poussière sont également pris en compte dans le bilan thermique.

Dans cet article, nous supposons que la PDR est isobare. Il s'agit d'une hypothèse de départ appropriée car plusieurs études montrent que les modèles isobares reproduisent de façon satisfaisante l'émission observée du gaz moléculaire chaud dans les PDRs interstellaires telles que la Tête-de-Cheval, NGC-7023 et la Barre d'Orion (*e.g.*, Habart et al. 2005; Allers et al. 2005; Joblin et al. 2018). Cependant, la pression magnétique et la pression de turbulence peuvent être importantes dans les PDRs (*e.g.*, van Dishoeck & Black 1986; Pellegrini et al. 2009; Pabst et al. 2020) et la pression thermique peut ne pas dominer. Par exemple, dans la Barre d'Orion, la pression turbulente non thermique est du même ordre de grandeur que la pression thermique du gaz (voir la Table 1 de Goicoechea et al. 2016). Par conséquent, les gradients de densité et de température calculés dans les modèles isobares peuvent ne pas correspondre entièrement à la structure du gaz dans les PDRs. Cependant, pour estimer l'émission des raies de OH dans l'IR moyen et étudier comment elle varie en fonction de l'excitation et des conditions physiques (c'est-à-dire la température et la densité), cette hypothèse est valable en première approximation. Cette étude est basée sur une grille de modèles avec une pression thermique allant de $P_{\text{th}}/k_B = 10^5$ à 10^9 K cm⁻³ ($P_{\text{th}}/k_B = n_{\text{H}}T_{\text{K}}$) et une intensité du champ FUV de $G_0^{\text{incident}} = 10^2$ à 10^5 en unités du champ de rayonnement interstellaire de Mathis et al. (1983). Tous les paramètres utilisés dans les modèles sont résumés dans la Table 4.1. Un modèle typique avec $P_{\text{th}}/k_B = 10^8$ K cm⁻³ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$ (paramètres typiques des PDRs très excitées telles que la Barre d'Orion) est adopté pour présenter les résultats. Dans les paragraphes suivants, nous passons en revue les processus microphysiques qui sont essentiels pour la modélisation de la couche moléculaire chaude d'où provient l'émission de OH dans l'IR moyen.

Dans le code PDR de Meudon, les niveaux rotationnels et rovibrationnels de H₂ sont calculés, y compris la (dés)excitation collisionnelle avec H (Wrathmall & Flower 2007), He, H₂ (Flower & Roueff 1998, 1999) et H⁺, ainsi que le pompage radiatif UV des raies électroniques suivi de la fluorescence. Pour notre grille de modèles, nous utilisons l'approximation FGK (Federman et al. 1979) qui permet un calcul rapide du transfert radiatif UV impliquant des effets d'auto-écranage. Les niveaux de H₂ sont peuplés en tenant compte de l'excitation due à la formation à la surface des grains. Pour la formation à la surface des poussières, nous supposons une distribution de Boltzmann à une température équivalente à un tiers de

1. Version publique d'août 2021 : https://pdr.obspm.fr/pdr_download.html

l'énergie de dissociation de H_2 (Black & van Dishoeck 1987). Comme le rapport d'embranchement de la distribution de l'énergie de dissociation de H_2 est inconnu parce qu'il dépend des conditions dans la PDR et de la nature des grains, on suppose que la distribution suit une loi d'équipartition. Les deux tiers restants de l'énergie de formation de H_2 sont répartis entre l'excitation des grains et l'énergie cinétique des molécules libérées.

La version du code utilisée dans cet article comprend un réseau chimique étendu. Cependant, la formation des molécules de H_2O n'est calculée qu'en tenant compte de la chimie en phase gazeuse et la formation sur les grains est négligée. Comme cette étude se concentre sur la photodissociation de l'eau dans les régions chaudes, le seul mécanisme de formation intéressant ici est la formation en phase gazeuse, ce qui n'influence donc pas les résultats. Les taux de réaction chimique sont calculés à l'aide de coefficients de vitesse thermiques, sauf pour la formation de CH^+ , SH^+ , OH et H_2O . Par exemple, une chimie état-état est incluse pour la formation de OH et de H_2O à la suite de réactions avec H_2 comportant une barrière énergétique (voir plus de détails dans la Section 4.3.1.1 avec les Équations (4.3) et (4.4)). Cela permet de prendre en compte l'énergie interne de H_2 dans le coefficient de vitesse et cette énergie peut être utilisée pour surmonter une barrière d'activation. En ce qui concerne la réaction $OH + H_2(v, J)$, la chimie état-état est prise en compte en remplaçant l'énergie d'activation par la différence entre l'énergie d'activation et l'énergie rovibrationnelle de H_2 (e.g. Tielens & Hollenbach 1985a; Sternberg & Dalgarno 1995). Cette approche peut ne pas être tout à fait exacte. Cependant, les coefficients de vitesse état-état de la réaction $OH + H_2(v)$ sont inconnus sauf pour $v = 1$ (Zellner & Steinert 1981; Zhang & Zhang 1994; Truong 1995). Cette approximation donne des résultats cohérents avec le coefficient de réaction état-état déterminé dans ces dernières études. De plus, lorsque cette approximation n'est pas adoptée et que seul le taux thermique est utilisé, l'abondance de H_2O est réduite d'un facteur trois. Nous nous attendons à ce que la valeur réelle de l'abondance se situe entre ces deux limites. Cette hypothèse est donc valable en première approximation. En ce qui concerne la réaction $O + H_2$, nous avons modifié la version du code PDR de Meudon utilisée dans cet article pour inclure les coefficients de vitesse état-état de $O + H_2(v, J)$ récemment calculés par Veselinova et al. (2021). Les taux de photodissociation de H_2O et OH sont systématiquement calculés en intégrant la section efficace sur le champ de rayonnement local, en utilisant la section efficace compilée à partir de la base de données de Leiden (Heays et al. 2017).

4.2.2 Excitation de OH

L'excitation de OH a été calculée en lien avec la chimie et le bilan thermique en utilisant la méthode de Gonzalez Garcia et al. (2008) qui prend en compte le pompage radiatif et l'excitation collisionnelle, et permet d'inclure la formation d'espèces dans des états excités. Afin d'inclure l'impact de la production de OH dans les états excités rotationnellement, nous supposons que seule la photodissociation de H_2O dans la gamme UV 114 – 143 nm conduit à la production de OH avec une distribution d'état non thermique et que les voies de destruction ne sont pas spécifiques à l'état, c'est-à-dire que le taux de destruction d'une molécule de OH est indépendant de son état. Toute autre voie de formation que la photodissociation de H_2O dans la gamme 114 – 143 nm est supposée produire des OH avec une distribution d'état thermique à la température locale du gaz. Par conséquent, nous avons né-

Paramètres et valeurs	
A_V^{tot}	20
P_{th}/k_B (K cm ⁻³)	10 ⁵ -10 ⁶ -10 ⁷ - 10⁸ -10 ⁹
$G_0^{incident}$ (Unité Mathis)	10 ² -10 ³ - 10⁴ -10 ⁵
Transfert	
Rayons cosmiques (s ⁻¹ par H ₂)	Approximation FGK 5 × 10 ⁻¹⁷
R_V	3,1
$N_H/E(B-V)$ (cm ⁻²)	5,8 × 10 ²¹
Rapport poussière/gaz	0,01
Distribution de la taille des grains	∝ $a^{-3.5}$
Rayon min des grains (cm)	1 × 10 ⁻⁷
Rayon max des grains (cm)	3 × 10 ⁻⁵

TABLE 4.1 – Paramètres d'entrée du code PDR de Meudon.

gligé l'émission prompte (*prompt emission*) de OH induite par la photodissociation de l'eau à plus grandes longueurs d'onde, qui produit des OH vibrationnellement chauds mais rotationnellement froids (van Harrevelt & van Hemert 2001), et le pompage chimique par O + H₂ qui produit des OH dans des états rotationnels inférieurs $N < 25$ (Liu et al. 2000, et A. Zanchet, com. priv.). Ces processus d'excitation n'ont pas d'impact sur les raies hautement rotationnellement excitées de OH dans le domaine 9–15 μm qui sont au centre de la présente étude (voir discussion dans Tabone et al. 2021).

Ces hypothèses conduisent à l'équation d'équilibre :

$$\sum_{j \neq i} P_{ji} n_j - n_i \sum_{j \neq i} P_{ij} + F_{pd} \bar{f}_i + (F - F_{pd}) f_i(T_K) - F \frac{n_i}{n(OH)} = 0, \quad (4.1)$$

où n_i [cm⁻³] est la densité de population locale de OH à une position donnée dans la PDR. P_{ij} sont les probabilités de transition radiative et collisionnelle et incluent la contribution de l'émission du gaz et de la poussière au champ de rayonnement local (voir Gonzalez Garcia et al. 2008, pour plus de détails). Nous avons pris en compte la (dés)excitation collisionnelle de OH avec He et H₂ en utilisant les taux de collision de Kłos et al. (2007) et Offer et al. (1994) qui ont été extrapolés pour inclure les transitions collisionnelles entre les niveaux rotationnels supérieurs de OH comme dans Tabone et al. (2021). F est le taux de formation total de OH et $f_i(T_K)$ est la distribution de Boltzmann à une température T_K . De plus, F_{pd} est le taux de production de OH par photodissociation de H₂O dans la bande 114 – 143 nm [cm⁻³s⁻¹] définie par :

$$F_{pd} = n_{H_2O} \int_{114 \text{ nm}}^{143 \text{ nm}} \sigma(\lambda) I(\lambda) d\lambda, \quad (4.2)$$

où $\sigma(\lambda)$ est la section efficace de photodissociation de H₂O, $I(\lambda)$ est le champ de rayonnement UV local, et n_{H_2O} est la densité locale de H₂O. Enfin, \bar{f}_i dans l'Équation (4.1) est la distribution d'état de OH suivant la photodissociation de H₂O. Celle-ci s'écrit $\bar{f}_i \propto \int_{\lambda} \eta_i(\lambda) \sigma(\lambda) I(\lambda) d\lambda$ où η_i est la probabilité de former OH dans un état i à la suite de la photodissociation de H₂O par un photon de longueur d'onde λ . La distribution exacte \bar{f}_i produite

par la photodissociation de l'eau dans le domaine UV de 114 – 143 nm dépend relativement peu de la forme du champ de rayonnement local et, dans ce travail, nous adoptons la distribution produite par les photons Lyman- α ($\lambda = 121,6$ nm) présentée dans Tabone et al. (2021).

Suivant Tabone et al. (2021), notre modèle de OH inclut la liste des niveaux d'énergie et des transitions radiatives fournie par Brooke et al. (2016). Afin de réduire le temps de calcul, le nombre de niveaux de OH a été réduit à un total de 412 en limitant le nombre quantique vibrationnel à $v \leq 1$ et en incluant uniquement l'état fondamental électronique OH(X). Tous les niveaux rotationnels qui sont stables dans un état vibrationnel sont conservés, ce qui correspond à $N \leq 50$ et $N \leq 48$ pour $v = 0$ et $v = 1$, respectivement. Afin de tenir compte de l'émission prompte induite par la production de OH dans les niveaux qui ont été rejetés, nous utilisons la distribution d'état réduite \tilde{f}_i dérivée par Tabone et al. (2024). Chaque niveau rotationnel est encore divisé par le couplage spin-orbite et le dédoublement Λ . Suivant Tabone et al. (2021), nous considérons les transitions rotationnelles *intra* et *cross-ladder* dans les bandes $v = 0$ et $v = 1$ ainsi qu'entre les états $v = 1$ et $v = 0$, ce qui donne un total de 2360 transitions (ro)vibrationnelles.

4.3 Résultats

Tout d'abord, nous présentons les résultats de notre modèle typique, qui correspond à un modèle à haute pression ($P_{\text{th}}/k_B = 10^8$ K cm $^{-3}$) et à fort champ UV incident ($G_0^{\text{incident}} = 10^4$). Ce modèle est particulièrement intéressant car il s'agit de paramètres représentatifs d'une PDR pour laquelle les raies de OH dans l'IR moyen sont les plus brillantes. Nous explorons ensuite une grille de modèles pour étudier comment les intensités des raies varient en fonction de la pression et du champ UV incident.

4.3.1 Modèle typique à haute pression et haut champ UV

4.3.1.1 Profil de densité de H₂O et champ UV

La Figure 4.1 montre la densité totale d'hydrogène et la température du gaz (Haut), ainsi que l'abondance de H₂O, OH et H₂ (Bas) dans la PDR. Le taux de photodissociation de H₂O est également affiché dans le panneau inférieur. La pression thermique étant supposée constante dans la PDR, le gaz devient plus dense lorsque la température diminue avec la profondeur. Jusqu'à ce que $A_V = 0,1$, la température est constante car le bilan thermique est dominé par le réchauffement dû à l'effet photoélectrique et par le refroidissement radiatif par l'émission de [O I] et de [C II]. Ensuite, à la transition H⁰/H₂ (due à l'opacité des poussières et à l'auto-écrantage), la température diminue fortement car le gaz est principalement refroidi par l'émission de H₂ et que le chauffage par effet photoélectrique est moins efficace en raison de l'atténuation du champ FUV. Plus profondément dans la PDR ($A_V > 1$), la température du gaz diminue doucement en raison du refroidissement par le CO, et finalement par le couplage thermique gaz-grain (Tielens & Hollenbach 1985a).

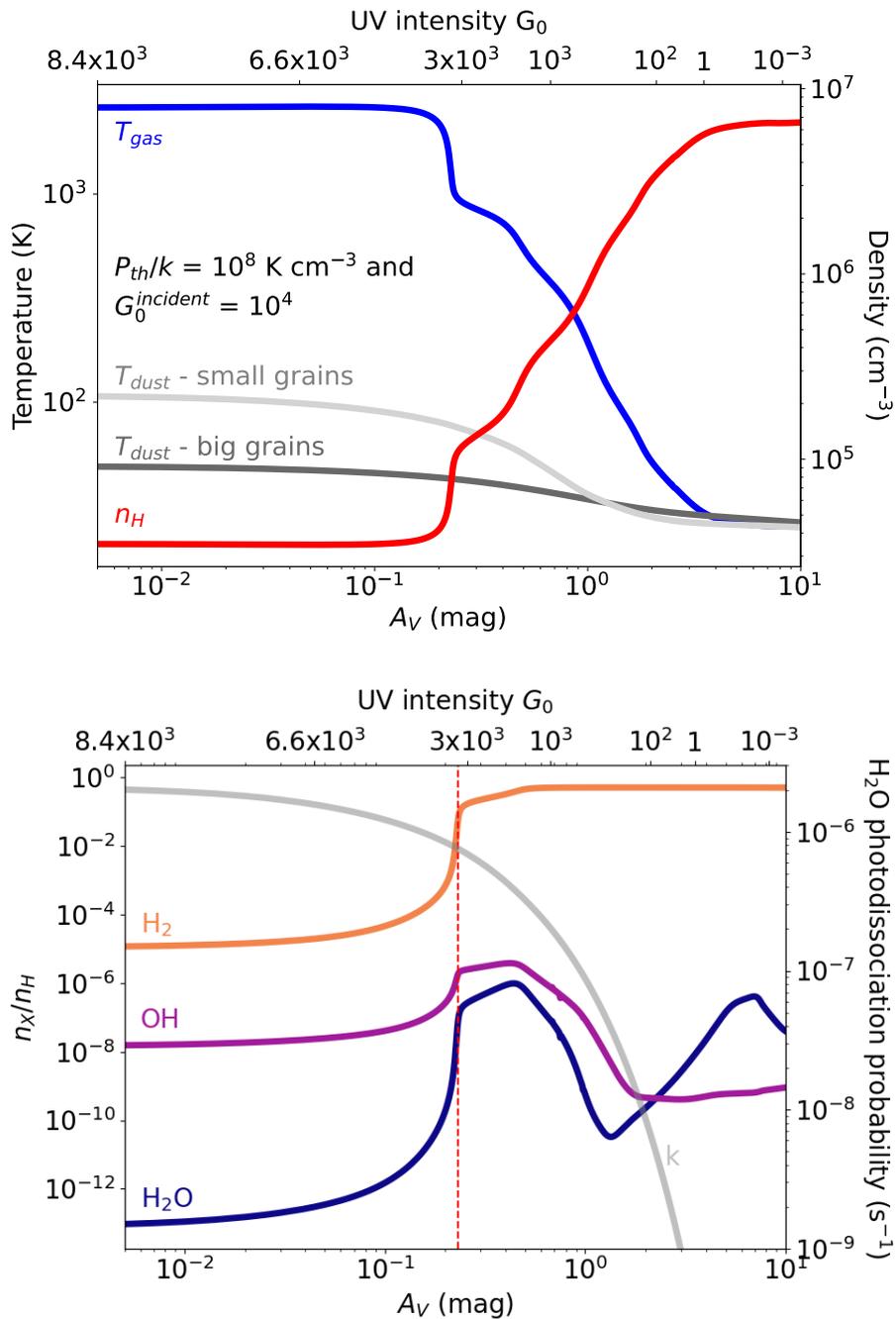


FIGURE 4.1 – Résultats de notre modèle typique avec $P_{th}/k_B = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. (Haut) Densité du gaz et température du gaz et de la poussière en fonction de l'extinction visuelle. La taille des petits (gros) grains est de 10^{-7} cm ($3 \times 10^{-5} \text{ cm}$). (Bas) Abondance de H_2O , OH et H_2 en fonction de l'extinction visuelle. Le taux de photodissociation de H_2O k (s^{-1}) est également représenté en gris clair. La ligne verticale rouge montre la position de la transition H^0/H_2 . L'intensité du champ UV local est donnée à sept positions différentes en haut du graphique.

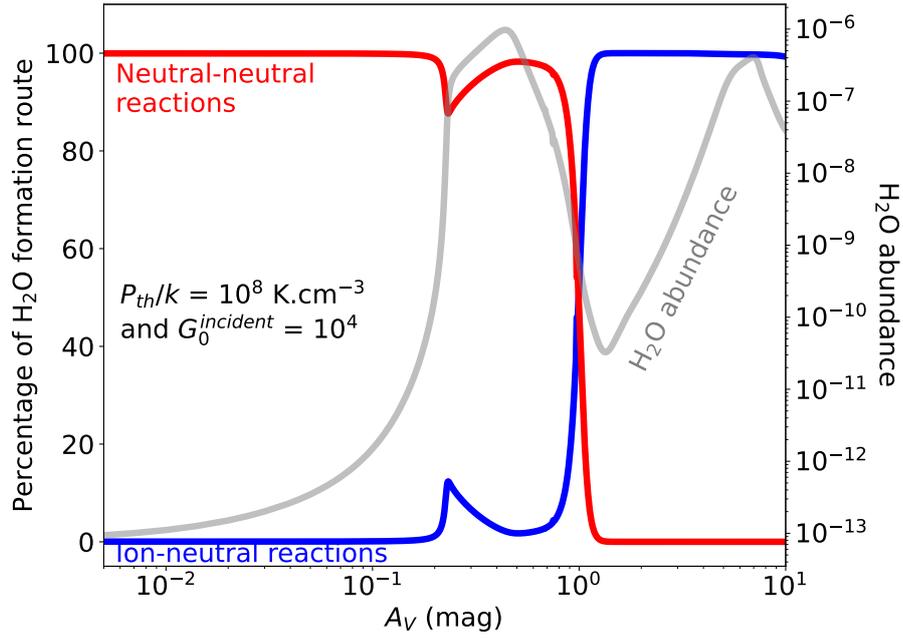
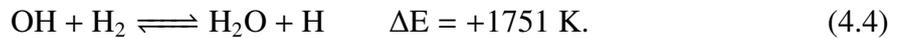
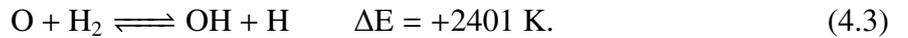


FIGURE 4.2 – Pourcentage des différentes voies de formation de H_2O en fonction de l’extinction visuelle pour le modèle $P_{\text{th}}/k_B = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. La ligne bleue représente le pourcentage de la voie de formation ion–neutre, et la ligne rouge représente le pourcentage de la voie de formation neutre–neutre qui nécessite des températures élevées ($T_K \gtrsim 300 \text{ K}$). L’augmentation de la voie de formation ion–neutre autour de $A_V = 0,2$ est due à l’augmentation de OH^+ suite à la formation neutre–neutre de OH . Elle est donc associée à une chimie chaude.

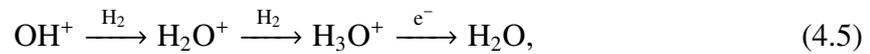
Le profil d’abondance de H_2O et de OH reflète celui de H_2 et de la température. Deux pics d’abondance de H_2O , correspondant à deux réservoirs d’eau distincts, sont mis en évidence dans le panneau inférieur de la Figure 4.1. Le premier pic à $A_V \sim 0,5$ dans la région chaude et irradiée est principalement dû à des réactions neutre–neutre (voir Figure 4.2). Ici, H_2O se forme principalement via un processus en deux étapes avec des barrières énergétiques (ΔE) (van Dishoeck et al. 2013, voir 4.A.1.1) :



Comme le premier pic correspond à un réservoir irradié de H_2O , on s’attend à ce que l’émission prompt de OH soit confinée à cette couche. La position du premier pic d’abondance de H_2O est un compromis entre le fait d’être suffisamment profond dans le nuage pour avoir du H_2 moléculaire relativement abondant (non photodissocié) nécessaire à la formation de l’eau et le fait d’être suffisamment proche du bord pour avoir une température assez élevée pour surmonter la barrière d’énergie de la réaction chimique. Le pic est en effet situé près de la transition H^0/H_2 , en accord avec l’étude de Sternberg & Dalgarno (1995) (voir leurs Figures 8 et 9). Par conséquent, le pic d’abondance de H_2O est très sensible à la température, comme on le verra plus loin dans la Section 4.3.2 et dans l’Annexe 4.A.1.1. Il est

intéressant de noter que dans la région chaude qui nous intéresse, l'inclusion de la réactivité de H_2 excité dans la formation de OH (et donc de H_2O) ne modifie pas radicalement les résultats par rapport aux taux thermiques. Par exemple, au pic d'abondance de H_2O , le taux de formation de $\text{H}_2 + \text{O}$ n'est augmenté que d'un facteur 2 par rapport au taux thermique qui est plutôt faible pour ces ordres de grandeur. Ceci est lié à l'endoergicité relativement modeste de la réaction $\text{O} + \text{H}_2$ par rapport aux réactions d'hydrogénation de N et S^+ (e.g. Goicoechea & Roncero 2022). Cette faible endoergicité se traduit par des coefficients de vitesse relativement élevés pour les états vibrationnels inférieurs de H_2 . Dans la région chaude, OH est aussi principalement produit par des réactions neutre–neutre (voir l'Équation (4.3) et l'Annexe 4.A.2) avec une contribution significative de la photodissociation de H_2O à la position du pic d'abondance de OH. Cependant, comme expliqué plus loin dans la Section 4.3.1.2, seule la photodissociation de l'eau peut conduire à des OH excités dans des états hautement rotationnels. Ainsi, l'émission de OH dans l'IR moyen dépend de l'abondance de l'eau et non pas directement de l'abondance de OH.

Plus profond dans la PDR ($A_V > 0,5$), les abondances de H_2O et de OH diminuent considérablement parce que la température baisse et que les deux molécules sont encore efficacement détruites par photodissociation (voir le taux de photodissociation de H_2O dans le panneau du bas de la Figure 4.1). Le second réservoir d'eau est plus profond dans le nuage, dans les régions plus froides, avec un pic d'abondance de H_2O à $A_V \simeq 7$. Dans cette région, H_2O est principalement formé par des réactions neutre–ion, se terminant par la recombinaison électronique de H_3O^+ :



OH^+ étant formé par $\text{O} + \text{H}_3^+$ dans les régions moléculaires (voir Figure 4.2 et Annexe 4.A.1.2). L'eau est encore principalement détruite par photodissociation avec une efficacité qui diminue avec la profondeur dans la PDR (voir le gris clair dans la Figure 4.1). Ainsi, l'abondance de H_2O augmente à nouveau avec A_V . Nous notons que dans les profondeurs du nuage, la formation de H_2O sur les grains suivie d'une désorption (non incluse dans notre modèle) devrait être importante (Hollenbach et al. 2009; Putaud et al. 2019). Cependant, cette composante froide n'est pas le point d'intérêt de cette étude puisqu'elle produit une quantité négligeable de OH hautement excité. En effet, bien que le réservoir froid soit plus abondant que le réservoir chaud, il est si faiblement irradié que la quantité d'eau photodissociée provenant de cette région est négligeable par rapport à celle provenant de la région chaude.

Il est intéressant de noter que la quantité de H_2O chaud ($N(\text{H}_2\text{O}) \sim 4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) ne représente que 5 %–15 % du contenu total en H_2O de la PDR. Ceci est en accord avec les résultats de Putaud et al. (2019) qui suggèrent que la composante froide domine l'émission de H_2O dans les données d'*Herschel*. Cela explique pourquoi nous ne pouvons pas utiliser ces résultats précédents pour prédire l'émission de OH dans l'IR moyen, car nous nous intéressons seulement au réservoir chaud.

4.3.1.2 Prédiction des raies de OH dans l'IR moyen

La Figure 4.3 présente le spectre calculé dans l'infrarouge moyen de OH pour notre modèle typique avec un angle de vue de 60° . L'angle de vue est l'angle entre la ligne de visée et la normale à la PDR, 0° correspondant à observer la PDR de face (*face-on*) et 90° correspondant à observer la PDR sur le côté (*edge-on*). La valeur de 60° est représentative de l'inclinaison de la plupart des PDRs interstellaires observées, car elles sont plus proches d'être *edge-on* que d'être *face-on* (e.g., la Barre d'Orion, la nébuleuse de la Tête-de-Cheval...). Une série de raies purement rotationnelles peut être observée dans la gamme $9 - 27 \mu\text{m}$ provenant de niveaux N élevés ($15 \leq N \leq 45$) avec des énergies supérieures $> 5\,000$ K. Ces raies purement rotationnelles *intra-ladder*, qui sont divisées en quatre composantes par le dédoublement Λ et le couplage spin-orbite (non apparent sur la Figure 4.3), dominent le spectre de OH dans l'infrarouge moyen. On observe une forte augmentation de l'intensité de la raie avec la diminution de N en deçà de $\lambda = 10 \mu\text{m}$ ($N \simeq 35$), puis une lente diminution au-delà de $\lambda = 10 \mu\text{m}$.

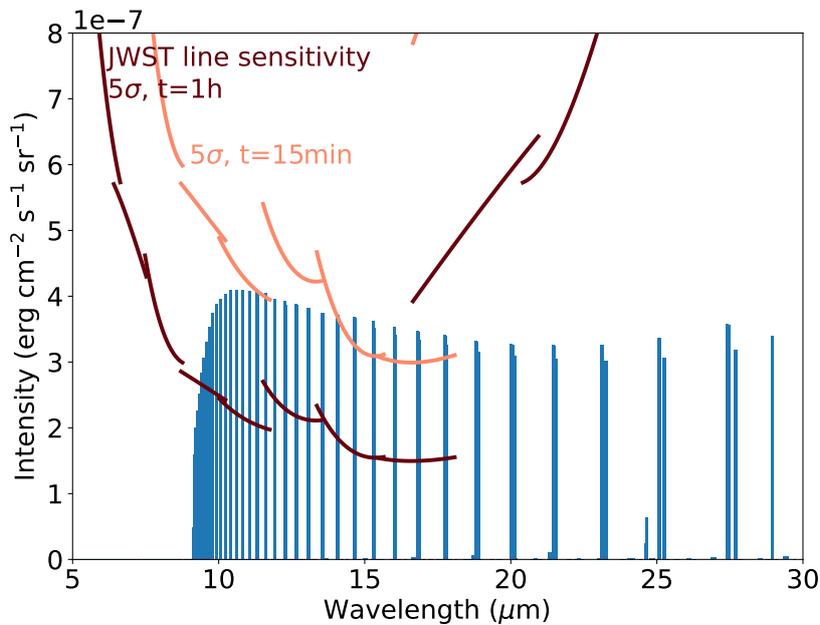


FIGURE 4.3 – Intensités des raies de OH dans l'infrarouge moyen observées avec un angle de vue de 60° en fonction de la longueur d'onde pour un modèle $P_{\text{th}}/k_B = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. Les lignes marron et orange représentent la sensibilité du JWST pour le temps d'intégration correspondant et un rapport signal à bruit de 5 (Glasse et al. 2015).

La Figure 4.4 résume le processus d'excitation conduisant au spectre d'émission prompt observé, représenté sur la Figure 4.3. Le pompage radiatif IR ne peut pas exciter ces raies en raison de l'énergie élevée des niveaux supérieurs. La désexcitation par émission stimulée provoquée par le rayonnement IR du fond est également négligeable en raison du faible nombre de photons. L'excitation collisionnelle ne peut pas peupler ces niveaux en raison de leur niveau d'énergie très élevé, et la désexcitation collisionnelle est négligeable en raison des densités critiques très élevées de ces niveaux ($n_{\text{crit}} \geq 10^{13} \text{ cm}^{-3}$). Par conséquent, la

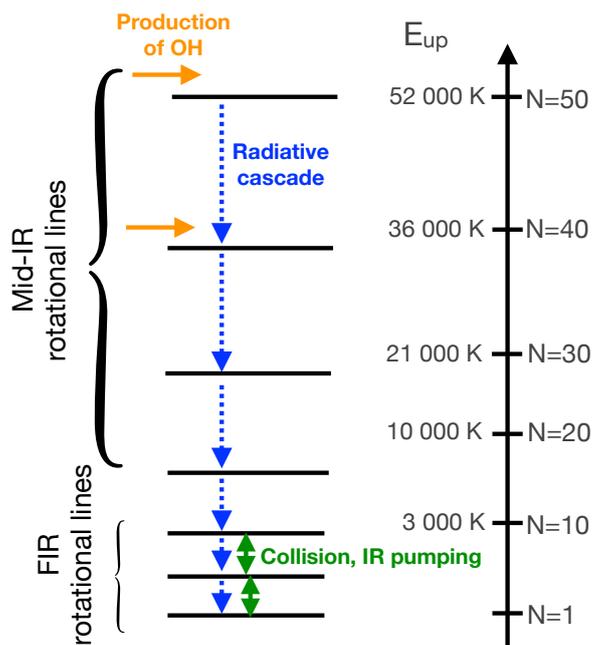


FIGURE 4.4 – Schéma de l'excitation de OH en présence d'une émission prompt. La production de OH rotationnellement excité (flèches orange) est suivie d'une cascade radiative $N \rightarrow N - 1$ (illustrée par les flèches bleues), émettant la série de raies montrée dans la Figure 4.3. Pour les états rotationnels inférieurs ($N \lesssim 10$), les niveaux de OH peuvent être excités par pompage IR et par collisions, qui émettent dans l'infrarouge lointain. Dans ce schéma très simplifié, seul un nombre limité de niveaux rotationnels est représenté, ignorant la division des niveaux rotationnels causée par le dédoublement Λ et le couplage spin-orbite, les niveaux vibrationnels et d'autres types de transitions radiatives plus faibles.

population des niveaux n est fixée que par la cascade radiative qui suit la photodissociation de H_2O formant OH dans des états N élevés.

En particulier, nous retrouvons le résultat de Tabone et al. (2021) selon lequel les intensités des raies de OH dans l'IR moyen sont seulement proportionnelles à la densité de colonne d'eau photodissociée dans la bande \tilde{B} ($114 < \lambda < 143$ nm).

$$\Phi_B = \int_z F_{pd}(z) dz, \quad (4.6)$$

où nous rappelons que F_{pd} est le taux de destruction (volumique) de H_2O par photodissociation dans la gamme UV 114 – 143 nm (voir l'Équation (4.2)). Ce résultat simple démontre que les raies de OH dans l'IR moyen donnent un accès direct à la photodissociation de H_2O mais aucune information (directe) sur la densité de colonne totale de OH, la densité ou la température. L'abondance de H_2O dans les milieux irradiés étant très sensible aux conditions physiques (en particulier la température), les raies de OH dans l'infrarouge moyen sont à leur tour un diagnostic indirect mais très sensible des conditions physiques.

Nous constatons également que la forme générale du spectre de OH dans l'infrarouge

moyen ne dépend ni de la densité de colonne de OH, ni de la densité de colonne de H₂O photodissociée Φ_B . En effet, comme discuté dans Tabone et al. (2021), l'intensité relative des raies excitées n'est déterminée que par la distribution des OH naissants, qui est déterminée par la forme spectrale du champ UV. Cependant, dans ce travail, nous négligeons l'effet de la forme du champ de rayonnement dans la gamme 114–143 nm et nous prenons la distribution de OH à la longueur d'onde du Ly- α (121 nm) comme longueur d'onde représentative. Par conséquent, l'intensité de chaque raie montrée ici est, par construction, uniquement proportionnelle à Φ_B et ne dépend pas d'autres paramètres. Dans ce qui suit, nous concentrons notre étude sur l'intensité totale du quadruplet $N = 30 \rightarrow 29$ à 10,8 μm car c'est le plus brillant du spectre.

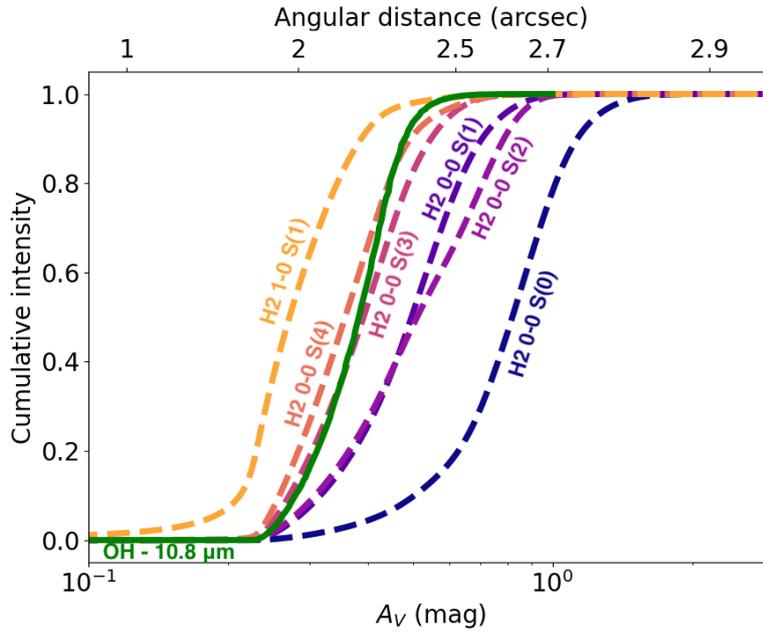


FIGURE 4.5 – Intensité cumulative (normalisée) de la raie de OH à 10,8 μm , et de plusieurs raies rotationnelles et rovibrationnelles de H₂ calculées avec le code PDR de Meudon à une pression thermique $P_{\text{th}}/k_B = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. L'émission de OH dans l'IR moyen trace une fine couche près de la transition H⁰/H₂.

Afin de localiser la région émettrice de l'émission de OH rotationnellement excité dans la PDR, nous calculons l'intensité cumulative de l'émission de OH en fonction de la profondeur dans la PDR. La Figure 4.5 compare l'intensité cumulée de la raie de OH à 10,8 μm et des raies de H₂ rotationnellement excitées à travers la PDR. Tout d'abord, cette Figure montre que l'émission de OH est confinée à une fine couche autour de $A_V \simeq 0,4$ qui correspond à la transition H⁰/H₂. On peut également constater que cette raie de OH culmine à la même position que les raies purement rotationnelles de H₂ relativement excitées, telles que 0-0 S(3) et 0-0 S(4). Les raies rotationnelles de H₂ sont excitées par collision, de sorte que leur région d'émission reflète les gradients de température à travers la PDR. Ainsi, les raies 0-0 S(3) ($E_{\text{up}}/k \sim 2\,504 \text{ K}$) et 0-0 S(4) ($E_{\text{up}}/k \sim 3\,474 \text{ K}$) culminent plus près du bord que les raies moins excitées telles que 0-0 S(0) ($E_{\text{up}}/k \sim 510 \text{ K}$), qui ont un niveau d'énergie supérieur plus bas. La raie H₂ 1-0 S(1) ($E_{\text{up}}/k \sim 6\,952 \text{ K}$) est principalement peuplée par le pompage UV. Cela explique pourquoi l'émission de cette raie culmine plus près du bord de la transition

H^0/H_2 .

Nous notons que les raies rotationnelles de H_2 sont un bon diagnostic de la température du gaz car elles sont proches de l'équilibre thermodynamique local et sont optiquement minces. Cependant, ce diagnostic nécessite une haute résolution angulaire pour séparer la région émettrice de chaque raie, sinon, les flux des raies sont moyennés sur la PDR. Le profil de température du gaz ne peut donc être mesuré avec les raies de H_2 que dans des PDRs proches et suffisamment larges. Dans les cas où les observations ne sont pas résolues spatialement, les raies de OH dans l'IR moyen peuvent être un diagnostic indirect unique avec lequel sonder la température à la transition H^0/H_2 car l'émission de OH dans l'IR moyen est fortement corrélée au bilan thermique en raison de la nécessité de températures élevées pour la formation de H_2O .

4.3.2 Effets de la pression thermique et du champ UV

Comme le montre la Section 4.3.1.2, l'émission de OH dans l'IR moyen est directement proportionnelle à la quantité d'eau photodissociée, et l'abondance de l'eau est très sensible à la température et au champ UV local. Par conséquent, on s'attendrait naturellement à ce que l'intensité de la raie de OH dépende fortement de la pression thermique et de l'intensité du champ de rayonnement UV incident. Dans cette section, nous étudions une grille de modèles avec une pression allant de $P_{th}/k_B = 10^5$ à 10^9 $K\text{ cm}^{-3}$ et une intensité de champ UV incident dans la gamme de $G_0^{incident} = 10^2$ à 10^5 .

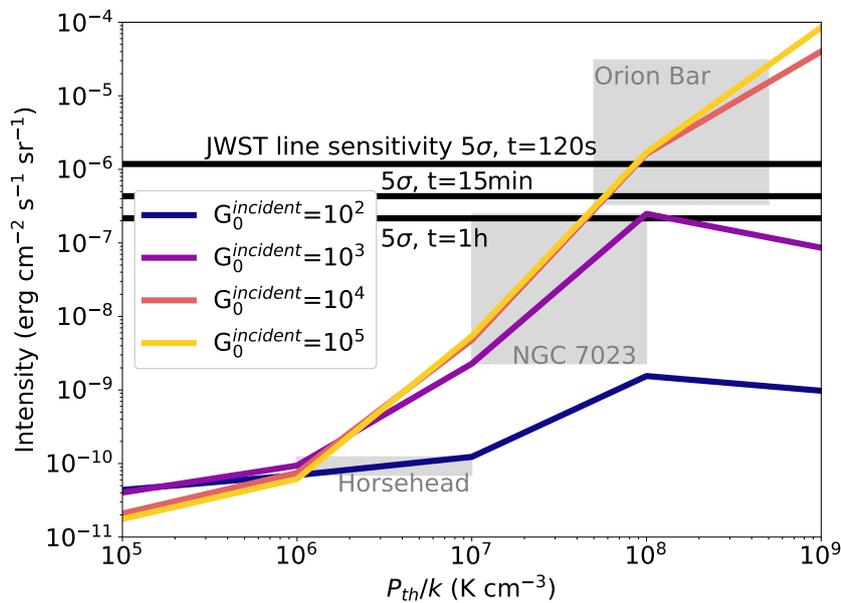


FIGURE 4.6 – Intensité cumulée du quadruplet à $\lambda = 10,8 \mu\text{m}$ observée avec un angle de vue de 60° en fonction de la pression du gaz pour différentes intensités de champ UV. Les lignes horizontales noires représentent la sensibilité du JWST pour le temps d'intégration correspondant et un rapport signal à bruit de 5.

La Figure 4.6 résume l'évolution de l'intensité de la raie à $10,8 \mu\text{m}$ en fonction de la pression thermique pour différentes intensités de champ UV. On constate que l'émission de OH dépend fortement de la pression thermique (voir la Section 4.3.2.1 pour plus d'explications). D'autre part, pour une intensité de champ UV $G_0^{\text{incident}} > 10^3$, l'intensité des raies de OH ne dépend pas significativement de l'intensité du champ UV incident (voir la section 4.3.2.2 pour plus d'explications). Pour comprendre ce résultat, nous étudions l'évolution de la température et de l'intensité du champ UV au niveau du pic de H₂O chaud en fonction de la pression thermique et de l'intensité du champ UV G_0^{incident} , comme le montre la Figure 4.7.

4.3.2.1 Dépendance à la pression

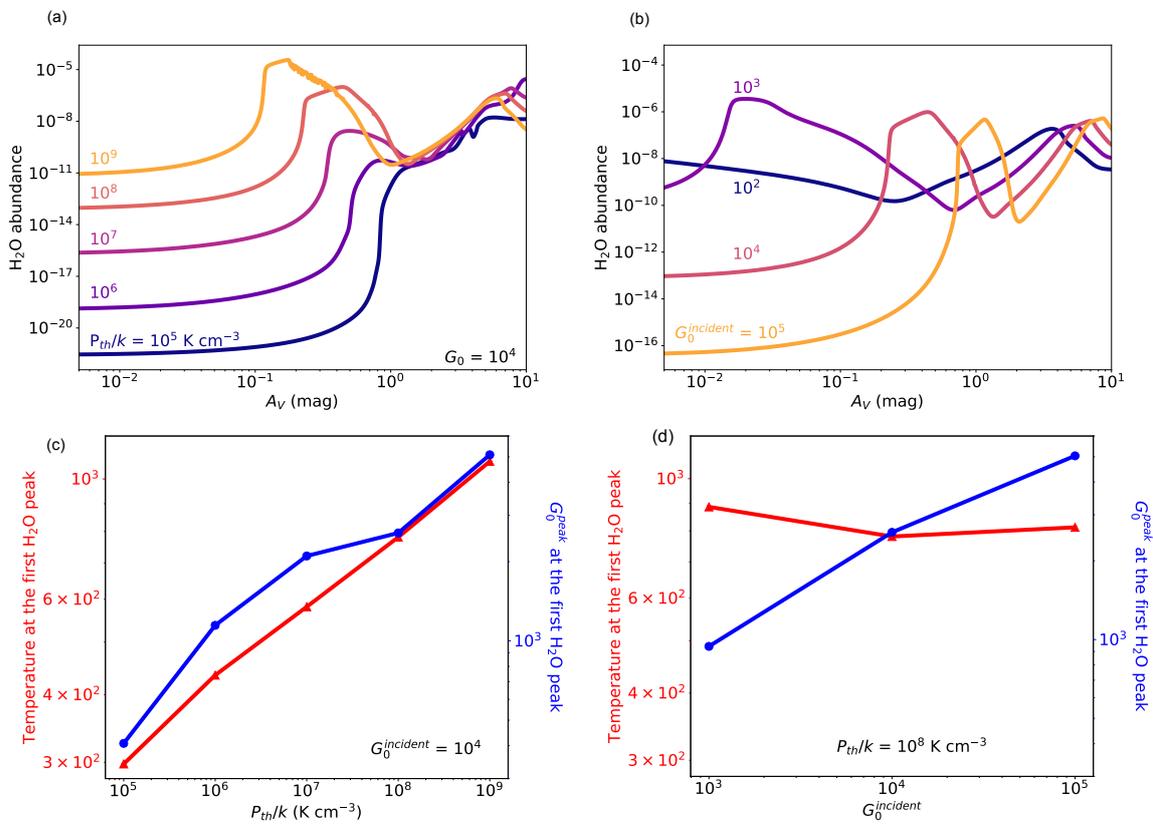


FIGURE 4.7 – Évolution de l'abondance de H₂O, de la température locale du gaz et du champ UV local en fonction de la pression thermique et du champ UV incident. (Haut) Profil d'abondance de H₂O pour différentes pressions thermiques à une intensité de champ UV donnée (a) et pour différents champs UV incidents à une pression thermique donnée (b). (Bas) Évolution de la température et du champ UV au niveau du premier pic de H₂O en fonction de la pression thermique (c) et de l'intensité du champ UV incident (d).

La Figure 4.7(a) présente le profil d'abondance de H₂O pour différentes pressions thermiques. Elle montre que nous retrouvons toujours un pic d'abondance de H₂O jusqu'à $P_{th}/k_B = 10^6 \text{ K cm}^{-3}$, correspondant au réservoir chaud et irradié de H₂O qui produit des OH rotationnellement excités. Lorsque la pression thermique augmente, le réservoir chaud de H₂O

se rapproche du bord et le pic d'abondance correspondant de H_2O augmente considérablement de six ordres de grandeur, en passant de $P_{\text{th}}/k_B = 10^6$ à 10^9 K cm^{-3} . Ce résultat peut surprendre car à haute pression, le réservoir chaud est plus irradié (voir Figure 4.7(c), courbe bleue) et donc H_2O est plus efficacement photodissocié. La densité augmente également avec la pression, ce qui accroît directement le taux de formation de H_2O . Cependant, cet effet n'est pas suffisant pour expliquer l'augmentation spectaculaire de l'abondance de H_2O . En effet, lorsque la pression augmente, le gaz à la transition H^0/H_2 se réchauffe (voir Figure 4.7(c), courbe rouge), déclenchant la formation active de OH et de H_2O par le biais de réactions neutre–neutre. Par conséquent, la forte augmentation de l'abondance de H_2O avec P_{th}/k_B est principalement due à l'augmentation de la température du gaz. Nous remarquons encore que l'augmentation de la température est une conséquence indirecte de l'augmentation de la densité et du champ UV local à la transition H^0/H_2 puisque le H_2 se forme plus près du bord du PDR à des densités élevées, et que le chauffage par pompage UV du H_2 et par la formation du H_2 sont renforcés.

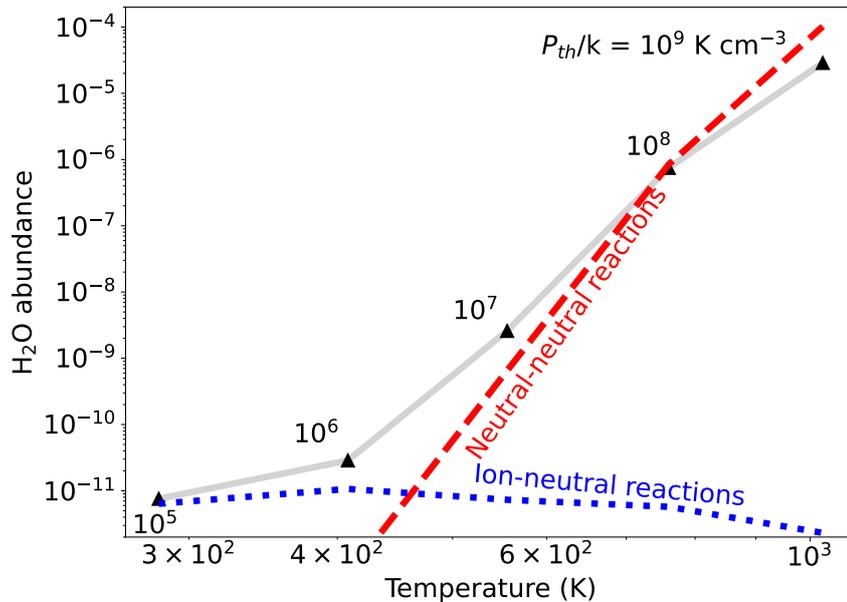


FIGURE 4.8 – Calculs analytiques de l'abondance du premier pic de H_2O en fonction de la température au premier pic de H_2O (Annexe 4.A.1, en utilisant le taux thermique de Agúndez et al. 2010; Veselinova et al. 2021). Les coefficients état–état ne sont pas pris en compte dans les calculs analytiques mais nous avons multiplié l'abondance calculée par 6 pour prendre en compte qualitativement l'augmentation de l'abondance due à l'énergie interne de H_2 . La ligne bleue en pointillés représente le calcul de l'abondance de H_2O formé par une réaction ion–neutre et la ligne rouge en pointillés représente le calcul de l'abondance de H_2O formé par des réactions neutre–neutre. Les triangles représentent les premiers pics d'abondance de H_2O calculés avec le code PDR de Meudon pour des modèles à un champ UV incident $G_0^{\text{incident}} = 10^4$ et une pression thermique différente.

La dépendance de la voie de formation de H_2O à la température est mise en évidence

sur la Figure 4.8 où l'abondance calculée de H_2O est comparée à notre modèle analytique de la chimie de l'oxygène détaillé dans l'Annexe 4.A.1. Nous retrouvons le fait que jusqu'à $P_{\text{th}}/k_B \simeq 10^7 \text{ K cm}^{-3}$, H_2O est principalement formé par des réactions neutre–neutre, et que l'efficacité de cette voie diminue pour des pressions thermiques plus faibles en raison de températures plus basses. Il est intéressant de noter qu'à très basse pression, en dessous de $P_{\text{th}}/k_B \simeq 10^6 \text{ K cm}^{-3}$, la réaction ion–neutre, qui dépend faiblement de la température, prend le relais de la voie neutre–neutre. Cela correspond approximativement à la pression thermique en dessous de laquelle le pic d'abondance de H_2O chaud disparaît.

Nous rappelons que l'intensité des raies de OH dans l'IR moyen est proportionnelle à la quantité de H_2O photodissociée, qui est le produit du profil de densité de H_2O et du flux de champ UV intégré sur le nuage. Cela explique pourquoi les raies de OH dans l'IR moyen augmentent avec la pression thermique (voir Figure 4.6) : H_2O se forme plus efficacement par réaction neutre–neutre dans la couche moléculaire chaude et, dans une moindre mesure, parce que ce réservoir est plus irradié (voir Figures 4.7 et 4.8).

4.3.2.2 Dépendance au champ UV incident

La Figure 4.7(b) présente le profil d'abondance de H_2O pour différentes intensités de champ UV incident et $P/k_B = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$. Lorsque l'intensité du champ UV incident augmente, le réservoir de H_2O chaud se déplace plus profondément dans le nuage. La transition H^0/H_2 est en effet déplacée vers des A_V plus grands car la densité de colonne totale doit être plus élevée pour déclencher la transition H^0/H_2 . L'abondance du pic de H_2O est également quelque peu réduite pour des champs UV incidents plus importants. Cela est dû à la fois à une légère baisse en température qui empêche la formation de H_2O par la voie neutre–neutre et à une augmentation du champ de rayonnement local à la transition H^0/H_2 (voir la Figure 4.7(d)).

Sur la base de ces résultats, nous arrivons à la conclusion que les intensités des raies de OH dans le MIR, qui sont proportionnelles à la quantité d'eau photodissociée, dépendent faiblement de l'intensité du champ UV incident pour $G_0^{\text{incident}} \gtrsim 10^3$. En effet, lorsque le champ UV incident augmente, la quantité de H_2O diminue lentement mais le champ de rayonnement local augmente en conséquence. Les deux effets ont tendance à agir l'un contre l'autre pour l'émission de OH dans l'IR moyen, ce qui se traduit par une dépendance plus faible vis-à-vis du champ UV incident que de la pression thermique, du moins pour $G_0^{\text{incident}} > 10^3$, où l'abondance de H_2O semble saturer lorsque le champ UV incident augmente.

4.3.2.3 Évolution du rapport des raies OH/ H_2

Les intensités des raies prédites dépendent de l'inclinaison de la PDR qui est une source majeure d'incertitude dans les observations. C'est pourquoi nous présentons une prédiction plus robuste dans la Figure 4.9, à savoir le rapport entre la raie de OH à $10,8 \mu\text{m}$ et la raie rovibrationnelle de H_2 à $2,12 \mu\text{m}$, qui culmine à une position proche de celle de OH et qui a déjà été observée à haute résolution angulaire (*e.g.*, Habart et al. 2023).

La Figure 4.9 montre que le rapport n'est pas constant et que lorsque $P_{\text{th}}/k_B \geq 10^6 \text{ K}$

cm^{-3} , le rapport augmente. Plus la pression est élevée, plus la quantité de gaz chaud est importante. Cela favorise la formation de H_2O chaud par réaction neutre–neutre et donc la formation de OH qui émet dans l'IR moyen. La raie H_2 1-0 S(1) augmente avec la pression car elle est proportionnelle à la densité du gaz (pour $n_{\text{H}}/G_0 < 40 \text{ cm}^{-3}$, e.g., Burton et al. 1990) mais elle ne dépend pas de la température du gaz.

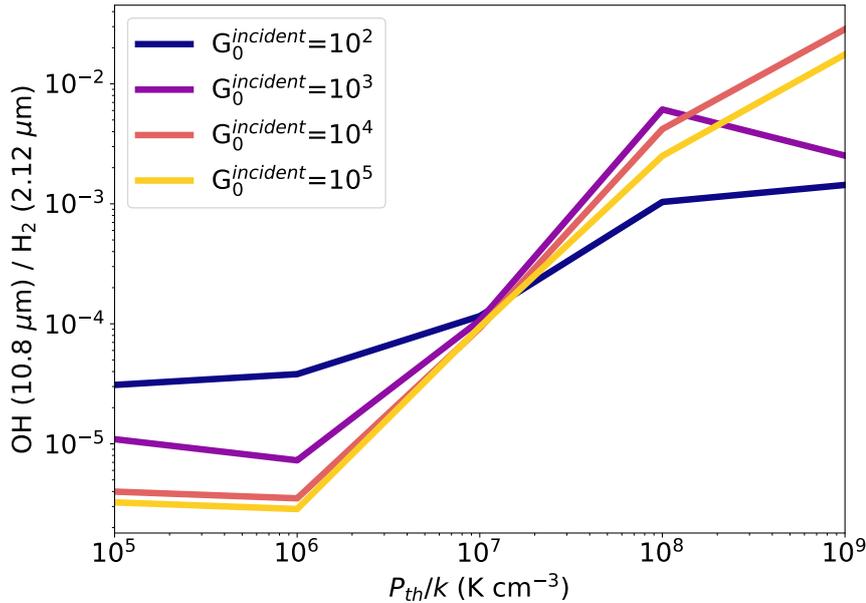


FIGURE 4.9 – Rapport de la raie de OH prédite à $10,8 \mu\text{m}$ sur la raie de H_2 1-0 S(1) à $2,12 \mu\text{m}$ prédite par le code PDR de Meudon.

4.4 Application à la Barre d'Orion et à d'autres environnements

4.4.1 Barre d'Orion

Le programme scientifique *Early Release Science "PDRs4All : Radiative feedback from massive stars"* (Berné et al. 2022) pour les observations du JWST est consacré à l'étude de l'interaction des étoiles massives avec leur environnement. La cible de ce programme est une PDR bien connue : la Barre d'Orion. Cette région sera observée par NIRSpec, NIRCам et MIRI, en fournissant de la spectroscopie IFU avec NIRSpec et MIRI, et de l'imagerie avec NIRCам et MIRI. Dans cette section, nous utilisons les prédictions pour la Barre d'Orion afin d'illustrer le potentiel de OH et nous discutons des principales limitations des prochaines observations du JWST des PDRs interstellaires.

4.4.1.1 Intensités prédites des raies de OH

Les paramètres utilisés dans les modèles de la Barre d'Orion sont résumés dans la Table 4.2. Nous considérons un modèle isobare avec une pression allant de $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$ à $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$, en accord avec les études précédentes (Allers et al. 2005; Joblin et al. 2018). Nous adoptons un champ UV incident provenant d'une étoile O7 illuminatrice avec une température effective $T_{\text{eff}} = 40\,000 \text{ K}$ modélisée par un corps noir à T_{eff} .

L'intensité du champ UV est égale à 2×10^4 en unité de Mathis, ce qui est en accord avec les estimations précédentes donnant $G_0^{\text{incident}} = 1\text{-}4 \times 10^4$ (Tielens & Hollenbach 1985b; Marconi et al. 1998). Nous utilisons la courbe d'extinction HD 38087 de Fitzpatrick & Massa (1990) et $R_V = 5,62$, ce qui est proche de la valeur déterminée pour la Barre d'Orion de 5,5 (Marconi et al. 1998). Cette courbe d'extinction est également en accord avec l'étude récente de la poussière réalisée par Schirmer et al. (2022) qui ont travaillé avec le modèle de poussière THEMIS dans la Barre d'Orion prenant en compte un appauvrissement en nanograins.

Ces modèles comprennent un calcul de transfert radiatif exact pour le pompage UV des raies H_2 provenant des 30 premiers niveaux de H_2 , tandis que les autres raies sont traitées à l'aide de l'approximation FGK (Federman et al. 1979). Cela permet que les effets d'écrantage mutuels entre les raies d'absorption UV de H_2 et de H qui se chevauchent soit pris en compte. Cette approximation peut affecter la position de la transition H^0/H_2 car l'approximation FGK tend à déplacer la transition H^0/H_2 plus près du bord du nuage, ce qui affecte légèrement l'abondance de H_2O dans la couche chaude. Cependant, les intensités des raies émergentes de OH et de H_2 sont peu affectées (moins de 10 %).

Paramètres et valeurs	
A_V^{tot}	10
$P_{\text{th}}/k_B \text{ (K cm}^{-3}\text{)}$	$5 \times 10^7 - 5 \times 10^8$
G_0^{incident} (Unité Mathis)	2×10^4
Forme du champ UV	Corps noir à 40 000 K
Transfert	<i>Full line</i>
Rayons cosmiques (s^{-1} par H_2)	5×10^{-17}
R_V	5,62
$N_{\text{H}}/E(\text{B-V}) \text{ (cm}^{-2}\text{)}$	$1,05 \times 10^{22}$
Rapport poussières/gaz	0,01
Distribution de la taille des grains	$\propto \alpha^{-3.5}$
Rayon min des grains (cm)	1×10^{-7}
Rayon max des grains (cm)	3×10^{-5}

TABLE 4.2 – Paramètres d'entrée du code PDR de Meudon pour le modèle de la Barre d'Orion.

Pour estimer l'intensité absolue des raies de OH dans l'infrarouge moyen, nous considérons le rapport entre les raies de OH et la raie de H_2 1-0 S(1) à $2,12 \mu\text{m}$ prédite par le modèle multiplié par l'intensité de la raie de H_2 1-0 S(1) récemment mesurée par le télescope *Keck* (Habart et al. 2023) à une résolution angulaire (0,1") similaire à celle du JWST. En effet, les raies de OH et de H_2 proviennent approximativement de la même région de la PDR (voir

Figure 4.5) et l'intensité de ces raies sera donc affectée de la même manière par les effets de géométrie. À la position des mosaïques NIRSpec-IFU et MIRI-MRS-IFU du programme ERS, la raie 1-0 S(1) a été mesurée à une intensité de $8,7 \times 10^{-4} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ au front de dissociation.

L'intensité de la raie H_2 à $2,12 \mu\text{m}$ doit être corrigée de l'extinction due à la poussière d'avant-plan et à la poussière interne de la Barre elle-même. Comme discuté dans Habart et al. (2023), la raie de H_2 devrait être environ 56 % plus brillante au total (16 % pour la poussière d'avant-plan et 40 % pour la poussière interne). Ceci est en accord avec la correction de l'extinction totale dérivée par Kaplan et al. (2021). Cela conduit à une intensité corrigée de l'extinction de $1,4 \times 10^{-3} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$. Les raies de OH à des longueurs d'onde plus importantes ne sont généralement pas affectées par l'extinction de la poussière. Ce n'est qu'à des longueurs d'onde plus courtes que l'extinction par la poussière atténue de manière significative l'émission. Les différents rapports des raies OH/ H_2 et l'intensité estimée des raies de OH sont présentés dans la Table 4.3.

Modèles	$P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$	$P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$
OH($9,9 \mu\text{m}$)/ H_2 ($2,12 \mu\text{m}$)	$7,6 \times 10^{-4}$	$8,7 \times 10^{-3}$
OH($10,8 \mu\text{m}$)/ H_2 ($2,12 \mu\text{m}$)	$8,1 \times 10^{-4}$	$9,2 \times 10^{-3}$
Intensité de OH à $9,9 \mu\text{m}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$)	$1,0 \times 10^{-6}$	$1,2 \times 10^{-5}$
Intensité de OH à $10,8 \mu\text{m}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$)	$1,1 \times 10^{-6}$	$1,3 \times 10^{-5}$
	Sensibilité à $9,9 \mu\text{m}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$)	Sensibilité à $10,8 \mu\text{m}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$)
Temps d'intégration	S/N = 5	S/N = 5
111 s	$1,4 \times 10^{-6}$	$1,2 \times 10^{-6}$
15 min	$5,0 \times 10^{-7}$	$4,3 \times 10^{-7}$

TABLE 4.3 – Rapport des raies OH/ H_2 ($2,12 \mu\text{m}$) et intensité estimée de la somme du quadruplet de la raie de OH pour différents modèles. Sensibilité du JWST pour un rapport signal à bruit de 5.

La sensibilité des raies de MIRI-MRS (spectroscopie à moyenne résolution) est d'environ $1 \times 10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ pour un rapport signal à bruit de 5 et un temps d'intégration de 111 secondes, ce qui est accordé pour le programme ERS². Les intensités des raies autour de $10 \mu\text{m}$ sont d'environ $1 \times 10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ pour le modèle de limite inférieure à $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$ et $1 \times 10^{-5} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ pour le modèle de limite supérieure à $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ (voir la Table 4.3). Les deux raies pourraient être détectées pour le modèle de limite supérieure en considérant uniquement les intensités estimées. Cependant, il est également possible d'additionner différentes raies pour augmenter le rapport signal à bruit et de les détecter même dans le modèle de limite inférieure. Néanmoins, la principale limitation pour la détection des raies de OH dans l'IR moyen dans la PDR est le faible

2. Valeur qui a été modifiée entre l'écriture de cet article et les observations.

contraste entre le continuum fort et les raies de OH faibles, comme expliqué dans la section suivante.

4.4.1.2 Spectre prédit avec le continuum et les autres raies

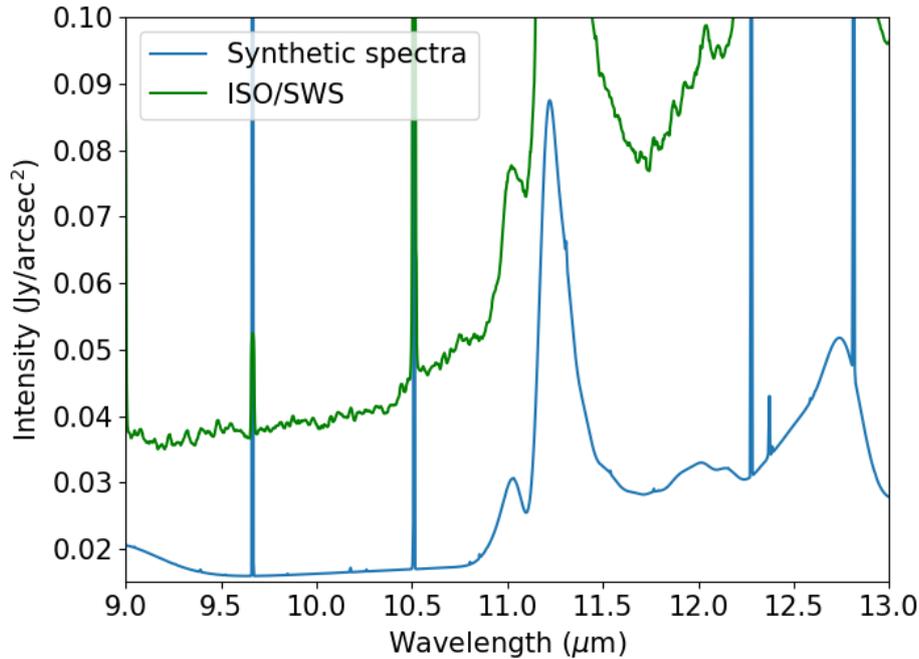


FIGURE 4.10 – Spectre synthétique au front de dissociation H^0/H_2 à partir du cube synthétique réalisé pour la future observation MIRI-MRS dans le programme ERS (Berné et al. 2022) ($R \sim 3\,000$) et spectre de ISO/SWS ($R \sim 1\,500$).

Pour étudier la détectabilité des raies de OH, nous avons estimé le continuum et les autres raies du gaz au niveau du front de dissociation H^0/H_2 où l'émission des raies de OH est maximale. Les raies de OH peuvent se mélanger avec d'autres raies, mais surtout, elles peuvent être perdues dans le bruit sur le continuum en raison de défauts instrumentaux tels que les franges. Il est donc nécessaire d'avoir des rapports de raies de OH sur le continuum plus grands que le bruit attendu sur le continuum (de l'ordre de 1 %). Pour estimer le continuum de la poussière et les autres raies, nous avons utilisé le cube synthétique de spectro-imagerie du programme ERS. Ce cube a été calculé à l'aide de cartes de cinq régions de la PDR et de cinq spectres modèles de ces régions. Les spectres modèles ont été déterminés en utilisant le code PDR pour la contribution des raies atomiques et moléculaires (Le Petit et al. 2006), CLOUDY pour le gaz ionisé (Ferland et al. 1998), le modèle PAHTAT pour l'émission des PAHs (Pilleri et al. 2012) utilisant les spectres modèles extraits par Foschino et al. (2019) sur les données ISO/SWS à l'aide d'algorithmes d'apprentissage automatique, et enfin le modèle de poussière THEMIS (Jones et al. 2013, 2017) avec le code de transfert radiatif SOC (Juvela 2019) pour l'émission du continuum de la poussière en suivant l'approche de Schirmer et al. (2022). Ce modèle de poussière est basé sur les observations de *Spitzer* et *Herschel* dans cinq bandes photométriques (3,6, 4,5, 5,8, 8, et 70 μm). Des observations à 24 μm de la

Barre d'Orion existent mais sont saturées. Nous comparons le modèle aux observations disponibles, c'est-à-dire aux observations ISO/SWS centrées sur la PDR avec un grand faisceau (*beam*, 20") et aux cartes *Spitzer*/IRAC. Le spectre *Spitzer*/IRS n'est disponible que dans la région atomique au pic du continuum de la poussière dans l'IR moyen. Le modèle reproduit fidèlement les observations *Spitzer*/IRAC à 3,6 et 8 μm . Cependant, à partir de 8 μm , le continuum dans le spectre synthétique est trois fois plus faible que celui mesuré dans le spectre ISO/SWS (voir Figure 4.10). Néanmoins, le spectre ISO/SWS ne résout pas spatialement la PDR et mélange le pic du continuum observé dans la zone atomique avec *Spitzer*/IRAC et le pic des raies de H₂ et OH attendu au front de dissociation. Le JWST résoudra spatialement les différentes couches de la PDR, ce qui nous permettra de vérifier correctement le modèle et de déterminer si le continuum est effectivement sous-estimé pour $\lambda > 8 \mu\text{m}$.

La Figure 4.10 montre le spectre au niveau du front de dissociation H⁰/H₂ dérivé du cube synthétique. Nous nous concentrons ici sur la gamme de longueurs d'onde comprise entre 9 et 13 μm car, comme le montre la Figure 4.3, il s'agit du domaine où les raies de OH sont les plus brillantes. En outre, au-delà de 15 μm , les raies de OH peuvent également être excitées par d'autres mécanismes tels que le pompage chimique par O + H₂ avec H₂ excité de manière rovibrationnelle (A. Zanchet, communications privées et résultats de Maiti & Schatz 2003; Braunstein et al. 2004; Weck et al. 2006) ou avec le premier état excité de l'oxygène O(¹D) (Liu et al. 2000) et pas seulement à partir de la photodissociation de l'eau.

4.4.1.3 Rapport raie sur continuum

La Figure 4.11 montre le rapport entre la raie de OH et le continuum pour des modèles avec différentes pressions thermiques. Afin de calculer ce rapport, les spectres des raies de OH ont été calculés en considérant les intensités intégrées divisées par la largeur de fréquence égale à l'élément de résolution spectrale. Les spectres ont ensuite été divisés par le spectre simulé incluant le continuum et les autres raies du gaz comme décrit dans la sous-section précédente. Le rapport est beaucoup plus élevé pour le modèle $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ que pour le modèle $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$, comme on s'y attendait d'après l'analyse de la Section 4.3.2.1. La variation du rapport raie sur continuum résulte de la distribution des intensités des raies de OH comme on peut le voir sur la Figure 4.3 et de la forme du continuum de la poussière, des bandes aromatiques, et des raies brillantes dans cette région comme on peut le voir sur la Figure 4.10. La forme générale est similaire pour les deux modèles, car, comme l'explique la Section 4.3.1.2, les intensités relatives des raies *intra-ladder* ne dépendent que de la forme spectrale du champ UV qui est ici le même pour les deux modèles. Le rapport des raies de OH sur le continuum est maximal autour de 10 μm . C'est le résultat d'un effet combiné entre les intensités des raies de OH qui atteignent leur maximum autour de 10,8 μm et le continuum qui augmente progressivement après 10 μm . Les raies autour de 10 μm sont donc celles qui ont la plus grande probabilité d'être détectées avec le JWST. La valeur du rapport maximal varie de 0,6 % pour un modèle de limite inférieure à $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$ à 7 % pour un modèle de limite supérieure à $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$. Le continuum peut être sous-estimé après 8 μm , ce qui peut conduire à des rapports plus faibles. La détection devrait donc être possible pour le modèle de limite supérieure à $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$, alors qu'elle sera plus difficile pour le modèle de limite inférieure à $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$.

