



HAL
open science

Structures dissipatives du milieu interstellaire : observations et modélisations

Benjamin Godard

► **To cite this version:**

Benjamin Godard. Structures dissipatives du milieu interstellaire : observations et modélisations. Astrophysique galactique [astro-ph.GA]. Université Paris Sud - Paris 11, 2010. Français. NNT : 2010PA112027 . tel-04638853

HAL Id: tel-04638853

<https://hal.science/tel-04638853>

Submitted on 8 Jul 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.

Structures dissipatives du milieu interstellaire : observations et modélisations

Benjamin Godard

Thèse de doctorat

Spécialité : Astronomie & Astrophysique

Soutenue publiquement le 10 février 2010

Composition du Jury

Laurent Verstraete	Président
Peter Schilke	Rapporteur
Thierry Passot	Rapporteur
Harvey Liszt	Examineur
Edith Falgarone	Directrice
Guillaume Pineau des Forêts	Codirecteur

Table des matières

Remerciements	21
Introduction	23
L'objet de cette thèse : le milieu interstellaire diffus	23
Motivations	24
Organisation de la thèse	25
I Le milieu interstellaire diffus sous contrôle UV	27
1 Les sources d'énergie du MIS	29
1.1 Champ de rayonnement interstellaire	30
1.1.1 Origines	30
1.1.2 Couplage avec le MIS	31
1.1.3 Anisotropie de l'ISRF	32
1.2 Champ magnétique	33
1.2.1 Les méthodes de mesure	33
1.2.2 Organisation à l'échelle galactique	34
1.2.3 Couplage avec le MIS	34
1.3 Les rayons cosmiques	36
1.3.1 Les incertitudes de mesures	36
Mesures dans le MIS local	36
Mesures à travers les abondances observées d'espèces molé- culaires	37
1.3.2 Quelle valeur faut-il adopter ?	39
1.3.3 Couplage avec le MIS	40
1.4 Énergie cinétique	40
1.4.1 Origines	40
1.4.2 Couplage avec le MIS	40
1.5 Conclusions	41
2 Processus thermiques et chimiques du MIS diffus	43
2.1 Les acteurs	44
2.1.1 Le gaz	44
2.1.2 Les grains	44
2.2 Chimie	45
2.2.1 Les réactions en phase gazeuse	46

	Réaction à 2 espèces atomiques ou moléculaires	46
	Photoprocessus	47
	Les réactions avec les rayons cosmiques	47
2.2.2	Les réactions à la surface des grains	48
	Principes	48
2.3	Chauffage	49
2.3.1	Effet photo-électrique	49
2.3.2	Formation de H ₂ sur les grains	49
2.3.3	Les rayons cosmiques	49
2.3.4	Échanges thermiques gaz-grains	50
2.3.5	Chauffages induits par la chimie	50
	Transfert d'énergie thermique entre les fluides	50
	Endothermicité et exothermicité	50
2.4	Refroidissement	51
2.4.1	Principes	51
2.4.2	Les agents refroidisseurs autre que C ⁺	53
	Transitions de structure fine de C et O	53
	Transitions rotationnelles de molécules : H ₂ , CO, H ₂ O, OH	53
2.5	Application aux nuages diffus	53
2.5.1	Le modèle PDR de Meudon	53
2.5.2	Composition chimique	56
2.5.3	Comparaisons des termes de chauffage et de refroidissement	57
2.6	Conclusion	57
3	Les inconsistances avec les observations	59
3.1	Excursion de la pression thermique dans le CNM	61
3.2	Composition chimique du milieu diffus	62
3.2.1	Introduction : les régions Galactiques observées	62
3.2.2	Les abondances moléculaires	64
3.2.3	Excitation de H ₂	65
3.2.4	Largeurs de raies	66
3.3	Article Godard 2009b	67
3.4	Les solutions envisagées	88
3.4.1	Le transport turbulent	88
3.4.2	La dissipation de l'énergie turbulente	89
	La reconnection magnétique	90
	Les chocs MHD (magnétohydrodynamique)	91
3.5	Conclusion	93
II	Dynamique d'un milieu turbulent	95
	Application au MIS	95
4	Propriétés générales de la turbulence	97
4.1	Caractérisation de la turbulence	97
4.1.1	Remarques	97
4.1.2	Définitions de la turbulence	98

	Définition via le nombre de Reynolds	98
	Définition via le nombre de Reynolds minimum	98
	Définition via la cascade turbulente	100
4.1.3	Les hypothèses de travail	100
4.2	Deux approches complémentaires de la turbulence	100
4.2.1	Moyennes et viscosité turbulente	101
4.2.2	Approche spectrale	101
	Autocorrélateur et spectre de puissance	102
	La distribution de probabilité	103
	Fonctions de structure	103
	Fonctions de transfert	103
4.3	Conclusion	105
5	Cascade turbulente : les lois d'échelles	107
5.1	Les invariants dans un fluide turbulent	107
5.1.1	Hydrodynamique incompressible	108
	Invariants	108
	Lois d'échelles. Turbulence de Kolmogorov	109
5.1.2	MHD incompressible	110
	Invariants	111
	Lois d'échelles	112
5.1.3	Le cas compressible	112
5.2	Intermittence	113
5.2.1	Autosimilarité et intermittence	113
5.2.2	Les traceurs de l'intermittence	114
	Variations spatio-temporelles	114
	Ailes non-gaussiennes dans les PDF d'incrément de vitesse	115
5.2.3	Les modèles existants	115
	Le β -modèle	116
	Le modèle multifractal	117
5.3	Conclusion	118
6	Turbulence dans le MIS	119
6.1	Introduction	119
6.2	Les sources d'énergie turbulente	120
6.2.1	De grandes inconnues	120
6.2.2	Explosions de supernovae	120
6.2.3	La rotation différentielle de la Galaxie	122
6.2.4	Les flots bipolaires	122
6.3	Observations de la turbulence et de l'intermittence	123
6.3.1	Quelques grandeurs utiles	123
6.3.2	Les lois d'échelles dans le gaz	125
	Quelles lois d'échelles	125
	Les résultats	126
6.3.3	Les incréments des centroïdes de vitesse	129
6.4	Prédictions des simulations numériques	130
6.4.1	Principes et définitions	130

6.4.2	Quelques résultats	131
6.5	Conclusions	133

III Physico-chimie induite par la dissipation de l'énergie turbulente dans le MIS diffus **135**

7	Les structures cohérentes du modèle TDR	137
7.1	Introduction : principe et justification de la méthode	138
7.2	Les équations d'évolution dynamique	141
7.2.1	Composantes radiale et axiale de la vitesse	141
7.2.2	Vorticité et composante orthoradiale de la vitesse	141
7.2.3	Quelle est la signification physique d'un vortex ?	142
7.3	D'où vient la dissipation d'énergie ?	142
7.3.1	Transfert d'énergie cinétique en chaleur	142
7.3.2	Processus de refroidissement	143
7.4	Contraintes sur les paramètres dynamiques	143
7.4.1	Les grandeurs caractéristiques d'un vortex	143
7.4.2	Contraintes sur la vorticité centrale ω_0	144
7.4.3	Contraintes sur la coupure radiale β	146
7.5	Discussion sur les vortex	147
7.5.1	Autres types de vortex	147
7.5.2	Comparaison avec le modèle de Burgers	149
7.5.3	Les vortex sont-ils proches des cisaillements plans ?	149
8	Vortex magnétisé	153
8.1	Principes et justifications	153
8.1.1	Découplage ion-neutre	153
8.1.2	Variables & conditions initiales	154
8.1.3	Équations d'évolution en coordonnées cylindriques	154
8.2	Méthode d'intégration	155
8.2.1	Introduction	155
	Choix des différences finies	155
	Schémas numériques	155
	Quel schéma choisir ?	156
8.2.2	Schémas numériques du code <i>Vortex-Dynamics.f95</i>	157
	Plusieurs versions	157
	La méthode ADI (Alternating-Direction Implicit method)	158
8.2.3	Les conditions aux bords	159
8.3	Résultats	159
8.3.1	Paramètres	159
8.3.2	Évolution vers un état stationnaire	160
8.3.3	Terme de chauffage turbulent induit	162
8.4	Contraintes sur le taux d'étirement a	163
8.5	Conclusion	163

9	Le modèle TDR : Turbulent Dissipation Regions	165
9.1	Description du code Thermo-chimie.f95	166
9.1.1	Méthodologie et architecture	166
9.1.2	Les entrées-sorties	169
	Les paramètres	169
	Les variables	169
	Temps d'exécution et espace mémoire	170
9.1.3	Les équations d'évolution	170
9.1.4	Lecture & analyse des résultats	174
9.2	Description du modèle TDR	174
9.2.1	Variables et équations	176
9.2.2	Paramètres et contraintes énergétiques	177
9.3	Article Godard <i>et al.</i> 2009a	179
9.4	Les résultats complémentaires	202
9.4.1	Un vortex s'expand-il sous l'effet de la température	202
9.4.2	Évolution des abondances durant la phase de relaxation	203
9.4.3	Importance des différentes phases	206
9.4.4	Prédictions pour les futures observations	210
9.5	Conclusions	211
	Conclusions & perspectives	213
	Résumés	213
	Analyse des observations du gaz diffus dans le plan galactique	213
	Le modèle TDR	214
	Principes & résultats	214
	Les limitations du modèle TDR	215
	Les projets	215
	Poursuite des observations du milieu diffus	215
	Analyse des données IRAM-PdBI	215
	Analyse des données du satellite Herschel-HIFI	216
	Analyses statistiques de simulations du milieu interstellaire	216
	Introduction du mélange turbulent dans le modèle PDR	217
	Annexes	221
A	Organisation du MIS	221
A.1	Les composantes du gaz interstellaire	221
A.1.1	États des lieux	221
A.1.2	Le modèle à 2 phases	222
A.1.3	Le modèle à 3 phases	224
A.2	Répartition du gaz dans la Galaxie	225
A.2.1	Radialement	226
A.2.2	Verticalement	227
A.2.3	Imbrication des phases	229
	Structure du gaz HI	230

B	Les invariants d'un gaz	233
B.1	En théorie cinétique des gaz	233
B.1.1	Système à N particules	233
B.1.2	Approche <i>continue</i>	234
B.1.3	Équations de conservations	234
B.2	En mécanique des fluides	235
B.2.1	Les théorèmes de transport	235
B.2.2	Le tenseur des contraintes σ	236
B.3	Transfert de la chaleur	237
B.3.1	Conduction thermique	237
B.3.2	Chauffage visqueux	238
B.3.3	Conductivité et viscosité	238
C	Les équations de la MHD	241
C.1	Évolution du champ magnétique dans un fluide ionisé	241
C.1.1	Simplifications dans le milieu interstellaire	241
C.1.2	Équation d'évolution du champ magnétique	242
C.1.3	Équation du champ gelé	242
C.2	Évolution du champ de vitesse du fluide ionisé	243
D	Chimie dans un vortex magnétisé	245
D.1	Comparaisons des chaînes de réactions dominantes dans le milieu ambiant et dans un vortex magnétisé	245
D.2	Évolution des taux des réactions dans un vortex magnétisé	245
E	Quelques outils mathématiques	265
E.1	Opérateurs en coordonnées cylindriques	265
E.2	Les relations utiles	265
E.3	Molécules observées dans le milieu interstellaire	267
F	Fichiers de chimie	269
	Bibliographie	291

Table des figures

1.1	Intensité moyenne du champ de rayonnement interstellaire (en $\text{erg.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}.\text{Hz}^{-1}.\text{sr}^{-1}$) dans le voisinage solaire en fonction de la longueur d'onde (compilation de données par Tielens 2005, principalement d'après Black 1996).	30
1.2	Variation spatiale de la densité d'énergie de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (Porter & Strong 2005) : pour $(R, Z) = (0, 0)$ kpc (courbe noire), $(0, 5)$ kpc (courbe magenta), $(4, 0)$ kpc (courbe bleue), $(12, 0)$ kpc (courbe rouge) et $(20, 0)$ kpc (courbe verte).	33
1.3	Vecteurs de polarisation de la lumière stellaire en coordonnées galactiques pour un échantillon de 5513 étoiles (Fosalba <i>et al.</i> 2002). Le panneau du haut montre la polarisation dans le gaz local tandis que le panneau du bas montre la moyenne de la polarisation sur plusieurs nuages dans le plan Galactique. La longueur des vecteurs est proportionnelle au degré de polarisation (échelle indiqué dans le panneau du bas).	35
1.4	Spectre local interstellaire (protons uniquement, courbes continues : Webber 1998, Moskalenko <i>et al.</i> 2002). Les courbes en pointillés proviennent d'extrapolations en lois en de puissance aux faibles énergies (Padovani <i>et al.</i> 2009). A titre de comparaison, les sections efficaces d'ionisation de H_2 par impact avec un proton ou par capture d'électron sont indiquées (avec des unités arbitraires) en fonction de l'énergie de la particule concernée.	37
1.5	Mesures en laboratoire de la vitesse (en $\text{cm}^3.\text{s}^{-1}$) de recombinaison dissociative de H_3^+ en fonction de leur date (Larsson <i>et al.</i> 2008).	38
1.6	Taux de recombinaison dissociative de H_3^+ en fonction de l'énergie de l'électron ; comparaison entre les expériences TSR et CRYING (points rouges et noirs) et les calculs théoriques des sections efficaces d'interaction entre l'ion et l'électron (courbe verte, Larsson <i>et al.</i> 2008).	39
2.1	Schéma explicatif du modèle PDR (Le Petit <i>et al.</i> 2006). Une couche de gaz plan parallèle est illuminée des deux cotés par des champs de rayonnement uniformes. L'extinction (écranage) A_V du champ de rayonnement est calculée en chaque point dans la direction perpendiculaire à la couche de gaz. A_V^{tot} représente la quantité totale de matière, paramètre d'entrée du modèle.	54

2.2	Abondances relatives de plusieurs espèces dans le milieu diffus en fonction de A_V et n_H . Ces figures sont obtenues à partir du code PDR de Meudon (Le Petit <i>et al.</i> 2006) pour une couche de gaz illuminée des 2 côtés, avec $\chi = 1$. Panneaux (a, c, e & g) : gaz de densité constante $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$. Panneaux (b, d, f, & h) : gaz à extinction constante $A_V = 0.4$	55
2.3	Fonctions de chauffage (panneaux a & b) et de refoiissement (panneaux c & d) dominantes dans le milieu diffus en fonction de A_V et n_H . Ces figures sont obtenues à partir du code PDR de Meudon (Le Petit <i>et al.</i> 2006) pour une couche de gaz illuminée des 2 côtés, avec $\chi = 1$. Panneaux (a & c) : gaz de densité constante $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$. Panneaux (b & d) : gaz à extinction constante $A_V = 0.4$	56
3.1	Distributions de $T_{K \max}$ et T_S en unité de densité de colonne de HI (facteur d'échelle 10^{20} cm^{-2}) pour les composantes observées dans le CNM et le WNM (Heiles & Troland 2003). Les lignes solides et en pointillés correspondent respectivement aux lignes de visée $ b > 10^\circ$ et $ b < 10^\circ$	60
3.2	Figures issues de Jenkins & Tripp (2007). Panneau (a) : positions des points (f_1, f_2) (voir texte pour les définitions) en fonction de la température. Sur chaque courbe la densité varie en puissance de 10 entre les gros points. Panneau (b) : Mesures des points (f_1, f_2) pour toutes les lignes de visée observées, et pour des vitesses radiales permises (voir Jenkins & Tripp 2001 pour plus de détails) ; La courbe théorique est obtenue pour une température $T = 100 \text{ K}$, et les cercles numérotés correspondent aux valeurs entières de $\log(P/k)$	61
3.3	Lignes de visée cibles de Lucas & Liszt et Liszt & Lucas (1996-2008) dans la direction de sources radio brillantes extragalactiques (quasars). La photo d'arrière plan provient des observations WIYN de la galaxie NGC 891. 1 carré correspond à une distance de 1 kpc.	62
3.4	Lignes de visée cibles (en violet) de Godard <i>et al.</i> (2009b) et (en vert) de Falgarone <i>et al.</i> (2005). La photo d'arrière plan provient des observations ESO-VLT de la galaxie NGC 1232. 1 carré correspond à une distance de 1 kpc.	63
3.5	Spectres de la raie HI à 21 cm en émission et en absorption, et des raies rotationnelles de CO et HCO ⁺ (1-0) respectivement en absorption et en émission, observés le long de lignes de visée à haute latitude Galactique (Liszt, comm. priv.).	64
3.6	Diagramme d'excitation des niveaux rotationnels purs de H ₂ observés dans le gaz diffus Galactique par Gry <i>et al.</i> (2002) (points bleus) et Lacour <i>et al.</i> (2005) (points violets) en directions d'étoiles tardives. Tous les points de cette figure sont normalisés à une densité de colonne de H ₂ , $N(\text{H}_2) = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$. Les températures d'excitation, obtenues à partir d'un ajustement exponentiel des populations des niveaux J = 0, 1 et 2 et J = 3, 4 et 5, sont également indiquées.	66

3.7	Profils des raies de transition de CN à 3874 Å, CH à 4300 Å et CH ⁺ à 4232 Å observés par Lambert <i>et al.</i> (1990) dans la direction de ζ Oph. Les courbes correspondent à des ajustements basés sur la méthode des moindres carrés.	67
3.8	Résultat du modèle de mélange turbulent diffusif de Lesaffre <i>et al.</i> (2007) pour deux type de nuages, <i>petit</i> et <i>grand</i> (voir texte), en fonction de la longueur de diffusion. Les colonnes densité de plusieurs molécules sont calculées sur l'ensemble du nuage.	89
3.9	Schéma d'une régions de reconnection (Vishniac & Lazarian 1999). Celle-ci se déroule dans une couche de largeur Δ. Les lignes épaisses et fines correspondent respectivement aux vitesses des ions et des neutres. L'éjection du gaz est restreinte à la région L _n	90
3.10	Figures extraites de Guillet (2008) et Flower & Pineau des Forêts (2003). Panneaux (a & b) : évolutions de la température (a) et des vitesses (b) en fonction du temps pour un choc hydrodynamique (HD, rouge) et magnétohydrodynamique (MHD, bleu, B ₀ = 100 μG) avec V _S = 30 km.s ⁻¹ et n _H = 10 ⁴ cm ⁻³ . Panneaux (c & d) : décomposition du flux d'énergie totale en énergies cinétique, thermique, interne, radiative et magnétique, pour un choc HD avec V _S = 15 km.s ⁻¹ et n _H = 10 ⁵ cm ⁻³ (c), et pour un choc MHD avec B ₀ = 100 μG, V _S = 25 km.s ⁻¹ et n _H = 10 ⁴ cm ⁻³ (d).	92
3.11	Panneau de gauche : densités de colonne (ronds pleins bleus) de CH et CH ⁺ observées dans le MIS diffus par Gredel <i>et al.</i> (2002) et comparaison aux prédictions du modèle de choc (ronds vides) avec les paramètres A _V = 0.1 et n _H = 20 cm ⁻³ . Le long des 2 courbes, le nombre de chocs sur la ligne de visée varie. Panneau de droite : prédictions des profils en absorption de CH et CH ⁺ produits dans un choc MHD de 8 km.s ⁻¹ se propageant dans la direction de la ligne de visée.	93
5.1	Schéma des fonctions de transfert d'énergie entre les champs (de vitesse et magnétique) et entre les échelles (Alexakis <i>et al.</i> 2005). L'épaisseur des traits indique l'importance du transfert (qui correspond à un taux d'énergie). Pour plus de détails, voir les définitions des grandeurs dans la Sect. 4.2.	111
5.2	Exemples d'une fonction autosimilaire (gauche), le mouvement brownien, et d'une fonction intermittente (droite), <i>l'escalier du diable</i> (Frisch 1995).	114
5.3	mesures du signal <i>représentatif</i> de la dissipation locale, (∂u/∂t) ² en fonction du temps, pour deux écoulements : en laboratoire (a) et dans l'atmosphère (b) (Meneveau & Sreenivasan 1991).	114
5.4	Panneau de gauche : exposants ζ _p des fonctions de structure en fonction de p (Frisch 1995). Panneau de droite : exemple de PDFs d'incrément de vitesse pour différentes valeurs de l, les ailes non gaussiennes étant de plus en plus marquées quand l diminue.	116
5.5	Panneau de gauche : exemple de cascade fractale pour β = 3/4. Panneau de droite : la probabilité qu'un élément de volume l ³ soit compris dans un objet de dimension D est l ^{3-D} (tirée de Frisch 1995).	117

6.1	Puissance volumique S_i par unité de nombre d'onde ($k_0 \sim 1 \text{ pc}^{-1}$) pour la source i d'injection d'énergie cinétique dans le MIS : SB = super bulle ; SN = supernovae ; W = vents stellaire ; HII = régions HII. S_i est normalisée au paramètre β qui mesure le rapport entre la taille caractéristique d'injection, et la distance parcourue par les ondes sonores quand le processus d'injection a atteint son expansion maximale (Norman & Ferrara 1996).	121
6.2	Spectre de puissance 3D de la densité électronique en fonction du nombre d'onde. Cette figure est le résultat d'une compilation de mesures effectuée par Armstrong <i>et al.</i> (1995). Les lignes en pointillés correspondent au spectre de Kolmogorov pour une échelle intégrale de 10^{20} cm des microéchelles de Kolmogorov de 10^7 cm et 10^{10} cm. La ligne en pointillés-traités correspond à un spectre de puissance en k^{-4}	125
6.3	Spectre de puissance obtenu à partir des centroïdes de vitesse du HI vu en émission dans la région Ursa Major (Miville-Deschênes 2003). La ligne en pointillés sépare les domaines (en nombre d'onde) observés avec le DRAO (Dominion Radio Astrophysical Observatory) et dans le cadre du relevé Leiden/Dwingeloo.	127
6.4	Indices spectraux β obtenues à partir des cartes d'intensités de raies atomiques et moléculaires en fonction du domaine d'échelles sur lesquelles les lois de puissance $P(k) \propto k^{-\beta}$ sont observées. Ces résultats proviennent des intensités des raies ^{12}CO et ^{13}CO (lignes fines) cartographiées pour des nuages à haute latitude galactique et des régions de formation d'étoiles (Bensch <i>et al.</i> 2001, Plume <i>et al.</i> 2000, Simon & Bensch 2002), des intensités à $100 \mu\text{m}$ (ligne épaisse verte) cartographiées pour des lignes de visée à haute latitude galactique (Gautier <i>et al.</i> 1992), des intensités du HI extragalactique vu en émission et cartographiées pour le LMC (lignes épaisses en tirets, Elmegreen <i>et al.</i> 2001) et pour le SMC (ligne épaisse en tirets, Stanamirovic & Lazarian 2001), des intensités du HI galactique vu en émission (ligne épaisse noire, Miville-Deschênes <i>et al.</i> 2003) et en absorption (ligne fine en tirets, Deshpande <i>et al.</i> 2000). Les barres d'erreurs sur les mesures de β sont comprises entre 0.05 et 0.3.	128
6.5	Distributions normalisées des incréments des centroïdes de vitesse observés entre 2 points distants de Δ (panneaux du haut), noté Lag (panneaux du bas). Les mesures des centroïdes de vitesse proviennent d'observations de la raie ^{12}CO cartographiée dans le nuage moléculaire L1512S, pour Δ mesuré en unités de 16 secondes d'arc (panneaux du haut, Pety 1999), et d'observations de la raie HI à 21 cm cartographiée dans un nuage HI de la constellation Ursa Major, pour un Lag mesuré en unités de 1 seconde d'arc (Miville-Deschênes <i>et al.</i> 1999).	129
6.6	Rapport $\chi = E_C/E_I$ entre les énergies cinétiques contenues dans les modes compressibles et incompressibles en fonction du temps, obtenu dans des simulations 3D d'écoulements hydrodynamiques turbulents en déclin (Porter <i>et al.</i> 2002). $R = 256^3$ et $\chi_0 = 0.1$ (courbe solide), $R = 128^3$ et $\chi_0 = 0.9$ (courbe en tirets) et $R = 64^3$ et $\chi_0 = 0.9$ (courbe en pointillés).	132