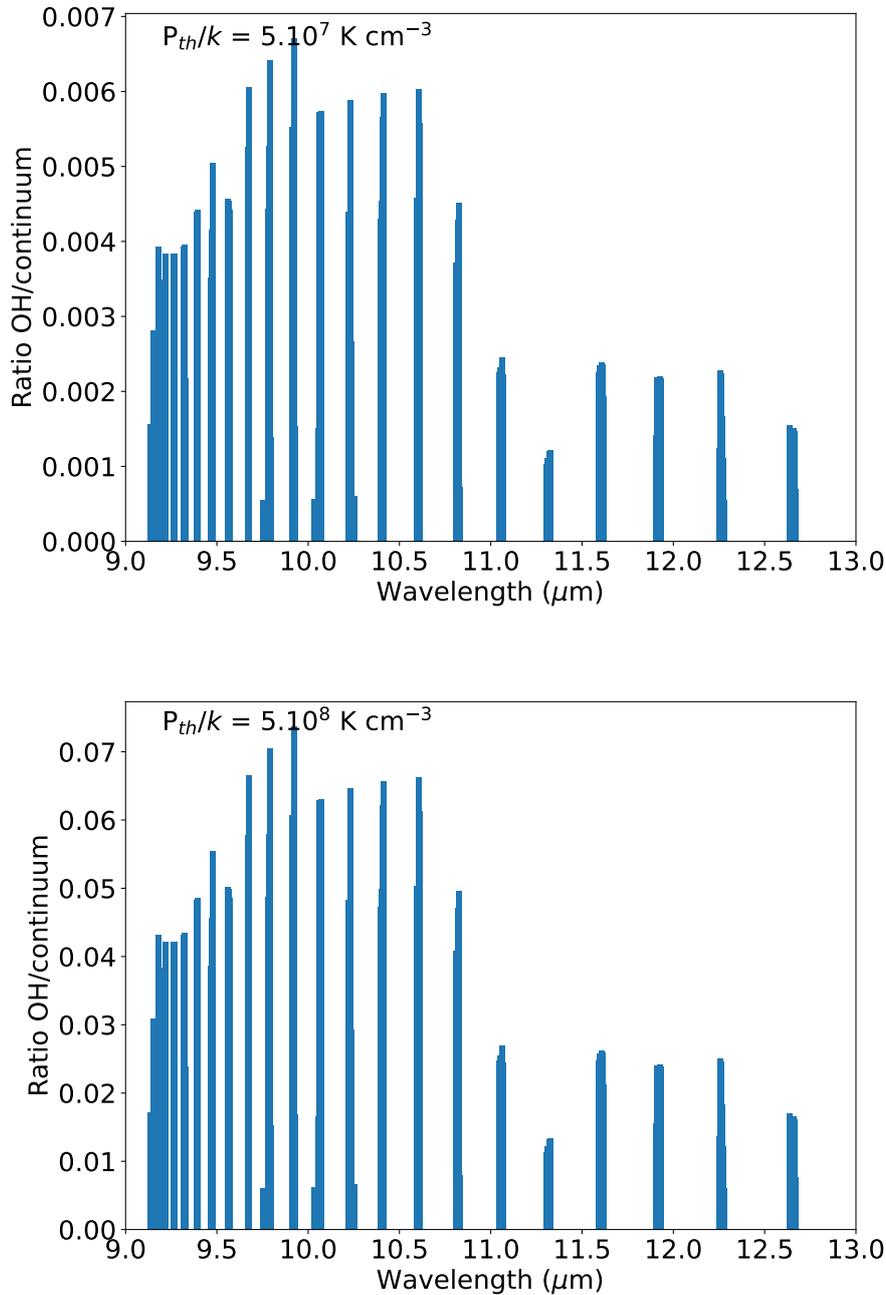


FIGURE 4.11 – Rapport des raies de OH sur le continuum. (Haut) $P_{th}/k_B = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. (Bas) $P_{th}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. La principale différence par rapport à la variation de l'intensité des raies de OH observée sur la Figure 4.3 se situe à 11,3 μm, où le rapport chute radicalement en raison de la bande aromatique (à 11,3 μm).

4.4.1.4 Mélange possible avec d'autres raies

Il existe également des raies intenses telles que les raies rotationnelles de H_2 (0-0 S(2) et 0-0 S(3)), des bandes aromatiques ou des raies provenant du gaz ionisé (Ne II à 12,8 μm, S IV

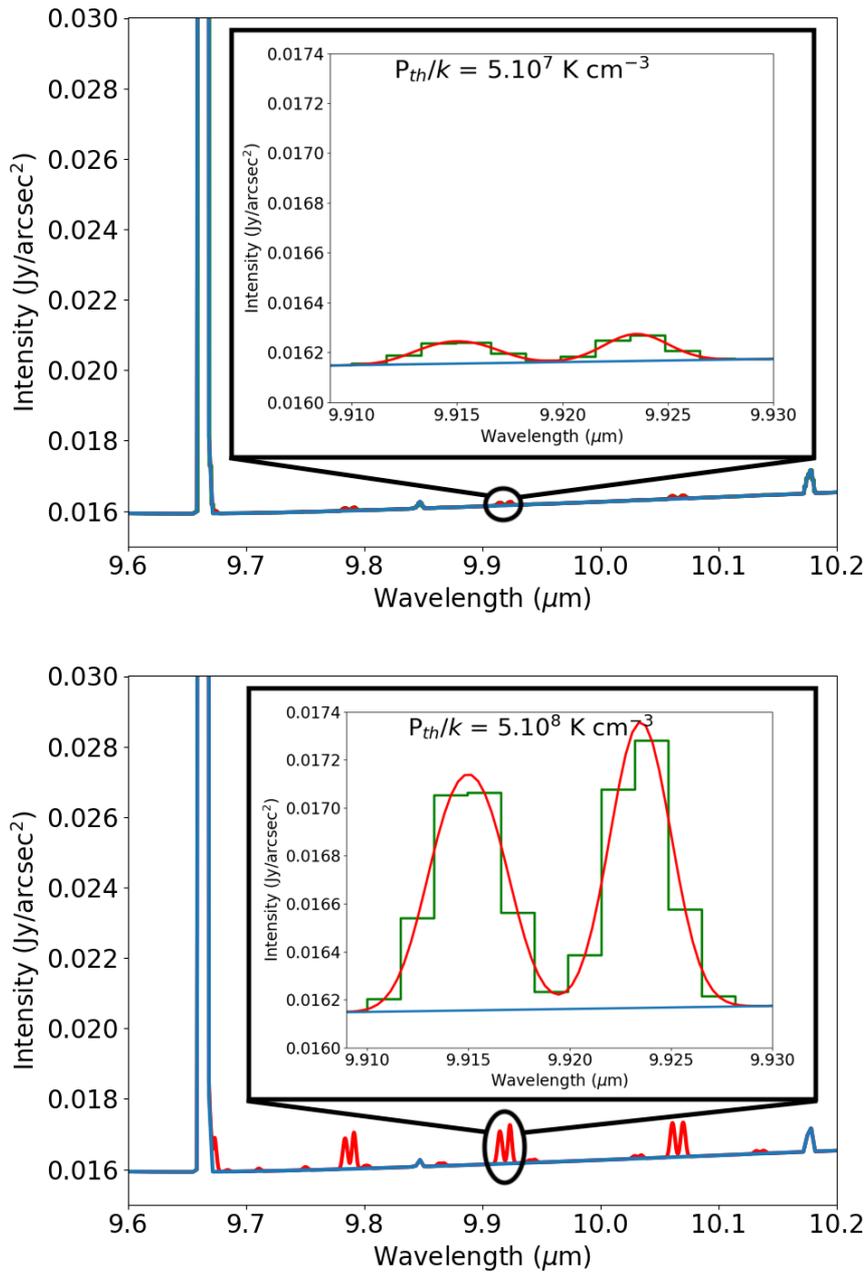


FIGURE 4.12 – Spectre près du front de dissociation à la position choisie pour l’observation avec MIRI-MRS/IFU de l’ERS (Berné et al. 2022) autour de $10 \mu\text{m}$ (bleu) avec l’ajout des raies de OH (rouge) pour un pouvoir de résolution spectral $R = 3\,000$. La raie à $9,67 \mu\text{m}$ correspond à la transition de H_2 0-0 S(3). L’échantillonnage, représenté par la ligne verte, est la moitié de l’élément de résolution autour de $10 \mu\text{m}$ (voir Figure 7 de Glasse et al. 2015). Il est d’environ $1,7 \times 10^{-3} \mu\text{m}$ près de $10 \mu\text{m}$ pour $R = 3\,000$. (Haut) $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. (Bas) $P_{\text{th}}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. Le quadruplet à $9,9 \mu\text{m}$ n’est que partiellement résolu avec un pouvoir de résolution de $3\,000$. Seuls deux pics sont visibles au lieu des quatre attendus (à $9,914 \mu\text{m}$, $9,916 \mu\text{m}$, $9,923 \mu\text{m}$ et $9,924 \mu\text{m}$).

à $10,5 \mu\text{m}$, etc.) qui pourraient se mélanger avec les raies de OH. La Figure 4.12 montre un zoom sur la zone de $10 \mu\text{m}$ du spectre où les raies de OH sont ajoutées avec un pouvoir de résolution de 3 000. Ce domaine de longueurs d'onde spécifique a été choisi parce que c'est là que le rapport entre les raies et le continuum est le plus élevé (voir la Figure 4.11). Sur cette Figure, la raie observée à $9,67 \mu\text{m}$ correspond à la raie de H_2 0-0 S(3). Cette Figure met en évidence le fait que les raies de OH sont nettement moins intenses que les autres raies. De plus, le quadruplet à $9,9 \mu\text{m}$ n'est que partiellement résolu avec un pouvoir de résolution de 3 000 (proche du pouvoir de résolution du JWST à cette longueur d'onde). En effet, seuls deux pics sont visibles au lieu des quatre attendus (à $9,914 \mu\text{m}$, $9,916 \mu\text{m}$, $9,923 \mu\text{m}$ et $9,924 \mu\text{m}$). Cependant, cette Figure montre que dans la région où le rapport entre les raies et le continuum est le plus élevé, aucune autre raie ne devrait se mélanger avec les raies de OH.

En résumé, cette étude montre qu'en termes d'intensité, il est probable que les raies de OH soient détectables tant que la pression thermique n'est pas trop faible. La principale difficulté pour détecter ces raies réside dans le rapport raie sur continuum. En effet, comme nous l'avons vu dans Section 4.4.1.3, même dans le meilleur des cas, le rapport raie sur continuum ne dépassera pas 1 % – 7 %. La détectabilité possible des raies de OH dépend du faible niveau de bruit. Le bruit doit être inférieur au rapport raie sur continuum pour permettre la détection.

4.4.2 Application à d'autres environnements

4.4.2.1 Autres PDRs interstellaires

La Figure 4.6 et la Section 4.3.2 montrent que les raies de OH dans l'infrarouge moyen ne peuvent être détectées que dans les PDRs très illuminées avec une pression élevée en raison de la présence d'une température élevée. En particulier, les raies de OH dans l'IR moyen devraient être trop faibles dans des régions telles que la nébuleuse de la Tête-de-Cheval car la pression thermique, et donc la température du gaz, est trop basse. Des régions telles que NGC-7023 pourraient produire des raies de OH suffisamment brillantes, mais celles-ci seraient à la limite de la détection (environ $1 \times 10^{-6} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ pour un temps d'intégration de 144 secondes, un rapport signal à bruit de 5, ce qui est accordé pour le GTO 1192). Cette Figure met en évidence le fait qu'une pression très élevée $P_{\text{th}}/k_B \gtrsim 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$ et qu'un champ UV intense $G_0 > 10^3$ sont nécessaires pour produire des raies de OH dans l'infrarouge moyen supposées détectables. En raison de ce résultat, la Barre d'Orion est le meilleur candidat pour les observer.

4.4.2.2 Proplyds

Les PDRs à la périphérie des nuages moléculaires denses ne sont pas les seuls objets où les raies de OH pourraient être détectées par le JWST. Notre modélisation thermo-chimique montre qu'en règle générale, les environnements irradiés plus denses (pression thermique élevée) donnent lieu à des intensités de raies de OH plus importantes dans l'IR moyen. Ce résultat est en accord avec les détections précédentes de raies brillantes de OH avec *Spit-*

zer/IRS dans plusieurs disques protoplanétaires (Carr & Najita 2014; Tabone et al. 2024) et de forts chocs protostellaires (Tappe et al. 2008, 2012). Les programmes dédiés aux PDRs interstellaires (e.g., ERS PDRs4All, Berné et al. 2022) engloberont des propylds dans leur champ de vue. Comme ils correspondent à des amas de gaz très denses ($n_{\text{H}} > 10^8 \text{ cm}^{-3}$, Champion et al. 2017), et compte tenu de la détection antérieure dans des disques non irradiés par des étoiles massives, les raies de OH dans l'infrarouge moyen devraient être bien détectées avec le JWST. Dans ces objets, l'émission de OH dans l'IR moyen sera toujours directement liée à la quantité de H_2O photodissociée par unité de temps. Cependant, l'interprétation détaillée du flux de raies nécessite une modélisation spécifique des propylds, ce qui dépasse le cadre du présent article.

4.5 Conclusion

Dans ce travail, nous avons exploré le potentiel des raies de OH dans l'infrarouge moyen pour l'étude des PDRs interstellaires. Afin d'atteindre cet objectif, nous avons modifié le code PDR de Meudon pour inclure l'émission prompte induite par la photodissociation de H_2O dans la bande UV 114 – 143 nm et un nouveau taux de formation état-état de OH, et nous avons analysé une grille de modèles.

Les principales conclusions de cette étude peuvent être résumées comme suit :

1. L'émission de OH dans l'IR moyen est confinée à une fine couche irradiée proche de la transition H^0/H_2 où H_2O est formé par des réactions neutre–neutre et est activement photodissocié.
2. Les raies de OH dans l'IR moyen sont directement proportionnelles à la densité de la colonne d'eau photodissociée dans la gamme de longueur d'onde 114 – 143 nm. Comme la formation de l'eau nécessite une température élevée, les raies de OH dans l'IR moyen sont très sensibles à la température à la transition H^0/H_2 . En particulier, nous prévoyons que les raies de OH dans l'IR moyen soient plus brillantes dans les régions où la pression thermique est élevée.
3. Les raies de OH dans l'IR moyen sont moins dépendantes de l'intensité du champ UV incident pour $G_0^{\text{incident}} > 10^3$. Lorsque le champ UV incident augmente, la transition H^0/H_2 se déplace plus profondément dans le nuage, mais la température et le champ UV local (et donc l'abondance de l'eau) restent plutôt constants, ce qui explique l'impact plutôt faible sur les raies de OH.
4. Il est prévu que les raies de OH ne soient détectables avec le JWST que dans les PDRs fortement illuminées ($G_0^{\text{incident}} > 10^3$) avec une pression élevée ($P_{\text{th}}/k_B > 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$). La détection pourrait alors être possible dans la Barre d'Orion mais pas dans la nébuleuse de la Tête-de-Cheval. Le faible rapport raie sur continuum pourrait également constituer une limitation majeure pour la détection des raies de OH en raison d'effets instrumentaux tels que les franges.

En conclusion, notre travail démontre que les raies de OH dans l'infrarouge moyen sont un outil prometteur pour étudier les processus physiques dans les PDRs. En particulier, les raies de OH dans l'IR moyen constituent un diagnostic, indirect mais sensible, de la température à la transition H^0/H_2 , un paramètre qui est très incertain dans les modèles de PDR (Röllig

et al. 2007). Les observations spatialement résolues des raies rotationnelles de OH et de H₂ dans l'IR moyen seront donc essentielles pour tester les modèles PDR et mieux calibrer la corrélation entre l'émission de OH et la température, et pour étudier en détail la chimie de l'oxygène dans les environnements irradiés. Pour les observations non résolues spatialement des PDRs, où l'émission H₂ ne donne qu'une estimation moyenne de la température, OH serait alors un diagnostic unique pour évaluer la température autour de la transition H⁰/H₂. Nous notons également que dans cette étude, nous nous sommes concentrés uniquement sur l'émission rapide de OH induite par la photodissociation de H₂O à courtes longueurs d'onde. L'émission prompte induite par la photodissociation de l'eau au-delà de 143 nm, qui excite les raies rovibrationnelles dans le proche IR, ainsi que le pompage chimique par O + H₂, qui excite les raies de l'IR moyen au-delà de 15 μm, si elles sont correctement modélisées, peuvent également apporter de fortes contraintes complémentaires sur les processus physiques et chimiques dans les PDRs denses.

4.A Annexes

4.A.1 Chimie de H₂O

4.A.1.1 Réactions neutre–neutre

Réaction	Vitesse de réaction	Coefficient de réaction
O + H ₂ = OH + H	$v_1 = k_1 n(\text{O})n(\text{H}_2)$	$k_1 = 2,22 \times 10^{-14} \times \left(\frac{T}{300}\right)^{3,75} \times e^{-2401/T}$
OH + H ₂ = H ₂ O + H	$v_2 = k_2 n(\text{OH})n(\text{H}_2)$	$k_2 = 2,22 \times 10^{-12} \times \left(\frac{T}{300}\right)^{1,43} \times e^{-1751/T}$
OH + hν = O + H	$v_{\phi_2} = k_{\phi_1} G_0 n(\text{OH})$	$k_{\phi_1} = 2,5 \times 10^{-10}$
H ₂ O + hν = OH + H	$v_{\phi_2} = k_{\phi_2} G_0 n(\text{H}_2\text{O})$	$k_{\phi_2} = 5,3 \times 10^{-10}$

TABLE 4.4 – Coefficient de vitesse thermique des réactions chimiques pour O + H₂ (Veselina et al. 2021) et OH + H₂ (Agúndez et al. 2010), et le taux de photodissociation de OH et H₂O (Heays et al. 2017).

Dans la région chaude, à faible A_V ($A_V \leq 1$), H₂O est formé par des réactions neutre–neutre :



En supposant que l'abondance totale de l'oxygène ($x_0 \simeq 3,19 \times 10^{-4}$) soit la somme de l'abondance de l'oxygène atomique, de l'eau et de l'hydroxyle, nous obtenons une abondance de H₂O à l'état d'équilibre de :

$$x(\text{H}_2\text{O}) = \frac{x_{\text{O}}}{1 + \frac{k_{\phi_1} k_{\phi_2}}{k_1 k_2 x(\text{H}_2)^2} \left(\frac{G_0}{n_{\text{H}}}\right)^2 + \frac{k_{\phi_2}}{k_2 x(\text{H}_2)} \left(\frac{G_0}{n_{\text{H}}}\right)} \quad (4.8)$$

Les coefficients de vitesse utilisés dans cette formule sont présentés dans la Table 4.4. Dans l'Annexe, nous utilisons les taux thermiques de Agúndez et al. (2010) et Veselinova et al. (2021). Cette formule est une généralisation de celle fournie par Kristensen et al. (2017) (voir aussi van Dishoeck et al. 2021) et montre que l'abondance de H_2O dans les environnements chauds et denses dépend principalement de G_0/n_{H} , T_{K} , et de l'abondance de H_2 .

L'abondance est représentée dans la Figure 4.13 en fonction de G_0/n_{H} pour différentes températures. L'abondance augmente considérablement avec la température dans la gamme $T_{\text{K}} = 400 - 1\,000\text{ K}$ alors qu'elle est inversement proportionnelle à G_0/n_{H} . Cela montre qu'une faible variation de la température entraîne une forte variation de l'abondance de H_2O et donc de l'émission de OH dans l'IR moyen, alors qu'une variation du champ de rayonnement UV incident a un impact un peu plus faible. En effet, plus la température et la densité sont élevées, plus elles favorisent la formation de H_2O . Plus l'intensité du champ UV est élevée, plus elle favorise sa destruction par photodissociation.

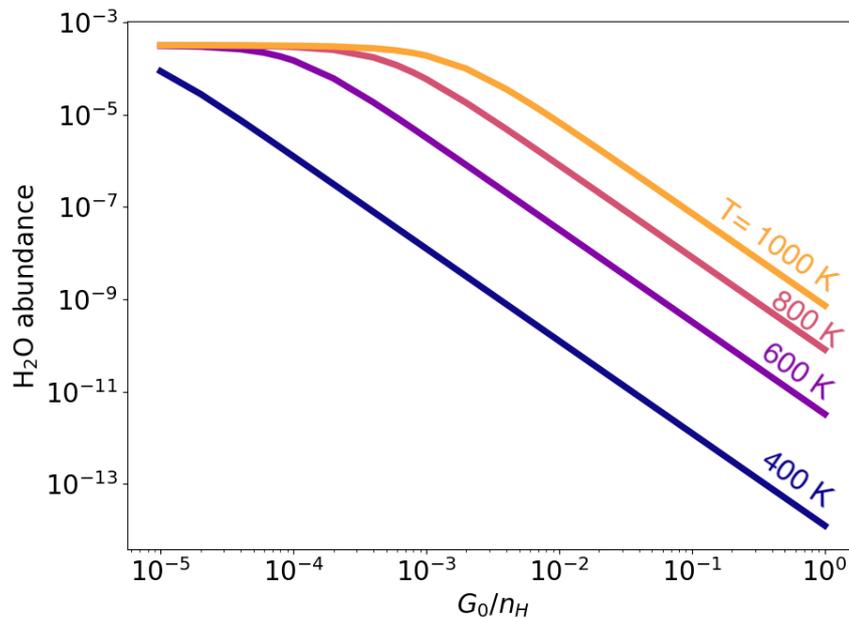


FIGURE 4.13 – Abondance de H_2O provenant des réactions neutre–neutre en fonction de $G_0^{\text{incident}}/n_{\text{H}}$ pour différentes températures.

Nous montrons également sur la Figure 4.15 que notre modèle analytique, multiplié par un facteur six pour prendre en compte qualitativement l'énergie interne de H_2 , reproduit bien le profil d'abondance calculé par le code PDR de Meudon, confirmant que, dans le cas des réactions $\text{H}_2 + \text{O}$, les taux de réaction thermique peuvent être utilisés pour analyser, au moins qualitativement, le rôle des conditions physiques sur la quantité de H_2O et donc sur l'émission de OH dans l'infrarouge moyen.

Nous notons que dans cette Annexe, nous n'utilisons que le taux de coefficient thermique en supposant que les niveaux de H_2 suivent une distribution de Boltzmann. La distribution des niveaux de H_2 peut être différente dans les PDRs, en particulier à cause du pompage UV. Cependant, l'utilisation de la chimie spécifique état–état de Veselinova et al. (2021)

n'augmente l'abondance de H_2O que d'un facteur 6-10. Il faut d'ailleurs noter que ce facteur est certainement surestimé puisque dans le code PDR, la chimie état-état de H_2O n'est pris en compte qu'en remplaçant l'énergie d'activation par la différence entre l'énergie d'activation et l'énergie rovibrationnelle de H_2 dans le coefficient de réaction au lieu des coefficients de réaction état-état estimés par des calculs quantiques précis comme ce qui est fait pour OH par Veselinova et al. (2021). Les résultats de Veselinova et al. (2021) montrent que la prise en compte de la chimie état-état dans le cas de OH n'a que peu d'impact sur l'abondance de OH (à peine un facteur 2) et donc il est possible que la chimie état-état de H_2O est un impact plus faible que ce qui est prédit actuellement dans le code PDR avec l'hypothèse faite.

4.A.1.2 Réactions neutre-ion

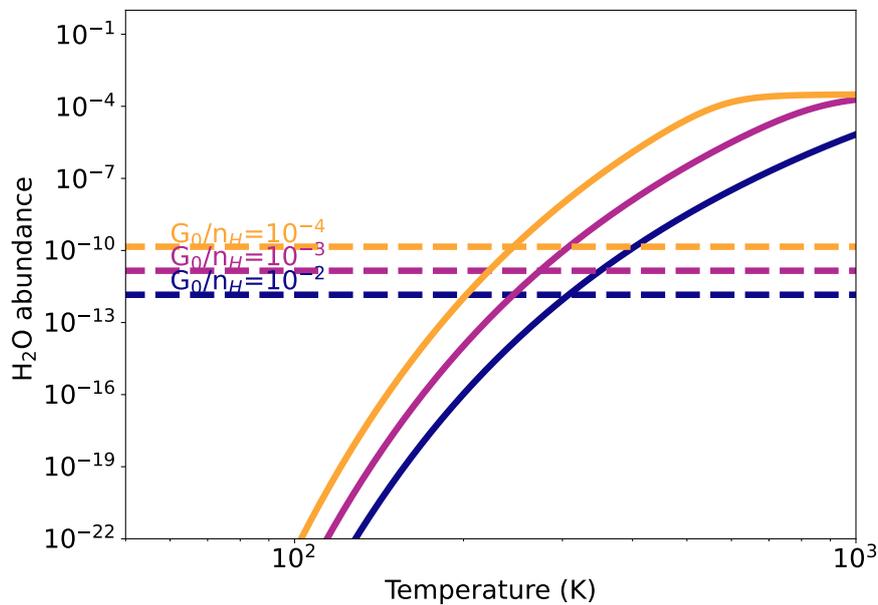
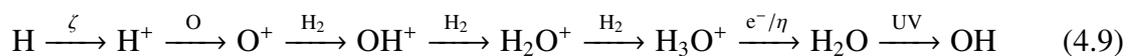


FIGURE 4.14 – Abondance de H_2O en fonction de la température pour différentes valeurs de G_0/n_{H} . Les lignes en pointillés sont les abondances calculées pour la voie ion-neutre et les lignes pleines sont les abondances calculées pour la voie neutre-neutre. Cette Figure met en évidence la température de transition entre la voie ion-neutre et la voie neutre-neutre.

Dans les régions froides, à des A_V plus élevés ($A_V \geq 1$), H_2O est formé par des réactions neutre-ion. Dans les régions atomiques, la voie ion-neutre est la suivante :

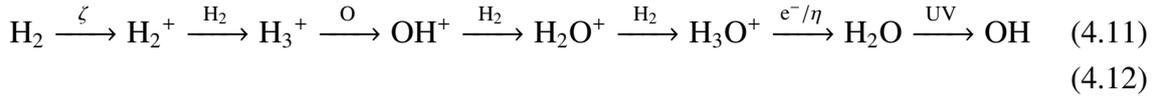


ζ est le taux d'ionisation des rayons cosmiques et η est le rapport d'embranchement de la recombinaison électronique formant H_2O ($\eta \sim 20\%$). En effet, la recombinaison électronique

de H_3O^+ peut également conduire à OH. Nous supposons en outre que cette série de réactions conduisant à H_3O^+ a une efficacité ϵ ($\epsilon \sim 15\%$) :

$$x(\text{H}_2\text{O}) = \epsilon \eta \frac{\zeta}{k_{\phi_2} G_0} x(\text{H}) \quad (4.10)$$

Dans les régions moléculaires, le chemin ion–neutre est légèrement différent :



(4.12)

Ainsi, dans les régions moléculaires, nous avons :

$$x(\text{H}_2\text{O}) = \epsilon \eta \frac{\zeta}{k_{\phi_2} G_0} x(\text{H}_2). \quad (4.13)$$

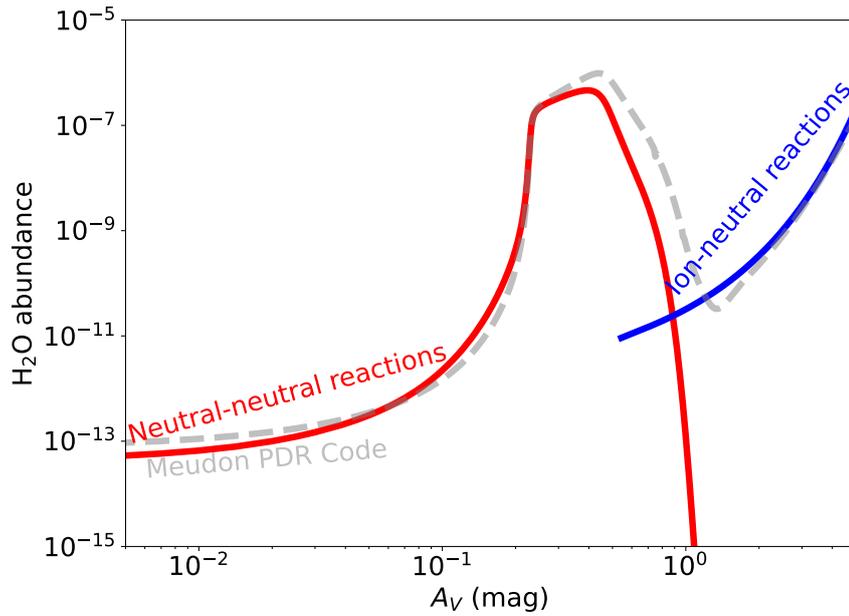


FIGURE 4.15 – Comparaison entre le code PDR de Meudon pour un modèle à $P_{\text{th}}/k_B = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$ et le calcul analytique de l'abondance de H_2O multiplié par un facteur 6. La différence entre le modèle et le calcul analytique est due au fait que nous ne prenons pas en compte les autres processus de formation.

Dans la Figure 4.15, nous montrons que la formule analytique reproduit bien le profil d'abondance de H_2O dans la région froide et protégée de la PDR où la voie de formation neutre–neutre est inefficace. Cependant, comme mentionné dans la Section 4.2.1, seule la chimie en phase gazeuse est prise en compte dans le code PDR de Meudon pour la formation de l'eau. Dans ces régions, la formation de H_2O solide et la photo-désorption ultérieure vers la phase gazeuse peuvent modifier la position et l'amplitude du pic (Hollenbach et al. 2009; Putaud et al. 2019).

4.A.2 Chimie de OH

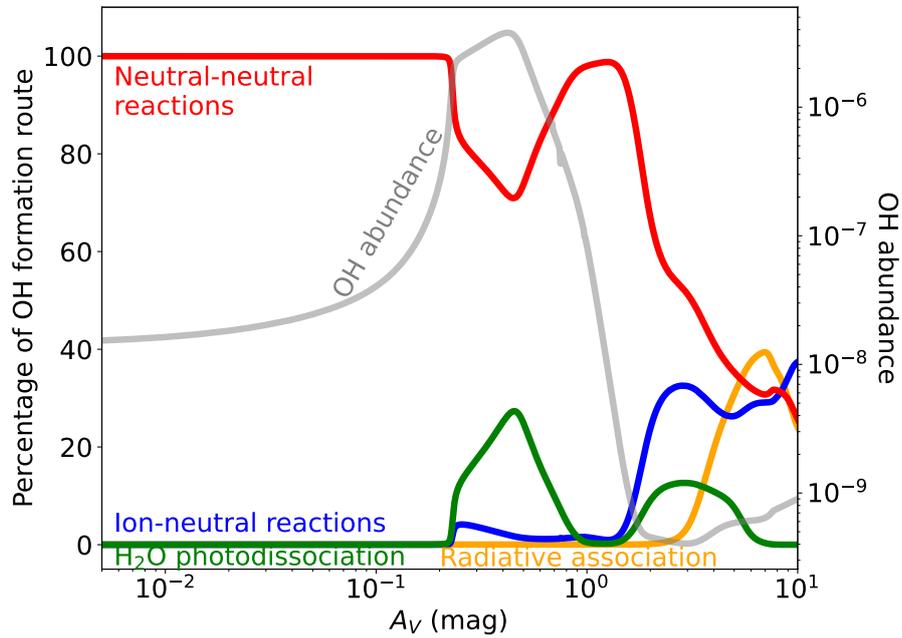


FIGURE 4.16 – Pourcentage des différentes voies de formation de OH en fonction de l’extinction visuelle pour le modèle $P_{\text{th}}/k_B = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0^{\text{incident}} = 10^4$. La ligne bleue représente le pourcentage de la voie de formation ion–neutre, et la ligne rouge représente le pourcentage de la voie de formation neutre–neutre qui nécessite des températures élevées ($T_K \gtrsim 300 \text{ K}$). La ligne verte représente le pourcentage de formation de OH par photodissociation de H_2O . La ligne orange représente le pourcentage de formation de OH par association radiative.

La Figure 4.16 présente les différentes voies de formation de OH. Elle montre que dans la majeure partie du nuage, les réactions neutre–neutre dominent. La photodissociation de H_2O contribue de manière significative au pic d’abondance de OH.

Chapitre 5

Détection de la chimie de l'eau en action dans un disque protoplanétaire

5.1	Introduction	175
5.1.1	Contexte	175
5.1.2	Objet étudié et méthode d'analyse	176
5.1.3	Organisation de l'article	178
5.2	Observations et réduction de données	179
5.3	Méthode	180
5.3.1	Post-traitement des spectres JWST	180
5.3.2	GROSBETA pour modéliser OH	180
5.4	Résultats	182
5.4.1	Analyse de l'émission de H ₂	182
5.4.2	Preuve de la photodissociation de H ₂ O	183
5.4.3	Preuve du pompage chimique (à la formation) par O + H ₂	187
5.4.4	La chimie en action de l'oxygène en phase gazeuse chaude	190
5.5	Discussion	195
5.6	Conclusions	196
5.A	Annexes	197
5.A.1	Calculs dynamiques quantiques pour O + H ₂	197
5.A.2	Intensité des raies de OH et de H ₂	198

Ce chapitre est essentiellement basé sur une traduction de l'article :

"OH as a probe of the warm-water cycle in planet-forming disk."

M. Zannese, B. Tabone, E. Habart, J. R. Goicoechea, A. Zanchet, et al.

Nature Astronomy, Volume **8**, p.577 (2024)

L'introduction a été modifiée pour mieux intégrer le chapitre dans le contexte du manuscrit de thèse. Une conclusion pour résumer les résultats a été ajoutée. La partie *Method* et les *Extended Data Figures* placées à la fin de l'article ont été réintégrés dans le texte principal pour faciliter la lecture.

OH as a probe of the warm-water cycle in planet-forming disks

Received: 29 July 2023

Accepted: 12 January 2024

Published online: 23 February 2024

 Check for updates

A list of authors and their affiliations appears at the end of the paper

Water is a key ingredient for the emergence of life as we know it. Yet, its destruction and reformation in space remain unprobed in warm gas ($T > 300$ K). Here we detect with the James Webb Space Telescope the emission of the hydroxyl radical (OH) from d203-506, a planet-forming disk exposed to external far-ultraviolet (FUV) radiation. These observations were made as part of the Early Release Science programme PDRs4All, which is focused on the Orion bar. The observed OH spectrum is compared with the results of quantum dynamical calculations to reveal two essential molecular processes. The highly excited rotational lines of OH in the mid-infrared are telltale signs of H_2O destruction by FUV radiation. The OH rovibrational lines in the near-infrared are attributed to chemical excitation by the key reaction $\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$, which seeds the formation of water in the gas phase. These results show that under warm and irradiated conditions, water is destroyed and efficiently reformed through gas-phase reactions. We infer that, in this source, the equivalent of Earth oceans' worth of water is destroyed per month and replenished. This warm-water cycle could reprocess some water inherited from cold interstellar clouds and explain the lower deuterium fraction of water in Earth's oceans compared with that found around protostars.

Water is a key ingredient in the emergence of life and is, therefore, a key aspect in the assessment of the habitability of (exo)planets. Yet, the trail of water to planets remains unclear. In a disk's inner regions (≤ 10 au), where the terrestrial and sub-Neptune planets are expected to form, a notable fraction of the water inherited from cold interstellar clouds is destroyed and reformed^{1–3}. In fact, theoretical models predict that under the warm ($T > 300$ K) and far-ultraviolet (FUV, $6 < h\nu < 13.6$ eV) irradiated conditions present in disk atmospheres, water is destroyed and reformed by the chemical cycle: $\text{O} \rightleftharpoons \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$ (refs. 1–3). Notably, this cycle is one of the processes that could lower the deuterium-to-hydrogen enrichment of water inherited from cold clouds and explain the intermediate D/H ratio found in Earth's oceans⁴.

In the past, understanding the detailed balance between the formation and destruction processes in a protoplanetary disk has been challenging because of the limited observational information. Warm water has been detected in planet-forming disks with Spitzer-IRS^{5–7} and ground-based instruments⁸, but its ongoing chemistry remains unprobed. Here, we unveil the water cycle under warm and irradiated

conditions thanks to the combination of observations of OH made by the James Webb Space Telescope (JWST) and quantum dynamical calculations.

The observational data stem from the JWST Early Release Science (ERS) programme PDRs4All⁹, which performed spectroscopic observations of the Orion bar, the edge of an interstellar cloud exposed to the intense FUV radiation from the massive stars of the Trapezium cluster¹⁰ (the FUV flux at the ionization front is $2\text{--}7 \times 10^4$ times that of the local interstellar medium¹¹). The Solar System presumably formed in a similar environment in which external UV radiation influenced the temperature, mass budget and chemical composition of the solar nebula¹². Figure 1 shows the d203-506 disk within the observed area as a dark lane against the bright background of the nebulae (see Methods for its detailed characteristics). A photo-evaporative wind, seen as a more diffuse emission of H_2 , is launched from the upper layers of the disk¹³. This is the result of the intense FUV radiation from the massive stars in the proximity of d203-506, which heats the gaseous disk. In addition, the young star at the centre launches a collimated

✉ e-mail: marion.zannese@universite-paris-saclay.fr

5.1 Introduction

5.1.1 Contexte

J'ai montré dans le Chapitre 4 que les raies de OH provenant de la photodissociation de l'eau était un diagnostic puissant pour contraindre les paramètres physiques du milieu. Les résultats de cette étude montrent également que ces raies ne sont détectables que dans les régions très denses et très irradiées. Seule la Barre d'Orion était un candidat, dans les PDRs, potentiel pour la détection de ces raies. Ainsi, quand les données de MIRI-MRS sur la Barre d'Orion du programme PDRs4All sont arrivées en janvier 2023, j'ai cherché la signature de cette émission. L'émission prompte de OH n'est pas détectée dans la PDR, signifiant probablement que la pression thermique du gaz est inférieure à $P_{\text{gas}} = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$. Ceci est d'ailleurs en accord avec les estimations de densité du gaz et de pression thermique réalisées à partir de l'émission des poussières et des raies de H_2 (voir Chapitre 3, Section 3.2.4.2). Cependant, dans les observations, deux disques protoplanétaires sont présents dans la ligne de visée (voir Chapitre 3, Section 3.2.3). C'est ainsi que nous avons détecté l'émission prompte de OH provenant de la photodissociation de l'eau dans le disque d203-506. Grâce aux observations combinées de NIRSspec et MIRI-MRS, nous détectons également dans ce disque l'émission de OH, rovibrationnellement excité par pompage chimique par $\text{O} + \text{H}_2$, traçant la première étape de la reformation de l'eau en phase gazeuse. Nous observons alors, dans le disque d203-506, les cycles de formation et de destruction de l'eau dans des conditions chaudes et irradiées grâce à la combinaison d'observations JWST de OH et de calculs de dynamique quantique.

L'eau est un ingrédient clé de l'émergence de la vie et constitue donc un aspect essentiel de l'évaluation de l'habitabilité des (exo)planètes. Pourtant, le cheminement de l'eau vers les planètes n'est toujours pas clair. Dans les régions internes d'un disque ($\lesssim 10 \text{ au}$), où les planètes terrestres et sous-Neptune devraient se former, une fraction significative de l'eau héritée des nuages froids est détruite et reformée (van Dishoeck et al. 2021; Glassgold et al. 2009; Bethell & Bergin 2009). En fait, les modèles théoriques prédisent que dans les régions chaudes ($T > 300 \text{ K}$) et irradiées par FUV ($6 < h\nu < 13,6 \text{ eV}$) présentes dans les atmosphères de disques, l'eau est détruite et reformée par le cycle chimique : $\text{O} \rightleftharpoons \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$ (van Dishoeck et al. 2021; Glassgold et al. 2009; Bethell & Bergin 2009). Notamment, ce cycle est l'un des processus qui pourrait réduire l'enrichissement en deutérium/hydrogène de l'eau héritée des nuages froids et expliquer le rapport D/H intermédiaire que l'on trouve dans les océans de la Terre (Thi et al. 2010). Dans le passé, la compréhension de l'équilibre détaillé entre les processus de formation et de destruction dans les disques protoplanétaires a été difficile en raison du peu d'informations observationnelles. De l'eau chaude a été détectée dans les disques protoplanétaires avec *Spitzer*-IRS (Salyk et al. 2011; Carr & Najita 2011; Pontoppidan et al. 2014) et des instruments au sol (Mandell et al. 2012), mais sa chimie en action n'a pas encore été sondée.

5.1.2 Objet étudié et méthode d'analyse

Pour réaliser ce projet, j'utilise les données d'observation provenant du programme JWST *Early Release Science* (ERS) "PDRs4All" (Berné et al. 2022). Pour plus de détails sur les observations de ce programme, j'invite le lecteur à se référer au Chapitre 3, Section 3.2.3. En résumé, ce programme a effectué des observations spectroscopiques de la Barre d'Orion, un nuage interstellaire exposé au rayonnement FUV intense des étoiles massives de l'amas du Trapèze (Tielens et al. 1993) (flux FUV au niveau du front d'ionisation égal à $2 - 7 \times 10^4$ fois celui du milieu interstellaire local, Peeters et al. 2024). Étudier un disque protoplanétaire dans cet environnement est particulièrement intéressant puisque le système solaire s'est vraisemblablement formé dans un environnement similaire, dans lequel le rayonnement UV externe a influencé la température, la masse et la composition chimique de la nébuleuse solaire (Adams 2010).

La Figure 5.1 montre le disque d203-506, situé dans la zone observée, comme une tache sombre sur un fond lumineux de nébuleuses. Un vent photoévaporé, vu en H_2 comme une émission plus diffuse, est lancé depuis les couches supérieures du disque (Winter & Haworth 2022). C'est le résultat de l'intense rayonnement FUV des étoiles massives à proximité de d203-506 qui chauffe le disque gazeux. De plus, la jeune étoile au centre lance un jet collimaté à grande vitesse, visible dans l'émission de la raie du $[Fe II]$, qui creuse une cavité dans le vent. La partie nord-ouest de la cavité est particulièrement brillante dans les raies moléculaires excitées. Cette émission accrue est probablement due à une augmentation locale de la densité induite par les chocs (*bow-shocks*) provenant du jet (Tabone et al. 2018), et l'irradiation directe des étoiles du Trapèze ou de l'étoile centrale elle-même. J'invite le lecteur à se référer au Chapitre 3, Section 3.2.5.1 pour une description détaillée de l'objet. Ici, nous rapportons la détection de l'émission rotationnelle et rovibrationnelle infrarouge de OH à la fois par MIRI-MRS et NIRSpec, respectivement. L'émission de OH est détectée là où il y a une émission de H_2 brillante, c'est-à-dire partout dans le vent photoévaporé, révélant une chimie active de l'oxygène en phase gazeuse alimentée par H_2 chaud. La Figure 5.2 montre des cartes d'émission de H_2 et de OH dans l'infrarouge proche et moyen. Dans cette étude, nous nous concentrons sur le point lumineux afin d'obtenir des spectres à haut rapport signal à bruit.

D'un point de vue observationnel, j'ai utilisé des données déjà réduites par des personnes de l'équipe PDRs4All. J'ai travaillé sur différentes versions en échangeant régulièrement avec l'équipe me permettant de comprendre leur effet sur les données. J'ai alors utilisé des cubes de spectro-imagerie déjà réduits desquels j'ai extrait les spectres en choisissant les ouvertures et réalisé toute l'analyse et interprétation scientifique (sur H_2 et OH) en mesurant les intensités intégrées, en réalisant les cartes d'émission, en réalisant les diagrammes d'excitation, etc.

Pour analyser les spectres observés, j'utilise le code GROSBETA, un modèle à zéro dimension que je décris plus précisément dans la Section 5.3.2. Les modifications sur ce code pour intégrer le pompage chimique ont été réalisées par Benoît Tabone. Les coefficients de réaction état-état du pompage chimique de OH utilisés pour reproduire les données ont été calculés par Veselinova et al. (2021). Dans ce Chapitre, je montre alors qu'un modèle à zéro dimension, plus simple que le code PDR de Meudon que j'utilise dans le Chapitre 4, donne

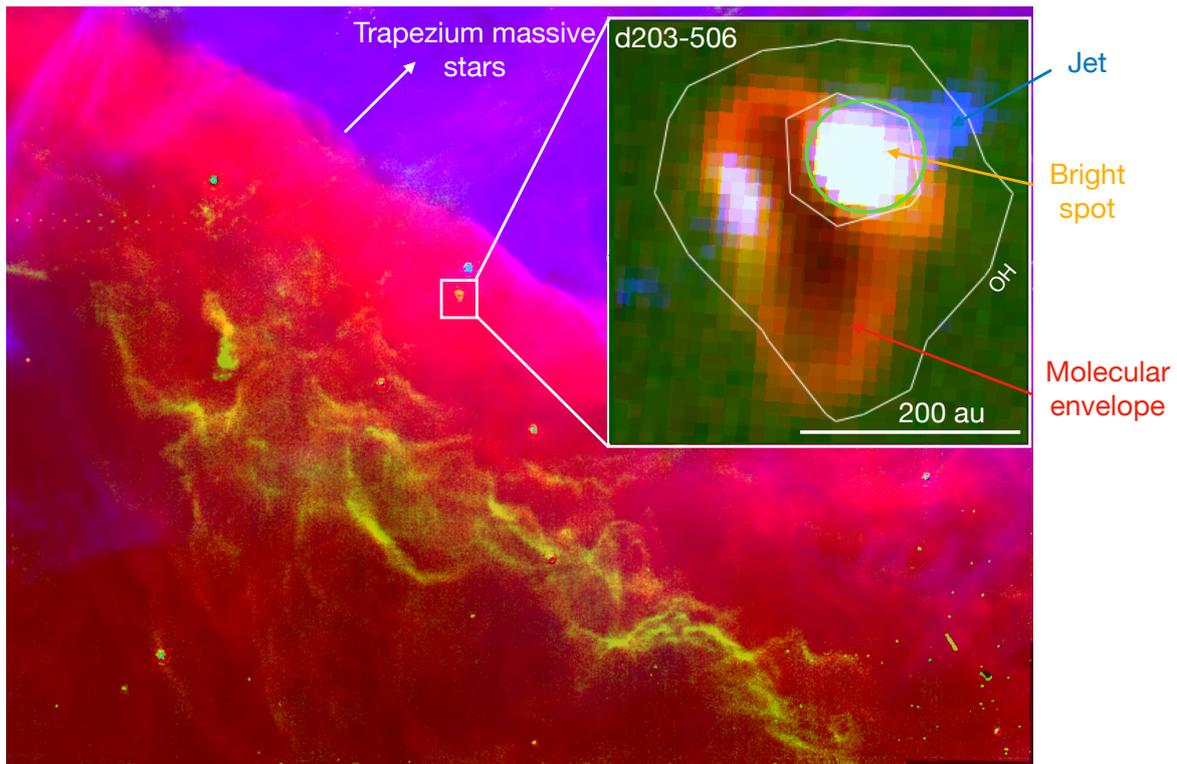


FIGURE 5.1 – Image composite NIRCам du JWST de la Barre d’Orion, située dans le nuage moléculaire d’Orion. Le rouge est l’émission à $3,35 \mu\text{m}$ (filtre F335M de NIRCам), le bleu est l’émission de Pa α (filtre F187N soustrait par le filtre F182M) et le vert est l’émission de la raie de H₂ 0-0 S(9) à $4,70 \mu\text{m}$ (filtre F470N soustrait par le filtre F480M). L’encadré montre un zoom sur le disque protoplanétaire d203-506 où les raies de OH sont détectées. Le rouge représente l’émission de la raie de H₂ 1-0 S(1) à $2,12 \mu\text{m}$ (filtre F212N), le bleu représente l’émission de la raie du [Fe II] à $1,64 \mu\text{m}$ (filtre F164N), et le vert représente l’émission dans le filtre F140M à large bande du proche infrarouge qui trace la lumière diffusée autour de $1,4 \mu\text{m}$ (filtre F140M à large bande). Les contours blancs représentent l’émission de la raie rotationnelle de OH à $9,79 \mu\text{m}$ détectée avec MIRI-MRS (les niveaux sont $1,1, 2,5 \times 10^{-5} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$). Le point brillant dans la partie nord-ouest du système d203-506 coïncide avec la région d’interaction entre un jet et le vent photoévaporé. L’émission de OH la plus brillante provient de cette région. Les spectres présentés dans les Figures 5.5 et 5.9 sont une moyenne sur la région délimitée par le cercle vert afin d’avoir le meilleur rapport signal à bruit. Crédits d’images : NASA, ESA, CSA, équipe PDRs4All ERS, pdrs4all.org.

des résultats compatibles avec ce dernier. Ainsi, nous mettons en avant la puissance de ces modèles simples pour contraindre rapidement les conditions physiques d’un objet sans avoir recours à des modèles thermochimiques pouvant être biaisés par leurs hypothèses de calculs (voir Chapitre 2, Section 2.1.1.6).

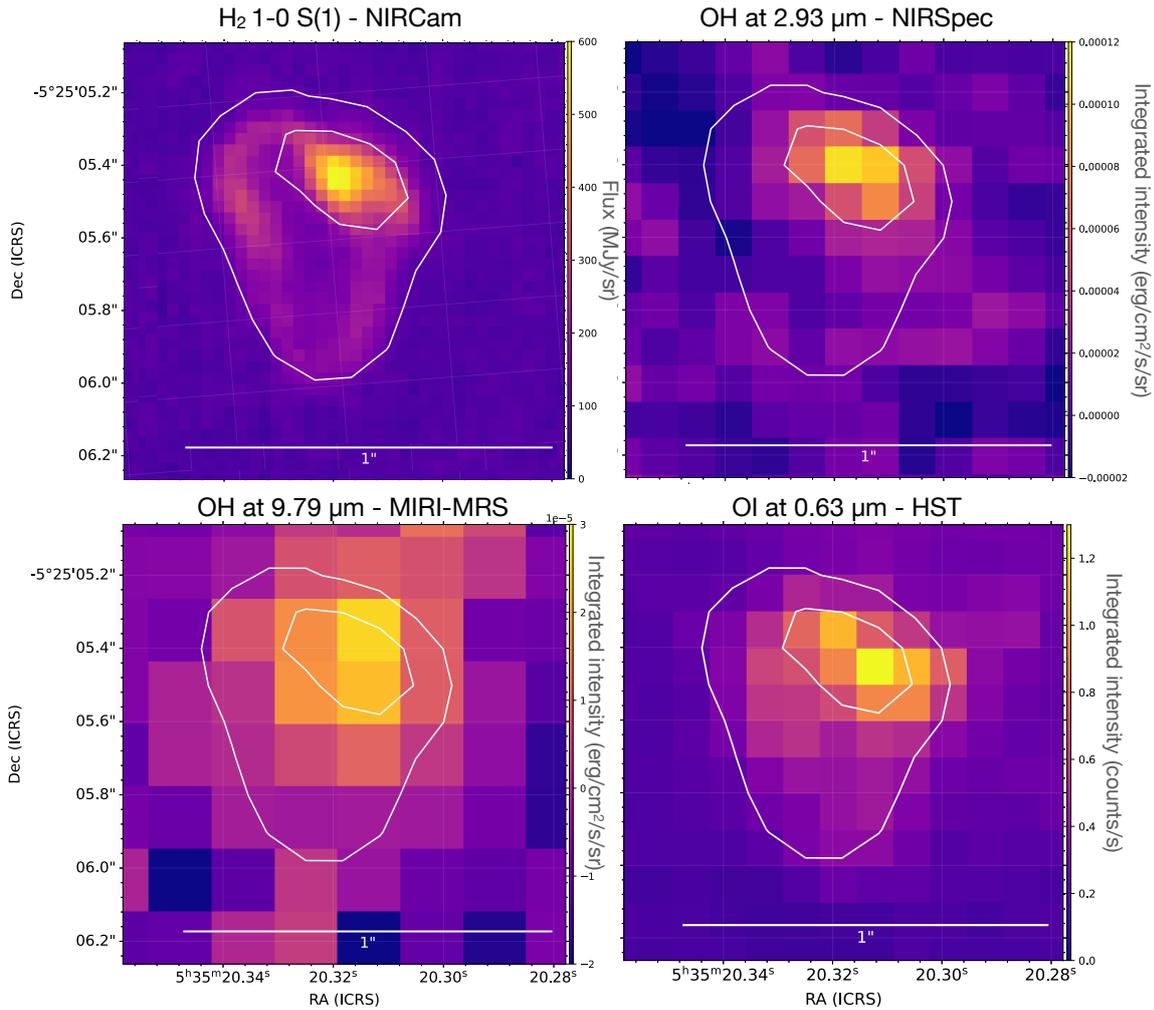


FIGURE 5.2 – Distribution spatiale de l'émission des raies clés. (En haut à gauche) Image de d203-506 dans le filtre F212N de NIRCcam (en MJy sr^{-1}), (en haut à droite) carte de l'intensité intégrée de la raie de OH détectée avec NIRSspec à $2,934 \mu\text{m}$ (en $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{sr}^{-1}$), (en bas à gauche) carte de l'intensité intégrée de la raie de OH détectée avec MIRI-MRS à $9,791 \mu\text{m}$ (en $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{sr}^{-1}$), (en bas à droite) carte de l'intensité intégrée de OI à $0,63 \mu\text{m}$ obtenue avec le télescope spatial Hubble (HST) (en counts s^{-1}) (Bally et al. 2000). Les contours de la raie de H_2 1-0 S(1) détectée par NIRSspec sont indiqués en blanc (niveaux à 7×10^{-4} , $2 \times 10^{-3} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{sr}^{-1}$).

5.1.3 Organisation de l'article

Dans cet article, nous dévoilons le cycle de formation et destruction de l'eau à travers la détection de OH rotationnellement et rovibrationnellement excité avec MIRI-MRS et NIRSspec, respectivement. Nous utilisons des modèles à zéro dimension pour comprendre les processus à l'origine de cette excitation. Ensuite, nous montrons comment ces signatures peuvent être utilisées pour contraindre des paramètres physiques et chimiques du milieu. L'article est organisé comme suit. Dans la Section 5.2, je présente les observations ainsi que les éléments principaux de la réduction de données. Dans la Section 5.3, je décris les

différentes méthodes d'analyse des spectres, c'est-à-dire le traitement après la réduction de données et les principaux ingrédients de la modélisation de OH par le code GROSBETA. Dans la Section 5.4, je présente les détections de OH ainsi que les principaux résultats de leur analyse. Plus particulièrement, la Section 5.4.1 présente l'analyse de l'émission de H₂ nécessaire à l'analyse de OH, la Section 5.4.2 présente l'émission prompte de OH suivant la photodissociation de l'eau, la Section 5.4.3 présente l'émission de OH par pompage chimique lors de la réaction O + H₂ et la Section 5.4.4 montre comment ces émissions peuvent être utilisées pour contraindre différents paramètres de l'environnement. La Section 5.5 discute comment ce cycle de l'eau peut influencer la composition de l'eau dans les disques protoplanétaires et plus particulièrement celle de nos océans. Les principaux résultats de cette étude sont résumés dans la Section 5.6.

5.2 Observations et réduction de données

Les observations avec MIRI-MRS en mode IFU (*Integral Field Unit*) ont été obtenues dans le cadre du programme PDRs4All *Early Research Science* (ERS) : *Radiative feedback from massive stars* (ID1288, PIs : Berné, Habart, Peeters) (Berné et al. 2022). Les observations couvrent une mosaïque de 9×1 centrée sur $\alpha_{J2000} = 05^{\text{h}}35^{\text{min}}20.4749^{\text{s}}$, $\delta_{J2000} = -05^{\circ}25'10.45''$. Un dither à 4 points optimisé pour les sources étendues a été appliqué et le modèle de lecture FASTR1 adapté aux sources brillantes a été utilisé. Le temps d'intégration était de 521,7 secondes, avec 47 groupes/intégration et 4 intégrations. Les données couvrent une gamme de longueurs d'onde allant de 4,90 à 27,9 μm , ont une résolution spectrale $R \sim 1\,700 - 3\,700$, et une résolution spatiale de $0,2'' - 0,8''$. Cette dernière correspond à une très petite échelle spatiale d'environ 100 au à la distance de la Barre d'Orion (414 pc, Menten et al. 2007). Les données MIRI-MRS ont été réduites à l'aide de la version 1.11.1 du *pipeline JWST*¹, et du *Calibration References Data System*² (CRDS) 1097. La correction des franges résiduelles de l'étape 2 a été appliquée en plus de l'étape de correction des franges standard. Une soustraction de l'arrière-plan principal a été appliquée à l'étape 3 de la réduction. Les 12 cubes (4 canaux de 3 sous-bandes chacun), toutes positions de pointage confondues, ont été assemblés en un seul cube (Canin et al., en préparation) (voir Chown et al. (2024) pour les détails de la réduction des données). La mosaïque a été positionnée afin de se superposer aux observations de NIRSpec-IFU de la Barre d'Orion qui est également une mosaïque 9×1 . Le mode de lecture NRSRAPID, approprié pour les sources brillantes, et un schéma de dither à 4 points ont également été utilisés pour NIRSpec. Le temps d'intégration sur la source était de 257,7 s par exposition avec cinq groupes par intégration avec une intégration par exposition. Les données ont été réduites en utilisant le *Science Calibration Pipeline* du JWST (version 1.10.2.dev26+g8f690fdc) et le contexte `mwst_1084.pmap` du *Calibration References Data System* (CRDS) (voir Peeters et al. (2024) sur le processus de réduction des données). Les spectres MIRI-MRS et NIRSpec, en unités de MJy sr^{-1} , ont été moyennés sur une ouverture circulaire centrée sur $\alpha_{J2000} = 5^{\text{h}}35^{\text{min}}20.3145^{\text{s}}$ et $\delta_{J2000} = -5^{\circ}25'05.528''$ avec un rayon de $0,15''$. Une position OFF a été moyennée dans une ouverture circulaire centrée sur $\alpha_{J2000} = 5^{\text{h}}35^{\text{min}}20.2539^{\text{s}}$ et $\delta_{J2000} = -5^{\circ}25'05.498''$ avec un rayon de $0,3''$.

1. <https://jwst-pipeline.readthedocs.io/en/latest/>

2. <https://jwst-crds.stsci.edu/>

5.3 Méthode

5.3.1 Post-traitement des spectres JWST

Afin de mieux visualiser les raies de OH dans les Figures 5.5 et 5.9, le continuum a été soustrait en considérant plusieurs points dans les régions spectrales exemptes de raies d'émission et les raies autres que celles de OH ont été soustraites comme le montre la Figure 5.3. Dans la gamme spectrale de MIRI-MRS sélectionnée (9-10,4 μm), plusieurs raies proéminentes sont présentes, telles que les raies de H I 8-13 à 9,261 et 9-20 à 9,392 μm , la raie de H₂ 0-0 S(3) à 9,665 μm . Les raies provenant de l'arrière-plan et de l'avant-plan du disque protoplanétaire ont été soustraites en les ajustant dans le spectre OFF. Ceci permet de soustraire l'émission des raies de recombinaison de H I, 8-13 à 9,261 et 9-20 à 9,392 μm . Nous avons également soustrait la raie de H₂ 0-0 S(3) en l'ajustant directement dans le spectre ON (voir Figure 5.3). Le même traitement a été appliqué au spectre NIRSPEC ; un continuum a été soustrait et les raies de H I, 5-11 à 2,873 μm et 5-10 3,039 μm , les raies de O I à 2,893 et 3,099 μm , les raies de H₂ 2-1 O(3) à 2,974 μm , 1-0 O(4) à 3,004 μm , 2-1 O(4) à 3,189 μm et deux raies non identifiées à 3,164 et 3,224 μm ont été supprimées en les ajustant directement dans le spectre ON.

5.3.2 GROSBETA pour modéliser OH

Notre modèle de OH comprend les niveaux rovibrationnels, le dédoublement Λ et les niveaux de structure fine de OH dans son état électronique fondamental OH($X^2\Pi$) et dans son premier état électronique OH($A^2\Sigma^+$), tels que fournis par Brooke et al. (2016); Yousefi et al. (2018) et compilés dans Tabone et al. (2021). Les spectres synthétiques du JWST de OH sont calculés à l'aide du code d'excitation moléculaire GROSBETA (Tabone et al. 2021) et des résultats des calculs de dynamique quantique (van Harrevelt & van Hemert 2000b, 2001). Le modèle d'excitation est basé sur une approche à zone unique suivant le formalisme présenté dans van der Tak et al. (2007). La population des niveaux de OH est calculée en tenant compte de la production de OH dans différents états, du pompage radiatif et de la (dés)excitation collisionnelle inélastique. Dans l'hypothèse de l'équilibre chimique, l'équation détaillée du bilan pour le niveau i le long de la ligne de visée est donnée par :

$$\sum_{j \neq i} P_{ji} N_j - N_i \sum_{j \neq i} P_{ij} + F \times \left(f_i(\text{OH}) - \frac{N_i(\text{OH})}{N(\text{OH})} \right) = 0, \quad (5.1)$$

où $N(\text{OH})$ est la densité de colonne totale de OH et N_i [cm^{-2}] sont les densités de colonne dans le niveau i . P_{ij} sont les probabilités de transition collisionnelle radiative et inélastique. La (dés)excitation collisionnelle inélastique de OH avec He et H₂ a été déterminée à l'aide des taux de collision inélastique de Kłos et al. (2007); Offer et al. (1994) et a été extrapolée pour inclure les transitions collisionnelles entre des niveaux de rotation supérieurs de OH, comme ce fut fait dans Tabone et al. (2021). Dans ce travail, la densité de colonne de OH est fixée à $N(\text{OH}) = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ et la densité à $n_{\text{H}} = 10^7 \text{ cm}^{-3}$. Nous adoptons également

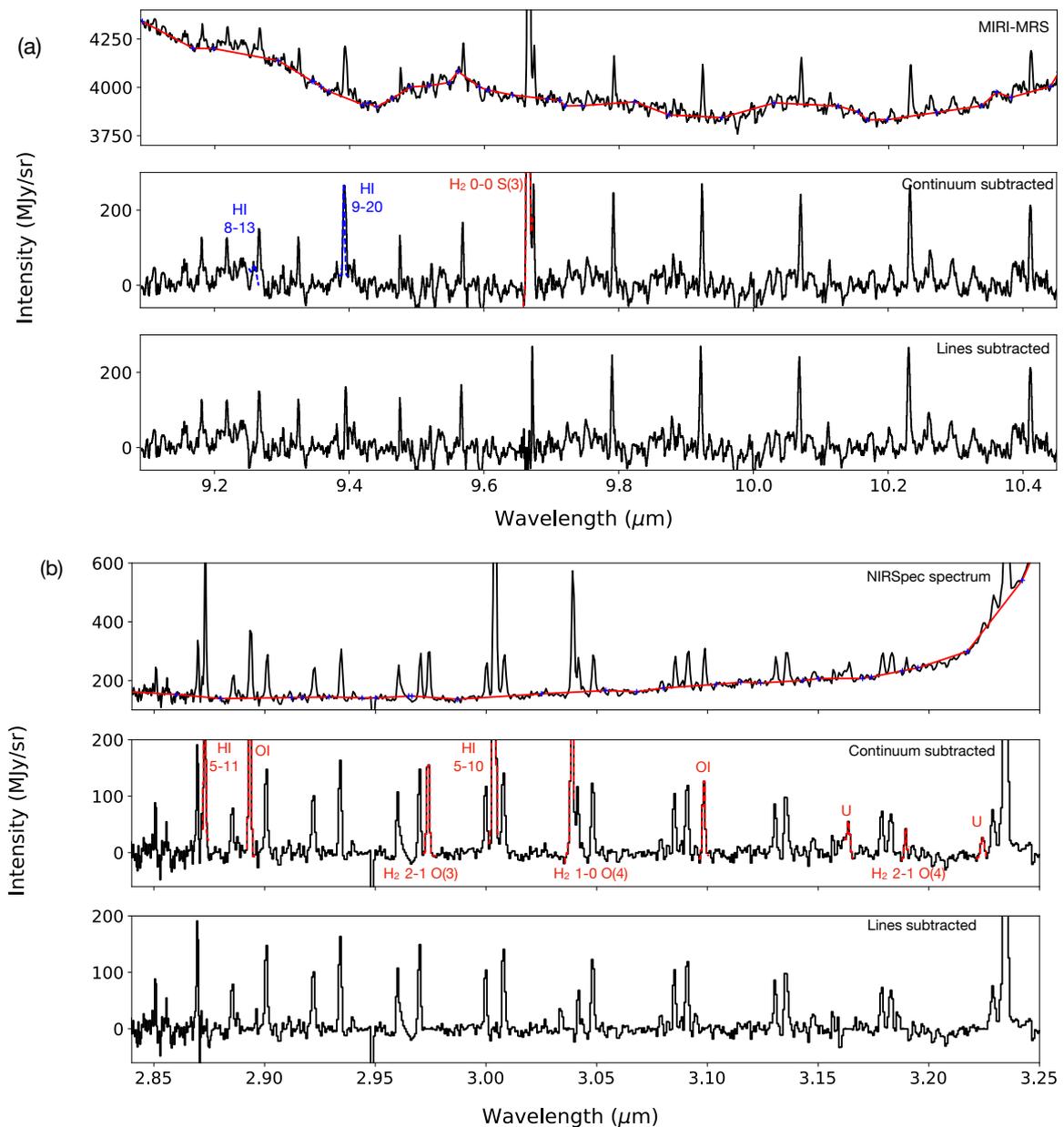


FIGURE 5.3 – Étapes de traitement des spectres MIRI-MRS et NIRSpec pour mieux visualiser les raies de OH. (a) (Haut) Spectre observé avec MIRI-MRS. La ligne rouge est le continuum estimé. (Milieu) Spectre soustrait du continuum. Les gaussiennes rouges sont les ajustements aux raies autres que celles de OH. Les gaussiennes bleues sont les ajustements aux raies de la position OFF qui contaminent les raies de OH. (Bas) Spectre traité avec la soustraction du continuum de la poussière et des raies brillantes autres que celles de OH. (b) (Haut) Spectre observé avec NIRSpec. La ligne rouge est le continuum estimé. (Milieu) Spectre soustrait du continuum. Les gaussiennes rouges sont des ajustements aux raies autres que celles de OH. (Bas) Spectre traité avec la soustraction du continuum de la poussière et des raies brillantes autres que celles de OH.

un champ de rayonnement local composé d'un corps noir dilué à 40 000 K pour modéliser le champ de rayonnement UV émis par les étoiles du Trapèze, un champ de rayonnement infrarouge correspondant à celui détecté par NIRSpec et MIRI-MRS, et un corps noir dilué à 50 K pour rendre compte de l'émission de la poussière dans l'IR lointain et dans le millimétrique. Nous insistons sur le fait que la désexcitation collisionnelle inélastique et le pompage radiatif des niveaux de OH sondés par le JWST étant des ordres de grandeur plus faibles que la désexcitation radiative, les valeurs exactes de $N(\text{OH})$, n_{H} et du champ de rayonnement local ont peu d'importance.

Dans l'équation (5.1), F est le taux de formation, mesuré en $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$, qui produit des OH dans des états i spécifiques avec une probabilité notée f_i et nous supposons que la probabilité de détruire les OH dans un état i est égale à la proportion de OH dans cet état $N_i/N(\text{OH})$. Nous supposons que les autres processus de formation et de destruction n'ont pas d'impact sur la population de niveau. Par souci de clarté, nous calculons des spectres synthétiques incluant soit la photodissociation de H_2O , soit le pompage chimique (à la formation). Cette approche est valable car ces deux processus excitent des niveaux d'énergie différents.

5.4 Résultats

5.4.1 Analyse de l'émission de H_2

L'étude des raies de OH dans MIRI-MRS et NIRSpec nécessite l'analyse de l'émission de H_2 . En effet, comme démontré dans le Chapitre 2, Section 2.2.2, ces raies de OH sont particulièrement liées à l'excitation de H_2 . De plus, comme présenté dans le Chapitre 2, Section 2.2.1.4 et le Chapitre 3, Section 3.2.4.2, les premiers niveaux de H_2 détectés par MIRI-MRS peuvent être utilisés comme un thermomètre du gaz. La température du gaz étant un paramètre important dans nos modélisations, les raies de H_2 sont essentielles pour analyser les raies de OH. Pour analyser l'émission de H_2 , nous avons tracé un diagramme d'excitation présenté dans la Figure 5.4.

Pour cela, nous avons mesuré les intensités intégrées des raies mesurées avec NIRSpec et MIRI-MRS. Ces dernières sont reportées dans la Table 5.4 dans l'Annexe 5.A.2. Elles ont été obtenues en ajustant chaque raie des spectres par une fonction gaussienne couplée à une fonction linéaire pour tenir compte du continuum. Nous notons que les intensités des raies de H_2 vers d203-506 sont également rapportées dans Berné et al. (2023) en utilisant une ouverture légèrement différente. Le diagramme d'excitation de H_2 est dérivé en traçant $Y \equiv \ln\left(\frac{4\pi I}{h\nu_0 A_{ul} g_u}\right)$ en fonction du niveau d'énergie supérieur E_{up} de chaque transition, où I est l'intensité intégrée de la raie, et A_{ul} et ν_0 sont le coefficient d'Einstein A et la fréquence de la raie, respectivement. Une température d'excitation T_{ex} et une densité de colonne totale N peuvent alors être déduites à l'aide de la formule canonique :

$$Y = \ln\left(\frac{N}{Q(T_{\text{ex}})}\right) - E_u/k_B T_{\text{ex}}, \quad (5.2)$$

où $Q(T_{\text{ex}})$ est la fonction de partition.

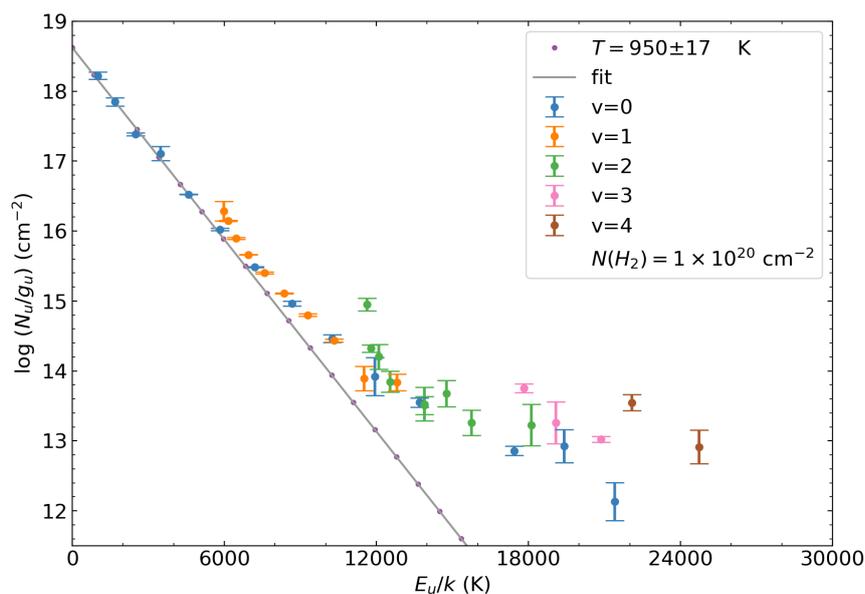


FIGURE 5.4 – Diagramme d’excitation de H_2 dans le point lumineux. L’ajustement de la température a été fait sur les cinq premières raies purement rotationnelles. Les flux de raies mesurés sont reportés dans la Table 5.4 dans l’Annexe 5.A.2. Les incertitudes sont calculées par la routine Python `curve_fit` comme des erreurs à 1σ sur les paramètres. L’impact des effets de calibration n’est pas pris en compte et les incertitudes associées peuvent atteindre 20 %.

Le diagramme d’excitation de H_2 a été réalisé à l’aide du `PhotoDissociation Region Toolbox Python module`³ (`pdrtpy`) (Pound & Wolfire 2023, 2008; Kaufman et al. 2006; Pound & Wolfire 2011).

L’excitation des raies rovibrationnelles jusqu’à des niveaux d’énergie de $\approx 8\,000$ K peut être décrite par une température d’excitation unique de $T_{\text{ex}} \sim 1\,000$ K. Puisque les premiers niveaux de H_2 sont à l’équilibre thermodynamique local, la température du gaz est égale à la température d’excitation. Ainsi, nous dérivons une température du gaz de $T_{\text{gas}} = (950 \pm 17)$ K. Cela correspond à la température moyenne du gaz de la couche chaude de H_2 où OH et H_2O sont efficacement formés et photodissociés. Nous déduisons également de l’Équation (5.2) une densité de colonne de $N(H_2) = 9,9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$.

5.4.2 Preuve de la photodissociation de H_2O

Le spectre MIRI-MRS illustré dans la Figure 5.5 révèle une série de raies rotationnelles de OH très excitées dans l’état vibrationnel fondamental, correspondant à un changement du nombre quantique de rotation de $N \rightarrow N - 1$. Au total, des raies provenant de 23 niveaux de rotation allant de $N = 44$ à $N = 18$ sont détectées dans la région $9 - 13 \mu\text{m}$, ce qui permet de sonder des énergies de niveau supérieur jusqu’à $45\,000$ K (voir la Figure 5.6).

3. <https://github.com/mpound/pdrtpy>

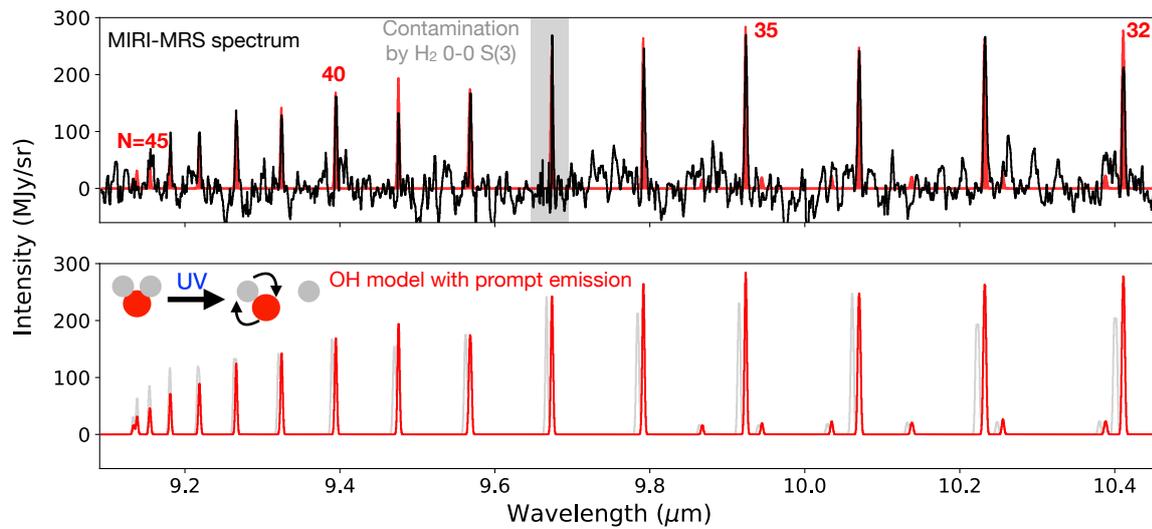


FIGURE 5.5 – Preuve de la photodissociation de H_2O à partir des raies rotationnelles de OH détectées par MIRI-MRS. (Haut) Spectre observé avec MIRI-MRS où le continuum de la poussière et les raies brillantes, autres que celles de OH, ont été soustraits (voir Section 5.3.1). Les raies de OH rotationnellement excitées sont détectées jusqu’aux niveaux $N = 44$. (Bas) Spectres synthétiques provenant de GROSBETA. Le spectre en rouge suppose que la photodissociation de l’eau produit des OH dans des états de dédoublement Λ symétrique, tandis que le spectre en gris suppose une distribution égale entre les sous-niveaux.

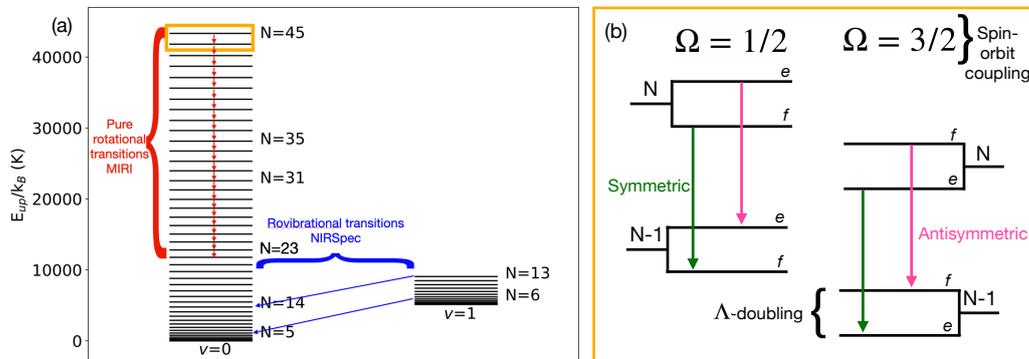


FIGURE 5.6 – Vue schématique de la spectroscopie de OH pertinente pour le JWST. (a) Niveaux d’énergie rotationnels et rovibrationnels de OH. Les flèches rouges représentent les transitions purement rotationnelles détectées par MIRI-MRS. Les flèches bleues représentent certaines des transitions rovibrationnelles détectées avec NIRSspec. (b) Zoom sur le rectangle jaune pour révéler la division d’un niveau rotationnel due au couplage spin-orbite et au dédoublement Λ . Les deux états spin-orbite sont désignés par le nombre quantique Ω et les états de dédoublement Λ sont désignés par leur parité spectroscopique $\epsilon = e/f$. Les flèches vertes et roses sont les transitions détectées dans les observations formant un quadruplet. Les flèches vertes sont les transitions provenant d’états symétriques et les flèches roses sont les transitions provenant d’états antisymétriques.

Le diagramme d'excitation de OH, présenté dans la Figure 5.7, a été tracé selon la méthode présentée dans la Section 5.4.1. Les intensités intégrées des raies de OH dans l'infrarouge sont reportées dans les Tables 5.2 et 5.3 dans l'Annexe 5.A.2. Celui-ci révèle une température d'excitation des niveaux rotationnels extrêmement élevée de 10 000 K. Cette température est dix fois plus élevée que la température du gaz déduite des raies rotationnelles de H₂ (voir Figure 5.4).

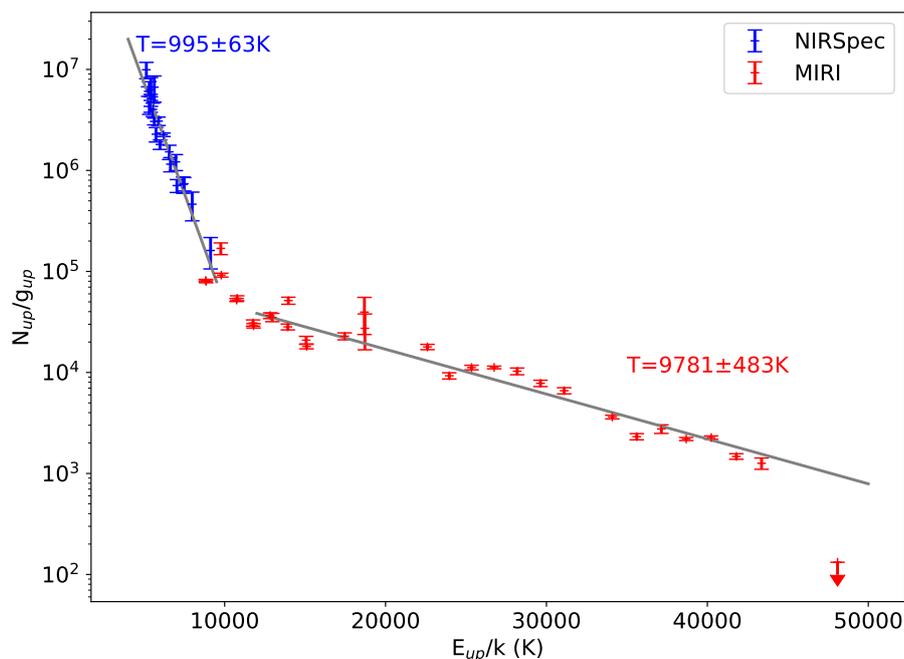


FIGURE 5.7 – Diagramme d'excitation des raies rovibrationnelles et purement rotationnelles de OH. Les croix bleues représentent les transitions rovibrationnelles détectées avec NIRSPEC ($\nu = 1 - 0$) et les croix rouges représentent les transitions purement rotationnelles détectées avec MIRI ($\nu = 0 - 0$). Les flux de raies mesurés sont reportés dans les Tables 5.2 et 5.3. Les incertitudes sont calculées par la routine Python `curve_fit` comme des erreurs 1σ sur les paramètres. L'impact des effets de calibration n'est pas pris en compte et les incertitudes associées peuvent atteindre 20 %.

La détection de OH extrêmement rotationnellement excité provient directement de la photodissociation de l'eau. Comme l'ont déjà montré les observations précédentes de *Spitzer* (Tappe et al. 2008; Najita et al. 2010; Carr & Najita 2014) basées sur des études séminales de physique moléculaire (Harich et al. 2001; van Harrevelt & van Hemert 2001), le seul processus qui peut exciter ces raies est la photodissociation de H₂O, via son état électronique \tilde{B} par des photons FUV de courtes longueurs d'onde, formant des OH dans des états N élevés. Les niveaux directement peuplés par la photodissociation de l'eau ($N \approx 35 - 45$) n'ont pas été détectés auparavant en raison de la résolution spectrale et de la sensibilité limitées de *Spitzer*-IRS. En outre, la résolution spectrale plus élevée de MIRI-MRS nous permet de séparer la composante symétrique de la composante antisymétrique de chaque raie rotationnelle jusqu'à $9,4 \mu\text{m}$ (voir la Figure 5.5 et la Figure 5.6). Par rapport aux raies moins excitées observées avec *Spitzer* (Carr & Najita 2014), nous trouvons un rapport beaucoup plus élevé (≥ 10) entre les raies symétriques et antisymétriques. Ceci est cohérent avec des calculs

quantiques récents utilisant une méthode de paquet d'ondes qui attribue cette propension à l'intersection conique $\tilde{B} \rightarrow X$ (Zhou et al. 2015).

Afin d'analyser le spectre MIRI-MRS, des spectres synthétiques JWST ont été calculés en utilisant le code GROSBETA (Tabone et al. 2021), qui prend en compte la production de OH dans les états excités (voir la section 5.3.2). Nous utilisons en entrée la distribution des états rotationnels et vibrationnels de OH produits par la photodissociation de H₂O via ses états électroniques \tilde{A} et \tilde{B} calculés par van Harrevelt & van Hemert (2000b, 2001) et compilés par Tabone et al. (2021). Comme ces calculs pionniers n'incluaient pas le couplage spin-orbite ni le dédoublement Λ , nous incluons les résultats de Zhou et al. (2015) en supposant que la photodissociation via l'état \tilde{B} conduit à OH dans des états symétriques, avec une distribution égale entre les deux composantes spin-orbite (voir la Figure 5.6 pour la spectroscopie de OH). La distribution des états de OH qui en résulte est calculée en intégrant la section efficace spécifique à un état sur un champ UV représenté par un corps noir à $T_{eff} = 40\,000$ K (voir Tabone et al. 2021). En l'absence de calculs systématiques de dynamique quantique pour les photons de courtes longueurs d'onde, nous négligeons en outre l'impact de la photodissociation de H₂O à des longueurs d'onde inférieures à 114 nm sur l'excitation de OH. Cette distribution est présentée dans la Figure 5.8.

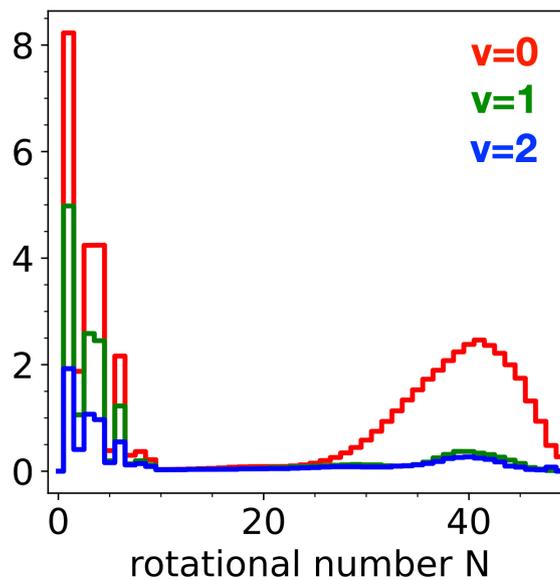


FIGURE 5.8 – Distributions d'états de OH, additionnées sur les états spin-orbite et de dédoublement Λ , produit après photodissociation de H₂O dans un champ FUV représentatif de la Barre d'Orion, prédites par les calculs de dynamique quantique. La photodissociation par des photons de courtes longueurs d'onde $\lambda < 144$ nm via l'état électronique \tilde{B} de l'eau produit des OH rotationnellement chauds avec des nombres quantiques de rotation de $N \simeq 35 - 45$ et la photodissociation par des photons de plus grandes longueurs d'onde via l'état électronique \tilde{A} conduit à des OH rotationnellement froids mais vibrationnellement chauds.

Comme le montre la Figure 5.5, le modèle est en accord avec le spectre observé. En particulier, nous retrouvons la forte augmentation de l'intensité des raies à partir de $\lambda = 9,15$ μm , et les intensités relativement constantes des raies au-delà de $\lambda = 9,5$ μm . Ce comportement est intrinsèquement lié à la distribution rotationnelle des OH produits. Une fois qu'une

molécule de OH est formée dans un état rotationnellement excité, elle se désintègre via les transitions radiatives $N \rightarrow N - 1$, un processus appelé "cascade radiative" (Tabone et al. 2021). L'accord entre le modèle et les observations n'est pas seulement une confirmation astronomique d'un processus moléculaire de base, mais, comme le montre la Section 5.4.4, il donne également accès au taux de destruction de l'eau et à son abondance locale.

5.4.3 Preuve du pompage chimique (à la formation) par O + H₂

Les raies rovibrationnelles $\nu = 1 - 0$ de OH sont détectées par NIRSpec à des longueurs d'onde plus courtes dans le proche infrarouge, avec un nombre quantique de rotation supérieur de $N = 1$ jusqu'à 10 (voir le spectre dans la Figure 5.9 et la Figure 5.6). Ces transitions ont déjà été détectées dans des environnements très denses comme les régions les plus internes des disques protoplanétaires ($n_{\text{H}} \gtrsim 10^8 \text{ cm}^{-3}$), mais pas dans un environnement moins dense comme les couches externes du système d203-506. L'excitation des niveaux rotationnels dans l'état $\nu = 1$ est bien décrite par une température d'excitation unique d'environ 1 000 K (voir le diagramme d'excitation dans la Figure 5.7), proche de la température du gaz déduite de l'émission H₂ (voir la Figure 5.4) et dix fois plus petite que la température d'excitation des raies dans l'IR moyen, ce qui implique une origine différente.

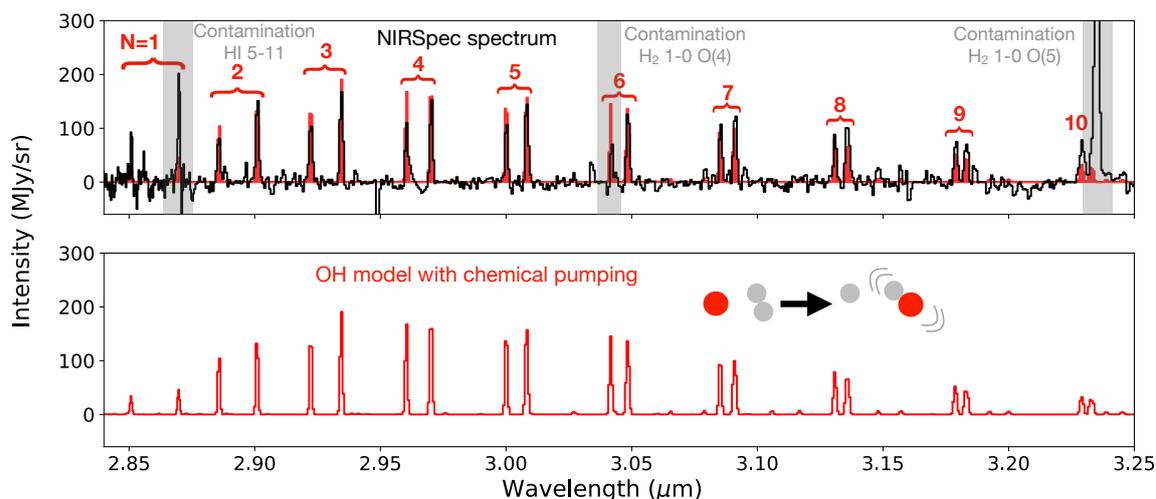


FIGURE 5.9 – Preuve du pompage à la formation via O + H₂ à partir des raies rovibrationnelles de OH détectées par NIRSpec. (Haut) Spectre observé par NIRSpec où le continuum de la poussière et les raies brillantes, autres que celles de OH, ont été soustraits (voir Section 5.3.1). Chaque transition rovibrationnelle est divisée par le couplage spin-orbite, mais le dédoublement Λ n'est pas résolu. (Bas) Spectres synthétiques de GROSBETA incluant l'excitation de OH via le pompage à la formation.

Nous attribuons les raies de OH dans l'IR proche à un pompage à la formation via la réaction O + H₂, qui est connue pour produire des OH dans des états vibrationnellement excités (Weck et al. 2006), mais qui n'a jusqu'à présent jamais été observée dans l'espace. Nous avons modifié le code GROSBETA pour inclure l'excitation de OH via la réaction O + H₂ en utilisant la distribution des états de OH produit extraite des récents calculs quantiques

fournissant les coefficients de réaction état-état de Veselinova et al. (2021). Comme la distribution des OH dépend à la fois de la température cinétique et de la population de H_2 , les distributions sont calculées comme suit

$$f_i(\text{OH}) = \sum_j k_{j \rightarrow i}(T) x_j(\text{H}_2) / \sum_i \sum_j k_{j \rightarrow i}(T) x_j(\text{H}_2), \quad (5.3)$$

où $x_j(\text{H}_2)$ est la population du niveau j de H_2 et $k_{j \rightarrow i}(T)$ sont les coefficients de réaction état-état à la température T . Les valeurs de $x_j(\text{H}_2)$ sont déduites des raies, observées avec MIRI-MRS et NIRSspec, de H_2 . Pour les niveaux $H_2(v = 0 J = 0)$, $H_2(v = 0 J = 1)$ et $H_2(v = 0 J = 2)$, qui ne sont pas sondés par le JWST, nous avons extrapolé leurs populations en supposant un équilibre thermodynamique local. Il est intéressant de noter que la distribution de OH qui en résulte diffère très peu d'une distribution supposant une distribution de Boltzmann des niveaux de H_2 à $T \approx 1\,000$ K. En fait, le taux de formation de OH ($v = 1$) est déterminé par les niveaux de H_2 rotationnellement excités ($v = 0 J \approx 4 - 9$) qui sont beaucoup plus peuplés que les niveaux vibrationnels et qui sont suffisamment réactifs pour produire des OH vibrationnellement excités en réagissant avec des atomes d'oxygène. Cette distribution est présentée dans la Figure 5.10.

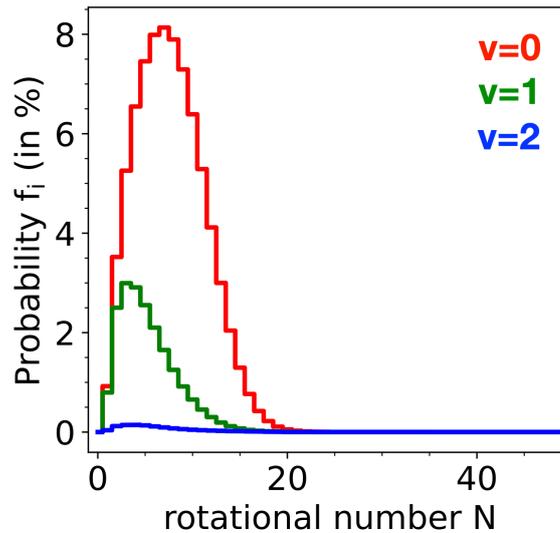


FIGURE 5.10 – Distributions d'états de OH, additionnées sur les états spin-orbite et de déboulement Λ , produit après sa formation via $O + H_2$ à une température de $T = 1\,000$ K et pour une population de H_2 telle que déduite pour d203-506, prédites par les calculs de dynamique quantique.

Le modèle synthétique GROSBETA montre un bon accord avec le spectre NIRSspec (voir Figure 5.9). Les raies de OH $v = 2 - 1$ sont également prédites pour être un ordre de grandeur plus faible, en accord avec la limite supérieure fixée par les observations; les calculs quantiques prédisent que 20 % du OH est produit dans l'état $v = 1$, avec moins de 1 % dans des états vibrationnellement excités plus élevés ($v \geq 2$). Le processus d'émission est relativement simple, car un OH produit dans un état $v = 1$ se désexcite rapidement en cascade via les transitions rovibrationnelles.

Processus alternatif d'excitation

Dans cette section, nous passons en revue les processus alternatifs qui peuvent conduire à l'excitation vibrationnelle de OH dans l'état électronique fondamental.

La photodissociation de l'eau via l'état électronique \tilde{A} par des photons de grandes longueurs d'onde produit un OH rotationnellement froid, mais vibrationnellement chaud. Notre modèle de OH inclut ce processus en utilisant la distribution de OH calculée par van Harrevelt & van Hemert (2001) tout en utilisant la surface d'énergie potentielle améliorée de l'état \tilde{A} de H₂O de van Harrevelt & van Hemert (2000a). Le spectre d'émission de OH qui en résulte lorsqu'on considère uniquement la photodissociation de l'eau via les états \tilde{A} et \tilde{B} est présenté dans la Figure 5.11. La forme générale du spectre modélisé dans le proche IR est très différente de celle observée. Les raies rovibrationnelles dans la bande $\nu = 1 - 0$ présentent une température d'excitation beaucoup plus basse, et la bande $\nu = 2 - 1$ est prédite comme étant forte. En adoptant la valeur de Φ (voir Section 5.4.4.1) qui correspond aux raies de OH dans l'IR moyen, nous trouvons également que les raies rovibrationnelles prédites par le modèle sont typiquement plus faibles d'un facteur 10 – 20 que les raies observées dans l'IR proche.

Le pompage radiatif UV de OH via la bande A-X peut également produire des OH excités vibrationnellement dans l'état électronique fondamental. Notre modèle d'excitation prend en compte ce processus puisque les niveaux de OH s'étendent à l'état électronique non dissociatif OH($A^2\Sigma^+$). En écartant le pompage chimique de OH dans le modèle d'excitation, nous trouvons que le spectre de OH dans l'IR proche est environ deux à trois ordres de grandeur plus faible qu'observé, et présente une température d'excitation trop froide dans l'état $\nu = 1$. Nous notons que pour le pompage UV, l'intensité des raies dépend de la densité de colonne supposée de OH, qui n'est pas directement sondée par nos observations. Cependant, la densité de colonne adoptée de $N(\text{OH}) = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ est une bonne estimation au premier ordre, puisqu'elle correspond à une abondance de OH de $x(\text{OH}) \simeq 10^{-5}$, une valeur qui est en accord avec les résultats des modèles physico-chimiques (*e.g.*, Zannese et al. 2023).

On sait peu de choses sur les sections efficaces de collision inélastique reliant les états $\nu = 0$ et $\nu = 1$ de OH. En raison de la barrière répulsive entre OH et H₂, et OH et He, les collisions avec H₂ et He sont négligeables par rapport à celles avec l'hydrogène atomique, qui est probablement abondant dans la couche émettrice de OH. La collision avec ce dernier est donc le seul processus qui peut contribuer à l'excitation de OH ($\nu = 1$). En fait, Atahan & Alexander (2006) ont calculé les taux de collision inélastique de désexcitation pour OH($\nu = 1$) + H \rightarrow OH($\nu = 0$) + H à une température cinétique de $T = 300 \text{ K}$ et en supposant une distribution thermique des niveaux de OH. Dans le système d203-506, la température est beaucoup plus élevée, environ $T \simeq 1\,000 \text{ K}$, et les niveaux rotationnels de OH, même dans le $\nu = 0$, devraient être peuplés de manière subthermique en raison de la faible densité du gaz ($n_{\text{H}} \simeq 10^7 \text{ cm}^{-3}$, voir Section 5.4.4.2). L'extrapolation du résultat de Atahan & Alexander (2006) aux conditions du gaz où l'on détecte OH reste incertaine. Néanmoins, pour une température de $T \simeq 1\,000 \text{ K}$, nous estimons un taux de collision de l'ordre de $k_{\text{coll}} \simeq 5 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Le rapport entre les OH ($\nu = 1$) excités par pompage chimique et par collisions inélastiques est d'environ $x(\text{OH})k_{\text{coll}}/x(\text{O})k_{\text{chem},\nu=1}$, où $k_{\text{chem},\nu=1}$ est le taux de formation de O + H₂ conduisant à OH($\nu = 1$). Nous concluons que le pompage chimique domine par rapport à l'excitation collisionnelle inélastique pour un rapport

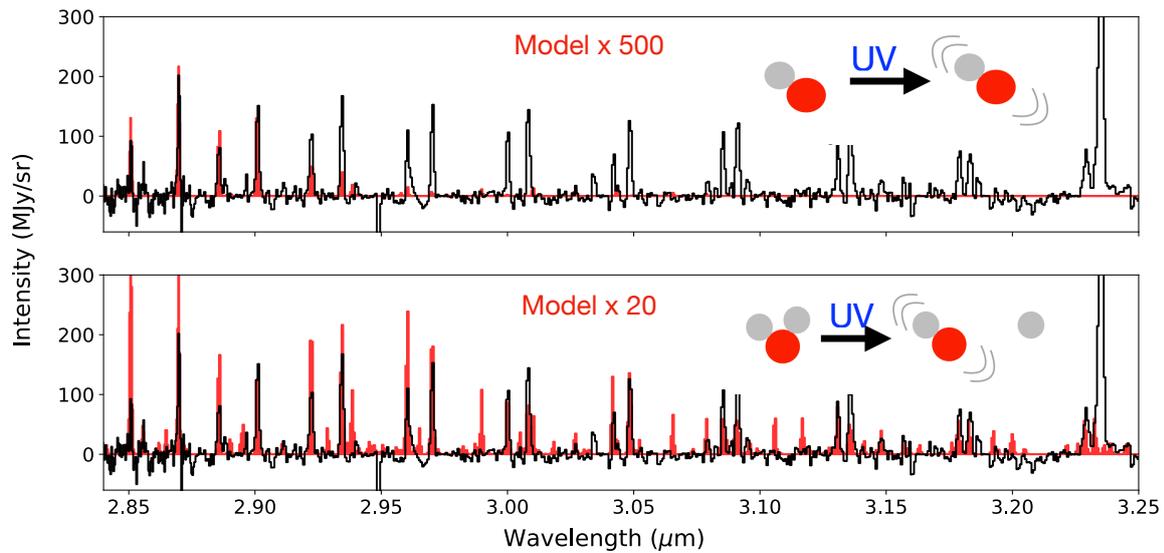


FIGURE 5.11 – Comparaison entre l'émission de OH observée dans le proche IR et la modélisation de processus d'excitation autres que le pompage à la formation. Modèles synthétiques de GROSBETA dans l'IR proche pour (Haut) le pompage radiatif par UV et (Bas) la photodissociation de H_2O via son état électronique \tilde{A} . Aucun de ces processus ne peut expliquer la forme et l'intensité du spectre rovibrationnel de OH observé.

d'abondance d'environ $x(\text{O})/x(\text{OH}) \gtrsim 10$. Le calcul des taux de collisions inélastiques est alors nécessaire pour évaluer la contribution des collisions inélastiques dans l'émission de OH.

Ainsi, si d'autres processus sont connus pour produire des OH dans des états vibrationnels (pompage UV, photodissociation de H_2O via son état électronique \tilde{A} , pompage IR), nous constatons que seules les collisions inélastiques pourraient contribuer de manière significative à l'émission observée si OH est très abondant ($x(\text{OH}) \gtrsim 10^{-5}$). Le bon accord entre les observations et le modèle indique cependant que le pompage à la formation de OH est très probablement dominant, soutenant ainsi une proposition antérieure basée sur les observations *Spitzer-IRS* et *Herschel* (Goicoechea et al. 2011; Carr & Najita 2014).

5.4.4 La chimie en action de l'oxygène en phase gazeuse chaude

5.4.4.1 Estimation des taux de formation

Dans le système d203-506, nous constatons que les niveaux rotationnels et vibrationnels hautement excités de OH sont principalement peuplés par le pompage à la formation (la réaction $\text{O} + \text{H}_2$ ou la photodissociation de l'eau) suivi par la désexcitation radiative, avec un impact négligeable du pompage radiatif et des collisions inélastiques. En outre, les raies rovibrationnelles et les raies rotationnellement excitées sont optiquement minces. Dans le régime optiquement mince, l'intensité de la raie intégrée est proportionnelle à la densité de colonne de OH du niveau supérieur :

$$I_{i \rightarrow j} = \frac{h\nu_{i,j}A_{i,j}}{4\pi}N_i. \quad (5.4)$$

En supposant que les niveaux excités de OH ne sont peuplés que par le pompage à la formation et la cascade radiative et que la fraction de OH dans les états rotationnellement et rovibrationnellement excités constitue une fraction négligeable de la population totale de OH, l'équation du bilan détaillé (5.1) s'écrit simplement :

$$\sum_{j,j \neq i} M_{ji}N_j + F \times f_i = 0 \quad \text{with} \quad \begin{cases} M_{ji} = -\sum_k A_{ik} & \text{if } i = j \\ M_{ji} = A_{ji} & \text{if } i \neq j \end{cases} \quad (5.5)$$

Ce système d'équations linéaires sur N_i montre que N_i , et donc l'intensité I_{ij} , sont simplement proportionnels à F , le taux de formation de OH. Suivant Tabone et al. (2021), nous pouvons donc définir l'intensité comme suit :

$$I_{ij} = \frac{h\nu_{i,j}}{4\pi} \tilde{I}_{ij} F, \quad (5.6)$$

où \tilde{I}_{ij} est le facteur de proportionnalité sans dimension. Il correspond à la probabilité qu'un OH produit finisse par cascader via la transition radiative $i \rightarrow j$.

\tilde{I}_{ij} ne dépend que de f_i , qui à son tour dépend de la forme du champ de rayonnement lorsqu'il s'agit de l'excitation par photodissociation de H₂O, et de la température du gaz et de la population de H₂ lorsqu'il s'agit du pompage chimique. Pour la photodissociation de l'eau, \tilde{I}_{ij} est fourni dans l'annexe D de Tabone et al. (2021) pour différentes formes du champ de rayonnement UV. Pour la formation par pompage chimique via $O + H_2 \rightarrow OH + H$, le facteur de proportionnalité calculé à $T = 1\,000$ K additionné sur les quatre composantes de la raie rovibrationnelle $v = 1 \rightarrow 0$ $N = 4 \rightarrow 5$ est $\tilde{I} = 2,3 \times 10^{-2}$.

Nous définissons deux taux de formation différents : le taux de formation par photodissociation de l'eau désigné par Φ et le taux de formation par $O + H_2$ désigné par R . Φ est également la densité de colonne de H₂O photodissocié par unité de temps (Tabone et al. 2021) :

$$\Phi \equiv \int_z k_\phi n_{H_2O} dz, \quad (5.7)$$

où n_{H_2O} est la densité locale de H₂O ([cm⁻³]) et k_ϕ est le taux de photodissociation de H₂O formant OH ([s⁻¹]), qui dépend de l'intensité et de la forme du champ de rayonnement FUV local (Heays et al. 2017). De même, R est aussi la densité de colonne de OH formé par unité de temps via $O + H_2$:

$$R \equiv \int_z \sum_i \sum_j k_{j \rightarrow i}(T) x_j(H_2) n_{H_2} n_O dz = \int_z k n_{H_2} n_O dz, \quad (5.8)$$

où n_O et n_{H_2} sont les densités de l'oxygène atomique et de l'hydrogène moléculaire, $x_j(H_2)$ est la population du niveau j de H₂, et $k_{j \rightarrow i}$ est le coefficient de vitesse état-état de la réaction ([cm³ s⁻¹]).

À partir des raies de l'IR moyen, nous obtenons une quantité d'eau photodissociée par unité de temps de $\Phi = 1,1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Compte tenu de la taille du point lumineux ($1,53 \times 10^{-12} \text{ sr}$, à une distance de 414 pc, Menten et al. 2007), cela correspond, en gros, à l'équivalent de la valeur en eau de l'océan terrestre photodissociée par mois⁴. De même, à partir des raies du proche infrarouge, nous déduisons une quantité de OH formée via $\text{O} + \text{H}_2$ par unité de temps de $R = 1,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Si les collisions inélastiques contribuaient à l'émission de OH dans le proche infrarouge, le taux de formation chimique R serait plus faible. Ces résultats sont résumés dans la Table 5.1.

Ces taux de formation mettent en lumière le cycle de l'eau dans des conditions chaudes et irradiées. Les raies de OH dans l'IR moyen révèlent que l'eau est activement photodétruite dans le système d203-506. L'échelle de temps de destruction de l'eau est déterminée en utilisant le taux de photodissociation de l'eau k_Φ : $\tau_{\text{photo}} = 1/k_\Phi$. Cette estimation conduit à une échelle de temps chimique d'environ un jour. En comparaison, l'échelle de temps dynamique du gaz sortant τ_{dyn} est beaucoup plus longue. Elle peut être estimée comme $\tau_{\text{dyn}} = d/v_{\text{adv}}$, où d est la distance entre le disque interne et le point lumineux et v_{adv} est la vitesse d'advection. Dans le cas de d203-506, $d \sim 100 \text{ au}$ et $\tau_{\text{dyn}} \gtrsim 50 \text{ ans}$. Par conséquent, l'eau illuminée ne peut pas provenir d'eau formée dans des conditions froides. En fait, notre analyse des raies de OH dans le proche infrarouge montre que le taux de formation de OH via $\text{O} + \text{H}_2$ est d'un ordre de grandeur supérieur au taux de destruction de H_2O . L'eau est donc efficacement reconstituée par la voie de formation en phase gazeuse initiée par la réaction $\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$. Nos estimations indiquent également que seule une petite fraction de OH, environ $\Phi/R \simeq 10 \%$, est effectivement convertie en H_2O . Notamment, OH est également photodissocié, ce qui réduit la probabilité de conversion de OH en H_2O . Il est intéressant de noter que la photodissociation de OH a déjà été révélée par les observations du télescope spatial *Hubble* de l'émission de O I à $\lambda = 6300 \text{ \AA}$ (Bally et al. 2000), qui est probablement excitée par la photodissociation de OH (Störzer & Hollenbach 1998). En supposant que l'émission de O I soit produite par $\text{OH} + h\nu \rightarrow \text{O} + \text{H}$ avec une probabilité de 50 % de former de l'oxygène dans l'état $\text{O}(^1\text{D})$ (van Dishoeck & Dalgarno 1984), nous déduisons une quantité de OH photodissociée par unité de temps de $7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$; une valeur proche du taux de formation R via $\text{O} + \text{H}_2$ donné ci-dessus. Ceci fournit une preuve supplémentaire que la majeure partie de l'émission de OH est produite par pompage chimique et non par excitation collisionnelle inélastique.

5.4.4.2 Estimation de la densité de colonne d'eau chaude et de la densité du gaz local

Estimation de la densité de colonne de l'eau

Grâce à la valeur dérivée des taux de formation de OH via la photodissociation de l'eau Φ et via $\text{O} + \text{H}_2$ R , on peut dériver des quantités astrophysiques telles que la densité de colonne d'eau chaude $N(\text{H}_2\text{O})$ et la densité du gaz local. Dans l'hypothèse d'un milieu homogène, l'équation (5.7) peut être réécrite comme suit

$$N(\text{H}_2\text{O}) = \frac{\Phi}{k_\phi}, \quad (5.9)$$

4. Les océans de la Terre sont composés d'environ 5×10^{46} molécules d'eau.

où le taux de photodissociation k_ϕ dépend du champ de rayonnement FUV. Nous pouvons obtenir une estimation du taux de photodissociation de H_2O en nous basant sur l'intensité du champ FUV local. Dans le système d203-506, le réservoir d'eau exposé se trouve probablement à une faible extinction visuelle. Ici, nous supposons que le champ FUV à la transition H^0/H_2 est éteint d'un facteur 5 tel que $k_\phi \simeq 1 \times 10^{-5} - 2 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ dans le point lumineux, ce qui correspond à une extinction visuelle de $A_V \lesssim 1$. Cela se traduit par $N(\text{H}_2\text{O}) \simeq 1 \times 10^{15} - 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. Malgré l'évidente présence de l'eau dans le vent photoévaporé de d203-506, les raies de l'eau ne sont pas détectées avec MIRI-MRS.

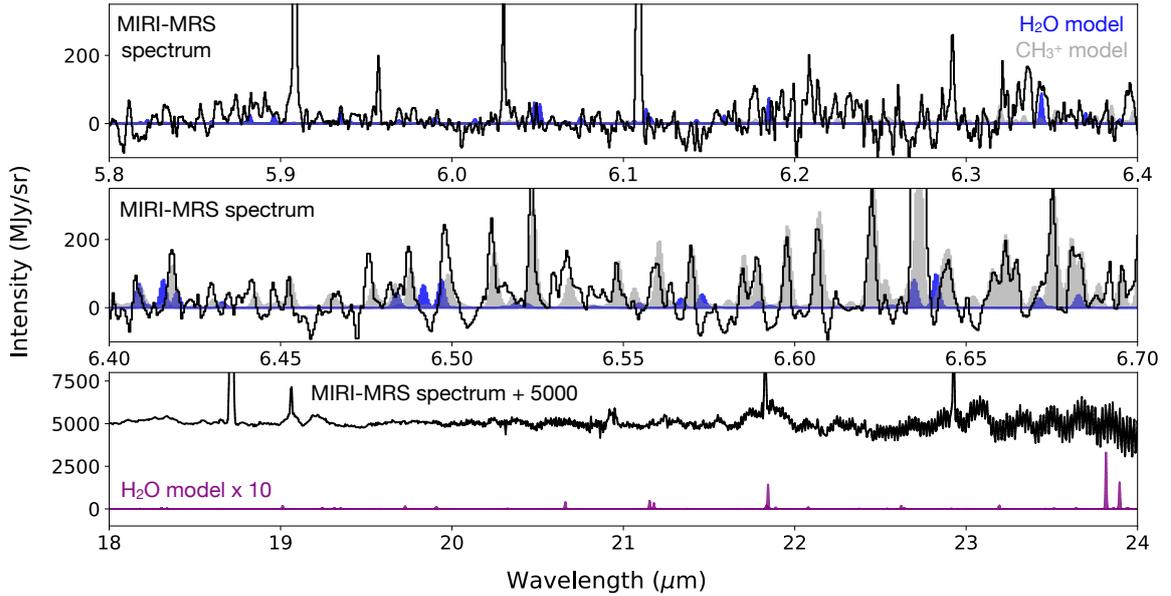


FIGURE 5.12 – Observations MIRI-MRS comparées à un spectre synthétique RADEX (van der Tak et al. 2007) des raies de H_2O les plus brillantes adoptant la quantité maximale d'eau invisible de $N(\text{H}_2\text{O}) = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ telle que déduite des raies de OH dans l'infrarouge moyen, une température de $T = 1\,000 \text{ K}$ déduite des raies de H_2 et une densité de $n_{\text{H}} = 10^7 \text{ cm}^{-3}$ déduite des raies de OH dans le proche infrarouge (voir Section 5.4.4). Les taux de collisions inélastiques proviennent de Faure & Josselin (2008) et sont disponibles dans la base de données LAMDA (Schöier et al. 2005). Nous avons également supposé un champ de rayonnement IR déduit des observations NIRSpec et MIRI-MRS. Lors du calcul des intensités des raies, nous avons supposé que le rayonnement continuum IR interagissant avec le gaz n'est pas le long de la même ligne de visée que les observations, comme décrit dans Tabone et al. (2021). Cette dernière hypothèse permet de fixer une limite supérieure stricte à l'intensité de la raie. En raison de la faible densité du gaz, H_2O est excité de manière subthermique, ce qui conduit à des raies indétectables. Dans la région autour de $5 - 7 \mu\text{m}$, le spectre MIRI-MRS est affecté par des franges résiduelles et une contamination possible par CH_3^+ (Berné et al. 2023). Un modèle ETL à $T = 700 \text{ K}$ de CH_3^+ est superposé en gris (Changala et al. 2023). Autour de $18 - 24 \mu\text{m}$, le continuum augmente fortement et le bruit augmente en conséquence, rendant impossible la détection des raies de H_2O dans cette région. Le même modèle de H_2O multiplié par un facteur de 10 est superposé en violet.

La Figure 5.12 montre que les modèles non-ETL prédisent sa non-détection, probablement en raison de la faible densité du gaz qui est beaucoup plus petite que les densités critiques des transitions de H₂O observables avec le JWST. La quantité d'eau, estimée avec les raies de OH, est encore trop faible de deux ordres de grandeur pour que l'eau subisse un auto-écranage UV dans cet environnement (Bosman et al. 2022).

Estimation de la densité locale

En supposant un milieu homogène, la densité locale peut être estimée à partir de la valeur déduite de R et de l'équation (5.8) comme suit :

$$n_{\text{H}} = \frac{R}{k(T)N(\text{H}_2)x(\text{O})}, \quad (5.10)$$

où $k(T)$ est le coefficient de vitesse de la réaction, $N(\text{H}_2)$ est la densité de colonne de H₂, $x(\text{O})$ est l'abondance de l'oxygène, et n_{H} est la densité totale d'atomes d'hydrogène. Pour d203-506, nous avons trouvé une densité de colonne de H₂ excité de $N(\text{H}_2) = 9,9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ et $T \simeq 1\,000 \text{ K}$ à partir des raies rotationnelles de H₂ (voir Figure 5.4). À partir de l'estimation de la température et de l'excitation de H₂, nous pouvons déduire le coefficient de réaction $k = 2,8 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. En utilisant l'estimation de $R = 1,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ à partir des raies de OH dans le proche infrarouge, nous obtenons $n_{\text{H}} = 1,4 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$.

Diagnostic	Quantité	Valeur mesurée
Raies de H ₂	$N(\text{H}_2)^a$	$(9,9 \pm 0,9) \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$
	T^a	$950 \pm 17 \text{ K}$
Raies de OH dans l'IR moyen	Φ (taux H ₂ O + $h\nu$) ^b	$(1,1 \pm 0,2) \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$
	$N(\text{H}_2\text{O})$	$1 \times 10^{15} - 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$
	$x(\text{H}_2\text{O})^c$	$5 \times 10^{-6} - 2,5 \times 10^{-5}$
Raie de OH dans l'IR proche	R (taux O + H ₂) ^{b,d}	$(1,2 \pm 0,3) \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$
	n_{H}^d	$(1,4 \pm 0,4) \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$

TABLE 5.1 – Paramètres dérivés de l'analyse des raies de OH et de H₂

Notes. ^(a) Les incertitudes de ces valeurs ne tiennent pas compte des effets de calibration. Elles pourraient être augmentées d'un facteur de 2 à 3 si l'incertitude associée aux effets de calibration est égale à 20 %. ^(b) Nombre de molécules de OH formées par unité de surface et de temps par l'une ou l'autre voie de formation (en $\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$). ^(c) L'abondance par rapport au nombre total d'atomes d'hydrogène est calculée en utilisant $N(\text{H}_2)$ déduit des raies de H₂. ^(d) La valeur déduite serait réduite si l'excitation collisionnelle inélastique jouait un rôle important. La limite inférieure attendue pour ces valeurs est $R = 1,1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ et $n_{\text{H}} = 1,3 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$.

5.5 Discussion

Quelles sont les implications pour le chemin de l'eau vers les planètes terrestres et notamment sur la Terre? L'augmentation du rapport D/H dans l'eau océanique moyenne standard (*standard mean ocean water*, SMOW, Hagemann et al. 1970) de $1,5 \times 10^{-4}$ par rapport au rapport D/H élémentaire interstellaire ($\approx 2 \times 10^{-5}$, Prodanović et al. 2010) indique qu'une fraction de l'eau terrestre s'est formée dans des conditions froides, probablement à la surface des grains interstellaires (Cleeves et al. 2014). Cette anomalie refléterait les effets de la chimie à basse température, où la faible différence d'énergie du point zéro entre les espèces porteuses de D et de H peut créer d'importantes fractions de deutérium (Tielens 1983; Ceccarelli et al. 2014). Cependant, le rapport D/H observé dans les protoétoiles (Persson et al. 2014; Jensen et al. 2021; Tobin et al. 2023) – qui retrace la teneur en eau héritée du milieu interstellaire froid – est plus élevé que le rapport D/H dans le SMOW ($0,3 - 1 \times 10^{-3}$ contre $1,5 \times 10^{-4}$, respectivement). Par conséquent, le traitement chimique pourrait avoir eu lieu dans le gaz chaud, réduisant la fraction de deutérium parce que les taux de formation de HDO et de H₂O sont similaires à des températures élevées. Dans le système d203-506, H₂O est efficacement détruit et reformé par la voie de formation en phase gazeuse chaude $O \rightleftharpoons OH \rightleftharpoons H_2O$. Cela peut réduire considérablement le rapport D/H de l'eau héritée de la phase froide jusqu'aux valeurs élémentaires interstellaires ($\approx 2 \times 10^{-5}$, Prodanović et al. 2010). Le rapport HDO/H₂O résultant pourrait être encore plus faible si la photodissociation sélective du dihydrogène conduit à des valeurs subsolaires de HD/H₂ (Le Petit et al. 2002). Il n'est cependant pas clair si l'eau dévoilée dans le système d203-506 est incorporée dans les comètes et les astéroïdes puisque le OH observé pourrait plutôt tracer un gaz non lié chauffé par le rayonnement FUV externe. Cette dernière hypothèse est soutenue par des modèles de vents photoévaporés présentant des conditions similaires à celles du système d203-506, qui prédisent que le OH photodissocié (et par conséquent H₂O) est principalement présent dans le gaz non lié (Ballabio et al. 2023).

Néanmoins, le système d203-506 constitue un laboratoire interstellaire unique car les mêmes processus chimiques se produisent dans l'atmosphère des disques protoplanétaires, même si le disque est uniquement irradié par l'étoile hôte. Les champs FUV générés par les étoiles accrétantes à la surface du disque varient de $G_0 = 10^3$ à 10^6 entre 1 et 10 au, en fonction des propriétés de la poussière et de l'écrantage par le gaz (Bethell & Bergin 2009; Bosman et al. 2022); une gamme qui est comparable à celle du gaz sondé par nos observations. La densité locale déduite des raies de OH dans l'IR moyen est un peu plus faible que les densités de gaz attendues dans les couches supérieures des disques ($0,2 - 1,2 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$ contre $10^8 - 10^{12} \text{ cm}^{-3}$) et la température est plus élevée que celle trouvée pour l'eau dans les disques protoplanétaires (1 000 K contre 400 – 600 K, Pontoppidan et al. 2014). Cependant, la voie de formation dans la phase gazeuse chaude est déjà efficace à $T > 400 \text{ K}$ et la densité du gaz n'affecte que le rapport OH/H₂O relatif dans les couches irradiées (Zannese et al. 2023).

5.6 Conclusions

Dans ce travail, nous avons dévoilé la détection de OH rotationnellement excité dans l'infrarouge moyen et rovibrationnellement excité dans l'infrarouge proche dans le disque protoplanétaire d203-506. Nous avons entrepris la modélisation de ces émissions grâce au code GROSBETA, utilisant des résultats de calculs de dynamique quantique, afin d'analyser leur provenance.

Les principales conclusions de cette étude peuvent être résumées comme suit :

1. L'émission de OH dans l'infrarouge proche et moyen provient de la même région que l'émission de H₂, c'est-à-dire une fine couche irradiée proche de la transition H/H₂.
2. L'émission de OH rotationnellement excités détectée dans l'infrarouge moyen avec MIRI-MRS provient de la photodissociation de l'eau dans son état électronique \tilde{B} .
3. L'émission de OH rovibrationnellement excités détectée dans l'infrarouge proche avec NIRSpec provient du pompage chimique via O + H₂.
4. Ces raies permettent de contraindre la chimie de l'oxygène et plus particulièrement le cycle de destruction et de reformation de l'eau en phase gazeuse. Elles permettent également l'accès aux taux de réaction de ces processus.
5. Les raies de OH dans l'infrarouge moyen permettent de contraindre une densité de colonne d'eau chaude de $N(\text{H}_2\text{O}) = 1 - 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, non détectée dans les données JWST, présente dans le vent photoévaporé d203-506.
6. Les raies de OH dans l'infrarouge proche permettent de contraindre une densité du gaz dans la couche externe de d203-506 de $n_{\text{H}} \approx 10^7 \text{ cm}^{-3}$.
7. Ainsi, les raies de OH, et plus particulièrement les processus d'excitation à la formation, (ici la photodissociation et le pompage chimique) sont des diagnostics puissants pour contraindre des paramètres physiques de l'objet étudié sans avoir à recourir à des modèles auto-cohérents comme le code PDR de Meudon.

Nous nous attendons à ce que l'émission de OH dans l'IR moyen et proche soit détectée par le JWST dans un large éventail d'environnements astrophysiques (par exemple les chocs, les régions de photodissociation au bord des nuages moléculaires, les comètes). Notre nouvelle méthode d'analyse des raies de OH fournira des contraintes vitales sur la physique et la chimie du gaz dans de tels environnements. Ce travail constitue également une illustration de référence du potentiel des raies IR excitées provenant de petites espèces moléculaires, qui peut être transposé à d'autres espèces comme le CO, CH⁺ (Neufeld et al. 2021) ou CH₃⁺. Dans ce contexte, de nouveaux calculs de dynamique quantique et des expériences en laboratoire sont essentiels pour exploiter tout le potentiel du JWST.

Comparaison à l'étude du Chapitre 4

La détection de OH suivant la photodissociation de l'eau dans d203-506 est en accord avec les résultats fondamentaux de l'étude présentée dans le Chapitre 4. En effet, le fait que l'émission prompte de OH soit détectée dans d203-506 et non dans la PDR montre la nécessité d'un gaz dense, chaud et irradié pour observer ce phénomène avec le JWST. Les cartes

d'émission présentées en 5.2 montre la corrélation entre l'émission de OH et de H₂. Cela confirme que l'émission prompte de OH se situe à la transition H/H₂ comme prédit dans l'étude précédente. La détection du pompage chimique de OH est également en accord avec les résultats présentés dans le Chapitre 4 puisqu'il permet de confirmer la formation efficace de OH en phase gazeuse par O + H₂.

5.A Annexes

5.A.1 Calculs dynamiques quantiques pour O + H₂

Cette section résume la détermination quantique *ab initio* des coefficients de vitesse d'état à état de la réaction $O(^3P) + H_2(v, j) \rightarrow OH(v', j') + H$ utilisé dans nos modèles chimiques et d'excitation de OH (Veselinova et al. 2021). Les calculs de diffusion en mécanique quantique (QM) indépendants du temps ont été effectués en appliquant la méthode hypersphérique à canal couplé mise en œuvre dans le code ABC (Skouteris et al. 2000), qui produit la matrice S habituelle, à partir de laquelle les sections transversales d'état à état et les coefficients de vitesse peuvent être calculés. L'ensemble des surfaces d'énergie potentielle (*Potential Energy Surface*, PES) calculées par Zanchet et al. (2019) a été utilisé, ce qui inclut les PES des deux états électroniques (un de symétrie $^3A''$ et un de symétrie $^3A'$) qui sont en corrélation adiabatique avec l'état fondamental électronique des réactifs, $O(^3P) + H_2$, et des produits, $OH(^2\Pi) + H$. Les calculs de diffusion ont été effectués à 60 énergies comprises entre 0,3 et 2,5 eV, en incluant toutes les ondes partielles (J) nécessaires pour atteindre la convergence ($J_{\max} = 62$) et toutes les valeurs de l'hélicité (Ω) jusqu'à 26. Les calculs de diffusion QM ont fourni la section transversale en fonction du nombre quantique de rotation en supposant que OH est une molécule à coquille fermée. Pour calculer la population rotationnelle naissante de OH en termes de moment angulaire total hors spin, N , nous avons représenté graphiquement les sections efficaces calculées en fonction de l'énergie de rotation, et attribué à l'état N la section efficace correspondant à l'énergie réelle de cet état. Les calculs ne font pas de distinction entre les deux composantes spin-orbite, et la procédure de Jambrina et al. (2016) a été utilisée pour distribuer la population des états rotationnels du produit dans les deux composantes du doublet Λ . La propagation a été effectuée en 300 étapes log-dérivées, avec une valeur maximale de l'hyperrayon de $20 a_0$. La base comprend tous les niveaux d'énergie diatomiques jusqu'à 3,25 eV.

Comme les réactions peuvent se produire sur les états électroniques $^3A'$ et $^3A''$, la constante de vitesse totale de la réaction est obtenue comme une moyenne pondérée des taux respectifs $k_{A'}$ et $k_{A''}$. Les poids sont obtenus en établissant la corrélation entre les états électroniques A' et A'' et les niveaux de spin-orbite de l'oxygène, et sont donc liés à leur population relative. On constate que l'état $1^3A''$ est en corrélation avec trois des cinq composantes de $O(^3P_2)$, tandis que l'état $1^3A'$ est en corrélation avec les deux autres composantes de $O(^3P_2)$ et une composante de $O(^3P_1)$. Compte tenu de ces considérations et en supposant une distribution thermique des niveaux de spin-orbite de l'atome d'oxygène, les coefficients de vitesse ther-

mique globaux sont calculés comme suit (Veselinova et al. 2021) :

$$k(T) = \frac{3k_{A''}(T) + \left[2 + \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{T}\right)\right]k_{A'}(T)}{5 + 3 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{T}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E_0}{T}\right)}, \quad (5.11)$$

où $k(T)$ fait référence au coefficient de vitesse état-état désiré ($v, j \rightarrow v', j'$) à une température donnée, $k_{A'}(T)$ et $k_{A''}(T)$ sont les coefficients de vitesse état-état sur les PES A' et A'' , respectivement. $\Delta E_1 = 227,708$ K et $\Delta E_0 = 326,569$ K sont les énergies des niveaux spin-orbite de l'atome d'oxygène 3P_1 et 3P_0 , respectivement, par rapport à l'état fondamental 3P_2 . Il convient de noter que la contribution de 3P_0 et les deux contributions de 3P_1 n'apparaissent pas dans le numérateur ; cela reflète le fait que ces états spin-orbite ne sont pas réactifs et ne contribueront pas aux constantes de vitesse totales de la formation de OH.

5.A.2 Intensité des raies de OH et de H₂

MIRI-MRS			
λ (μm)	N	E_{up}/k_B (K)	I ($\times 10^{-5}$ erg cm $^{-2}$ s $^{-1}$ sr $^{-1}$)
9,181	44	43 343	0,91 \pm 0,12
9,219	43	41 776	1,02 \pm 0,07
9,266	42	40 216	1,50 \pm 0,06
9,325	41	38 663	1,38 \pm 0,05
9,394	40	37 120	1,64 \pm 0,16
9,475	39	35 588	1,30 \pm 0,09
9,568	38	34 070	1,89 \pm 0,08
9,791	36	31 079	2,97 \pm 0,21
9,923	35	29 609	3,24 \pm 0,23
10,069	34	28 160	3,89 \pm 0,30
10,232	33	26 731	3,86 \pm 0,12
10,411	32	25 325	3,48 \pm 0,18
10,608	31	23 943	2,58 \pm 0,18
10,825	30	22 586	4,44 \pm 0,27
11,610	27	18 671	3,38 \pm 1,35
11,615	27	18 701	2,24 \pm 0,87
11,929	26	17 447	3,30 \pm 0,26
12,657	24	15 053	1,12 \pm 0,10
12,665	24	15 085	0,92 \pm 0,05
13,081	23	13 916	1,27 \pm 0,09
13,089	23	13 949	2,20 \pm 0,18
13,550	22	12 816	1,36 \pm 0,09
13,560	22	12 850	1,24 \pm 0,12
14,070	21	11 754	0,94 \pm 0,07
14,082	21	11 789	0,84 \pm 0,04
14,648	20	10 783	1,29 \pm 0,04
14,664	20	10 767	1,27 \pm 0,07
15,295	19	9 749	3,34 \pm 0,44
15,314	19	9 786	1,71 \pm 0,08
16,021	18	8 809	1,26 \pm 0,03
16,045	18	8 847	1,16 \pm 0,04

TABLE 5.2 – Intensité des raies de OH détectées avec MIRI-MRS. Les incertitudes sont calculées par la routine Python `curve_fit` comme des erreurs à 1σ sur les paramètres. L'impact des effets de calibration n'est pas pris en compte et les incertitudes associées peuvent atteindre 20 %.

NIRSpec				
λ (μm)	Ω	N	E_{up}/k_B (K)	I ($\times 10^{-5}$ erg cm $^{-2}$ s $^{-1}$ sr $^{-1}$)
2,718	1/2	3	5 414	$2,06 \pm 0,65$
2,851	1/2	1	5 314	$2,89 \pm 1,02$
2,870	3/2	1	5 134	$6,77 \pm 1,24$
2,886	1/2	2	5 401	$4,81 \pm 0,97$
2,901	3/2	2	5 250	$7,92 \pm 0,86$
2,922	1/2	3	5 541	$6,35 \pm 0,96$
2,934	3/2	3	5 415	$10,00 \pm 0,41$
2,960	1/2	4	5 735	$4,99 \pm 0,81$
2,970	3/2	4	5 627	$7,99 \pm 0,61$
3,000	1/2	5	5 982	$5,12 \pm 0,55$
3,008	3/2	5	5 888	$10,18 \pm 0,98$
3,048	3/2	6	6 199	$7,78 \pm 0,31$
3,085	1/2	7	6 632	$4,88 \pm 0,78$
3,091	3/2	7	6 558	$7,28 \pm 1,17$
3,131	1/2	8	7 033	$3,50 \pm 0,51$
3,136	3/2	8	6 966	$6,69 \pm 1,21$
3,179	1/2	9	7 483	$4,18 \pm 0,64$
3,183	3/2	9	7 422	$4,54 \pm 0,83$
3,229	1/2	10	7 483	$2,95 \pm 0,93$

TABLE 5.3 – Intensité des raies de OH détectées avec NIRSpec. Les incertitudes sont calculées par la routine Python `curve_fit` comme des erreurs à 1σ sur les paramètres. L'impact des effets de calibration n'est pas pris en compte et les incertitudes associées peuvent atteindre 20 %.

λ (μm)	Transition	E_{up}/k_B (K)	I ($\times 10^{-4}$ erg cm $^{-2}$ s $^{-1}$ sr $^{-1}$)
17,035	0-0 S(1)	1 015	1,55 \pm 0,19
12,279	0-0 S(2)	1 682	2,26 \pm 0,30
9,665	0-0 S(3)	2 504	12,85 \pm 0,68
8,025	0-0 S(4)	3 474	8,70 \pm 2,03
6,910	0-0 S(5)	4 586	20,27 \pm 0,12
6,109	0-0 S(6)	5 830	5,30 \pm 0,12
5,511	0-0 S(7)	7 197	10,01 \pm 0,20
5,053	0-0 S(8)	8 677	1,96 \pm 0,15
4,695	0-0 S(9)	10 262	3,31 \pm 0,41
4,410	0-0 S(10)	11 940	0,52 \pm 0,33
4,181	0-0 S(11)	13 703	1,05 \pm 0,16
3,846	0-0 S(13)	17 444	0,47 \pm 0,07
3,724	0-0 S(14)	19 403	0,24 \pm 0,13
3,626	0-0 S(15)	21 412	0,15 \pm 0,09
2,627	1-0 O(2)	5 987	9,89 \pm 3,15
2,407	1-0 Q(1)	6 149	35,70 \pm 0,62
2,223	1-0 S(0)	6 472	7,06 \pm 0,22
2,122	1-0 S(1)	6 952	25,03 \pm 0,36
2,034	1-0 S(2)	7 585	7,04 \pm 0,20
1,958	1-0 S(3)	8 365	14,23 \pm 0,42
1,892	1-0 S(4)	9 287	2,87 \pm 0,13
1,836	1-0 S(5)	10 342	4,16 \pm 0,19
1,788	1-0 S(6)	11 522	0,42 \pm 0,17
1,748	1-0 S(7)	12 818	1,06 \pm 0,29
2,786	2-1 O(2)	11 636	0,65 \pm 0,13
2,974	2-1 O(3)	11 790	0,64 \pm 0,08
2,356	2-1 S(0)	12 095	0,20 \pm 0,08
2,248	2-1 S(1)	12 550	0,52 \pm 0,18
2,073	2-1 S(3)	13 891	0,47 \pm 0,14
2,604	2-1 Q(5)	13 891	0,27 \pm 0,15
2,654	2-1 Q(7)	15 763	0,19 \pm 0,08
1,853	2-1 S(7)	18 107	0,28 \pm 0,19
1,233	3-1 S(1)	17 819	0,72 \pm 0,10
2,201	3-2 S(3)	19 086	0,24 \pm 0,17
2,066	3-2 S(5)	20 857	0,16 \pm 0,02
3,376	4-3 O(3)	22 080	0,10 \pm 0,03
1,242	4-2 S(4)	24 734	0,15 \pm 0,09

TABLE 5.4 – Intensités des raies H₂ détectées au point lumineux avec la position OFF soustraite. Les incertitudes sont calculées par la routine Python `curve_fit` comme des erreurs à 1 σ sur les paramètres. L'impact des effets de calibration n'est pas pris en compte et les incertitudes associées peuvent atteindre 20 %.

Chapitre 6

Détection de la chimie du carbone dans des régions irradiées

6.1	Introduction	206
6.1.1	Contexte	206
6.1.2	Objets étudiés et méthode d'analyse	208
6.1.3	Organisation de l'article	210
6.2	Observations et réduction des données	210
6.3	Détection et distribution spatiale de l'émission rovibrationnelle de CH⁺ et CH₃⁺	211
6.3.1	Détection de CH ⁺ et CH ₃ ⁺	211
6.3.2	Distribution spatiale	213
6.3.3	Dépendance de la densité du gaz	215
6.4	Analyse du processus d'excitation	216
6.4.1	Température d'excitation rotationnelle	217
6.4.2	Preuve du pompage chimique (à la formation) de CH ⁺	221
6.5	Discussion	227
6.5.1	Diagnostics sur la chimie et les conditions physiques	227
6.5.2	Processus d'excitation alternatifs	229
6.5.3	Discussion sur la chimie en phase gazeuse	231
6.6	Conclusion	234
6.A	Annexes	235
6.A.1	Intensité des raies de CH ⁺ dans la PDR et dans d203-506	235
6.A.2	Spectres observés de CH ⁺ et CH ₃ ⁺ dans la PDR et dans le disque	237
6.A.3	Post-traitement des spectres du JWST	239

Ce chapitre est basé essentiellement sur une traduction de l'article :

**"PDRs4All : Detection of CH⁺ and CH₃⁺ rovibrational emission in the Orion Bar :
evidence of chemical pumping."**

M. Zannese, B. Tabone, E. Habart, E. Dartois, J. Goicoechea et al.

Bientôt soumis dans *Astronomy & Astrophysics*

L'introduction et la conclusion ont été modifiées pour mieux intégrer le chapitre dans le contexte du manuscrit de thèse.

PDRs4All - XX: Detection of CH⁺ and CH₃⁺ rovibrational emission in the Orion Bar: evidence of chemical pumping.

M. Zannese¹, B. Tabone¹, E. Habart¹, E. Dartois², J. Goicoechea³, L. Coudert², B. Gans², M.-A. Martin-Drumel², U. Jacovella², A. Faure⁴, B. Godard⁵, A.G.G. Tielens^{6,7}, R. Le Gal^{4,8}, S. Vicente⁹, O. Berné¹⁰, E. Peeters^{11,12,13}, D. Van De Putte¹⁴, R. Chown^{11,12}, A. Sidhu^{11,12}, I. Schroetter¹⁰, A. Canin¹⁰, O. Kannavou¹

¹ Université Paris-Saclay, CNRS, Institut d'Astrophysique Spatiale, 91405 Orsay
e-mail: marion.zannese@universite-paris-saclay.fr

² Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, CNRS, Université Paris-Saclay, 91405 Orsay, France

³ Instituto de Física Fundamental (CSIC), Calle Serrano 121-123, 28006, Madrid, Spain

⁴ Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG), Université Grenoble Alpes, CNRS, F-38000 Grenoble, France

⁵ Observatoire de Paris, Université PSL, Sorbonne Université, LERMA, 75014 Paris, France

⁶ Leiden Observatory, Leiden University, 2300 RA Leiden, The Netherlands

⁷ Astronomy Department, University of Maryland, College Park, MD 20742, USA

⁸ Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM), 300 Rue de la Piscine, F-38406 Saint-Martin d'Hères, France

⁹ Instituto de Astrofísica e Ciências do Espaço, Tapada da Ajuda, Edifício Leste, 2° Piso, P-1349-018 Lisboa, Portugal

¹⁰ Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie, Université Toulouse III - Paul Sabatier, CNRS, CNES, 9 Av. du colonel Roche, 31028 Toulouse Cedex 04, France

¹¹ Department of Physics & Astronomy, The University of Western Ontario, London ON N6A 3K7, Canada

¹² Institute for Earth and Space Exploration, The University of Western Ontario, London ON N6A 3K7, Canada

¹³ Carl Sagan Center, SETI Institute, 339 Bernardo Avenue, Suite 200, Mountain View, CA 94043, USA

¹⁴ Space Telescope Science Institute, 3700 San Martin Drive, Baltimore, MD, 21218, USA

July 3, 2024

ABSTRACT

Context. The methyldyne cation (CH⁺) and the methyl cation (CH₃⁺) are building blocks of organic molecules in the ultraviolet (UV)-irradiated gas, yet their formation mechanism remains mainly unprobed. The *James Webb Space Telescope (JWST)*, with its high spatial resolution and good spectral resolution, provides unique access to the detection of these molecules.

Aims. Our goal is to investigate how the infrared rovibrational emission of CH⁺ and CH₃⁺, detected in the Orion Bar for the first time and in the protoplanetary disk d203-506, can be used to probe the formation and excitation mechanisms of these molecules and constrain the physico-chemical conditions of the environment.

Methods. We use spectro-imaging acquired using both the NIRSpec and MIRI-MRS instruments on board *JWST* to study the spatial distribution of CH⁺ and CH₃⁺ at very small scales (down to 0.1"), and compare it to excited H₂ emission. We study in detail their excitation and, in the case of CH⁺, we compare the observed line intensities with chemical-pumping models based on recent quantum dynamical calculations. Throughout this study, we compare the emission of these molecules in two environments: the Bar, a photodissociation region (PDR), and a protoplanetary disk (d203-506), both irradiated by the Trapezium cluster.

Results. CH⁺ and CH₃⁺ vibrationally excited emission is detected both in the PDR and in d203-506. This emission originates from the same region as highly excited H₂ (high rotational and rovibrational levels). Their emission correlates less with the lower rotational levels of H₂ ($J < 5$) or the emission of aromatic/aliphatic infrared bands (AIBs). The comparison between the PDR and d203-506 shows that both CH⁺ and CH₃⁺ excitation and/or formation are highly dependent on density. The excitation temperature of the observed CH⁺ and CH₃⁺ rovibrational lines is around $T \sim 1500$ K in the PDR and $T \sim 800$ K in d203-506. Moreover, the column densities derived from the rovibrational emission are less than 0.1 % of the total known column densities. These different results show that CH⁺ and CH₃⁺ level populations strongly deviate from local thermodynamical equilibrium (LTE). CH⁺ rovibrational supra-thermal emission ($v = 1$, and $v = 2$) can be explained by chemical pumping via $C^+ + H_2^+ = CH^+ + H$. Difference in the population distribution of the H₂⁺ energy levels between the Orion Bar and d203-506, then result in different excitation temperature. These results are in favor of a gas phase formation pathway of CH⁺ and CH₃⁺ via successive hydrogen abstraction reactions. However, we do not find any evidence of CH₂⁺ emission in the *JWST* spectrum. Finally, observed CH⁺ intensities coupled with chemical pumping model provide a diagnostic tool to trace the local density.

Conclusions. Line emission from vibrationally excited CH⁺ and CH₃⁺ provides us with a new window into the first steps of hydrocarbon gas-phase chemistry in action. This study highlights the need for extended molecular data of detectable molecules in the interstellar medium to analyse the *JWST* observations.

Key words. Photo-Dissociation regions (PDR) – Stars: formation – molecular processes – radiative transfer – ISM: astrochemistry – Individual: Orion Bar

6.1 Introduction

6.1.1 Contexte

Le Chapitre 5 a mis en évidence la détection de OH dans l'infrarouge proche et moyen. Dans ce Chapitre, nous avons montré comment l'excitation par pompage chimique de OH via $O + H_2$ dans ses niveaux rovibrationnels, détectée dans le disque irradié d203-506, peut être utilisée pour déduire directement le taux de formation des molécules et la densité locale à partir des intensités observées. Cette méthode peut s'appliquer à d'autres hydrides puisque leurs réactions de formation sont similaires à OH qui se forme à partir de H_2^* (voir Chapitre 2, Section 2.2.3.2). C'est pourquoi, à la suite de cette étude, je suis partie à la recherche d'autres espèces pouvant être affectées par ces mêmes processus d'excitation. C'est ainsi que je me suis intéressée à CH^+ et CH_3^+ .

Il est attendu que le cation méthylidyne (CH^+) et le méthylcation (CH_3^+) fassent partie des premiers éléments constitutifs de la chimie organique complexe dans les gaz irradiés par ultraviolet (Smith 1992; Herbst 2021). Dans les nuages interstellaires denses, on suppose que la majorité des espèces moléculaires détectées sont produites par des réactions ion-neutre en phase gazeuse. La chimie des ions carbonés est initiée par C^+ , particulièrement abondant dans les régions à fort champ de rayonnement UV, qui conduit à CH^+ , CH_2^+ et CH_3^+ par abstraction consécutive de dihydrogène (*e.g.*, Sternberg & Dalgarno 1995). Comme décrit plus en détail dans le Chapitre 2, Section 2.2.2.2, ces petits ions moléculaires devraient ensuite réagir avec plusieurs autres espèces pour créer une variété d'hydrocarbures.