6.7 Composantes compressible et incompressible du spectre de puissance de la vitesse obtenues dans des simulations 3D d'écoulements MHD entretenus (Vestuto *et al.* 2003). Le paramètre $\beta = 0.01$ (panneau a), $\beta = 0.1$ (panneau b), $\beta = 1.0$ (panneau c) et $\beta \rightarrow \infty$ (panneau d). Les autres paramètres des simulations sont décrits dans le texte. Les ajustements en loi de puissance des spectres dans le domaine inertiel sont également montrés. La grandeur $\chi = 12\%$ (panneau a), $\chi = 19\%$ (panneau b), $\chi = 21\%$ (panneau c) et $\chi = 24\%$ (panneau d). 133

7.1 Expérience de Douady, Couder et Brachet (1991). Panneau de gauche : schéma de l'expérience : Ω_0 est la vitesse angulaire des cylindres en rotation. Panneau de droite : photo de l'expérience. La cuve est remplie d'eau pétillante. Les parties sombres révèlent les zones de basse pression où les bulles grossissent et percolent. 139

7.2 Illustration (coupes axiales) de 4 états de tornades observés numériquement et en laboratoire (Nolan & Farrell 1999). Quand S (voir le texte principal pour la définition) augmente, le vortex passe de l'état dit *faible* (panneau a), à l'état dit à 2 *cellules* (panneau d) où le coeur de la structure est inactif, en passant par les états transitoires (c & d). Les flèches indiquent les directions de la vitesse et les symboles "M" montrent les positions du maximum de la vitesse orthoradiale. 140

7.3 Figures issues des travaux de Mouri & Hori (2009). Panneau (a) : schéma des conventions adoptées concernant l'inclinaison d'un tube de vortécité par rapport à l'écoulement moyen. Panneau (b) : prédictions du profil moyen (pour des inclinaisons quelconques des vortex) de vitesse dans la direction normale à l'écoulement (courbe continue) et du profil de vitesse obtenu pour un vortex vérifiant $x_0 = y_0 = \theta_0 = 0$ (courbe en pointillés). Panneau (c) : densité de probabilité $|\delta u|/\langle \delta u^2 \rangle^{1/2}$ où $|\delta u| = |u(x + \delta x) - u(x)|$ pour $Re = 719$ (distribution gaussienne en pointillés). Les flèches indiquent les critères de selection des vortex intenses adoptés par Mouri *et al.* (2007). 145

7.4 Comparaison des fonctions de chauffage moyennes dans des structures de types "cisaillement" et "vortex" en fonction de a et n_H . Concernant les vortex, ces résultats proviennent d'un code d'intégration des équations de la dynamique présentées dans la Sect. 9.1. 151

8.1 Résultats du code Vortex-Dynamics.f95, version v3. Panneau (a) : évolution de la vitesse maximale des ions dans le plan perpendiculaire à l'axe de révolution $|\mathbf{u}_{i\perp}|_{\max}$; les différentes courbes correspondent à différents modèles (cf. Tab. 8.2). Panneaux (b & c) : composantes orthoradiale et axiale du champ magnétique à $t = 100$ ans, en fonction de r et de z pour le modèle de référence (cf. Tab. 8.1). 161

9.1	Description schématique des différentes étapes du code Thermo-chimie.f95. Panneau (a) : évolution de la température d'une cellule fluide durant son parcours dans le vortex actif (rouge) puis durant la phase de relaxation (bleu) après la destabilisation du vortex (Hily-Blant, comm. priv.). Panneau (b) : schéma d'un vortex et vue lagrangienne de l'évolution d'une particule fluide à l'intérieur du vortex actif. Panneau (c) : évolution de la température de chaque cellule fluide composant un vortex en phase de relaxation, en fonction donc de la position et du temps (Godard <i>et al.</i> 2009a).	166
9.2	Architecture du code Thermo-chimie.f95. Les couleurs des boîtes correspondent aux différentes couches du code : lecture des paramètres et des données et initialisation des tableaux et des index (en noir), appels des fonctions <code>evol_minc</code> , <code>evol_vact</code> et <code>evol_vrel</code> (en vert, voir texte), appel de l'intégrateur, initialisation des variables et écriture des résultats (en bleu), et calculs des dérivées (en violet). L'ordre d'utilisation d'une couche, ou d'une sous couche est indexé par une lettre, tandis que l'ordre des appels des diverses fonctions est indiqué par un nombre.	168
9.3	Comparaison des taux de photodissociation de H_2 et CO obtenus par le modèle PDR avec les ajustements de ces taux sous la forme $\alpha\chi\exp(-\beta A_V)$.	172
9.4	Description schématique du modèle TDR. Panneau (a) : vision artistique du modèle obtenue à partir d'une simulation hydrodynamique de turbulence incompressible ; le milieu interstellaire diffus turbulent est composé d'une phase ambiante (vert), de zones de dissipation intermittente de l'énergie turbulente (rouge), et d'empreintes de vortex en phase de relaxation (bleu) ; une ligne de visée aléatoire, échantillonnant par convention une quantité de matière $n_H = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$, intercepte chaque phase. Panneau (b) : schéma des fluctuations de l'abondance d'une espèce X le long de la ligne de visée ; les couleurs correspondent à celles des différentes phases dans le panneau (a). . . .	175
9.5	Taux de transfert d'énergie cinétique ε_l en fonction de l'échelle l . Cette figure est obtenue à partir de la compilation de données issues d'observations du gaz moléculaire détecté en émission ^{12}CO (1-0) (Falgarone <i>et al.</i> 1998).	178
9.6	Panneaux (a & b) : température des neutres T_n en fonction de la position radiale de la particule fluide dans un vortex. Panneaux (c & d) : rapport du module des forces spécifiques (par unité de masse) $n_n/\rho_n\nabla(kT_n)$ et $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$, projetées selon r , en fonction de la position radiale de la particule fluide dans un vortex.	202
9.7	Évolution des abondances de certaines espèces en fonction du temps et de la position dans le vortex durant la phase de relaxation. Les paramètres du modèle sont : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	204
9.8	Temps de relaxation $\tau_{VR}(X)$ (cf. Sect. 9.2.1) pour plusieurs espèces chimiques X, en fonction des paramètres A_V (panneau a), n_H (panneau b) et a (panneau c). Lorsqu'un paramètre varie, les autres sont fixés aux valeurs : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	205

9.9 Temps de relaxation $\tau_{VR}(X)$ (cf. Sect. 9.2.1) pour plusieurs espèces chimiques X, en fonction des paramètres A_V (panneau a), n_H (panneau b) et a (panneau c). Lorsqu'un paramètre varie, les autres sont fixés aux valeurs : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ 206

9.10 Pourcentage du volume total occupé par les vortex actifs en fonction du taux d'étirement a et pour une densité du gaz variant entre 10^1 et $5 \times 10^2 \text{ cm}^{-3}$ 207

9.11 Contribution (en pourcentages) de chacune des phases (ambiante, vortex actif, relaxation) aux densités de colonne totales de plusieurs espèces. Dans un triangle, ces contributions s'obtiennent en projetant les points sur les 3 hauteurs. Dans chaque panneau, un paramètre varie, A_V (panneau a), n_H (panneau b) et a (panneau c), tandis que les paramètres restant sont fixés aux valeurs : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Dans chaque panneau, plus A_V et n_H sont faibles, plus les molécules sont formées dans les vortex actifs, et plus a est grand, plus les molécules sont formées dans le milieu ambiant. 208

9.12 Contribution (en pourcentages) de chacune des phases (ambiante, vortex actif, relaxation) aux densités de colonne totales de plusieurs espèces. Dans un triangle, ces contributions s'obtiennent en projetant les points sur les 3 hauteurs. Dans chaque panneau, un paramètre varie, A_V (panneau a), n_H (panneau b) et a (panneau c), tandis que les paramètres restant sont fixés aux valeurs : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Dans chaque panneau, plus A_V et n_H sont faibles, plus les molécules sont formées dans les vortex actifs, et plus a est grand, plus les molécules sont formées dans le milieu ambiant. 209

9.13 Prédictions de 168 modèles TDR concernant les densités de colonne de plusieurs molécules. Dans chaque panneau, le taux d'étirement varie le long de chaque courbe entre 10^{-12} et 10^{-9} s^{-1} par intervalles logarithmiques. 211

A.1 Pression thermique P/k en fonction de la densité (Wolfire *et al.* 1995). Panneau (a) : pour plusieurs valeurs de la densité de colonne notée ici N_w (10^{19} cm^{-2} étant la référence). Panneau (b) : pour plusieurs valeurs des abondances (élémentaires relatives à l'hydrogène) en carbone et oxygène \mathcal{A}_C & \mathcal{A}_O (référence : 3×10^{-4} et $4.6 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$). Panneau (c) : pour différentes valeurs de la métallicité Z , la référence étant $Z = D/G$ (rapport d'abondances entre les poussières et le gaz). Panneau (d) : pour plusieurs valeurs du champ de rayonnement interstellaire (la référence étant le champ de Draine). 223

A.2 Schéma du modèle à trois phases du milieu interstellaire (McKee & Ostriker 1977). Panneau de gauche : bulle de CNM entourée par le gaz HI chaud, le tout plongé dans le HIM. Panneau de droite : expansion d'une supernovae dans le milieu interstellaire. 225

A.3	Schéma de la Galaxie vue de haut (Ferrière 2001). GC montre la position du centre galactique et \odot la position du soleil. l est la longitude galactique, tandis que les régions I, II, III et IV indiquent les quadrants. La Galaxie tourne dans le sens des aiguilles d'une montre autour de GC, et d'autant plus rapidement (en vitesse angulaire, jusqu'au rayon où la courbe de rotation est plate) que la distance à GC est petite.	227
A.4	Densité de colonne d'hydrogène intégrée dans la direction perpendiculaire au disque galactique, et densité massique surfacique, les deux calculées dans des modèles axisymétriques, et donc données en fonction de la distance au centre. Cette figure est une compilation de données (Ferrière 2001).	228
A.5	Comparaison des distributions (en hauteur z dans la Galaxie) de la pression gravitationnelle (courbe du haut) et de la pression thermique (courbe du bas, la contribution du HIM n'est pas prise en compte). La différence entre ces 2 courbes est également affichée. Cette figure est extraite de Cox (2005).	229
A.6	Carte HI à haute résolution (Hartman & Burton 1997) : (a) d'un champ $120^\circ \times 30^\circ$ centré en ($l = 80^\circ$, $b = -40^\circ$) pour des vitesses comprises entre -20 et 20 km.s ⁻¹ ; (b) d'un champ $6^\circ \times 3^\circ$ centré en ($l = 260.5^\circ$, $b = 0^\circ$) pour des vitesses de 30-50 km.s ⁻¹	230
B.1	Schéma explicatif du processus microscopique de conduction thermique entre deux volumes de fluide A et B à des températures T_A et T_B (Charbonneau 2007).	237
D.1	Réseau de réactions qui contrôle l'évolution des abondances des espèces affichées, dans le milieu diffus (panneau du haut) pour $n_H = 50$ cm ⁻³ et $A_V = 0.4$, et dans un vortex magnétisé (panneau du bas) pour $a = 3 \times 10^{-11}$ s ⁻¹ . Pour chaque espèce, seules les réactions qui, au total, contribuent à plus de 70 % à leur formation et à leur destruction sont affichées. Les énergies impliquées dans les réactions endoénergétiques sont également affichées (en K).	247
D.2	Réseau de réactions qui contrôle l'évolution des abondances des espèces affichées, dans le milieu diffus (panneau du haut) pour $n_H = 50$ cm ⁻³ et $A_V = 0.4$, et dans un vortex magnétisé (panneau du bas) pour $a = 3 \times 10^{-11}$ s ⁻¹ . Pour chaque espèce, seules les réactions qui, au total, contribuent à plus de 70 % à leur formation et à leur destruction sont affichées. Les énergies impliquées dans les réactions endoénergétiques sont également affichées (en K). Les réactions qui gouvernent la formation et la destruction de N et N ⁺ ne sont pas affichées ici (par souci de simplicité).	248

D.3	Réseau de réactions qui contrôle l'évolution des abondances des espèces affichées, dans le milieu diffus (panneau du haut) pour $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $A_V = 0.4$, et dans un vortex magnétisé (panneau du bas) pour $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Pour chaque espèce, seules les réactions qui, au total, contribuent à plus de 70 % à leur formation et à leur destruction sont affichées. Les énergies impliquées dans les réactions endoénergétiques sont également affichées (en K).	249
D.4	Réseau de réactions qui contrôle l'évolution des abondances des espèces affichées, dans le milieu diffus (panneau du haut) pour $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $A_V = 0.4$, et dans un vortex magnétisé (panneau du bas) pour $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Pour chaque espèce, seules les réactions qui, au total, contribuent à plus de 70 % à leur formation et à leur destruction sont affichées. Les énergies impliquées dans les réactions endoénergétiques sont également affichées (en K).	250
D.5	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CH})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	251
D.6	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CH}^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	252
D.7	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CH}_3^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	253
D.8	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{C}_2\text{H})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	254
D.9	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{OH})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	255
D.10	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{H}_2\text{O})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	256
D.11	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{HCO}^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	257
D.12	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CO})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	258
D.13	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CN})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	259
D.14	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{HCN})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	260
D.15	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{HCNH}^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	261

D.16	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{NH})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	262
D.17	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CS})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	263
D.18	Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{SH}^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$	264

Liste des tableaux

1	Classification des types de nuages (Snow & McCall 2006). Les fractions f correspondent à l'abondance relative de l'espèce par rapport à l'abondance de l'élément concerné.	23
1.1	Bilan d'énergie du milieu interstellaire diffus. Les valeurs données sont des moyennes à l'échelle de ~ 10 pc dans le voisinage solaire et pour du gaz diffus de densité $n_{\text{H}} = 10 \text{ cm}^{-3}$ et un champ magnétique ambiant de $5 \mu\text{G}$, obtenues à partir de plusieurs travaux (voir texte).	30
1.2	Taux d'ionisation par les rayons cosmiques (protons uniquement) de H_2 et He obtenus à partir des LIS de la Fig. 1.4.	36
2.1	Abondances élémentaires, relatives à celle de l'hydrogène, dans le gaz diffus (Anders & Grevesse 1989, Savage & Sembach 1996, Sofia & Meyer 2001).	44
2.2	Caractéristiques de quelques raies de structure fine, dont les plus importantes en ce qui concerne le refroidissement du milieu diffus, C^+ , C et O. Les densités critiques correspondant aux collisions avec les électrons sont calculées pour $T_e = 10^4 \text{ K}$	52
3.1	Densités de colonne et abondances relatives observées dans le milieu interstellaire diffus le long des lignes de visées affichées en Fig. 3.3 & Fig. 3.4 ainsi que dans le MIS local. Les nombres entre parenthèses sont des puissances de 10.	65
6.1	Sources d'injection de l'énergie cinétique dans le milieu interstellaire : échelles, efficacités, et taux de transfert en énergie turbulente $\dot{\epsilon}$	122
6.2	Grandeurs caractéristiques utiles à l'étude de la turbulence dans les 3 composantes du CNM. Les définitions des diverses quantités sont données dans le texte.	124
7.1	Caractéristiques dynamiques radiales des vortex de Burgers et NF.	150
8.1	Paramètres physiques et numériques du code Vortex-Dynamics.f95.	160
8.2	Paramètres des 4 modèles exposés dans la Fig. 8.1 (panneau a). La densité n_{H} et le taux d'étirement a sont fixés : $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$, $a = 5 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$	160

9.1	Paramètres physiques du code numérique Thermo-chimie.f95. Les paramètres de contrôle de l'intégrateur VODE (Brown <i>et al.</i> 1989) ne sont pas présents dans cette table, ni les paramètres de contrôle des équations d'état des phases ambiantes et de relaxation.	169
A.1	Ionisation des espèces élémentaires. Les nombres entre parenthèses sont des puissances des 10.	222
A.2	Caractéristiques physiques des phases du milieu interstellaire. Densités n_H , températures T , masses surfaciques Σ_{\odot} dans le voisinage solaire et masses totales M dans la Galaxie sont obtenues à partir des revues de Ferrière (2005), Lequeux (2002) et Tielens (2005).	222
F.1	Liste des espèces chimiques prises en compte dans le modèle TDR, et enthalpies de formation associées ΔH_0 (en kcal/mol).	269

Remerciements

Tous ceux qui passent par là le savent : une thèse est loin d'être un exploit personnel ; il s'agit en réalité d'un effort de groupe. Et si la mienne a finalement abouti, c'est bien grâce à l'aide et au soutien de nombreuses personnes, à qui je souhaite un jour, si possible, rendre la pareille. Je me permet donc d'exprimer ici ma plus sincère gratitude envers celles et ceux qui m'ont aidé à travailler, à me détendre, à écrire ce maudit manuscrit, et à surmonter mes angoisses. J'aimerais remercier tout spécialement

mes chers directeurs de thèse ; deux personnes impressionnantes, tant au niveau scientifique qu'humain ; mais également deux personnes parfaitement complémentaires pour encadrer un jeune thésard. De toi, Édith, c'est sans doute ton énergie, apparemment illimitée, ton engagement politique et scientifique, et ta passion pour la recherche que j'ai le plus appréciés durant ces trois dernières années. Quant à toi, Guillaume, ce sont tes talents de pédagogues et ton amour de l'enseignement que je respecte par dessus tout.

les membres de mon jury qui ont accepté d'évaluer mon travail. En particulier, j'aimerais adresser un grand merci à mes rapporteurs Peter Schilke et Thierry Passot, pour avoir lu avec attention ce manuscrit.

Javier et Henrik, mes voisins de bureau, et leurs charmantes compagnes Ana et Julia. Merci pour tous ces bons moments passés avec vous ; ces verres ; ces discussions ; ces fous rires. Javier, je te suis extrêmement reconnaissant de m'avoir chaleureusement accueilli et aidé durant les premiers mois, et d'avoir supporté mon anglais fragile. Quel honneur ce fut d'assister à ton mariage sur les quais de Seine ! Et quel joie de te savoir à présent heureux à Madrid ! Henrik, ce sont nos soirées de philosophes de comptoir qui me sont chères ; nos délires, nos histoires incroyables, nos problèmes psychologiques, notre façon de nous choquer mutuellement, ou de nous culpabiliser : tu me laisses des souvenirs impérissables.

les postdocs, les membres du LERMA et de l'IAS avec lesquels j'ai travaillé ou simplement discuté autour de notre sandwich quotidien, ou d'un petit verre. Parmi eux, je pense tout spécialement à Massimo, Andréa, Maryvonne, Patrick, Pierre L., Sylvie et Vincent (merci à vous trois pour vos conseils sur ma soutenance).

l'ensemble de ma famille et en particulier mes parents, mon frère Rémi et sa délicieuse Lidwine. Vous m'avez soutenu sans faillir durant mes problèmes de santé, vous avez écouté patiemment mes plaintes, et vous vous êtes tous coupés en quatre pour me rendre la vie plus facile, notamment lors de ma soutenance. Vous avez été tout simplement formidables (et vous ne comprenez toujours pas pourquoi accepter des cadeaux me met mal à l'aise ?).

mes compagnons du Portugal, Pierre G. (bien sûr que je me rappelle), Léo (gaffe à la pedras negras), Benjamin (encore une blague ?), Verena (où sont ces foutus photos ?)

et Hans (soyons polis et vertueux). C'est encore avec un large sourire que je repense à nos jours heureux en cette belle cité d'Evora.

mes très proches amis, Franck (merci pour ces moments de détente et tous ces films que nous avons partagés), Mathieu, Julien, Blandine (merci pour l'hortensia), Antoine, Rémi, Charlotte et Damien. Et bien sûr Olivier et Guilhem. Ce n'est pas sans raison si je vous cite en dernier. Cela fait maintenant 16 ans que l'on se connaît, et quel que soit le périple, vous en faites toujours partie. Vous vous battez avec moi, vous partagez mes peines, vous me remettez à ma place, et vous supportez tous mes travers avec une extraordinaire patience. Je vous suis infiniment redevable.

mon bien aimé bon papa. Tu avais la certitude que j'étais formidable, ce qui me mettait mal à l'aise. Parce que je voulais, et je voudrai sans cesse, être un jour à la hauteur de ce que tu pensais de moi.

Introduction

L'objet de cette thèse : le milieu interstellaire diffus

Le milieu interstellaire (MIS) contient une variété de composantes et de types de nuages, qui couvrent eux mêmes un grand domaine de conditions physiques et donc chimiques. Le milieu appelé *diffus*, qui est l'objet de recherche de cette thèse, s'étend sur toute la Galaxie et contient une grande partie de la masse du MIS. Ajouté au fait qu'il est à l'origine de la formation des structures plus denses comme les coeurs protostellaires, la détermination des mécanismes responsables de l'évolution dynamique, thermique et chimique du MIS diffus est d'une importance essentielle pour l'étude du cycle de la matière.

En outre, la dynamique interne du milieu diffus n'étant pas dominée par la gravité, ceci en fait un formidable laboratoire d'analyse des autres termes sources de la dynamique, et de leur couplage avec le gaz.

Tab. 1 – Classification des types de nuages (Snow & McCall 2006). Les fractions f correspondent à l'abondance relative de l'espèce par rapport à l'abondance de l'élément concerné.

	diffus		dense	
	atomique	moléculaire	translucide	moléculaire
Porteur H	$f_{\text{H}_2} < 0.1$	$f_{\text{H}_2} > 0.1$	$f_{\text{H}_2} \sim 1$	$f_{\text{H}_2} \sim 1$
Porteur C	$f_{\text{C}^+} \sim 1$	$f_{\text{C}^+} > 0.5$	$f_{\text{CO}} < 0.9$	$f_{\text{CO}} > 0.9$
A_V	0 – 0.2	0.2 – 2	2 – 5	> 5
n_{H} (cm^{-3})	$10^1 - 10^2$	$10^2 - 5.10^2$	$5.10^2 - 5.10^3$	$> 5.10^3$
T (K)	30 – 100	30 – 150	15 – 50	10 – 50
Domaines	UV, visible	UV, visible	UV, visible	IR
d'observation	HI 21 cm	IR, mm	IR, mm	

Le grand problème, qui revient fréquemment dans la littérature est de donner une définition claire au milieu interstellaire diffus. Nous avons choisi, tout au long de cette thèse d'adopter la classification de Snow & McCall (2006), donnée en Tab. 1, et ainsi

de définir le domaine de variation des conditions physiques des nuages diffus :

$$\begin{aligned} A_V &< 2, \\ 10 &< n_H < 500 \text{ cm}^{-3}, \\ 30 &< T < 150 \text{ K}. \end{aligned} \tag{1}$$

où A_V est l'extinction dans le visible du champ de rayonnement interstellaire, n_H est la densité (en nombre) du gaz et T sa température.