L'émission de ces molécules semble particulièrement importante dans les environnements fortement irradiés. En effet, elles nécessitent soit un gaz à haute température cinétique ($T > 400$ K), soit un gaz avec de grandes abondances de H_2 excité rovibrationnellement (voir Équation (6.2)). Dans ces environnements, un rayonnement intense dans l'ultraviolet lointain (FUV, $E < 13,6$ eV) ($G_0 > 10^2$) peut produire du H_2 excité via pompage UV. Ainsi, ces molécules peuvent être utilisées pour contraindre les conditions physiques de ces régions spécifiques. De plus, la formation et l'excitation de CH^+ et de CH_3^+ résultent de processus physico-chimiques spécifiques. En plus de contraindre les conditions physiques, ils peuvent être utilisés pour sonder les processus chimiques induits par les UV.

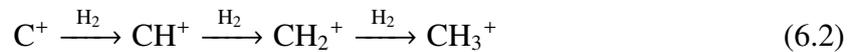
CH^+ a été détecté pour la première fois par absorption dans le milieu interstellaire diffus (Douglas & Herzberg 1941). Depuis, l'émission de CH^+ a été observée dans divers environnements tels que les nébuleuses planétaires (*e.g.*, Cernicharo et al. 1997; Wesson et al. 2010), les régions de formation d'étoiles massives (*e.g.*, Falgarone et al. 2010; Bruderer et al. 2010), les disques (*e.g.*, Thi et al. 2011) et les galaxies (*e.g.*, Spinoglio et al. 2012; Rangwala et al. 2014)... En particulier, des raies purement rotationnelles de CH^+ dans l'infrarouge lointain ont été détectées dans la Barre d'Orion avec *Herschel*/SPIRE, *Herschel*/PACS et *Herschel*/HIFI (Naylor et al. 2010; Habart et al. 2010; Nagy et al. 2013; Parikka et al. 2017; Joblin et al. 2018; Goicoechea et al. 2019). Dans les gaz chauds, on pense qu'il s'agit du produit de la réaction :



qui est largement endoergique lorsque H_2 est dans son état fondamental ($v = 0$ et $J = 0$).

Des études antérieures ont suggéré que cette réaction peut devenir exoergique lorsque H_2 est vibrationnellement ou rotationnellement excité (Stecher & Williams 1972; Jones et al. 1986; Hierl et al. 1997; Agúndez et al. 2010; Godard & Cernicharo 2013; Zanchet et al. 2013; Nagy et al. 2013). Alors que l'excitation collisionnelle avec H et H_2 est possible pour les niveaux rotationnels les plus bas de CH^+ , elle est peu probable pour les niveaux rovibrationnels en raison de leurs énergies de niveaux supérieurs élevées et de leurs densités critiques élevées. De plus, l'excitation collisionnelle de CH^+ est entravée par la forte réactivité de cette espèce avec H et H_2 (Black 1998). Cependant, dans les environnements chauds, en plus de surmonter l'endothermie de la réaction de formation, l'énergie interne de H_2^* excité pourrait également être utilisée pour créer CH^+ dans un état excité. Godard & Cernicharo (2013) montrent que les niveaux purement rotationnels de CH^+ $J \geq 2$ peuvent être excités par pompage chimique pendant sa formation. Ce mécanisme a été proposé pour expliquer l'émission rotationnelle de CH^+ dans la Barre d'Orion, ce qui a été confirmé par Faure et al. (2017) qui ont comparé les modèles de pompage chimique et les intensités des raies de CH^+ observées. Cela a été confirmé par Parikka et al. (2017) (respectivement Goicoechea et al. 2019) qui ont étudié la morphologie spatiale des raies d'émission rotationnelle de CH^+ dans la Barre d'Orion (respectivement à très grande échelle dans le nuage moléculaire d'Orion, OMC-1) à la résolution spatiale de *Herschel* (10" ou 0,02 pc à 120 μm). Ces auteurs ont confirmé une corrélation entre CH^+ et H_2^* vibrationnellement excité. Le pompage chimique des transitions rovibrationnels ($v = 1 - 0$, P(1)–P(10)) de CH^+ a été observé dans la nébuleuse planétaire NGC-7027 (Neufeld et al. 2021). Cette région présente des conditions physiques très similaires à celles de la Barre d'Orion, avec une intensité de champ FUV d'environ $G_0 \sim 10^5$, une température du gaz d'environ $T \sim 1\,000$ K et une densité d'environ $n_H \sim 10^5$ cm $^{-3}$.

Contrairement à CH^+ , CH_3^+ n'a été détecté que récemment dans l'espace, en dehors du système solaire, avec le JWST grâce à l'instrument MIRI-MRS, dans le disque d203-506 irradié par des étoiles massives, près de la barre d'Orion (Berné et al. 2023; Changala et al. 2023), et dans TW Hya, l'étoile T-Tauri la plus proche avec un disque de gaz riche en poussières (Henning et al. 2024). En effet, en raison de l'absence d'un moment dipolaire permanent, CH_3^+ n'a pas d'émission rotationnelle observable. En raison de cette détection récente et de la complexité de la molécule, la voie de formation et l'excitation du CH_3^+ restent insaisissables. On suppose que le CH_3^+ se forme en phase gazeuse à la suite de réactions successives avec le H_2 :



En outre, Pety et al. (2005) ont proposé que la photodestruction des PAHs puisse être précurseur de petits hydrocarbures dans les PDRs. En effet, dans la nébuleuse de la Tête-de-Cheval, les modèles chimiques de pointe, qui ne prennent pas en compte le processus de photodestruction des PAHs, ne parviennent pas à reproduire l'abondance des hydrocarbures observés (C_2H , C_3H_2 , C_4H ...). Cela a été confirmé par Alata et al. (2014, 2015) qui ont montré expérimentalement que de petits hydrocarbures peuvent être produits par la photolyse de carbones amorphes hydrogénés lorsqu'ils sont exposés à des photons UV. En implémentant les paramètres de réaction déterminés expérimentalement dans un modèle astrophysique dépendant du temps avec des paramètres typiques de la nébuleuse de la Tête-de-Cheval, ces auteurs montrent que l'abondance des petits hydrocarbures peut augmenter temporairement

de plusieurs ordres de grandeur. Un second scénario pour la formation de CH^+ et CH_3^+ est donc la photodestruction de petits grains. Cependant, Cuadrado et al. (2015) ont montré que dans les PDRs fortement irradiées, comme la Barre d'Orion, la photodestruction des PAHs n'est pas une condition nécessaire pour expliquer les abondances observées de petits hydrocarbures. Par conséquent, dans cette région, le scénario de la phase gazeuse est privilégié. Dans ce scénario, CH_3^+ serait naturellement produit à partir de CH^+ . L'étude de CH_3^+ à la lumière de CH^+ est donc très pertinente. En phase gazeuse, le pompage chimique induit par H_2^* pourrait également exciter CH_3^+ .

6.1.2 Objets étudiés et méthode d'analyse

Dans ce projet, j'utilise à nouveau les données d'observation du programme JWST *Early Release Science* (ERS) PDRs4All (Berné et al. 2022). J'invite une nouvelle fois le lecteur à se référer au Chapitre 3, Section 3.2.3 pour les détails de ce programme. Ce programme s'intéresse à la Barre d'Orion, une région de photodissociation (pour une revue voir Hollenbach & Tielens 1997; Wolfire et al. 2022) prototypique hautement irradiée située dans la nébuleuse d'Orion. La Barre d'Orion agit comme un véritable laboratoire interstellaire où l'on peut observer les processus non thermiques, présentés dans l'introduction. Cette région est exposée au champ FUV intense de l'amas du Trapèze ($G_0 = 2 - 7 \times 10^4$, Peeters et al. 2024). Ce champ FUV intense façonne le bord du nuage en ionisant et en photodissociant le gaz environnant qui compose le nuage d'Orion. Cela crée la PDR observée, subdivisée en plusieurs transitions entre la région H II, la couche atomique et la région moléculaire.

La Figure 6.1 montre une vue RGB de la Barre d'Orion observée avec NIRCcam où l'émission de CH^+ et CH_3^+ est détectée. La Barre d'Orion étant vue de côté, l'observation des différentes transitions entre le gaz ionisé (en bleu), le gaz atomique (en rouge) et la transition H^0/H_2 (en vert) est facilitée. Ceci rend cette cible particulièrement utile pour étudier la différence dans les spectres compte tenu de la variation des paramètres physico-chimiques entre ces zones. Dans le champ de vue de MIRI-MRS et NIRSpec, nous détectons trois fronts de dissociation d'une épaisseur d'environ 1". Dans le reste de l'étude, nous utilisons le troisième front de dissociation DF3 comme modèle pour tous les DFs car il est le plus proche de l'observateur. En effet, les différences dans l'atténuation des raies d'émission de H_2 indiquent que DF1 est situé plus profondément, derrière une couche plus épaisse de gaz atomique, et DF2 étant à une position intermédiaire entre DF1 et DF3 (Habart et al. 2024; Peeters et al. 2024). J'invite le lecteur à se référer au Chapitre 3, Section 3.2.4 pour une description détaillée de la Barre d'Orion observée par le JWST.

Dans le champ de vue de MIRI-MRS et NIRSpec, un disque protoplanétaire (d203-506) situé le long de la ligne de visée vers la couche atomique est également détecté. Ce disque est un disque incliné, presque sur le bord, vu en silhouette sur le fond lumineux. Il est également illuminé par un intense champ FUV d'intensité similaire à celle du front d'ionisation (Berné et al. 2024). Les observations du JWST révèlent en fait le vent photoévaporé entourant le disque qui est brillant dans l'émission du gaz moléculaire (comme H_2) plutôt que le disque interne qui est caché à l'intérieur. J'invite le lecteur à se référer au Chapitre 3, Section 3.2.5.1 pour une description détaillée de d203-506.

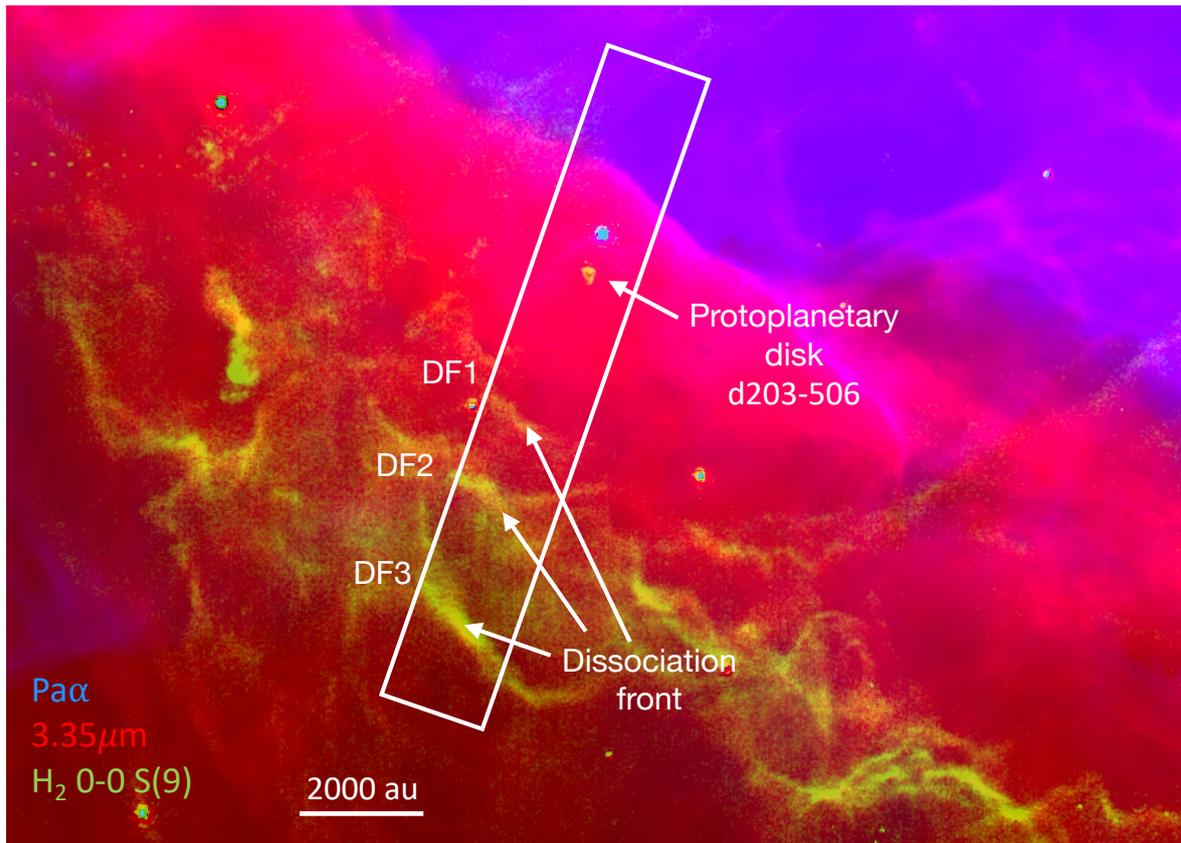


FIGURE 6.1 – Image composite NIRCcam du JWST de la Barre d’Orion, située dans le nuage moléculaire d’Orion. Le rouge est l’émission à $3,35 \mu\text{m}$ (filtre F335M NIRCcam), le bleu est l’émission de $\text{Pa}\alpha$ (filtre F187N soustrait par le filtre F182M) et le vert est l’émission de la raie H_2 0-0 S(9) à $4,70 \mu\text{m}$ (filtre F470N soustrait par le filtre F480M). L’émission de CH_3^+ et CH^+ est détectée dans le disque protoplanétaire et dans les fronts de dissociation. Le rectangle blanc représente la zone dans laquelle les mosaïques de spectroscopie NIRSpect et MIRI se chevauchent.

D’un point de vue observationnel, j’ai à nouveau utilisé des données déjà réduites par des personnes de l’équipe PDRs4All et ai utilisé des cubes de spectro-imagerie déjà réduits desquels j’ai extrait les spectres en choisissant les ouvertures. J’ai une nouvelle fois réalisé toute l’analyse et interprétation scientifique (sur H_2 , CH^+ et CH_3^+) en mesurant les intensités intégrées, en réalisant les cartes d’émission, en réalisant les diagrammes d’excitation, etc.

Pour analyser les observations, j’ai développé ici des modèles analytiques de cinétique chimique basées sur les calculs de coefficients de réaction état-état qui cette fois ont été calculés par Zanchet et al. (2013); Faure et al. (2017); Neufeld et al. (2021). Contrairement aux Chapitres 4 et 5, je n’utilise ni codes auto-cohérents (comme le code PDR de Meudon), ni codes à zéro dimension (comme le code GROSBETA) pour souligner la robustesse et la facilité des modèles analytiques pour contraindre les paramètres physiques d’une région. Nous montrons cependant les limites de ces modèles analytiques dans une étude avancée des processus d’excitation dans des régions où les conditions physiques varient rapidement, comme dans les PDRs.

6.1.3 Organisation de l'article

Dans cet article, nous présentons la détection et l'analyse de l'émission de CH^+ et CH_3^+ vibrationnellement excités dans la Barre d'Orion. Cette détection est comparée à celle du disque irradié (d203-506) situé dans la ligne de visée vers le bord du gaz atomique de la Barre (voir Figure 6.1). La détection des raies dans le proche infrarouge et dans l'infrarouge moyen avec le JWST fournit des résultats supplémentaires par rapport aux études précédentes, car les niveaux d'énergie sondés sont très différents et la résolution angulaire (0,1–1") du JWST est bien meilleure que celle de *Herschel* (d'un facteur 10–100). Nous sommes donc en mesure d'étudier la morphologie spatiale de l'émission de ces deux espèces. Dans la Section 6.2, nous présentons les observations obtenues avec JWST/NIRSpec et JWST/MIRI-MRS ainsi que la réduction des données. Dans la Section 6.3, nous présentons la détection des raies de CH^+ et CH_3^+ dans la PDR et dans d203-506. Nous étudions également la morphologie spatiale de leur émission et la comparons avec différents traceurs dans la région tels que H_2 et l'émission des bandes infrarouges aromatiques/aliphatiques (AIBs). Dans la Section 6.4, nous analysons l'excitation de CH^+ et de CH_3^+ . Nous étudions ainsi en détail leur température d'excitation et comparons la différence entre les deux environnements : la PDR et d203-506. Dans cette section, nous comparons également les observations avec un modèle analytique simple incluant le pompage chimique et la cascade radiative. Dans la Section 6.5.1, nous discuterons comment utiliser ce processus comme un diagnostic simple pour dériver la densité locale et le taux de formation dans ces régions avec cette modélisation. Nous discuterons également de la non-détection de CH_2^+ et des autres mécanismes de formation et d'excitation qui pourraient être en jeu pour CH^+ et CH_3^+ .

6.2 Observations et réduction des données

Les observations avec MIRI-MRS et NIRSpec en mode IFU (integral field unit) ont été obtenues dans le cadre du programme ERS (*Early Research Science*) PDRs4All¹ : *Radiative feedback from massive stars* (ID1288, PIs : Berné, Habart, Peeters, Berné et al. 2022). Les observations MIRI-MRS et NIRSpec couvrent une mosaïque de 9×1 centrée sur $\alpha_{J2000} = 05^{\text{h}}35^{\text{m}}20.4749^{\text{s}}$, $\delta_{J2000} = -05^{\circ}25'10.45''$. Dans cette étude, nous utilisons l'ensemble des cubes de spectro-imagerie² pour étudier la morphologie spatiale. Les données MIRI-MRS ont été réduites à l'aide de la version 1.12.5 du *pipeline JWST*³, et du *Calibration References Data System*⁴ (CRDS) dans le contexte `jwtst_1154.pmap`. En plus de l'étape standard de correction des franges, la correction des franges résiduelles de l'étape 2 a été appliquée, ainsi qu'une soustraction du fond principal à l'étape 3 de la réduction. Les 12 cubes (4 canaux de 3 sous-bandes chacun), toutes positions de pointage confondues, ont été assemblés en un seul cube (voir Chown et al. 2024; Van De Putte et al. 2024, pour les paramètres d'observation et les détails de la réduction des données). Les données NIRSpec ont été réduites à l'aide du pipeline scientifique JWST (version 1.10.2.dev26+g8f690fdc) et du contexte `jwtst_1084.pmap`

1. <https://pdrs4all.org/>, DOI : 10.17909/pg4c-1737

2. Disponible sur le site MAST de PDRs4All : <https://doi.org/10.17909/wqwy-p406>

3. <https://jwst-pipeline.readthedocs.io/en/latest/>

4. <https://jwst-crds.stsci.edu/>

du *Calibration References Data System* (CRDS) (voir Peeters et al. (2024) pour les paramètres d'observation et le processus de réduction des données). Nous utilisons également les spectres MIRI-MRS et NIRSspec, en unités de MJy sr⁻¹, qui ont été moyennés sur l'ouverture donnée par Berné et al. (2023) pour le disque d203-506 et nous avons utilisé les spectres modèles⁵ de Peeters et al. (2024), Chown et al. (2024) et Van De Putte et al. (2024) pour la PDR.

Dans cette étude, l'émission de CH⁺ et de H₂ peut être affectée par l'extinction le long de la ligne de visée. L'extinction peut être négligée dans le disque (Peeters et al. 2024). Cependant, nous devons corriger cette émission de l'extinction par la matière dans la PDR et la matière d'avant-plan. Pour la corriger, nous utilisons la courbe d'extinction paramétrée de Gordon et al. (2023), évaluée à $R(V) = 5,5$. Dans le DF3, l'extinction au pic d'émission de H₂ est de $A_V = 3,4$, obtenue en additionnant l'extinction déterminée pour l'avant-plan ($A_V = 1,4$) et celle intrinsèque à la PDR atomique ($A_V = 2$) selon Peeters et al. (2024) et Van De Putte et al. (2024). Il est important de noter que la courbe d'extinction choisie ne peut pas attester de l'extinction de la raie de H₂ 0-0 S(3) (Van De Putte et al. 2024, Sidhu et al. en préparation). L'évaluation de l'extinction exacte est difficile dans la Barre d'Orion et sera discutée dans Meshaka et al. (en préparation). L'incertitude sur la correction de l'extinction a un impact limité sur les résultats de cette étude compte tenu des autres incertitudes.

6.3 Détection et distribution spatiale de l'émission rovibrationnelle de CH⁺ et CH₃⁺

6.3.1 Détection de CH⁺ et CH₃⁺

6.3.1.1 CH⁺

La haute sensibilité et la bonne résolution spectrale du JWST ont permis la détection de l'émission rovibrationnelle de CH⁺ dans la Barre d'Orion, dans les fronts de dissociation et dans le disque d203-506. La Figure 6.2 montre que lorsque H₂ est brillant (aux fronts de dissociation et dans d203-506), nous détectons CH⁺ et lorsque H₂ est plus faible (dans la région atomique), il n'y a pas de détection de CH⁺. Ces raies rovibrationnelles ont été détectées pour la première fois dans NGC-7027 avec le *NASA's Infrared Telescope Facility* (IRTF) (Neufeld et al. 2021). A l'exception du disque, ces raies sont très faibles (environ 100 fois moins brillantes que H₂ 1-0 S(1)) et il est donc nécessaire d'obtenir des spectres à partir d'ouvertures plus grandes que la taille d'un pixel afin d'augmenter le rapport signal à bruit. Les intensités des raies sont indiquées dans la Table 6.2 dans l'Annexe 6.A.1. La correction de l'extinction de l'émission de CH⁺ n'augmente l'intensité des raies que d'un facteur $\sim 1,3$. Comme CH⁺ est détecté de façon similaire dans les trois fronts de dissociation, les intensités rapportées pour la PDR proviennent du DF3. Le spectre du DF3 et de d203-506 dans l'infrarouge proche est présenté dans la Figure 6.12 dans l'Annexe 6.A.2.1.

5. <https://pdrs4a11.org/seps/>

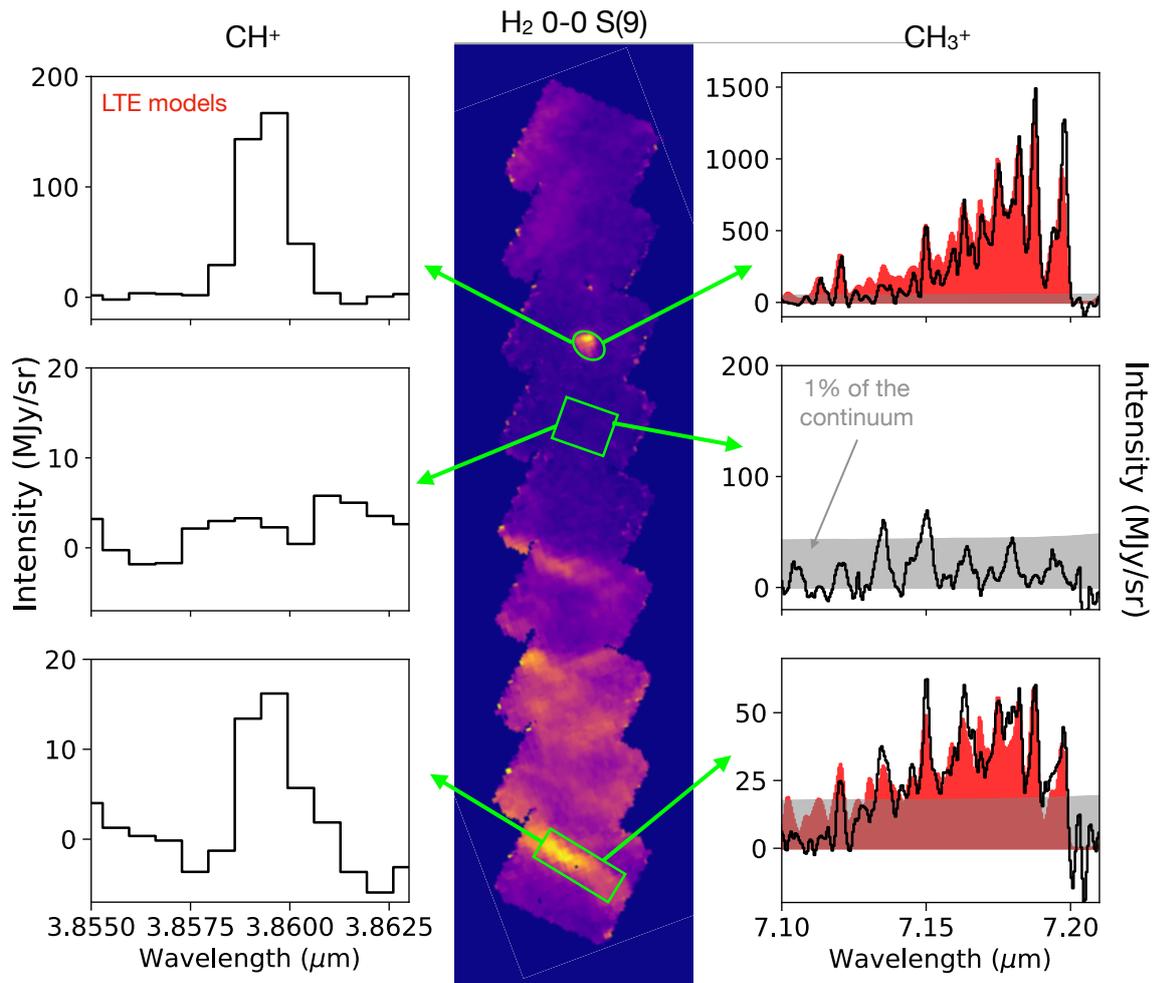


FIGURE 6.2 – Carte soustraite du continuum de l'émission de H_2 0-0 S(9) à $4,69 \mu\text{m}$ (Sidhu et al. en préparation). Les rectangles verts représentent les ouvertures utilisées pour extraire les spectres. (Gauche) Raie de CH^+ $\nu = 1 - 0$ P(5) à $3,86 \mu\text{m}$. (À droite) Émission de la branche Q de CH_3^+ autour de $7,15 \mu\text{m}$. Les remplissages rouges représentent les modèles ETL ajustés aux observations (voir la Section 6.4.1, les Figures 6.12 et 6.13 dans l'Annexe 6.A.2). Le remplissage gris représente 1 % du continuum. Cela montre que CH^+ et CH_3^+ sont détectés là où H_2 est brillant et non là où H_2 est faible.

Nous détectons des raies rovibrationnelles de CH^+ ($\nu = 1 \rightarrow 0$ et $\nu = 2 \rightarrow 1$) de $3,5$ à $4,4 \mu\text{m}$ avec NIRSPEC, jusqu'à $J = 13$ pour $\nu = 1$ (énergie du niveau supérieur $E_{\text{up}} = 7\,398$ K) et $J = 10$ pour $\nu = 2$ ($E_{\text{up}} = 9\,743$ K). La raie P(5) à $3,85 \mu\text{m}$ est présentée dans la Figure 6.2. L'émission de CH^+ à partir de $\nu = 1$ et $\nu = 2$ est divisée en deux branches, la branche R (au-dessous de $3,62 \mu\text{m}$) et la branche P (au-dessus de $3,68 \mu\text{m}$). La branche R (resp. P) correspond aux transitions rovibrationnelles avec un changement du nombre de rotation $J \rightarrow J - 1$ (resp. $J \rightarrow J + 1$). Il est intéressant de noter que nous retrouvons l'asymétrie entre la branche R et la branche P démontrée par Changala et al. (2021). En raison de cette asymétrie, la branche P est plus brillante que la branche R, ce qui explique pourquoi nous détectons seulement 3 raies de la branche R. Pour le reste de l'étude, nous nous concentrons donc sur la branche P.

6.3.1.2 CH₃⁺

CH₃⁺ a été détecté pour la première fois dans le disque d203-506 (Berné et al. 2023; Changala et al. 2023). L'émission la plus brillante de CH₃⁺, détectée avec MIRI-MRS autour de 7 μm, correspond à sa branche Q ($E_{\text{up}} \gtrsim 2\,000$ K) et est présentée sur la Figure 6.2. L'émission observée correspond aux modes de flexion hors plan (ν_2) et dégénérés dans le plan (ν_4) du cation (Cunha de Miranda et al. 2010; Asvany et al. 2018). L'attribution de cette émission a été rendue possible parce que la succession de raies d'émission est caractéristique de la statistique de spin d'un porteur moléculaire qui posséderait trois atomes équivalents sans spin nul (par exemple, des atomes d'hydrogène). De plus, le spectre peut être bien reproduit par des modèles utilisant des constantes de rotation de l'ordre de celles attendues des calculs disponibles (Kraemer & Špirko 1991; Keceli et al. 2009). Des calculs quantiques ultérieurs ont permis de reproduire de manière satisfaisante l'émission observée dans d203-506 et les attributions spectroscopiques ont été confirmées par une mesure expérimentale du spectre photoélectronique résolu en rotation de la bande ν_2 de CH₃⁺ (Changala et al. 2023).

Nous présentons ici la première détection de cette molécule dans un nuage interstellaire. CH₃⁺ est détecté dans les trois fronts de dissociation ainsi que dans d203-506, où l'émission de H₂ et de CH⁺ est brillante (voir Figure 6.2). Contrairement à CH⁺, le spectre de CH₃⁺ autour de 7 μm ne contient pas de raies discrètes. Comme il y a beaucoup de transitions dans cette gamme de longueurs d'onde, les raies se mélangent et créent un pseudo-continuum moléculaire. Comme pour CH⁺, son émission dans la PDR est très faible (environ 50 fois moins brillante que H₂ 1-0 S(1)), c'est pourquoi nous dérivons également les spectres à partir des mêmes grandes ouvertures. De plus, l'émission du continuum à 7 μm est forte en raison d'une bande d'émission de la poussière entre 7 et 9 μm, ce qui conduit à un faible rapport raie sur continuum (voir Figure 6.2). La correction des franges dans les données MIRI-MRS les réduit à environ 1 % (voir Chapitre 3, Section 3.1.4.2) et ici le rapport raie sur continuum est d'environ 4 %. Cela complique donc l'analyse de la signature de CH₃⁺ dans la PDR.

6.3.2 Distribution spatiale

La spectro-imagerie du JWST nous permet d'étudier la morphologie spatiale de la Barre d'Orion et de comparer l'émission de différents traceurs. La Figure 6.3 montre le profil d'intensité normalisé de plusieurs raies sur le champ de vue total de l'IFU dans d203-506 (panneau du haut) et dans la PDR (panneau du bas). La position de la coupe est présentée dans Peeters et al. (2024) et dans la Figure 3.28. Comme on le voit sur cette Figure, l'émission de H₂ trace les différents fronts de transition entre la couche atomique et la région moléculaire (voir également Sidhu et al. en préparation pour une analyse approfondie de l'émission de H₂). Cette émission retrace également le vent photoévaporé de d203-506 (Berné et al. 2024). Plus précisément, l'émission rotationnelle ($v = 0$ $J > 5$) et rovibrationnelle de H₂ trace le bord du front de dissociation où la température et le champ FUV sont plus élevés que plus loin dans le nuage, car leur excitation est pilotée par le pompage FUV. Les niveaux rotationnels inférieurs de H₂ ($J < 5$) culminent plus loin dans le nuage, où la densité de colonne est plus élevée et le gaz encore assez chaud, car ils sont principalement excités par les collisions (Van De Putte et al. 2024). La séparation spatiale entre les niveaux rotationnels les plus bas

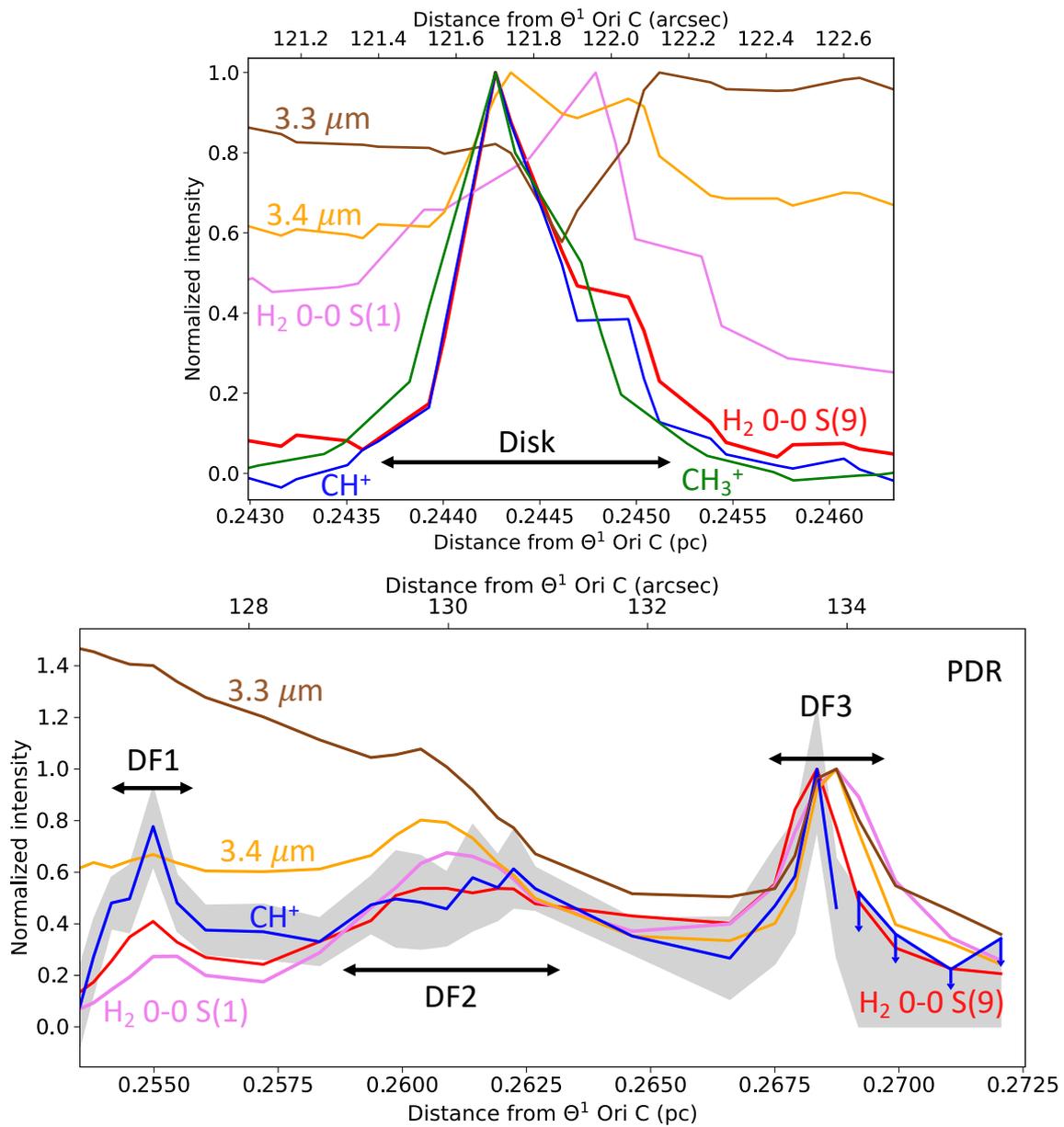


FIGURE 6.3 – Profils d’intensité intégrée normalisés de la raie de CH^+ $\nu = 1 - 0$ P(5), de l’émission de CH_3^+ entre 7,16 et 7,20 μm , de la raie de H_2 0-0 S(1), de la raie de H_2 0-0 S(9) et de l’émission AIBs à 3,3 et 3,4 μm (Haut) à travers le disque protoplanétaire d203-506 (Bas) à travers les fronts de dissociation, en fonction de la distance à l’étoile θ^1 Ori C. La position de la coupe est présentée dans Peeters et al. (2024) et dans la Figure 3.28. Les cartes utilisées pour dériver le profil d’intensité des raies de H_2 (resp. l’émission de CH_3^+) sont présentées dans Sidhu et al. (en préparation) (resp. Berné et al. 2023). L’émission de CH^+ et de CH_3^+ suit mieux l’émission de H_2^* excité que l’émission de H_2 moins excité et que l’émission des AIBs.

de H_2 et les niveaux hautement excités est à la limite de la résolution spatiale de MIRI-MRS (0,3–1"). La séparation entre l’émission de H_2 0-0 S(9) et de H_2 0-0 S(1) est visible dans

les données de NIRSPEC et de MIRI-MRS, comme le montre la Figure 6.3, et est d'environ $0,5''$, ce qui est à peine résolu. L'émission de H_2 0-0 S(1) (en rose) et les AIBs (en marron) est plus profonde que l'émission de H_2 0-0 S(9) (en rouge) dans le DF3 (voir aussi Peeters et al. (2024)).

Nous comparons maintenant la distribution spatiale de l'émission de CH^+ et de CH_3^+ à celle des raies de H_2 . La Figure 6.3 montre une bonne coïncidence spatiale entre l'émission de H_2 0-0 S(9) et l'émission de CH^+ et de CH_3^+ . Les profils d'intensité montrent que CH^+ culmine là où H_2 culmine à la fois dans d203-506 et dans la PDR avec une meilleure résolution spatiale. Plus précisément, l'émission de CH^+ suit mieux celle de la raie excitée de H_2 0-0 S(9) ($E_{\text{up}} = 10\,261$ K) que celle de la raie de H_2 0-0 S(1), plus froide ($E_{\text{up}} = 1\,015$ K). Grâce à la haute résolution spatiale du JWST, cette comparaison entre H_2^* excité et CH^+ fournit une vision plus précise que ce que donnaient les résultats précédents de Parikka et al. (2017) par exemple, qui ont montré que l'émission rotationnelle de CH^+ est cospatiale avec l'émission de H_2 1-0 S(1) à la résolution spatiale de *Herschel*. Ces résultats sont en accord avec la nécessité d'une forte excitation de H_2^* pour produire l'émission de CH^+ . De plus, dans les deux panneaux, il est clair que le profil d'émission de CH^+ est plus proche de H_2 que de l'émission AIB à $3,3\ \mu\text{m}$ et $3,4\ \mu\text{m}$. Ce résultat est en accord avec la formation (et peut-être l'excitation) de CH^+ en phase gazeuse via des réactions entre H_2 et C^+ (voir Équation (6.1)) plutôt qu'avec la photodestruction des grains de poussières.

CH_3^+ est trop faible dans la PDR pour obtenir un profil d'intensité à travers la mosaïque, mais le panneau du haut de la Figure 6.3 montre également un très bon accord avec l'émission de CH^+ et de H_2 dans d203-506 (voir aussi Berné et al. 2023). La Figure 6.2 montre également que CH_3^+ est brillant là où H_2 est brillant dans la PDR. Ce bon accord entre la distribution spatiale de CH^+ , CH_3^+ et H_2 est en faveur d'une formation de CH^+ et CH_3^+ en phase gazeuse par réaction avec H_2 comme décrit dans l'Équation (6.2).

6.3.3 Dépendance de la densité du gaz

Alors que l'émission normalisée de CH^+ et de CH_3^+ vibrationnellement excités suit bien l'émission de H_2^* excité, il est important de noter que le rapport d'intensité de CH^+ et de H_2 0-0 S(9) entre les fronts de dissociation et d203-506 est très différent. La Figure 6.4 montre le rapport d'intensité intégrée de CH^+ P(5) / H_2 0-0 S(9) et le rapport d'intensité de crête de CH_3^+ – $7,19\ \mu\text{m}$ / H_2 0-0 S(9) en fonction de H_2 1-0 S(1) / H_2 2-1 S(1). Le rapport H_2 1-0 S(1) / H_2 2-1 S(1) est un traceur de la densité dans des régions denses et fortement irradiées. Dans ces conditions, l'excitation collisionnelle du niveau $\text{H}_2\ v = 1\ J = 3$ devient compétitive lorsque la densité augmente au-dessus de $10^5\ \text{cm}^{-3}$. Le rapport des raies 1-0 S(1) / 2-1 S(1) passe alors d'une valeur de cascade radiative pure (environ 2) à une valeur d'excitation collisionnelle (de l'ordre de 10). Cette Figure montre que pour CH^+ et CH_3^+ , leur rapport d'intensité sur H_2 0-0 S(9) est beaucoup plus élevé dans le disque que dans la PDR (un facteur 10 pour CH^+ et CH_3^+). En revanche, le rapport $\text{CH}^+/\text{CH}_3^+$ reste relativement constant entre la PDR et le disque, CH_3^+ étant légèrement plus élevé (d'un facteur 2) à haute densité par rapport à CH^+ . Ceci suggère que l'excitation et/ou la formation de CH^+ et CH_3^+ dépendent plus de la densité que l'excitation de H_2 0-0 S(9). Ceci est en accord avec une voie chimique en phase gazeuse puisque la densité joue un rôle majeur dans l'efficacité des

collisions inélastiques et réactives.

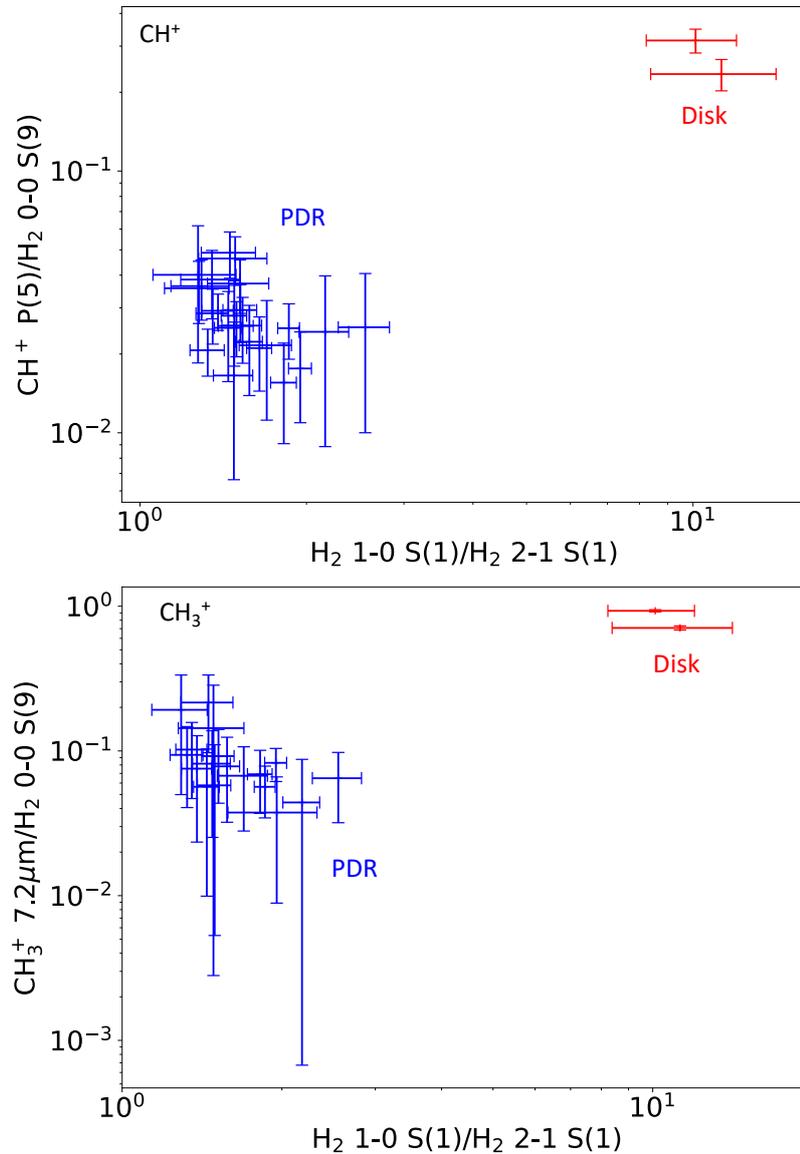


FIGURE 6.4 – Rapport d'intensité intégrée de CH^+ $\nu = 1 - 0$ P(5) sur H_2 0-0 S(9) (en haut) et rapport d'intensité de crête de CH_3^+ $- 7,19 \mu\text{m}$ sur H_2 0-0 S(9) (en bas) en fonction du rapport d'intensité intégrée de H_2 1-0 S(1) / H_2 2-1 S(1) qui est un traceur de la densité dans ces conditions. L'émission de CH^+ et de CH_3^+ semble augmenter de façon similaire à haute densité par rapport à l'émission de H_2 0-0 S(9).

6.4 Analyse du processus d'excitation

La section précédente montre la coïncidence spatiale entre les émissions de H_2 , CH^+ et CH_3^+ excités, tendant à favoriser une formation en phase gazeuse. Cependant, l'excitation de ces molécules ne peut pas être déterminée uniquement par l'étude de leur distribution

spatiale. Une étude détaillée de l'excitation dans la PDR et dans le disque est menée dans les sections suivantes. Comme l'émission de CH^+ et de CH_3^+ dans les trois fronts de dissociation est similaire, nous nous concentrons sur le DF3 dans le reste de l'article.

6.4.1 Température d'excitation rotationnelle

6.4.1.1 CH^+

Pour estimer la température d'excitation des transitions rovibrationnelles de CH^+ , nous avons dérivé les intensités absolues de chaque raie détectée avec un rapport signal à bruit suffisant (au moins 3) et tracé un diagramme d'excitation présenté dans la Figure 6.5. Cette méthode repose sur l'hypothèse que l'émission est optiquement mince, ce qui est raisonnable car la densité de colonne des niveaux de CH^+ vibrationnels est faible. Pour dériver les intensités absolues, nous avons ajusté les raies avec une gaussienne couplée à une fonction linéaire pour prendre en compte le continuum, puis nous avons intégré la fonction gaussienne sur les longueurs d'onde.

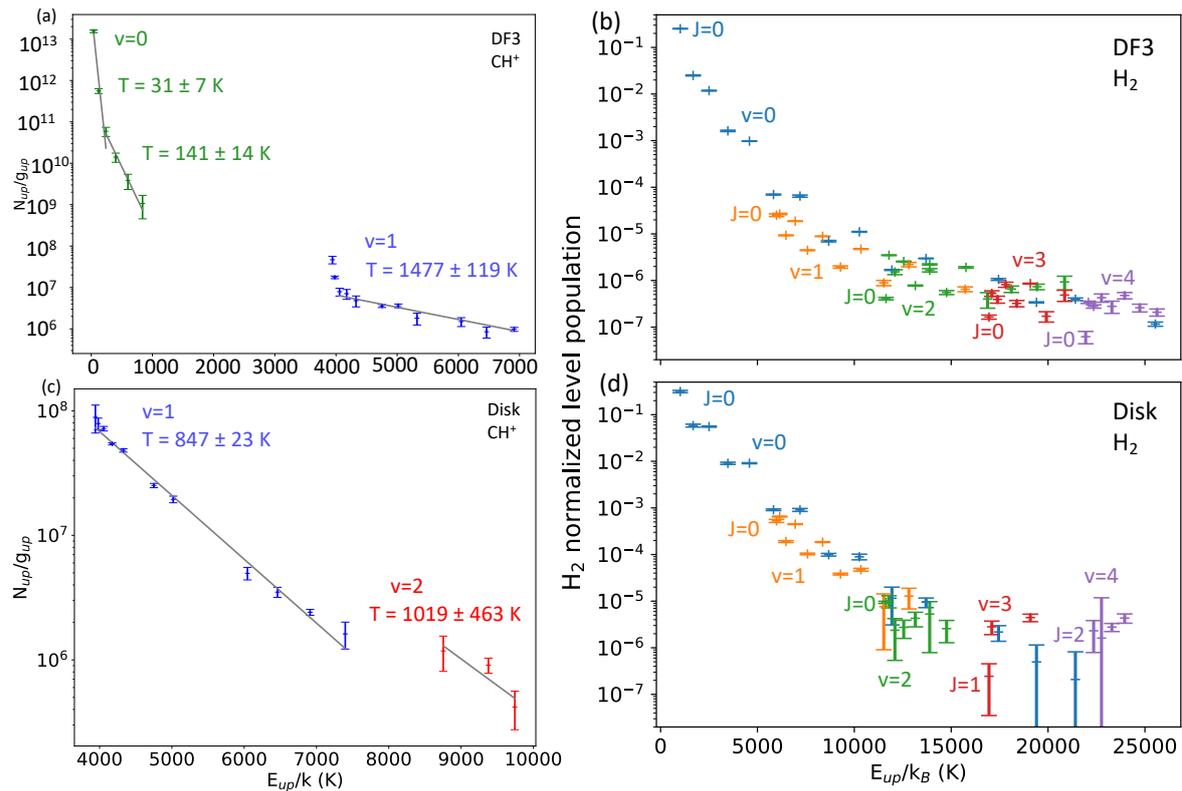


FIGURE 6.5 – Diagramme d'excitation de CH^+ et population des niveaux de H_2 dans d203-506 et dans la PDR. (Gauche) Diagramme d'excitation de CH^+ (a) dans la PDR et (c) dans d203-506. (b) Population des niveaux de H_2 normalisé à la densité de colonne totale (voir Table 6.1) (b) dans la PDR (d) dans d203-506. La différence entre les diagrammes d'excitation de CH^+ dans la PDR et dans le disque peut être expliquée par la différence de distribution de la population de H_2 .

Il est intéressant de noter que dans la PDR, le diagramme d'excitation du premier mode vibrationnel ($\nu = 1$) correspond à une ligne droite (voir Figure 6.5(a)). Cela signifie que l'excitation des niveaux de rotation dans l'état vibrationnel $\nu = 1$ de CH^+ suit une distribution de Boltzmann, c'est-à-dire une distribution de température unique telle que décrite ci-dessous :

$$\ln\left(\frac{N_{\text{up}}}{g_{\text{up}}}\right) = \ln\left(\frac{N}{Q(T_{\text{ex}})}\right) - \frac{E_{\text{up}}}{k_B T_{\text{ex}}}, \quad (6.3)$$

où N_{up} est la densité de colonne du niveau supérieur de la transition étudiée, g_{up} la dégénérescence du niveau supérieur, N la densité de colonne totale, T_{ex} la température d'excitation, $Q(T_{\text{ex}})$ la fonction de partition et k_B la constante de Boltzmann. La température d'excitation dérivée dans la PDR à partir de ce diagramme atteint environ 1 500 K, et reflète une excitation suprathermique ($T_{\text{ex}} > T_{\text{gas}}$, c'est-à-dire que l'excitation n'est pas seulement collisionnelle). En effet, il est peu probable que cette température très élevée soit atteinte dans la PDR au niveau du front de dissociation. La température du gaz dérivée des raies de H_2 à la transition H^0/H_2 est d'environ $T \sim 600$ K (Van De Putte et al. 2024, Sidhu et al. en préparation et voir la Table 6.1). En outre, les modèles du code PDR de Meudon (Le Petit et al. 2006) avec des paramètres cohérents pour la Barre d'Orion ne prévoient pas que la température soit supérieure à $T \sim 1\,000$ K où les abondances de CH^+ et de H_2 sont maximales (Joblin et al. 2018; Zannese et al. 2023; Van De Putte et al. 2024, Meshaka et al. en préparation).

Nous avons également tracé le diagramme d'excitation des transitions purement rotationnelles dans l'état fondamental vibrationnel $\nu = 0$ de CH^+ ($40 < E_{\text{up}} < 850$ K) détecté dans la PDR avec *Herschel*/HIFI et *Herschel*/PACS (Parikka et al. 2017; Joblin et al. 2018). Pour comparer les observations de *Herschel* et du JWST, nous considérons un facteur de dilution du faisceau car leur taille de faisceau est différente. Suivant Joblin et al. (2018), nous avons considéré que dans les observations de *Herschel*, CH^+ provient d'un filament de 2" de large avec une longueur infinie, ce qui conduit à des facteurs de dilution du faisceau de 0,10 à 0,28 en fonction des raies de CH^+ considérées dans l'IR lointain. Ici, nous voyons que la température d'excitation des niveaux $\nu = 0$ est beaucoup plus basse que la température d'excitation des niveaux $\nu = 1$, sauf pour les niveaux $J = 0$ et 1 à l'intérieur de $\nu = 1$. Les niveaux $\nu = 0$ sont peuplés de manière sub-thermique en raison des densités critiques élevées des niveaux et de la réactivité élevée de CH^+ qui entrave l'excitation par collisions. Par conséquent, l'excitation de tous les niveaux de CH^+ ne peut pas être expliquée par une seule température. Un autre argument en faveur de l'excitation non thermique est la densité de colonne observée dans le premier mode vibrationnel $\nu = 1$ de CH^+ . Dans la PDR, nous obtenons une densité de colonne d'environ $N(\text{CH}^+) = (7,9 \pm 2,3) \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$. Dans les modèles PDR standards pour la Barre d'Orion, la densité de colonne estimée pour CH^+ est d'environ $N(\text{CH}^+) \sim 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, ce qui est en accord avec la densité de colonne observée dans $\nu = 0$ avec *Herschel* qui est d'environ $N(\text{CH}^+) \approx 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Ceci montre que l'émission de CH^+ détectée avec le JWST ne trace pas la majeure partie de CH^+ connue (prédite par les modèles et observée par les raies purement rotationnelles) mais seulement une très petite fraction (inférieure à 0,1 %). Tous ces résultats montrent qu'il est très peu probable que l'excitation de cette molécule soit thermalisée.

Dans d203-506, l'excitation à l'intérieur d'un niveau vibrationnel ($\nu = 1$ et $\nu = 2$) suit également une distribution de Boltzmann avec une température d'excitation autour de $T =$

850 K qui est plus basse que dans la PDR. Cette température est similaire à la température du gaz dérivée des raies de H_2 ($T_{\text{gaz}} \sim 900$ K, Berné et al. 2023, voir Table 6.1). Cependant, le diagramme d'excitation montre un décalage entre les niveaux $\nu = 1$ et $\nu = 2$. En effet, les niveaux $\nu = 2$ sont plus fortement peuplés que ce que l'on pourrait attendre en extrapolant la droite qui correspond à l'excitation du $\nu = 1$. À partir de ce diagramme d'excitation, nous pouvons déduire une température de vibration entre $\nu = 1$ et $\nu = 2$ en utilisant les niveaux $\nu = 1 J = 7$ et $\nu = 2 J = 7$ avec l'Équation :

$$T_{\text{vib}} = \frac{E_2 - E_1}{k_B} / \ln\left(\frac{N_1 g_2}{N_2 g_1}\right). \quad (6.4)$$

Nous mesurons $T_{\text{vib}} \sim 1\,300$ K qui est plus élevée que la température de rotation $T_{\text{rot}} \sim 900$ K. Une fois de plus, une distribution de Boltzmann unique ne peut pas expliquer l'excitation de tous les niveaux de CH^+ dans d203-506. Même si la température d'excitation est proche de la température du gaz, il est probable que les niveaux de CH^+ ne soient pas thermalisés dans d203-506.

Cette analyse montre que la température d'excitation de CH^+ est plus élevée et que la température cinétique du gaz est plus basse dans la Barre d'Orion par rapport à d203-506. Ce résultat soutient l'idée que l'excitation de CH^+ ne peut pas être thermique dans la Barre d'Orion. Le comportement différent de la température d'excitation met en évidence la différence d'excitation de CH^+ dans ces environnements, qui peut être expliquée par le pompage chimique (à la formation). Ce scénario est étudié dans la section suivante.

6.4.1.2 CH_3^+

Afin de dériver la température d'excitation de CH_3^+ à partir de la branche Q uniquement, nous étudions l'évolution de la forme de la signature montrée sur la Figure 6.6. Il apparaît que les raies à courtes longueurs d'onde de la branche Q sont plus brillantes à des températures plus élevées, ce qui démontre que la forme de la branche Q peut être utilisée pour étudier l'excitation de CH_3^+ dans les modes vibrationnels observés.

Il est difficile de dériver correctement les intensités intégrées de CH_3^+ car le spectre révèle une large pseudo-continuum, au lieu de raies discrètes, avec un très faible contraste avec l'émission du continuum de la poussière. Nous mesurons donc la différence d'intensité entre le pic et la base de certaines caractéristiques étroites et proéminentes de la branche Q qui sont particulièrement sensibles à la température. Cette méthode nous permet de limiter les principales incertitudes dans ce domaine de longueurs d'onde : les franges et l'estimation du continuum. En effet, dans la région autour $7\ \mu\text{m}$, le continuum est très fort en raison de l'augmentation des AIBs entre 7 et $9\ \mu\text{m}$ qui culminent à $7,7\ \mu\text{m}$. La pente est donc abrupte et difficile à ajuster. De plus, le pseudo-continuum moléculaire de CH_3^+ est difficile à séparer du continuum de poussières. Ici, le rapport raie sur continuum est très faible, jusqu'à 4% dans le meilleur des cas. Le défi consiste donc à déterminer le continuum de la poussière avec une précision inférieure à 4% afin de pouvoir mesurer correctement l'émission de CH_3^+ . Entre le pic et la base de la raie, le continuum de la poussière ne varie pas de manière drastique, ce qui rend cette mesure presque exempte de l'influence de l'estimation du continuum.

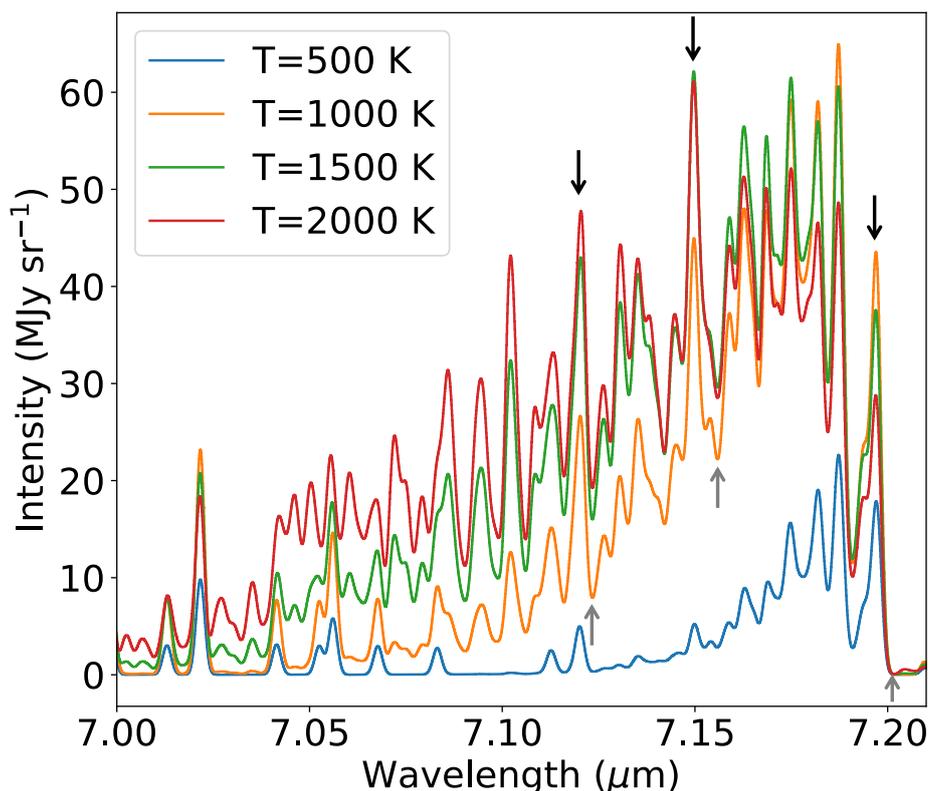


FIGURE 6.6 – Modèles ETL de la branche Q de CH_3^+ à différentes températures d'excitation en utilisant l'ensemble des constantes spectroscopiques de Changala et al. (2023). Plus la température d'excitation est élevée, plus les raies à courtes longueurs d'onde sont intenses.

Pour estimer la température d'excitation de l'émission de CH_3^+ , nous utilisons les deux rapports de raies $7,12 \mu\text{m}/7,2 \mu\text{m}$ et $7,15 \mu\text{m}/7,2 \mu\text{m}$. La Figure 6.7 montre l'évolution de ces rapports en fonction de la température. Les rapports modélisés sont calculés à partir d'un modèle ETL utilisant les données spectroscopiques de Changala et al. (2023). Le rapport mesuré sur le spectre MIRI-MRS est superposé en gris. Les incertitudes sur le rapport mesuré tiennent compte de la variation de la mesure en fonction du choix du continuum. Cette Figure montre que la température d'excitation se situe entre $T = 1\,000 \text{ K}$ et $T = 1\,700 \text{ K}$ dans le DF3. Cette température d'excitation est similaire à celle de CH^+ . En utilisant cette méthode, nous obtenons une température d'excitation autour de $T = 700 \text{ K}$ dans d203-506 qui est en accord avec la température obtenue par Changala et al. (2023) en ajustant un modèle ETL au spectre observé (voir Figure 6.13 dans l'Annexe 6.A.2.2). Comme pour CH^+ , la température d'excitation de CH_3^+ dans le DF3 est plus élevée que la température du gaz et plus élevée que la température d'excitation dans d203-506. Ceci est également en faveur d'une excitation par un processus non thermique.

De même que pour CH^+ , la densité de colonne de CH_3^+ dans la PDR et le disque d203-506 estimée en utilisant l'émission rovibrationnelle et une hypothèse d'ETL, est plus faible que ce qui est prédit par les modèles. En effet, nous estimons $N(\text{CH}_3^+) \sim 2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ dans la PDR et $N(\text{CH}_3^+) = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ dans le disque, alors que la densité de colonne attendue dans la Barre d'Orion est $N(\text{CH}_3^+) \approx 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Comme pour le CH^+ , l'émission observée

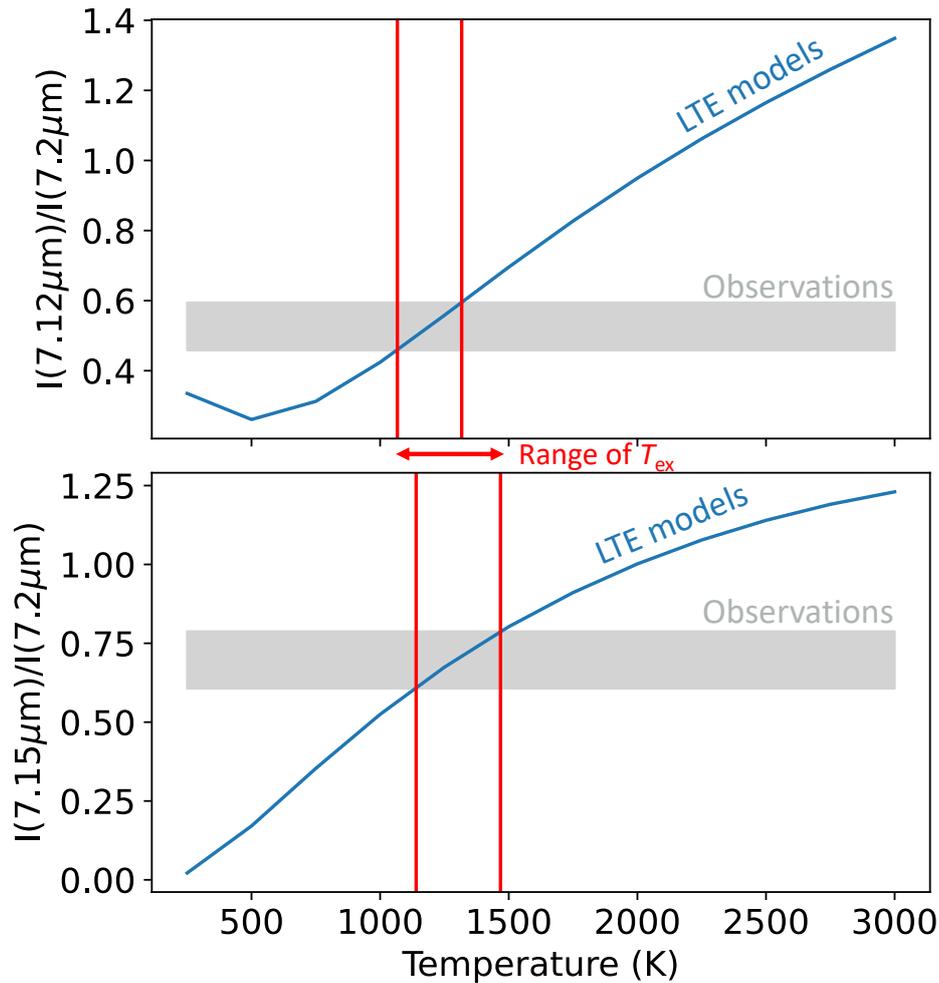


FIGURE 6.7 – Rapports des raies de CH_3^+ en fonction de la température. La ligne bleue représente l'estimation des rapports pour les modèles ETL. La zone grise correspond à la mesure du rapport dans les données du DF3. Les incertitudes proviennent de l'estimation du continuum. Les lignes rouges tracent la gamme de température où les modèles croisent les observations. (En haut) Rapport de la raie $7,12 \mu\text{m}$ sur la raie $7,2 \mu\text{m}$. (En bas) Rapport de la raie à $7,15 \mu\text{m}$ sur la raie à $7,2 \mu\text{m}$. La température d'excitation de CH_3^+ dans le DF3 est d'environ $1\,000 - 1\,700 \text{ K}$.

de CH_3^+ excité vibrationnellement ne représente qu'une très petite fraction de l'abondance totale prédite par les modèles.

6.4.2 Preuve du pompage chimique (à la formation) de CH^+

6.4.2.1 Le modèle

Nous obtenons le résultat inattendu que la température d'excitation de CH^+ et de CH_3^+ est plus basse dans un environnement plus chaud (disque) que dans un environnement plus froid

(DF3). L'excitation de CH^+ par pompage chimique a déjà été proposée pour son état vibrationnel fondamental dans la Barre d'Orion (Godard & Cernicharo 2013) et son état $v = 1$ dans NGC-7027 (Neufeld et al. 2021). Dans cette section, nous montrons que le pompage chimique peut naturellement expliquer l'excitation de CH^+ dérivée des observations NIRS-pec en utilisant un modèle analytique simple. Nous supposons tout d'abord que toutes les raies observées proviennent d'une seule couche et sont uniquement excitées par pompage chimique par la réaction $\text{C}^+ + \text{H}_2(v, J) \rightarrow \text{CH}^+(v', J') + \text{H}$. Pour prédire l'intensité des raies, nous supposons également qu'un cation CH^+ produit dans un état quantique donné via $\text{C}^+ + \text{H}_2$ se désexcite rapidement par une cascade radiative. Nous négligeons donc les collisions ou tout autre processus de (dés)excitation tel que le pompage UV ou IR. Les densités critiques des niveaux rovibrationnels de CH^+ ($n_c \sim 10^{13} \text{ cm}^{-3}$) sont en effet des ordres de grandeur plus élevés que les densités attendues dans la Barre d'Orion ou d203-506 ($n_{\text{H}} \sim 10^5 - 10^7 \text{ cm}^{-3}$).

La distribution exacte de la population de CH^+ après le pompage chimique dépend des coefficients de réaction d'état à état mais aussi des densités locales des niveaux de H_2 . La probabilité de former CH^+ dans un état donné i par $\text{C}^+ + \text{H}_2$ est définie comme suit

$$f_i(\text{CH}^+)_{\text{chem-pump}} = \frac{\sum_j k_{j \rightarrow i}(T) x_j(\text{H}_2)}{\sum_i \sum_j k_{j \rightarrow i}(T) x_j(\text{H}_2)} \quad (6.5)$$

où $x_j(\text{H}_2)$ est la population du niveau j de H_2 normalisée par rapport à la population totale, et $k_{j \rightarrow i}(T)$ est le coefficient de vitesse d'état à état de la réaction ($[\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}]$). Nous utilisons les coefficients de vitesse d'état à état calculés par Zanchet et al. (2013) avec l'extension de Faure et al. (2017). Les taux disponibles concernent les réactions de H_2 ($v = 1, J = 0, 1, v = 2, J = 0$) vers CH^+ ($v' = 0, 1, 2, J'$). Ainsi, nous ne disposons de données moléculaires d'état à état que pour 3 niveaux de H_2 alors que nous avons des observations de plus de 50 niveaux de H_2 dans la Barre d'Orion. Pour les autres niveaux de H_2 et de CH^+ , nous devons utiliser l'extrapolation proposée par Neufeld et al. (2021) et nous la normalisons au coefficient de vitesse de la réaction $\text{C}^+ + \text{H}_2(v = 1, J = 0) \rightarrow \text{CH}^+(v' = 1, J' = 0) + \text{H}$. De nouveaux calculs quantiques sont nécessaires pour vérifier la validité de cette extrapolation.

La probabilité f_i de former CH^+ dans un état donné ne doit pas être confondue avec la distribution de probabilité de CH^+ dont dépendent les intensités des raies. La population d'un niveau donné est en effet le résultat de la production directe de CH^+ dans cet état et de la production indirecte par cascade radiative de CH^+ produit dans des états supérieurs. On peut alors résoudre l'équation détaillée d'équilibre, incluant la cascade radiative et le pompage chimique, pour calculer la densité de colonne N_i dans un état donné et prédire l'intensité des raies. Dans ce travail, nous simplifions davantage l'équation détaillée du bilan en notant tout d'abord que la probabilité de formation de CH^+ dans un état v diminue considérablement avec le niveau vibrationnel v . Lorsque l'on considère l'échelle rotationnelle à l'intérieur d'un état v , on peut donc négliger la cascade radiative à partir de $v' > v$. Nous notons également que la cascade radiative peuplant un niveau rovibrationnel (v, J) est dominée par les transitions $(v \rightarrow v, J \rightarrow J - 1)$. En d'autres termes, chaque état vibrationnel v peut être traité comme une cascade rotationnelle séparée $J + 1 \rightarrow J$ alimentée par la production de CH^+ dans l'état v avec une fuite due aux transitions $v \rightarrow v - 1$. Sous ces hypothèses simplificatrices, les équations détaillées du bilan sont les suivantes :

$$\left(\sum_m A_{i \rightarrow m} \right) x_i = A_{i+1 \rightarrow i} x_{i+1} + \frac{R}{N} \times f_i \quad (6.6)$$

où $A_{i+1 \rightarrow i}$ est le coefficient d'Einstein de la transition purement rotationnelle $J + 1 \rightarrow J$ et $A_{i \rightarrow m}$ est le coefficient d'Einstein de toutes les autres transitions possibles à partir du niveau i . Le terme à gauche décrit la désexcitation du niveau i via toutes les transitions descendantes, essentiellement les transitions purement rotationnelles et rovibrationnelles, le premier terme à droite est la population du niveau i via la cascade radiative, supposée être dominée par la transition purement rotationnelle $J + 1 \rightarrow J$, et le second terme à droite décrit la population directe via le pompage à la formation. Cette équation est similaire à l'Équation C.2. de Tabone et al. (2021), à la différence importante que l'Équation (6.6) inclut $v \rightarrow v - 1$ qui peut être considéré comme une fuite dans la cascade radiative.