Fort de cette définition, ce manuscrit présente les sources d'énergie responsables de l'évolution dynamique, thermique et chimique des nuages diffus. L'objectif est d'explorer et de quantifier le rôle qu'occupe la turbulence dans ce bilan.

Motivations

La turbulence est en effet un processus clef de l'évolution du milieu interstellaire. Durant les vingt dernières années, de nombreux travaux ont étayé cette idée.

- La turbulence joue un rôle essentiel dans la formation stellaire car l'énergie contenue dans les mouvements non-thermiques s'oppose à l'effondrement gravitationnel. En effet, contrairement à la pression thermique qui ne dépend pas des échelles, la pression turbulente, qui elle en dépend, stabilise les grandes échelles qui sont les plus instables gravitationnellement (Bonazzola et al. 1987, 1992 ; Panis & Pérault 1998).
- La turbulence est probablement le mécanisme responsable de la structuration du gaz interstellaire, des phases les plus diffuses, pour lesquelles la gravité a un impact négligeable, jusqu'aux phases les plus denses, au sein desquelles les étoiles se forment. Audit & Hennebelle (2005) montrent notamment le rôle décisif de la turbulence dans les échanges de matière entre les 2 phases du MIS diffus, le WNM (Warm Neutral Medium, $T \sim 8000$ K) et le CNM (Cold Neutral Medium, $T \sim 100$ K) ainsi que dans la formation de structures observées à toutes les échelles en émission.
- Enfin, la dissipation locale de l'énergie turbulente injectée à grande échelle (via les supernovae, la rotation différentielle de la Galaxie, ...) est probablement un prérequis à la formation de coeurs pré-stellaires (Myers & Lazarian 1998).

Un domaine encore peu exploré est le rôle de la turbulence dans l'évolution du milieu diffus, précurseur des nuages denses. Les observations en absorption de nombreux atomes, ions et molécules soulèvent bien des questions concernant la structure et les propriétés du milieu :

- le MIS diffus, supposé composé de 2 phases en équilibre de pression, le CNM et le WNM est à présent détecté en émission à des températures intermédiaires ;
- bien que la turbulence du CNM soit supersonique, les spectres de puissance de vitesses et de densités ont la signature du spectre de puissance de la turbulence incompressible ;

- les observations en absorption dans les domaines UV, radio et submillimétrique révèlent un gaz qui, bien que faiblement protégé du champ destructeur de radiation UV, est chimiquement riche : les abondances de nombreuses espèces telles que CH^+ , OH et HCO^+ sont des ordres de grandeur supérieures aux prédictions des modèles traditionnels de type PDR (PhotoDissociation Regions). Dans le MIS diffus, ces molécules sont en effet produites via des réactions hautement endo-énergétiques dont les températures caractéristiques (quelques 10^3 K) ne peuvent être atteintes qu'en tenant compte des sources d'énergie non thermique telles que la dissipation intermittente de la turbulence supersonique (Falgarone et al. 1995).

Pour rendre compte de ces observations, il est donc devenu nécessaire de concevoir des modèles dans lesquels la chimie est couplée à la dynamique du milieu. Les temps caractéristiques des évolutions dynamique, chimique et thermique du gaz étant comparables, tous les traitements doivent se faire hors-équilibre.

Organisation de la thèse

La première partie de cette thèse est introductive et comporte 3 chapitres. Dans le Chap. 1, nous présentons les sources d'énergie du gaz diffus, leur distribution dans la Galaxie, et les mécanismes de couplage. Le but est de prouver que l'évolution thermique du MIS semble effectivement, en moyenne, contrôlée par le champ de radiation UV. Nous énonçons donc, dans le chapitre suivant (Chap. 2), les processus chimiques et thermiques à prendre en compte dans la modélisation d'un gaz partiellement ionisé, et nous présentons les prédictions des modèles PDR (statiques) concernant la composition chimique du MIS diffus. Le dernier chapitre (Chap. 3) expose alors les multiples contradictions entre les observations et la vision statique du milieu interstellaire.

Dans la seconde partie (Chaps. 4, 5 & 6) nous présentons les principales propriétés d'un milieu turbulent : les définitions, les outils mathématiques appropriés, les lois d'échelle, l'intermittence spatio-temporelle et quelques théories visant à décrire les caractéristiques statistiques d'un tel écoulement. L'objectif de cette partie est triple : d'une part, présenter les multiples observations qui révèlent la nature turbulente du milieu interstellaire ; d'autre part, contraindre la quantité d'énergie mécanique injectée dans le milieu ainsi que les échelles d'injection ; et enfin, discuter l'importance, en terme énergétique, des modes incompressibles de la turbulence interstellaire. Ce dernier point est abordé à partir des observations des spectres de puissance du champ de vitesse mais également en prenant pour exemple les résultats issus de simulations numériques d'écoulements compressibles hydrodynamiques et magnétohydrodynamiques.

La dernière partie (Chaps. 7, 8 & 9) correspond au coeur de notre travail : la présentation du modèle TDR (Turbulent Dissipation Regions). En nous fondant sur les propriétés des écoulements turbulents, en particulier l'intermittence, nous étudions la dynamique d'une structure cohérente telle qu'observée dans les simulations numériques et dans les expériences en laboratoire : un vortex magnétisé. Et nous décrivons les processus dissipatifs induits par une telle structure : le chauffage du gaz par fric-

tion visqueuse et par friction ion-neutre. Les Chaps. 7 & 8 ont pour but de quantifier ces taux de chauffage en fonction du type de vortex étudié, mais également de mettre en évidence les échelles temporelles et spatiales auxquelles la dissipation a lieu. Dans le Chap. 8, nous montrons qu'une structure de type vortex induit nécessairement un découplage des fluides neutre et ionisé, et que leurs champs de vitesse ainsi que le champ magnétique atteignent *rapidement* (comparé au temps de vie du vortex) un état stationnaire.

Enfin, dans le Chap. 9, nous calculons simultanément les évolutions dynamique, thermique et chimique d'un gaz entraîné dans un vortex à l'état stationnaire. Puis, en supposant que toute l'énergie mécanique contenue dans la turbulence interstellaire est dissipée via ces structures (que nous appelons alors *structures dissipatives*), nous quantifions l'impact de la turbulence sur la composition chimique du gaz diffus à grande échelle, en modélisant une ligne de visée aléatoire.

Première partie

Le milieu interstellaire diffus sous contrôle UV

Chapitre 1

Les sources d'énergie du MIS

Sommaire

1.1	Champ de rayonnement interstellaire	30
1.1.1	Origines	30
1.1.2	Couplage avec le MIS	31
1.1.3	Anisotropie de l'ISRF	32
1.2	Champ magnétique	33
1.2.1	Les méthodes de mesure	33
1.2.2	Organisation à l'échelle galactique	34
1.2.3	Couplage avec le MIS	34
1.3	Les rayons cosmiques	36
1.3.1	Les incertitudes de mesures	36
1.3.2	Quelle valeur faut-il adopter ?	39
1.3.3	Couplage avec le MIS	40
1.4	Énergie cinétique	40
1.4.1	Origines	40
1.4.2	Couplage avec le MIS	40
1.5	Conclusions	41

Comme nous pouvons le remarquer sur la Fig. A.5 de l'annexe A, la pression thermique du gaz interstellaire n'est pas suffisante pour s'opposer à la pression gravitationnelle déduite des distributions verticales de densités dans la Galaxie. En effet, d'autres sources agissent comme soutien : le champ de rayonnement interstellaire, le champ magnétique, les rayons cosmiques et l'énergie cinétique. Les valeurs des densités d'énergie et des termes de chauffage associés, calculés en moyenne à l'échelle de 10 pc dans du gaz moléculaire que l'on suppose situé dans le voisinage solaire (comme référence), sont données en Tab. 1.1.

Ce chapitre a pour but de présenter ces différentes sources, mais également leur fluctuations spatiales dans la Galaxie, et leur terme de pression associés. Avant de rentrer dans les détails, remarquons que quel que soit le processus décrit, il dérive fondamentalement de l'énergie gravitationnelle, réservoir ultime de l'énergie, y compris nucléaire (au sein des étoiles).

TAB. 1.1 – Bilan d'énergie du milieu interstellaire diffus. Les valeurs données sont des moyennes à l'échelle de ~ 10 pc dans le voisinage solaire et pour du gaz diffus de densité $n_{\text{H}} = 10 \text{ cm}^{-3}$ et un champ magnétique ambiant de $5 \mu\text{G}$, obtenues à partir de plusieurs travaux (voir texte).

Source	Densités d'énergie (erg.cm^{-3})	Taux de chauffage ($\text{erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$)
Rayonnement UV	1.6×10^{-12}	5×10^{-24}
Rayons cosmiques	2.9×10^{-12}	3×10^{-25}
Champ magnétique	1.0×10^{-12}	2×10^{-26}
Turbulence	1.8×10^{-12}	2×10^{-26}

1.1 Champ de rayonnement interstellaire

1.1.1 Origines

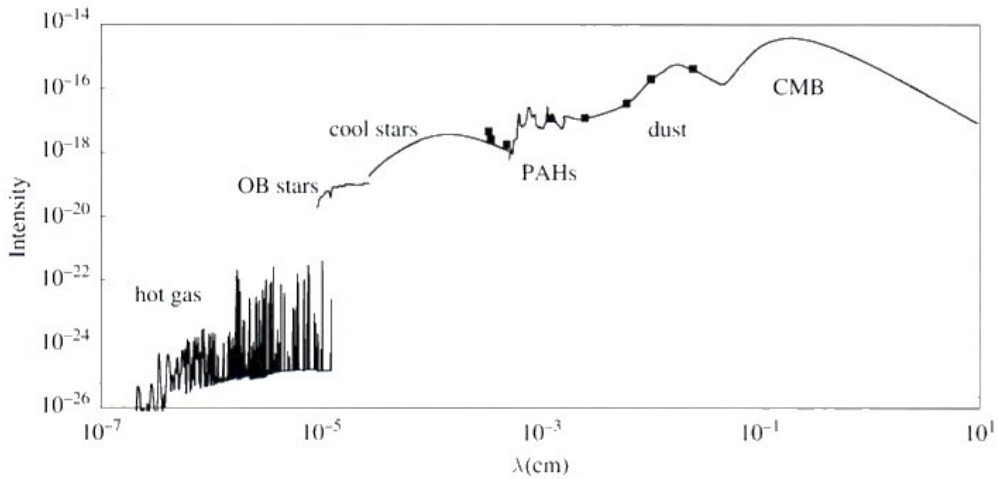


Fig. 1.1 – Intensité moyenne du champ de rayonnement interstellaire (en $\text{erg.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}.\text{Hz}^{-1}.\text{sr}^{-1}$) dans le voisinage solaire en fonction de la longueur d'onde (compilation de données par Tielens 2005, principalement d'après Black 1996).

En moyenne, le champ de rayonnement (ISRF, interstellar radiation field) constitue une source d'énergie de grande importance pour le MIS comme le montre la table. 1.1. Son intensité en fonction de la longueur d'onde des photons, ainsi que ses origines, sont données dans la Fig. 1.1, obtenue dans le voisinage solaire. Celle-ci est le résultat d'une compilation de données (Black 1996, Boulanger 2000, Giard *et al.* 1994) réalisée par Tielens (2005). On distingue ainsi 4 sources (notons que la comparaison des énergies contenues dans diverses bandes de fréquence se fait en comparant les quantités λI_{λ} entre elles, et non pas simplement les intensités I_{λ}).

- L'émission due au gaz coronal chaud (10^6 K) dans le halo galactique et dans les restes de supernovae, domine le champ de rayonnement moyen dans le do-

maine des rayons X et FUV (far ultraviolet), à très faibles longueurs d'onde (de 10^{-7} cm à 10^{-5} cm, soit de 30 à 3×10^3 THz). Comme le montre la figure 1.1, cette composante contient un grand nombre de raies d'émission, provenant des transitions électroniques d'espèces très ionisées.

- Le rayonnement provenant des étoiles est la composante dominante de l'ISRF de 10^{-5} cm à 3×10^{-4} cm (soit de 1 à 30 THz). Dans les domaines (ultraviolet), visible, et NIR (near-infrared), il est respectivement dû aux étoiles de types O et B, de type A, et aux étoiles tardives (FGBKM).
- Les PAHs (polycyclic aromatic hydrocarbon), les petits grains chauffés hors équilibre, ainsi que les poussières à l'équilibre thermique, absorbent la lumière stellaire à faible longueur d'onde et réémettent des photons respectivement dans les domaines MIR (mid-infrared) et FIR (far-infrared) (de 3×10^{-4} cm à 3×10^{-2} cm, soit de 10 GHz à 1 THz).
- Le rayonnement du fond diffus cosmologique à 2.7 K, joue un rôle important dans le domaine submillimétrique et domine totalement l'ISRF à partir des longueurs d'onde millimétriques.

Dans les modèles de chimie du milieu interstellaire, on s'intéresse en général uniquement au transfert de rayonnement dans le domaine UV, puisque son importance dans le chauffage et dans l'ionisation du gaz est la plus importante (cf. Tab. 1.1). Il existe plusieurs déterminations de l'ISRF dans ce domaine de longueur d'onde, dont celle de Habing (1968), celle de Mathis *et al.* (1983) et celle de Draine (1978). Ces champs de rayonnement moyens sont calculés dans le voisinage solaire en fonction de la longueur d'onde, puis utilisés dans les modèles avec un facteur d'échelle noté χ .

L'ISRF de Habing (1968) est obtenu en adoptant une distribution d'étoiles O et B et en tenant compte de l'extinction par les poussières, tandis que Mathis *et al.* (1983) déterminent l'ISRF en fonction de la distance au centre Galactique avec un modèle de distribution d'étoiles plus précis. Dans la suite de ce manuscrit, nous adopterons la formule analytique de Draine (1978) pour l'intensité du champ de rayonnement $I_{\text{rad}}(\lambda)$ (en $\text{erg.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}.\text{ster}^{-1}.\text{\AA}^{-1}$), soit

$$I_{\text{rad}}(\lambda) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{6.3600 \cdot 10^7}{\lambda^4} - \frac{1.0237 \cdot 10^{11}}{\lambda^5} + \frac{4.0812 \cdot 10^{13}}{\lambda^6} \right], \quad (1.1)$$

valable uniquement entre 912 et 2500 Å. En admettant que le champ est isotrope, et en intégrant sur toutes les directions, on obtient¹ alors la densité d'énergie par intervalle de longueur d'onde $u_{\text{rad}}(\lambda)$ (en $\text{erg.cm}^{-3}.\text{\AA}^{-1}$) :

$$e_{\text{rad}}(\lambda) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{2.1200 \cdot 10^{-3}}{\lambda^4} - \frac{3.4123}{\lambda^5} + \frac{1.3604 \cdot 10^3}{\lambda^6} \right]. \quad (1.3)$$

1.1.2 Couplage avec le MIS

Le couplage du champ de rayonnement avec le gaz interstellaire a plusieurs conséquences. (1) L'ISRF est à l'origine de l'ionisation du gaz dans les parties les moins

¹La formule de passage entre $I_{\text{rad}}(\lambda)$ et $u_{\text{rad}}(\lambda)$ est

$$e_{\text{rad}}(\lambda) = c^{-1} \int I_{\text{rad}} d\Omega = 4\pi J_{\text{rad}}(\lambda)/c \quad (1.2)$$

protégées, et est donc responsable du couplage du gaz avec le champ magnétique interstellaire. (2) Il exerce une pression de radiation qu'il ne faut pas négliger, en particulier pour les régions HII. (3) Il est, en moyenne, la principale source de chauffage du gaz (dans ses parties les moins écrantées), engendrant ainsi la pression thermique qui s'oppose à l'effondrement gravitationnel. Bien que celle-ci représente moins de 10% de la pression gravitationnelle (cf. annexe A, Sect. A.2), il est nécessaire de la prendre en compte du fait des fluctuations locales qui peuvent être importantes.

Quantitativement ces différents couplages sont proportionnels à la densité d'énergie de l'ISRF dans différents domaines de longueur d'onde. Pour la pression de radiation, il faut intégrer e_{rad} sur toutes les longueurs d'onde, soit

$$e_{\text{rad}} \sim 1 \text{ eV.cm}^{-3}. \quad (1.4)$$

Pour le chauffage du gaz, ainsi que pour l'ionisation des espèces autres que H, He, N et O, et la photodissociation des molécules du MIS neutre seule la composante UV de 912 à 2066 Å importe. En effet, ces longueurs d'onde correspondent à des photons d'énergie comprise entre 6 et 13.6 eV, que l'on peut comparer aux potentiels d'ionisation des espèces élémentaires fournis dans la Tab. A.1 (cf. annexe A). L'intégration sur cette gamme de longueur d'onde donne :

$$e_{\text{rad}} \sim 5.6 \times 10^{-2} \text{ eV.cm}^{-3}. \quad (1.5)$$

1.1.3 Anisotropie de l'ISRF

Le champ de rayonnement interstellaire est hautement anisotrope et hétérogène : non seulement au niveau local, par exemple pour du gaz à proximité d'une étoile, mais également à l'échelle galactique. En effet, les distributions d'étoiles et de matière étant elles même inhomogènes, le facteur χ introduit plus haut peut varier d'une région à l'autre.

Estimer les variations de l'ISRF dans la Galaxie n'est pas chose facile. Pour la gamme de longueurs d'onde 0.1-100 μm , Moskalenko *et al.* (2006) utilisent la combinaison de 2 modèles :

- un modèle de distribution d'étoiles dans la Galaxie. Fondé sur le modèle *SKY* de Waincoat *et al.* (1992), il prend en compte les différents types d'étoiles et les spectres synthétiques associés (Girardi *et al.* 2002), et attribue à chaque composante de la Galaxie (disque, bras, halo, noyau, barre) une certaine densité d'étoiles.
- un modèle qui décrit la distribution et les propriétés des poussières. Leur distribution en taille ainsi que leur abondance (relativement au gaz) provient des travaux de Weingartner & Draine (2001), tandis que leur distribution spatiale dans la Galaxie est déduite de celle du gaz. Enfin, dans ce modèle, l'absorption et la réémission de la lumière stellaire par des grains sphériques sont traités (Li & Draine 2001), ainsi que leur chauffage par le rayonnement (Draine & Li 2001).

La Fig. 1.2 montre les résultats du modèle de Porter & Strong (2005). La densité d'énergie de l'ISRF est affichée en fonction de la longueur d'onde, et pour plusieurs positions dans la Galaxie. Dans le plan Galactique, χ varie d'au moins un facteur 5 entre 4 et 12 kpc, et d'au moins un facteur 100 entre le centre Galactique et 20 kpc.

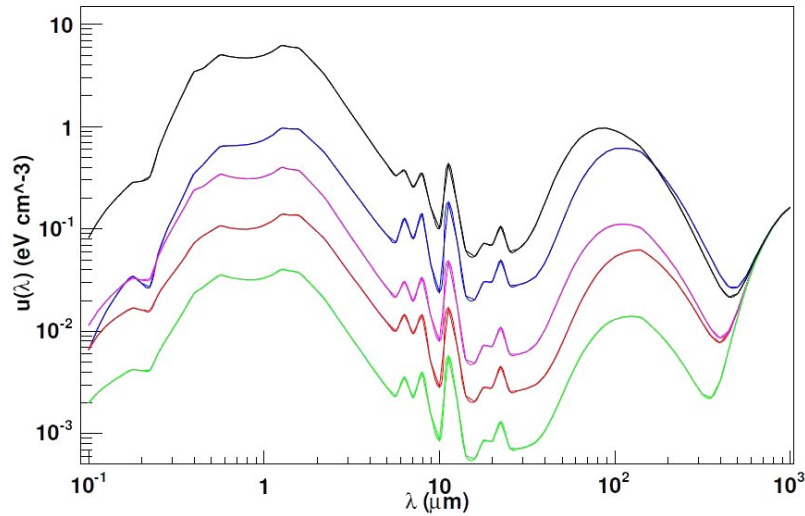


FIG. 1.2 – Variation spatiale de la densité d'énergie de l'ISRF en fonction de la longueur d'onde (Porter & Strong 2005) : pour $(R, Z) = (0, 0)$ kpc (courbe noire), $(0, 5)$ kpc (courbe magenta), $(4, 0)$ kpc (courbe bleue), $(12, 0)$ kpc (courbe rouge) et $(20, 0)$ kpc (courbe verte).

1.2 Champ magnétique

L'origine du champ magnétique galactique est encore méconnue : il est possible qu'il ait été amplifié par un processus de dynamo galactique à partir d'un champ beaucoup plus faible ou encore qu'il provienne d'un champ primordial intergalactique. Toutefois son existence n'est plus remise en cause. Source d'énergie et de pression importante dans le MIS, comparable dans ces termes au champ de rayonnement (table 1.1), son rôle est essentiel.

1.2.1 Les méthodes de mesure

En astronomie, il existe à ce jour 4 grandes méthodes pour évaluer le champ magnétique dans lequel baigne le milieu interstellaire. Une revue sur le sujet est proposée par Crutcher *et al.* (2003).

- L'interaction entre le champ magnétique et le moment magnétique des atomes et des molécules² induit une levée de dégénérescence des niveaux d'énergie, et un dédoublement de la raie moléculaire observée : il s'agit de l'effet Zeeman³. Le décalage en fréquence des raies qui en résultent dépend de l'intensité du champ magnétique ($\sim 1.4 \text{ Hz} \cdot \mu\text{G}^{-1}$) mais également de l'orientation relative de celui-ci avec le moment. Ainsi l'effet Zeeman donne accès à la composante

²Rappel : un moment magnétique peut être associé à toute particule chargée dont le moment cinétique est non nul. En mécanique quantique on écrit $\mu = -\mu_B/\hbar \times (g_l \mathbf{L} + g_s \mathbf{S})$ où μ_B est le magnéton de Bohr, g_l et g_s , sont les rapports gyromagnétiques orbital et de spin, et \mathbf{L} et \mathbf{S} sont les moments angulaires orbital et de spin des électrons.

³analogue de l'effet Stark qui décrit la séparation des raies moléculaires due au champ électrique.

longitudinale (le long de la ligne de visée) du champ (ex : Myers *et al.* 1995, qui mesurent l'effet Zeeman sur la raie HI à 21 cm dans le MIS diffus).

- L'étude de la polarisation du rayonnement synchrotron d'électrons relativistes donne des renseignements sur la direction du champ magnétique (Sokolov & Ternov 1969). En principe, si l'on connaît également le flux d'électrons associé, on peut déduire l'intensité du champ. Bien que cette méthode semble parfaite (à la fois la direction et l'intensité sont accessibles), la mesure du flux d'électrons est extrêmement difficile.
- Les observations du milieu interstellaire montrent une excellente corrélation entre la direction de la polarisation de la lumière issue des étoiles et l'extinction interstellaire. Ce résultat s'explique de la manière suivante : dans le MIS les grains de poussières sont chargés et agissent donc comme des dipôles en rotation. Plongés dans le champ magnétique interstellaire, ceux-ci s'alignent alors de façon à minimiser l'angle que fait l'axe de plus grand moment d'inertie avec **B**. La lumière des étoiles transmise et diffusée par les grains est donc polarisée. Seule la direction du champ est mesurable par ce procédé (Fosalba *et al.* 2002).
- La dernière méthode de mesure est la *rotation Faraday*. Lorsqu'une onde polarisée linéairement traverse un milieu comportant des électrons libres baignant dans un champ magnétique ambiant, la direction de polarisation subit une rotation, car les ondes circulaires droite et gauche ne se propagent pas à la même vitesse. Cette rotation est proportionnelle à la composante longitudinale du champ magnétique (Clegg *et al.* 1992).

1.2.2 Organisation à l'échelle galactique

Les méthodes observationnelles décrites plus haut ont permis de mettre en évidence la structure du champ magnétique à l'échelle galactique (principalement avec la polarisation de la lumière et l'étude de la rotation des pulsars) ainsi que localement, à l'intérieur de nuages moléculaires denses (effet Zeeman et rotation Faraday). Comme le montre la compilation de données réalisée par Fosalba *et al.* (2002), montrée en Fig. 1.3, le champ magnétique possède 2 composantes principales. À grande échelle, il existe un champ ordonné d'intensité $\sim 1.5\mu\text{G}$, parallèle aux bras spiraux, et qui s'inverse plusieurs fois en direction du centre Galactique. D'autre part à plus petite échelle, s'ajoute un champ désordonné de forte amplitude ($\sim 5\mu\text{G}$ pour $n_{\text{H}} = 100 \text{ cm}^{-3}$) qui croît avec la densité : $B \leq 10 \mu\text{G}$ pour $n_{\text{H}} \leq 300 \text{ cm}^{-3}$, $B \leq 10 \times (n_{\text{H}}/300 \text{ cm}^{-3})^{2/3} \mu\text{G}$ pour $n_{\text{H}} \geq 300 \text{ cm}^{-3}$ (Crutcher *et al.* 2009). Le rayonnement synchrotron observé dans le Halo montre, quant à lui, l'existence d'un champ magnétique à haute latitude provenant de l'éjection des particules ionisées par les supernovae.

1.2.3 Couplage avec le MIS

Comme indiqué en introduction, le champ magnétique interstellaire est d'une importance essentielle dans la dynamique : il agit notamment dans les échanges de matière entre les différentes phases (Hennebelle & Passot 2007) et est un soutien efficace contre l'effondrement gravitationnel. Comme pour l'ISRF, la pression magnétique est

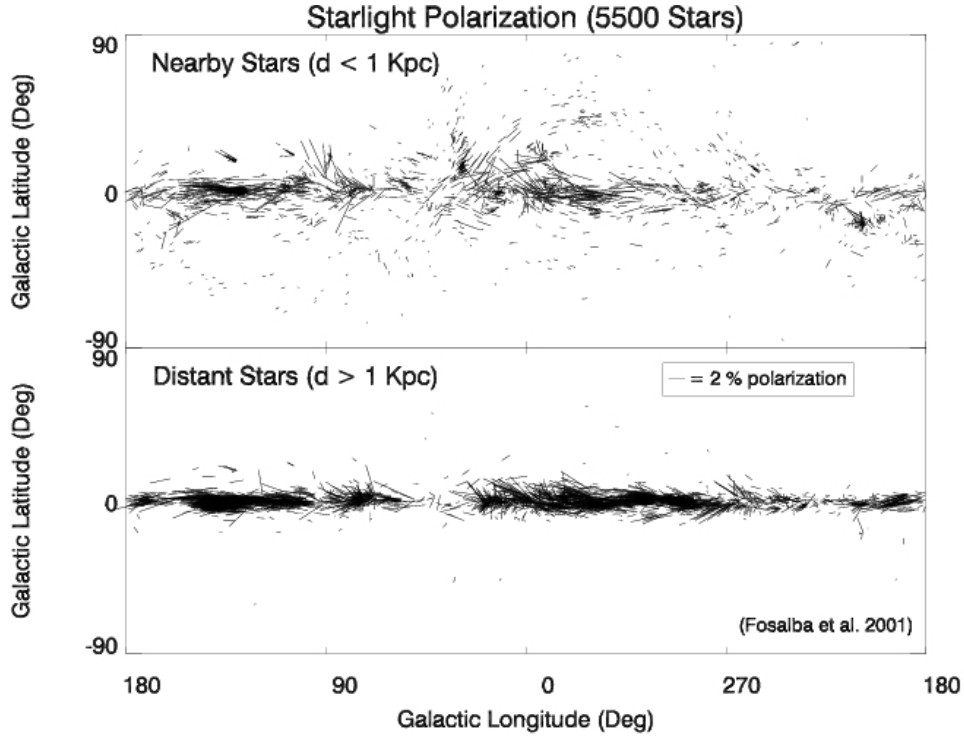


FIG. 1.3 – Vecteurs de polarisation de la lumière stellaire en coordonnées galactiques pour un échantillon de 5513 étoiles (Fosalba *et al.* 2002). Le panneau du haut montre la polarisation dans le gaz local tandis que le panneau du bas montre la moyenne de la polarisation sur plusieurs nuages dans le plan Galactique. La longueur des vecteurs est proportionnelle au degré de polarisation (échelle indiquée dans le panneau du bas).

proportionnelle à la densité d'énergie. En moyenne, celle-ci vaut :

$$\begin{aligned}
 e_{mag} &= \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} \sim 10^{-12} \text{ erg.cm}^{-3} \\
 &= 0.62 \text{ eV.cm}^{-3}
 \end{aligned}
 \tag{1.6}$$

pour $B \sim 5\mu\text{G}$.

L'impact du champ magnétique sur l'évolution thermique et chimique du MIS provient de la friction entre les ions et les neutres dans un gaz partiellement ionisé. Ce processus de couplage dépend de l'échelle considérée, de la différence de vitesse entre les ions et les neutres, ainsi que de leurs densités respectives. C'est parce qu'en moyenne, le taux résultant est faible (l'évaluation suivante provient du modèle TDR présentée dans les Chaps. 7, 8 & 9),

$$\Gamma_{in} \sim 2 \cdot 10^{-26} \left(\frac{n_{\text{H}}}{10 \text{ cm}^{-3}} \right) \left(\frac{x_i}{1.38 \cdot 10^{-4}} \right) \text{ erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1},
 \tag{1.7}$$

où x_i est la fraction d'ionisation du gaz, qu'il est souvent négligé face au champ de rayonnement.

1.3 Les rayons cosmiques

Les rayons cosmiques sont des particules de haute énergie : principalement des protons et des électrons relativistes mais également des noyaux lourds. Produits dans les supernovae (les particules emportent environ 10 % de l'énergie cinétique de l'éjecta), les rayons cosmiques sont une source importante d'énergie et de pression dans le MIS.

En outre, les particules de faible énergie (~ 100 MeV) sont, la principale source d'ionisation et de chauffage du gaz, dans les régions suffisamment protégées du champ de rayonnement UV. Ce faisant, ils modifient la fraction d'ionisation du gaz et donc son couplage avec le champ magnétique.

Les rayons cosmiques sont enfin très bien couplés avec le champ magnétique interstellaire et sont confinés dans un disque de 12 kpc de rayon et de 2 kpc d'épaisseur (Tielens 2005).

1.3.1 Les incertitudes de mesures

La grande difficulté dans l'étude des rayons cosmiques, est d'obtenir des contraintes observationnelles fiables sur leur distribution en énergie, leur répartition dans la Galaxie ainsi que sur les taux d'ionisation des espèces atomiques et moléculaires en fonction des phases du MIS. Les méthodes employées pour mesurer la densité de particules relativistes et leurs interactions sont malheureusement soumises à de grandes incertitudes, dont on peut trouver une revue dans Padovani *et al.* (2009).

Mesures dans le MIS local

Une première méthode de mesure repose sur la détection directe de rayons cosmiques⁴, ou leur détection indirecte quand ils interagissent avec l'atmosphère⁵. L'idée consiste alors à reproduire ces mesures avec un modèle de transport des rayons cosmiques dans le MIS, pour obtenir le spectre local interstellaire (LIS pour Local Interstellar Spectrum), c'est à dire le nombre de particules par unité de surface, de temps, d'angle solide et d'énergie. La Fig. 1.4 (Webber 1998, Moskalenko *et al.* 2002) montre les valeurs minimales et maximales du LIS qui peuvent être extrapolées grâce aux observations locales des rayons cosmiques, tandis que la Tab. 1.2 donne les taux d'ionisation correspondants de H₂ et He (Padovani *et al.* 2009).

ζ^{H_2} (s ⁻¹)	ζ^{He} (s ⁻¹)	Référence
2.08×10^{-17}	1.33×10^{-17}	Webber (1998)
1.48×10^{-14}	2.16×10^{-15}	Moskalenko <i>et al.</i> (2002)

TAB. 1.2 – Taux d'ionisation par les rayons cosmiques (protons uniquement) de H₂ et He obtenus à partir des LIS de la Fig. 1.4.

Les champs magnétiques terrestre et interplanétaire, ainsi que le vent solaire, gênent les mesures du flux de rayons cosmiques sur Terre. Plus précisément, les mesures du

⁴Ceci n'est possible que dans l'espace, ou à haute altitude dans l'atmosphère terrestre.

⁵Mesure des muons produits in fine lors de collision d'un rayon cosmique avec une molécule de l'atmosphère, par des détecteurs à scintillation par exemple.

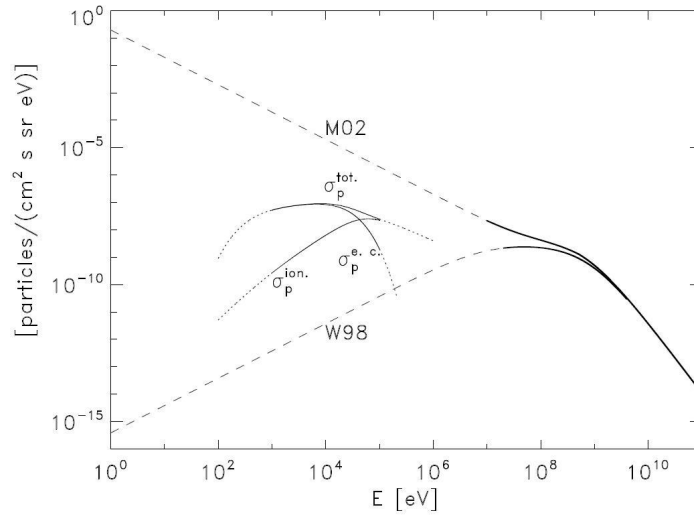


FIG. 1.4 – Spectre local interstellaire (protons uniquement, courbes continues : Webber 1998, Moskalenko *et al.* 2002). Les courbes en pointillés proviennent d’extrapolations en lois en de puissance aux faibles énergies (Padovani *et al.* 2009). A titre de comparaison, les sections efficaces d’ionisation de H_2 par impact avec un proton ou par capture d’électron sont indiquées (avec des unités arbitraires) en fonction de l’énergie de la particule concernée.

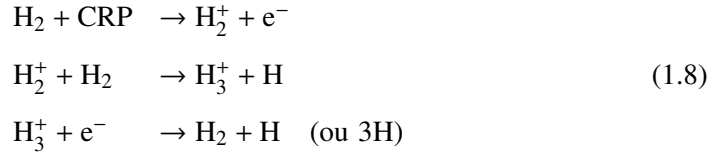
flux de rayons cosmiques sont impossibles pour des particules d’énergie inférieure au GeV, et fluctuent grandement entre 10 et 100 GeV (Casadei & Bindi 2004). Cet effet est d’autant plus important que les sections efficaces d’ionisation ont un maximum pour des énergies de l’ordre du keV (10 keV pour l’ionisation de H_2 par des protons).

Une autre limitation des mesures locales est lié à l’histoire du système solaire. En effet, on sait que celui-ci est situé dans une bulle de gaz chaud et peu dense (la *local bubble*, $n_H \sim 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$) dont l’origine est due à une dizaine d’explosions de supernovae durant les 10 derniers millions d’années. Ainsi le milieu local n’est probablement pas représentatif du MIS de la Galaxie.

Mesures à travers les abondances observées d’espèces moléculaires

Depuis 30 ans, de nombreux travaux ont été consacrés à l’évaluation des taux d’ionisation ζ^H et ζ^{H_2} , respectivement de l’hydrogène atomique et moléculaire, par les mesures des abondances de certaines espèces telles que OH (Black & Dalgarno 1977), HD (van Dishoeck & Black 1986) et H_3^+ (McCall *et al.* 1998). Une explication des méthodes ainsi qu’une comparaison entre les différents taux obtenus selon les traceurs utilisés est proposée par Indriolo *et al.* (2007) Pour expliquer un peu plus la méthode, prenons un exemple simple : H_3^+ . Si l’on admet que le système de réaction chimique

qui forme et détruit cette molécule dans le MIS diffus est :



alors la densité de H_3^+ s'écrit simplement (McCall *et al.* 2003)

$$n(\text{H}_3^+) = \frac{\zeta^{\text{H}_2} n(\text{H}_2)}{k_e n(\text{e}^-)}
 \tag{1.9}$$

où k_e est le taux de recombinaison dissociative de H_3^+ . Ainsi la densité de cet ion moléculaire et ζ^{H_2} sont reliés par une équation simple.

La question est alors : quel traceur utiliser ? Tout d'abord, il faut bien comprendre qu'alors que OH et HD permettent d'estimer ζ^{H} et par extension ζ^{H_2} , c'est l'inverse en ce qui concerne H_3^+ . Néanmoins, depuis sa détection dans le milieu diffus par McCall *et al.* (1998), H_3^+ a été de plus en plus utilisé, les arguments étant que la chimie sous jacente est suffisamment simple⁶ pour que l'on puisse obtenir une valeur de ζ^{H_2} en fonction de 2 paramètres, k_e et $n(\text{e}^-)/n(\text{H}_2)$. Avec cette méthode, Indriolo *et al.* (2007) trouvent un taux d'ionisation par les rayons cosmiques de l'ordre de $2 \times 10^{-16} \text{ s}^{-1}$, soit un ordre de grandeur au dessus des valeurs obtenues via l'observation de OH ou HD.

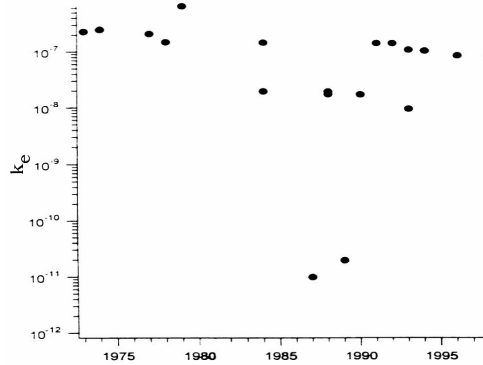


Fig. 1.5 – Mesures en laboratoire de la vitesse (en $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$) de recombinaison dissociative de H_3^+ en fonction de leur date (Larsson *et al.* 2008).

Toutefois il faut se rendre compte que les mesures du taux de recombinaison de H_3^+ ont variés durant les 50 dernières années sur plus d'un ordre de grandeur, comme indiqué dans les Fig. 1.5 & 1.6 qui affichent les différentes mesures expérimentales de k_e en fonction de leur date ainsi qu'une comparaison des mesures expérimentales les plus récentes aux modèles théoriques (Larsson *et al.* 2008). En outre k_e dépend de la température des électrons. Enfin, le rapport $n(\text{e}^-)/n(\text{H}_2)$ dans le milieu diffus est loin d'être bien contraint par les observations.

⁶En comparaison, les méthodes reposant sur les mesures d'abondances de OH et HD sont fortement dépendantes du modèle chimique utilisé : chimie et déplétion liées aux grains, intensité du champ de rayonnement UV, etc...

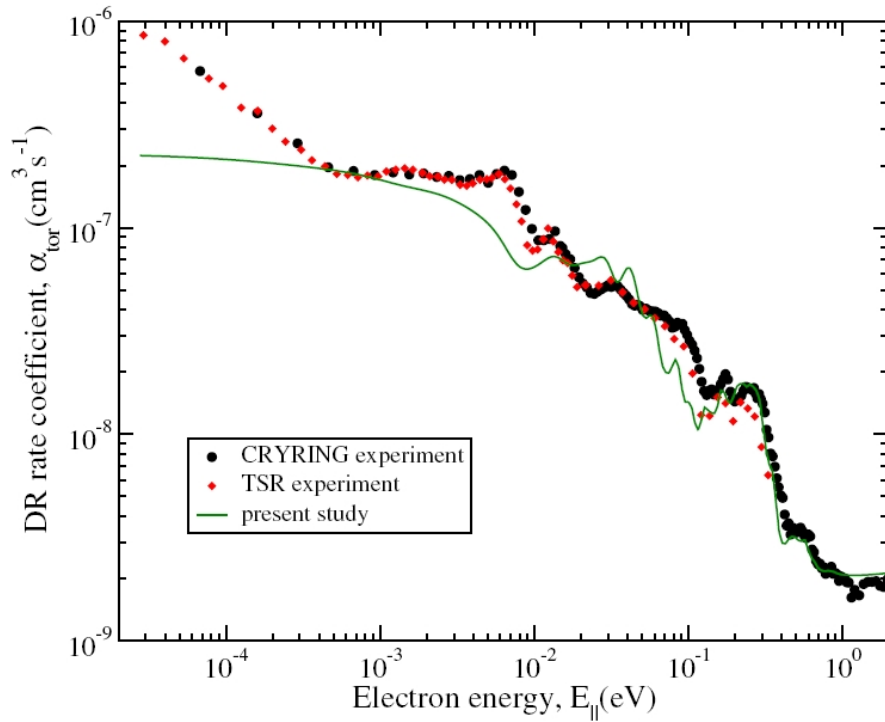


FIG. 1.6 – Taux de recombinaison dissociative de H_3^+ en fonction de l'énergie de l'électron ; comparaison entre les expériences TSR et CRYRING (points rouges et noirs) et les calculs théoriques des sections efficaces d'interaction entre l'ion et l'électron (courbe verte, Larsson *et al.* 2008).

1.3.2 Quelle valeur faut-il adopter ?

Les 2 méthodes de mesure décrites plus haut ont de telles incertitudes que toute valeur de ζ^{H_2} comprise entre 10^{-17} et 10^{-15} s^{-1} est acceptable, ou du moins peut être justifiée d'une manière ou d'une autre. Il faut se faire un avis personnel sur

- la chimie : les erreurs sur les taux de réaction avec les rayons cosmiques peuvent être importantes ;
- l'astrochimie : un modèle analytique n'est pas suffisant pour tirer des conclusions à partir de l'observation d'une seule espèce ;
- la physique du MIS : le champ magnétique par exemple peut avoir une importance capitale dans les interactions entre ions et rayons cosmiques (non prise en compte jusqu'à présent).

Pour toutes les raisons citées plus haut, et parce que la présence de H_3^+ dans le milieu diffus peut s'expliquer par d'autres arguments (cf. Sect. 3.4) qu'un haut flux de rayons cosmiques, dans la suite de ce manuscrit la valeur

$$\zeta = 3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1} \quad (1.10)$$

sera adoptée, ce qui correspond à des taux d'ionisation de H et H₂ de

$$\begin{aligned}\zeta^{\text{H}} &= 1.4 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1} \\ \zeta^{\text{H}_2} &= 2.9 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}.\end{aligned}\tag{1.11}$$

1.3.3 Couplage avec le MIS

Le flux de rayons cosmiques de faible énergie a des répercussions sur leur rôle dans la dynamique du MIS. Toutefois, dans le cas le moins optimiste (Fig. 1.4), Webber (1998) évalue la densité d'énergie contenue dans les rayons cosmiques à

$$e_{CR} \sim 1.8 \text{ eV.cm}^{-3}.\tag{1.12}$$

Ceci suffit à justifier leur importance. De plus les rayons cosmiques, déterminent la fraction d'ionisation du gaz ainsi que sa température dans ses régions les plus protégées du champ de rayonnement UV. Leur impact sur la dynamique s'étend donc au couplage du gaz avec le champ magnétique, au support thermique des nuages moléculaires et à l'évolution chimique du MIS dans son ensemble.

1.4 Énergie cinétique

1.4.1 Origines

Les sources de l'énergie turbulente contenue dans le milieu interstellaire sont multiples. Puisqu'il s'agit, dans une certaine mesure, de l'objet de cette thèse, une analyse détaillée sera effectuée dans la Sect. 6.2 où les références des travaux sur le sujet seront données. Rappelons juste ici, qu'historiquement, les sources d'injection jugées les plus probables sont les vents d'étoiles massives ainsi que les explosions de supernovae. Depuis, plusieurs autres processus ont été envisagés, le même problème revenant sans cesse : comment évaluer l'efficacité d'injection liée à telle ou telle source.

1.4.2 Couplage avec le MIS

La densité d'énergie contenue dans la turbulence peut être évaluée à partir de la compilation de données de nuages moléculaires observés en émission dans la raie ¹²CO (Falgarone *et al.* 1998) qui montre la masse et la dispersion de vitesse interne des nuages en fonction de leur échelle. En supposant que l'on connaisse la densité massique ρ du gaz, on obtient, à l'échelle de 10 pc,

$$\begin{aligned}e_{\text{turb}} &= \rho u_{\text{rms}}^2 \sim 1.8 \cdot 10^{-12} \left(\frac{n_{\text{H}}}{10 \text{ cm}^{-3}} \right) \left(\frac{u_{\text{rms}}}{3.5 \cdot 10^5 \text{ cm.s}^{-1}} \right)^2 \text{ erg.cm}^{-3} \\ &\sim 1.1 \text{ eV.cm}^{-3}\end{aligned}\tag{1.13}$$

ce qui est comparable aux densités d'énergies contenues dans les rayons cosmiques, le champ magnétique et le champ de rayonnement.

Tout comme le champ magnétique, cette énergie contenue dans la turbulence a toujours été négligée dans l'évolution thermique et chimique du MIS, son impact, en

moyenne, sur le chauffage du gaz étant faible. À l'échelle L de 10 pc, on l'évalue à :

$$\rho \frac{u_{\text{rms}}^3}{L} \sim 2 \cdot 10^{-26} \left(\frac{n_{\text{H}}}{10 \text{ cm}^{-3}} \right) \left(\frac{u_{\text{rms}}}{3.5 \cdot 10^5 \text{ cm.s}^{-1}} \right)^3 \left(\frac{L}{10 \text{ pc}} \right)^{-1} \text{ erg.cm.}^{-3}\text{s}^{-1}. \quad (1.14)$$

1.5 Conclusions

Ainsi, bien que les densités d'énergie du champ de rayonnement UV, des rayons cosmiques, du champ magnétique et de la turbulence soient proches, et donc qu'il y ait équipartition d'énergie, les couplages avec le gaz sont tels qu'à grande échelle, et en moyenne, seule l'énergie de radiation importe pour le chauffage du gaz. Comme nous le verrons dans la partie [III](#), la turbulence et le champ magnétique peuvent jouer un rôle prépondérant à bien plus petite échelle, et notamment lorsqu'on s'écarte de la vision statique du milieu interstellaire.

Chapitre 2

Processus thermiques et chimiques du MIS diffus

Sommaire

2.1 Les acteurs	44
2.1.1 Le gaz	44
2.1.2 Les grains	44
2.2 Chimie	45
2.2.1 Les réactions en phase gazeuse	46
2.2.2 Les réactions à la surface des grains	48
2.3 Chauffage	49
2.3.1 Effet photo-électrique	49
2.3.2 Formation de H ₂ sur les grains	49
2.3.3 Les rayons cosmiques	49
2.3.4 Échanges thermiques gaz-grains	50
2.3.5 Chauffages induits par la chimie	50
2.4 Refroidissement	51
2.4.1 Principes	51
2.4.2 Les agents refroidisseurs autre que C ⁺	53
2.5 Application aux nuages diffus	53
2.5.1 Le modèle PDR de Meudon	53
2.5.2 Composition chimique	56
2.5.3 Comparaisons des termes de chauffage et de refroidissement	57
2.6 Conclusion	57

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, en moyenne, seuls le champ rayonnement interstellaire et les rayons cosmiques semblent influencer sur l'évolution thermique et chimique des différentes composantes du MIS. En première approche il paraît donc légitime de ne s'intéresser qu'au transfert de rayonnement. Cette approche est celle des modèles PDR (PhotoDissociation Regions) qui décrivent de manière détaillée les processus chimiques et physiques d'une couche de gaz statique unidimensionnelle soumise à un champ de radiation externe.