Lorsqu'une raie est optiquement mince, on peut calculer son intensité comme suit :

$$I_{ij} = \frac{hNA_{ij}v_{ij}}{4\pi} x_i, \quad (6.7)$$

où v_{ij} est la fréquence de la raie considérée. Comme l'Équation (6.6) est une équation linéaire en R/N , la population du niveau x_i est proportionnelle à R/N . Par conséquent, en suivant Tabone et al. (2021) et en injectant cette mise à l'échelle dans l'Équation (6.7), l'intensité de la raie peut être réécrite comme suit

$$I_{ij} = \frac{hv_{ij}}{4\pi} R\tilde{I}_{ij}, \quad (6.8)$$

où $\tilde{I}_{ij} = x_i NA_{ij}/R$ est l'intensité de la raie normalisée (sans unité) qui ne dépend que de la distribution f_i et des coefficients d'Einstein A_{ij} . Elle correspond à la probabilité qu'un produit CH^+ formé via $\text{C}^+ + \text{H}_2$ transite par la transition $i \rightarrow j$. Ainsi, on peut écrire que la probabilité qu'un CH^+ transite par une transition provenant du niveau i vaut $\tilde{I}_i = \sum_j \tilde{I}_{ij}$. Nous pouvons alors réécrire l'Équation (6.6) de façon à ce qu'elle soit indépendante de R/N :

$$\tilde{I}_i = \frac{A_{i+1 \rightarrow i}}{\sum_m A_{i+1 \rightarrow m}} \tilde{I}_{i+1} + f_i \quad (6.9)$$

En résumé, notre modèle d'excitation simple utilise la distribution des CH^+ naissants f_i calculée à partir des coefficients de réaction d'état à état et de la distribution d'état de H_2 . À partir de là, nous calculons la distribution de CH^+ dans chaque état rovibrationnel à l'aide de l'Équation (6.9) qui est résolue itérativement en commençant par le niveau J le plus élevé de l'état rovibrationnel considéré pour lequel $x_i \simeq 0$.

6.4.2.2 Application

Grâce à MIRI-MRS et NIRSpec, les populations des niveaux de H_2 sont directement mesurées dans la PDR et dans d203-506. Les populations de niveaux de H_2 sont tracées sur la Figure 6.5. Pour prendre en compte les niveaux de H_2 qui ne sont pas observés avec le JWST mais significativement peuplés par pompage UV (détectés jusqu'à $v = 12$ avec

IGRINS, Kaplan et al. 2017; Kaplan et al. 2021), nous considérons qu'ils sont peuplés suivant une distribution de Boltzmann à la température du gaz comme une limite inférieure. Pour la limite supérieure, nous considérons que tous les niveaux de H_2 avec des énergies de niveaux supérieurs $E_{up} < 30\,000$ K sont aussi peuplés (en considérant la dégénérescence) que le dernier niveau observé du même mode vibrationnel. Au-delà de 30 000 K, la population des niveaux est inférieure d'au moins 7 ordres de grandeur par rapport aux niveaux purement rotationnels moins excités, tandis que les coefficients d'état à état atteignent une valeur constante qui n'est supérieure que de 5 ordres de grandeur. On peut alors négliger ces niveaux dans le calcul du pompage chimique. La température du gaz est également estimée dans les deux environnements grâce aux raies purement rotationnelles de H_2 (Van De Putte et al. 2024; Berné et al. 2023, Sidhu et al. en préparation).

Nous supposons ici que l'excitation de CH^+ est due au pompage chimique et que l'impact du pompage radiatif et des collisions inélastiques est négligeable. Nous ne prenons en compte que les quatre premiers modes vibrationnels de CH^+ . En utilisant les coefficients d'état à état, la distribution de H_2 observée avec le JWST et extrapolée, et la température du gaz dérivée, nous pouvons calculer la probabilité que CH^+ se désexcite finalement à travers les transitions observées après son excitation par pompage chimique.

La Figure 6.8 montre les intensités normalisées calculées $\tilde{I}_{ij} = \frac{A_{ij}}{\sum_m A_{im}} \tilde{I}_i$ des transitions rovibrationnelles $v = 1 \rightarrow 0$, $J \rightarrow J + 1$ de CH^+ en considérant à la fois le pompage chimique direct et indirect (voir Équation (6.9)) dans la PDR et dans le disque. Le modèle de pompage chimique montre un bon accord avec les observations, sauf pour les niveaux $v = 1$ $J = 0, 1$ dans la PDR, qui pourraient être excités par d'autres processus, que nous discuterons dans la section suivante. Dans tous les cas, le modèle de pompage chimique peut reproduire la différence de température d'excitation dans d203-506 et dans la PDR. En effet, la Figure montre un maximum dans les intensités de CH^+ pour des nombres de rotation entre $J = 5 - 10$ dans la PDR contre $J = 2 - 7$ dans le disque. Ceci explique la température plus élevée détectée dans la PDR que dans le disque. Cette différence dans l'excitation rotationnelle reflète la différence dans les populations des niveaux de H_2 dans ces environnements. Dans d203-506, la température du gaz est plus élevée que dans la PDR, ce qui explique que les niveaux purement rotationnels très excités ($v = 0$ $J = 5 - 10$) sont plus peuplés proportionnellement aux autres niveaux dans le disque que dans la PDR. L'excitation de CH^+ dans le disque est donc dominée par les niveaux purement rotationnels de H_2 , suivant l'ETL ($J < 9$), alors que c'est moins le cas pour la PDR. En effet, H_2 $J < 9$ représente environ 18 % de l'excitation de CH^+ dans le $v = 1$ dans le disque contre moins de 2 % dans la PDR. Si les niveaux purement rotationnels excités par collisions sont plus peuplés, ils ont cependant des énergies plus faibles que les niveaux rotationnels et rovibrationnels pompés par FUV ($v = 0$ $J > 8$ et $v > 0$). Ils domineront donc l'excitation de CH^+ mais seront surtout capables d'exciter les niveaux inférieurs tels que $v = 1$ $J = 2 - 7$. Au contraire, dans la PDR, l'excitation sera dominée par les niveaux H_2 pompés par FUV qui ont des énergies plus élevées et seront capables d'exciter des niveaux plus élevés de CH^+ , tels que $J = 5 - 10$. Ainsi, la température d'excitation sera plus élevée que dans le disque. Ce résultat montre que CH^+ semble être excité par des niveaux de H_2 excités thermiquement dans les régions où la température du gaz est élevée et par des niveaux de H_2 pompés par FUV dans les régions fortement irradiées où la température est plus basse.

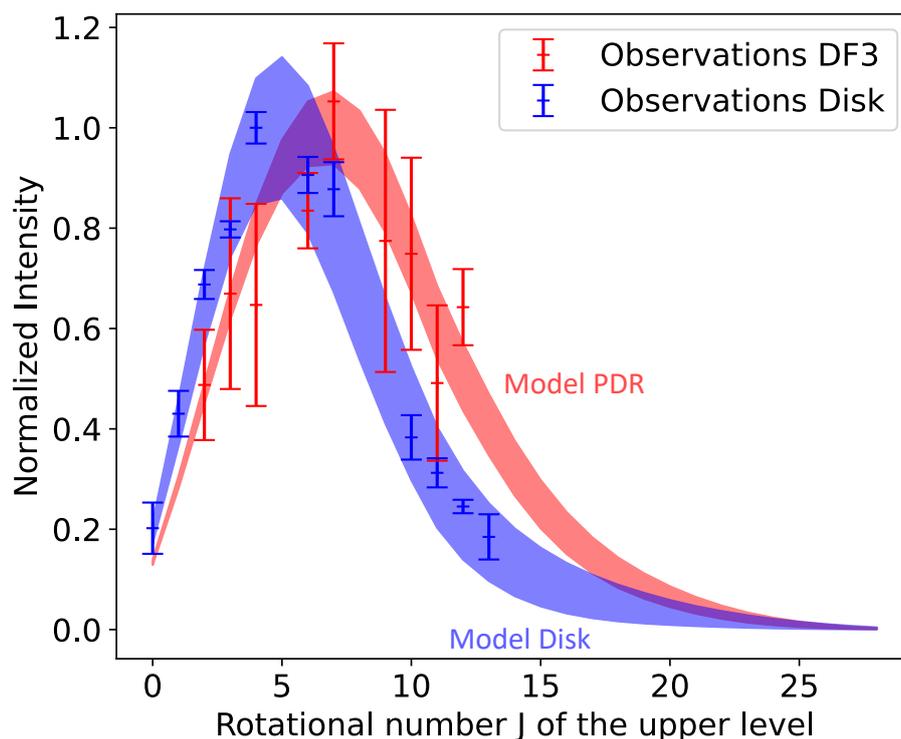


FIGURE 6.8 – Intensité normalisée \tilde{I}_{ij} des transitions rovibrationnelles de $\text{CH}^+ \nu = 1 \rightarrow 0$, $J \rightarrow J + 1$ après pompage chimique, compte tenu de la distribution de H_2 observée et de la température du gaz. La ligne rouge (resp. bleue) correspond aux intensités de CH^+ dans la PDR (resp. dans le disque). Les zones ombrées indiquent l'intervalle entre les limites supérieures et inférieures telles qu'elles ont été déterminées dans la Section 6.4.2.2. Les croix rouges (resp. bleues) correspondent aux intensités normalisées des transitions de CH^+ observées dans la PDR (resp. le disque).

En plus de bien reproduire l'émission du niveau $\nu = 1$, la Figure 6.9 montre que le modèle de pompage chimique peut attester de l'émission des niveaux $\nu = 2$ détectés par NIRSspec dans le disque, car il peut reproduire correctement le rapport observé entre $\nu = 1$ et $\nu = 2$. On constate que le pompage chimique est également compatible avec l'émission $\nu = 0$ détectée dans la PDR avec *Herschel/HIFI* et *Herschel/PACS* (Parikka et al. 2017; Joblin et al. 2018). En effet, le modèle de pompage chimique qui reproduit $\nu = 1$ et $\nu = 2$ ne surestime pas l'émission attendue en $\nu = 0$. Tout d'abord, le fait que les intensités de $\nu = 0$ soient trop élevées pourrait s'expliquer par l'incertitude sur le facteur de dilution du faisceau qui pourrait sous-estimer la taille physique de la région émettrice de CH^+ . Ensuite, l'émission observée de CH^+ pour le niveau $\nu = 0$ $J = 6$ peut être expliquée par le pompage chimique. Les niveaux J inférieurs semblent être plus peuplés que ce qui est prédit avec le pompage chimique, soulignant l'importance des collisions inélastiques dans l'excitation de ces niveaux. Ce résultat est en accord avec Godard & Cernicharo (2013) qui a montré que, dans la Barre d'Orion, si les transitions à haut J sont principalement pilotées par le pompage chimique, les collisions inélastiques sont nécessaires pour reproduire toutes les raies détectées dans l'infrarouge lointain. En effet, dans la Table 4 de Godard & Cernicharo (2013), ils montrent que les collisions représentent jusqu'à 80 % de l'excitation de $J = 1$ et

40 % de l'excitation de $J = 6$.

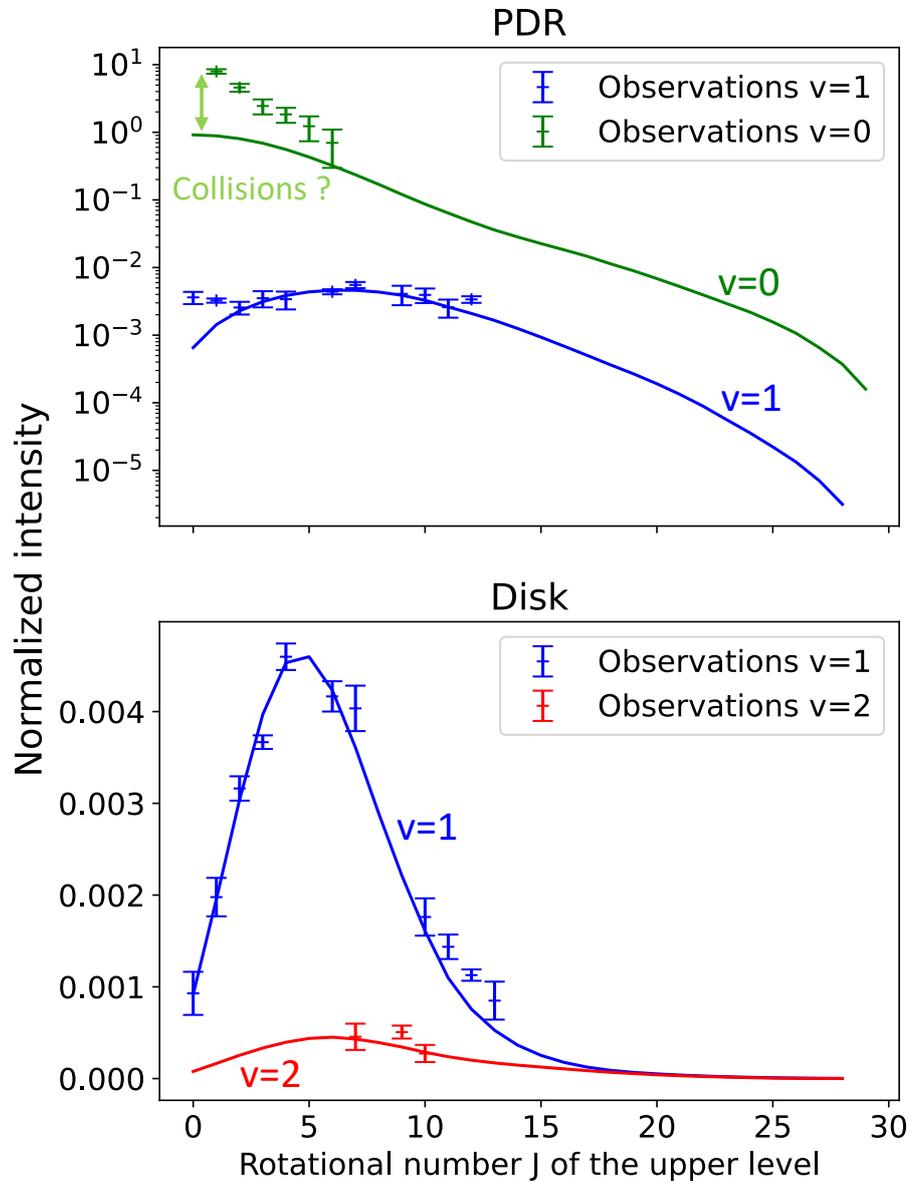


FIGURE 6.9 – Intensité normalisée \tilde{I}_{ij} de CH^+ de $\nu = 0 \rightarrow 0, J \rightarrow J - 1$ (vert), $\nu = 1 \rightarrow 0, J \rightarrow J + 1$ (bleu), $\nu = 2 \rightarrow 1, J \rightarrow J + 1$ (rouge) après pompage chimique en considérant les populations des niveaux de H_2 et la température observées dans la PDR et dans le disque. Les émissions des niveaux $\nu = 1$ et $\nu = 2$ sont observées avec NIRSpc. Les émissions des niveaux $\nu = 0$ sont observées avec *Herschel*/PACS et *Herschel*/HIFI en considérant que l'émission provient d'un filament de $2''$ de large (Joblin et al. 2018).

6.5 Discussion

6.5.1 Diagnostics sur la chimie et les conditions physiques

6.5.1.1 Estimation du taux de formation de CH^+ par $\text{C}^+ + \text{H}_2^*$

En suivant le formalisme de Zannese et al. (2024) utilisé pour l'excitation par pompage chimique de OH, nous pouvons estimer un taux de formation de CH^+ à partir des intensités mesurées dans les observations et du modèle de pompage chimique. Nous supposons ici que, dans les deux environnements, l'impact du pompage radiatif et des collisions inélastiques est négligeable. De plus, les raies rovibrationnelles sont optiquement minces. Par conséquent, les intensités I_{ij} sont simplement proportionnelles à R , le taux de formation de CH^+ comme décrit dans l'Équation (6.7). Le taux de formation peut donc être calculé comme suit :

$$R = \frac{4\pi I_{ij}}{h\nu_{ij} \tilde{I}_{ij}} \quad (6.10)$$

À partir des intensités observées et de la distribution de la population de CH^+ , nous obtenons $R = (2,6 - 5,1) \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ dans la PDR et $R = (1,5 - 4,3) \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ dans le disque. Le taux de formation de CH^+ est environ 7 fois plus élevé dans le disque que dans la PDR. Un bref résumé des résultats importants de notre étude est présenté dans la Table 6.1.

6.5.1.2 Estimation de la densité du gaz

Zannese et al. (2024) ont montré que les modèles de pompage chimique de $\text{O} + \text{H}_2$ peuvent être utilisés pour estimer la densité locale. Ici, nous suivons ce formalisme en raison de la similarité des processus ($\text{O} + \text{H}_2$ vs $\text{C}^+ + \text{H}_2$). Ainsi, le taux de formation, intégré sur la ligne de visée, de CH^+ via $\text{C}^+ + \text{H}_2$ correspond à :

$$R \equiv \int_z \sum_i \sum_j k_{j \rightarrow i}(T) x_j(\text{H}_2) n_{\text{H}_2} n_{\text{C}^+} dz = \int_z k n_{\text{H}_2} n_{\text{C}^+} dz. \quad (6.11)$$

où n_{C^+} et n_{H_2} sont les densités de carbone ionisé et d'hydrogène moléculaire, $x_j(\text{H}_2)$ est la population des niveaux de H_2 normalisée par rapport à la population totale, et $k_{j \rightarrow i}$ est le coefficient de vitesse d'état à état de la réaction ($[\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}]$).

Dans l'hypothèse d'un milieu homogène, la densité locale peut être estimée à partir de la valeur déduite de R et de l'Équation (6.11) comme suit :

$$n_{\text{H}} = \frac{R}{kN(\text{H}_2)x(\text{C}^+)}, \quad (6.12)$$

où $k(T, x_j(\text{H}_2))$ est le coefficient de vitesse de la réaction, $N(\text{H}_2)$ est la densité de colonne de H_2 , $x(\text{C}^+)$ est l'abondance du carbone ionisé, et n_{H} est la densité totale de noyaux d'hydrogène.

Dans les deux environnements, l'abondance du carbone ionisé peut être estimée à $x(\text{C}^+) \simeq 1,4 \times 10^{-4}$ (Sofia et al. 1997). Dans d203-506, nous calculons la densité de colonne de H_2 excité qui est égale à $N(\text{H}_2) = 8,7 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ et la température qui est égale à $T \simeq 850 \text{ K}$ (Berné et al. 2023). On en déduit le coefficient de réaction $k = (2,5 - 2,6) \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ à partir des données de Zanchet et al. (2013); Faure et al. (2017); Neufeld et al. (2021). En utilisant l'estimation de $R = (1,5 - 4,3) \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ à partir des raies de CH^+ dans le proche IR, nous dérivons $n_{\text{H}} = (0,5 - 1,4) \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$. Il est intéressant de noter que la densité dérivée de ce diagnostic donne une valeur similaire à celle du diagnostic réalisé par Zannese et al. (2024) avec le pompage chimique pour la molécule OH via $\text{O} + \text{H}_2$. Ceci est également en accord avec l'estimation faite par Berné et al. (2024) à partir d'une approche différente utilisant les raies de H_2 et le code PDR de Meudon (Le Petit et al. 2006).

De même, dans la PDR, la densité de colonne de H_2 excité est $N(\text{H}_2) = 1,6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ et la température est égale à $T \simeq 570 \text{ K}$ dérivées à partir des raies rotationnelles (Van De Putte et al. 2024, Sidhu et al en préparation). À partir de l'estimation de la température et de l'excitation de H_2 , nous déduisons le coefficient de réaction $k = (2,1 - 2,2) \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. En utilisant l'estimation de $R = (2,6 - 5,1) \times 10^{10} \text{ cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$ à partir des raies de CH^+ dans le proche infrarouge, nous obtenons $n_{\text{H}} = (0,5 - 1,1) \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Cette valeur conduit à une pression thermique pour le front de dissociation d'environ $P_{\text{gaz}} \simeq 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$.

Cette estimation de la densité est plus élevée que celle obtenue à partir de l'émission de H_2 ($P_{\text{gas}}/k_B \sim 5 \times 10^7 - 2 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$, Joblin et al. 2018; Van De Putte et al. 2024, Meshaka et al. en préparation, Sidhu et al. en préparation). Il est difficile d'affirmer si la pression thermique est constante sur tout le front de dissociation car la résolution spatiale n'est pas suffisante pour sonder réellement la variation de la densité et de la température. Ici, nous ne supposons qu'un modèle à une seule couche qui ne prend en compte aucune variation des conditions physiques. Nous avons montré précédemment que les raies de CH^+ sont plus sensibles à la densité que les raies de H_2 hautement excitées (voir Figure 6.4). Elles pourraient être plus influencées par la partie la plus dense du front et donc tracer une pression thermique plus élevée que celle dérivée de l'émission globale de H_2 (rotationnelle et rovibrationnelle). De plus, pour augmenter le rapport signal à bruit de la détection des raies de CH^+ , nous avons dérivé les intensités à partir d'une grande ouverture. Cela signifie que les populations des niveaux de H_2 sont également moyennées. En faisant la moyenne des populations des niveaux de H_2 , nous sous-estimons probablement la proportion de H_2 dans les états hautement excités par rapport aux états les plus faiblement excités à la position à laquelle CH^+ culmine. Sous-estimer ces niveaux conduit à surestimer la densité du gaz. En effet, comme ils ont plus d'énergie interne, ils sont plus réactifs et favorisent la formation de CH^+ dans les états excités. Nous pouvons utiliser des modèles pour estimer comment la densité peut être affectée par la moyenne des populations des niveaux de H_2 . Nous utilisons le modèle du code PDR de Meudon (Le Petit et al. 2006) reproduisant le mieux l'émission de H_2 à $P_{\text{gas}} = 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$ (Meshaka et al. en préparation). Nous avons calculé les populations des niveaux de H_2 , la densité de colonne de H_2 et la température au pic de la raie de H_2 1-0 S(1) et au pic de la raie de H_2 0-0 S(1). La valeur de $k \times N(\text{H}_2)$ au pic de H_2 1-0 S(1) est environ 5 fois plus grande qu'au pic de H_2 0-0 S(1). Il est intéressant de noter que ce facteur est similaire même dans un modèle à pression thermique plus élevée ($P_{\text{gas}}/k_B = 5 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$). Ainsi, en utilisant l'Équation (6.12), la densité dérivée peut être surestimée d'un facteur 5 selon les modèles. L'utilisation d'un modèle auto-cohérent, tel que

le code PDR de Meudon, incluant le pompage chimique de CH^+ , est nécessaire pour fournir des prédictions plus précises compte tenu de la forte variation des paramètres physiques. Il sera également utile de valider nos modèles à zéro dimension en les confrontant à des modèles PDR prenant en compte la profondeur du nuage. Toutefois, cette modélisation plus poussée dépasse le cadre de cette présente étude.

Diagnostic	Quantité	Valeur mesurée dans la PDR	Valeur mesurée dans d203-506
Raies de H_2	$N(\text{H}_2)^a$	$(1,6 \pm 0,1) \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$	$(8,7 \pm 0,8) \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$
	T^a	$566 \pm 7 \text{ K}$	$836 \pm 13 \text{ K}$
Raies de CH^+	$R(\text{C}^+ + \text{H}_2)^{b,c}$	$2,5 - 5,1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$	$1,5 - 5,3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$
	n_{H}^c	$0,5 - 1,1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$	$0,5 - 1,4 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$

TABLE 6.1 – Paramètres dérivés de l’analyse des raies de CH^+ et de H_2

Notes. ^(a) Les incertitudes de ces valeurs ne prennent pas en compte les effets de calibration. Elles pourraient être augmentées d’un facteur de 2 à 3 si l’incertitude associée aux effets de calibration est égale à 20 %. ^(b) Nombre de molécules de CH^+ formées par unité de surface et de temps (en $\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$). ^(c) La valeur inférée serait réduite si l’excitation collisionnelle inélastique jouait un rôle important.

6.5.2 Processus d’excitation alternatifs

Pour s’assurer que les raies observées ne sont excitées que par le pompage chimique, nous devons vérifier que d’autres processus d’excitation ne peuvent pas expliquer le spectre observé. De plus, les deux premières raies de CH^+ , $\nu = 1$ P(1) et P(2), détectées dans la PDR ne peuvent pas être expliquées par le modèle de pompage chimique (voir Figure 6.9).

6.5.2.1 Pompage IR

Si le pompage IR est pertinent pour exciter les niveaux observés, alors la température de brillance du rayonnement infrarouge T_{IR} autour de 3,5-4,5 μm doit être similaire à la température d’excitation vibrationnelle T_{vib} ,

$$T_{\text{IR}} = \frac{hc}{\lambda k_B} / \ln \left(1 + \frac{2hc}{I_\lambda \lambda c^2} \right) \quad (6.13)$$

où I_λ est l’intensité observée, corrigée de l’extinction à la longueur d’onde λ . Autour de 3,5-4,5 μm , $I_\lambda \sim 100 \text{ MJy sr}^{-1}$ dans le DF3 et $I_\lambda \sim 300 \text{ MJy sr}^{-1}$ dans d203-506. Ainsi, dans le DF3 et d203-506, $T_{\text{IR}} \sim 180 - 190 \text{ K}$.

En raison des différentes températures rotationnelles dans les niveaux $\nu = 0$ et $\nu = 1$ détectés dans le DF3, la température vibrationnelle, calculée à partir de l’Équation (6.4),

varie de $T_{\text{vib}} \sim 290$ K à $T_{\text{vib}} \sim 650$ K. Dans tous les cas, la température de brillance du rayonnement infrarouge ne peut pas expliquer l'excitation de tous les niveaux rotationnels dans le $\nu = 1$, même les deux premiers qui ne peuvent pas être expliqués par le pompage chimique.

Dans d203-506, nous ne pouvons pas mesurer la température de vibration entre $\nu = 0$ et $\nu = 1$ car il n'y a pas de données disponibles pour la détection des raies purement rotationnelles de CH^+ . Cependant, la température de vibration entre $\nu = 1$ et $\nu = 2$, qui est d'environ $T_{\text{vib}} \sim 1300$ K est également incompatible avec le pompage IR.

6.5.2.2 Collisions

Il est difficile d'exclure totalement les collisions comme processus d'excitation car les taux de collisions inélastiques entre $\nu = 1$ et $\nu = 0$ sont inconnus. En effet, seuls les taux de collisions de désexcitation des niveaux rotationnels ont été calculés pour les électrons (Hamilton et al. 2016), pour l'hydrogène atomique (Faure et al. 2017), pour l'hydrogène moléculaire (Hammami et al. 2008) et pour l'hélium (Hammami et al. 2009). Cependant, en utilisant l'extrapolation faite par Faure et al. (2017), on peut estimer le taux de collision d'excitation à $T = 1000$ K autour de $k_{\text{coll}}(1000 \text{ K}) \simeq 4 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ et à $T = 500$ K autour de $k_{\text{coll}}(500 \text{ K}) \simeq 2 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

Nous pouvons considérer que les collisions avec l'hydrogène atomique pour exciter le niveau $\nu = 1$ sont le processus dominant lorsque

$$k_{\text{coll}}x(\text{H})x(\text{CH}^+) > k_{\text{chem},\nu=1}x(\text{C}^+)x(\text{H}_2). \quad (6.14)$$

où $k_{\text{chem},\nu=1}$ est taux de formation de $\text{C}^+ + \text{H}_2$ conduisant à $\text{CH}^+(\nu = 1)$. A la transition H/H_2 , $x(\text{H}) \simeq x(\text{H}_2)$. L'équation (6.14) peut donc être réécrite comme suit :

$$\frac{x(\text{CH}^+)}{x(\text{C}^+)} > \frac{k_{\text{chem},\nu=1}}{k_{\text{coll}}}. \quad (6.15)$$

Ainsi, les collisions deviennent dominantes pour $x(\text{CH}^+)/x(\text{C}^+) > 3 \times 10^{-3}$ dans d203-506 et $x(\text{CH}^+)/x(\text{C}^+) > 7 \times 10^{-4}$ dans le DF3.

Selon les modèles photochimiques, $x(\text{CH}^+) \sim 3 \times 10^{-7}$ dans d203-506 (voir l'Extended Data Figure 7 de Berné et al. 2023). Ainsi, $x(\text{CH}^+)/x(\text{C}^+) \sim 2,5 \times 10^{-3}$ et les collisions ne sont pas dominantes. Au contraire, $x(\text{CH}^+) \sim 1,2 - 1,5 \times 10^{-7}$ dans le DF3 selon les modèles PDR autour de $P_{\text{gaz}} = 5 \times 10^7 - 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ et $G_0 = 10^4$. Ainsi, $x(\text{CH}^+)/x(\text{C}^+) \gtrsim 10^{-3}$ et les collisions ne peuvent être négligées dans la PDR. Ici, nous comprenons que le pompage chimique dépend plus de la température que les collisions. En suivant ce raisonnement, nous pouvons expliquer pourquoi les deux premières raies du niveau $\nu = 1$ dans le DF3 ne peuvent pas être reproduites par le modèle de pompage chimique alors qu'elles le peuvent dans d203-506.

L'excitation par collisions est plus efficace pour les niveaux avec $\Delta J = 1 - 2$ (Godard & Cernicharo 2013; Faure et al. 2017). Cela explique pourquoi les premiers niveaux de $\nu = 1$

sont plus impactés par les collisions que les niveaux supérieurs car les niveaux à faible J de l'état vibrationnel fondamental $\nu = 0$ de CH^+ sont plus peuplés.

Il est probable que dans d203-506, les niveaux rotationnels du CH^+ soient plus uniformément peuplés en raison de la température plus élevée du gaz. Ceci rendrait la population des niveaux $\nu = 1$ par collision plus distribuée dans les différents niveaux de rotation et donc moins visible que dans DF3.

Cependant, CH^+ est très réactif et peut être détruit très rapidement par réaction avec H_2 . Cette forte réactivité pourrait entraver l'efficacité de la collision inélastique en tant que processus d'excitation. Par conséquent, pour conclure correctement si les niveaux $\nu = 1$ $J = 0, 1$ détectés dans le DF3 peuvent être expliqués par des collisions, nous avons besoin des calculs des taux de collision du CH^+ .

6.5.3 Discussion sur la chimie en phase gazeuse

6.5.3.1 Impact de la destruction des grains de carbone

Tout au long de cette étude, nous avons démontré que le CH^+ est formé et excité par $\text{C}^+ + \text{H}_2$. En effet, la corrélation spatiale entre H_2 et CH^+ et la comparaison entre les intensités observées et les modèles de pompage chimique montrent que dans la PDR et d203-506, les observations peuvent être expliquées par la voie de formation en phase gazeuse.

Cette conclusion est plus difficile à faire pour CH_3^+ . À l'heure actuelle, il n'existe pas de données théoriques ou expérimentales sur la réaction $\text{CH}_2^+ + \text{H}_2$ état à état. CH_3^+ est un système à quatre atomes, ce qui complique la modélisation de tels processus en raison du nombre accru de canaux de sortie. Cependant, plusieurs aspects des observations sont frappants. CH_3^+ est détecté à la même position que H_2 et CH^+ . De plus, dans la PDR, sa température d'excitation est plus élevée que la température du gaz et plus élevée que la température d'excitation estimée dans d203-506, comme pour CH^+ . De plus, si CH^+ est formé en phase gazeuse, CH_3^+ doit être un produit dominant de la réaction en chaîne de l'Équation (6.2) car les réactions de $\text{CH}^+ + \text{H}_2$ et $\text{CH}_2^+ + \text{H}_2$ sont exothermiques pour tous les $\text{H}_2(\nu, J)$ contrairement à $\text{C}^+ + \text{H}_2$.

De plus, les études montrant que la photodestruction des PAH pourrait conduire à de petits hydrocarbures, comme Pety et al. (2005), ne mentionnent pas la possibilité de produire des hydrocarbures fortement hydrogénés comme CH_3^+ . Elles révèlent la formation d'hydrocarbures avec de petites chaînes de carbone mais contenant au moins deux carbones.

Enfin, il est difficile de concevoir que le CH_3^+ puisse être produit avec une telle température d'excitation dans la PDR par la photodestruction de petits grains. De plus, à ce jour, il n'y a toujours pas de détection des espèces non polaires CH_4 et C_2H_2 dans la barre d'Orion qui devraient être les principaux produits de la photodestruction des PAHs.

Tous ces résultats sont en faveur de l'hypothèse que CH_3^+ est formé et excité en phase gazeuse (voir Eq. (6.2)). Les coefficients de vitesse état par état du pompage chimique du CH_3^+ par la réaction $\text{CH}_2^+ + \text{H}_2$ sont essentiels pour conclure correctement cette question.

6.5.3.2 Recherche de CH_2^+

Dans la voie de la phase gazeuse, nous détectons donc deux intermédiaires cruciaux : CH^+ et CH_3^+ . En supposant que cette voie forme principalement CH_3^+ (voir Équation (6.2)), la question se pose : qu’advient-il de CH_2^+ , l’étape intermédiaire entre le CH^+ et le CH_3^+ ? CH_2^+ possède trois modes vibrationnels, le mode d’étirement symétrique (ν_1), le mode de flexion (ν_2), et le mode d’étirement asymétrique (ν_3) et leurs fondamentaux correspondants dans son état fondamental électronique sont situés autour de $\sim 3,47 \mu\text{m}$ ($2883,0 \text{ cm}^{-1}$) (Kraemer et al. 1994), $\sim 10,05 \mu\text{m}$ ($995,5 \text{ cm}^{-1}$) (Kraemer et al. 1994), et $\sim 3,19 \mu\text{m}$ ($3131,4 \text{ cm}^{-1}$) (Rösslein et al. 1992), respectivement. En suivant la logique qui sous-tend la détection de CH^+ et de CH_3^+ , on s’attendrait à ce que la détection de CH_2^+ soit basée sur l’émission de ν_2 autour de $10 \mu\text{m}$. Les données expérimentales existantes dans la littérature ne permettent pas de modéliser actuellement un spectre d’émission en phase gazeuse à haute résolution pour cette transition en raison du manque d’informations spectroscopiques sur les constantes de rotation de l’état vibrationnel $\nu_2 = 1$. Seules les constantes de rotation de l’état fondamental sont bien caractérisées (Rösslein et al. 1992; Willitsch & Merkt 2003; Gottfried & Oka 2004). La bande fondamentale de ce mode a fait l’objet d’études théoriques (Osman et al. 1997) et expérimentales (Bunker et al. 2001). Ces résultats contraignent la recherche de la signature de l’émission de CH_2^+ entre 9 et $11 \mu\text{m}$, une région où il n’y a plus de bandes observées non assignées dans les spectres JWST de la Barre d’Orion et de d203-506 (voir Figure 6.10). Cela soulève la question intrigante de savoir pourquoi CH^+ et CH_3^+ peuvent être détectés par leurs signatures d’émission dans l’infrarouge proche et moyen alors que CH_2^+ ne le peut pas, bien que les modèles astrochimiques prévoient des abondances comparables pour CH_2^+ et CH_3^+ (voir l’*Extended Data Figure 7* de Berné et al. 2023).

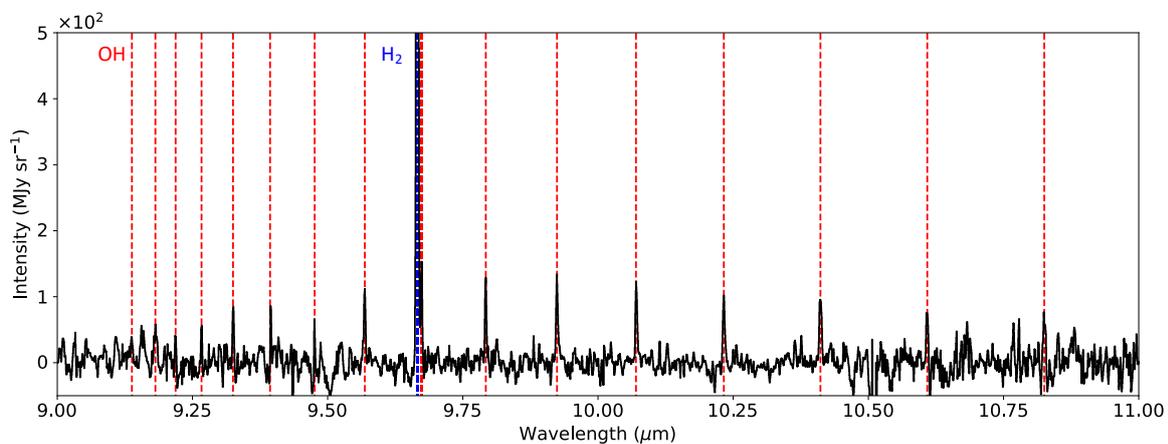


FIGURE 6.10 – Spectre soustrait du continuum et de la position OFF du disque d203-506 entre 9 et $11 \mu\text{m}$ avec les raies identifiées.

Une meilleure compréhension des propriétés spectroscopiques de CH_2^+ est nécessaire pour évaluer la compatibilité de cette non-détection avec les prédictions actuelles des modèles astrochimiques. La première étape pour répondre à cette question consiste à décrire les forts couplages vibroniques connus pour être présents dans les modes de flexion de CH_2^+ et donnant lieu à un riche ensemble de transitions potentielles (voir Figure 6.11) et à évaluer la distribution de la population de CH_2^+ dans la structure des niveaux d’énergie pendant

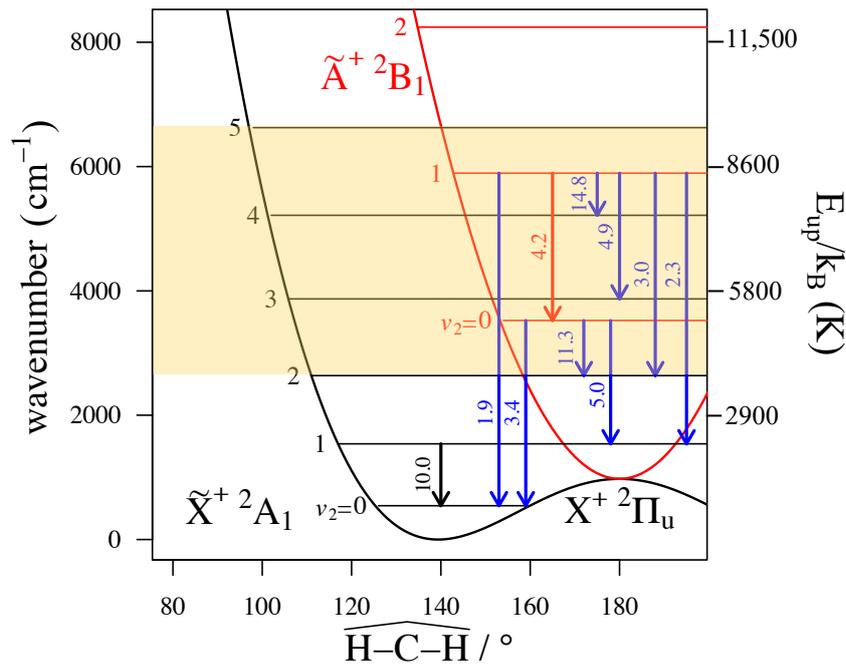


FIGURE 6.11 – Diagramme des niveaux énergétiques des niveaux de flexion dans les deux états électroniques les plus bas de CH_2^+ , en fonction de l'angle de la liaison HCH en degrés, sans prendre en compte l'excitation dans l'un ou l'autre des modes d'étirement. Ces deux états électroniques sont fortement couplés par l'effet Renner-Teller. Les transitions vibrationnelles (en noir pour l'état fondamental \tilde{X} , en rouge pour l'état \tilde{A}) et vibroniques (en bleu) autorisées sont représentées. Les courbes des positions des niveaux potentiels et vibrationnels sont adaptées de Coudert et al. (2018) et Jensen et al. (1995). Pour chaque transition, la position dans laquelle ils tomberont est notée en μm . Le rectangle superposé en jaune représente les énergies des niveaux supérieurs des transitions de CH^+ détectées.

le processus de sa formation à partir de l'addition de H_2 au CH^+ . En l'absence d'informations spécifiques sur la distribution des états de CH_2^+ dans la Barre d'Orion, la formation de CH_2^+ dans son premier état électronique excité (\tilde{A}^+) doit également être considérée. CH_2^+ pourrait émettre des vibrations à partir de son mode vibrationnel le moins énergétique ($\nu_2 = 1 \rightarrow \nu_2 = 0$ dans \tilde{A}^+), qui devrait être situé autour de $\sim 4 \mu\text{m}$ ($2\,500 \text{ cm}^{-1}$). Alternativement, il pourrait se relaxer jusqu'à son état électronique fondamental (\tilde{X}^+) par émission vibronique. Si l'on estime que seuls les premiers niveaux vibrationnels de l'état \tilde{A}^+ sont peuplés sur la base des températures de CH^+ et de CH_3^+ dans la Barre d'Orion (estimées entre environ 700 et 1 500 K), les transitions d'émission les plus fortes se feront vers les niveaux vibrationnels excités de \tilde{X}^+ . Les caractéristiques d'émission de CH_2^+ pourraient donc provenir des $\nu_2 = 0$ et $\nu_2 = 1$ de l'état électronique \tilde{A}^+ vers les ν_2 niveaux de flexion de l'état électronique \tilde{X}^+ . Les plages attendues pour ces transitions sont indiquées dans la Figure 6.11. Les émissions vibroniques typiques présentent une plus grande probabilité que les émissions vibrationnelles, ce qui pourrait expliquer le caractère insaisissable de CH_2^+ car ses signatures spectroscopiques pourraient être dispersées, diluées et contribuer à d'autres régions spectrales du spectre JWST. Le spectre d'émission de CH_2^+ dans l'environnement

chaud de la Barre d'Orion et du disque pourrait en fait être situé dans l'infrarouge proche, en particulier si CH_2^+ est produit dans des états vibrationnels supérieurs à $\nu_2 = 1$ dans l'état électronique \tilde{A}^+ . Des recherches plus approfondies sur les voies de formation de CH_2^+ et sur le degré d'excitation sont donc nécessaires.

6.6 Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié l'émission rovibrationnelle de CH^+ et CH_3^+ dans la Barre d'Orion et établi des contraintes sur leur voie de formation et leur excitation. Nous avons également exploré le potentiel de l'émission de CH^+ dans le proche infrarouge comme diagnostic pour l'étude des PDRs et des disques interstellaires.

Les principales conclusions de cette étude peuvent être résumées comme suit :

1. Les émissions de CH^+ , CH_3^+ et H_2 excités proviennent des mêmes régions. Ils tracent tous une fine couche à la transition H^0/H_2 où l'émission des niveaux de H_2 pompés par FUV atteint également son maximum.
2. L'émission de CH^+ et de CH_3^+ dépend fortement de la densité locale. Comme l'excitation de CH^+ suit un processus non-thermique, un diagnostic simple permet d'accéder à la densité du gaz à la transition H/H_2 . Ce diagnostic donne une estimation de $n_{\text{H}} \approx 10^7 \text{ cm}^{-3}$ dans d203-506 et $n_{\text{H}} \approx 10^6 \text{ cm}^{-3}$ dans la PDR. Cette dernière pourrait être surestimée en raison de l'utilisation d'une grande ouverture pour dériver les intensités des raies.
3. CH^+ et CH_3^+ ont tous deux une température d'excitation plus élevée dans la PDR que la température du gaz ($T_{\text{ex}}(\text{PDR}) \sim 1\,500 \text{ K} > T_{\text{gaz}}(\text{PDR}) \sim 600 \text{ K}$). En outre, la température d'excitation est plus élevée dans la PDR que dans le disque d203-506, même si la température du gaz dans le disque est plus élevée ($T_{\text{ex}}(\text{d203-506}) \sim 800 \text{ K} \sim T_{\text{gaz}}(\text{d203-506}) \sim 900 \text{ K}$).
4. L'étude des densités de colonne observées de CH^+ et CH_3^+ dans leurs états rovibrationnels montre que l'émission observée ne trace qu'une petite fraction de l'abondance totale de ces molécules, moins de 0,1 % dans la PDR. En effet, pour les deux molécules, la densité de colonne dérivée des raies rovibrationnelles est d'environ $N(\text{CH}^+/\text{CH}_3^+) \sim 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, alors que les densités de colonne totales attendues sont d'environ $N(\text{CH}^+/\text{CH}_3^+) \sim 10^{14} \text{ cm}^{-2}$.
5. L'excitation de CH^+ et probablement de CH_3^+ peut être expliquée par un pompage chimique avec du H_2 excité. Ceci est en faveur d'une voie de formation en phase gazeuse suivant $\text{C}^+ \xrightarrow{\text{H}_2} \text{CH}^+ \xrightarrow{\text{H}_2} \text{CH}_2^+ \xrightarrow{\text{H}_2} \text{CH}_3^+$.
6. L'étude approfondie du mécanisme de pompage chimique a montré que dans les régions où la température est élevée (comme le disque), l'excitation de CH^+ est principalement due aux niveaux rotationnels de H_2 qui sont peuplés par des collisions. En revanche, dans les régions où la température n'est pas aussi élevée mais où l'irradiation est forte (comme la PDR), l'excitation est principalement due à des niveaux de H_2 pompés par FUV.

7. Les modèles de pompage chimique peuvent être utilisés pour déterminer le taux de formation de CH^+ dans la Barre d'Orion et dans d203-506.
8. Les tentatives de détection de CH_2^+ , l'intermédiaire entre CH^+ et CH_3^+ , ont été infructueuses. Cependant, la complexité de la spectroscopie de CH_2^+ pourrait expliquer la non-détection de ce cation, même s'il a des abondances similaires à celles de CH^+ et de CH_3^+ .

En conclusion, notre étude a dévoilé la formation et l'excitation en phase gazeuse des espèces carbonées. Cependant, elle a également révélé le besoin de données moléculaires pour pouvoir comprendre correctement les observations du JWST. Alors que le pompage chimique est bien étudié pour CH^+ , les coefficients de réaction d'état à état ne sont pas disponibles pour CH_3^+ . Ils sont pourtant essentiels pour comprendre le processus de formation et d'excitation de cette molécule.

Comparaison aux études des Chapitres 4 et 5

Les résultats présentés dans ce Chapitre présentent de nombreuses similitudes à ceux présentés dans le Chapitre 5. Tout d'abord, tout comme OH, nous remarquons une corrélation spatiale entre l'émission de H_2 et de CH^+ dans d203-506 et dans la PDR. De plus, l'excitation de CH^+ dans d203-506 est particulièrement similaire à l'excitation rovibrationnelle de OH détectée dans l'infrarouge proche dans ce même objet. Ces similitudes s'expliquent par le fait que ces deux molécules sont excitées par pompage chimique et que leur formation et excitation dépend fortement de l'excitation de H_2 . L'estimation de la densité de d203-506 calculée grâce au pompage chimique de CH^+ est similaire à celle réalisée avec le pompage chimique de OH dans le Chapitre 5. Cet accord permet de montrer la robustesse du diagnostic développé dans ces études. L'estimation de la densité dans la Barre d'Orion donnant une valeur d'un ordre de grandeur plus bas que d203-506 permet d'expliquer la non-détection de l'émission prompte de OH dans la Barre présentée dans le Chapitre 5. En effet, le Chapitre 4 a mis en évidence le fait que l'émission prompte dépend fortement de la pression thermique du gaz. Ainsi, la Barre d'Orion n'est en effet pas suffisamment chaude et dense pour permettre la détection de l'émission prompte par le JWST.

6.A Annexes

6.A.1 Intensité des raies de CH^+ dans la PDR et dans d203-506

λ (μm)	Raie	E_{up}/k_B (K)	Intensités - DF3 ($\times 10^{-6}$ $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{sr}^{-1}$)	Intensités - DF3 (corrigées de l'extinction) ($\times 10^{-6}$ $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{sr}^{-1}$)	Intensité - Disque ($\times 10^{-5}$ $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{sr}^{-1}$)
$v = 1 \rightarrow 0$					
3,549	R(3)	4 328	$1,51 \pm 0,49$	$2,03 \pm 0,94$	$1,14 \pm 0,26$
3,581	R(2)	4 174	$1,97 \pm 0,88$	$2,65 \pm 0,67$	$0,71 \pm 0,26$
3,615	R(1)	4 058	$0,59 \pm 0,19$	$0,79 \pm 0,40$	$1,27 \pm 0,28$
3,688	P(1)	3 942	$4,34 \pm 0,89$	$5,76 \pm 0,13$	$1,09 \pm 0,28$
3,727	P(2)	3 980	$3,87 \pm 0,28$	$5,12 \pm 0,40$	$2,30 \pm 0,25$
3,769	P(3)	4 058	$3,03 \pm 0,65$	$4,00 \pm 0,85$	$3,64 \pm 0,16$
3,813	P(4)	4 174	$4,13 \pm 1,11$	$5,42 \pm 1,46$	$4,17 \pm 0,09$
3,859	P(5)	4 328	$3,96 \pm 1,17$	$5,17 \pm 1,53$	$5,16 \pm 0,17$
3,959	P(7)	4 751	$5,02 \pm 0,43$	$6,51 \pm 0,55$	$4,56 \pm 0,19$
4,013	P(8)	5 019	$6,28 \pm 0,66$	$8,10 \pm 0,84$	$4,36 \pm 0,27$
4,128	P(10)	5 324	$4,53 \pm 1,85$	$5,79 \pm 1,66$	/
4,190	P(11)	6 046	$4,33 \pm 1,05$	$5,52 \pm 1,34$	$1,82 \pm 0,22$
4,255	P(12)	6 461	$2,81 \pm 0,84$	$3,56 \pm 1,06$	$1,46 \pm 0,14$
4,323	P(13)	6 912	$3,63 \pm 0,41$	$4,59 \pm 0,51$	$1,13 \pm 0,07$
4,394	P(14)	7 398	/	/	$0,84 \pm 0,21$
$v = 2 \rightarrow 1$					
3,570	R(7)	9 048	/	/	$1,12 \pm 0,84$
3,676	R(3)	8 088	/	/	$0,12 \pm 0,01$
3,707	R(2)	7 939	/	/	$0,38 \pm 0,06$
4,195	P(8)	8 754	/	/	$0,48 \pm 0,16$
4,318	P(10)	9 378	/	/	$0,50 \pm 0,08$
4,383	P(11)	9 743	/	/	$0,27 \pm 0,09$

TABLE 6.2 – Intensité des raies CH^+ détectées dans le DF3 et dans le disque. Les incertitudes sont calculées par la routine Python `curve_fit` comme des erreurs à 1σ sur les paramètres. L'impact des effets de calibration n'est pas pris en compte et les incertitudes associées peuvent atteindre 20 %.

6.A.2 Spectres observés de CH^+ et CH_3^+ dans la PDR et dans le disque

6.A.2.1 CH^+

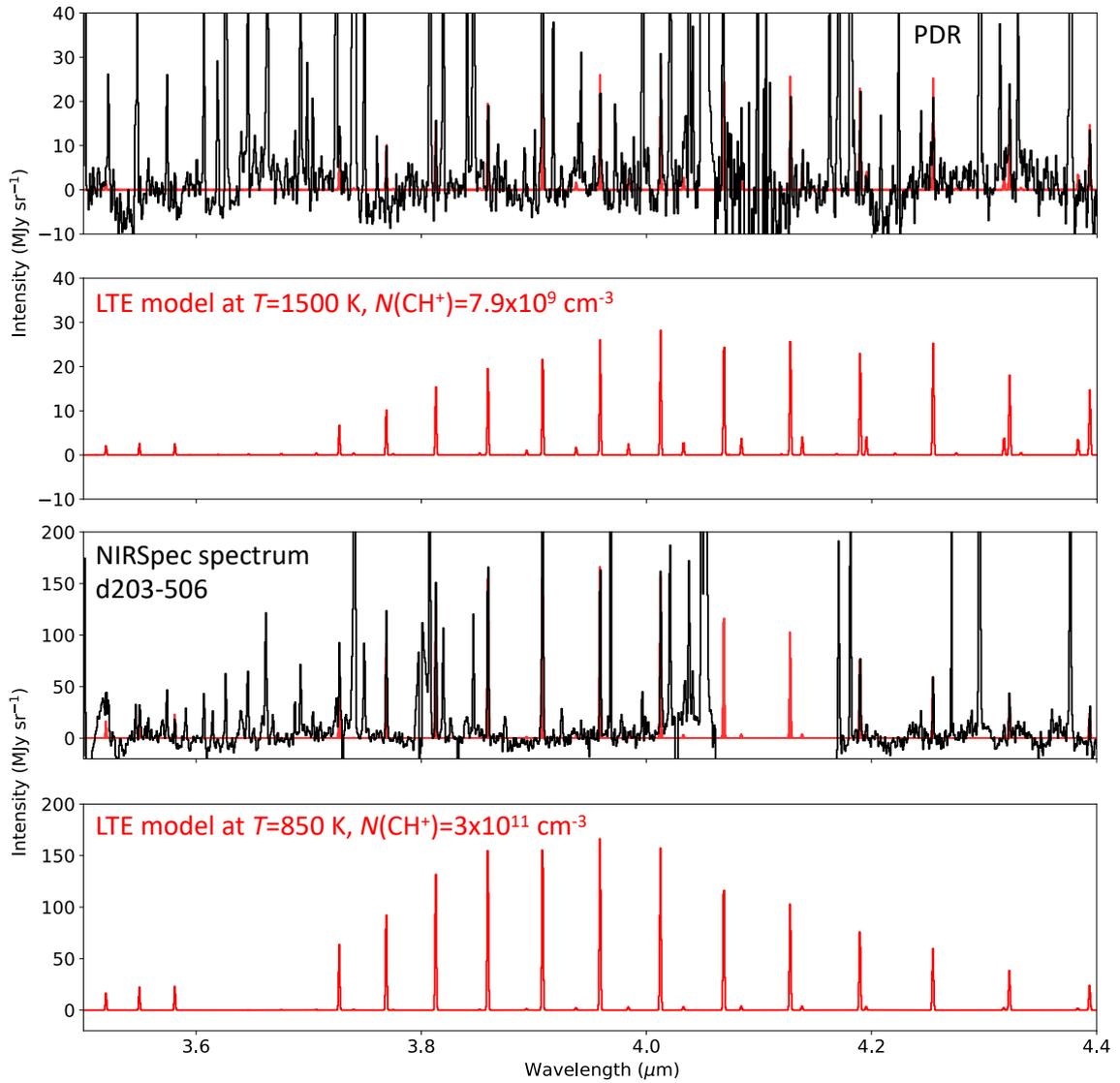


FIGURE 6.12 – (a) (Haut) Spectre de CH^+ soustrait du continuum dans le DF3. (Bas) Modèle ETL de CH^+ à $T = 1\,500\text{ K}$ et $N(\text{CH}^+) = 7,9 \times 10^9\text{ cm}^{-2}$. (b) (Haut) Spectre de CH^+ soustrait du continuum dans d203-506. (Bas) Modèle ETL de CH^+ à $T = 850\text{ K}$ et $N(\text{CH}^+) = 3 \times 10^{11}\text{ cm}^{-2}$.

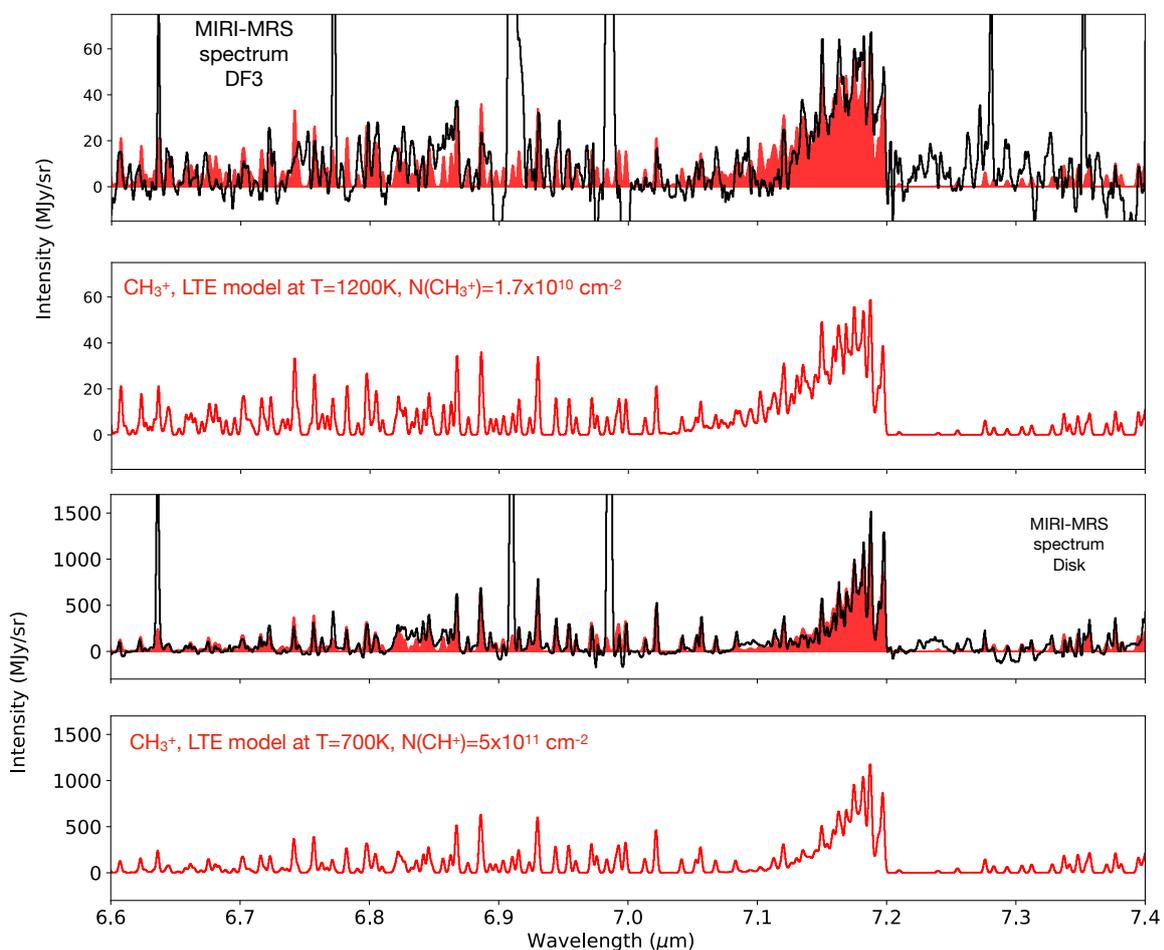
6.A.2.2 CH_3^+ 

FIGURE 6.13 – (a) (Haut) Spectre de CH_3^+ soustrait du continuum dans le DF3. (Bas) Modèle ETL de CH_3^+ à $T = 1\,200\text{ K}$ et $N(\text{CH}_3^+) = 1,7 \times 10^{10}\text{ cm}^{-2}$. (b) (Haut) Spectre de CH_3^+ soustrait du continuum dans d203-506. (Bas) Modèle ETL de CH_3^+ à $T = 700\text{ K}$ et $N(\text{CH}_3^+) = 5 \times 10^{11}\text{ cm}^{-2}$ (Berné et al. 2023; Changala et al. 2023).

6.A.3 Post-traitement des spectres du JWST

6.A.3.1 CH⁺

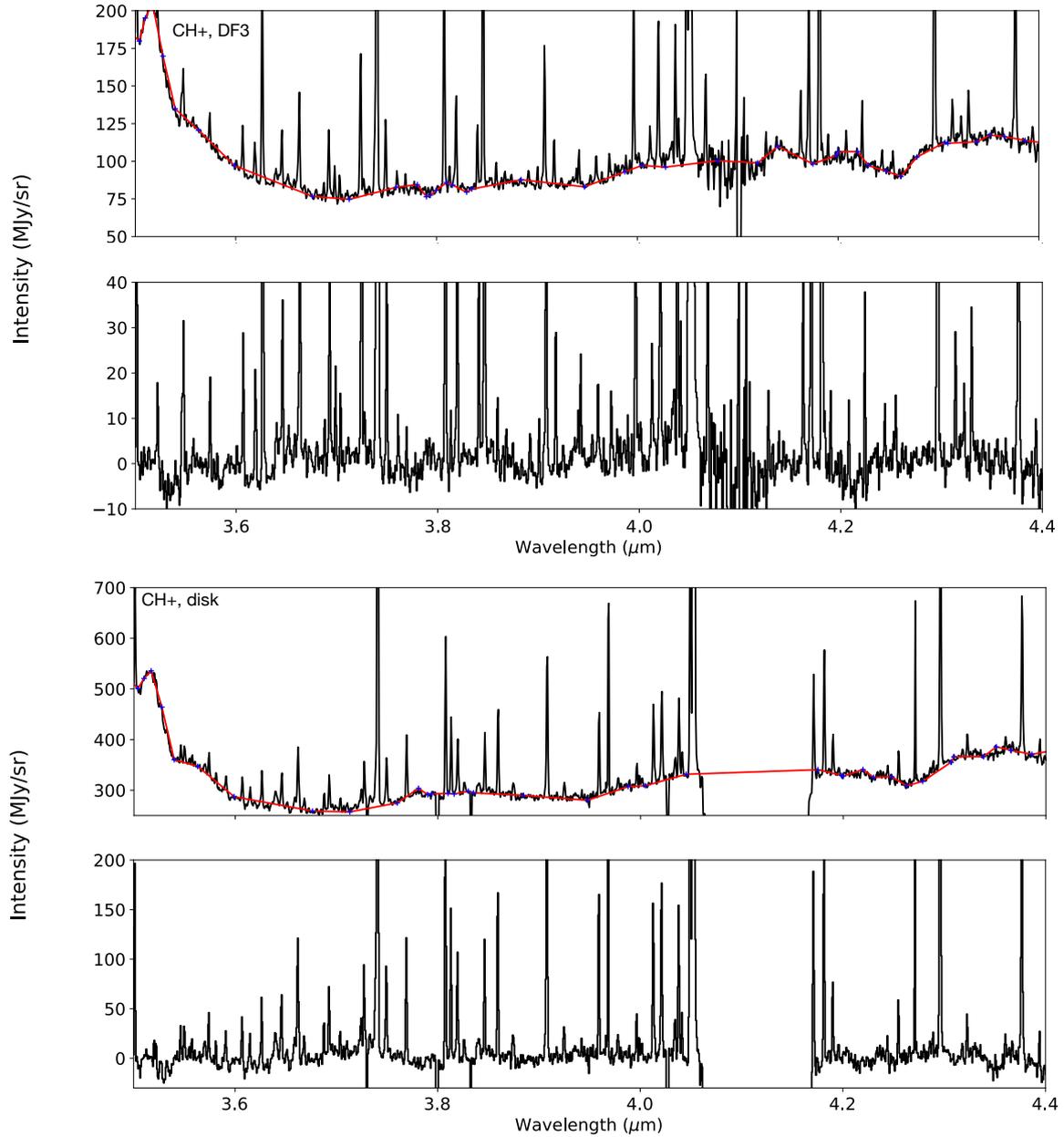


FIGURE 6.14 – Traitement du spectre NIRSpect. (Haut) DF3 : (Premier panneau) Spectre observé avec NIRSpect. La ligne rouge est le continuum estimé. (Deuxième panneau) Spectre soustrait du continuum. (Bas) d203-506 : (Troisième panneau) Spectre observé avec NIRSpect. La ligne rouge est le continuum estimé. (Quatrième panneau) Spectre soustrait du continuum.

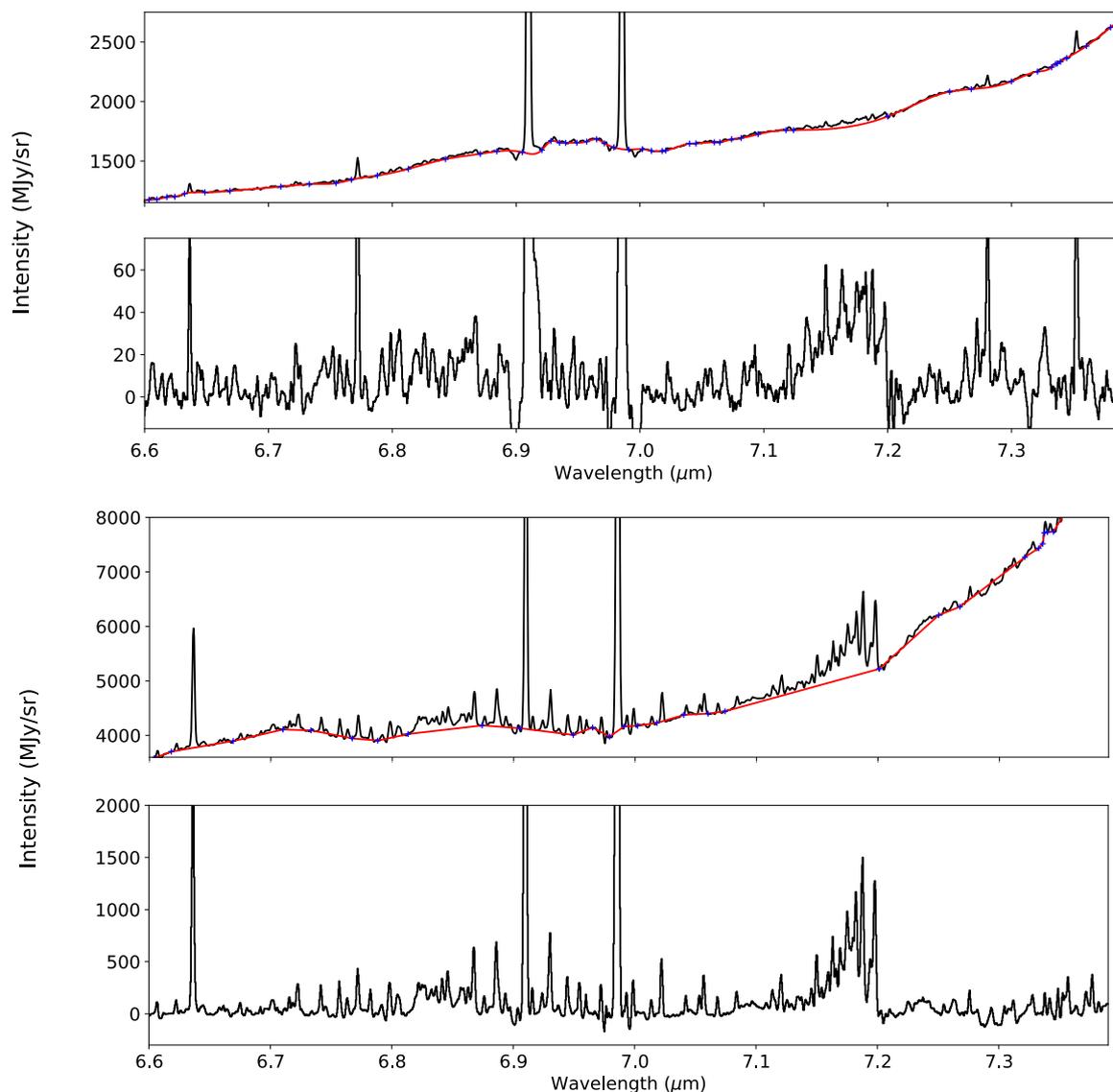
6.A.3.2 CH_3^+ 

FIGURE 6.15 – Traitement du spectre MIRI-MRS. (Haut) DF3 : (Premier panneau) Spectre observé avec MIRI-MRS. La ligne rouge est le continuum estimé. (Deuxième panneau) Spectre soustrait du continuum. (Bas) d203-506 : (Troisième panneau) Spectre observé avec MIRI-MRS. La ligne rouge est le continuum estimé. (Quatrième panneau) Spectre soustrait du continuum.

Conclusions et perspectives

Conclusions et perspectives

Comprendre l'origine de la Terre et de notre Système Solaire nécessite de remonter dans le temps et d'observer ce système à sa naissance. Pour cela, l'étude du milieu interstellaire où se forment les étoiles et les systèmes planétaires est primordiale. Ce milieu interstellaire est en constante interaction avec les étoiles qui, en échangeant de la matière et de l'énergie, affectent la structure physique et chimique de ce dernier. Au cours de cette thèse, je me suis alors intéressée à l'impact de la rétroaction radiative des étoiles massives sur la formation stellaire et planétaire, en étudiant les interfaces neutres chaudes et irradiées entre les milieux ionisés et moléculaires froids. Plus particulièrement, j'ai étudié comment l'excitation à la formation de certaines molécules permettaient de contraindre les paramètres physiques et chimiques de ces régions. Pour ce faire, j'ai couplé un travail de modélisation détaillée du gaz, en utilisant des données de dynamique quantique, avec l'analyse des observations du *James Webb Space Telescope*. Le JWST, observant dans l'infrarouge proche et moyen, apporte un tout nouveau regard sur les conditions physiques et la chimie des régions chaudes. En effet, si *Herschel* permettait d'observer l'émission du gaz et de la poussière froids/tièdes, le JWST permet l'accès à l'émission de la matière chaude et excitée. Grâce à sa grande sensibilité et résolution spatiale, il peut, comparé à *Spitzer* ou *ISO*, détecter des objets très faibles et à petites échelles. Il permet également la détection de l'émission de raies très peu brillantes localisées sur de très faibles échelles spatiales (1") à l'interface entre le gaz ionisé et le gaz moléculaire. Il permet alors un accès inédit à la chimie et à la microphysique des sous-structures des régions de photodissociation (front d'ionisation, front de dissociation...) et des régions chaudes des disques protoplanétaires (les régions internes irradiées par l'étoile centrale ou les vents photoévaporés dans le cas des disques irradiés par des étoiles massives). L'étude de ces interfaces chaudes est essentielle pour comprendre l'évolution physico-chimique de la matière du nuage, dans la phase protostellaire et dans les disques protoplanétaires. La compréhension de cette évolution est un sujet phare de l'astronomie moderne pour établir un lien avec la matière dans le Système Solaire.

Mon étude des molécules très excitées à la formation a permis de révéler une chimie particulièrement active dans les régions chaudes et irradiées. Dans la Barre d'Orion et le disque protoplanétaire d203-506 présent dans la ligne de visée des observations, nous détectons l'émission de OH, CH⁺ et CH₃⁺. Chacune de ces molécules est excitée dans ces régions par des processus d'excitation à la formation nous permettant de contraindre la chimie en action.