Ce chapitre présente les principaux processus chimiques et thermiques à prendre en compte pour décrire la composition et les propriétés physiques du gaz diffus, ainsi

que les prédictions obtenues, dans le cadre des modèles PDR. Nous considérons ici que le milieu interstellaire est composé de deux gaz distincts, les gaz neutre et ionisé, non nécessairement couplés l'un avec l'autre (leurs champs de vitesse peuvent être différents). Ceci nous permet d'introduire dès à présent les processus chimiques et thermiques induits par le découplage ion-neutre, qui seront utiles lors de l'élaboration du modèle TDR (Chap. 9).

2.1 Les acteurs

2.1.1 Le gaz

Le milieu interstellaire est composé de gaz extrêmement ténu et c'est sa composition en espèces élémentaires qui détermine son évolution chimique. Comme indiqué dans la Tab. 2.1, le gaz contient, en nombre, 90% d'hydrogène, 10% d'hélium, et seulement 0.1% d'éléments lourds ou métaux tels que C, N, O, Mg, Si, S et Fe (etc). En masse, cette distribution correspond à 70% d'hydrogène, 28% d'hélium et 2% d'éléments lourds.

TAB. 2.1 – Abondances élémentaires, relatives à celle de l'hydrogène, dans le gaz diffus (Anders & Grevesse 1989, Savage & Sembach 1996, Sofia & Meyer 2001).

élément	X	[X] / [H]	phase gazeuse	grains
hélium	He	1.00×10^{-1}	1.00×10^{-1}	
carbone	C	3.55×10^{-4}	1.38×10^{-4}	2.17×10^{-4}
oxygène	O	4.42×10^{-4}	3.02×10^{-4}	1.40×10^{-4}
azote	N	7.94×10^{-5}	7.94×10^{-5}	
soufre	S	1.86×10^{-5}	1.86×10^{-5}	
magnésium	Mg	3.70×10^{-5}		3.70×10^{-5}
silicium	Si	3.37×10^{-5}		3.37×10^{-5}
fer	fe	3.23×10^{-5}	1.50×10^{-8}	3.23×10^{-5}

De plus, le MIS diffus étant protégé du champ de rayonnement pour des photons d'énergie supérieure à 13.6 eV (l'hydrogène est non ionisé), la comparaison des potentiels d'ionisation des différentes espèces (cf. Tab. A.1, annexe A) permet de déduire la fraction d'ionisation x_i du gaz :

$$x_i = \frac{n_i}{n_H} = \frac{[n(\text{C}^+) + n(\text{S}^+)]}{n_H} \sim 1.6 \times 10^{-4} \quad (2.1)$$

où n_i est la densité des ions, obtenue en considérant que tous les atomes C et S sont ionisés (conformément à la Tab. 1).

2.1.2 Les grains

Les poussières, que l'on considère bien mélangées au gaz, ne représentent qu'une faible fraction de la masse du milieu interstellaire (environ 1%), et pourtant elles ont une grande influence sur l'état physique du MIS ainsi que sur les observations.

Au niveau observationnel, non seulement les poussières absorbent la lumière émise dans l'UV et le visible et la réémettent dans l'IR et le submillimétrique (provoquant le rougissement de la lumière stellaire), mais, comme indiqué en Sect. 1.2, leur axe de plus grand moment d'inertie s'aligne avec le champ magnétique (provoquant une polarisation de la lumière)

Au niveau de la micro-physique du MIS, les poussières ont un rôle crucial.

- Elles sont responsables de la déplétion du milieu en éléments lourds qui se retrouvent piégés dans les coeurs ou les manteaux de glace de grains (voir le bilan de Flower & Pineau des Forêts 2003, Tab. 1).
- Les poussières (principalement celles dont la taille est < 1.5 nm) sont à l'origine du couplage efficace entre le champ de rayonnement interstellaire et le MIS par effet photoélectrique (cf Sect. 1.1.2 & 2.3.1).
- Elles sont enfin des catalyseurs pour les réactions chimiques. Par adsorption à leur surface, elles favorisent la rencontre d'atomes et offrent des sites qui absorbent l'énergie libérée par une réaction.

La distribution en taille des poussières est encore un sujet très débattu. Néanmoins, les observations IRAS (Infrared Astronomical Satellite) puis ISO (Infrared Space Observatory) montrent (Desert *et al.* 1990) que leur taille entre 0.5 et 110 nm suit la distribution de Mathis *et al.* (1977), soit $n(a) \propto a^{-3.5}$. Pourtant cette distribution ne rend pas compte de toutes les propriétés des poussières, comme l'émission IR entre 3.3 et 12.0 μm . Sans oublier qu'il semble probable que cette distribution varie en fonction des environnements, et des différentes composantes du milieu interstellaire.

Pour finir, les poussières sont très fortement couplées au gaz par collisions et leur distribution spatiale suit bien celle du gaz interstellaire. Alors que l'émission à 100 μm est bien corrélée à l'émission HI à 21 cm (Boulanger & Pérault 1988), les rapports d'émission 12 $\mu\text{m}/100 \mu\text{m}$ et 25 $\mu\text{m}/100 \mu\text{m}$ varient d'un facteur 10 d'un environnement à l'autre. Ainsi alors que les gros grains sont uniformément distribués dans le MIS, les grains responsables de l'émission $< 60 \mu\text{m}$ ne le sont pas.

2.2 Chimie

Le milieu interstellaire est en perpétuelle évolution chimique. Sous les contraintes énergétiques discutées dans le chapitre précédent, les constituants élémentaires sont continuellement réarrangés d'une espèce à l'autre, piégés à la surface ou dans les coeurs des grains, ionisés ou recombinés.

L'astrochimie est la science qui décrit le transfert d'espèces et les échanges de charges entre les atomes, les molécules et les grains. Elle est d'une grande importance en astrophysique (et pas seulement dans la compréhension du milieu interstellaire) puisque les photons émis lors de transitions entre états excités d'espèces atomiques et moléculaires constituent la majorité des observables. Cette section énumère et décrit les nombreux processus à l'oeuvre dans le milieu interstellaire. On distingue les réactions se déroulant en phase gazeuse et celles se produisant à la surface des grains, ces dernières étant plus incertaines et difficilement accessibles par les expériences en laboratoire.

2.2.1 Les réactions en phase gazeuse

Les atomes et les molécules observés dans le milieu interstellaire sont souvent des espèces très réactives (à temps de vie très court), tels que les radicaux¹ CN, CH, OH. Leur présence dans le MIS vient de la faible densité du gaz (environ $10^4 - 10^5$ fois moins dense que le meilleur vide obtenu dans les expériences de laboratoire, dans le cas du milieu interstellaire diffus). En ce sens, le MIS est un formidable laboratoire pour l'étude des composants à la base de la chimie en phase gazeuse, les hydrures, les chaînes carbonées et oxygénées.

La présence d'une espèce et les variations de son abondance au cours du temps sont le résultat d'une compétition entre les mécanismes de formation et de destruction, dont les temps caractéristiques dépendent des processus de couplage mis en jeu dans chaque réaction.

Réaction à 2 espèces atomiques ou moléculaires

Soit x_1 et x_2 les réactants. L'évaluation de la vitesse de réaction s'effectue en intégrant la section efficace $\sigma(u)$ sur la probabilité que les 2 espèces aient une vitesse relative u . Dans le cas des réactions neutre-neutre, x_1 et x_2 ayant la même vitesse d'ensemble, u est simplement due à l'agitation thermique et l'on intègre sur une maxwellienne de température T_n :

$$\langle \sigma u \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\mu}{kT_n} \right)^{3/2} \int_0^{+\infty} u \sigma(u) \exp\left(-\frac{\mu u^2}{2kT_n}\right) u^2 du \quad (2.2)$$

où μ est la masse réduite des particules (voir plus bas). Dans le cas des réactions ion-neutre (nous rappelons que nous considérons un milieu partiellement ionisé, où les gaz neutre et ionisé n'ont pas nécessairement les mêmes vitesses d'ensemble) il peut exister une différence de vitesse d'ensemble u_D entre x_1 et x_2 et l'on a :

$$\langle \sigma v \rangle = \left(\frac{\mu}{2\pi kT_r} \right)^{1/2} \frac{1}{u_D} \int_0^{+\infty} u \sigma(u) \left[e^{\left(-\frac{\mu(u-u_D)^2}{2kT_r}\right)} - e^{\left(-\frac{\mu(u+u_D)^2}{2kT_r}\right)} \right] u^2 du \quad (2.3)$$

où T_r est la température de réaction et μ est la masse réduite des particules que l'on définit ainsi :

$$T_r = \frac{m_1 T_2 + m_2 T_1}{m_1 + m_2} \quad \text{et} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.4)$$

où T_1, T_2, m_1 et m_2 sont respectivement les températures et les masses des deux particules. Si l'on connaît la section efficace en fonction de la vitesse, on peut alors évaluer numériquement l'intégrale ci-dessus. Dans ce travail, on applique une approximation qui consiste à intégrer la section efficace seulement sur une maxwellienne centrée sur la température effective T_{eff} (Flower *et al.* 1985) :

$$\frac{3}{2} k T_{\text{eff}} = \frac{3}{2} k T_r + \frac{1}{2} \mu u_D^2 \quad (2.5)$$

¹un radical est une espèce chimique ayant un ou plusieurs électrons non appariés sur sa couche externe.

Récemment, des simulations Monte Carlo ont été réalisées par Guillet (2008) qui confirment la validité de cette approximation. En calculant alors l'intégrale des sections efficaces on obtient une expression de la vitesse de réaction en fonction de T_{eff} . Souvent, on l'exprime approximativement par une relation de la forme d'Arrhénius :

$$k(T_{\text{eff}}) = \gamma \left(\frac{T_{\text{eff}}}{300 \text{ K}} \right)^\alpha \exp\left(-\frac{\beta}{T_{\text{eff}}}\right) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad (2.6)$$

Ainsi, si les gaz neutre et ionisé ont une vitesse relative non négligeable u_D et si le taux de réaction ion-neutre dépend de la température, celui-ci peut augmenter considérablement.

Photoprocessus

Les photons se propageant dans la Galaxie ionisent ou dissocient les espèces chimiques. Dans le milieu interstellaire diffus, ils sont la principale source de destruction de molécules.

Ces processus ne sont pas indépendants de la fréquence du rayonnement. En effet, la condition nécessaire, est que les photons impliqués aient une énergie supérieure au seuil d'ionisation E_i des atomes ou des molécules considérés ou à l'énergie de liaison des molécules. Le milieu diffus, tel qu'il a été défini en introduction, est dénué de photons d'énergie supérieure à l'ionisation de l'hydrogène atomique ($E_f = 13.6 \text{ eV}$). Les photons UV et FUV sont donc les seuls capables d'ioniser ou de dissocier les espèces et c'est la raison pour laquelle les modèles PDR ne se soucient souvent que du transfert de rayonnement dans le domaine de longueur d'onde du champ de radiation de Draine.

Les taux associés dépendent des sections efficaces des réactions, du champ de rayonnement ambiant et de la densité du milieu, et s'écrivent ainsi :

$$k = \int_{\nu_i}^{\nu_f} 4\pi \mathcal{N}_{\text{ISRF}}(\nu) \alpha(\nu) d\nu \quad (2.7)$$

où $\mathcal{N}_{\text{ISRF}}$ est l'intensité du champ de rayonnement interstellaire. Les résultats des calculs de ces taux sont ajustés sous une forme simple dans un domaine limité de densité et d'extinction :

$$k = \alpha \chi \exp(-\gamma A_V) \text{ s}^{-1} \quad (2.8)$$

où χ est, rappelons-le, le coefficient multiplicatif qui permet de quantifier le champ de rayonnement par rapport au champ UV interstellaire moyen de Draine (cf section 1.1).

Les réactions avec les rayons cosmiques

Ce sujet a déjà été abordé dans la Sect. 1.3. Tous les électrons issus de l'ionisation des atomes et des molécules par les rayons cosmiques sont très énergétiques et excitent les états de la molécule H_2 , produisant ainsi, de manière indirecte des photons UV capables de photoioniser ou photodissocier les molécules. Ainsi le processus est similaire à celui décrit plus haut et le taux résultant s'écrit sous la forme simple :

$$k = \gamma \zeta \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^\alpha \text{ s}^{-1}. \quad (2.9)$$

où ζ est le taux d'ionisation directe par les rayons cosmiques.

2.2.2 Les réactions à la surface des grains

Principes

La chimie à la surface des poussières est gouvernée par les taux d'accrétion et d'éjection d'une espèce sur (et depuis) le grain, ainsi que par la vitesse de déplacement de l'espèce sur la surface. Chacun de ces processus est un sujet de recherche d'envergure qui demande une étude de la surface du grain (glace d'eau, silicate, etc...), des barrières d'énergie mises en jeu, et de la topologie du grain. C'est pourquoi seules les grandes lignes sont abordées ici, fondées sur l'approche de Hollenbach & Salpeter (1971) et Hollenbach *et al.* (1971) concernant la formation de H_2 . La formation de cette molécule s'exprime (en $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$)

$$\left. \frac{dn(H_2)}{dt} \right|_{\text{form}} = \frac{1}{2} n(H) \langle u_H \rangle n_g \sigma S(T, T_g) \epsilon_{H_2} \quad (2.10)$$

où n_g et $n(H)$ sont les densités de grains et d'atomes d'hydrogène, $\langle u_H \rangle$ leur vitesse thermique, S est le coefficient de collage d'un atome H sur un grain et ϵ_{H_2} est l'efficacité de formation de H_2 sur le grain.

Le coefficient de collage S qui dépend de la température du grain T_g et celle du gaz T , est estimé analytiquement par Burke & Hollenbach (1983) pour des atomes d'hydrogène à

$$S(T, T_g) = \left[1 + 4 \times 10^{-2} (T + T_g)^{1/2} \right]^{-1}. \quad (2.11)$$

Le temps caractéristique d'échappement d'une espèce depuis la surface d'un grain dépend de l'énergie interne de l'espèce adsorbée $h\nu_0$ (ν_0 de l'ordre de $2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ pour un atome H), de la température du grain, ainsi que de la barrière d'énergie du site d'adsorption E_b et peut s'écrire sous la forme simple

$$\tau_{\text{echap}} = \nu_0^{-1} \exp\left(\frac{E_b}{kT_g}\right). \quad (2.12)$$

Dans le cas de l'hydrogène atomique et moléculaire, celui-ci est respectivement de l'ordre de $2 \times 10^3 \text{ s}$ et $3 \times 10^7 \text{ s}$ (Tielens 2005), pour une surface composée de glace d'eau et une température de grain de 10 K.

Enfin, la migration des atomes à la surface s'effectue, à basse température, et pour des espèces légères telles que l'hydrogène ou le deutérium, principalement par effet tunnel. La distance caractéristique entre les sites est de l'ordre de 1 \AA tandis que le temps de migration pour des atomes H vaut environ 10^{-10} s (Tielens 2005).

En tenant compte uniquement de l'adsorption d'un atome H sur un grain et en supposant que le processus de formation de H_2 est stationnaire (le nombre d'atomes H adsorbés par unité de temps est le double du nombre de molécules H_2 éjectées par le grain), Le Petit *et al.* (2006) dérivent l'équation de formation de H_2 suivante :

$$\left. \frac{dn(H_2)}{dt} \right|_{\text{form}} = 1.4 \times 10^{-17} S n_H n(H) T^{1/2} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \quad (2.13)$$

où n_H est la densité de protons dans le gaz et $n(H)$ est la densité d'atomes d'hydrogène. Pour un coefficient de collage proche de 1 et pour une température de 10 K, la vitesse de réaction est de $4 \times 10^{-17} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, un résultat proche de celui déduit des analyses des observations Copernicus (Jura 1975) et des observations FUSE (Gry *et al.* 2002).

2.3 Chauffage

Cette section n'a pas pour but de décrire de manière exhaustive tous les mécanismes de chauffage du milieu interstellaire : il en existe de nombreux. Le but est simplement de rappeler les expressions approchées des termes dominants dans le cas du MIS diffus, ainsi que leurs différentes dépendances en fonction de l'état physico-chimique du gaz. C'est pourquoi, les termes de chauffage issus de la photodissociation des molécules (une partie de l'énergie du photon est transmise en énergie interne et cinétique des produits), du rayonnement X (similaire au chauffage par les rayons cosmiques) et de la contraction gravitationnelle (compression du gaz) ne sont pas abordés.

En outre, ce chapitre ayant pour ambition de présenter la thermo-chimie d'un milieu diffus contrôlé par les photons UV, les chauffages provenant de la turbulence et du couplage avec le champ magnétique (chauffage par diffusion ambipolaire) sont également écartés (ils seront abordés lors de la présentation du modèle TDR, cf. Chaps. 7, 8 & 9).

2.3.1 Effet photo-électrique

Comme le montre la Fig. 2.3, l'effet photo-électrique est un processus majeur de chauffage, et en particulier en ce qui concerne le milieu interstellaire diffus. Des électrons sont arrachés des grains interstellaires par le rayonnement UV et fournissent de l'énergie au milieu ambiant en se thermalisant. L'énergie des photons incidents sert ainsi : à chauffer le grain, à franchir la barrière coulombienne si le grain est chargé positivement, et à chauffer le gaz (les électrons éjectés ayant des énergies trop faibles pour ioniser les espèces). Il y a donc une énergie minimale nécessaire $h\nu_i$ qui dépend de la nature des grains impliqués, de leurs tailles et de leurs charges. Le taux de chauffage résultant s'obtient en sommant les contributions de tous les états possibles (taille, charge et interaction avec les photons), et en tenant compte de la distribution en taille des grains. Il peut s'écrire finalement, en fonction du facteur d'échelle χ du champ de rayonnement, de l'extinction A_V et de la densité (Black 1987) :

$$\Gamma_{P-E} = 4 \times 10^{-26} n_H \chi \exp(-2.5A_V) \text{ erg.cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \quad (2.14)$$

2.3.2 Formation de H₂ sur les grains

Après sa formation sur les grains, la molécule H₂ est éjectée. L'énergie de liaison ($\sim 4,5$ eV) est alors redistribuée dans le chauffage du grain, l'excitation des niveaux de H₂ et l'énergie cinétique qui est directement rendue au milieu par collisions élastiques. Les poids respectifs de ces phénomènes sont très mal connus et l'on suppose que le terme de chauffage compte pour 1/3 de l'énergie de liaison (notons qu'il s'agit d'un choix totalement arbitraire). Ainsi, on estime ce taux de chauffage à l'aide de la vitesse de réaction de formation de H₂ :

$$\Gamma_{H_2} = 3.5 \times 10^{-29} n_H n(H) \sqrt{T} \text{ erg.cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \quad (2.15)$$

2.3.3 Les rayons cosmiques

L'énergie cinétique emportée par les électrons primaires arrachés aux atomes et molécules par les rayons cosmiques est suffisamment importante (~ 35 eV) pour parti-

ciper efficacement au chauffage du gaz. Ce mécanisme se déroule via la thermalisation des électrons primaires et secondaires, ces derniers étant issus d'ionisation des espèces par les électrons primaires. La distribution des rayons cosmiques est telle que les principales contributions proviennent de ceux de faibles énergie ($\sim 1 - 10$ MeV) dont le flux est très incertain.

Le calcul du terme de chauffage dépend alors du nombre total d'ionisations, qui dépend lui-même de la distribution d'énergie des électrons primaires et de la fraction d'ionisation du gaz, et de la quantité d'énergie redistribuée en énergie thermique par ionisation. Ce taux a été déterminé par Spitzer & Scott (1969) :

$$\Gamma_{R-C} = \zeta \cdot n_H \cdot \max \left[5.7, \left(32 - 7 \log \frac{1}{x_i} \right) \right] \text{ eV.cm}^{-3}.\text{s}^{-1} \quad (2.16)$$

où x_i est la fraction d'ionisation du gaz.

2.3.4 Échanges thermiques gaz-grains

Dans le milieu interstellaire, le gaz et les grains ne sont pas toujours à l'équilibre thermique, et montrent donc des différences de température. Ce processus dépend des températures respectives, mais également de la charge des grains qui peut modifier la section efficace d'interaction (via l'interaction avec le champ magnétique), et de l'efficacité d'une collision dans le transfert d'énergie entre la particule de gaz et le grain. En principe ce terme peut-être aussi bien un terme de refroidissement que de chauffage du gaz, cela dépend de l'environnement considéré. Le taux de chauffage résultant est estimé à (Hollenbach 1989) :

$$\Gamma_{gg} = 3.5 \times 10^{-34} n_H^2 \sqrt{T} (T_g - T) \text{ erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}. \quad (2.17)$$

2.3.5 Chauffages induits par la chimie

Transfert d'énergie thermique entre les fluides

Si l'on considère que le milieu diffus est composé de 2 fluides distincts non nécessairement couplés, le gaz neutre d'une part et le gaz ionisé d'autre part, il faut prendre en compte dans les termes de chauffage associés à chaque fluide le transfert d'énergie qui se produit lors des réactions chimiques.

En effet, les ions sont formés à la température T_n (température des neutres) par photoionisation ou photodissociation et sont détruits par recombinaison électronique à la température T_i (température des ions). Les quantités d'énergie transférées du fluide neutre au fluide ionisé (dans le premier cas) et du fluide ionisé au fluide neutre (dans le cas suivant) valent respectivement $3/2kT_n$ et $3/2kT_i$. La contribution totale de ces transferts au chauffage et au refroidissement des fluides s'obtient donc en sommant les contributions de chaque réaction prise en compte dans la description de l'évolution chimique du milieu.

Endothermicité et exothermicité

Lors d'une réaction, la différence entre les énergies de liaison chimique des produits et des réactifs est, en général, non nulle. Considérons donc une réaction endo-

thermique ou exothermique, d'énergie caractéristique ΔE (avec ΔE négatif ou positif). L'énergie transmise à une espèce produite de masse m vaut $(M - m)\Delta E/M$ où M est la masse totale des produits de la réaction. Le terme de chauffage d'un fluide (neutre ou ionisé) s'obtient en sommant les contributions de chaque réaction.

2.4 Refroidissement

Le refroidissement du gaz interstellaire provient des processus radiatifs : une espèce excitée par collision se désexcite radiativement en émettant un photon qui s'échappe du milieu, ce qui correspond à une perte d'énergie. L'efficacité de ces processus dépend de plusieurs paramètres : (1) il faut que la température cinétique du gaz soit suffisamment élevée pour peupler les niveaux excités des atomes et des molécules ; (2) il faut que la densité soit suffisamment importante pour qu'il y ait excitation collisionnelle ; (3) il faut que le milieu soit optiquement mince pour les photons considérés ; (4) il faut enfin que l'abondance de l'espèce en question soit suffisamment importante pour que le mécanisme soit efficace. La Tab. 2.2 donne la liste des transitions de structures fines (et les densités critiques associées) qui seront présentées plus en détail dans les sections suivantes.