En effet, l'émission de OH, détectée dans l'infrarouge moyen, permet de révéler la photodissociation de l'eau (voir Chapitre 5). Cette émission suivant ce processus est alors appelée émission prompte. L'émission de OH et CH⁺, dans l'infrarouge proche (et potentiellement celle de CH₃⁺ dans l'infrarouge moyen) trace la formation et l'excitation de ces espèces par pompage chimique via des réactions avec H₂ : X + H₂ → XH + H (voir Chapitres 5 et 6). Ainsi, la détection de ces molécules à travers ces raies d'émission provenant d'excitation à la formation, nous permet de contraindre les réactions de formation et de destruction de ces espèces (H₂O, OH, CH⁺, CH₃⁺) et permet de tester les modèles photochimiques déjà existants. Nous montrons alors un cycle de formation et de destruction de l'eau très actif dans le disque protoplanétaire d203-506 ($O \xrightleftharpoons[UV]{H_2} OH \xrightleftharpoons[UV]{H_2} H_2O$) ainsi que le début de la chaîne de la chimie du carbone (C⁺ $\xrightarrow{H_2}$ CH⁺ $\xrightarrow{H_2}$ CH₂⁺ $\xrightarrow{H_2}$ CH₃⁺) dans la Barre d'Orion et dans d203-506. Grâce aux modèles d'excitation, se basant sur les calculs de dynamique quantique, nous avons pu identifier les processus d'excitation observés. Grâce à cela, nous pouvons alors traduire l'intensité des raies mesurée directement en taux de formation et de destruction de ces espèces. Nous avons donc un accès direct à la chimie en action dans les régions chaudes et irradiées.

Au-delà de contraindre la chimie, l'analyse couplée des observations avec les modèles d'excitation nous permet de contraindre les conditions physiques du milieu. En effet, dans les Chapitres 5 et 6, je montre comment le modèle GROSBETA et les modèles analytiques d'excitation à la formation peuvent être utilisés pour déterminer localement l'intensité du champ UV ou la densité du gaz à partir de l'intensité des raies observées. En effet, je montre dans les Chapitres 4 et 5 que l'intensité des raies de OH provenant de la photodissociation de l'eau est directement proportionnelle à la quantité d'eau photodissociée par unité de temps. Ainsi, lorsque l'on détecte l'eau dans l'objet et que l'on peut estimer son abondance, les raies de OH sont alors un diagnostic robuste pour contraindre l'intensité du champ UV. Dans notre étude, l'eau chaude, qui peut être photodissociée, n'est pas détectée dans la Barre d'Orion mais l'intensité du champ UV est bien contrainte par les raies de fluorescence de O I ou de H₂. Ainsi, en connaissant l'intensité du champ UV, les raies de OH permettent alors de contraindre l'abondance de l'eau dans la région. Dans les Chapitres 5 et 6, je montre que l'intensité des raies de OH et de CH⁺ provenant du pompage chimique est directement proportionnelle à la quantité de l'espèce formée par unité de temps. Or, celle-ci dépend de l'abondance des deux réactifs (H₂ et O ou C⁺) et de la densité du gaz. Ainsi, l'intensité des raies de OH et de CH⁺ pompées chimiquement permet une estimation locale de la densité (l'abondance de O et de C⁺ est égale à l'abondance interstellaire de ces espèces dans la Barre d'Orion).

Dans le Chapitre 4, j'ai étudié l'impact des conditions physiques sur l'émission de OH suivant la photodissociation de l'eau, en implémentant ce processus dans le code PDR auto-cohérent de Meudon. Le principal résultat de cette étude est que cette émission est seulement possible dans les régions chaudes, denses et très irradiées puisque l'intensité de l'émission prompte de OH est fortement corrélée à la pression thermique du gaz et l'intensité du champ de rayonnement. Cette contrainte est liée à la formation de l'eau par $O \xrightarrow{H_2} OH \xrightarrow{H_2} H_2O$ nécessitant de hautes températures. Ainsi, l'émission des raies suivant le pompage chimique (nécessitant également de hautes températures) est aussi restreinte à ces régions. Nous comprenons alors que ces mécanismes d'excitation sont des diagnostics robustes de ces interfaces

chaudes et irradiées. Cependant, celles-ci peuvent se trouver dans différents objets astrophysiques. En effet, si j'ai étudié dans cette thèse les régions de photodissociation et les vents photoévaporés, des conditions similaires se trouvent dans les régions internes des disques protoplanétaires, dans les nébuleuses planétaires, dans des protoétoiles, dans des *outflows*, dans des galaxies... Cette thèse met alors en avant l'universalité de ces diagnostics.

Au cours de cette thèse, j'ai utilisé plusieurs méthodes pour modéliser l'émission observée de molécules. Dans le Chapitre 4, j'utilise un code auto-cohérent modélisant la structure globale de la PDR pour prédire l'émission de raies de OH suivant la photodissociation de l'eau. Dans le Chapitre 5, j'utilise le code GROSBETA, un code à zéro dimension, modélisant uniquement l'excitation de OH à une position précise de la PDR (conditions physiques constantes). Enfin, dans le Chapitre 6, j'utilise uniquement des modèles analytiques modélisant également l'excitation de la molécule suivant le pompage chimique. L'utilisation de modèles de plus en plus simples montre leur capacité à identifier les processus d'excitation en s'affranchissant des incertitudes des modèles auto-cohérents que nous discutons dans le Chapitre 2, Section 2.1.1.6. De plus, mes travaux démontrent également la robustesse de ceux-ci pour contraindre les paramètres physiques d'une région à une position donnée. Ceux-ci sont particulièrement utiles dans le cadre des données du JWST où la résolution angulaire spectaculaire nous permet de sonder des sous-structures dans lesquelles les conditions physiques varient peu. Ils sont alors particulièrement complémentaires aux modèles auto-cohérents, qui sont, dans l'ensemble, plus réalistes, puisque ceux-ci permettent de prendre en compte les variations physiques observées dans une PDR. Nous montrons que ces modèles sont alors essentiels pour modéliser les régions où les variations physiques sont très rapides et où elles ne sont pas résolues spatialement par le JWST.

Inclure les processus d'excitation à la formation dans des codes auto-cohérent

Une des perspectives de ma thèse est d'inclure les processus d'excitation à la formation dans des codes auto-cohérents, comme le code PDR de Meudon, afin d'étudier la morphologie spatiale de l'émission de ces molécules. Nous avons déjà implémenté l'excitation de OH suivant la photodissociation de l'eau dans le code PDR (voir Chapitre 4) mais le pompage chimique de OH et CH^+ n'est toujours pas pris en compte dans ce code. Le pompage chimique des niveaux rotationnels de CH^+ a déjà été implémenté dans le code PDR par Godard & Cernicharo (2013), il faudrait alors étendre cette excitation aux niveaux rovibrationnels. Nous pourrions ainsi étudier la compatibilité des modèles analytiques avec les modèles auto-cohérents et étudier la compatibilité des diagnostics entre eux. En effet, on s'attend à ce que l'émission des molécules étudiées dans cette thèse provienne de la même couche irradiée proche de la transition H/H₂. Ainsi, un unique modèle auto-cohérent devrait pouvoir reproduire l'émission de chacune de ces molécules.

Poursuivre l'étude de ces espèces en collaboration avec des physiciens moléculaires

Les travaux menés dans les Chapitres 5 et 6 ont permis de montrer les données moléculaires manquantes pour modéliser et analyser correctement ces processus d'excitation. En effet, dans le Chapitre 5 et 6, nous négligeons l'impact des collisions pour expliquer l'excitation observée. Cependant, pour mener à bien ces conclusions, les mesures de taux de

collisions sont nécessaires. Ensuite, l'étude de CH_3^+ dans le Chapitre 6 démontre le manque de données moléculaires pour mener les mêmes travaux que sur CH^+ . En effet, nous avons pu étudier en détail l'excitation par pompage chimique de CH^+ . Nous discutons l'excitation de CH_3^+ en avançant des éléments mettant en avant la possibilité d'un pompage chimique de CH_3^+ . Cependant, dû au manque de données moléculaires pour la réaction $\text{CH}_2^+ + \text{H}_2$, nous n'avons pas pu conclure l'analyse. Enfin, nous montrons dans le Chapitre 6, notre méconnaissance quasi complète de l'émission de CH_2^+ . La non-détection de cette espèce soulève plusieurs questions auxquelles il est difficile de répondre sans connaître précisément la spectroscopie de ce cation.

Pour analyser l'émission de ces espèces très excitées, un chemin se dessine alors. Tout d'abord, il nous faut connaître la spectroscopie de la molécule afin de l'identifier dans un spectre (ce qui nous manque pour CH_2^+), ensuite il nous faut les données moléculaires pour identifier ses processus d'excitation (ce qui nous manque pour CH_3^+ pour le pompage chimique et les collisions et ce qui nous manque pour CH^+ et OH pour les collisions). Dans le cadre de mes recherches, j'ai établi d'étroites collaborations avec des physiciens et des chimistes moléculaires (à Madrid, à Salamanque et à l'Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, ISMO). Je souhaite alors poursuivre ce travail de collaboration avec ces deux équipes afin d'obtenir ces clés d'analyses manquantes.

La collaboration avec les scientifiques de l'ISMO permet de répondre aux questions sur la non-détection de CH_2^+ . En effet, des calculs sont en cours de réalisation pour mieux contraindre la spectroscopie de ce cation qui nous servira de première étape à l'analyse de son absence du spectre JWST. Connaître la position des transitions possibles de CH_2^+ est essentiel pour chercher sa détection qui aurait pu nous échapper. L'étude de CH_2^+ est un projet mené pour l'instant à l'ISMO que je souhaite suivre afin de mieux contraindre la chimie du carbone observée dans les régions irradiées.

La collaboration avec les scientifiques de Madrid et Salamanque ont permis l'analyse du pompage chimique de OH et CH^+ . Je souhaite alors pouvoir étendre cette collaboration à mes travaux sur CH_3^+ . La connaissance des coefficients état-état de la réaction $\text{CH}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H}$ et des taux de collisions de CH_3^+ permettra de mieux contraindre son excitation et sa formation. En effet, nos travaux et les modèles photochimiques traditionnels se basent sur l'hypothèse que CH_3^+ est formé uniquement en phase gazeuse. Les travaux de Pety et al. (2005) et Alata et al. (2014, 2015) ont cependant montré la possibilité de destruction des grains carbonés pour former des petits hydrocarbures dans les régions irradiées. L'analyse précise de l'émission de CH_3^+ , nécessitant les calculs des données moléculaires manquantes, apportera alors des contraintes observationnelles plus précises sur les voies de formation des hydrocarbures.

L'étude précise de CH_3^+ dont l'émission se situe dans l'infrarouge moyen demande, cependant, une compréhension plus approfondie des franges visibles dans MIRI-MRS, que je discute dans le Chapitre 3, Section 3.1.4.2. En effet, dans la PDR, l'émission de CH_3^+ est particulièrement faible et pourrait être affectée par les franges. Celles-ci pourraient modifier les rapports des raies de CH_3^+ et donc affecter la température d'excitation mesurée. La correction des franges se basant sur l'ajustement de sinusoïdes pourrait également altérer le signal émis par CH_3^+ en l'assimilant à des franges. Je souhaite alors dans le futur suivre les différents travaux réalisés sur la réduction des franges dans les données. À terme, j'aimerais pouvoir

comprendre comment les franges peuvent modifier le signal de CH_3^+ et en contraindre les conséquences sur l'analyse scientifique.

Etudier l'émission de OH, CH^+ et CH_3^+ dans d'autres environnements

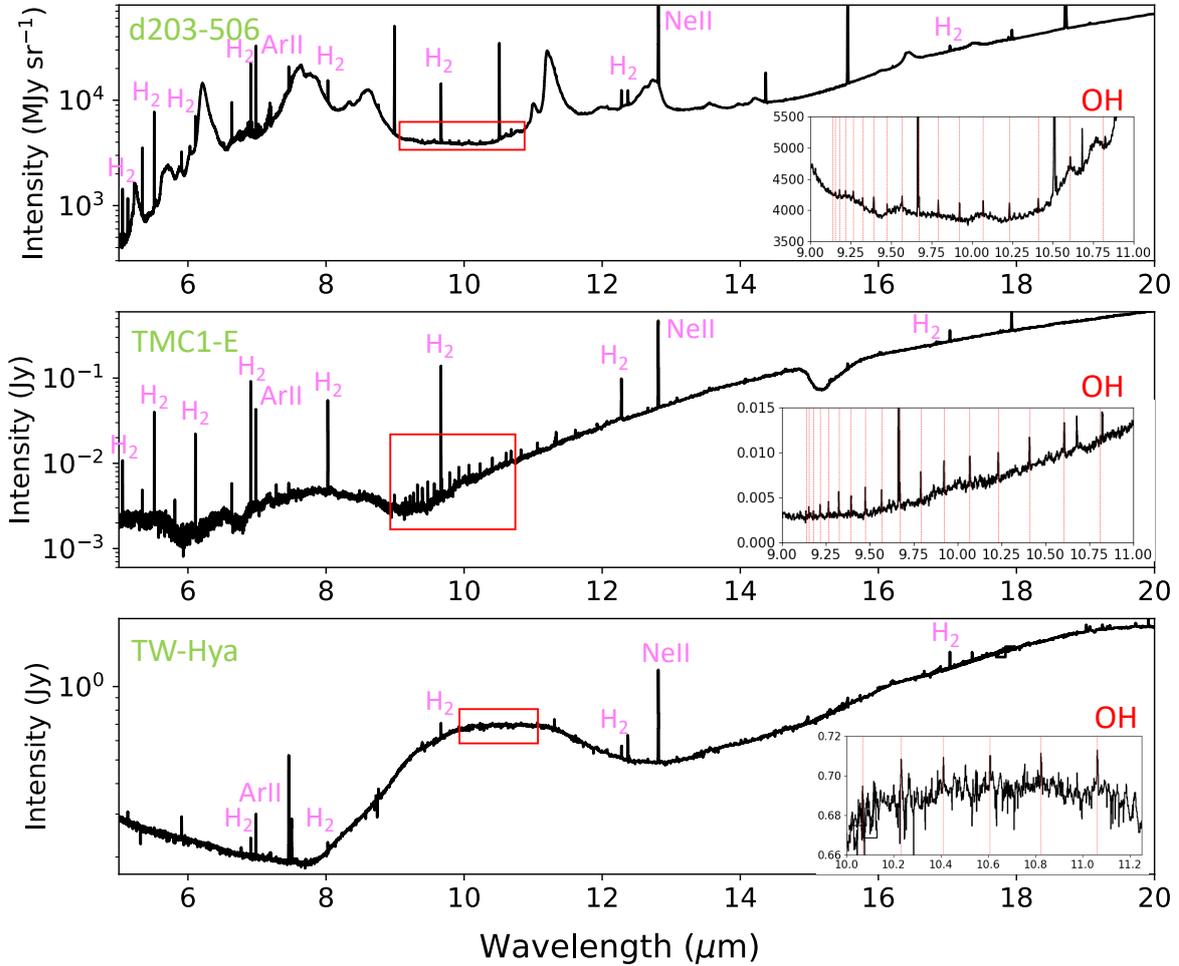


FIGURE 6.16 – Spectres observés avec MIRI-MRS de trois objets astrophysiques présentant une signature de l'émission prompt de OH suivant la photodissociation de l'eau ainsi que des raies du gaz similaires. (Haut) Spectre de vent photoévaporé d203-506. (Milieu) Spectre de la protoétoile TMC1-E (Tychoniec et al. 2024). (Bas) Spectre du disque TW-Hya (Henning et al. 2024). Les encarts sont des zooms sur la zone du spectre où OH est détecté.

L'émission de OH, CH^+ et CH_3^+ a déjà été et sera probablement détectée dans différents environnements comme des protoétoiles (*e.g.*, Francis et al. 2024; Neufeld et al. 2024; Tychoniec et al. 2024), des nébuleuses planétaires, d'autres disques protoplanétaires (*e.g.*, Henning et al. 2024; Temmink et al. 2024), des comètes, etc. La Figure 6.16 montre les spectres de différents objets dévoilant ces signatures. L'étude réalisée dans les Chapitres 4, 5 et 6 a permis de montrer que l'émission des raies suivant des processus d'excitation à la formation permet de contraindre les paramètres physiques du milieu (densité du gaz, intensité du champ UV, abondances d'espèces...). Nous avons pu vérifier la robustesse de ces diagnos-

tics dans deux environnements avec des densités différentes (PDR et disque protoplanétaire). Ainsi, étudier ces émissions dans d'autres objets permettrait de vérifier que ces diagnostics s'appliquent bien à différentes régions. Dans la plupart des régions où ces espèces ont été détectées, l'analyse reste assez succincte. Une étude avancée de ces émissions reste à mener.

De plus, je souhaiterais pouvoir étudier ces émissions dans ces différents objets pour mieux comprendre l'impact de l'environnement sur l'émission de ces espèces. Nous avons montré dans le Chapitre 6 que CH^+ et CH_3^+ pouvaient être utilisés comme des traceurs de densité puisque leur émission est largement renforcée dans les régions denses. Ce résultat est très probablement adaptable à l'émission de OH puisqu'elle suit un mécanisme similaire à celui de la formation de CH^+ et de CH_3^+ . Cependant, pour réellement utiliser ces espèces comme traceurs de la densité, il faudrait mieux contraindre le lien entre elles et ce paramètre physique. Il est donc nécessaire d'étudier leur émission dans plusieurs environnements avec des densités différentes. Ensuite, dans le Chapitre 6, nous avons soulevé le fait intéressant que CH^+ et CH_3^+ semblaient être affectés par la densité de façon similaire. En effet, le rapport de leur intensité est relativement constant entre la PDR ($n_{\text{H}} \sim 10^5 \text{ cm}^{-3}$) et dans d203-506 ($n_{\text{H}} \sim 10^6 \text{ cm}^{-3}$) à un facteur 2 près. Si CH_3^+ semble légèrement plus favorisé à haute densité par rapport à CH^+ , les incertitudes de mesures font qu'il est difficile de conclure sur ce sujet. Étudier l'émission comparée de CH^+ et de CH_3^+ dans des objets à différentes densités permettraient de mieux contraindre la relation entre les deux espèces. Par exemple, CH_3^+ a été détecté dans d203-504, un disque proche de d203-506, situé dans la ligne de visée des observations PDRs4All. Cependant, dans ce disque, CH^+ n'est pas détecté. Cette non-détection est assez curieuse puisque l'émission de H_2 dans d203-504 est très similaire à celle de d203-506 (même température d'excitation et densité de colonne de H_2), ce qui laisse penser que le pompage chimique de CH^+ est favorable dans cette région. Cependant, plusieurs explications peuvent expliquer cette non-détection, l'émission de CH_3^+ est plus faible dans d203-504 que dans d203-506 et le continuum autour de $3 \mu\text{m}$ où est attendu CH^+ est plus fort, impliquant un bruit sur le continuum plus fort. Cela pourrait rendre l'émission de CH^+ à la limite de détection dans ce disque. L'étude du rapport $\text{CH}^+/\text{CH}_3^+$ dans différents environnements pourrait tout de même clarifier l'absence de CH^+ dans le disque d203-504.

Coupler les données du JWST avec celles d'ALMA

L'interféromètre ALMA est particulièrement approprié pour la comparaison avec les observations JWST. En effet, grâce à l'interférométrie, il atteint une résolution angulaire similaire à celle du JWST et donc permet une comparaison directe de la structure de l'objet dans les deux gammes de longueurs d'onde. De plus, sa gamme de fréquences lui permet de tracer une composante de la matière différente. En effet, il a accès à l'émission des poussières froides ainsi qu'une riche émission moléculaire. Contrairement au JWST, qui nécessite que les molécules soient très excitées pour émettre dans l'infrarouge, ALMA a accès à l'émission des molécules carbonées complexes (comportant plusieurs carbones, par exemple C_2H , C_3H , C_4H , C_3H_2 ...). De nombreuses études ont d'ailleurs montré la richesse des régions irradiées en petits hydrocarbures (*e.g.*, Cuadrado et al. 2015, Goicoechea et al. en préparation). L'origine de ces hydrocarbures est encore discutée, ils peuvent se former en phase gazeuse et par photodestruction des grains. La comparaison de l'émission de ces hydrocarbures détectés avec ALMA avec l'émission du gaz chaud (avec H_2 par exemple) permet de contraindre

la possibilité de formation en phase gazeuse de ces espèces. De plus, avec le JWST, nous avons accès au premier bloc de la chimie du carbone en phase gazeuse (CH^+ et CH_3^+) alors qu'ALMA nous donne accès aux molécules plus complexes. Comparer l'émission de CH^+ et CH_3^+ avec l'émission des petits hydrocarbures est essentiel pour s'assurer que CH_3^+ peut réellement être à l'origine de la complexité observée dans les espèces carbonées.

Poursuivre l'étude de H_2 dans les régions denses et irradiées

Dans les régions denses et irradiées, H_2 est à l'origine d'une chimie particulièrement active, grâce à son excitation par collisions et pompage UV. Dans les Chapitres 5 et 6, j'ai montré la nécessité d'étudier H_2 pour analyser l'émission de OH et CH^+ . Ces deux espèces se forment et sont excitées lors de la réaction $\text{X} + \text{H}_2^* = \text{XH} + \text{H}$. L'état d'excitation de H_2 a donc une influence forte sur l'état d'excitation de la molécule produite par cette réaction. La connaissance des populations des niveaux de H_2 est essentielle pour la modélisation du pompage chimique de OH et de CH^+ . De plus, j'ai comparé les résultats de mes diagnostics avec ceux faits par H_2 car l'émission de cette molécule permet également de contraindre des paramètres physiques importants du nuage comme la température et la densité du gaz. Je souhaiterais alors continuer à étudier l'émission de H_2 , qui est un élément pivot dans la compréhension du milieu, dans différentes régions denses et irradiées.

C'est pourquoi, je vais, dans l'année qui vient, étudier et modéliser l'émission de H_2 en utilisant les données du programme GTO "*Physics and Chemistry of PDR Fronts*" (1192) se concentrant sur les données de la Tête-de-Cheval et NGC-7023. Ces PDRs sont assez différentes de la Barre d'Orion puisqu'elles sont moins irradiées (dans la Tête-de-Cheval, le champ de rayonnement vaut $G_0 \sim 100$ et dans NGC-7023, il vaut $G_0 \sim 2\,000 - 3\,000$). L'étude de H_2 dans ces PDRs permettra des contraintes phares sur les conditions physiques. En effet, H_2 permet de contraindre la température et la pression thermique dans ces environnements. Puisqu'elles sont moins irradiées, H_2 est moins photodissociée au bord de la PDR et la transition H/H_2 apparaît à de très faibles A_V (0,01-0,1). Ainsi, H_2 permettra d'évaluer le profil en température du bord de la PDR jusqu'aux régions moléculaires. Contraindre la pression au bord de la PDR est particulièrement intéressant puisque cela permet de vérifier l'équilibre de pression. Nous avons plusieurs fois discuté dans ce manuscrit une possible évolution de la pression thermique dans la PDR. D'ailleurs une augmentation faible est prédite par les modèles dynamiques (comme Hydra). Contraindre la pression en tout point de la PDR permettra alors de sonder cette évolution et de comparer la pression de la PDR à la pression du gaz ionisé. Cela permettra également de vérifier s'il existe une surpression importante du gaz à la transition H/H_2 et si les modèles statiques, c'est-à-dire supposant un équilibre de pression, sont suffisants pour reproduire les données observationnelles de H_2 (la température d'excitation, la distance entre le front d'ionisation et de dissociation...). Des modélisations des effets hors équilibre (dus à la photoévaporation du gaz) ont montré que ceux-ci pourraient être particulièrement importants dans ces PDRs moins irradiées, comme la Tête-de-Cheval (Maillard et al. 2021).

Nous avons montré dans cette thèse l'importance de H_2^* dans la chimie chaude des régions irradiées. L'étude de ces PDRs moins excitées que la Barre d'Orion nous permettra de contraindre dans quelle mesure, H_2^* peut déclencher une chimie active lorsque la température du gaz et l'intensité du champ de rayonnement UV est plus faible. Nous avons montré au

cours de cette thèse que l'excitation à la formation était un diagnostic robuste des régions denses et irradiées. L'étude de ces PDRs moins excitées que la Barre d'Orion permettrait de vérifier ce résultat et plus particulièrement les prédictions réalisées dans le Chapitre 4 montrant que OH ne pourrait pas être détecté dans ces régions. Nous pourrions alors contraindre la densité et l'intensité du champ de rayonnement limite à partir desquels l'émission de ces espèces peut être observée.

Enfin, les raies d'émission de H₂ permettent d'apporter de fortes contraintes sur la courbe d'extinction de la poussière (à partir de transitions de 1 à 7 μm, provenant du même niveau supérieur). La détermination de la courbe d'extinction est critique puisque ces effets le long de la ligne de visée sont particulièrement importants dans les régions de formation stellaire. Ces effets affectent le spectre NIRSpec et MIRI et donc toutes les raies d'émission dans cette gamme de longueurs d'onde. Pour analyser l'intensité des raies, dont nous avons besoin dans les diagnostics que j'ai développés à partir des processus d'excitation à la formation, la connaissance précise de l'extinction par la poussière est essentielle. Dans les raies de H₂, l'extinction par la poussière affecte particulièrement la raie 0-0 S(3) à 9,66 μm due à la bande des silicates à 10 μm. Ainsi, l'extinction par la poussière peut impacter la dérivation de paramètres clés de l'étude du milieu comme la température du gaz et le rapport ortho-sur-para de H₂. Il est essentiel d'obtenir une courbe d'atténuation réaliste pour pouvoir produire des analyses quantitatives des raies d'émission observées dans le spectre du JWST. L'estimation de la courbe d'extinction peut également se faire à l'aide de l'étude de l'émission des poussières observée dans différents filtres de NIRCам et de MIRIm (Abergel et al. 2024). Nous pourrions alors comparer les contraintes obtenues avec l'émission de H₂ avec les contraintes obtenues par l'émission des poussières sur la courbe d'extinction.

Ce travail sur les PDRs galactiques moins irradiées, telles que la Tête-de-Cheval et NGC-7023 est d'autant plus important car leurs conditions physiques sont beaucoup plus représentatives de celles régnant dans les régions moléculaires illuminées des galaxies normales (comme notre Galaxie) et qui sont responsables de l'essentiel de leur émission IR. Mieux comprendre la formation stellaire et planétaire ainsi que la rétroaction radiative par les étoiles massives nécessitent l'étude de ces régions plus représentatives que la Barre d'Orion.

Annexes

Annexe A

Formule de l'intensité du champ ultraviolet

La relation de Strömgen pour une région H II en supposant une densité d'électron constante s'écrit :

$$\Phi_{\text{EUV}} f_{\text{gas}} = \frac{4}{3} \pi \alpha_r n_e^2 d^3 \quad (\text{A.1})$$

où Φ_{EUV} est la luminosité des photons EUV de la source, f_{gas} est la fraction de rayonnement EUV absorbé par le gaz de la région H II, d est le rayon de Strömgen soit la distance entre la source et le front d'ionisation de la PDR, α_r est le coefficient de recombinaison d'électron avec des protons. On peut définir un coefficient de proportionnalité entre la luminosité des photons EUV et des photons FUV (entre 912 – 2000 Å) :

$$\Phi_{\text{FUV}} = f \Phi_{\text{EUV}} \quad (\text{A.2})$$

L'intensité du champ UV G_0 peut s'écrire :

$$G_0 = \frac{\Phi_{\text{FUV}} f_{\text{PDR}}}{4\pi d^2 F_0} \quad (\text{A.3})$$

où $F_0 \simeq 10^8$ photons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ est le flux FUV approprié pour $G_0 = 1$ et f_{PDR} est la fraction de photons FUV qui échappent à l'absorption par la poussière dans la région H II ($f_{\text{PDR}} \simeq f_{\text{gas}}$).

Annexe B

Estimation du champ UV

L'intensité du champ UV est estimée à partir des raies d'émission de O I pompées dans l'UV. Les émissions de O I, $3d^3D^o - 3p^3P$ 1,129 μm et O I, $4s^3S^o - 3p^3P$ 1,317 μm résultent du pompage UV par des photons de 1027 et 1040 \AA respectivement. L'intensité UV peut donc être déterminée à l'aide de l'équation suivante :

$$I_{\nu}^{\text{UV}} = \frac{4\pi \sin(i)}{A f_b} \frac{\lambda_{\text{IR}} \lambda_{\text{UV}}}{c W_{\lambda}} I(\text{IR}) \quad (\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ Hz}^{-1}), \quad (\text{B.1})$$

où $I(\text{IR})$ est l'intensité observée de la raie dans l'infrarouge en $\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$, i l'inclinaison de la barre par rapport à la ligne de visée, W_{λ} la largeur équivalente de la raie dans l'UV, $W_{\lambda}/\lambda_{\text{UV}} = 3,6 \times 10^{-5}$, f_b le rapport d'embranchement ou la probabilité d'émission dans l'IR à la suite de l'absorption d'un photon UV (voir les Tables 3 et 4 dans Walmsley et al. 2000), et A est égal à 3 pour les raies de O I, car ses raies pompées par UV sont des triplets dont la séparation est supérieure à W_{λ} (Marconi et al. 1998; Walmsley et al. 2000).

Comme cette émission fluorescente provient d'une région étroite du front d'ionisation, l'intensité UV calculée représente le rayonnement UV émergeant de la région H II, où l'extinction de la PDR est négligeable. Par conséquent, nous n'appliquons qu'une extinction d'avant-plan, $\exp(-\tau_{f,\lambda})$, avec $\tau_{f,\lambda}$ la profondeur optique d'avant-plan telle qu'elle a été obtenue avec les raies de recombinaison de H I. Nous adoptons une inclinaison i de 4° (Salgado et al. 2016) et obtenons le rapport d'embranchement à partir de Walmsley et al. (2000, Tables 3 et 4).

Annexe C

Intensité des raies détectées dans la Barre d'Orion

C.1 Intensité des raies détectées dans l'infrarouge proche avec NIRSpec (Peeters et al. 2024)

TABLE C.1 – Intensités (observées et corrigées pour l'extinction) et densités de colonne des raies H₂ dans les états $\nu = 0$ et $\nu = 1$ telles qu'observées dans les cinq régions.

Raie	λ (μm)	Intensité observée	Intensité corrigée de l'extinction ($\times 10^{-5}$ erg cm $^{-2}$ s $^{-1}$ sr $^{-1}$)		Densité de colonne (cm $^{-2}$)	
			Avant-plan	Mélange	Avant-plan	Mélange
H II region						
0-0S(8)	5,0531152	2,57 ^{2,65} _{2,49}	2,77 ^{2,86} _{2,68}	–	2,74 ^{2,82} _{2,65}	–
0-0S(9)	4,6946139	6,29 ^{6,41} _{6,17}	6,82 ^{6,94} _{6,69}	–	4,13 ^{4,21} _{4,05}	–
0-0S(10)	4,4097910	1,31 ^{1,38} _{1,24}	1,43 ^{1,50} _{1,35}	–	0,57 ^{0,60} _{0,54}	–
0-0S(11)	4,1810772	3,35 ^{3,50} _{3,20}	3,67 ^{3,83} _{3,51}	–	1,01 ^{1,05} _{0,96}	–
0-0S(12)	3,9961466	0,92 ^{0,97} _{0,87}	1,02 ^{1,07} _{0,96}	–	0,20 ^{0,21} _{0,19}	–
0-0S(13)	3,8461132	2,15 ^{2,25} _{2,05}	2,38 ^{2,48} _{2,27}	–	0,36 ^{0,37} _{0,34}	–
0-0S(15)	3,6261662	1,52 ^{1,59} _{1,45}	1,70 ^{1,77} _{1,62}	–	0,16 ^{0,17} _{0,15}	–
1-0Q(3)	2,4237297	9,15 ^{9,80} _{8,50}	11,14 ^{11,93} _{10,35}	–	6,05 ^{6,48} _{5,62}	–
1-0Q(4)	2,4374894	3,33 ^{3,69} _{2,97}	4,05 ^{4,48} _{3,61}	–	2,29 ^{2,54} _{2,05}	–
1-0Q(5)	2,4547514	5,01 ^{5,20} _{4,82}	6,08 ^{6,30} _{5,85}	–	3,56 ^{3,69} _{3,42}	–
1-0Q(7)	2,4999655	3,09 ^{3,22} _{2,96}	3,73 ^{3,89} _{3,57}	–	2,32 ^{2,42} _{2,22}	–
1-0S(0)	2,2232902	4,02 ^{4,33} _{3,71}	5,03 ^{5,42} _{4,64}	–	2,80 ^{3,02} _{2,58}	–
1-0S(1)	2,1218337	11,40 ^{11,77} _{11,03}	14,49 ^{14,96} _{14,01}	–	5,60 ^{5,79} _{5,42}	–
1-0S(2)	2,0337578	4,15 ^{4,24} _{4,06}	5,36 ^{5,47} _{5,24}	–	1,73 ^{1,77} _{1,69}	–
1-0S(3)	1,9575590	8,62 ^{8,83} _{8,41}	11,29 ^{11,57} _{11,01}	–	3,32 ^{3,41} _{3,24}	–
1-0S(4)	1,8919359	2,39 ^{2,58} _{2,20}	3,17 ^{3,43} _{2,92}	–	0,91 ^{0,98} _{0,84}	–
1-0S(5)	1,8357597	5,28 ^{5,33} _{5,12}	7,10 ^{7,17} _{7,04}	–	2,09 ^{2,11} _{2,07}	–
1-0S(7)	1,7479552	2,95 ^{3,12} _{2,78}	4,06 ^{4,29} _{3,82}	–	1,50 ^{1,59} _{1,42}	–
1-0O(3)	2,8025164	12,70 ^{13,10} _{12,30}	14,88 ^{15,34} _{14,41}	–	6,25 ^{6,44} _{6,05}	–
1-0O(4)	3,0038681	3,60 ^{3,70} _{3,50}	4,15 ^{4,26} _{4,04}	–	2,73 ^{2,80} _{2,65}	–

TABLE C.1 – suite.

Raie	λ (μm)	Intensité observée	Intensité corrigée de l'extinction ($\times 10^{-5}$ erg cm $^{-2}$ s $^{-1}$ sr $^{-1}$)		Densité de colonne (cm $^{-2}$)	
			Avant-plan	Mélange	Avant-plan	Mélange
1-0O(5)	3,2349876	4,61 ^{4,70} _{4,52}	5,24 ^{5,34} _{5,14}	–	5,15 ^{5,25} _{5,05}	–
1-0O(7)	3,8074188	1,46 ^{1,51} _{1,41}	1,62 ^{1,67} _{1,56}	–	3,67 ^{3,79} _{3,55}	–
1-1S(9)	4,9540952	1,13 ^{1,23} _{1,02}	1,22 ^{1,33} _{1,11}	–	0,87 ^{0,96} _{0,79}	–
1-1S(11)	4,4166106	1,03 ^{1,08} _{0,98}	1,12 ^{1,17} _{1,07}	–	0,37 ^{0,39} _{0,36}	–
1-1S(12)	4,2236663	0,33 ^{0,33} _{0,32}	0,36 ^{0,37} _{0,35}	–	0,09 ^{0,09} _{0,08}	–
1-1S(15)	3,8405061	0,43 ^{0,50} _{0,36}	0,48 ^{0,55} _{0,40}	–	0,06 ^{0,07} _{0,05}	–
Atomic PDR						
0-0S(8)	5,0531152	2,32 ^{2,40} _{2,24}	2,86 ^{2,96} _{2,75}	2,90 ^{3,01} _{2,79}	2,82 ^{2,92} _{2,72}	2,86 ^{2,97} _{2,76}
0-0S(9)	4,6946139	5,95 ^{6,26} _{5,64}	7,43 ^{7,82} _{7,05}	7,55 ^{7,95} _{7,16}	4,50 ^{4,74} _{4,27}	4,58 ^{4,82} _{4,34}
0-0S(10)	4,4097910	1,37 ^{1,43} _{1,31}	1,74 ^{1,81} _{1,66}	1,77 ^{1,84} _{1,69}	0,69 ^{0,72} _{0,66}	0,70 ^{0,73} _{0,67}
0-0S(11)	4,1810772	3,40 ^{3,54} _{3,26}	4,38 ^{4,55} _{4,20}	4,45 ^{4,63} _{4,28}	1,20 ^{1,25} _{1,15}	1,22 ^{1,27} _{1,17}
0-0S(12)	3,9961466	0,79 ^{0,89} _{0,69}	1,03 ^{1,17} _{0,90}	1,05 ^{1,19} _{0,92}	0,21 ^{0,23} _{0,18}	0,21 ^{0,24} _{0,18}
0-0S(13)	3,8461132	2,30 ^{2,38} _{2,22}	3,04 ^{3,15} _{2,93}	3,10 ^{3,21} _{2,99}	0,46 ^{0,47} _{0,44}	0,47 ^{0,48} _{0,45}
0-0S(14)	3,7244259	1,10 ^{1,17} _{1,03}	1,47 ^{1,57} _{1,38}	1,50 ^{1,60} _{1,40}	0,17 ^{0,18} _{0,16}	0,18 ^{0,19} _{0,17}
0-0S(15)	3,6261662	1,94 ^{1,99} _{1,89}	2,63 ^{2,69} _{2,56}	2,68 ^{2,74} _{2,61}	0,25 ^{0,26} _{0,24}	0,26 ^{0,26} _{0,25}
1-0Q(1)	2,4065919	12,80 ^{13,09} _{12,51}	22,19 ^{22,69} _{21,69}	22,68 ^{23,19} _{22,17}	7,87 ^{8,04} _{7,69}	8,04 ^{8,22} _{7,86}
1-0Q(2)	2,4134388	4,78 ^{4,94} _{4,62}	8,27 ^{8,55} _{7,99}	8,45 ^{8,74} _{8,16}	4,14 ^{4,28} _{4,00}	4,23 ^{4,37} _{4,09}
1-0Q(3)	2,4237297	8,23 ^{8,38} _{8,08}	14,18 ^{14,44} _{13,93}	14,50 ^{14,76} _{14,24}	7,70 ^{7,84} _{7,56}	7,87 ^{8,01} _{7,73}
1-0Q(4)	2,4374894	2,41 ^{2,59} _{2,23}	4,13 ^{4,44} _{3,83}	4,23 ^{4,54} _{3,92}	2,34 ^{2,52} _{2,17}	2,40 ^{2,57} _{2,22}
1-0Q(5)	2,4547514	4,48 ^{4,55} _{4,41}	7,64 ^{7,77} _{7,52}	7,81 ^{7,94} _{7,69}	4,48 ^{4,55} _{4,40}	4,58 ^{4,65} _{4,50}
1-0Q(6)	2,4755590	1,25 ^{1,33} _{1,17}	2,12 ^{2,26} _{1,98}	2,17 ^{2,31} _{2,02}	1,28 ^{1,36} _{1,20}	1,31 ^{1,39} _{1,22}
1-0Q(7)	2,4999655	2,57 ^{2,66} _{2,48}	4,32 ^{4,47} _{4,18}	4,42 ^{4,57} _{4,27}	2,69 ^{2,78} _{2,60}	2,75 ^{2,84} _{2,66}
1-0Q(9)	2,5598505	1,59 ^{1,63} _{1,55}	2,63 ^{2,69} _{2,56}	2,68 ^{2,75} _{2,62}	1,75 ^{1,79} _{1,70}	1,79 ^{1,83} _{1,74}
1-0S(0)	2,2232902	3,14 ^{3,66} _{2,62}	5,83 ^{6,79} _{4,87}	5,95 ^{6,93} _{4,98}	3,25 ^{3,78} _{2,71}	3,32 ^{3,86} _{2,77}
1-0S(1)	2,1218337	8,77 ^{8,97} _{8,57}	17,04 ^{17,42} _{16,65}	17,36 ^{17,76} _{16,97}	6,59 ^{6,74} _{6,44}	6,72 ^{6,87} _{6,56}
1-0S(2)	2,0337578	3,02 ^{3,13} _{2,90}	6,12 ^{6,47} _{5,89}	6,23 ^{6,67} _{5,99}	1,98 ^{2,05} _{1,90}	2,01 ^{2,09} _{1,94}
1-0S(3)	1,9575590	6,36 ^{6,50} _{6,22}	13,43 ^{13,73} _{13,14}	13,64 ^{13,94} _{13,34}	3,96 ^{4,04} _{3,87}	4,02 ^{4,11} _{3,93}
1-0S(4)	1,8919359	1,65 ^{1,74} _{1,56}	3,62 ^{3,82} _{3,42}	3,67 ^{3,87} _{3,47}	1,03 ^{1,09} _{0,98}	1,05 ^{1,11} _{0,99}
1-0S(5)	1,8357597	3,41 ^{3,56} _{3,26}	7,75 ^{8,10} _{7,40}	7,84 ^{8,19} _{7,49}	2,28 ^{2,38} _{2,17}	2,30 ^{2,41} _{2,20}
1-0O(3)	2,8025164	12,00 ^{12,33} _{11,67}	18,60 ^{19,10} _{18,09}	19,01 ^{19,53} _{18,50}	7,81 ^{8,02} _{7,60}	7,98 ^{8,20} _{7,77}
1-0O(4)	3,0038681	3,00 ^{3,09} _{2,91}	4,45 ^{4,59} _{4,32}	4,55 ^{4,69} _{4,41}	2,92 ^{3,01} _{2,83}	2,99 ^{3,08} _{2,90}
1-0O(5)	3,2349876	4,58 ^{4,68} _{4,48}	6,53 ^{6,67} _{6,39}	6,67 ^{6,81} _{6,53}	6,42 ^{6,56} _{6,28}	6,56 ^{6,70} _{6,41}
1-0O(7)	3,8074188	1,52 ^{1,59} _{1,45}	2,02 ^{2,11} _{1,93}	2,06 ^{2,15} _{1,97}	4,58 ^{4,79} _{4,38}	4,67 ^{4,88} _{4,46}
1-1S(9)	4,9540952	1,31 ^{1,39} _{1,23}	1,62 ^{1,72} _{1,52}	1,64 ^{1,74} _{1,54}	1,16 ^{1,23} _{1,09}	1,18 ^{1,25} _{1,11}
1-1S(11)	4,4166106	1,05 ^{1,10} _{1,00}	1,33 ^{1,39} _{1,27}	1,35 ^{1,41} _{1,29}	0,44 ^{0,46} _{0,42}	0,45 ^{0,47} _{0,43}
1-1S(14)	3,9416091	0,21 ^{0,24} _{0,19}	0,28 ^{0,32} _{0,24}	0,29 ^{0,33} _{0,25}	0,04 ^{0,05} _{0,04}	0,04 ^{0,05} _{0,04}
1-1S(15)	3,8405061	0,64 ^{0,70} _{0,58}	0,85 ^{0,93} _{0,77}	0,87 ^{0,94} _{0,79}	0,10 ^{0,11} _{0,09}	0,10 ^{0,11} _{0,10}
DF 1						
0-0S(8)	5,0531152	5,90 ^{6,01} _{5,79}	9,57 ^{9,76} _{9,39}	15,04 ^{15,33} _{14,75}	9,46 ^{9,64} _{9,27}	14,86 ^{15,14} _{14,57}
0-0S(9)	4,6946139	14,80 ^{15,04} _{14,56}	24,87 ^{25,28} _{24,46}	39,85 ^{40,50} _{39,19}	15,07 ^{15,32} _{14,82}	24,15 ^{24,55} _{23,75}
0-0S(10)	4,4097910	3,14 ^{3,23} _{3,05}	5,47 ^{5,63} _{5,30}	8,92 ^{9,19} _{8,65}	2,17 ^{2,23} _{2,10}	3,54 ^{3,65} _{3,43}
0-0S(11)	4,1810772	8,80 ^{9,14} _{8,46}	15,86 ^{16,47} _{15,25}	26,32 ^{27,33} _{25,31}	4,35 ^{4,52} _{4,19}	7,23 ^{7,51} _{6,95}
0-0S(12)	3,9961466	2,18 ^{2,26} _{2,10}	4,06 ^{4,20} _{3,92}	6,84 ^{7,08} _{6,60}	0,81 ^{0,84} _{0,78}	1,36 ^{1,41} _{1,32}
0-0S(13)	3,8461132	5,48 ^{5,71} _{5,25}	10,53 ^{10,97} _{10,09}	17,95 ^{18,71} _{17,20}	1,58 ^{1,65} _{1,52}	2,70 ^{2,81} _{2,59}
0-0S(15)	3,6261662	3,43 ^{3,50} _{3,36}	6,95 ^{7,09} _{6,80}	12,07 ^{12,32} _{11,82}	0,66 ^{0,68} _{0,65}	1,15 ^{1,17} _{1,13}
0-0S(17)	3,4858030	1,25 ^{1,33} _{1,17}	2,63 ^{2,80} _{2,46}	4,63 ^{4,93} _{4,33}	0,18 ^{0,19} _{0,17}	0,31 ^{0,33} _{0,29}
1-0Q(1)	2,4065919	32,40 ^{32,86} _{31,94}	116,91 ^{118,55} _{115,26}	213,12 ^{216,13} _{210,12}	41,45 ^{42,03} _{40,86}	75,56 ^{76,63} _{74,50}
1-0Q(2)	2,4134388	9,13 ^{9,25} _{9,01}	32,76 ^{33,19} _{32,34}	59,77 ^{60,54} _{58,99}	16,40 ^{16,61} _{16,18}	29,91 ^{30,30} _{29,52}
1-0Q(3)	2,4237297	18,30 ^{18,71} _{17,89}	65,14 ^{66,59} _{63,70}	118,93 ^{121,57} _{116,29}	35,37 ^{36,15} _{34,58}	64,57 ^{66,00} _{63,14}
1-0Q(4)	2,4374894	5,01 ^{5,16} _{4,86}	17,64 ^{18,17} _{17,11}	32,25 ^{33,22} _{31,28}	10,00 ^{10,30} _{9,70}	18,27 ^{18,83} _{17,72}
1-0Q(5)	2,4547514	9,38 ^{9,66} _{9,10}	32,60 ^{33,57} _{31,62}	59,66 ^{61,44} _{57,88}	19,09 ^{19,66} _{18,52}	34,93 ^{35,98} _{33,89}
1-0Q(6)	2,4755590	1,96 ^{2,08} _{1,84}	6,71 ^{7,13} _{6,28}	12,29 ^{13,07} _{11,51}	4,05 ^{4,31} _{3,79}	7,42 ^{7,89} _{6,95}

TABLE C.1 – suite.

Raie	λ (μm)	Intensité observée	Intensité corrigée de l'extinction ($\times 10^{-5}$ erg cm^{-2} s $^{-1}$ sr $^{-1}$)		Densité de colonne (cm^{-2})	
			Avant-plan	Mélange	Avant-plan	Mélange
1-0Q(7)	2,4999655	4,80 ^{4,88} _{1,72}	16,13 ^{16,38} _{15,87}	29,60 ^{30,07} _{29,13}	10,05 ^{10,21} _{9,89}	18,44 ^{18,73} _{18,15}
1-0Q(9)	2,5598505	2,86 ^{2,94} _{2,78}	9,21 ^{9,48} _{8,95}	16,95 ^{17,44} _{16,46}	6,15 ^{6,30} _{5,95}	11,27 ^{11,60} _{10,95}
1-0S(0)	2,2232902	6,67 ^{6,88} _{6,46}	28,28 ^{29,18} _{27,38}	50,29 ^{51,89} _{48,69}	15,75 ^{16,25} _{15,25}	28,00 ^{28,89} _{27,11}
1-0S(1)	2,1218337	18,60 ^{19,11} _{18,09}	87,50 ^{89,88} _{85,12}	152,15 ^{156,29} _{148,01}	33,85 ^{34,77} _{32,93}	58,86 ^{60,46} _{57,26}
1-0S(2)	2,0337578	5,27 ^{5,43} _{5,11}	27,41 ^{28,22} _{26,59}	46,45 ^{47,83} _{45,08}	8,86 ^{9,12} _{8,59}	15,01 ^{15,46} _{14,57}
1-0S(3)	1,9575590	10,50 ^{10,87} _{10,13}	60,06 ^{62,16} _{57,96}	99,03 ^{102,49} _{95,56}	17,68 ^{18,30} _{17,07}	29,16 ^{30,18} _{28,14}
1-0S(4)	1,8919359	2,61 ^{2,96} _{2,26}	16,32 ^{18,49} _{14,16}	26,16 ^{29,62} _{22,69}	4,67 ^{5,28} _{4,05}	7,47 ^{8,47} _{6,48}
1-0S(5)	1,8357597	5,50 ^{5,70} _{5,30}	37,37 ^{38,73} _{36,01}	58,19 ^{60,31} _{56,07}	10,97 ^{11,37} _{10,58}	17,09 ^{17,71} _{16,47}
1-0S(7)	1,7479552	2,37 ^{2,54} _{2,20}	18,57 ^{19,92} _{17,23}	27,42 ^{29,40} _{25,44}	6,89 ^{7,38} _{6,39}	10,17 ^{10,90} _{9,43}
1-0O(3)	2,8025164	37,50 ^{38,39} _{36,61}	104,15 ^{106,63} _{101,67}	191,66 ^{196,23} _{187,09}	43,73 ^{44,78} _{42,69}	80,48 ^{82,40} _{78,56}
1-0O(4)	3,0038681	8,46 ^{8,66} _{8,26}	21,27 ^{21,77} _{20,77}	38,79 ^{39,70} _{37,88}	13,96 ^{14,29} _{13,63}	25,46 ^{26,06} _{24,86}
1-0O(5)	3,2349876	13,90 ^{14,12} _{13,68}	31,80 ^{32,31} _{31,29}	57,09 ^{58,00} _{56,18}	31,26 ^{31,76} _{30,76}	56,12 ^{57,01} _{55,22}
1-0O(7)	3,8074188	3,93 ^{4,06} _{3,80}	7,62 ^{7,86} _{7,37}	13,03 ^{13,45} _{12,61}	17,29 ^{17,84} _{16,73}	29,58 ^{30,52} _{28,63}
1-0O(8)	4,1624250	0,76 ^{0,86} _{0,66}	1,37 ^{1,55} _{1,20}	2,28 ^{2,57} _{1,99}	4,91 ^{5,54} _{4,28}	8,16 ^{9,21} _{7,11}
1-0O(9)	4,5754805	1,03 ^{1,00} _{1,00}	1,75 ^{1,81} _{1,70}	2,83 ^{2,93} _{2,74}	10,23 ^{10,57} _{9,88}	16,51 ^{17,06} _{15,95}
1-1S(9)	4,9540952	2,22 ^{2,31} _{2,13}	3,63 ^{3,78} _{3,49}	5,74 ^{5,96} _{5,51}	2,60 ^{2,71} _{2,50}	4,11 ^{4,27} _{3,95}
1-1S(11)	4,4166106	1,88 ^{1,94} _{1,82}	3,27 ^{3,37} _{3,17}	5,33 ^{5,49} _{5,18}	1,09 ^{1,12} _{1,05}	1,77 ^{1,82} _{1,72}
1-1S(12)	4,2236663	0,67 ^{0,73} _{0,61}	1,20 ^{1,31} _{1,09}	1,98 ^{2,16} _{1,81}	0,29 ^{0,32} _{0,27}	0,48 ^{0,53} _{0,44}
1-1S(13)	4,0676182	1,70 ^{1,83} _{1,57}	3,12 ^{3,36} _{2,89}	5,23 ^{5,63} _{4,83}	0,58 ^{0,63} _{0,54}	0,97 ^{1,05} _{0,90}
1-1S(14)	3,9416091	0,45 ^{0,49} _{0,41}	0,85 ^{0,93} _{0,78}	1,44 ^{1,57} _{1,31}	0,13 ^{0,14} _{0,11}	0,21 ^{0,23} _{0,19}
1-1S(15)	3,8405061	0,90 ^{0,94} _{0,87}	1,74 ^{1,80} _{1,67}	2,96 ^{3,07} _{2,86}	0,21 ^{0,22} _{0,20}	0,36 ^{0,37} _{0,35}
1-1S(16)	3,7604175	0,30 ^{0,33} _{0,27}	0,59 ^{0,65} _{0,53}	1,01 ^{1,11} _{0,91}	0,06 ^{0,07} _{0,05}	0,10 ^{0,11} _{0,09}
1-1S(17)	3,6983683	0,29 ^{0,35} _{0,23}	0,58 ^{0,70} _{0,46}	1,00 ^{1,21} _{0,79}	0,05 ^{0,06} _{0,04}	0,09 ^{0,11} _{0,07}
DF 2						
0-0S(8)	5,0531152	8,48 ^{8,62} _{8,34}	10,80 ^{10,97} _{10,63}	11,10 ^{11,28} _{10,93}	10,67 ^{10,84} _{10,50}	10,97 ^{11,15} _{10,79}
0-0S(9)	4,6946139	21,10 ^{20,54} _{20,66}	27,35 ^{27,92} _{26,77}	28,16 ^{28,75} _{27,57}	16,58 ^{16,23} _{16,23}	17,07 ^{17,42} _{16,71}
0-0S(10)	4,4097910	4,73 ^{4,89} _{4,57}	6,24 ^{6,45} _{6,02}	6,43 ^{6,65} _{6,21}	2,48 ^{2,59} _{2,39}	2,55 ^{2,64} _{2,47}
0-0S(11)	4,1810772	13,20 ^{13,74} _{12,66}	17,72 ^{18,44} _{16,99}	18,29 ^{19,04} _{17,54}	4,87 ^{5,06} _{4,67}	5,02 ^{5,23} _{4,82}
0-0S(12)	3,9961466	3,36 ^{3,54} _{3,18}	4,59 ^{4,84} _{4,33}	4,74 ^{5,00} _{4,48}	0,91 ^{0,96} _{0,86}	0,94 ^{1,00} _{0,89}
0-0S(13)	3,8461132	8,76 ^{9,16} _{8,36}	12,14 ^{12,70} _{11,58}	12,56 ^{13,13} _{11,98}	1,83 ^{1,91} _{1,74}	1,89 ^{1,98} _{1,80}
0-0S(15)	3,6261662	5,38 ^{5,48} _{5,27}	7,66 ^{7,80} _{7,51}	7,93 ^{8,08} _{7,78}	0,73 ^{0,74} _{0,72}	0,76 ^{0,77} _{0,74}
0-0S(17)	3,4858030	2,44 ^{2,54} _{2,34}	3,54 ^{3,68} _{3,40}	3,67 ^{3,82} _{3,53}	0,24 ^{0,25} _{0,23}	0,25 ^{0,26} _{0,24}
1-0Q(1)	2,4065919	64,00 ^{65,99} _{62,01}	121,54 ^{125,32} _{117,76}	126,46 ^{130,39} _{122,52}	43,09 ^{44,43} _{41,75}	44,83 ^{46,23} _{43,44}
1-0Q(2)	2,4134388	11,70 ^{12,48} _{10,92}	22,16 ^{23,64} _{20,68}	23,06 ^{24,60} _{21,52}	11,09 ^{11,83} _{10,35}	11,54 ^{12,31} _{10,77}
1-0Q(3)	2,4237297	23,70 ^{24,39} _{23,01}	44,70 ^{46,01} _{43,40}	46,57 ^{47,88} _{45,16}	24,27 ^{24,98} _{23,56}	25,26 ^{26,00} _{24,52}
1-0Q(4)	2,4374894	8,35 ^{8,82} _{7,82}	15,61 ^{16,55} _{14,67}	16,24 ^{17,22} _{15,27}	8,85 ^{9,38} _{8,31}	9,21 ^{9,76} _{8,65}
1-0Q(5)	2,4547514	18,10 ^{18,60} _{17,60}	33,73 ^{34,67} _{32,80}	35,11 ^{36,08} _{34,14}	19,75 ^{20,30} _{19,21}	20,56 ^{21,13} _{19,99}
1-0Q(6)	2,4755590	4,31 ^{4,48} _{4,14}	7,97 ^{8,28} _{7,66}	8,30 ^{8,62} _{7,97}	4,81 ^{5,00} _{4,63}	5,01 ^{5,21} _{4,82}
1-0Q(7)	2,4999655	9,71 ^{9,92} _{9,50}	17,80 ^{18,18} _{17,41}	18,53 ^{18,93} _{18,12}	11,08 ^{11,33} _{10,84}	11,54 ^{11,79} _{11,29}
1-0Q(9)	2,5598505	5,41 ^{5,72} _{5,10}	9,71 ^{10,26} _{9,15}	10,11 ^{10,68} _{9,53}	6,46 ^{6,82} _{6,09}	6,72 ^{7,11} _{6,34}
1-0S(0)	2,2232902	15,30 ^{15,59} _{15,01}	31,50 ^{32,09} _{30,91}	32,69 ^{33,30} _{32,07}	17,54 ^{17,87} _{17,21}	18,20 ^{18,54} _{17,86}
1-0S(1)	2,1218337	41,80 ^{43,04} _{40,56}	90,64 ^{93,32} _{87,95}	93,82 ^{96,61} _{91,04}	35,06 ^{36,10} _{34,02}	36,29 ^{37,37} _{35,22}
1-0S(2)	2,0337578	11,50 ^{11,90} _{11,10}	26,22 ^{27,12} _{25,31}	27,06 ^{27,99} _{26,12}	8,47 ^{8,77} _{8,18}	8,74 ^{9,05} _{8,44}
1-0S(3)	1,9575590	23,60 ^{24,32} _{22,88}	56,42 ^{58,15} _{54,70}	58,03 ^{59,80} _{56,26}	16,61 ^{17,12} _{16,11}	17,09 ^{17,61} _{16,56}
1-0S(4)	1,8919359	5,80 ^{5,98} _{5,62}	14,50 ^{14,96} _{14,04}	14,86 ^{15,33} _{14,38}	4,14 ^{4,28} _{4,01}	4,25 ^{4,38} _{4,11}
1-0S(5)	1,8357597	11,90 ^{12,38} _{11,42}	31,01 ^{32,26} _{29,75}	31,63 ^{32,93} _{30,36}	9,11 ^{9,48} _{8,74}	9,29 ^{9,67} _{8,92}
1-0S(7)	1,7479552	5,38 ^{5,52} _{5,24}	15,06 ^{15,44} _{14,67}	15,25 ^{15,64} _{14,86}	5,58 ^{5,73} _{5,44}	5,65 ^{5,80} _{5,51}
1-0O(3)	2,8025164	70,50 ^{72,46} _{68,54}	117,47 ^{120,73} _{114,20}	122,30 ^{125,70} _{118,90}	49,33 ^{50,70} _{47,95}	51,36 ^{52,78} _{49,93}
1-0O(4)	3,0038681	15,20 ^{15,60} _{14,80}	24,09 ^{24,72} _{23,47}	25,06 ^{25,72} _{24,41}	15,82 ^{16,23} _{15,40}	16,45 ^{16,88} _{16,02}
1-0O(5)	3,2349876	22,80 ^{23,17} _{22,43}	34,48 ^{35,04} _{33,92}	35,81 ^{36,39} _{35,24}	33,89 ^{34,44} _{33,34}	35,20 ^{35,77} _{34,63}
1-0O(7)	3,8074188	5,90 ^{6,16} _{5,64}	8,21 ^{8,57} _{7,85}	8,50 ^{8,87} _{8,12}	18,64 ^{19,46} _{17,82}	19,29 ^{20,13} _{18,44}
1-0O(8)	4,1624250	1,16 ^{1,24} _{1,08}	1,56 ^{1,67} _{1,45}	1,61 ^{1,73} _{1,49}	5,58 ^{5,98} _{5,18}	5,76 ^{6,18} _{5,35}

TABLE C.1 – suite.

Raie	λ (μm)	Intensité observée	Intensité corrigée de l'extinction ($\times 10^{-5}$ erg cm $^{-2}$ s $^{-1}$ sr $^{-1}$)		Densité de colonne (cm $^{-2}$)	
			Avant-plan	Mélange	Avant-plan	Mélange
1-0O(9)	4,5754805	1,54 ^{1,59} _{1,49}	2,01 ^{2,08} _{1,94}	2,07 ^{2,14} _{2,00}	11,71 ^{12,11} _{11,31}	12,07 ^{12,48} _{11,65}
1-1S(9)	4,9540952	3,68 ^{3,80} _{3,56}	4,71 ^{4,86} _{4,55}	4,84 ^{5,00} _{4,68}	3,37 ^{3,48} _{3,26}	3,47 ^{3,58} _{3,36}
1-1S(11)	4,4166106	3,39 ^{3,53} _{3,24}	4,47 ^{4,66} _{4,28}	4,61 ^{4,81} _{4,41}	1,48 ^{1,55} _{1,42}	1,53 ^{1,59} _{1,46}
1-1S(12)	4,2236663	1,03 ^{1,07} _{0,99}	1,38 ^{1,44} _{1,32}	1,42 ^{1,48} _{1,36}	0,34 ^{0,35} _{0,32}	0,35 ^{0,36} _{0,33}
1-1S(14)	3,9416091	0,76 ^{0,89} _{0,63}	1,04 ^{1,22} _{0,87}	1,08 ^{1,26} _{0,90}	0,15 ^{0,18} _{0,13}	0,16 ^{0,19} _{0,13}
1-1S(15)	3,8405061	1,51 ^{1,56} _{1,46}	2,09 ^{2,16} _{2,02}	2,17 ^{2,24} _{2,09}	0,25 ^{0,26} _{0,25}	0,26 ^{0,27} _{0,25}
1-1S(16)	3,7604175	0,51 ^{0,53} _{0,49}	0,71 ^{0,75} _{0,68}	0,74 ^{0,77} _{0,70}	0,07 ^{0,08} _{0,07}	0,08 ^{0,08} _{0,07}
DF 3						
0-0S(8)	5,0531152	10,40 ^{10,54} _{10,26}	11,86 ^{12,02} _{11,70}	11,90 ^{12,06} _{11,74}	11,72 ^{11,88} _{11,56}	11,75 ^{11,91} _{11,59}
0-0S(9)	4,6946139	24,70 ^{25,19} _{24,21}	28,45 ^{29,02} _{27,88}	28,53 ^{29,10} _{27,96}	17,24 ^{17,59} _{16,90}	17,29 ^{17,64} _{16,94}
0-0S(10)	4,4097910	5,78 ^{5,96} _{5,60}	6,72 ^{6,93} _{6,52}	6,74 ^{6,95} _{6,54}	2,67 ^{2,75} _{2,59}	2,68 ^{2,76} _{2,59}
0-0S(11)	4,1810772	14,50 ^{15,07} _{13,93}	17,02 ^{17,69} _{16,35}	17,07 ^{17,74} _{16,40}	4,67 ^{4,86} _{4,49}	4,69 ^{4,91} _{4,50}
0-0S(12)	3,9961466	3,70 ^{3,84} _{3,56}	4,38 ^{4,54} _{4,22}	4,40 ^{4,56} _{4,24}	0,87 ^{0,91} _{0,84}	0,88 ^{0,91} _{0,84}
0-0S(13)	3,8461132	9,30 ^{9,69} _{8,91}	11,11 ^{11,57} _{10,65}	11,15 ^{11,61} _{10,68}	1,67 ^{1,74} _{1,60}	1,68 ^{1,75} _{1,61}
0-0S(14)	3,7244259	3,30 ^{3,36} _{3,24}	3,97 ^{4,04} _{3,90}	3,99 ^{4,06} _{3,92}	0,47 ^{0,48} _{0,46}	0,47 ^{0,48} _{0,46}
0-0S(15)	3,6261662	5,34 ^{5,42} _{5,26}	6,47 ^{6,57} _{6,37}	6,49 ^{6,59} _{6,39}	0,62 ^{0,63} _{0,61}	0,62 ^{0,63} _{0,61}
0-0S(16)	3,5475872	1,18 ^{1,25} _{1,11}	1,44 ^{1,53} _{1,35}	1,44 ^{1,53} _{1,35}	0,11 ^{0,12} _{0,11}	0,11 ^{0,12} _{0,11}
0-0S(17)	3,4858030	2,29 ^{2,39} _{2,19}	2,80 ^{2,92} _{2,69}	2,81 ^{2,93} _{2,70}	0,19 ^{0,20} _{0,18}	0,19 ^{0,20} _{0,18}
0-0S(19)	3,4041629	1,15 ^{1,26} _{1,04}	1,42 ^{1,56} _{1,28}	1,42 ^{1,56} _{1,28}	0,07 ^{0,08} _{0,07}	0,08 ^{0,08} _{0,07}
1-0Q(1)	2,4065919	75,90 ^{78,05} _{73,75}	107,62 ^{110,67} _{104,57}	108,04 ^{111,10} _{104,98}	38,16 ^{39,24} _{37,08}	38,31 ^{39,39} _{37,22}
1-0Q(4)	2,4374894	5,98 ^{6,30} _{5,65}	8,42 ^{8,88} _{7,97}	8,46 ^{8,92} _{8,00}	4,77 ^{5,03} _{4,51}	4,79 ^{5,05} _{4,53}
1-0Q(5)	2,4547514	17,10 ^{17,67} _{16,53}	24,00 ^{24,80} _{23,20}	24,09 ^{24,89} _{23,30}	14,05 ^{14,52} _{13,59}	14,11 ^{14,58} _{13,64}
1-0Q(6)	2,4755590	4,02 ^{4,15} _{3,89}	5,62 ^{5,79} _{5,44}	5,64 ^{5,82} _{5,46}	3,39 ^{3,50} _{3,29}	3,41 ^{3,51} _{3,30}
1-0Q(7)	2,4999655	9,18 ^{9,36} _{9,00}	12,77 ^{13,02} _{12,51}	12,82 ^{13,07} _{12,56}	7,95 ^{8,11} _{7,79}	7,98 ^{8,14} _{7,82}
1-0Q(9)	2,5598505	5,48 ^{5,68} _{5,28}	7,53 ^{7,81} _{7,26}	7,56 ^{7,84} _{7,29}	5,01 ^{5,20} _{4,83}	5,03 ^{5,22} _{4,84}
1-0S(0)	2,2232902	15,60 ^{16,06} _{15,14}	23,11 ^{23,79} _{22,44}	23,20 ^{23,88} _{22,53}	12,87 ^{13,25} _{12,49}	12,92 ^{13,29} _{12,54}
1-0S(1)	2,1218337	43,10 ^{44,24} _{41,96}	65,69 ^{67,43} _{63,95}	65,91 ^{67,65} _{64,17}	25,41 ^{26,08} _{24,74}	25,50 ^{26,17} _{24,82}
1-0S(2)	2,0337578	11,80 ^{12,14} _{11,46}	18,48 ^{19,01} _{17,95}	18,54 ^{19,07} _{18,01}	5,97 ^{6,14} _{5,80}	5,99 ^{6,16} _{5,82}
1-0S(3)	1,9575590	24,70 ^{25,56} _{23,84}	39,70 ^{41,09} _{38,31}	39,81 ^{41,20} _{38,42}	11,69 ^{12,10} _{11,28}	11,72 ^{12,13} _{11,31}
1-0S(4)	1,8919359	5,69 ^{6,03} _{5,35}	9,37 ^{9,93} _{8,81}	9,39 ^{9,95} _{8,83}	2,68 ^{2,84} _{2,52}	2,68 ^{2,84} _{2,52}
1-0S(5)	1,8357597	12,70 ^{13,31} _{12,09}	21,39 ^{22,42} _{20,37}	21,43 ^{22,46} _{20,41}	6,28 ^{6,58} _{5,98}	6,30 ^{6,60} _{5,99}
1-0O(3)	2,8025164	76,60 ^{78,36} _{74,84}	101,15 ^{103,47} _{98,82}	101,55 ^{103,88} _{99,21}	42,47 ^{43,45} _{41,50}	42,64 ^{43,62} _{41,66}
1-0O(4)	3,0038681	13,90 ^{14,29} _{13,51}	17,86 ^{18,36} _{17,36}	17,93 ^{18,43} _{17,43}	11,73 ^{12,05} _{11,40}	11,77 ^{12,10} _{11,44}
1-0O(5)	3,2349876	20,40 ^{20,71} _{20,09}	25,55 ^{25,94} _{25,16}	25,65 ^{26,04} _{25,26}	25,12 ^{25,50} _{24,73}	25,21 ^{25,60} _{24,82}
1-0O(7)	3,8074188	5,97 ^{6,16} _{5,78}	7,15 ^{7,38} _{6,92}	7,17 ^{7,40} _{6,94}	16,23 ^{16,75} _{15,70}	16,28 ^{16,80} _{15,76}
1-0O(8)	4,1624250	1,26 ^{1,32} _{1,20}	1,48 ^{1,56} _{1,40}	1,48 ^{1,56} _{1,41}	5,30 ^{5,57} _{5,03}	5,32 ^{5,59} _{5,04}
1-0O(9)	4,5754805	1,66 ^{1,73} _{1,59}	1,92 ^{2,00} _{1,83}	1,92 ^{2,01} _{1,84}	11,18 ^{11,68} _{10,69}	11,22 ^{11,71} _{10,72}
1-1S(9)	4,9540952	4,38 ^{4,54} _{4,22}	5,01 ^{5,19} _{4,83}	5,02 ^{5,20} _{4,84}	3,59 ^{3,72} _{3,46}	3,60 ^{3,73} _{3,47}
1-1S(11)	4,4166106	3,44 ^{3,55} _{3,33}	4,00 ^{4,13} _{3,87}	4,01 ^{4,14} _{3,88}	1,33 ^{1,37} _{1,29}	1,33 ^{1,37} _{1,29}
1-1S(12)	4,2236663	1,12 ^{1,18} _{1,06}	1,31 ^{1,39} _{1,24}	1,32 ^{1,39} _{1,24}	0,32 ^{0,34} _{0,30}	0,32 ^{0,34} _{0,30}
1-1S(13)	4,0676182	1,94 ^{2,40} _{1,48}	2,29 ^{2,84} _{1,74}	2,30 ^{2,85} _{1,75}	0,43 ^{0,53} _{0,32}	0,43 ^{0,53} _{0,33}
1-1S(14)	3,9416091	0,69 ^{0,75} _{0,63}	0,82 ^{0,89} _{0,75}	0,82 ^{0,89} _{0,75}	0,12 ^{0,13} _{0,11}	0,12 ^{0,13} _{0,11}
1-1S(15)	3,8405061	1,34 ^{1,42} _{1,26}	1,60 ^{1,70} _{1,51}	1,61 ^{1,70} _{1,51}	0,19 ^{0,21} _{0,18}	0,19 ^{0,21} _{0,18}
1-1S(16)	3,7604175	0,47 ^{0,53} _{0,41}	0,57 ^{0,64} _{0,50}	0,57 ^{0,64} _{0,50}	0,06 ^{0,06} _{0,05}	0,06 ^{0,06} _{0,05}
1-1S(17)	3,6983683	0,70 ^{0,77} _{0,64}	0,85 ^{0,92} _{0,77}	0,85 ^{0,93} _{0,77}	0,07 ^{0,08} _{0,07}	0,08 ^{0,08} _{0,07}

TABLE C.2 – Intensité intégrée des composantes des AIB dans les cinq régions (10^{-3} erg cm $^{-2}$ s $^{-1}$ sr $^{-1}$).

Band	H II region	Atomic PDR	DF1	DF2	DF3
PAHFIT					
3,23	0	0	0	0	0
3,29	10,58	45,27	30,43	24,09	15,50
3,39	0,30	1,59	1,05	0,78	0,47
3,40	1,01	3,21	2,86	3,35	2,73
3,42	0,15	0,51	0,32	0,33	0,25
3,46	1,61	6,94	5,16	4,79	3,71
3,51	0,39	1,93	1,43	1,28	1,08
3,56	0,14	0,64	0,53	0,45	0
Décomposition Gaussienne					
3,25	0,85	3,48	2,23	1,71	1,24
3,29	6,46	28,63	18,84	14,50	9,31
3,33	0,32	1,44	1,00	0,60	0,37
3,39	0,08	0,63	0,37	0,25	0,15
3,40	0,51	1,53	1,42	1,60	1,27
3,42	0,09	0,25	0,18	0,24	0,20
3,46	0,27	1,06	0,84	0,75	0,60
3,51	0,14	0,71	0,50	0,44	0,35
3,56	0,06	0,21	0,17	0,09	0,08
plat	3,89	16,60	11,46	11,00	8,30
PAHs deutérés					
4,64	0,10	0,35	0,22	0,09	0,05
4,75	0,04	0,05	0,09	0,08	0,06

TABLE C.3 – Intensité intégrée des raies d'émission dans les cinq régions en unités de $\times 10^{-5}$ erg cm $^{-2}$ s $^{-1}$ sr $^{-1}$.

Raie	λ (μ m)	H II region	Atomic PDR	DF1	DF2	DF3
H I 3-7	1,00524	341,71 \pm 8,62	256,34 \pm 5,11	141,51 \pm 2,43	125,94 \pm 2,56	95,30 \pm 1,90
He I	1,08340	1820,42 \pm 47,68	1112,43 \pm 17,34	684,11 \pm 7,33	655,44 \pm 8,22	549,92 \pm 6,84
H I 3-6	1,09414	617,15 \pm 15,88	458,51 \pm 9,61	252,97 \pm 4,85	223,91 \pm 4,32	171,09 \pm 3,20
O I	1,12909	5,87 \pm 0,45	16,12 \pm 0,64	3,08 \pm 0,59	3,18 \pm 0,38	2,23 \pm 0,25
N I	1,12967	1,11 \pm 0,44	2,88 \pm 0,63	0,52 \pm 0,59	0,14 \pm 0,37	0,33 \pm 0,25
He I	1,19727	14,42 \pm 0,29	9,64 \pm 0,19	5,88 \pm 0,11	5,24 \pm 0,21	3,14 \pm 0,14
N I	1,22928	1,15 \pm 0,14	4,30 \pm 0,45	0,93 \pm 0,34	0,75 \pm 0,21	0,39 \pm 0,17
N I	1,23010	0,74 \pm 0,14	1,40 \pm 0,44	0,88 \pm 0,34	0,26 \pm 0,21	0,45 \pm 0,17
[Fe II]	1,25253	0,00 \pm 0,00	0,00 \pm 0,00	0,00 \pm 0,00	1,04 \pm 1,54	0,00 \pm 0,00
H I 3-5	1,28220	1251,93 \pm 25,40	923,66 \pm 15,53	507,22 \pm 7,17	450,69 \pm 6,84	342,21 \pm 4,91

TABLE C.3 – suite.

Raie	λ (μm)	H II region	Atomic PDR	DF1	DF2	DF3
O I	1,31690	17,20 \pm 0,26	52,71 \pm 0,47	9,21 \pm 0,24	7,05 \pm 0,29	5,20 \pm 0,31
H ₂ v= 3,J=14->v= 1,J=14	1,53402	4,41 \pm 2,79	5,56 \pm 2,03	1,48 \pm 1,34	0,89 \pm 0,83	0,86 \pm 0,58
[Fe II]	1,64409	29,96 \pm 0,66	32,44 \pm 0,63	9,53 \pm 0,43	6,13 \pm 0,46	5,44 \pm 0,25
He I	1,68008	0,98 \pm 1,24	0,65 \pm 0,83	0,00 \pm 0,00	0,36 \pm 0,57	0,00 \pm 0,00
H I 4-11	1,68112	64,84 \pm 1,46	48,59 \pm 0,93	25,31 \pm 0,35	22,13 \pm 0,62	14,83 \pm 0,77
He I	1,70071	27,34 \pm 0,49	16,91 \pm 0,33	10,70 \pm 0,25	8,22 \pm 0,29	5,15 \pm 0,22
He I	1,73560	1,05 \pm 1,36	0,76 \pm 0,97	0,92 \pm 0,42	1,17 \pm 0,46	0,39 \pm 0,37
H I 4-10	1,73668	85,94 \pm 1,53	64,55 \pm 0,93	34,72 \pm 0,50	29,78 \pm 0,52	22,55 \pm 0,38
He I	1,81677	1,71 \pm 1,50	0,79 \pm 0,98	1,02 \pm 0,67	0,00 \pm -0,00	0,00 \pm -0,00
H I 4-9	1,81792	119,87 \pm 2,25	86,38 \pm 1,32	46,72 \pm 0,82	41,74 \pm 0,57	32,32 \pm 0,54
H ₂ v=11,J= 2->v= 8,J= 4	1,81831	0,00 \pm -0,00	0,00 \pm -0,00	0,00 \pm -0,00	0,00 \pm -0,00	0,00 \pm -0,00
He I	1,86906	143,24 \pm 3,36	89,27 \pm 1,68	56,68 \pm 1,09	48,82 \pm 1,09	38,39 \pm 0,73
He I	1,87028	47,72 \pm 2,61	29,95 \pm 1,38	19,11 \pm 0,92	16,07 \pm 0,90	12,82 \pm 0,65
H I 3-4	1,87564	3122,79 \pm 96,93	2259,21 \pm 59,12	1232,16 \pm 28,01	1092,97 \pm 26,29	855,70 \pm 19,10
He I	2,05873	271,15 \pm 4,70	141,77 \pm 1,91	85,27 \pm 1,06	71,11 \pm 0,98	56,35 \pm 0,65
He I	2,06070	2,78 \pm 1,89	1,90 \pm 1,00	1,27 \pm 0,63	0,43 \pm 0,63	0,17 \pm 0,43
He I	2,11264	8,30 \pm 0,15	4,71 \pm 0,14	2,74 \pm 0,13	2,48 \pm 0,16	1,80 \pm 0,13
He I	2,11383	2,81 \pm 0,15	1,71 \pm 0,13	1,11 \pm 0,13	0,89 \pm 0,16	0,70 \pm 0,13
H ₂ v= 1,J= 3->v= 0,J= 1	2,12194	11,44 \pm 0,34	8,68 \pm 0,22	18,58 \pm 0,50	41,69 \pm 1,11	42,93 \pm 1,07
H ₂ v=10,J=11->v= 8,J= 9	2,16139	5,21 \pm 0,15	3,23 \pm 0,04	1,95 \pm 0,10	1,44 \pm 0,15	1,08 \pm 0,11
He I	2,16232	1,80 \pm 0,14	1,00 \pm 0,03	0,67 \pm 0,10	0,77 \pm 0,14	0,55 \pm 0,10
He I	2,16475	10,53 \pm 2,42	6,26 \pm 1,44	4,40 \pm 0,82	3,48 \pm 0,93	3,02 \pm 0,62
H I 4-7	2,16616	277,83 \pm 5,32	197,47 \pm 2,88	104,13 \pm 1,38	92,97 \pm 1,47	74,04 \pm 0,96
[Fe III]	2,21875	7,17 \pm 0,15	3,95 \pm 0,10	1,73 \pm 0,16	1,56 \pm 0,25	1,02 \pm 0,15
H ₂ v= 2,J= 3->v= 1,J= 1	2,24784	3,25 \pm 0,15	2,60 \pm 0,10	4,33 \pm 0,15	9,64 \pm 0,34	8,54 \pm 0,25
He I	2,62597	478,10 \pm 10,31	334,79 \pm 4,67	166,18 \pm 2,74	146,63 \pm 4,03	119,72 \pm 3,58
H ₂ v= 2,J= 6->v= 1,J= 6	2,62698	6,28 \pm 4,50	6,20 \pm 2,39	15,11 \pm 1,66	26,37 \pm 2,83	30,93 \pm 2,65
He I	3,03778	0,93 \pm 1,64	0,15 \pm 1,08	0,00 \pm 0,00	0,00 \pm 0,54	0,17 \pm 0,43
H ₂ v= 1,J=18->v= 0,J=18	3,03890	0,00 \pm 0,00	0,00 \pm 0,00	0,00 \pm 0,00	0,00 \pm 0,00	0,00 \pm 0,00
H I 5-10	3,03920	53,71 \pm 2,05	37,25 \pm 1,22	17,65 \pm 0,55	15,58 \pm 0,51	12,02 \pm 0,42
[Fe III]	3,22960	2,92 \pm 0,41	2,00 \pm 0,41	0,85 \pm 0,29	0,48 \pm 0,38	0,65 \pm 0,24
H ₂ v= 1,J= 3->v= 0,J= 5	3,23512	4,63 \pm 0,33	4,99 \pm 0,41	13,84 \pm 0,33	22,30 \pm 0,40	20,06 \pm 0,31
H I 5-9	3,29702	76,38 \pm 0,66	57,17 \pm 0,90	26,37 \pm 0,56	22,71 \pm 0,56	18,90 \pm 0,41
He I	3,73879	4,70 \pm 2,13	2,06 \pm 1,42	1,42 \pm 0,77	1,15 \pm 0,75	0,93 \pm 0,63
H I 5-8	3,74061	110,29 \pm 4,04	78,33 \pm 2,31	34,70 \pm 1,03	30,55 \pm 0,96	25,85 \pm 0,80
He I	4,04918	41,82 \pm 10,06	22,76 \pm 2,71	13,48 \pm 3,27	11,92 \pm 3,08	9,69 \pm 2,50
H I 4-5	4,05244	789,67 \pm 34,29	539,66 \pm 8,08	247,90 \pm 8,21	211,08 \pm 7,30	182,58 \pm 5,94
He I	4,69492	6,32 \pm 0,18	6,10 \pm 0,15	14,99 \pm 0,38	21,43 \pm 0,66	25,04 \pm 0,78

TABLE C.4 – Intensité de C I dans les spectres des cinq régions.

λ (1)	$I_{Obs.}$ (2)	$g(\tau_{p,\lambda}, \tau_{f,\lambda})$ (3)	$I_{corr.}$ (4)
H II region			
0,984	1,05±0,02	0,170	6,20±0,11
1,0696	0,28±0,02	0,203	1,41±0,12
1,1759	0,23±0,04	0,248	0,94±0,14
1,0696/1,1759	1,22±0,21		1,50±0,26
0,984/1,0696	3,69±0,32		4,41±0,38
Atomic region			
0,984	1,32±0,02	0,083	15,81±0,24
1,0696	0,37±0,03	0,101	3,68±0,28
1,1759	0,41±0,02	0,128	3,23±0,18
1,0696/1,1759	0,90±0,08		1,14±0,11
0,984/1,0696	3,53±0,27		4,30±0,33
DF1			
0,984	0,88±0,01	0,202	4,35±0,07
1,0696	0,22±0,04	0,237	0,93±0,18
1,1759	0,30±0,04	0,284	1,07±0,15
1,0696/1,1759	0,73±0,18		0,87±0,21
0,984/1,0696	3,99±0,77		4,67±0,90
DF2			
0,984	1,13±0,02	0,201	5,63±0,09
1,0696	0,20±0,03	0,236	0,86±0,12
1,1759	0,26±0,04	0,283	0,92±0,15
1,0696/1,1759	0,78±0,17		0,93±0,20
0,984/1,0696	5,60±0,80		6,56±0,94
DF3			
0,984	1,75±0,02	0,184	9,53±0,10
1,0696	0,34±0,02	0,217	1,56±0,09
1,1759	0,21±0,05	0,264	0,79±0,17
1,0696/1,1759	1,63±0,37		1,98±0,45
0,984/1,0696	5,15±0,31		6,09±0,36

Notes. Colonne : (1) Longueur d'onde (μm). L'intensité 0,984 est la somme des intensités des raies 0,9827 et 0,9854 μm , l'intensité 1,0696 est la somme des intensités des raies 1,0687 et 1,0695 μm et l'intensité 1,1759 est la somme des intensités des raies 1,1752 et 1,1758 μm ; (2) intensité observée ($10^{-4} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$); (3) $g(\tau_{p,\lambda}, \tau_{f,\lambda})$ (4) intensité corrigée de l'extinction ($10^{-4} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$).

C.2 Intensité des raies détectées dans l'infrarouge moyen avec MIRI-MRS (Van De Putte et al. 2024)

TABLE C.5 – Identification, décalage en longueur d'onde mesurée et mesure de l'intensité^a I avec incertitude^b σ des raies les plus importantes dans chaque région.

Espèces	Transition	λ_{rest} (μm)	$\Delta\lambda_{\text{obs}}$ (10^{-4} μm)	A (s^{-1})	E_l (cm^{-1})	E_u (cm^{-1})	I_{HII}	σ_{HII}	I_{Atomic}	σ_{Atomic} (10^{-5} $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{sr}^{-1}$)	I_{DFI}	σ_{DFI}	I_{DFE}	σ_{DFE}	I_{DF3}	σ_{DF3}
H I	7-23	4,9237	2	3,62e+02	107440	109471	1,85	0,10	1,16	0,17	0,58	0,06	0,55	0,32	0,36	0,25
UID	-	4,9280	0	-	-	-	-	-	-	-	0,23	0,17	0,46	0,34	0,42	0,22
H ₂	1-1 S(9)	4,9541	3	4,37e-07	8908	10927	0,69	0,11	0,78	0,12	1,54	0,09	2,72	0,10	2,38	0,09
UID	-	4,9680	0	-	-	-	-	-	-	-	0,20	0,22	0,28	0,14	0,28	0,14
H I	7-22	4,9709	2	4,57e+02	107440	109452	2,13	0,01	1,70	0,06	0,71	0,13	0,38	0,05	0,39	0,14
H I	7-21	5,0261	1	5,82e+02	107440	109430	2,50	0,09	1,93	0,19	0,73	0,02	0,56	0,15	0,78	0,10
H ₂	0-0 S(8)	5,0531	3	3,24e-07	4052	6031	2,48	0,06	2,35	0,09	4,66	0,10	7,12	0,05	7,38	0,17
H I	7-20	5,0913	2	7,52e+02	107440	109404	2,75	0,07	2,02	0,18	0,89	0,11	0,82	0,15	0,63	0,22
H I	6-10	5,1287	2	3,69e+04	106632	108582	33,66	0,13	25,58	0,35	10,24	0,13	8,92	0,13	7,46	0,16
H I	7-19	5,1693	1	9,85e+02	107440	109375	3,45	0,08	2,21	0,19	1,02	0,27	0,82	0,19	0,97	0,30
UID	-	5,2400	0	-	-	-	3,76	0,11	2,00	0,26	-	-	-	-	-	-
H I	7-18	5,2637	1	1,31e+03	107440	109340	3,60	0,21	2,66	0,23	1,02	0,04	1,10	0,13	0,87	0,05
H ₂	1-1 S(8)	5,3300	2	2,92e-07	8008	9884	-	-	-	-	0,35	0,23	0,91	0,03	0,78	0,07
Fe II	d^6D-d^4F 9/2 - 9/2	5,3402	3	-	0	1873	20,43	0,02	50,52	0,40	22,48	0,53	16,45	0,18	6,76	0,11
H I	7-17	5,3798	3	1,78e+03	107440	109299	4,62	0,10	3,18	0,22	1,29	0,20	1,16	0,07	1,00	0,10
H ₂	0-0 S(7)	5,5112	4	2,00e-07	3187	5002	11,16	0,45	11,43	0,23	27,17	0,13	42,13	0,11	39,45	0,26
H I	7-16	5,5252	2	2,47e+03	107440	109250	5,40	0,16	4,23	0,12	1,83	0,13	1,84	0,02	1,35	0,04
UID	-	5,5515	0	-	-	-	-	-	-	-	0,76	0,18	1,78	0,07	-	-
UID	-	5,5960	0	-	-	-	1,33	0,19	0,14	0,21	-	-	-	-	-	-
UID	-	5,6280	0	-	-	-	0,67	0,14	-	-	-	-	-	-	-	-
UID	-	5,6340	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
UID	-	5,6580	0	-	-	-	0,83	0,06	-	-	0,19	0,31	0,46	0,27	0,20	0,11
H I	7-15	5,7115	1	3,52e+03	107440	109191	6,48	0,22	4,46	0,35	1,74	0,27	1,80	0,15	1,51	0,09
UID	-	5,7400	0	-	-	-	3,17	0,27	1,76	0,33	0,46	0,28	0,58	0,14	0,49	0,09
H ₂	1-1 S(7)	5,8109	4	1,82e-07	7188	8908	0,42	0,11	0,07	0,32	1,07	0,30	2,64	0,10	2,10	0,16
H I	6-9	5,9082	1	7,06e+04	106632	108325	45,15	0,62	34,98	0,78	13,38	0,46	11,73	0,32	9,92	0,14
H I	7-14	5,9568	1	5,16e+03	107440	109119	8,14	0,12	6,43	0,23	2,54	0,16	2,05	0,20	1,75	0,07
H ₂	0-0 S(6)	6,1086	4	1,14e-07	2415	4052	5,67	0,32	5,63	0,57	15,81	0,88	25,42	0,30	22,03	0,23
H I	7-13	6,2919	2	7,85e+03	107440	109030	9,39	0,71	5,50	1,50	1,78	0,38	2,01	0,31	1,85	0,23
H I	8-29	6,3159	4	9,84e+01	107965	109548	0,56	0,60	-	-	-	-	-	-	-	-
H I	8-28	6,3540	2	1,18e+02	107965	109539	0,81	0,57	-	-	-	-	-	-	-	-
UID	-	6,3660	0	-	-	-	0,59	0,16	-	-	-	-	-	-	-	-
H I	8-27	6,3969	0	1,42e+02	107965	109528	0,79	0,10	-	-	-	-	-	-	-	-
UID	-	6,4120	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
H ₂	1-1 S(6)	6,4383	3	1,05e-07	6454	8008	0,24	0,14	0,19	0,25	1,77	0,64	2,13	0,38	0,82	0,20
H I	8-26	6,4455	2	1,73e+02	107965	109516	0,84	0,03	-	-	0,09	0,63	0,32	0,23	0,30	0,14

TABLE C.5 – suite.

Espèces	Transition	λ_{rest} (μm)	$\Delta\lambda_{\text{obs}}$ ($10^{-4}\mu\text{m}$)	A (s^{-1})	E_l (cm^{-1})	E_u (cm^{-1})	$I_{\text{H}\alpha}$	$\sigma_{\text{H}\alpha}$	I_{Atomic}	σ_{Atomic} ($10^{-5}\text{ erg cm}^{-2}\text{ s}^{-1}\text{ sr}^{-1}$)	I_{DFI}	σ_{DFI}	I_{DF2}	σ_{DF2}	I_{DF3}	σ_{DF3}
UID		6,4976	0	–	–	–	0,67	0,28	2,60	0,41	–	–	–	–	–	–
H I	8-25	6,5010	1	2,12e+02	107965	109503	0,93	0,12	1,11	0,40	0,38	0,08	0,14	0,10	0,26	0,07
H I	8-24	6,5647	2	2,63e+02	107965	109488	1,23	0,15	0,82	0,16	0,05	0,11	0,12	0,10	0,13	0,10
Ni II	$2D-2D\ 5/2-3/2$	6,6360	3	5,54e+02	0	1507	3,70	0,22	17,96	0,83	5,57	0,67	4,65	0,48	1,44	0,26
H I	8-23	6,6384	-10	3,28e+02	107965	109471	0,78	0,34	–	–	–	–	–	–	–	–
He I	multiple	6,7217	1	–	195114	196601	1,30	0,15	3,23	0,26	1,69	0,17	1,15	0,09	0,54	0,02
H I	8-22	6,7245	4	4,15e+02	107965	109452	1,38	0,10	1,14	0,07	0,48	0,14	0,37	0,09	0,40	0,03
H I	7-12	6,7720	2	1,25e+04	107440	108917	12,82	0,20	9,30	0,37	3,23	0,35	2,66	0,30	2,41	0,21
H I	8-21	6,8259	2	5,31e+02	107965	109430	1,34	0,16	0,26	0,55	–	–	–	–	–	–
UID		6,8590	0	–	–	–	–	–	3,38	0,40	–	–	–	–	–	–
H ₂	0-0 S(5)	6,9095	3	5,88e-08	1740	3187	29,93	0,43	29,75	0,83	98,77	1,11	161,79	1,11	137,70	1,08
H I	8-20	6,9468	0	6,89e+02	107965	109404	2,18	1,57	1,38	1,89	0,31	0,76	0,28	0,58	0,57	0,64
Ar II	$2p-2p\ 3/2-1/2$	6,9853	4	4,23e-02	0	1432	1105,30	10,23	1423,34	8,85	174,53	1,25	167,85	0,99	147,86	0,94
H I	8-19	7,0927	3	9,07e+02	107965	109375	2,41	0,22	–	–	–	–	–	–	–	–
H I	8-18	7,2717	4	1,22e+03	107965	109340	2,62	0,13	1,09	0,53	0,09	0,22	0,18	0,29	0,20	0,20
H ₂	1-1 S(5)	7,2801	4	5,44e-08	5814	7187	0,16	0,19	0,12	0,79	0,40	0,31	0,91	0,43	0,66	0,28
Ni III	$3F-3F\ 4-3$	7,3492	35	6,50e-02	0	1361	12,66	0,19	7,54	0,52	3,53	0,38	2,78	0,21	2,59	0,21
He I	$3D-3F^o$ multiplet	7,4334	3	–	193917	195262	0,40	0,02	–	–	–	–	–	–	–	–
H I	5-6	7,4599	2	1,02e+06	105292	106632	237,55	0,71	185,67	1,39	69,24	0,63	61,44	0,23	50,09	0,13
H I	8-17	7,4951	4	1,66e+03	107965	109299	1,48	0,52	–	–	–	–	–	–	–	–
H I	6-8	7,5025	4	1,56e+05	106632	107965	64,75	0,49	48,65	1,36	18,14	0,74	16,22	0,42	13,29	0,22
H I	7-11	7,5081	3	2,12e+04	107440	108772	15,37	0,81	11,08	3,11	3,95	2,03	3,73	1,47	3,09	0,60
H I	8-16	7,7804	2	2,33e+03	107965	109250	4,21	0,28	5,03	1,20	–	–	–	–	–	–
UID		7,8780	0	–	–	–	2,54	0,41	–	–	–	–	–	–	–	–
H ₂	0-0 S(4)	8,0250	5	2,64e-08	1169	2415	16,95	0,16	16,26	0,64	57,39	0,47	96,98	0,68	85,43	0,34
H I	8-15	8,1549	4	3,36e+03	107965	109191	4,85	0,13	3,45	0,61	1,36	0,36	1,31	0,37	0,88	0,18
H I	9-27	8,3084	0	1,30e+02	108325	109528	0,92	0,15	–	–	–	–	–	–	–	–
H I	9-26	8,3907	4	1,59e+02	108325	109516	0,54	0,11	–	–	–	–	–	–	–	–
UID		8,4095	0	–	–	–	0,76	0,31	–	–	–	–	–	–	–	–
H I	9-25	8,4849	3	1,95e+02	108325	109503	0,57	0,40	–	–	–	–	–	–	–	–
H I	9-24	8,5938	-4	2,42e+02	108325	109488	1,04	0,48	–	–	–	–	–	–	–	–
H I	8-14	8,6645	3	5,01e+03	107965	109119	4,38	0,55	2,75	0,95	–	–	–	–	–	–
H I	9-23	8,7206	3	3,04e+02	108325	109471	0,74	0,33	–	–	–	–	0,19	0,53	0,26	0,44
H I	7-10	8,7601	3	3,90e+04	107440	108582	24,65	0,53	18,23	0,54	8,08	0,66	6,76	0,65	5,25	0,35
H I	9-22	8,8697	5	3,85e+02	108325	109452	0,72	0,24	–	–	–	–	–	–	–	–
Ar III	$3P-3P\ 2-1$	8,9914	-1	3,10e-02	0	1112	1466,00	1,67	795,10	1,49	489,49	0,92	413,35	0,68	333,44	0,42
H I	9-21	9,0470	4	4,95e+02	108325	109430	0,76	0,65	0,40	0,63	–	–	–	–	–	–
H I	9-20	9,2605	1	6,45e+02	108325	109404	0,81	0,20	0,58	0,07	0,47	0,11	0,43	0,06	0,30	0,08

TABLE C.5 – suite.

Espèces	Transition	λ_{rest} (μm)	$\Delta\lambda_{\text{obs}}$ ($10^{-4}\mu\text{m}$)	A	E_l (cm^{-1})	E_u (cm^{-1})	$I_{\text{H}\alpha}$	$\sigma_{\text{H}\alpha}$	I_{Atomic}	σ_{Atomic} ($10^{-5} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$)	I_{DF1}	σ_{DF1}	I_{DF2}	σ_{DF2}	I_{DF3}	σ_{DF3}
H I	8-13	9,3920	4	7,80e+03	107965	109030	7,22	0,29	5,24	0,08	2,31	0,14	2,09	0,15	1,64	0,13
H I	9-19	9,5217	4	8,56e+02	108325	109375	0,83	0,56	0,68	0,41	—	—	—	—	—	—
H ₂	0-0 S(3)	9,6649	8	9,84e+09	705	1740	38,46	0,21	22,03	0,47	63,15	0,32	199,96	0,16	148,41	0,17
H I	9-18	9,8470	9	1,16e+03	108325	109340	1,42	0,31	0,99	0,29	—	—	—	—	—	—
H I	9-17	10,2613	5	1,60e+03	108325	109299	2,60	0,25	1,91	0,33	0,84	0,18	0,67	0,12	0,59	0,13
UID	—	10,3845	0	—	—	—	1,40	0,16	0,46	0,19	0,07	0,20	0,29	0,08	0,08	0,11
S IV	$2p^0 - 2p^0 1/2 - 3/2$	10,5105	2	7,30e+03	0	951	492,10	0,56	413,84	0,78	271,81	0,56	251,25	0,39	190,24	0,30
Ni II	$4F - 4F 9/2 - 7/2$	10,6822	8	2,71e+02	8394	9330	2,20	0,40	3,97	0,32	0,58	0,27	0,54	0,11	0,47	0,17
H I	9-16	10,8036	4	2,27e+03	108325	109250	2,79	0,20	1,98	0,28	0,57	0,20	0,50	0,11	0,54	0,05
He I	$3S - 3P^0$ multiplet	10,8820	5	—	—	—	0,62	0,22	0,51	0,59	—	—	—	—	—	—
Ni III	$3F - 3F 3 - 2$	11,0023	14	2,70e+02	1361	2270	2,17	0,80	1,96	2,93	0,89	1,96	0,55	0,94	0,52	0,48
H I	7-9	11,3087	6	8,24e+04	107440	108325	29,05	1,69	22,42	2,75	9,41	2,17	7,86	1,15	6,27	1,06
H I	9-15	11,5395	6	3,32e+03	108325	109191	2,76	0,29	1,15	0,81	0,14	0,40	0,15	0,27	0,17	0,20
H I	10-20	12,1568	2	6,17e+02	108582	109404	0,99	0,19	—	—	—	—	—	—	—	—
H ₂	0-0 S(2)	12,2786	7	2,76e+09	354	1169	24,67	0,24	20,48	0,26	56,56	0,15	107,33	0,12	89,38	0,05
H I	6-7	12,3719	9	4,56e+05	106632	107440	92,29	0,42	68,00	0,38	27,00	0,40	23,62	0,31	19,23	0,23
H I	8-11	12,3872	9	2,30e+04	107965	108772	10,66	0,47	7,55	0,72	3,22	0,59	3,10	0,40	2,25	0,29
H I	9-14	12,5871	8	5,08e+03	108325	109119	4,29	0,06	2,92	0,27	0,75	0,08	0,99	0,15	0,82	0,02
H I	10-19	12,6110	6	8,25e+02	108582	109375	1,35	0,26	—	—	—	—	—	—	—	—
Ne II	$2p^0 - 2p^0 3/2 - 1/2$	12,8135	7	8,32e+03	0	780	6156,40	0,79	4612,99	1,96	1422,69	1,40	1188,46	1,42	1013,34	0,65
H I	10-18	13,1880	5	1,13e+03	108582	109340	1,47	0,23	—	—	—	—	—	—	—	—
H I	10-17	13,9418	-1	1,58e+03	108582	109299	1,48	0,20	—	—	—	—	—	—	—	—
H I	9-13	14,1831	4	8,19e+03	108325	109030	5,02	0,31	3,14	0,82	0,95	0,50	0,87	0,29	0,70	0,18
UID	—	14,3330	0	—	—	—	0,93	0,49	0,90	0,59	0,50	0,32	0,56	0,36	0,30	0,12
C II	$3P - 3P 2 - 1$	14,3678	3	7,62e+03	0	696	20,66	0,61	82,39	0,68	36,86	0,35	30,19	0,30	10,67	0,22
H I	10-16	14,9623	5	2,28e+03	108582	109250	2,11	0,22	1,51	0,40	—	—	—	—	—	—
Ne III	$3P - 3P 2 - 1$	15,5550	10	5,85e+03	0	643	2039,97	0,74	1468,13	1,15	874,50	0,72	759,39	0,57	582,45	0,43
H I	8-10	16,2091	0	4,68e+04	107965	108582	16,53	0,55	10,92	0,89	4,44	0,73	4,50	0,53	3,33	0,41
H I	10-15	16,4117	-2	3,42e+03	108582	109191	4,28	1,01	6,84	5,23	—	—	—	—	—	—
H I	9-12	16,8806	12	1,43e+04	108325	108917	6,16	1,09	4,15	1,25	1,73	0,59	1,53	0,64	1,16	0,49
H ₂	0-0 S(1)	17,0348	19	4,76e+10	118	706	24,97	1,00	19,89	1,60	46,92	1,29	114,43	1,05	119,29	0,70
P III	$2p^0 - 2p^0 1/2 - 3/2$	17,8846	4	1,47e+03	0	559	39,80	0,22	26,08	1,44	14,54	1,15	13,53	0,90	10,63	0,87
Fe II	$d^4F - d^4F 9/2 - 7/2$	17,9360	-0	5,84e+03	1873	2430	15,17	0,93	30,99	0,22	6,09	0,25	5,05	0,35	3,02	0,16
UID	—	18,6510	0	—	—	—	—	—	—	—	7,69	0,98	9,40	0,73	7,54	0,66
S III	$3P - 3P 1 - 2$	18,7130	-1	1,43e+03	299	833	599,73	1,28	4127,26	1,75	1884,99	1,39	1681,10	0,73	1297,20	0,96
H I	7-8	19,0619	4	2,27e+05	107440	107965	46,39	2,04	35,43	3,73	14,22	1,88	12,01	1,30	9,97	1,11
Ar III	$3P - 3P 1 - 0$	21,8291	-2	5,19e+03	1112	1570	94,13	1,38	48,27	2,02	27,58	0,68	24,18	0,60	19,10	0,70
H I	9-11	22,3405	-26	2,81e+04	108325	108772	13,28	0,68	—	—	—	—	—	—	—	—

TABLE C.5 – suite.

Espèces	Transition	λ_{rest} (μm)	$\Delta\lambda_{\text{obs}}$ ($10^{-4}\mu\text{m}$)	A (s^{-1})	E_l (cm^{-1})	E_u (cm^{-1})	$I_{\text{H}\alpha}$	$\sigma_{\text{H}\alpha}$	I_{Atomic}	σ_{Atomic} ($10^{-5}\text{ erg cm}^{-2}\text{ s}^{-1}\text{ sr}^{-1}$)	I_{DF1}	σ_{DF1}	I_{DF2}	σ_{DF2}	I_{DF3}	σ_{DF3}
Fe III	$^5D-^5D\ 4-3$	22,9250	15	2,80e-03	0	436	141,05	3,71	88,91	3,20	39,08	2,11	29,57	1,23	25,94	1,21
Si I	$^3P-^3P\ 2-1$	25,2490	44	1,40e-03	0	396	–	–	–	–	6,64	4,04	7,57	3,49	16,38	1,94
Fe II	$d^6D-d^6D\ 9/2-7/2$	25,9884	70	2,13e-03	0	385	55,80	10,65	298,31	33,29	158,19	14,68	152,99	11,69	37,46	8,31

Notes. ^(a) Les intensités sont omises lorsque la ligne est absente ou trop faible pour une mesure fiable. ^(b) Les incertitudes σ sont basées sur la mesure du bruit local uniquement, ce qui permet de déterminer le rapport signal à bruit. Nous suggérons une incertitude de 3 % pour représenter les incertitudes de calibration systématiques.

Annexe D

Articles publiés et soumis en co-autrice

Formation of the methyl cation by photochemistry in a protoplanetary disk

<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06307-x>

Received: 14 March 2023

Accepted: 9 June 2023

Published online: 26 June 2023

 Check for updates

Olivier Berné¹✉, Marie-Aline Martin-Drumel², Ilane Schroetter¹, Javier R. Goicoechea³, Ugo Jacovella², Bérenger Gans², Emmanuel Dartois², Laurent H. Coudert², Edwin Bergin⁴, Felipe Alarcon⁴, Jan Cami^{5,6,7}, Evelyne Roueff⁸, John H. Black⁹, Oskar Asvany¹⁰, Emilie Habart¹¹, Els Peeters^{5,6,7}, Amelie Canin¹, Boris Trahin¹¹, Christine Joblin¹, Stephan Schlemmer¹⁰, Sven Thorwirth¹⁰, Jose Cernicharo³, Maryvonne Gerin⁸, Alexander Tielens^{12,13}, Marion Zannese¹¹, Alain Abergel¹¹, Jeronimo Bernard-Salas^{14,15}, Christiaan Boersma¹⁶, Emeric Bron⁸, Ryan Chown^{5,6}, Sara Cuadrado³, Daniel Dicken¹¹, Meriem Elyajouri¹¹, Asunción Fuente¹⁷, Karl D. Gordon¹⁸, Lina Issa¹, Olga Kannavou¹¹, Baria Khan⁵, Ozan Lacinbala¹⁹, David Languignon⁸, Romane Le Gal^{20,21}, Alexandros Maragkoudakis¹⁶, Raphael Meshaka⁸, Yoko Okada¹⁰, Takashi Onaka^{22,23}, Sofia Pasquini⁵, Marc W. Pound¹³, Massimo Robberto¹⁸, Markus Röllig^{24,25}, Bethany Schefter⁵, Thiébaud Schirmer^{9,11}, Aamek Sidhu^{5,6}, Benoit Tabone¹¹, Dries Van De Putte¹⁸, Silvia Vicente²⁶ & Mark G. Wolfire¹³

Forty years ago, it was proposed that gas-phase organic chemistry in the interstellar medium can be initiated by the methyl cation CH_3^+ (refs. 1–3), but so far it has not been observed outside the Solar System^{4,5}. Alternative routes involving processes on grain surfaces have been invoked^{6,7}. Here we report James Webb Space Telescope observations of CH_3^+ in a protoplanetary disk in the Orion star-forming region. We find that gas-phase organic chemistry is activated by ultraviolet irradiation.

As part of the PDRs4All Early Release Science programme on the James Webb Space Telescope (JWST) (pdrs4all.org)⁸, we have obtained observations of the protoplanetary disk d203-506 (ref. 9). This object is situated in the Orion Bar, at about 0.25 pc from the massive, strongly ultraviolet (UV) emitting Trapezium stars that are at 414 pc from Earth¹⁰, inside the Orion Nebula. The disk is about 100 astronomical units (AU) in radius, and has an estimated mass of roughly $10 M_J$ (O. Berné et al., manuscript in preparation). The central star of d203-506 has an estimated mass of $M_* = 0.2 \pm 0.1 M_\odot$ (O. Berné et al., manuscript in preparation), typical for stars of the Orion Nebula Cluster¹¹. This star is obscured by the flared disk that is seen nearly edge-on⁹. Figure 1 shows integrated intensity images of the d203-506 disk (see Methods for details on JWST data reduction). This includes the emission of vibrationally and rotationally excited H_2 and CH^+ , and fine-structure emission of oxygen ([O I]) and ionized iron ([Fe II]). The molecular emission arises from a hot (gas temperature T_{gas} of roughly 1,000 K) and dense (gas density $n_{\text{H}} > 10^5 \text{ cm}^{-3}$) wind that is produced by photoevaporation from the disk because of irradiation by far-UV photons (FUV, that is, photons with energies E in the range 6–13.6 eV) from the Trapezium stars (O. Berné et al., manuscript in preparation). The [Fe II] image shows the emission associated with a collimated jet. Some of the

wind emission is cospatial with this jet, but overall the wind is more extended and creates a ‘halo’ around the disk.

The mid-infrared spectrum of d203-506 was obtained using the Mid-Infrared Instrument (MIRI)-Medium Resolution Spectroscopy (MRS) spectrometer onboard the JWST (see Methods for details) and is shown in Fig. 2. In the spectrum, we detect pure rotational lines of H_2 [0-0 S(1) to 0-0 S(8)] from which we derive an excitation temperature $T_{\text{ex}} = 923 \pm 48 \text{ K}$ (Methods). The straight line observed in the excitation diagram derived from these transitions (Extended Data Fig. 3) indicates that the excitation temperature of H_2 is close to the gas kinetic temperature, and thus confirms the presence of hot molecular gas in the wind of d203-506.

In addition to identified H_2 and H I emission lines (Methods), a strong residual emission consisting of a series of lines in the 6.5–8.0 μm range is observed (Fig. 2). This emission, as seen in the lower middle panel of Fig. 1, is spatially resolved and only present in d203-506. It is cospatial with H_2 and CH^+ emissions, with the best spatial correlation observed with the 2.12 μm line of vibrationally excited H_2 (Fig. 1). We conclude that the observed features in Fig. 2 are an astrophysical signal associated with emission from the wind of the d203-506 protoplanetary disk. We note, however, given that the angular resolution of MIRI is at the

¹Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie, Université de Toulouse, CNRS, CNES, UPS, Toulouse, France. ²Institut des Sciences Moléculaires d’Orsay, Université Paris-Saclay, CNRS, Orsay, France. ³Instituto de Física Fundamental (CSIC), Madrid, Spain. ⁴Department of Astronomy, University of Michigan, Ann Arbor, MI, USA. ⁵Department of Physics and Astronomy, The University of Western Ontario, London, Ontario, Canada. ⁶Institute for Earth and Space Exploration, The University of Western Ontario, London, Ontario, Canada. ⁷Carl Sagan Center, SETI Institute, Mountain View, CA, USA. ⁸LERMA, Observatoire de Paris, PSL University, Sorbonne Université, CNRS, Meudon, France. ⁹Department of Space, Earth, and Environment, Chalmers University of Technology, Onsala Space Observatory, Onsala, Sweden. ¹⁰Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Cologne, Germany. ¹¹Institut d’Astrophysique Spatiale, Université Paris-Saclay CNRS, Orsay, France. ¹²Leiden Observatory, Leiden University, Leiden, the Netherlands. ¹³Astronomy Department, University of Maryland, College Park, MD, USA. ¹⁴ACRI-ST, Centre d’Etudes et de Recherche de Grasse (CERGA), Grasse, France. ¹⁵INCLASS Common Laboratory, Grasse, France. ¹⁶NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA, USA. ¹⁷Observatorio Astronómico Nacional (OAN,IGN), Madrid, Spain. ¹⁸Space Telescope Science Institute, Baltimore, MD, USA. ¹⁹KU Leuven Quantum Solid State Physics (QSP), Leuven, Belgium. ²⁰Institut de Planétologie et d’Astrophysique de Grenoble, Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble, France. ²¹Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM), Saint-Martin d’Hères, France. ²²Department of Physics, Faculty of Science and Engineering, Meisei University, Tokyo, Japan. ²³Department of Astronomy, Graduate School of Science, The University of Tokyo, Tokyo, Japan. ²⁴Physikalisches Verein-Gesellschaft für Bildung und Wissenschaft, Frankfurt, Germany. ²⁵Physikalisches Institut, Goethe-Universität, Frankfurt, Germany. ²⁶Instituto de Astrofísica e Ciências do Espaço, Lisbon, Portugal. ✉e-mail: olivier.berne@irap.omp.eu



STAR FORMATION

A far-ultraviolet-driven photoevaporation flow observed in a protoplanetary disk

Olivier Berné^{1*}, Emilie Habart², Els Peeters^{3,4,5}, Ilane Schroetter¹, Amélie Canin¹, Aamek Sidhu^{3,4}, Ryan Chown^{3,4}, Emeric Bron⁶, Thomas J. Haworth⁷, Pamela Klaassen⁸, Boris Trahin², Dries Van De Putte⁹, Felipe Alarcón¹⁰, Marion Zannese², Alain Abergel², Edwin A. Bergin¹⁰, Jeronimo Bernard-Salas^{11,12}, Christiaan Boersma¹³, Jan Cami^{3,4,5}, Sara Cuadrado¹⁴, Emmanuel Bernart¹⁵, Daniel Dicken², Meriem Elyajouri², Asunción Fuente¹⁶, Javier R. Goicoechea¹⁴, Karl D. Gordon^{9,17}, Lina Issa¹, Christine Joblin¹, Olga Kannavou², Baria Khan³, Ozan Lacinbala², David Languignon⁶, Romane Le Gal^{1,18,19}, Alexandros Maragkoudakis¹³, Raphael Meshaka², Yoko Okada²⁰, Takashi Onaka^{21,22}, Sofia Pasquini³, Marc W. Pound²³, Massimo Robberto^{9,17}, Markus Röflig²⁰, Bethany Schefter³, Thiébaud Schirmer^{2,24}, Thomas Simmer², Benoit Tabone², Alexander G. G. M. Tielens^{23,25}, Sílvia Vicente²⁶, Mark G. Wolfire²³, PDRs4All Team†

Most low-mass stars form in stellar clusters that also contain massive stars, which are sources of far-ultraviolet (FUV) radiation. Theoretical models predict that this FUV radiation produces photodissociation regions (PDRs) on the surfaces of protoplanetary disks around low-mass stars, which affects planet formation within the disks. We report James Webb Space Telescope and Atacama Large Millimeter Array observations of a FUV-irradiated protoplanetary disk in the Orion Nebula. Emission lines are detected from the PDR; modeling their kinematics and excitation allowed us to constrain the physical conditions within the gas. We quantified the mass-loss rate induced by the FUV irradiation and found that it is sufficient to remove gas from the disk in less than a million years. This is rapid enough to affect giant planet formation in the disk.

Young low-mass stars are surrounded by protoplanetary disks of gas and dust, which have lifetimes of a few million years (1–3) and are the sites of planet formation (4). Planet formation is limited by processes that remove mass from the disk, such as photoevaporation (5). This occurs when the upper layers of protoplanetary disks are heated by x-ray or ultraviolet photons. Radiative heating increases the gas temperature, which brings the local sound speed above the escape velocity of the disk, causing the gas to escape from the system. Those photons could be from the central star (6) or from nearby massive stars (7). Because most low-mass stars form in clusters that also contain massive stars, most protoplanetary disks are exposed to external radiation, and so they are expected to experience photoevaporation driven by ultraviolet photons during their lifetime (7–11). Theoretical models predict that far-ultraviolet

(FUV) photons, those with energies below the Lyman limit (energy $E < 13.6$ eV), dominate the photoevaporation process. The effect affects the disk mass, radius, and lifetime (7, 10, 12–18); its chemical evolution (19–21); and the growth and migration of any planets forming within the disk (22). However, these processes have not been directly observed.

Most observational constraints on the mass-loss rates associated with photoionization have been obtained for objects in the Orion Nebula known as proplyds, in which the ionization of FUV-driven photoevaporation flows from disks produces comet-shaped ionization fronts (23, 24). Modeling of the observed ionization fronts of proplyds has indicated mass-loss rates $\dot{M} \approx 10^{-8}$ to 10^{-6} solar masses per year ($M_{\odot} \text{ year}^{-1}$) (25–27). However, those observations did not determine the physical conditions (radiation field, gas temperature, and density) at the locations where the photoevaporation flows are launched.

In the regions where FUV photons penetrate the disk, a photodissociation region (PDR) forms at the disk surface. Most observational tracers of PDR physics (spectral lines of H_2 , O, and C^+) are in the near- and far-infrared wavelength ranges. The spatial scale of PDRs in externally illuminated disks is a few hundred astronomical units (au), which corresponds to angular sizes < 1 arc sec ($''$) for the closest star-forming clusters (12, 29, 30).

Images of a photoevaporation flow

Figure 1 shows optical and near-infrared images of the Orion Bar, a ridge in the Orion Nebula (31) situated about 0.25 pc southeast of the Trapezium Cluster of massive stars. The western edge of the bar constitutes the ionization front (Fig. 1B), which separates regions where the gas is fully ionized and at temperature $T \sim 10^4$ K from the neutral atomic region at $T \sim 500$ to 1000 K. We investigated the source [BOM2000] d203-506 (hereafter d203-506) (32, 33), a protoplanetary disk seen in absorption against the bright background, which is located at the following coordinates: right ascension $5^{\text{h}}35^{\text{m}}20^{\text{s}}.357$ and declination $-5^{\circ}25'05''.81$ (J2000 equinox). Previous observations of d203-506 found no sign of an ionization front (32–34), indicating that the radiation field reaching the disk is dominated by FUV photons.

We obtained near-infrared and submillimeter observations of d203-506, with the James Webb Space Telescope (JWST) and the Atacama Large Millimeter Array (ALMA), respectively, both at angular resolution $\sim 0.1''$ (corresponding to ~ 40 au at the distance of the Orion Nebula). JWST images were taken in multiple broad and narrow band filters using the Near-Infrared Camera (NIRCam) instrument (35). We also obtained near-infrared spectroscopic observations using the integral field unit (IFU) of the Near-Infrared Spectrograph (NIRSpec) instrument on JWST (35). The ALMA interferometric data cubes provided maps of rotational emission lines from the molecules HCN and HCO^+ , with a velocity resolution of 0.2 km s^{-1} (35).

Figure 2 compares the JWST and ALMA images to archival optical images from the Hubble

¹Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie, Université de Toulouse, Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), Centre National d'Etudes Spatiales, 31028 Toulouse, France. ²Institut d'Astrophysique Spatiale, Université Paris-Saclay, CNRS, 91405 Orsay, France. ³Department of Physics and Astronomy, The University of Western Ontario, London, ON N6A 3K7, Canada. ⁴Institute for Earth and Space Exploration, The University of Western Ontario, London, ON N6A 3K7, Canada. ⁵Carl Sagan Center, Search for ExtraTerrestrial Intelligence Institute, Mountain View, CA 94043, USA. ⁶Laboratoire d'Etudes du Rayonnement et de la Matière, Observatoire de Paris, Université Paris Science et Lettres, CNRS, Sorbonne Universités, F-92190 Meudon, France. ⁷School of Physics and Astronomy, Queen Mary University of London, London E1 4NS, UK. ⁸UK Astronomy Technology Centre, Royal Observatory Edinburgh, Blackford Hill EH9 3HJ, UK. ⁹Space Telescope Science Institute, Baltimore, MD 21218, USA. ¹⁰Department of Astronomy, University of Michigan, Ann Arbor, MI 48109, USA. ¹¹ACRI-ST, Centre d'Etudes et de Recherche de Grasse, F-06130 Grasse, France. ¹²Innovative Common Laboratory for Space Spectroscopy, 06130 Grasse, France. ¹³NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA 94035, USA. ¹⁴Instituto de Física Fundamental, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, 28006 Madrid, Spain. ¹⁵Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, Université Paris-Saclay, CNRS, 91405 Orsay, France. ¹⁶Centro de Astrobiología, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, and Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial, 28850 Torrejón de Ardoz, Spain. ¹⁷Johns Hopkins University, Baltimore, MD 21218, USA. ¹⁸Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble, Université Grenoble Alpes, CNRS, F-38000 Grenoble, France. ¹⁹Institut de Radioastronomie Millimétrique, F-38406 Saint-Martin d'Hères, France. ²⁰Physikalisches Institut, Universität zu Köln, 50937 Köln, Germany. ²¹Department of Astronomy, Graduate School of Science, The University of Tokyo, Tokyo 113-0033, Japan. ²²Department of Physics, Faculty of Science and Engineering, Meisei University, Hino, Tokyo 191-8506, Japan. ²³Astronomy Department, University of Maryland, College Park, MD 20742, USA. ²⁴Department of Space, Earth and Environment, Chalmers University of Technology, Onsala Space Observatory, SE-439 92 Onsala, Sweden. ²⁵Leiden Observatory, Leiden University, 2300 RA Leiden, Netherlands. ²⁶Instituto de Astrofísica e Ciências do Espaço, P-1349-018 Lisboa, Portugal.

*Corresponding author. Email: olivier.berne@irap.omp.eu

†PDRs4All Team authors and affiliations are listed in the supplementary materials.

PDRs4All

II. JWST's NIR and MIR imaging view of the Orion Nebula[★]

Emilie Habart¹, Els Peeters^{2,3,4}, Olivier Berné⁵, Boris Trahin¹, Amélie Canin⁵, Ryan Chown^{2,3}, Ameer Sidhu^{2,3}, Dries Van De Putte⁶, Felipe Alarcón⁷, Ilane Schroetter⁵, Emmanuel Dartois⁸, Sílvia Vicente⁹, Alain Abergel¹, Edwin A. Bergin⁷, Jeronimo Bernard-Salas^{10,11}, Christiaan Boersma¹², Emeric Bron¹³, Jan Cami^{2,3,4}, Sara Cuadrado¹⁴, Daniel Dicken¹⁵, Meriem Elyajouri¹, Asunción Fuente¹⁶, Javier R. Goicoechea¹⁴, Karl D. Gordon^{6,17}, Lina Issa⁵, Christine Joblin⁵, Olga Kannavou¹, Baria Khan^{2,3,4}, Ozan Lacinbala¹⁸, David Languignon¹³, Romane Le Gal^{19,20}, Alexandros Maragkoudakis¹², Raphael Meshaka^{1,13}, Yoko Okada²¹, Takashi Onaka^{22,23}, Sofia Pasquini², Marc W. Pound⁷, Massimo Robberto^{6,24}, Markus Röllig^{25,26}, Bethany Schefter^{2,3}, Thiébaud Schirmer^{1,27}, Benoit Tabone¹, Alexander G. G. M. Tielens^{28,29}, Mark G. Wolfire²⁹, Marion Zannese¹, Nathalie Ysard¹, Marc-Antoine Miville-Deschenes³⁰, Isabel Aleman³¹, Louis Allamandola^{12,32}, Rebecca Auchettl³³, Giuseppe Antonio Baratta³⁴, Salma Bejaoui¹², Partha P. Bera^{12,35}, John H. Black²⁷, Francois Boulanger³⁶, Jordy Bouwman^{37,38,39}, Bernhard Brandl^{28,40}, Philippe Brechignac⁸, Sandra Brünken⁴¹, Mridusmita Buragohain⁴², Andrew Burkhardt⁴³, Alessandra Candian⁴⁴, Stéphanie Cazaux⁴⁵, Jose Cernicharo¹⁴, Marin Chabot⁴⁶, Shubhadip Chakraborty^{47,48}, Jason Champion⁵, Sean W. J. Colgan¹², Ilsa R. Cooke⁴⁹, Audrey Coutens⁵, Nick L.J. Cox^{10,11}, Karine Demyk⁵, Jennifer Donovan Meyer⁵⁰, Sacha Foschino⁵, Pedro García-Lario⁵¹, Lisbeth Gavilan¹², Maryvonne Gerin⁵², Carl A. Gottlieb⁵³, Pierre Guillard^{54,55}, Antoine Gusdorf^{56,52}, Patrick Hartigan⁵⁶, Jinhua He^{57,58,59}, Eric Herbst⁶⁰, Liv Hornekaer⁶¹, Cornelia Jäger⁶², Eduardo Janot-Pacheco⁶³, Michael Kaufman⁶⁴, Francisca Kemper^{65,66,67}, Sarah Kendrew⁶⁸, Maria S. Kirsanova⁶⁹, Pamela Klaassen¹⁵, Sun Kwok⁷⁰, Álvaro Labiano⁷¹, Thomas S.-Y. Lai⁷², Timothy J. Lee^{12,†}, Bertrand Lefloch⁷³, Franck Le Petit¹³, Aigen Li⁷⁴, Hendrik Linz⁷⁵, Cameron J. Mackie^{76,77}, Suzanne C. Madden²⁸, Joëlle Mascetti⁷⁸, Brett A. McGuire^{50,79}, Pablo Merino⁸⁰, Elisabetta R. Micelotta⁸¹, Karl Misselt⁸², Jon A. Morse⁸³, Giacomo Mulas^{34,5}, Naslim Neelamkodan⁸⁴, Ryou Ohsawa⁸⁵, Alain Omont⁵², Roberta Paladini⁸⁶, Maria Elisabetta Palumbo³⁴, Amit Pathak⁸⁷, Yvonne J. Pendleton⁸⁸, Annemieke Petrigiani⁸⁹, Thomas Pino⁸, Elena Puga⁶⁸, Naseem Rangwala¹², Mathias Rapacioli⁹⁰, Alessandra Ricca^{12,4}, Julia Roman-Duval⁶, Joseph Roser^{4,12}, Evelyne Roueff¹³, Gaël Rouillé⁶², Farid Salama¹², Dinalva A. Sales⁹¹, Karin Sandstrom⁹², Peter Sarre⁹³, Ella Sciamma-O'Brien¹², Kris Sellgren⁹⁴, Sachindev S. Shenoy⁹⁵, David Teyssier⁵¹, Richard D. Thomas⁹⁶, Aditya Togi⁹⁷, Laurent Verstraete¹, Adolf N. Witt⁹⁸, Alwyn Wootten⁵⁰, Henning Zettergren⁹⁹, Yong Zhang¹⁰⁰, Ziwei E. Zhang¹⁰¹, and Junfeng Zhen¹⁰²

(Affiliations can be found after the references)

Received 26 April 2023 / Accepted 24 July 2023

ABSTRACT

Context. The *James Webb* Space Telescope (JWST) has captured the most detailed and sharpest infrared (IR) images ever taken of the inner region of the Orion Nebula, the nearest massive star formation region, and a prototypical highly irradiated dense photo-dissociation region (PDR).

Aims. We investigate the fundamental interaction of far-ultraviolet (FUV) photons with molecular clouds. The transitions across the ionization front (IF), dissociation front (DF), and the molecular cloud are studied at high-angular resolution. These transitions are relevant to understanding the effects of radiative feedback from massive stars and the dominant physical and chemical processes that lead to the IR emission that JWST will detect in many Galactic and extragalactic environments.

Methods. We utilized NIRCcam and MIRI to obtain sub-arcsecond images over $\sim 150''$ and $42''$ in key gas phase lines (e.g., Pa α , Br α , [FeII] 1.64 μm , H₂ 1–0 S(1) 2.12 μm , 0–0 S(9) 4.69 μm), aromatic and aliphatic infrared bands (aromatic infrared bands at 3.3–3.4 μm , 7.7, and 11.3 μm), dust emission, and scattered light. Their emission are powerful tracers of the IF and DF, FUV radiation field and density distribution. Using NIRSpec observations the fractional contributions of lines, AIBs, and continuum emission to our NIRCcam images were estimated. A very good agreement is found for the distribution and intensity of lines and AIBs between the NIRCcam and NIRSpec observations.

[★] The reduced images are provided via the REGARDS Database webpage (<https://regards.osups.universite-paris-saclay.fr/user/jwst>) and on the Mikulski Archive for Space Telescopes (MAST: <https://mast.stsci.edu,DOIis:10.17909/pg4c-1737>). All links to data products are referenced on the PDRs4All website <https://pdrs4all.org>.

[†] Tim Lee sadly passed away on Nov. 3 2022.

PDRs4All

III. JWST's NIR spectroscopic view of the Orion Bar[★]

Els Peeters^{1,2,3} , Emilie Habart⁴ , Olivier Berné⁵ , Aamek Sidhu^{1,2}, Ryan Chown^{1,2}, Dries Van De Putte⁶ , Boris Trahin⁴, Ilane Schroetter⁵ , Amélie Canin⁵, Felipe Alarcón⁷ , Bethany Scheffer^{1,2} , Baria Khan¹, Sofia Pasquini¹ , Alexander G. G. M. Tielens^{8,9}, Mark G. Wolfire⁹, Emmanuel Dartois¹⁰ , Javier R. Goicoechea¹¹, Alexandros Maragkoudakis¹², Takashi Onaka^{13,14} , Marc W. Pound⁹ , Sílvia Vicente¹⁵, Alain Abergel⁴, Edwin A. Bergin⁷, Jeronimo Bernard-Salas^{16,17} , Christiaan Boersma¹² , Emeric Bron¹⁸, Jan Cami^{1,2,3} , Sara Cuadrado¹¹, Daniel Dicken¹⁹, Meriem Elyajouri⁴, Asunción Fuente²⁰, Karl D. Gordon^{6,21}, Lina Issa⁵, Christine Joblin⁵ , Olga Kannavou⁴, Ozan Lacinbala²², David Languignon¹⁸, Romane Le Gal^{23,24} , Raphael Meshaka^{4,18}, Yoko Okada²⁵ , Massimo Robberto^{6,26} , Markus Röellig^{27,28} , Thiébaud Schirmer^{4,29}, Benoit Tabone⁴ , Marion Zannese⁴ , Isabel Aleman^{30,31,32}, Louis Allamandola^{12,33}, Rebecca Auchettl³⁴, Giuseppe Antonio Baratta³⁵ , Salma Bejaoui¹², Partha P. Bera^{12,33}, John H. Black²⁹, Francois Boulanger³⁶, Jordy Bouwman^{37,38,39}, Bernhard Brandl^{8,40} , Philippe Brechignac¹⁰, Sandra Brünken⁴¹ , Mridusmita Buragohain⁴², Andrew Burkhardt⁴³, Alessandra Candian⁴⁴, Stéphanie Cazaux⁴⁵, Jose Cernicharo¹¹, Marin Chabot⁴⁶, Shubhadip Chakraborty^{47,48}, Jason Champion⁵, Sean W. J. Colgan¹² , Ilsa R. Cooke⁴⁹, Audrey Coutens⁵ , Nick L. J. Cox^{16,17} , Karine Demyk⁵, Jennifer Donovan Meyer⁵⁰ , Sacha Foschino⁵, Pedro García-Lario⁵¹ , Maryvonne Gerin⁵² , Carl A. Gottlieb⁵³ , Pierre Guillard^{54,55}, Antoine Gusdorf^{36,52}, Patrick Hartigan⁵⁶, Jinhua He^{57,58,98} , Eric Herbst⁵⁹, Liv Hornekaer⁶⁰ , Cornelia Jäger⁶¹ , Eduardo Janot-Pacheco⁶² , Michael Kaufman⁶³ , Sarah Kendrew⁶⁴, Maria S. Kirsanova⁶⁵ , Pamela Klaassen¹⁹, Sun Kwok⁶⁶ , Álvaro Labiano⁶⁷ , Thomas S.-Y. Lai⁶⁸ , Timothy J. Lee^{12,†}, Bertrand Lefloch⁶⁹, Franck Le Petit¹⁸ , Aigen Li⁷⁰, Hendrik Linz⁷¹, Cameron J. Mackie^{72,73}, Suzanne C. Madden⁷⁴ , Joëlle Mascetti⁷⁵ , Brett A. McGuire^{50,76}, Pablo Merino⁷⁷, Elisabetta R. Micelotta⁷⁸, Karl Misselt⁷⁹, Jon A. Morse⁸⁰, Giacomo Mulas^{99,5} , Naslim Neelamkoda⁸¹, Ryou Ohsawa⁸² , Roberta Paladini⁶⁸, Maria Elisabetta Palumbo³⁵ , Amit Pathak⁸³ , Yvonne J. Pendleton⁸⁴ , Annemieke Petrigani⁸⁵ , Thomas Pino¹⁰, Elena Puga⁶⁴, Naseem Rangwala¹², Mathias Rapacioli⁸⁶ , Alessandra Ricca^{12,3} , Julia Roman-Duval⁶ , Joseph Roser^{3,12} , Evelyne Roueff¹⁸ , Gaël Rouille⁶¹ , Farid Salama¹² , Dinalva A. Sales⁸⁷ , Karin Sandstrom⁸⁸, Peter Sarre⁸⁹ , Ella Sciamma-O'Brien¹², Kris Sellgren⁹⁰, Sachindev S. Shenoy⁹¹, David Teysier⁵¹, Richard D. Thomas⁹² , Aditya Togi⁹³ , Laurent Verstraete⁴, Adolf N. Witt⁹⁴ , Alwyn Wootten⁵⁰ , Nathalie Ysard⁴, Henning Zettergren⁹², Yong Zhang⁹⁵ , Ziwei E. Zhang⁹⁶, and Junfeng Zhen⁹⁷

(Affiliations can be found after the references)

Received 12 October 2023 / Accepted 22 December 2023

ABSTRACT

Context. JWST has taken the sharpest and most sensitive infrared (IR) spectral imaging observations ever of the Orion Bar photodissociation region (PDR), which is part of the nearest massive star-forming region the Orion Nebula, and often considered to be the ‘prototypical’ strongly illuminated PDR.

Aims. We investigate the impact of radiative feedback from massive stars on their natal cloud and focus on the transition from the H II region to the atomic PDR – crossing the ionisation front (IF) –, and the subsequent transition to the molecular PDR – crossing the dissociation front (DF). Given the prevalence of PDRs in the interstellar medium and their dominant contribution to IR radiation, understanding the response of the PDR gas to far-ultraviolet (FUV) photons and the associated physical and chemical processes is fundamental to our understanding of star and planet formation and for the interpretation of any unresolved PDR as seen by JWST.

Methods. We used high-resolution near-IR integral field spectroscopic data from NIRSpec at JWST to observe the Orion Bar PDR as part of the PDRs4All JWST Early Release Science programme. We constructed a 3'' × 25'' spatio-spectral mosaic covering 0.97–5.27 μm at a spectral resolution R of ~2700 and an angular resolution of 0.075''–0.173''. To study the properties of key regions captured in this mosaic, we extracted five template spectra in apertures centred on the three H₂ dissociation fronts, the atomic PDR, and the H II region. This wealth of detailed spatial-spectral information was analysed in terms of variations in the physical conditions—incident UV field, density, and temperature – of the PDR gas.

* Full Table 3, a table with line intensities for the five template spectra (Table B.1), and the five template spectra are available at the CDS via anonymous ftp to cdsarc.cds.unistra.fr (130.79.128.5) or via <https://cdsarc.cds.unistra.fr/viz-bin/cat/J/A+A/685/A74>

† Tim Lee sadly passed away on Nov. 3 2022.

PDRs4All

IV. An embarrassment of riches: Aromatic infrared bands in the Orion Bar[★]

Ryan Chown^{1,2}, Aamek Sidhu^{1,2}, Els Peeters^{1,2,3}, Alexander G. G. M. Tielens^{4,5}, Jan Cami^{1,2,3}, Olivier Berné⁶, Emilie Habart⁷, Felipe Alarcón⁸, Amélie Canin⁶, Ilane Schroetter⁶, Boris Trahin⁷, Dries Van De Putte⁹, Alain Abergel⁷, Edwin A. Bergin⁸, Jeronimo Bernard-Salas^{10,11}, Christiaan Boersma¹², Emeric Bron¹³, Sara Cuadrado¹⁴, Emmanuel Dartois¹⁵, Daniel Dicken¹⁶, Meriem El-Yajouri⁷, Asunción Fuente¹⁷, Javier R. Goicoechea¹⁴, Karl D. Gordon^{9,18}, Lina Issa⁶, Christine Joblin⁴, Olga Kannavou⁷, Baria Khan¹, Ozan Lacinbala¹⁹, David Languignon¹³, Romane Le Gal^{20,21}, Alexandros Maragkoudakis¹², Raphael Meshaka^{7,13}, Yoko Okada²², Takashi Onaka^{23,24}, Sofia Pasquini¹, Marc W. Pound⁵, Massimo Robberto^{9,25}, Markus Röllig^{26,27}, Bethany Schefter^{1,2}, Thiébaud Schirmer^{7,28}, Sílvia Vicente²⁹, Mark G. Wolfire⁵, Marion Zannese⁷, Isabel Aleman³⁰, Louis Allamandola^{12,31}, Rebecca Auchettl³², Giuseppe Antonio Baratta³³, Salma Bejaoui¹², Partha P. Bera^{12,29}, John H. Black²⁸, François Boulanger³⁴, Jordy Bouwman^{35,36,37}, Bernhard Brandl^{4,38}, Philippe Brechignac¹⁵, Sandra Brünken³⁹, Mridusmita Buragohain⁴⁰, Andrew Burkhardt⁴¹, Alessandra Candian⁴², Stéphanie Cazaux⁴³, Jose Cernicharo¹⁴, Marin Chabot⁴⁴, Shubhadip Chakraborty^{45,46}, Jason Champion⁶, Sean W. J. Colgan¹², Ilsa R. Cooke⁴⁷, Audrey Coutens⁶, Nick L. J. Cox^{10,11}, Karine Demyk⁶, Jennifer Donovan Meyer⁴⁸, Sacha Foschino⁶, Pedro García-Lario⁴⁹, Lisseth Gavilan¹², Maryvonne Gerin⁵⁰, Carl A. Gottlieb⁵¹, Pierre Guillard^{52,53}, Antoine Gusdorf^{34,50}, Patrick Hartigan⁵⁴, Jinhua He^{55,56}, Eric Herbst⁵⁷, Liv Hornekaer⁵⁸, Cornelia Jäger⁵⁹, Eduardo Janot-Pacheco⁶⁰, Michael Kaufman⁶¹, Francisca Kemper^{62,63,64}, Sarah Kendrew⁶⁵, Maria S. Kirsanova⁶⁶, Pamela Klaassen¹⁶, Sun Kwok⁶⁷, Álvaro Labiano⁶⁸, Thomas S.-Y. Lai⁶⁹, Timothy J. Lee^{12,★}, Bertrand Lefloch²⁰, Franck Le Petit¹³, Aigen Li⁷⁰, Hendrik Linz⁷¹, Cameron J. Mackie^{72,73}, Suzanne C. Madden⁷⁴, Joëlle Mascetti⁷⁵, Brett A. McGuire^{48,76}, Pablo Merino⁷⁷, Elisabetta R. Micelotta⁷⁸, Karl Misselt⁷⁹, Jon A. Morse⁸⁰, Giacomo Mulas^{33,6}, Naslim Neelamkodan⁸¹, Ryou Ohsawa⁸², Alain Omont⁸³, Roberta Paladini⁸⁴, Maria Elisabetta Palumbo³³, Amit Pathak⁸⁵, Yvonne J. Pendleton⁸⁶, Annemieke Petrigani⁸⁷, Thomas Pino¹⁵, Elena Puga⁶⁵, Naseem Rangwala¹², Mathias Rapacioli⁸⁸, Alessandra Ricca^{12,3}, Julia Roman-Duval⁹, Joseph Roser^{3,12}, Evelyne Roueff¹³, Gaël Rouillé⁸⁹, Farid Salama¹², Dinalva A. Sales⁹⁰, Karin Sandstrom⁹¹, Peter Sarre⁹², Ella Sciamma-O'Brien¹², Kris Sellgren⁹³, Sachindev S. Shenoy⁹⁴, David Teyssier⁶⁸, Richard D. Thomas⁹⁵, Aditya Togi⁷¹, Laurent Verstraete⁷, Adolf N. Witt⁹⁶, Alwyn Wootten⁴⁸, Henning Zettergren⁹⁵, Yong Zhang⁹⁷, Ziwei E. Zhang⁹⁸, and Junfeng Zhen⁹⁹

(Affiliations can be found after the references)

Received 14 April 2023 / Accepted 1 August 2023

ABSTRACT

Context. Mid-infrared observations of photodissociation regions (PDRs) are dominated by strong emission features called aromatic infrared bands (AIBs). The most prominent AIBs are found at 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, and 11.2 μm . The most sensitive, highest-resolution infrared spectral imaging data ever taken of the prototypical PDR, the Orion Bar, have been captured by JWST. These high-quality data allow for an unprecedentedly detailed view of AIBs.

Aims. We provide an inventory of the AIBs found in the Orion Bar, along with mid-IR template spectra from five distinct regions in the Bar: the molecular PDR (i.e. the three H₂ dissociation fronts), the atomic PDR, and the H II region.

Methods. We used JWST NIRSpec IFU and MIRI MRS observations of the Orion Bar from the JWST Early Release Science Program, PDRs4All (ID: 1288). We extracted five template spectra to represent the morphology and environment of the Orion Bar PDR. We investigated and characterised the AIBs in these template spectra. We describe the variations among them here.

[★] The 5 template spectra are available at the CDS via anonymous ftp to cdsarc.cds.unistra.fr (130.79.128.5) or via <https://cdsarc.cds.unistra.fr/viz-bin/cat/J/A+A/685/A75>

^{**} Tim Lee sadly passed away on Nov. 3, 2022.