On remarque que ces différents facteurs jouent les uns contre les autres : le refroidissement est donc le résultat d'un savant mélange entre tous ces effets. Dans cette section les principes de calcul des taux de refroidissement sont présentés brièvement. Idéalement, dans les modèles, il faudrait résoudre pour chaque espèce les équations d'évolution des populations des niveaux excités et ainsi en déduire les taux de désexcitation et le refroidissement associé (ce qui demanderait un temps de calcul important). Ici, on ne donnera donc que les expressions approchées des fonctions de refroidissement à prendre en compte pour décrire le MIS diffus. Ces expressions sont en effet utilisées dans de nombreux modèles, tels que le modèle TDR (cf. Chaps. 7, 8 & 9) que nous avons développé.

2.4.1 Principes

Évaluer le taux de refroidissement dû à une désexcitation radiative d'un atome ou d'une molécule revient à calculer l'intensité des raies mises en jeu. Pour décrire de manière pédagogique les étapes du calcul, il est courant de prendre l'exemple de C^+ : d'une part parce qu'il s'agit d'un agent refroidisseur important du MIS (cf. Fig. 2.3), d'autre part parce que la désexcitation du niveau en question ne fait intervenir qu'une seule raie, la raie de structure fine $^2P_{3/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$, ce qui simplifie les calculs.

Considérons un système à 2 niveaux d'énergie, notés u et l (upper & lower), à l'équilibre statistique (les taux de transitions dans un sens ou dans l'autre sont égaux). En négligeant l'excitation par absorption de photons, ainsi que l'émission stimulée (ce qui est souvent valide pour les transitions de structure fine qui sont fortement *interdites*) on a :

$$n_l C_{lu} = n_u (A_{ul} + C_{ul}) \quad (2.18)$$

où $n_{l,u}$ sont les populations des niveaux, $C_{lu,ul}$ sont les probabilités d'excitation et de désexcitation collisionnelles, et A_{ul} est le coefficient d'Einstein d'émission spontanée.

TAB. 2.2 – Caractéristiques de quelques raies de structure fine, dont les plus importantes en ce qui concerne le refroidissement du milieu diffus, C⁺, C et O. Les densités critiques correspondant aux collisions avec les électrons sont calculées pour $T_e = 10^4$ K.

espèce	transition $l - u$	λ μm	A_{ul} s^{-1}	$n_{\text{crit-e}}$ cm^{-3}	$n_{\text{crit-H}_2}$ cm^{-3}
C	$^3P_0 - ^3P_1$	609.1354	$7.93 \cdot 10^{-8}$		$5 \cdot 10^2$
	$^3P_1 - ^3P_2$	370.4151	$2.65 \cdot 10^{-7}$		$3 \cdot 10^3$
C ⁺	$^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$	157.7410	$2.40 \cdot 10^{-6}$	$4.7 \cdot 10^1$	$3 \cdot 10^3$
O	$^3P_2 - ^3P_1$	63.1840	$8.95 \cdot 10^{-5}$	$2.3 \cdot 10^4$	$5 \cdot 10^5$
	$^3P_1 - ^3P_0$	145.5250	$1.70 \cdot 10^{-5}$		$1 \cdot 10^5$
S ⁺	$^3P_2 - ^1D_2$	0.6300	$6.30 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^6$	
	$^4S_{3/2} - ^2D_{5/2}$	0.6716	$2.60 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^3$	
	$^2S_{3/2} - ^2D_{3/2}$	0.6731	$8.82 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^3$	
Si ⁺	$^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$	34.8152	$2.17 \cdot 10^{-4}$		$3.4 \cdot 10^5$
Fe ⁺	$^6D_{7/2} - ^6D_{5/2}$	35.3491	$1.57 \cdot 10^{-3}$		$3.3 \cdot 10^6$
	$^6D_{9/2} - ^6D_{7/2}$	25.9882	$2.13 \cdot 10^{-3}$		$2.2 \cdot 10^6$

En supposant que C_{ul} est également négligeable, c'est-à-dire que la densité du milieu est faible face à la densité critique, on obtient simplement

$$n_u = n_l C_{lu} / A_{ul} \quad (2.19)$$

et une intensité qui s'écrit alors, dans le cas d'un milieu optiquement mince

$$I_{ul} = n_u \frac{h\nu}{4\pi} A_{ul} \quad \text{erg.cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{ster}^{-1}. \quad (2.20)$$

Du fait de l'hypothèse de stationnarité, celle-ci ne dépend pas de A_{ul} mais uniquement du taux d'excitation par collisions, de la fréquence ν de la transition et de la température cinétique du gaz (pour évaluer le rapport de populations n_u/n_l).

La dernière étape du calcul consiste donc à établir la liste des partenaires de collisions efficaces, qui se réduit à H, H₂, He, et quelquefois les e⁻ et à estimer les taux d'excitation correspondant.

Dans le cas de la transition de structure fine de C⁺, on obtient, à partir des calculs des taux d'excitation par collisions réalisés par Launay & Roueff (1977a) et Hayes & Nussbaumer (1984), les fonctions de refroidissement approchées suivantes :

$$\begin{aligned}
 \Lambda_{\text{C}^+-\text{H}} &= 2.2 \times 10^{-23} n(\text{C}^+) n(\text{H}) \exp\left(\frac{-92 \text{ K}}{T_{\text{eff}}}\right) \quad \text{erg.cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \\
 \Lambda_{\text{C}^+-\text{H}_2} &= 1.5 \times 10^{-23} n(\text{C}^+) n(\text{H}_2) \exp\left(\frac{-92 \text{ K}}{T_{\text{eff}}}\right) \quad \text{erg.cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \\
 \Lambda_{\text{C}^+-\text{e}^-} &= 5.5 \times 10^{-20} n(\text{C}^+) n_e \frac{\Omega(T_e)}{\sqrt{T_e}} \exp\left(\frac{-92 \text{ K}}{T_e}\right) \quad \text{erg.cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}
 \end{aligned} \quad (2.21)$$

où $\Omega(T_e)$ est la force de collision, un paramètre qui varie entre 1.8 et 2.9 pour T_e variant entre 0 et 10^4 K.

2.4.2 Les agents refroidisseurs autre que C⁺

Transitions de structure fine de C et O

Le même type de calcul peut-être appliqué pour déterminer les fonctions de refroidissement des raies de structure fine de C et O, qui, comme le montre la Fig. 2.3 peuvent être importantes dans la gamme de température du MIS diffus. La différence étant qu'il faille traiter, non pas une mais plusieurs transitions à la fois. Les estimations des taux de désexcitation collisionnelle avec H par Launay & Roueff (1977b) permettent de dériver les expression approchées :

$$\begin{aligned}\Lambda_{C-H,H_2} &= 10^{-24}n(C) \left[n(H) + \frac{n(H_2)}{\sqrt{2}} \right] \\ &\times \left[(1.4 + 0.018 \sqrt{T}) \exp\left(-\frac{23}{T}\right) + (3.8 + 0.110 \sqrt{T}) \exp\left(-\frac{62}{T}\right) \right] \text{ erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1} \\ \Lambda_{O-H,H_2} &= 10^{-26}n(O) \sqrt{T} \left[n(H) + \frac{n(H_2)}{\sqrt{2}} \right] \\ &\times \left[24 \exp\left(-\frac{228}{T}\right) + 7 \exp\left(-\frac{326}{T}\right) \right] \text{ erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}\end{aligned}\tag{2.22}$$

Transitions rotationnelles de molécules : H₂, CO, H₂O, OH

Encore une fois, le calcul sous jacent des fonctions de refroidissement associées est identique. C'est le nombre de niveaux et de transitions à prendre en compte qui s'accroît.

Dans le cas de H₂ qui devient un agent refroidisseur efficace dans le MIS diffus pour des températures de l'ordre de 10² – 5 × 10³ K (suffisantes pour peupler par collisions ses niveaux ro-vibrationnels), le taux de refroidissement que nous avons adopté dans le modèle TDR (cf. Chap. 9) est celui estimé par Le Bourlot *et al.* (1999) : la méthode, qui consiste à traiter en détail les peuplements collisionnel et radiatif des niveaux excités de H₂, sera présentée dans le Chap. 9.

En ce qui concerne le refroidissement par les transitions rotationnelles de CO, H₂O et OH, Flower *et al.* (1986) obtiennent une expression approchée (en sommant directement les contributions des partenaires de collisions), que nous utiliserons dans la suite de ce travail :

$$\begin{aligned}\Lambda_{CO,H_2O,OH} &= 10^{-26}T[(n(CO) + n(H_2O)) \times (n(H_2) + n(H)) \\ &+ n(OH) \times n(H_2) + 10n(H)] \text{ erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}\end{aligned}\tag{2.23}$$

2.5 Application aux nuages diffus

2.5.1 Le modèle PDR de Meudon

La structure et la géométrie du problème traité par les codes PDR (PhotoDissociation Region) sont schématisées dans la Fig. 2.1 : quelle est l'influence d'une source de radiation externe sur une couche plan parallèle statique composée de gaz et de poussières, et à l'équilibre thermique et chimique ? Les modèles PDR sont des outils numériques qui résolvent en chaque point la physico-chimie du milieu interstellaire

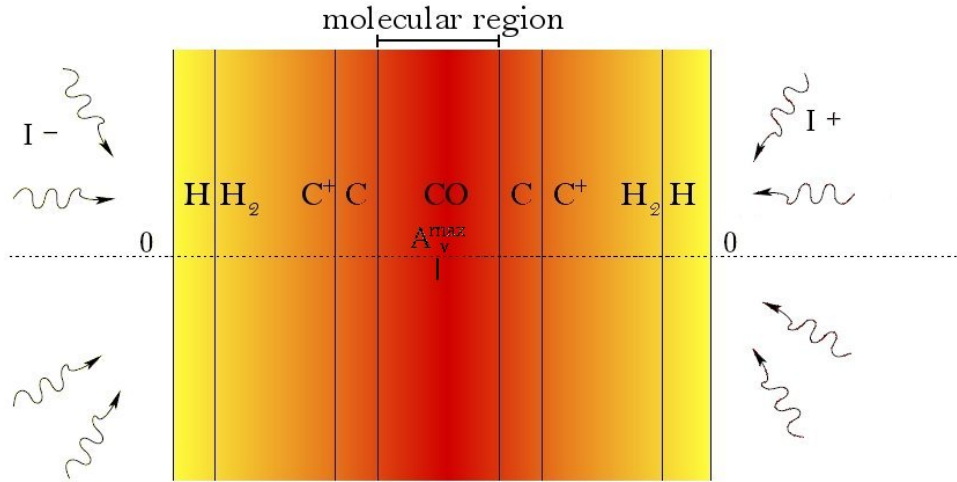


FIG. 2.1 – Schéma explicatif du modèle PDR (Le Petit *et al.* 2006). Une couche de gaz plan parallèle est illuminée des deux cotés par des champs de rayonnement uniformes. L’extinction (écranage) A_V du champ de rayonnement est calculée en chaque point dans la direction perpendiculaire à la couche de gaz. A_V^{tot} représente la quantité totale de matière, paramètre d’entrée du modèle.

en prenant en compte, de manière détaillée, le couplage entre le transfert de rayonnement, la chimie (en phase gazeuse et à la surface des grains) de centaines d’espèces atomiques et moléculaires, et les processus thermiques de chauffage et de refroidissement (Röellig *et al.* 2007).

Une attention particulière est accordée aux mécanismes de photodestruction, qui peuvent varier d’une espèce à l’autre. Par exemple des molécules telles que CH⁺ ou NH sont photodissociées par absorption directe d’un photon qui les fait passer de l’état fondamental à la partie répulsive d’un état excité. Dans ce cas, la section efficace de photodissociation est continue en fonction de la longueur d’onde des photons incidents. Alors qu’en revanche, H₂ et CO sont photodissociées de manière indirecte : le photon qu’elles absorbent les fait passer de l’état fondamental à un état électronique lié. Puis, soit par désexcitation radiative vers un état non liant (cas de H₂), soit par couplage non radiatif avec le continu d’un état non liant (cas de CO), ces molécules sont dissociées. H₂ et CO sont donc photodissociées dans les raies. Pour H₂, il s’agit des raies $B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ et $C^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$, respectivement dans les systèmes de Lyman et Werner, dans la gamme de longueur d’onde 912-1100 Å. Quant à CO, des expériences (Lee & Guest 1981) ont montré une absorption non continue aux alentours de 1060 Å.

Ainsi les modèles PDR fournissent des informations importantes sur la composition chimique d’un nuage soumis aux seuls photons UV : en particulier sur la profondeur optique de la transition H/H₂.

À partir de la Fig. 2.1, il est essentiel de comprendre, que dans un modèle PDR, il y a identité entre l’extinction A_V (protection du gaz face au champ de rayonnement) et la quantité de matière totale N_H au travers du gaz. Dans la suite nous utilisons le

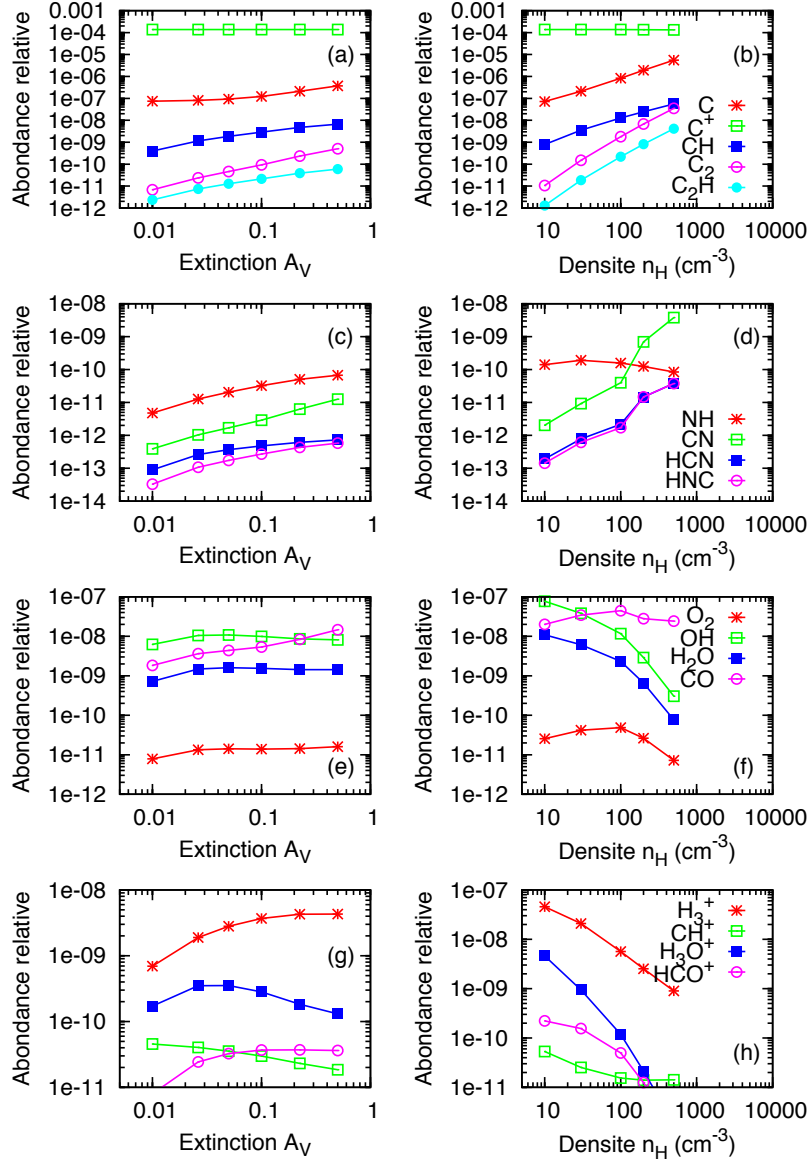


FIG. 2.2 – Abondances relatives de plusieurs espèces dans le milieu diffus en fonction de A_V et n_H . Ces figures sont obtenues à partir du code PDR de Meudon (Le Petit *et al.* 2006) pour une couche de gaz illuminée des 2 côtés, avec $\chi = 1$. Panneaux (a, c, e & g) : gaz de densité constante $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$. Panneaux (b, d, f, & h) : gaz à extinction constante $A_V = 0.4$.

code PDR de Meudon² (Le Petit *et al.* 2006), notamment pour obtenir la composition chimique et les termes de chauffage et de refroidissement en fonction de la densité et de l'extinction (Figs. 2.2 & 2.3). Ce code contient plusieurs spécificités : Il résout notamment l'excitation radiative de plusieurs espèces telles que H₂O, CO et HCO⁺.

2.5.2 Composition chimique

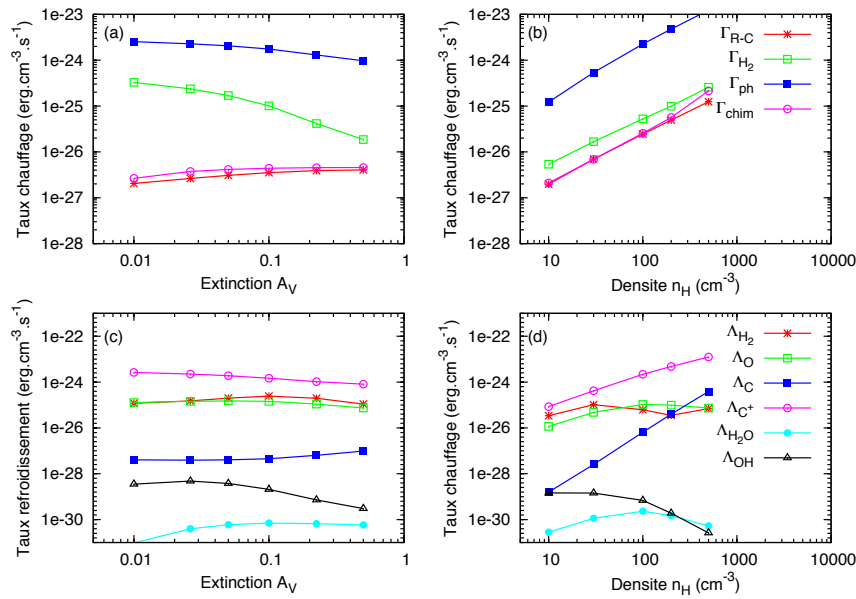


Fig. 2.3 – Fonctions de chauffage (panneaux a & b) et de refroidissement (panneaux c & d) dominantes dans le milieu diffus en fonction de A_V et n_H . Ces figures sont obtenues à partir du code PDR de Meudon (Le Petit *et al.* 2006) pour une couche de gaz illuminée des 2 côtés, avec $\chi = 1$. Panneaux (a & c) : gaz de densité constante $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$. Panneaux (b & d) : gaz à extinction constante $A_V = 0.4$.

Les prédictions du modèle PDR de Meudon concernant les abondances relatives de plusieurs espèces sont montrées dans la Fig. 2.2, où l'on remarque immédiatement que la densité a un impact fort sur la composition chimique. Ce sont les espèces azotées, ainsi que CH, C₂ et C₂H qui semblent dépendre le plus de l'extinction, leurs abondances variant de 2 ordres de grandeurs pour $0.01 < A_V < 0.5$. Enfin, C⁺ est bien l'espèce ionisée dominante pour tous les modèles, et son abondance relative est égale à l'abondance totale du carbone, indiquée dans la Tab. 2.1, ce qui est consistant avec nos définitions du MIS diffus (voir l'introduction).

²Ce code est disponible en ligne à l'adresse : <http://pdr.obspm.fr/>

2.5.3 Comparaisons des termes de chauffage et de refroidissement

La Fig. 2.3 montre une comparaison des taux de chauffage et des taux de refroidissement en fonction de la densité et de l'extinction. Concernant les chauffages, on remarque que non seulement les importances relatives des taux sont remarquablement constantes, mais également que l'effet photoélectrique domine toutes les autres sources d'un facteur 30 sur l'ensemble de la gamme de paramètres couverte par le milieu diffus.

En ce qui concerne les taux de refroidissement, c'est C^+ qui domine en moyenne, d'environ un ordre de grandeur. Mais alors que les importances relatives ne semblent pas dépendre crucialement de l'extinction, elles montrent de fortes variations en fonction de la densité, un effet qui est partiellement dû à l'impact de la densité sur la température du gaz.

Dans la gamme de température $50 < T < 500$ K le refroidissement s'effectue par l'intermédiaire des transitions de structure fine de C^+ et O. Le carbone ionisé n'a qu'une transition efficace pour refroidir le milieu : ${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$ qui correspond à une température d'excitation de 92 K; tandis que l'oxygène se désexcite par l'intermédiaire de 2 transitions : ${}^3P_0 \rightarrow {}^3P_1$ et ${}^3P_1 \rightarrow {}^3P_2$, qui correspondent respectivement à des températures d'excitation de 99 K et 228 K.

L'augmentation de la température du milieu diffus permet le peuplement des niveaux rotationnels de H_2 par collisions. Entre 500 et 5000 K, ce refroidissement domine les autres d'au moins 2 ordres de grandeur.

2.6 Conclusion

Si l'on suppose que le MIS diffus est à l'équilibre chimique et thermique, et que son état (composition et température) est complètement déterminé par le champ de rayonnement UV ambiant (approche suivie dans les modèles PDR), le bilan thermique montre que le chauffage du gaz est principalement assuré par l'effet photo-électrique, tandis que son refroidissement est dû à la transition de structure fine de l'ion C^+ . Et la composition chimique du gaz est résumée dans la Fig. 2.2. Dans le chapitre suivant, nous allons présenter les nombreuses observations qui remettent en cause cette vision du MIS diffus, à la fois statique et à l'équilibre thermique et chimique.

Chapitre 3

Les inconsistances avec les observations

Sommaire

3.1	Excursion de la pression thermique dans le CNM	61
3.2	Composition chimique du milieu diffus	62
3.2.1	Introduction : les régions Galactiques observées	62
3.2.2	Les abondances moléculaires	64
3.2.3	Excitation de H ₂	65
3.2.4	Largeurs de raies	66
3.3	Article Godard 2009b	67
3.4	Les solutions envisagées	88
3.4.1	Le transport turbulent	88
3.4.2	La dissipation de l'énergie turbulente	89
3.5	Conclusion	93

Il existe de nombreuses observations qui s'opposent à la vision d'un milieu interstellaire composé de différentes phases en équilibre de pression thermique, sans grande interaction les unes avec les autres, en simple mouvement ballistique, et dont les compositions chimiques sont entièrement contrôlées par le champ de rayonnement ambiant.

Un exemple assez convainquant est donné par l'analyse des relevés de la raie HI à 21 cm, observée en absorption et en émission. Dans leur échantillon composé de 79 sources, Heiles & Troland (2003) détectent respectivement 202 et 172 composantes qu'ils attribuent au CNM et au WNM. Lors de la décomposition en profils Gaussiens, une limite supérieure $T_{K \max}$ de la température cinétique T_K est dérivée des largeurs de raies, tandis que la température de spin T_S , déduite de l'intensité absolue, en fournit une limite inférieure (notons d'ailleurs que $T_S = T_K$ pour $T_K < 1000$ K).