PDRs4All

VIII. Mid-infrared emission line inventory of the Orion Bar

Dries Van De Putte¹ , Raphael Meshaka^{2,3}, Boris Trahin^{2,1}, Emilie Habart², Els Peeters^{4,5,6} , Olivier Berné⁷ , Felipe Alarcón⁸ , Amélie Canin⁷, Ryan Chown^{4,5,9}, Ilane Schroetter⁷ , Aameek Sidhu^{4,5}, Christiaan Boersma¹⁰ , Emeric Bron³, Emmanuel Dartois¹¹ , Javier R. Goicoechea¹² , Karl D. Gordon^{1,13} , Takashi Onaka¹⁴, Alexander G. G. M. Tielens^{15,16}, Laurent Verstraete², Mark G. Wolfire¹⁶, Alain Abergel², Edwin A. Bergin⁸, Jeronimo Bernard-Salas^{17,18} , Jan Cami^{4,5,6} , Sara Cuadrado¹², Daniel Dicken¹⁹ , Meriem Elyajouri² , Asunción Fuente²⁰ , Christine Joblin⁷ , Baria Khan⁴, Ozan Lacinbala²¹, David Languignon³, Romane Le Gal^{22,23} , Alexandros Maragkoudakis¹⁰, Yoko Okada²⁴ , Sofia Pasquini⁴ , Marc W. Pound¹⁶ , Massimo Robberto^{1,25} , Markus Röellig^{26,27}, Bethany Schefter^{4,5} , Thiébaud Schirmer^{2,28}, Benoit Tabone², Sílvia Vicente²⁹, Marion Zannese² , Sean W. J. Colgan¹⁰, Jinhua He^{30,31,32} , Gaël Rouillé³³ , Aditya Togi³⁴, Isabel Aleman^{35,36} , Rebecca Auchetti³⁷, Giuseppe Antonio Baratta³⁸ , Salma Bejaoui¹⁰, Partha P. Bera^{10,39}, John H. Black²⁸ , Francois Boulanger⁴⁰, Jordy Bouwman^{41,42,43} , Bernhard Brandl^{15,44} , Philippe Brechignac¹¹, Sandra Brünken⁴⁵ , Mridusmita Buragohain⁴⁶, Andrew Burkhardt⁴⁷, Alessandra Candian⁴⁸ , Stéphanie Cazaux⁴⁹, Jose Cernicharo¹² , Marin Chabot⁵⁰, Shubhadip Chakraborty^{51,52} , Jason Champion⁷, Ilsa R. Cooke⁵³, Audrey Coutens⁷ , Nick L. J. Cox^{17,18} , Karine Demyk⁷ , Jennifer Donovan Meyer⁵⁴ , Sacha Foschino⁷, Pedro García-Lario⁵⁵, Maryvonne Gerin⁵⁶, Carl A. Gottlieb⁵⁷ , Pierre Guillard^{58,59} , Antoine Gusdorf^{40,56}, Patrick Hartigan⁶⁰ , Eric Herbst⁶¹, Liv Hornekaer⁶², Lina Issa⁷, Cornelia Jäger³³ , Eduardo Janot-Pacheco⁶³, Olga Kannavou², Michael Kaufman⁶⁴ , Francisca Kemper^{65,66,67} , Sarah Kendrew⁶⁸ , Maria S. Kirsanova⁶⁹ , Pamela Klaassen¹⁹, Sun Kwok⁷⁰ , Álvaro Labiano⁷¹ , Thomas S.-Y. Lai⁷², Bertrand Le Floch⁷³, Franck Le Petit³, Aigen Li⁷⁴ , Hendrik Linz⁷⁵, Cameron J. Mackie^{76,77}, Suzanne C. Madden⁷⁸ , Joëlle Mascetti⁷⁹ , Brett A. McGuire^{54,80}, Pablo Merino⁸¹, Elisabetta R. Micelotta⁸², Jon A. Morse⁸³ , Giacomo Mulas^{84,7} , Naslim Neelamkodan⁸⁵ , Ryou Ohsawa⁸⁶ , Alain Omont⁵⁶, Roberta Paladini⁷², Maria Elisabetta Palumbo³⁸ , Amit Pathak⁸⁷ , Yvonne J. Pendleton⁸⁸ , Annemieke Petrigiani⁸⁹ , Thomas Pino¹¹, Elena Puga⁶⁸, Naseem Rangwala¹⁰ , Mathias Rapacioli⁹⁰ , Jeonghee Rho^{6,91}, Alessandra Ricca^{10,6} , Julia Roman-Duval¹, Joseph Roser^{6,10} , Evelyne Roueff³ , Farid Salama¹⁰ , Dinalva A. Sales⁹² , Karin Sandstrom⁹³, Peter Sarre⁹⁴ , Ella Sciamma-O'Brien¹⁰, Kris Sellgren⁹, Sachindev S. Shenoy⁹⁵, David Teyssier⁵⁵, Richard D. Thomas⁹⁶ , Adolf N. Witt⁹⁷ , Alwyn Wootten⁵⁴ , Nathalie Ysard², Henning Zettergren⁹⁶ , Yong Zhang⁹⁸ , Ziwei E. Zhang⁹⁹ , and Junfeng Zhen¹⁰⁰

(Affiliations can be found after the references)

Received 19 January 2024 / Accepted 20 April 2024

ABSTRACT

Context. Mid-infrared emission features are important probes of the properties of ionized gas and hot or warm molecular gas, which are difficult to probe at other wavelengths. The Orion Bar photodissociation region (PDR) is a bright, nearby, and frequently studied target containing large amounts of gas under these conditions. Under the “PDRs4All” Early Release Science Program for JWST, a part of the Orion Bar was observed with MIRI integral field unit (IFU) spectroscopy, and these high-sensitivity IR spectroscopic images of very high angular resolution (0.2”) provide a rich observational inventory of the mid-infrared (MIR) emission lines, while resolving the H II region, the ionization front, and multiple dissociation fronts.

Aims. We list, identify, and measure the most prominent gas emission lines in the Orion Bar using the new MIRI IFU data. An initial analysis summarizes the physical conditions of the gas and demonstrates the potential of these new data and future IFU observations with JWST.

Methods. The MIRI IFU mosaic spatially resolves the substructure of the PDR, its footprint cutting perpendicularly across the ionization front and three dissociation fronts. We performed an up-to-date data reduction, and extracted five spectra that represent the ionized, atomic, and molecular gas layers. We identified the observed lines through a comparison with theoretical line lists derived from atomic data and simulated PDR models. The identified species and transitions are summarized in the main table of this work, with measurements of the line intensities and central wavelengths.

PDRs4All

IX. Sulfur elemental abundance in the Orion Bar

Asunción Fuente¹, Evelyne Roueff², Franck Le Petit², Jacques Le Bourlot^{2,26}, Emeric Bron², Mark G. Wolfire³, James F. Babb⁴, Pei-Gen Yan⁴, Takashi Onaka⁵, John H. Black⁶, Ilane Schroetter⁷, Dries Van De Putte⁸, Aamek Sidhu^{9,10}, Amélie Canin⁷, Boris Trahin¹¹, Felipe Alarcón¹², Ryan Chown^{9,10}, Olga Kannavou¹¹, Olivier Berné⁷, Emilie Habart¹¹, Els Peeters^{9,10,13}, Javier R. Goicoechea¹⁴, Marion Zannese¹¹, Raphael Meshaka^{11,2}, Yoko Okada¹⁵, Markus Röllig^{16,17}, Romane Le Gal^{18,19}, Dinalva A. Sales²⁰, Maria Elisabetta Palumbo²¹, Giuseppe Antonio Baratta²¹, Suzanne C. Madden²², Naslim Neelamkodan²³, Ziwei E. Zhang²⁴, and P. C. Stancil²⁵

(Affiliations can be found after the references)

Received 13 January 2024 / Accepted 25 March 2024

ABSTRACT

Context. One of the main problems in astrochemistry is determining the amount of sulfur in volatiles and refractories in the interstellar medium. The detection of the main sulfur reservoirs (icy H₂S and atomic gas) has been challenging, and estimates are based on the reliability of models to account for the abundances of species containing less than 1% of the total sulfur. The high sensitivity of the *James Webb* Space Telescope provides an unprecedented opportunity to estimate the sulfur abundance through the observation of the [S I] 25.249 μm line.

Aims. Our aim is to determine the amount of sulfur in the ionized and warm molecular phases toward the Orion Bar as a template to investigate sulfur depletion in the transition between the ionized gas and the molecular cloud in HII regions.

Methods. We used the [S III] 18.7 μm, [S IV] 10.5 μm, and [S I] 25.249 μm lines to estimate the amount of sulfur in the ionized and molecular gas along the Orion Bar. For the theoretical part, we used an upgraded version of the Meudon photodissociation region (PDR) code to model the observations. New inelastic collision rates of neutral atomic sulfur with ortho- and para- molecular hydrogen were calculated to predict the line intensities.

Results. The [S III] 18.7 μm and [S IV] 10.5 μm lines are detected over the imaged region with a shallow increase (by a factor of 4) toward the HII region. This suggests that their emissions are partially coming from the Orion Veil. We estimate a moderate sulfur depletion, by a factor of ~2, in the ionized gas. The corrugated interface between the molecular and atomic phases gives rise to several edge-on dissociation fronts we refer to as DF1, DF2, and DF3. The [S I] 25.249 μm line is only detected toward DF2 and DF3, the dissociation fronts located farthest from the HII region. This is the first ever detection of the [S I] 25.249 μm line in a PDR. The detailed modeling of DF3 using the Meudon PDR code shows that the emission of the [S I] 25.249 μm line is coming from warm (>40 K) molecular gas located at A_v ~1–5 mag from the ionization front. Moreover, the intensity of the [S I] 25.249 μm line is only accounted for if we assume the presence of undepleted sulfur.

Conclusions. Our data show that sulfur remains undepleted along the ionic, atomic, and molecular gas in the Orion Bar. This is consistent with recent findings that suggest that sulfur depletion is low in massive star-forming regions because of the interaction of the UV photons coming from the newly formed stars with the interstellar matter.

Key words. astrochemistry – ISM: abundances – HII regions – photon-dominated region (PDR) – ISM: individual objects: Orion Bar

1. Introduction

Gas and solids experience a continuous evolution from their early times in molecular clouds until their incorporation into a growing planet through a protoplanetary disk. Although this evolution lasts for a few million years, we now think that the disk's chemical composition is to a large extent determined by the physical and chemical conditions in the progenitor molecular cloud (see, e.g., Guzmán et al. 2017; Jensen et al. 2019; Booth et al. 2021). Elemental abundances are preserved during the planet formation process, and their values in the progenitor protoplanetary disk will determine the chemical composition of future planet atmospheres. The origin of the raw material needed to facilitate life is not clear, however. The Earth could have

acquired its volatiles and organics from other sources. About 0.5% of the Earth's mass could have come from the bombardment of cometary bodies from the outer Solar System during the so-called Late Veneer (Wang et al. 2013; Ehrenfreund et al. 2015; Caselli 2020). Since the composition of comets seems to be similar to that of the dust grains in the initial protosolar nebula (Capria et al. 2017; Bockelée-Morvan & Biver 2017), we need to follow the whole history of elements in space, from molecular clouds to protoplanetary disks, in order to understand how heavy atoms are incorporated into moons and planets and eventually life-forms.

Sulfur is one of the most abundant elements in the Universe and is known to play a significant role in biological systems in Earth. In the interstellar medium, sulfur is found in gas phase,

LETTER TO THE EDITOR

PDRs4All

X. ALMA and JWST detection of neutral carbon in the externally irradiated disk d203-506: Undepleted gas-phase carbon

J. R. Goicoechea^{1,*}, J. Le Bourlot², J. H. Black³, F. Alarcón⁴, E. A. Bergin⁴, O. Berné⁵, E. Bron⁶, A. Canin⁵, E. Chapillon⁷, R. Chown^{8,9,10}, E. Dartois¹¹, M. Gerin⁶, E. Habart¹², T. J. Haworth¹³, C. Joblin⁵, O. Kannavou¹², F. Le Petit⁶, T. Onaka¹⁴, E. Peeters^{8,9,15}, J. Pety^{6,7}, E. Roueff⁶, A. Sidhu^{8,9}, I. Schroetter⁵, B. Tabone¹², A. G. G. M. Tielens^{16,17}, B. Trahin¹², D. Van De Putte^{18,8,9}, S. Vicente¹⁹, and M. Zannese¹²

(Affiliations can be found after the references)

Received 4 June 2024 / Accepted 7 August 2024

ABSTRACT

The gas-phase abundance of carbon, $x_C = [C/H]_{\text{gas}} = x_{C^+} + x_{C^0} + x_{CO} + \dots$, and its depletion factors are essential parameters for understanding the gas and solid compositions that are ultimately incorporated into (exo)planets. The majority of protoplanetary disks are born in clusters and, as a result, are exposed to external far-ultraviolet (FUV) radiation. These FUV photons potentially affect the disk's evolution, chemical composition, and line excitation. We present the first detection of the [C I] 609 μm fine-structure (3P_1 – 3P_0) line of neutral carbon (C^0), achieved with ALMA, toward one of these disks, d203-506, in the Orion Nebula Cluster. We also report the detection of [C I] forbidden and C I permitted lines (from electronically excited states up to ~ 10 eV) observed with JWST in the near-infrared (NIR). These lines trace the irradiated outer disk and photo-evaporative wind. Contrary to the common belief that these NIR lines are C^+ recombination lines, we find that they are dominated by FUV-pumping of C^0 followed by fluorescence cascades. They trace the transition from atomic to molecular gas, and their intensities scale with G_0 . The lack of outstanding NIR O I fluorescent emission, however, implies a sharper attenuation of external FUV radiation with $E \gtrsim 12$ eV ($\lambda \lesssim \text{Lyman-}\beta$). This is related to a lower effective FUV dust absorption cross section compared to that of interstellar grains, implying a more prominent role for FUV shielding by the C^0 photoionization continuum. The [C I] 609 μm line intensity is proportional to $N(C^0)$ and can be used to infer x_C . We derive $x_C \simeq 1.4 \times 10^{-4}$. This implies that there is no major depletion of volatile carbon compared to x_C measured in the natal cloud, hinting at a young disk. We also show that external FUV radiation impacts the outer disk and wind by vertically shifting the water freeze-out depth, which likely results in less efficient grain growth and settling. This shift leads to nearly solar gas-phase C/O abundance ratios in these irradiated layers.

Key words. protoplanetary disks – ISM: abundances – photon-dominated region (PDR)

1. Introduction

Tracing the carbon reservoir in protoplanetary disks is essential for understanding the variations in the gaseous elemental carbon-to-oxygen abundance¹ ratio, which connects the atmospheric composition of a planet with its formation site (e.g., Öberg et al. 2011, 2023; Madhusudhan 2012; Miotello et al. 2019; Bosman et al. 2021; Mah et al. 2023). In addition, carbon plays a key role in the formation of the complex organics that serve as the foundation for prebiotic chemistry and can be incorporated into planetary systems as they form.

Observations show that the gas-phase CO abundance in 1–10 Myr old disks can be depleted by a factor of 10–100 compared to molecular clouds, even after accounting for freeze-out and photodissociation. This suggests that something happens to CO by ~ 1 Myr (Zhang et al. 2020; Bergner et al. 2020). Grain growth, facilitated by the formation of water-rich ice mantles, followed by settling to the midplane and radial drift may explain these depletion factors (Bergin et al. 2016; Krijt et al. 2020). However, the majority of observational studies target “isolated” disks in nearby low-mass star-forming regions such as

Taurus, Lupus, Ophiuchus, and Chameleon (at $d \sim 150$ pc; e.g., ALMA Partnership et al. 2015; Öberg et al. 2021). Yet, most low-mass stars (and thus planets) are born in clusters that contain one or more high-mass stars (e.g., Lada & Lada 2003). These OB stars emit intense ultraviolet (UV) radiation that illuminates the disk populations that gradually emerge from the natal cloud (e.g., O’Dell et al. 1993). External UV illumination leads to disk mass-loss driven by photo-evaporation (Johnstone et al. 1998; Störzer & Hollenbach 1999; Winter & Haworth 2022) and potentially impacts the properties of planets forming within those disks (Winter et al. 2022; Qiao et al. 2023). However, due to the greater distance to clusters, spectroscopic studies are scarcer (Boyden & Eisner 2020, 2023; Maucó et al. 2023), and it is still a matter of debate whether environmental UV radiation modifies the chemistry of “externally irradiated” disks (Walsh et al. 2013; Ramírez-Tannus et al. 2023; Díaz-Berríos et al. 2024).

The d203-506 system, in the Orion Nebula Cluster (ONC; at $d \sim 400$ pc; see Habart et al. 2024), is a remarkable example of a disk around a low-mass star that is externally irradiated by far-ultraviolet (FUV) radiation ($\sim 6 < E < 13.6$ eV) with no evidence for the comet-shaped ionization front seen in proplyds (e.g., O’Dell et al. 1993; Ricci et al. 2008). This implies a shielding from ionizing extreme-ultraviolet (EUV) radiation ($E > 13.6$ eV). The estimated FUV flux from the O-type stars θ^1 Ori C and θ^2 Ori A is $\sim 10^4$ times higher than around the profusely studied isolated disks in Taurus-like clouds. Thus, d203-506 may be

* Corresponding author; javier.r.goicoechea@cscic.es

¹ We denote the total “solar” abundance of element X as $x_{X_{\odot}}$, with $x_{C_{\odot}} = 2.9 \times 10^{-4}$ and $x_{C_{\odot}}/x_{O_{\odot}} = 0.54$ (Asplund et al. 2009). We refer to the gas-phase abundance of species Y with respect to H nuclei as the density ratio $x_Y = n(Y)/n_H$, where $n_H = n(H) + 2n(H_2)$ in neutral gas.

Bibliographie

- Abel, N. P., Ferland, G. J., Shaw, G., & van Hoof, P. A. M. 2005, *ApJS*, 161, 65
- Abergel, A., Misselt, K., Gordon, K. D., et al. 2024, *A&A*, 687, A4
- Abgrall, H., Roueff, E., & Drira, I. 2000, *A&AS*, 141, 297
- Adams, F. C. 2010, *ARA&A*, 48, 47
- Agertz, O., Kravtsov, A. V., Leitner, S. N., & Gnedin, N. Y. 2013, *ApJ*, 770, 25
- Agúndez, M., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., Faure, A., & Roueff, E. 2010, *ApJ*, 713, 662
- Alata, I., Cruz-Díaz, G. A., Muñoz Caro, G. M., & Dartois, E. 2014, *A&A*, 569, A119
- Alata, I., Jallat, A., Gavilan, L., et al. 2015, *A&A*, 584, A123
- Alexander, R., Pascucci, I., Andrews, S., Armitage, P., & Cieza, L. 2014, in *Protostars and Planets VI*, ed. H. Beuther, R. S. Klessen, C. P. Dullemond, & T. Henning, 475–496
- Allers, K. N., Jaffe, D. T., Lacy, J. H., Draine, B. T., & Richter, M. J. 2005, *ApJ*, 630, 368
- Alves, J. F., Lada, C. J., & Lada, E. A. 2001, *Nature*, 409, 159
- Andresen, P., Beushausen, V., Häusler, D., Lülff, H. W., & Rothe, E. W. 1985, *The Journal of Chemical Physics*, 83, 1429
- Andrews, B. H. & Thompson, T. A. 2011, *ApJ*, 727, 97
- Arab, H., Abergel, A., Habart, E., et al. 2012, *A&A*, 541, A19
- Arce, H. G., Borkin, M. A., Goodman, A. A., Pineda, J. E., & Halle, M. W. 2010, *ApJ*, 715, 1170
- Argyriou, I., Wells, M., Glasse, A., et al. 2020, *A&A*, 641, A150
- Arthur, S. J. 2012, *MNRAS*, 421, 1283
- Aru, M. L., Maucó, K., Manara, C. F., et al. 2024, *A&A*, 687, A93
- Asvany, O., Thorwirth, S., Redlich, B., & Schlemmer, S. 2018, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 347, 1
- Atahan, S. & Alexander, M. H. 2006, *Journal of Physical Chemistry A*, 110, 5436
- Aumer, M., White, S. D. M., Naab, T., & Scannapieco, C. 2013, *MNRAS*, 434, 3142
- Bakes, E. L. O. & Tielens, A. G. G. M. 1994, *ApJ*, 427, 822
- Ballabio, G., Haworth, T. J., & Henney, W. J. 2023, *MNRAS*, 518, 5563
- Bally, J., O’Dell, C. R., & McCaughrean, M. J. 2000, *AJ*, 119, 2919
- Barnes, A. T., Longmore, S. N., Dale, J. E., et al. 2020, *MNRAS*, 498, 4906

-
- Barnes, A. T., Watkins, E. J., Meidt, S. E., et al. 2023, *ApJ*, 944, L22
- Bell, T. A., Hartquist, T. W., Viti, S., & Williams, D. A. 2006, *A&A*, 459, 805
- Bernard-Salas, J., Habart, E., Arab, H., et al. 2012, *A&A*, 538, A37
- Bernard-Salas, J., Peeters, E., Sloan, G. C., et al. 2009, *ApJ*, 699, 1541
- Bernard-Salas, J. & Tielens, A. G. G. M. 2005, *A&A*, 431, 523
- Berné, O., Habart, É., Peeters, E., et al. 2022, *PASP*, 134, 054301
- Berné, O., Habart, E., Peeters, E., et al. 2024, *Science*, 383, 988
- Berné, O., Marcelino, N., & Cernicharo, J. 2010, *Nature*, 466, 947
- Berné, O., Martin-Drumel, M.-A., Schroetter, I., et al. 2023, *Nature*, 621, 56
- Bertoldi, F. & Draine, B. T. 1996, *ApJ*, 458, 222
- Bethell, T. & Bergin, E. 2009, *Science*, 326, 1675
- Bialy, S., Burkhart, B., & Sternberg, A. 2017, *ApJ*, 843, 92
- Binder, B. A. & Povich, M. S. 2018, *ApJ*, 864, 136
- Bisbas, T. G., Bell, T. A., Viti, S., Yates, J., & Barlow, M. J. 2012, *MNRAS*, 427, 2100
- Bisbas, T. G., Haworth, T. J., Barlow, M. J., et al. 2015, *MNRAS*, 454, 2828
- Black, J. H. 1998, *Faraday Discussions*, 109, 257
- Black, J. H. & Dalgarno, A. 1973, in *Bulletin of the American Astronomical Society*, Vol. 5, 380
- Black, J. H. & van Dishoeck, E. F. 1987, *ApJ*, 322, 412
- Boersma, C., Rubin, R. H., & Allamandola, L. J. 2012, *ApJ*, 753, 168
- Böker, T., Arribas, S., Lützgendorf, N., et al. 2022, *A&A*, 661, A82
- Bosman, A. D., Bergin, E. A., Calahan, J., & Duval, S. E. 2022, *ApJ*, 930, L26
- Bournaud, F., Perret, V., Renaud, F., et al. 2014, *ApJ*, 780, 57
- Boutéraon, T. 2019, *Theses, Université Paris Saclay (COMUE)*
- Boyden, R. D. & Eisner, J. A. 2020, *ApJ*, 894, 74
- Braunstein, M., Adler-Golden, S., Maiti, B., & Schatz, G. C. 2004, *The Journal of Chemical Physics*, 120, 4316
- Bron, E., Agúndez, M., Goicoechea, J. R., & Cernicharo, J. 2018, *arXiv e-prints*, arXiv :1801.01547
- Bron, E., Le Bourlot, J., & Le Petit, F. 2014, *A&A*, 569, A100
- Brooke, J. S. A., Bernath, P. F., Western, C. M., et al. 2016, *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, 168, 142
- Brouard, M., Langford, S. R., & Manolopoulos, D. E. 1994, *The Journal of Chemical Physics*, 101, 7458
- Bruderer, S., Benz, A. O., van Dishoeck, E. F., et al. 2010, *A&A*, 521, L44
- Bruderer, S., van Dishoeck, E. F., Doty, S. D., & Herczeg, G. J. 2012, *A&A*, 541, A91
- Bunker, P., Chan, M., Kraemer, W., & Jensen, P. 2001, *Chemical physics letters*, 341, 358
- Burton, M. G., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1990, *ApJ*, 365, 620
- Capriotti, E. R. & Kozminski, J. F. 2001, *PASP*, 113, 677
- Cardelli, J. A., Clayton, G. C., & Mathis, J. S. 1989, *ApJ*, 345, 245
- Carr, J. S. & Najita, J. R. 2011, *ApJ*, 733, 102

- Carr, J. S. & Najita, J. R. 2014, *ApJ*, 788, 66
- Carroll, J. J., Frank, A., Blackman, E. G., Cunningham, A. J., & Quillen, A. C. 2009, *ApJ*, 695, 1376
- Castor, J., McCray, R., & Weaver, R. 1975a, *ApJ*, 200, L107
- Castor, J. I., Abbott, D. C., & Klein, R. I. 1975b, *ApJ*, 195, 157
- Ceccarelli, C., Caselli, P., Bockelée-Morvan, D., et al. 2014, in *Protostars and Planets VI*, ed. H. Beuther, R. S. Klessen, C. P. Dullemond, & T. Henning, 859–882
- Cernicharo, J., Liu, X. W., González-Alfonso, E., et al. 1997, *ApJ*, 483, L65
- Champion, J., Berné, O., Vicente, S., et al. 2017, *A&A*, 604, A69
- Changala, P. B., Chen, N. L., Le, H. L., et al. 2023, *A&A*, 680, A19
- Changala, P. B., Neufeld, D. A., & Godard, B. 2021, *ApJ*, 917, 16
- Chevance, M. 2016, PhD thesis, Université de Paris Diderot (Paris VII), France
- Chevance, M., Kruijssen, J. M. D., Hygate, A. P. S., et al. 2020, *MNRAS*, 493, 2872
- Chevance, M., Kruijssen, J. M. D., Krumholz, M. R., et al. 2022, *MNRAS*, 509, 272
- Chevance, M., Krumholz, M. R., McLeod, A. F., et al. 2023, in *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, Vol. 534, *Protostars and Planets VII*, ed. S. Inutsuka, Y. Aikawa, T. Muto, K. Tomida, & M. Tamura, 1
- Chiar, J. E. & Tielens, A. G. G. M. 2006, *ApJ*, 637, 774
- Chiar, J. E., Tielens, A. G. G. M., Whittet, D. C. B., et al. 2000, *ApJ*, 537, 749
- Choi, Y., van der Tak, F. F. S., Bergin, E. A., & Plume, R. 2014, *A&A*, 572, L10
- Chown, R., Sidhu, A., Peeters, E., et al. 2024, *A&A*, 685, A75
- Churchwell, E., Felli, M., Wood, D. O. S., & Massi, M. 1987, *ApJ*, 321, 516
- Chuss, D. T., Andersson, B. G., Bally, J., et al. 2019, *ApJ*, 872, 187
- Clarke, C. J. 2007, *MNRAS*, 376, 1350
- Cleeves, L. I., Bergin, E. A., Alexander, C. M. O. D., et al. 2014, *Science*, 345, 1590
- Coleman, G. A. L. & Nelson, R. P. 2014, *MNRAS*, 445, 479
- Compiègne, M., Verstraete, L., Jones, A., et al. 2011, *A&A*, 525, A103
- Cormier, D., Abel, N. P., Hony, S., et al. 2019, *A&A*, 626, A23
- Coudert, L., Gans, B., Holzmeier, F., et al. 2018, *The Journal of Chemical Physics*, 149
- Cox, N. L. J., Pilleri, P., Berné, O., Cernicharo, J., & Joblin, C. 2016, *MNRAS*, 456, L89
- Cuadrado, S., Goicoechea, J. R., Pilleri, P., et al. 2015, *A&A*, 579, C1
- Cubick, M., Stutzki, J., Ossenkopf, V., Kramer, C., & Röllig, M. 2008, *A&A*, 488, 623
- Cunha de Miranda, B. K., Alcaraz, C., Elhanine, M., et al. 2010, *The Journal of Physical Chemistry A*, 114, 4818, PMID : 20218643
- Cunningham, A. J., Frank, A., Carroll, J., Blackman, E. G., & Quillen, A. C. 2009, *ApJ*, 692, 816
- Cunningham, A. J., Frank, A., Quillen, A. C., & Blackman, E. G. 2006, *ApJ*, 653, 416
- Curtis, E. I., Richer, J. S., Swift, J. J., & Williams, J. P. 2010, *MNRAS*, 408, 1516
- Dale, J. E., Ercolano, B., & Bonnell, I. A. 2012, *MNRAS*, 424, 377
- Dale, J. E., Ercolano, B., & Bonnell, I. A. 2013, *MNRAS*, 430, 234
- Dalgarno, A. & McCray, R. A. 1972, *ARA&A*, 10, 375
- de Jong, T., Boland, W., & Dalgarno, A. 1980, *A&A*, 91, 68

-
- Decleir, M., Gordon, K. D., Andrews, J. E., et al. 2022, *ApJ*, 930, 15
- Dell’Ova, P. 2021, Theses, Université Paris sciences et lettres
- Dent, W. R. F., Hovey, G. J., Dewdney, P. E., et al. 2009, *MNRAS*, 395, 1805
- Douglas, A. E. & Herzberg, G. 1941, *ApJ*, 94, 381
- Draine, B. T. 1978, *ApJS*, 36, 595
- Draine, B. T. 2003, *ARA&A*, 41, 241
- Draine, B. T. 2011, *Physics of the Interstellar and Intergalactic Medium*
- Draine, B. T. & Bertoldi, F. 1996, *ApJ*, 468, 269
- Draine, B. T. & Lee, H. M. 1984, *ApJ*, 285, 89
- Duarte-Cabral, A., Chrysostomou, A., Peretto, N., et al. 2012, *A&A*, 543, A140
- Elmegreen, B. G. 2011, in *EAS Publications Series*, Vol. 51, *EAS Publications Series*, ed. C. Charbonnel & T. Montmerle, 45–58
- Elyajouri, M., Ysard, N., Abergel, A., et al. 2024, *A&A*, 685, A76
- Engel, V., Schinke, R., & Staemmler, V. 1988, *The Journal of Chemical Physics*, 88, 129
- Engel, V., Staemmler, V., Vander Wal, R., et al. 1992, *Journal of physical chemistry*, 96, 3201
- Evans, Neal J., I., Dunham, M. M., Jørgensen, J. K., et al. 2009, *ApJS*, 181, 321
- Facchini, S., Clarke, C. J., & Bisbas, T. G. 2016, *MNRAS*, 457, 3593
- Falgarone, E., Godard, B., Cernicharo, J., et al. 2010, *A&A*, 521, L15
- Fall, S. M., Krumholz, M. R., & Matzner, C. D. 2010, *ApJ*, 710, L142
- Fatuzzo, M. & Adams, F. C. 2008, *ApJ*, 675, 1361
- Faure, A., Halvick, P., Stoecklin, T., et al. 2017, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 469, 612
- Faure, A. & Josselin, E. 2008, *A&A*, 492, 257
- Federman, S. R., Glassgold, A. E., & Kwan, J. 1979, *ApJ*, 227, 466
- Feldman, P. D., Festou, M. C., Tozzi, P., & Weaver, H. A. 1997, *The Astrophysical Journal*, 475, 829
- Ferland, G. J., Chatzikos, M., Guzmán, F., et al. 2017, *Rev. Mexicana Astron. Astrofis.*, 53, 385
- Ferland, G. J., Korista, K. T., Verner, D. A., et al. 1998, *PASP*, 110, 761
- Ferland, G. J., Porter, R. L., van Hoof, P. A. M., et al. 2013, *Rev. Mexicana Astron. Astrofis.*, 49, 137
- Ferrière, K. M. 2001, *Reviews of Modern Physics*, 73, 1031
- Fillion, J.-H., Ruiz, J., Yang, X.-F., et al. 2004, *The Journal of Chemical Physics*, 120, 6531
- Fillion, J. H., van Harrevelt, R., Ruiz, J., et al. 2001, *The Journal of Physical Chemistry A*, 105, 11414
- Fitzpatrick, E. L. & Massa, D. 1986, *ApJ*, 307, 286
- Fitzpatrick, E. L. & Massa, D. 1988, *ApJ*, 328, 734
- Fitzpatrick, E. L. & Massa, D. 1990, *ApJS*, 72, 163
- Fitzpatrick, E. L., Massa, D., Gordon, K. D., Bohlin, R., & Clayton, G. C. 2019, *ApJ*, 886, 108
- Flower, D. 2007, *Molecular Collisions in the Interstellar Medium*
- Flower, D. R. & Pineau des Forêts, G. 2015, *A&A*, 578, A63

- Flower, D. R. & Roueff, E. 1998, *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, 31, 2935
- Flower, D. R. & Roueff, E. 1999, *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, 32, 3399
- Fogerty, S., Forrest, W., Watson, D. M., Sargent, B. A., & Koch, I. 2016, *ApJ*, 830, 71
- Foschino, S., Berné, O., & Joblin, C. 2019, *A&A*, 632, A84
- Francis, L., van Gelder, M. L., van Dishoeck, E. F., et al. 2024, *A&A*, 683, A249
- Franco, J., Shore, S. N., & Tenorio-Tagle, G. 1994, *ApJ*, 436, 795
- Franco, J., Tenorio-Tagle, G., & Bodenheimer, P. 1990, *ApJ*, 349, 126
- Freyer, T., Hensler, G., & Yorke, H. W. 2003, *ApJ*, 594, 888
- Galliano, F., Galametz, M., & Jones, A. P. 2018, *ARA&A*, 56, 673
- Galliano, F., Madden, S. C., Tielens, A. G. G. M., Peeters, E., & Jones, A. P. 2008, *ApJ*, 679, 310
- Garcia-Segura, G., Mac Low, M. M., & Langer, N. 1996, *A&A*, 305, 229
- Gavilan, L., Le, K. C., Pino, T., et al. 2017, *A&A*, 607, A73
- Genel, S., Naab, T., Genzel, R., et al. 2012, *ApJ*, 745, 11
- Ginsburg, A., Bally, J., & Williams, J. P. 2011, *MNRAS*, 418, 2121
- Glasse, A., Rieke, G. H., Bauwens, E., et al. 2015, *PASP*, 127, 686
- Glassgold, A. E., Meijerink, R., & Najita, J. R. 2009, *ApJ*, 701, 142
- Godard, B. & Cernicharo, J. 2013, *A&A*, 550, A8
- Godard, B., Pineau des Forêts, G., Lesaffre, P., et al. 2019, *A&A*, 622, A100
- Goicoechea, J. R., Joblin, C., Contursi, A., et al. 2011, *A&A*, 530, L16
- Goicoechea, J. R., Le Bourlot, J., Black, J. H., et al. 2024, *A&A*, 689, L4
- Goicoechea, J. R., Pabst, C. H. M., Kabanovic, S., et al. 2020, *A&A*, 639, A1
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Cuadrado, S., et al. 2016, *Nature*, 537, 207
- Goicoechea, J. R., Rodríguez-Fernández, N. J., & Cernicharo, J. 2004, *ApJ*, 600, 214
- Goicoechea, J. R. & Roncero, O. 2022, *A&A*, 664, A190
- Goicoechea, J. R., Santa-Maria, M. G., Bron, E., et al. 2019, *A&A*, 622, A91
- Goldbaum, N. J., Krumholz, M. R., Matzner, C. D., & McKee, C. F. 2011, *ApJ*, 738, 101
- Gonzalez Garcia, M., Le Bourlot, J., Le Petit, F., & Roueff, E. 2008, *A&A*, 485, 127
- Gordon, K. D., Cartledge, S., & Clayton, G. C. 2009, *ApJ*, 705, 1320
- Gordon, K. D., Clayton, G. C., Declair, M., et al. 2023, *ApJ*, 950, 86
- Gorti, U. & Hollenbach, D. 2002, *ApJ*, 573, 215
- Gottfried, J. L. & Oka, T. 2004, *The Journal of chemical physics*, 121, 11527
- Gould, R. J. & Salpeter, E. E. 1963, *ApJ*, 138, 393
- Graves, S. F., Richer, J. S., Buckle, J. V., et al. 2010, *MNRAS*, 409, 1412
- Gritschneider, M., Naab, T., Walch, S., Burkert, A., & Heitsch, F. 2009, *ApJ*, 694, L26
- Großschedl, J. E., Alves, J., Meingast, S., et al. 2018, *A&A*, 619, A106
- Güdel, M., Briggs, K. R., Montmerle, T., et al. 2008, *Science*, 319, 309
- Guerra, J. A., Chuss, D. T., Dowell, C. D., et al. 2021, *ApJ*, 908, 98
- Guo, H. & Murrell, J. N. 1988, *Molecular Physics*, 65, 821
- Habart, E., Abergel, A., Boulanger, F., et al. 2011, *A&A*, 527, A122

-
- Habart, E., Boulanger, F., Verstraete, L., Walmsley, C. M., & Pineau des Forêts, G. 2004, *A&A*, 414, 531
- Habart, E., Dartois, E., Abergel, A., et al. 2010, *A&A*, 518, L116
- Habart, E., Le Gal, R., Alvarez, C., et al. 2023, *A&A*, 673, A149
- Habart, E., Peeters, E., Berné, O., et al. 2024, *A&A*, 685, A73
- Habart, E., Walmsley, M., Verstraete, L., et al. 2005, *Space Sci. Rev.*, 119, 71
- Habing, H. J. 1968, *Bulletin of the Astronomical Institutes of the Netherlands*, 19, 421
- Hagemann, R., Nief, G., & Roth, E. 1970, *Tellus*, 22, 712
- Haid, S., Walch, S., Seifried, D., et al. 2018, *MNRAS*, 478, 4799
- Hamilton, J. R., Faure, A., & Tennyson, J. 2016, *MNRAS*, 455, 3281
- Hammami, K., Nkem, C., Owono Owono, L. C., Jaidane, N., & Ben Lakhdar, Z. 2008, *J. Chem. Phys.*, 129, 204305
- Hammami, K., Owono Owono, L. C., & Stäuber, P. 2009, *A&A*, 507, 1083
- Harich, S. A., Hwang, D. W. H., Yang, X., et al. 2000, *The Journal of Chemical Physics*, 113, 10073
- Harich, S. A., Yang, X., Yang, X., & Dixon, R. N. 2001, *Phys. Rev. Lett.*, 87, 253201
- Harper-Clark, E. & Murray, N. 2009, *ApJ*, 693, 1696
- Haworth, T. J. 2021, *MNRAS*, 503, 4172
- Haworth, T. J., Boubert, D., Facchini, S., Bisbas, T. G., & Clarke, C. J. 2016, *MNRAS*, 463, 3616
- Haworth, T. J., Clarke, C. J., Rahman, W., Winter, A. J., & Facchini, S. 2018, *MNRAS*, 481, 452
- Haworth, T. J., Coleman, G. A. L., Qiao, L., Sellek, A. D., & Askari, K. 2023a, *MNRAS*, 526, 4315
- Haworth, T. J., Reiter, M., O'Dell, C. R., et al. 2023b, *MNRAS*, 525, 4129
- Heays, A. N., Bosman, A. D., & van Dishoeck, E. F. 2017, *A&A*, 602, A105
- Henney, W. J. & Arthur, S. J. 1998, *AJ*, 116, 322
- Henney, W. J. & O'Dell, C. R. 1999, *AJ*, 118, 2350
- Henning, T., Kamp, I., Samland, M., et al. 2024, *PASP*, 136, 054302
- Herbst, E. 1987, in *Interstellar Processes*, ed. D. J. Hollenbach & J. Thronson, Harley A., Vol. 134, 611
- Herbst, E. 2021, *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*, 8, 207
- Hernández, J., Calvet, N., Perez, A., et al. 2014, *ApJ*, 794, 36
- Hierl, P. M., Morris, R. A., & Viggiano, A. A. 1997, *J. Chem. Phys.*, 106, 10145
- Hogerheijde, M. R., de Geus, E. J., Spaans, M., van Langevelde, H. J., & van Dishoeck, E. F. 1995, *ApJ*, 441, L93
- Hollenbach, D., Kaufman, M. J., Bergin, E. A., & Melnick, G. J. 2009, *ApJ*, 690, 1497
- Hollenbach, D. & Natta, A. 1995, *ApJ*, 455, 133
- Hollenbach, D. & Salpeter, E. E. 1971, *ApJ*, 163, 155
- Hollenbach, D. J. & Tielens, A. G. G. M. 1997, *ARA&A*, 35, 179
- Hollenbach, D. J. & Tielens, A. G. G. M. 1999, *Reviews of Modern Physics*, 71, 173
- Hopkins, P. F., Kereš, D., Oñorbe, J., et al. 2014, *MNRAS*, 445, 581

- Hopkins, P. F., Quataert, E., & Murray, N. 2011, *MNRAS*, 417, 950
- Hopkins, P. F., Quataert, E., & Murray, N. 2012a, *MNRAS*, 421, 3522
- Hopkins, P. F., Quataert, E., & Murray, N. 2012b, *MNRAS*, 421, 3488
- Hosokawa, T. & Inutsuka, S.-i. 2006, *ApJ*, 646, 240
- Huber, K. P. & Herzberg, G. 1979, *Molecular Spectra and Molecular Structure* (Springer US)
- Hwang, D. W., Yang, X., & Yang, X. 1999, *The Journal of Chemical Physics*, 110, 4119
- Häusler, D., Andresen, P., & Schinke, R. 1987, *The Journal of Chemical Physics*, 87, 3949
- Inoguchi, M., Hosokawa, T., Mineshige, S., & Kim, J.-G. 2020, *MNRAS*, 497, 5061
- Jambrina, P. G., Zanchet, A., Aldegunde, J., Brouard, M., & Aoiz, F. J. 2016, *Nature Communications*, 7, 13439
- Jensen, P., Brumm, M., Kraemer, W., & Bunker, P. 1995, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 172, 194
- Jensen, S. S., Jørgensen, J. K., Kristensen, L. E., et al. 2021, *A&A*, 650, A172
- Joblin, C., Bron, E., Pinto, C., et al. 2018, *A&A*, 615, A129
- Joblin, C., Leger, A., & Martin, P. 1992, *ApJ*, 393, L79
- Johnson, H. L. 1965, *ApJ*, 141, 923
- Johnstone, D. & Bally, J. 1999, *ApJ*, 510, L49
- Jones, A. P. 1990, *MNRAS*, 247, 305
- Jones, A. P. 2016, *Royal Society Open Science*, 3, 160223
- 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, M. E., Barlow, S., Ellison, G., & Ferguson, E. 1986, *Chemical Physics Letters*, 130, 218
- Judge, D. L. & Lee, L. C. 1973, *The Journal of Chemical Physics*, 58, 104
- Jura, M. 1975, *ApJ*, 197, 575
- Jura, M. 1976, *ApJ*, 204, 12
- Juvela, M. 2019, *A&A*, 622, A79
- Kalogerakis, K. S., Romanescu, C., Ahmed, M., Wilson, K. R., & Slinger, T. G. 2012, *Icarus*, 220, 205
- Kamp, I., Tilling, I., Woitke, P., Thi, W. F., & Hogerheijde, M. 2010, *A&A*, 510, A18
- Kaplan, K. F., Dinerstein, H. L., Kim, H., & Jaffe, D. T. 2021, *The Astrophysical Journal*, 919, 27
- Kaplan, K. F., Dinerstein, H. L., Oh, H., et al. 2017, *ApJ*, 838, 152
- Kaufman, M. J., Wolfire, M. G., & Hollenbach, D. J. 2006, *ApJ*, 644, 283
- Kavak, Ü., van der Tak, F. F. S., Tielens, A. G. G. M., & Shipman, R. F. 2019, *A&A*, 631, A117
- Keceli, M., Shiozaki, T., Yagi, K., & Hirata, S. 2009, *Molecular Physics*, 107, 1283
- Kim, J.-h., Ma, X., Grudić, M. Y., et al. 2018, *MNRAS*, 474, 4232
- Kirsanova, M. S., Ossenkopf-Okada, V., Anderson, L. D., et al. 2020, *MNRAS*, 497, 2651
- Kłos, J., Lique, F., & Alexander, M. H. 2007, *Chemical Physics Letters*, 445, 12
- Knee, L. B. G. & Sandell, G. 2000, *A&A*, 361, 671
- Knight, C., Peeters, E., Stock, D. J., Vacca, W. D., & Tielens, A. G. G. M. 2021, *ApJ*, 918, 8

-
- Knight, C., Peeters, E., Tielens, A. G. G. M., & Vacca, W. D. 2022, *MNRAS*, 509, 3523
- Koo, B.-C., Kim, C.-G., Park, S., & Ostriker, E. C. 2020, *ApJ*, 905, 35
- Kounkel, M., Covey, K., Suárez, G., et al. 2018, *AJ*, 156, 84
- Kounkel, M., Hartmann, L., Loinard, L., et al. 2017, *ApJ*, 834, 142
- Kraemer, W., Jensen, P., & Bunker, P. 1994, *Canadian Journal of Physics*, 72, 871
- Kraemer, W. & Špirko, V. 1991, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 149, 235
- Kristensen, L. E., van Dishoeck, E. F., Mottram, J. C., et al. 2017, *A&A*, 605, A93
- Kruijssen, J. M. D., Schrubba, A., Chevance, M., et al. 2019, *Nature*, 569, 519
- Kruijssen, J. M. D., Schrubba, A., Hygate, A. P. S., et al. 2018, *MNRAS*, 479, 1866
- Krumholz, M. R., Bate, M. R., Arce, H. G., et al. 2014, in *Protostars and Planets VI*, ed. H. Beuther, R. S. Klessen, C. P. Dullemond, & T. Henning, 243
- Krumholz, M. R., Cunningham, A. J., Klein, R. I., & McKee, C. F. 2010, *ApJ*, 713, 1120
- Krumholz, M. R., Klein, R. I., & McKee, C. F. 2005, in *Massive Star Birth : A Crossroads of Astrophysics*, ed. R. Cesaroni, M. Felli, E. Churchwell, & M. Walmsley, Vol. 227, 231–236
- Krumholz, M. R., Klein, R. I., & McKee, C. F. 2007, *ApJ*, 656, 959
- Krumholz, M. R. & Matzner, C. D. 2009, *ApJ*, 703, 1352
- Krumholz, M. R., Matzner, C. D., & McKee, C. F. 2006, *ApJ*, 653, 361
- Krumholz, M. R., McKee, C. F., & Bland-Hawthorn, J. 2019, *ARA&A*, 57, 227
- Krumholz, M. R. & Tan, J. C. 2007, *ApJ*, 654, 304
- Kuhn, M. A., Hillenbrand, L. A., Sills, A., Feigelson, E. D., & Getman, K. V. 2019, *ApJ*, 870, 32
- Labiano, A., Argyriou, I., Álvarez-Márquez, J., et al. 2021, *A&A*, 656, A57
- Labiano, A., Azzollini, R., Bailey, J., et al. 2016, in *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, Vol. 9910, *Observatory Operations : Strategies, Processes, and Systems VI*, ed. A. B. Peck, R. L. Seaman, & C. R. Benn, 99102W
- Lancaster, L., Ostriker, E. C., Kim, J.-G., & Kim, C.-G. 2021a, *ApJ*, 914, 89
- Lancaster, L., Ostriker, E. C., Kim, J.-G., & Kim, C.-G. 2021b, *ApJ*, 914, 90
- Lancaster, L., Ostriker, E. C., Kim, J.-G., & Kim, C.-G. 2021c, *ApJ*, 922, L3
- Law, D. R., E. Morrison, J., Argyriou, I., et al. 2023, *AJ*, 166, 45
- Lawrence, G. M. 1972, *The Journal of Chemical Physics*, 56, 3435
- Le Bourlot, J., Le Petit, F., Pinto, C., Roueff, E., & Roy, F. 2012, *A&A*, 541, A76
- Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., & Roueff, E. 2006, *ApJS*, 164, 506
- Le Petit, F., Roueff, E., & Le Bourlot, J. 2002, *A&A*, 390, 369
- Lee, K., Looney, L. W., Schnee, S., & Li, Z.-Y. 2013, *ApJ*, 772, 100
- Lee, L. C. & Judge, D. L. 1973, *Canadian Journal of Physics*, 51, 378
- Leitherer, C., Robert, C., & Drissen, L. 1992, *ApJ*, 401, 596
- Levrier, F., Le Petit, F., Hennebelle, P., et al. 2012, *A&A*, 544, A22
- Li, Z.-Y. & Nakamura, F. 2006, *ApJ*, 640, L187
- Lis, D. C. & Schilke, P. 2003, *ApJ*, 597, L145
- Liu, X., Lin, J. J., Harich, S., Schatz, G. C., & Yang, X. 2000, *Science*, 289, 1536
- L.J. Dunne, H. G. & Murrell, J. 1987, *Molecular Physics*, 62, 283

- Lopez, L. A., Krumholz, M. R., Bolatto, A. D., Prochaska, J. X., & Ramirez-Ruiz, E. 2011, *ApJ*, 731, 91
- Lopez, L. A., Krumholz, M. R., Bolatto, A. D., et al. 2014, *ApJ*, 795, 121
- Luhman, M. L., Jaffe, D. T., Keller, L. D., & Pak, S. 1994, *ApJ*, 436, L185
- Mac Low, M.-M., Toraskar, J., Oishi, J. S., & Abel, T. 2007, *ApJ*, 668, 980
- Mackey, J. & Lim, A. J. 2011, *MNRAS*, 412, 2079
- Maillard, V., Bron, E., & Le Petit, F. 2021, in *SF2A-2021 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics*. Eds. : A. Siebert, ed. A. Siebert, K. Baillié, E. Lagadec, N. Lagarde, J. Malzac, J. B. Marquette, M. N'Diaye, J. Richard, & O. Venot, 81–84
- Maiti, B. & Schatz, G. C. 2003, *The Journal of Chemical Physics*, 119, 12360
- Malhotra, S., Kaufman, M. J., Hollenbach, D., et al. 2001, *ApJ*, 561, 766
- Manara, C. F., Robberto, M., Da Rio, N., et al. 2012, *ApJ*, 755, 154
- Mandell, A. M., Bast, J., van Dishoeck, E. F., et al. 2012, *ApJ*, 747, 92
- Marconi, A., Testi, L., Natta, A., & Walmsley, C. M. 1998, *A&A*, 330, 696
- Mathis, J. S., Mezger, P. G., & Panagia, N. 1983, *A&A*, 500, 259
- Matzner, C. D. 2002, *ApJ*, 566, 302
- Matzner, C. D. 2007, *ApJ*, 659, 1394
- Matzner, C. D. & McKee, C. F. 2000, *ApJ*, 545, 364
- Maucó, K., Manara, C. F., Ansdell, M., et al. 2023, *A&A*, 679, A82
- Mayya, Y. D., Alzate, J. A., Lomelí-Núñez, L., et al. 2023, *MNRAS*, 521, 5492
- McKee, C. F. & Williams, J. P. 1997, *ApJ*, 476, 144
- McLeod, A. F., Dale, J. E., Evans, C. J., et al. 2019, *MNRAS*, 486, 5263
- McLeod, A. F., Kruijssen, J. M. D., Weisz, D. R., et al. 2020, *ApJ*, 891, 25
- Mellema, G., Arthur, S. J., Henney, W. J., Iliiev, I. T., & Shapiro, P. R. 2006, *ApJ*, 647, 397
- Menten, K. M., Reid, M. J., Forbrich, J., & Brunthaler, A. 2007, *A&A*, 474, 515
- Meyer, D. M., Cardelli, J. A., & Sofia, U. J. 1997, *ApJ*, 490, L103
- Meyer, D. M., Jura, M., & Cardelli, J. A. 1998, *ApJ*, 493, 222
- Muno, M. P., Clark, J. S., Crowther, P. A., et al. 2006a, *ApJ*, 636, L41
- Muno, M. P., Law, C., Clark, J. S., et al. 2006b, *ApJ*, 650, 203
- Murga, M. S., Kirsanova, M. S., Wiebe, D. S., & Boley, P. A. 2022, *MNRAS*, 509, 800
- Murray, N., Quataert, E., & Thompson, T. A. 2010, *ApJ*, 709, 191
- Nagy, Z., Choi, Y., Ossenkopf-Okada, V., et al. 2017, *A&A*, 599, A22
- Nagy, Z., van der Tak, F. F. S., Fuller, G. A., Spaans, M., & Plume, R. 2012, *A&A*, 542, A6
- Nagy, Z., Van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, 550, A96
- Najita, J. R., Carr, J. S., Strom, S. E., et al. 2010, *ApJ*, 712, 274
- Nakamura, F. & Li, Z.-Y. 2007, *ApJ*, 662, 395
- Nakamura, F. & Li, Z.-Y. 2011, *ApJ*, 740, 36
- Narayanan, G., Snell, R., & Bemis, A. 2012, *MNRAS*, 425, 2641
- Naylor, D. A., Dartois, E., Habart, E., et al. 2010, *A&A*, 518, L117
- Ndugu, N., Bitsch, B., & Jurua, E. 2018, *MNRAS*, 474, 886

-
- Neufeld, D. A., Godard, B., Bryan Changala, P., et al. 2021, *ApJ*, 917, 15
- Neufeld, D. A. & Kaufman, M. J. 1993, *ApJ*, 418, 263
- Neufeld, D. A., Manoj, P., Tyagi, H., et al. 2024, *ApJ*, 966, L22
- O’Dell, C. R., Abel, N. P., & Ferland, G. J. 2020, *ApJ*, 891, 46
- O’Dell, C. R. & Harris, J. A. 2010, *AJ*, 140, 985
- O’Dell, C. R., Kollatschny, W., & Ferland, G. J. 2017, *ApJ*, 837, 151
- O’Dell, C. R. & Wen, Z. 1994, *ApJ*, 436, 194
- O’Dell, C. R., Wen, Z., & Hu, X. 1993, *ApJ*, 410, 696
- Offer, A. R., van Hemert, M. C., & van Dishoeck, E. F. 1994, *J. Chem. Phys.*, 100, 362
- Offner, S. S. R. & Chaban, J. 2017, *ApJ*, 847, 104
- Olivier, G. M., Lopez, L. A., Rosen, A. L., et al. 2021, *ApJ*, 908, 68
- Osmann, G., Bunker, P. R., Jensen, P., & Kraemer, W. P. 1997, *Chemical Physics*, 225, 33
- Ossenkopf, V., Röllig, M., Neufeld, D. A., et al. 2013, *A&A*, 550, A57
- Osterbrock, D. E. & Ferland, G. J. 2006, *Astrophysics of gaseous nebulae and active galactic nuclei*
- Owen, J. E., Ercolano, B., & Clarke, C. J. 2011, *MNRAS*, 411, 1104
- Owen, J. E., Ercolano, B., Clarke, C. J., & Alexander, R. D. 2010, *MNRAS*, 401, 1415
- Pabst, C., Higgins, R., Goicoechea, J. R., et al. 2019, *Nature*, 565, 618
- Pabst, C. H. M., Goicoechea, J. R., Hacar, A., et al. 2022, *A&A*, 658, A98
- Pabst, C. H. M., Goicoechea, J. R., Teyssier, D., et al. 2020, *A&A*, 639, A2
- Papadopoulos, P. P., Thi, W. F., & Viti, S. 2002, *ApJ*, 579, 270
- Parikka, A., Habart, E., Bernard-Salas, J., et al. 2017, *A&A*, 599, A20
- Parikka, A., Habart, E., Bernard-Salas, J., Köhler, M., & Abergel, A. 2018, *A&A*, 617, A77
- Parmar, P. S., Lacy, J. H., & Achtermann, J. M. 1991, *ApJ*, 372, L25
- Peeters, E., Habart, Emilie, Berné, Olivier, et al. 2024, *A&A*, 685, A74
- Pellegrini, E. W., Baldwin, J. A., & Ferland, G. J. 2011, *ApJ*, 738, 34
- Pellegrini, E. W., Baldwin, J. A., Ferland, G. J., Shaw, G., & Heathcote, S. 2009, *ApJ*, 693, 285
- Pellegrini, E. W., Rahner, D., Reissl, S., et al. 2020, *MNRAS*, 496, 339
- Persson, M. V., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Harsono, D. 2014, *A&A*, 563, A74
- Pety, J., Teyssier, D., Fossé, D., et al. 2005, *A&A*, 435, 885
- Pilleri, P., Montillaud, J., Berné, O., & Joblin, C. 2012, *A&A*, 542, A69
- Plunkett, A. L., Arce, H. G., Corder, S. A., et al. 2013, *ApJ*, 774, 22
- Pokhrel, R., Gutermuth, R. A., Krumholz, M. R., et al. 2021, *ApJ*, 912, L19
- Pontoppidan, K. M., Salyk, C., Bergin, E. A., et al. 2014, in *Protostars and Planets VI*, ed. H. Beuther, R. S. Klessen, C. P. Dullemond, & T. Henning, 363–385
- Pound, M. W. & Wolfire, M. G. 2008, in *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, Vol. 394, *Astronomical Data Analysis Software and Systems XVII*, ed. R. W. Argyle, P. S. Bunclark, & J. R. Lewis, 654
- Pound, M. W. & Wolfire, M. G. 2011, *PDRT : Photo Dissociation Region Toolbox*
- Pound, M. W. & Wolfire, M. G. 2023, *AJ*, 165, 25

- Priestley, F. D., Barlow, M. J., & Viti, S. 2017, *MNRAS*, 472, 4444
- Prodanović, T., Steigman, G., & Fields, B. D. 2010, *MNRAS*, 406, 1108
- Prozesky, A. & Smits, D. P. 2018, *MNRAS*, 478, 2766
- Putaud, T., Michaut, X., Le Petit, F., Roueff, E., & Lis, D. C. 2019, *A&A*, 632, A8
- Quillen, A. C., Thorndike, S. L., Cunningham, A., et al. 2005, *ApJ*, 632, 941
- Raghuram, S. & Bhardwaj, A. 2012, *Planetary and Space Science*, 63-64, 139, advances in Planetary Atmospheres and Exploration
- Rangwala, N., Maloney, P. R., Glenn, J., et al. 2014, *ApJ*, 788, 147
- Rigby, J., Perrin, M., McElwain, M., et al. 2023, *PASP*, 135, 048001
- Robberto, M., Gennaro, M., Ubeira Gabellini, M. G., et al. 2020, *ApJ*, 896, 79
- Robberto, M., Soderblom, D. R., Bergeron, E., et al. 2013, *ApJS*, 207, 10
- Rogers, H. & Pittard, J. M. 2013, *MNRAS*, 431, 1337
- Röllig, M., Abel, N. P., Bell, T., et al. 2007, *A&A*, 467, 187
- Röllig, M., Szczerba, R., Ossenkopf, V., & Glück, C. 2013, *A&A*, 549, A85
- Rösslein, M., Gabrys, C., Jagod, M.-F., & Oka, T. 1992, *Journal of molecular spectroscopy (Print)*, 153, 738
- Rubin, R. H., Simpson, J. P., O'Dell, C. R., et al. 2011, *MNRAS*, 410, 1320
- Salgado, F., Berné, O., Adams, J. D., et al. 2016, *ApJ*, 830, 118
- Salyk, C., Pontoppidan, K. M., Blake, G. A., Najita, J. R., & Carr, J. S. 2011, *ApJ*, 731, 130
- Savage, B. D. & Sembach, K. R. 1996, *ApJ*, 470, 893
- Schirmer, T., Abergel, A., Verstraete, L., et al. 2020, *A&A*, 639, A144
- Schirmer, T., Ysard, N., Habart, E., et al. 2022, *A&A*, 666, A49
- Schneider, N., Simon, R., Guevara, C., et al. 2020, *PASP*, 132, 104301
- Schöier, F. L., van der Tak, F. F. S., van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 2005, *A&A*, 432, 369
- Schultz, G. V. & Wiemer, W. 1975, *A&A*, 43, 133
- Scoville, N. Z., Polletta, M., Ewald, S., et al. 2001, *AJ*, 122, 3017
- Segev, E. & Shapiro, M. 1982, *The Journal of Chemical Physics*, 77, 5604
- Selman, F., Melnick, J., Bosch, G., & Terlevich, R. 1999, *A&A*, 347, 532
- Seo, Y. M., Goldsmith, P. F., Walker, C. K., et al. 2019, *ApJ*, 878, 120
- Shaw, G., Ferland, G. J., Henney, W. J., et al. 2009, *ApJ*, 701, 677
- Sheffer, Y., Wolfire, M. G., Hollenbach, D. J., Kaufman, M. J., & Cordier, M. 2011, *ApJ*, 741, 45
- Skouteris, D., Castillo, J. F., & Manolopoulos, D. E. 2000, *Comp. Phys. Comm.*, 133, 128
- Smith, D. 1992, *Chemical Reviews*, 92, 1473
- Smith, M. C., Bryan, G. L., Somerville, R. S., et al. 2021, *MNRAS*, 506, 3882
- Soam, A., Andersson, B. G., Straizys, V., et al. 2021, *AJ*, 161, 149
- Sofia, U. J., Cardelli, J. A., Guerin, K. P., & Meyer, D. M. 1997, *ApJ*, 482, L105
- Spinoglio, L., Pereira-Santaella, M., Busquet, G., et al. 2012, *ApJ*, 758, 108
- Stahler, S. W. & Palla, F. 2004, *The Formation of Stars*
- Stecher, T. P. 1965, *ApJ*, 142, 1683
- Stecher, T. P. 1969, *ApJ*, 157, L125

-
- Stecher, T. P. & Williams, D. A. 1972, *ApJ*, 177, L141
- Steglich, M., Bouwman, J., Huisken, F., & Henning, T. 2011, *ApJ*, 742, 2
- Stephens, T. L. & Dalgarno, A. 1973, *ApJ*, 186, 165
- Sternberg, A. & Dalgarno, A. 1989, *ApJ*, 338, 197
- Sternberg, A. & Dalgarno, A. 1995, *ApJS*, 99, 565
- Stinson, G. S., Brook, C., Macciò, A. V., et al. 2013, *MNRAS*, 428, 129
- Störzer, H. & Hollenbach, D. 1998, *ApJ*, 502, L71
- Stutzki, J. & Guesten, R. 1990, *ApJ*, 356, 513
- Suin, P., Zavagno, A., Colman, T., et al. 2024, *A&A*, 682, A76
- Swift, J. J. & Welch, W. J. 2008, *ApJS*, 174, 202
- Tabone, B., Raga, A., Cabrit, S., & Pineau des Forêts, G. 2018, *A&A*, 614, A119
- Tabone, B., Van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 2024, *A&A*, 691, A11
- Tabone, B., van Hemert, M. C., van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 2021, *A&A*, 650, A192
- Tappe, A., Forbrich, J., Martín, S., Yuan, Y., & Lada, C. J. 2012, *ApJ*, 751, 9
- Tappe, A., Lada, C. J., Black, J. H., & Muench, A. A. 2008, *ApJ*, 680, L117
- Tauber, J. A., Tielens, A. G. G. M., Meixner, M., & Goldsmith, P. F. 1994, *ApJ*, 422, 136
- Temmink, M., van Dishoeck, E. F., Gasman, D., et al. 2024, *A&A*, 689, A330
- Tenorio-Tagle, G., Silich, S., Martínez-González, S., et al. 2013, *ApJ*, 778, 159
- Tenorio-Tagle, G., Wünsch, R., Silich, S., & Palouš, J. 2007, *ApJ*, 658, 1196
- Thi, W. F., Ménard, F., Meeus, G., et al. 2011, *A&A*, 530, L2
- Thi, W. F., Woitke, P., & Kamp, I. 2010, *MNRAS*, 407, 232
- Thompson, T. A., Quataert, E., & Murray, N. 2005, *ApJ*, 630, 167
- Tielens, A. G. G. M. 1983, *A&A*, 119, 177
- Tielens, A. G. G. M. 2005, *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*
- Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985a, *ApJ*, 291, 722
- Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985b, *ApJ*, 291, 747
- Tielens, A. G. G. M., Meixner, M. M., van der Werf, P. P., et al. 1993, *Science*, 262, 86
- Toalá, J. A. & Arthur, S. J. 2011, *ApJ*, 737, 100
- Tobin, J. J., van't Hoff, M. L. R., Leemker, M., et al. 2023, *Nature*, 615, 227
- Townsley, L. K., Broos, P. S., Feigelson, E. D., et al. 2006, *AJ*, 131, 2140
- Tremblin, P., Audit, E., Minier, V., Schmidt, W., & Schneider, N. 2012, *A&A*, 546, A33
- Truong, T. N. 1995, *J. Chem. Phys.*, 102, 5335
- Tychoniec, Ł., van Gelder, M. L., van Dishoeck, E. F., et al. 2024, *A&A*, 687, A36
- van Breemen, J. M., Min, M., Chiar, J. E., et al. 2011, *A&A*, 526, A152
- Van De Putte, D., Meshaka, R., Trahin, B., et al. 2024, *A&A*, 687, A86
- van der Tak, F. F. S., Black, J. H., Schöier, F. L., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 2007, *A&A*, 468, 627
- van der Tak, F. F. S., Nagy, Z., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, 560, A95
- van der Werf, P. P., Stutzki, J., Sternberg, A., & Krabbe, A. 1996, *A&A*, 313, 633
- van Dishoeck, E. F. & Black, J. H. 1986, *ApJS*, 62, 109
- van Dishoeck, E. F. & Dalgarno, A. 1984, *ApJ*, 277, 576

- van Dishoeck, E. F., Herbst, E., & Neufeld, D. A. 2013, *Chemical Reviews*, 113, 9043
- van Dishoeck, E. F., Kristensen, L. E., Mottram, J. C., et al. 2021, *A&A*, 648, A24
- van Harrevelt, R. & van Hemert, M. C. 2000a, *J. Chem. Phys.*, 112, 5777
- van Harrevelt, R. & van Hemert, M. C. 2000b, *J. Chem. Phys.*, 112, 5787
- van Harrevelt, R. & van Hemert, M. C. 2001, *J. Chem. Phys.*, 114, 9453
- Verdolini, S., Yeh, S. C. C., Krumholz, M. R., Matzner, C. D., & Tielens, A. G. G. M. 2013, *ApJ*, 769, 12
- Veselinova, A., Agúndez, M., Goicoechea, J. R., et al. 2021, *A&A*, 648, A76
- Vink, J. S., de Koter, A., & Lamers, H. J. G. L. M. 2000, *A&A*, 362, 295
- Visser, R., Geers, V. C., Dullemond, C. P., et al. 2007, in *Molecules in Space and Laboratory*, ed. J. L. Lemaire & F. Combes, 102
- von Dirke, M., Heumann, B., Kühl, K., Schröder, T., & Schinke, R. 1994, *The Journal of Chemical Physics*, 101, 2051
- Wakelam, V., Bron, E., Cazaux, S., et al. 2017, *Molecular Astrophysics*, 9, 1
- Walawender, J., Bally, J., & Reipurth, B. 2005, *AJ*, 129, 2308
- Walch, S., Whitworth, A. P., Bisbas, T. G., Wunsch, R., & Hubber, D. A. 2013, *MNRAS*, 435, 917
- Walch, S. K., Whitworth, A. P., Bisbas, T., Wunsch, R., & Hubber, D. 2012, *MNRAS*, 427, 625
- Walmsley, C. M., Natta, A., Oliva, E., & Testi, L. 2000, *A&A*, 364, 301
- Watson, W. D. 1972, *ApJ*, 176, 103
- Weaver, H. A., Feldman, P. D., McPhate, J. B., et al. 1994, *ApJ*, 422, 374
- Weaver, R., McCray, R., Castor, J., Shapiro, P., & Moore, R. 1977, *ApJ*, 218, 377
- Weck, P. F., Balakrishnan, N., Brandão, J., Rosa, C., & Wang, W. 2006, *The Journal of Chemical Physics*, 124, 074308
- Weide, K., Hennig, S., & Schinke, R. 1989, *The Journal of Chemical Physics*, 91, 7630
- Weide, K. & Schinke, R. 1987, *The Journal of Chemical Physics*, 87, 4627
- Weilbacher, P. M., Monreal-Ibero, A., Kollatschny, W., et al. 2015, *A&A*, 582, A114
- Wesson, R., Cernicharo, J., Barlow, M. J., et al. 2010, *A&A*, 518, L144
- Whittet, D. C. B., Boogert, A. C. A., Gerakines, P. A., et al. 1997, *ApJ*, 490, 729
- Whittet, D. C. B. & van Breda, I. G. 1980, *MNRAS*, 192, 467
- Whitworth, A. 1979, *MNRAS*, 186, 59
- Williams, J. P. & McKee, C. F. 1997, *ApJ*, 476, 166
- Willitsch, S. & Merkt, F. 2003, *The Journal of chemical physics*, 118, 2235
- Winn, J. N. & Fabrycky, D. C. 2015, *ARA&A*, 53, 409
- Winter, A. J., Clarke, C. J., Rosotti, G. P., Hacar, A., & Alexander, R. 2019, *MNRAS*, 490, 5478
- Winter, A. J. & Haworth, T. J. 2022, *European Physical Journal Plus*, 137, 1132
- Woitke, P., Kamp, I., & Thi, W. F. 2009, *A&A*, 501, 383
- Wolfire, M. G., Vallini, L., & Chevance, M. 2022, *ARA&A*, 60, 247
- Wrathmall, S. A. & Flower, D. R. 2007, *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, 40, 3221

-
- Wu, R., Bron, E., Onaka, T., et al. 2018, *A&A*, 618, A53
- Yang, X. F., Hwang, D. W., Lin, J. J., & Ying, X. 2000, *The Journal of Chemical Physics*, 113, 10597
- Yeh, S. C. C. & Matzner, C. D. 2012, *ApJ*, 757, 108
- Yeh, S. C. C., Verdolini, S., Krumholz, M. R., Matzner, C. D., & Tielens, A. G. G. M. 2013, *ApJ*, 769, 11
- Yorke, H. W. & Sonnhalter, C. 2002, *ApJ*, 569, 846
- Yorke, H. W., Tenorio-Tagle, G., Bodenheimer, P., & Rozyczka, M. 1989, *A&A*, 216, 207
- Young Owl, R. C., Meixner, M. M., Fong, D., et al. 2002, *ApJ*, 578, 885
- Yousefi, M., Bernath, P. F., Hodges, J., & Masseron, T. 2018, *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, 217, 416
- Zamora-Avilés, M. & Vázquez-Semadeni, E. 2014, *ApJ*, 793, 84
- Zamora-Avilés, M., Vázquez-Semadeni, E., & Colín, P. 2012, *ApJ*, 751, 77
- Zanchet, A., Godard, B., Bulut, N., et al. 2013, *ApJ*, 766, 80
- Zanchet, A., Menendez, M., Jambrina, P. G., & Aoiz, F. J. 2019, *J. Chem. Phys.*, 151, 094307
- Zannese, M., Tabone, B., Habart, E., et al. 2024, *Nature Astronomy*, 8, 577
- Zannese, M., Tabone, B., Habart, E., et al. 2023, *A&A*, 671, A41
- Zellner, R. & Steinert, W. 1981, *Chemical Physics Letters*, 81, 568
- Zhang, D. H. & Zhang, J. Z. H. 1994, *J. Chem. Phys.*, 100, 2697
- Zhang, Z. E., Cummings, S. J., Wan, Y., Yang, B., & Stancil, P. C. 2021, *ApJ*, 912, 116
- Zhou, L., Xie, D., & Guo, H. 2015, *J. Comp. Phys*, 142, 124317
- Zuckerman, B. & Evans, N. J., I. 1974, *ApJ*, 192, L149