La Fig. 3.1 montre les distributions obtenues de T_S et de $T_{K \max}$ en unité de densité de colonne (le facteur d'échelle est de 10^{20} cm⁻²). En se focalisant sur les lignes de visées à haute latitude Galactique ($|b| > 10^\circ$, traits continus dans la Fig. 3.1), Heiles & Troland (2003) montrent qu'en fraction de la densité de colonne totale :

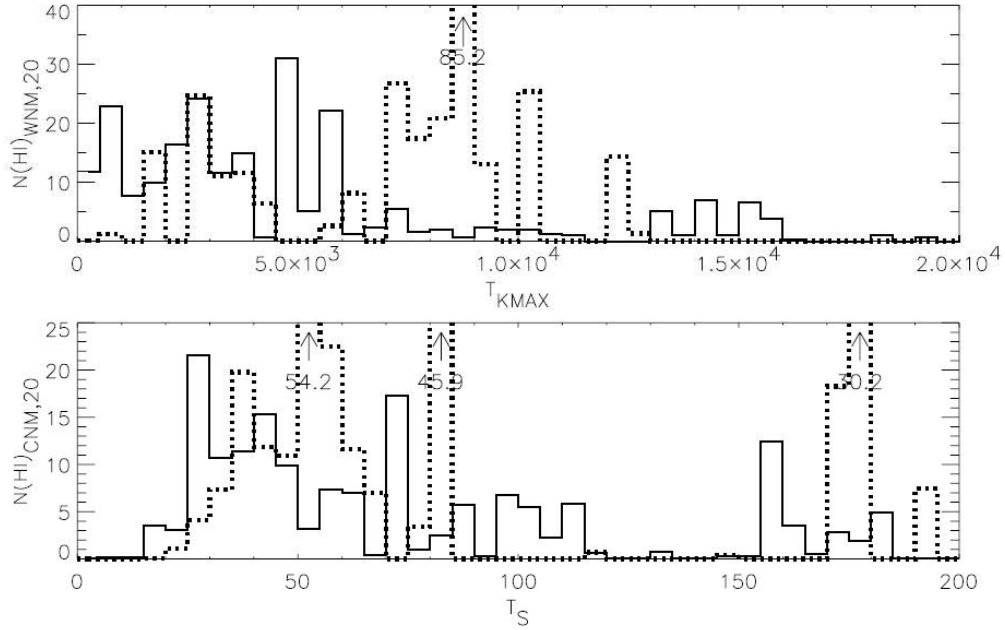


FIG. 3.1 – Distributions de $T_{K \max}$ et T_S en unité de densité de colonne de HI (facteur d'échelle 10^{20} cm^{-2}) pour les composantes observées dans le CNM et le WNM (Heiles & Troland 2003). Les lignes solides et en pointillés correspondent respectivement aux lignes de visée $|b| > 10^\circ$ et $|b| < 10^\circ$.

- 4% du WNM vérifie $T_K < 500 \text{ K}$, 48% a des températures cinétiques $500 < T_K < 5000 \text{ K}$, et 48% repose dans la gamme¹ $T_K > 5000 \text{ K}$;
- 4% du CNM vérifie $T_K < 25 \text{ K}$, 67% est dans la gamme $T_K < 100 \text{ K}$, 18% entre 100 et 200 K, et 11% a des températures cinétiques supérieures à 200 K (avec comme limite supérieure 658 K).

Ainsi le gaz HI montre de larges distributions de température. Pour le CNM, la valeur médiane est d'environ 70 K, mais l'on sait qu'environ 30 % a des températures bien supérieures. En outre, les observations révèlent du gaz en train de refroidir (composantes du WNM trop froides pour être thermiquement instable), et une grande fraction du WNM est détectée dans la gamme thermiquement instable $500 < T_K < 5000 \text{ K}$.

Dans ce chapitre, nous traquons les indices observationnels d'un milieu interstellaire non statique. Nous concentrons nos efforts sur le CNM et sur le milieu diffus, afin de montrer que le gaz est non seulement constamment en évolution chimique, thermique et dynamique, mais également que sa composition chimique et son état physique peuvent être différents des prédictions des modèles PDR.

¹Notons que certaines composantes (22% en densité de colonne totale) vérifient $T_{K \max} > 20000 \text{ K}$. Comme T_K ne peut dépasser 10^4 K , faute de quoi le milieu serait ionisé, ces valeurs extrêmes sont la trace : de plusieurs sous composantes non résolues contenues dans la gaussienne initiale ou de mouvements non-thermiques très supersoniques.

3.1 Excursion de la pression thermique dans le CNM

Jenkins & Tripp (2001, 2007) ont mesuré les fluctuations spatiales de la pression thermique dans le CNM en observant les raies d'absorption de structure fine du carbone neutre en direction de 102 étoiles. Le principe consiste à comparer les densités de colonne des niveaux de structure fine de l'état fondamental, notés C^0 , C^1 et C^2 , et qui vérifient $N(C) = N(C^0) + N(C^1) + N(C^2)$. En définissant les quantités

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{N(C^1)}{N(C)} \\ f_2 &= \frac{N(C^2)}{N(C)} \end{aligned} \quad (3.1)$$

il est possible d'obtenir la pression du gaz en plaçant les mesures dans le plan $[f_1 - f_2]$, comme indiqué en Fig. 3.2. Les courbes théoriques affichées correspondent à plusieurs températures, et les points sur ces courbes à plusieurs densités. L'avantage d'une telle représentation est la suivante : alors que les points de mêmes densités (sur les différentes courbes) sont très éloignés les uns des autres, les points de même pression sont assez proches, si bien que la pression du gaz peut être évaluée sans la connaissance de la température ou de la densité.

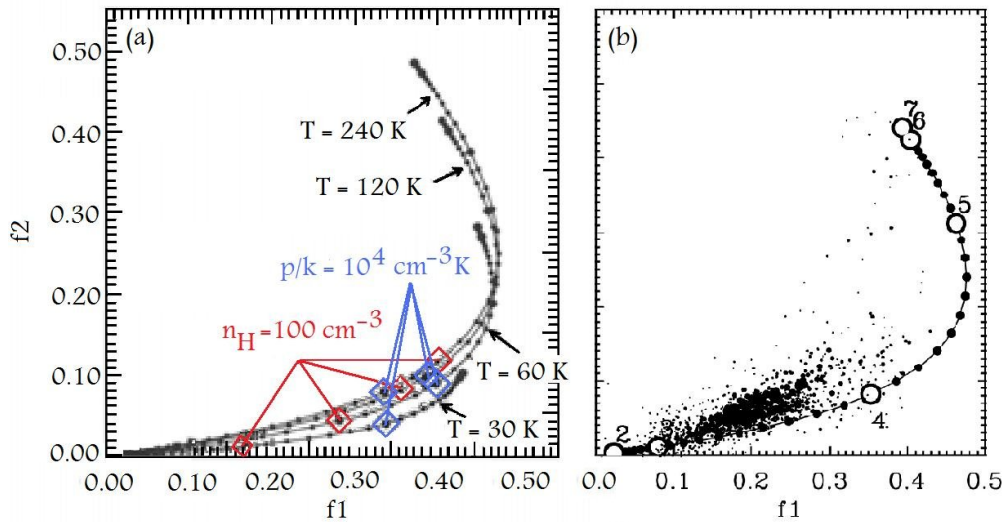


FIG. 3.2 – Figures issues de Jenkins & Tripp (2007). Panneau (a) : positions des points (f_1, f_2) (voir texte pour les définitions) en fonction de la température. Sur chaque courbe la densité varie en puissance de 10 entre les gros points. Panneau (b) : Mesures des points (f_1, f_2) pour toutes les lignes de visée observées, et pour des vitesses radiales permises (voir Jenkins & Tripp 2001 pour plus de détails) ; La courbe théorique est obtenue pour une température $T = 100$ K, et les cercles numérotés correspondent aux valeurs entières de $\log(P/k)$.

En pratique tous les points mesurés sont situés en dehors de ces courbes, comme le montre la Fig. 3.2. L'explication est la suivante. Chaque point peut-être expliqué par la combinaison d'une grande quantité de gaz dont la pression se situe aux alentours de

$P/k \sim 2700 \text{ cm}^{-3} \text{ K}$, plus une fraction de gaz à des pressions nettement plus élevées, qui peuvent même atteindre $P/k \sim 10^5 \text{ cm}^{-3} \text{ K}$. La distribution de pression thermique ainsi obtenue est attribuée à la turbulence interstellaire qui modifie la densité (flots divergents ou convergents) et la température (chauffage à petite échelle par la turbulence compressible ou incompressible) locales du gaz.

3.2 Composition chimique du milieu diffus

3.2.1 Introduction : les régions Galactiques observées

Les observations en absorption du milieu diffus ont révélé, depuis déjà plusieurs années, de nombreuses *anomalies* chimiques, dans le sens où ni la composition du gaz, ni l'état d'excitation des molécules ne peuvent être expliqués dans le cadre restreint des modèles PDR.

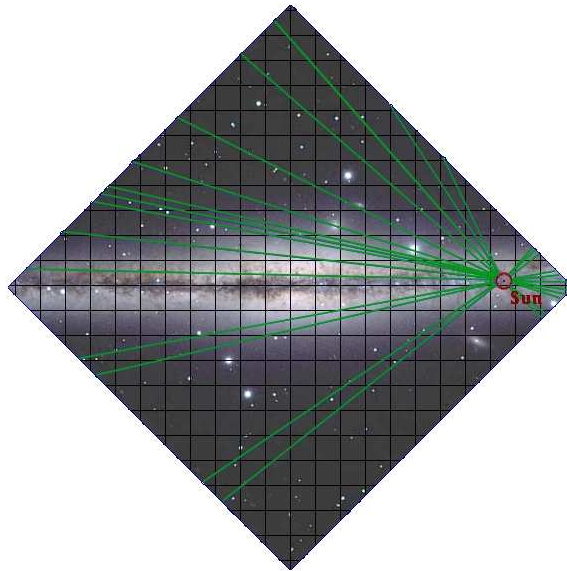


FIG. 3.3 – Lignes de visée cibles de Lucas & Liszt et Liszt & Lucas (1996-2008) dans la direction de sources radio brillantes extragalactiques (quasars). La photo d'arrière plan provient des observations WIYN de la galaxie NGC 891. 1 carré correspond à une distance de 1 kpc.

Il y a néanmoins quelques difficultés à surmonter pour interpréter correctement les observations.

- Le milieu accessible dépend des longueurs d'onde des transitions atomiques et moléculaires. En effet les mesures en absorption dans les domaines visible et UV sont limitées au gaz diffus dans le voisinage solaire, pour des lignes de visée d'extinction $A_V < 2$, ce qui correspond approximativement à une distance de 1 kpc autour du soleil (= 1 subdivision sur les Figs. 3.3 & 3.4). En comparaison, l'extinction dans le domaine radio étant environ 10 fois inférieure à

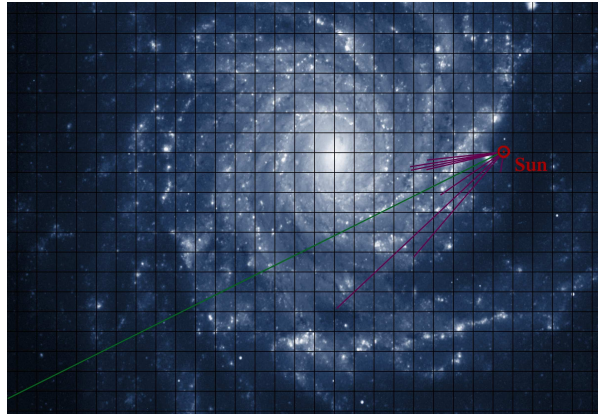


FIG. 3.4 – Lignes de visée cibles (en violet) de Godard *et al.* (2009b) et (en vert) de Falgarone *et al.* (2005). La photo d’arrière plan provient des observations ESO-VLT de la galaxie NGC 1232. 1 carré correspond à une distance de 1 kpc.

celle dans le visible, les observations centimétrique, millimétrique, et submillimétriques permettent d’échantillonner plusieurs kpc de gaz, et donc de sonder la Galaxie plus en profondeur. L’interprétation couplée des observations réalisées dans plusieurs domaines de fréquence est donc délicate, non seulement parce que les milieux échantillonnés sont différents mais également parce que les résolutions angulaires et spectrales des instruments varient. C’est la raison pour laquelle, il est important d’observer des molécules *bridge* : celles qui possèdent des transitions détectables dans plusieurs domaines de longueur d’onde : citons par exemple CN et CH (observables en visible et millimétrique), H₂ (observable en UV et infrarouge) et CH⁺ (observable en visible et submillimétrique).

- Comme nous l’avons vu tout au long de cette partie, le milieu interstellaire est fortement hétérogène, non seulement en densité et en température mais également en ce qui concerne les contraintes auxquelles le milieu est soumis : champs de rayonnement et magnétique, énergie cinétique injectée, distribution des rayons cosmiques. L’intercomparaison entre différentes lignes de visée doit prendre en compte d’éventuelles variations des conditions physiques du gaz.
- Enfin, comme le montre la Fig. 3.5 (Liszt, comm. priv.), résultat d’observations à hautes latitudes Galactique, le MIS ne montre pas un mais plusieurs états chimiques. Et c’est parce qu’il est difficile de déterminer les densités et les températures de chaque composante en vitesse observée, qu’il devient également difficile d’associer ces états chimiques à telle ou telle phase du MIS. On remarque ainsi sur la Fig. 3.5, qu’il existe des composantes en HCO⁺ non visibles en CO et vice versa, des composantes en CO et/ou HCO⁺ qui apparaissent en HI ou non.

La Fig. 3.3 montrent les lignes de visée étudiées par Lucas & Liszt et Liszt & Lucas (1996-2008) dans le domaine millimétrique, tandis que la Fig. 3.4 affiche celles observées par Falgarone *et al.* (2005) en infrarouge et par Godard *et al.* (2009b) en millimétrique.

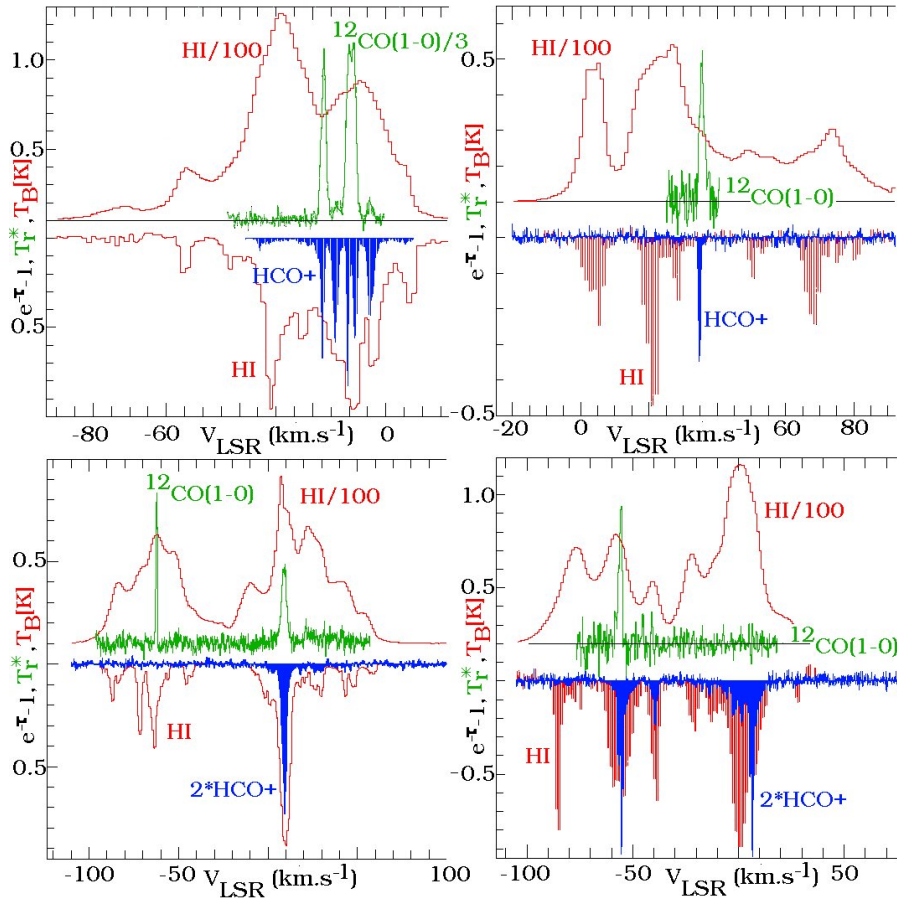


FIG. 3.5 – Spectres de la raie HI à 21 cm en émission et en absorption, et des raies rotationnelles de CO et HCO⁺ (1-0) respectivement en absorption et en émission, observés le long de lignes de visée à haute latitude Galactique (Liszt, comm. priv.).

3.2.2 Les abondances moléculaires

Depuis la découverte dans les années 40 de CH⁺, CH et CN, de nombreux autres atomes et molécules se sont ajoutés au bilan chimique du MIS diffus. La Tab. 3.1 donne les abondances relatives obtenues. La comparaison avec la Fig. 2.2 du chapitre précédent montre de multiples inconsistances (de 1 à 3 ordres de grandeurs) avec les prédictions des modèles PDR, dont les plus marquées concernent CH⁺, HCO⁺, CO et les molécules azotées.

Les mêmes résultats sont obtenus quelle que soit la position du gaz dans la Galaxie (Godard *et al.* 2009b). Ceci indique que les abondances et les corrélations de certaines espèces (HCO⁺, CN, HCN, HNC, C₂H et C₃H₂), et peut-être de beaucoup d'autres, ne seraient pas tributaires des variations du champ de rayonnement dans la Galaxie.

En réalité, toutes les molécules listées dans la Tab. 3.1 tracent un gaz qui n'est pas entièrement dominé par le champ de rayonnement UV, car elles sont reliées entre elles par la chimie. En effet, le challenge n'est pas tant d'expliquer l'abondance d'une de ces molécules mais de toutes simultanément. Cet objectif est motivé par les nombreuses

TAB. 3.1 – Densités de colonne et abondances relatives observées dans le milieu interstellaire diffus le long des lignes de visées affichées en Fig. 3.3 & Fig. 3.4 ainsi que dans le MIS local. Les nombres entre parenthèses sont des puissances de 10.

Espèce	N_{\min} (cm^{-2})	N_{\max} (cm^{-2})	$\langle N \rangle / N_{\text{H}}$	$\delta \log [N/N_{\text{H}}]$ (erreur log)	Référence
CH	1.0 (12)	2.5 (14)	5.6 (-09)	~ 3	a, b, c, h
CH ⁺	7.0 (11)	8.0 (13)	5.6 (-09)	~ 10	a, b, c
OH	7.0 (12)	3.5 (14)	2.5 (-08)	~ 3	d, i
HCO ⁺	1.8 (11)	8.0 (12)	1.0 (-09)	~ 3	d, i, j
H ₂ O	1.0 (12)	3.0 (13)	4.4 (-09)	~ 3	l, m, i
CO	1.3 (14)	2.0 (16)	1.7 (-06)	~ 10	f, i
C ₂ H	1.0 (12)	1.0 (14)	1.0 (-08)	~ 5	e, n, i, j
C ₃ H ₂	4.0 (10)	3.5 (12)	3.9 (-10)	~ 5	e, n, i, j
CN	2.0 (12)	1.0 (14)	1.0 (-08)	~ 10	g, j
HCN	1.0 (11)	2.0 (13)	1.1 (-09)	~ 10	g, j
HNC	2.0 (10)	6.0 (12)	3.3 (-10)	~ 10	g, j
CS	1.5 (11)	7.0 (12)	1.1 (-09)	~ 5	o, i
H ₃ ⁺	5.4 (13)	2.0 (14)	7.8 (-08)		k

Références : (a) Crane *et al.* (1995); (b) Gredel (1997); (c) Weselak (2008b); (d) Lucas & Liszt (1996); (e) Lucas & Liszt (2000); (f) Liszt & Lucas (1998); (g) Liszt & Lucas (2001); (h) Liszt & Lucas (2002); (i) Godard *et al.* (2009a); (j) Godard *et al.* (2009b); (k) McCall *et al.* (2002); (l) Neufeld *et al.* (2002); (m) Olofsson *et al.* (comm. priv.); (n) Gerin *et al.* (en prép.); (o) Lucas & Liszt (2002).

corrélations observées (voir Godard *et al.* 2009 a&b pour plus de détails) :

- les corrélations linéaires fortes entre CH et H₂ (Liszt & Lucas 2002), entre HCO⁺ et OH (Lucas & Liszt 1996), entre CN, HCN et HNC (Liszt & Lucas 2001, Godard *et al.* 2009b) et entre C₂H et C₃H₂ (Liszt & Lucas 2000), et celles faibles entre HCO⁺, H₂O, CS et C₂H (Oloffson *et al.* priv. comm., Lucas & Liszt 2002, Godard *et al.* 2009b);
- les corrélations non linéaires entre HCO⁺, CN, HCN et HNC (loi de puissance en $N(X) \sim N(\text{HCO}^+)^{1.25}$, Godard *et al.* 2009b) et entre HCO⁺ et CO (loi de puissance en $N(\text{CO}) \sim N(\text{HCO}^+)^2$, Liszt & Lucas 1998).

3.2.3 Excitation de H₂

H₂ est la molécule la plus abondante dans le milieu interstellaire. Néanmoins, celle-ci étant symétrique, elle ne possède pas de moment dipolaire permanent; on ne peut donc l'observer qu'à travers ses transitions quadrupolaires ce qui la rend difficilement détectable. Elle fut découverte dans le MIS dans les années 70, grâce au télescope spatial Copernicus, tout d'abord dans l'UV puis dans l'infrarouge (avec le télescope spatial ISO). Avec le temps, les observations ont permis d'estimer les densités de colonne de nombreux niveaux excités.

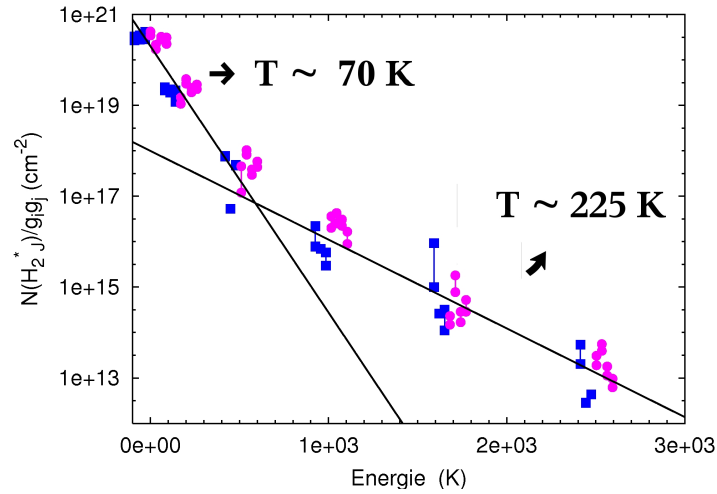


FIG. 3.6 – Diagramme d’excitation des niveaux rotationnels purs de H_2 observés dans le gaz diffus Galactique par Gry *et al.* (2002) (points bleus) et Lacour *et al.* (2005) (points violets) en directions d’étoiles tardives. Tous les points de cette figure sont normalisés à une densité de colonne de H_2 , $N(\text{H}_2) = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$. Les températures d’excitation, obtenues à partir d’un ajustement exponentiel des populations des niveaux $J = 0, 1$ et 2 et $J = 3, 4$ et 5 , sont également indiquées.

Dans le gaz diffus, les niveaux rotationnels de H_2 ne sont pas à l’équilibre statistique avec une seule température T_{rot} , comme le montre la Fig. 3.6, résultat d’une compilation des mesures de Gry *et al.* (2002) et Lacour *et al.* (2005) réalisées en absorption avec le télescope spatial FUSE. La température d’excitation des niveaux $J > 3$, qui est de l’ordre de 300 K (Falgarone *et al.* 2005), ne peut s’expliquer ni par le pompage radiatif dû aux photons UV, puisque ces températures sont observées dans des régions protégées du rayonnement stellaire, ni par l’excitation de H_2 lors de sa formation (Lacour *et al.* 2005).

3.2.4 Largeurs de raies

Enfin, un dernier argument qui s’oppose à la vision statique du milieu interstellaire s’obtient en analysant les profils observés des raies de transitions moléculaires et atomiques. En effet, bien que Lucas & Liszt (1996) aient remarqué une surprenante similarité entre les profils de raie de OH et HCO^+ , plusieurs autres molécules peuvent être classées en fonction de leurs largeurs de raie, comme le montre la Fig. 3.7, qui exhibe les profils de CN (3874 Å), CH (4300 Å) et CH^+ (4232 Å) observés par Lambert *et al.* (1990) en direction de ζ Oph. On remarque sur cette figure que le profil de CH^+ est plus large et moins gaussien que celui de CH, lui-même plus large que celui de CN.

Depuis ce résultat, des analyses statistiques des largeurs de raies ont été réalisées par Crane *et al.* (1995) dans le milieu diffus le long de 20 étoiles brillantes, et par Pan *et al.* (2004, 2005) en directions d’étoiles des régions CepOB2 et CepOB3. Celles-ci montrent que les profils de raie de CH^+ sont invariablement plus larges que ceux de CH. De la même manière, Godard *et al.* (2009b) comparent les largeurs de raies de

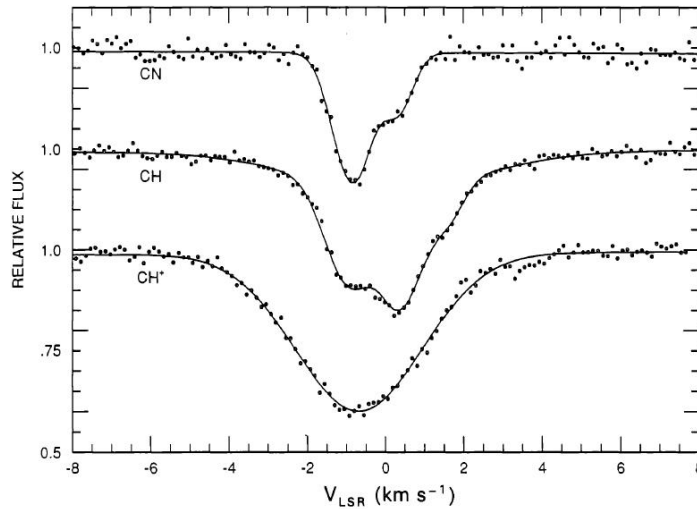


FIG. 3.7 – Profils des raies de transition de CN à 3874 Å, CH à 4300 Å et CH⁺ à 4232 Å observés par Lambert *et al.* (1990) dans la direction de ζ Oph. Les courbes correspondent à des ajustements basés sur la méthode des moindres carrés.

HCO⁺, CN, HCN et HNC, déduites d'un ajustement gaussien des spectres observés au travers du disque galactique (cf. Fig. 3.4), en direction de régions de formations d'étoiles. Non seulement la classification suivante est obtenue,

$$\Delta(\text{HCO}^+) > \Delta(\text{HNC}) \geq \Delta(\text{HCN}) \sim \Delta(\text{CN}) \quad (3.2)$$

où Δ est la largeur à mi-hauteur des ajustements gaussiens, mais des corrélations sont observées entre les largeurs de raie de ces 4 molécules.

Tous ces rapports montrent que la chimie du MIS diffus est, d'une manière ou d'une autre, reliée à sa dynamique, puisque, les abondances des espèces sont fortement corrélées les unes avec les autres, tandis que leurs signatures dynamiques sont très différentes.

3.3 Article Godard 2009b

Dans cet article nous présentons l'analyse des raies de transition moléculaires de HCO⁺, CN, HCN et HNC, à 1 et 3 mm, observées en absorption en direction de régions de formation d'étoiles avec le télescope IRAM-30m. Comme le montre la Fig. 3.4, les lignes de visées (cibles du programme clé PRISMAS de l'instrument Herschel-HIFI) traversent des kpc de gaz interstellaire appartenant au disque galactique. À partir des données HCO⁺ (2-1) et (1-0), et grâce à la remarquable résolution spectrale et au fort rapport S/N, nous déduisons les températures d'excitation avec une précision d'environ 1 K, ce qui nous permet également de donner une limite supérieure sur les densités des milieux sondés. Les corrélations trouvées entre les densités de colonne de ces molécules sont en accord avec celles observées par Lucas & Liszt (1996-2008) le long de lignes de visée à hautes latitudes galactiques, suggérant que la composition chimique du gaz vu en absorption est indépendante des fluctuations du champ de rayonnement et

du flux de rayons cosmiques dans la Galaxie. La décomposition des spectres en profils gaussiens est réalisée à l'aide d'un programme d'ajustement que nous avons construit, basé sur la méthode Levenberg-Marquardt. L'intercomparaison des profils associés à chaque composante² en vitesse est également en accord avec les résultats de Lucas & Liszt (1996-2008), et révèlent une classification des espèces en fonction de leurs largeurs de raies : les profils de HCO⁺ (1-0) sont systématiquement plus larges que ceux de HNC (1-0), eux mêmes plus larges que ceux de HCN (1-0), ces derniers étant équivalents aux profils de CN (1-0).

A partir de l'analyse du relevé 2MASS (Cutie *et al.* 2003), effectué par Marshall *et al.* (2006), nous déduisons également les densités de colonne totales échantillonnées, afin de discuter les variations d'abondances chimiques observées le long des lignes de visées. Nous comparons alors les résultats obtenus avec ceux déduits des modèles PDR et TDR (Turbulent Dissipation Regions) (Godard *et al.* 2009a, cf. Chap. 9). Nous trouvons que bien que les modèles PDR soient en mesure de reproduire les abondances observées de CN, HCN et HNC pour des densités du gaz comprises entre 10^3 et 10^4 cm⁻³, les prédictions concernant l'abondance de HCO⁺ sont au moins un ordre de grandeur en deçà des valeurs observées. Les modèles TDR, quant à eux, reproduisent simultanément les abondances des toutes ces molécules et de C₂H (Gerin *et al.* 2009), ainsi que leurs multiples corrélations, et ce pour une gamme de densités allant de 30 à 200 cm⁻³ (pour HCO⁺) et de 10 à 500 cm⁻³ (pour CN, HCN, HNC et C₂H).

²On appelle composante une gaussienne unique extraite du spectre total.

Molecular absorption lines toward star forming regions : a comparative study of HCO⁺, HNC, HCN and CN^{*}

B. Godard¹, E. Falgarone¹, M. Gerin¹, P. Hily-Blant² and M. De Luca¹

¹ LRA/LERMA, CNRS UMR 8112, École Normale Supérieure, Observatoire de Paris, Paris

² LAOG, CNRS UMR 5571, Université Joseph Fourier & Observatoire de Grenoble, Grenoble

Received ??? / Accepted ???

Abstract

Aims. The comparative study of several molecular species at the origin of the gas phase chemistry in the diffuse interstellar medium is a key input in unraveling the coupled chemical and dynamical evolution of the interstellar medium.

Methods. The lowest rotational lines of HCO⁺, HCN, HNC and CN have been observed at the IRAM-30m telescope in absorption against the λ 3 mm and λ 1.3 mm continuum emission of massive star forming regions in the Galactic plane. The absorption lines probe the gas over kiloparsecs along these lines of sight. The excitation temperatures of HCO⁺ are inferred from the comparison of the absorptions in the two lowest transitions. The spectra of all molecular species on a same line of sight are decomposed into Gaussian velocity components. Most appear in all the spectra of a given line of sight. For each component, we derive the central opacity, the velocity dispersion, and compute the molecular column density. We compare our results to the predictions of UV-dominated chemical models of photodissociation regions (PDR models) and to those of non-equilibrium models in which the chemistry is driven by the dissipation of turbulent energy (TDR models).

Results. The molecular column densities of all the velocity components span up to two orders of magnitude. Those of CN, HCN and HNC are linearly correlated with each other with mean ratios $N(\text{HCN})/N(\text{HNC}) = 4.8 \pm 1.3$ and $N(\text{CN})/N(\text{HNC}) = 24.1 \pm 8.5$, and more loosely correlated with those of HCO⁺, $N(\text{HNC})/N(\text{HCO}^+) = 0.5 \pm 0.3$, $N(\text{HCN})/N(\text{HCO}^+) = 1.9 \pm 0.9$ and $N(\text{CN})/N(\text{HCO}^+) = 13 \pm 6$. These ratios are similar to those inferred from observations of high Galactic latitude lines of sight, suggesting that the gas sampled by absorption lines in the Galactic plane has the same chemical properties as that in the Solar neighbourhood. The FWHM of the Gaussian velocity components span the range 0.3 to 3 km s⁻¹ and those of the HCO⁺ lines are found to be 30% broader than those of CN-bearing molecules. The PDR models fail to reproduce simultaneously the observed abundances of the CN-bearing species and HCO⁺, even for large density material ($100 \text{ cm}^{-3} < n_{\text{H}} < 10^4 \text{ cm}^{-3}$). The TDR models, in turn, are able to reproduce the observed abundances and abundance ratios of all the analysed molecules for the moderate gas densities ($30 \text{ cm}^{-3} < n_{\text{H}} < 200 \text{ cm}^{-3}$) and the turbulent energy observed in the diffuse interstellar medium.

Conclusions. Intermittent turbulent dissipation appears to be a promising driver of the gas phase chemistry of the diffuse and translucent gas throughout the Galaxy. The details of the dissipation mechanisms are still to be investigated.

Key words. Astrochemistry - Turbulence - ISM: molecules - ISM: kinematics and dynamics - ISM: structure - ISM: clouds

1. Introduction

Since its discovery through absorption lines in bright star spectra (Hartmann 1904), our knowledge of the interstellar medium has grown upon a variety of absorption line measurements. Diatomic molecules have been discovered in this hostile environment in the late 1930's and early 1940's (see references in the review of Snow and McCall 2006) and since then have been observed in the UV and visible spectral domains toward bright stars (e.g. Crane *et al.* 1995, Gredel 1997, Weselak *et al.* 2008a, 2008b, 2009, Gry *et al.* 2002, Lacour *et al.* 2005) at increasingly large extinction values (up to $A_V < 5$ Gredel *et al.* 2002). Molecules are also detected at submillimeter, millimeter and centimeter wavelengths in absorption against the continuum emission of

star forming regions (e.g. Koo 1997, Fish *et al.* 2003, Nyman 1983, Nyman & Millar 1989, Cox *et al.* 1988, Carral & Welch 1992, Greaves & Williams 1994, Neufeld *et al.* 2002, Plume *et al.* 2004, Olofsson *et al.* 2009) and bright extragalactic radio sources (Liszt *et al.* 2008 and references therein). The picture that emerges from these measurements is complex and the link between the structure in density and temperature, the molecular richness and the velocity field is still to be unraveled. In particular, the abundance of several molecules, like CH⁺ or HCO⁺ (to name a few) are found to be orders of magnitude larger than those deduced from UV dominated chemical models. In the cases of HCO⁺, HNC and HCN the abundances inferred from observations of the diffuse ISM are similar to those observed in dark clouds (Lucas & Liszt 1996, 2000, Liszt & Lucas 2001). The column densities of specific species, like HCO⁺ and OH, exhibit remarkable correlations that cannot be understood in the UV dominated chemistry.

* Based on observations obtained with the IRAM 30m telescope. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany) and IGN (Spain).

Table 1. Properties of background sources, and rms noise levels of the spectra.

Source	RA(J2000) (h) (m) (s)	Dec (J2000) (°) (′) (″)	l (°)	b (°)	D ^a (kpc)	σ_l/T_c^b HCO ⁺ (0-1)	σ_l/T_c^b HCO ⁺ (1-2)	σ_l/T_c^b HNC (0-1)	σ_l/T_c^b HCN (0-1)	σ_l/T_c^b CN (0-1)
G05.88-0.39	18 00 30.4	-24 04 00	05.88	-0.39	3.8	0.021				
G08.67-0.36	18 06 18.9	-21 37 35	08.67	-0.36	4.8	0.138				
G10.62-0.38	18 10 28.7	-19 55 50	10.62	-0.38	4.8	0.049	0.206	0.043	0.035	0.064
G34.3+0.1	18 53 18.7	+01 14 58	34.26	+0.15	3.8	0.117	0.328	0.038	0.036	0.154
W49N	19 10 13.2	+09 06 12	43.17	+0.01	11.5	0.015	0.072	0.020	0.021	0.031
W51	19 23 43.9	+14 30 30.5	49.49	-0.39	7.0	0.022	0.089	0.043	0.034	0.070

^a Source distance from Fish *et al.* (2003) who resolve the kinematic distance ambiguity. Errors are around 1.0 kpc.

^b σ_l/T_c is the rms noises divided by the continuum intensities of the spectra.

Table 2. Observation parameters.

Molecule	Transition	ν_0 (GHz)	T_c (K)							T_{sys} (K)				
			G05	G08	G10	G34	W49	W51	G05	G08	G10	G34	W49	W51
HCO ⁺	0 - 1	89.1885247	1.5	0.22	0.69	0.86	1.73	1.03	156	162	206	137	167	132
HCO ⁺	1 - 2	178.3750563			0.60	0.26	1.10	0.96			588	420	375	374
HNC	0,1 - 1,0	90.6634170			0.97	0.88	1.94	0.93			186	162	160	191
HNC	0,1 - 1,2	90.6635560			0.97	0.88	1.94	0.93			186	162	160	191
HNC	0,1 - 1,1	90.6636220			0.97	0.88	1.94	0.93			186	162	160	191
HCN	0,1 - 1,1	88.6304160			1.05	1.20	1.86	1.10			158	167	146	140
HCN	0,1 - 1,2	88.6318470			1.05	1.20	1.86	1.10			158	167	146	140
HCN	0,1 - 1,0	88.6339360			1.05	1.20	1.86	1.10			158	167	146	140
CN	0,1/2,3/2 - 1,1/2,1/2	113.1441573			0.94	0.70	1.68	0.92			280	382	275	275
CN	0,1/2,1/2 - 1,1/2,3/2	113.1704915			0.94	0.70	1.68	0.92			280	382	275	275
CN	0,1/2,3/2 - 1,1/2,3/2	113.1912787			0.94	0.70	1.68	0.92			280	382	275	275
CN	0,1/2,1/2 - 1,3/2,3/2	113.4881202			0.93	0.69	1.68	0.93			284	312	209	206
CN	0,1/2,3/2 - 1,3/2,5/2	113.4909702			0.93	0.69	1.68	0.93			284	312	209	206
CN	0,1/2,1/2 - 1,3/2,1/2	113.4996443			0.93	0.69	1.68	0.93			284	312	209	206
CN	0,1/2,3/2 - 1,3/2,3/2	113.5089074			0.93	0.69	1.68	0.93			284	312	209	206
CN	0,1/2,3/2 - 1,3/2,1/2	113.5204315			0.93	0.69	1.68	0.93			284	312	209	206

Alternative chemical models that couple the chemical evolution of the gas to the turbulent dynamical evolution of the medium have been developed. The space time intermittency of turbulent dissipation is invoked to locally enhance the rate of highly endoenergetic reactions, otherwise blocked in the cold ISM. Turbulent dissipation in low velocity magneto hydrodynamical (MHD) shocks (Flower & Pineau des Forêts 1998) or magnetized regions of intense velocity shear (Falgarone *et al.* 1995, Joulain *et al.* 1998) are promising frameworks. Turbulent mixing between the warm neutral medium (WNM) and the cold neutral medium (CNM) has also been proposed as a possibility to enhance the formation rate of specific species (Lesaffre *et al.* 2007). In the turbulent dissipation regions (TDR) model of Godard *et al.* (2009), dissipation of turbulent energy occurs in short lived ($\sim 10^2$ yr) magnetized vortices and is responsible for long lasting ($\sim 10^3$ yr or more) chemical signatures due to the large thermal and chemical inertia of the diffuse gas. Following the chemical and thermal evolutions of the dissipation and relaxation phases, the TDR models reproduce the column densities of CH⁺, CH, HCO⁺, OH, H₂O, C₂H and of the rotational levels of H₂ ($J \geq 3$), as well as their correlations, observed in the local diffuse medium.

The present study broadens the investigation of the diffuse medium chemistry by analysing observations performed in the direction of remote star forming regions that sample gas throughout the Galactic plane. The selected background sources are extensively studied star forming regions, close to the Galactic plane ($|b| < 0.5^\circ$) (e.g. Mookerjee *et al.* 2007).

These lines of sight are also the primary targets of the Herschel-HIFI (Heterodyne Instrument for the Far Infrared) key program PRISMAS (PRobing InterStellar Molecules with Absorption line Studies) whose objective is to advance the understanding of astrochemistry by observing species at the origin of gas phase chemistry, namely light hydrides and small carbon containing molecules. The present work is therefore building for the future comparisons between radio and far infrared (FIR) observations.

The observations and their analysis are discussed in Sect. 2 and 3. The main results are presented in Sect. 4 and the cyanide chemistry and the predictions of 1D chemical models are discussed in Sect. 5.

2. Observations

The observations were carried out at the IRAM-30m telescope on Pico Veleta (Spain), in August and December 2006. For the sources listed in Tab. 1 (with their Galactic coordinates and their distance from the Sun), we observed, in wobbler switching mode,

- the $J = 0 - 1$ absorption lines of HCO⁺ and HNC at 89.1885247 and 90.6635680 GHz respectively,
- the $F = 1 - 1$, $1 - 2$ and $1 - 0$ hyperfine components of the $J = 0 - 1$ absorption line of HCN near 88.6318470 GHz and
- the $F = 3/2 - 1/2$, $1/2 - 3/2$, $3/2 - 3/2$, $3/2 - 5/2$ and $1/2 - 1/2$ hyperfine components of the $J = 0 - 1$ absorption line of CN near 113.1912787 GHz.

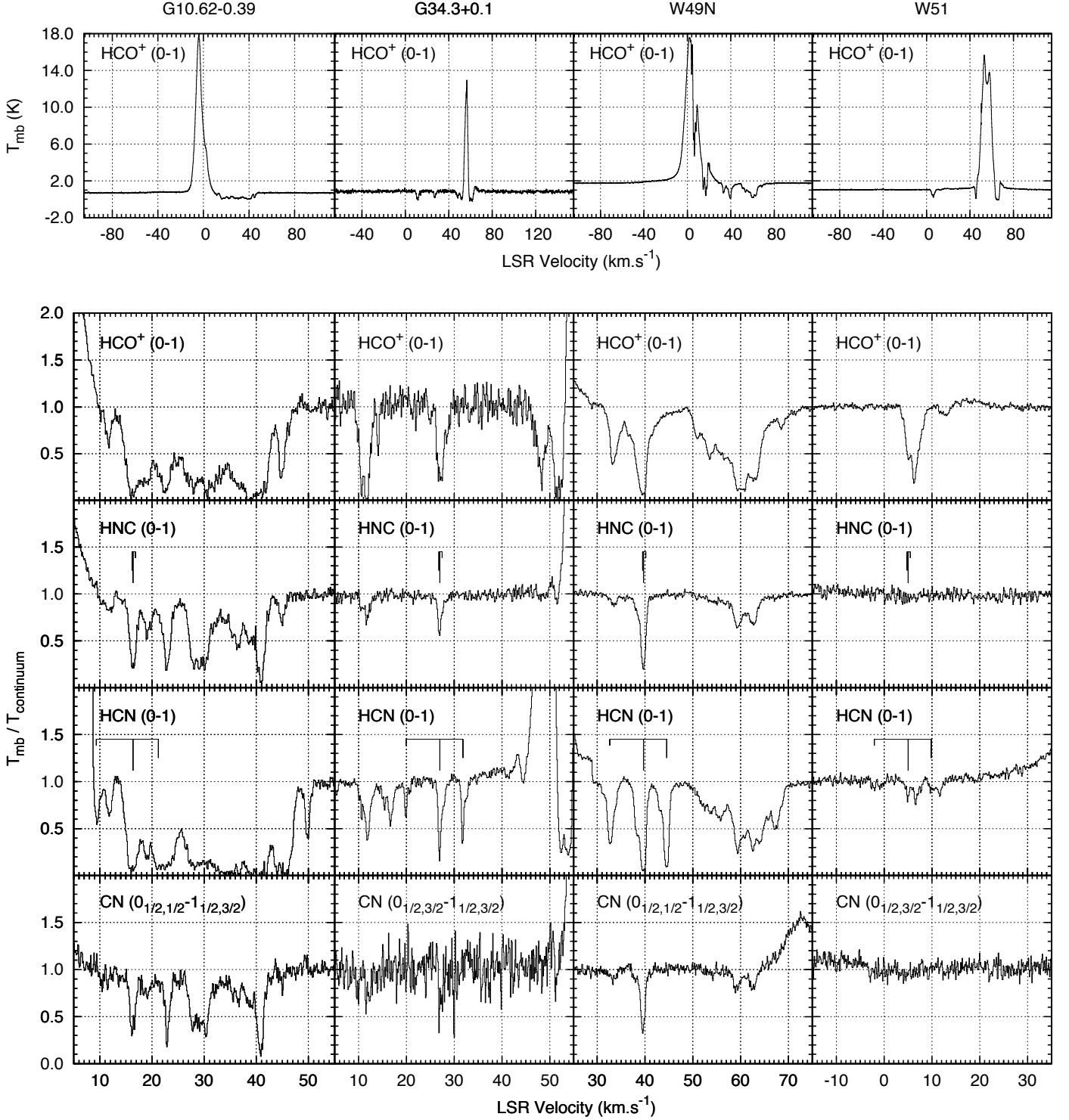


Figure 1. Absorption profiles observed in the direction of G10.62-0.39, G34.3+0.1, W49N and W51 in the ground state transitions of HCO^+ , HCN, HNC and CN. The hyperfine structure (relative positions and relative LTE line strength) of the $J = 0 - 1$ transition of HNC and HCN are displayed. The broad velocity coverage of the upper panels illustrates the quality of the baseline. The lower panels display the velocity structure of the absorption features in more details. All the spectra have been normalized to the continuum temperature.

We used the IRAM-30m SIS receivers tuned in SSB (single side band) mode, with rejection of the image bands larger than 15dB. The spectra were obtained using the VESPA correlator at a frequency resolution of 40 kHz. The rms pointing accuracy of the

telescope checked on nearby continuum sources was $3''$ and the integration time ranged between 11 and 59 minutes. Between 88 and 113 GHz, the forward and main beam efficiencies were of 0.95 and 0.75, the spectral resolution and the half power beam

width range from $\sim 0.13 \text{ km s}^{-1}$ and $28''$ to $\sim 0.10 \text{ km s}^{-1}$ and $22''$ respectively. The observation parameters are listed in Tab. 2.

The gain receiver stability, and therefore the uncertainty on the continuum level, T_c , is estimated by comparing the continuum levels from several spectra in the vicinity of the different lines. For the same frequency ranges, they differ by 0.1 to 0.3 K (see Tab. 2). The uncertainty on the continuum level therefore ranges between 10 and 30 %.

Fig. 1 displays a selection of spectra obtained after data reduction using the GILDAS-CLASS90 software¹ (Hily-Blant *et al.* 2005). We focus on the absorption part of the spectra, outside the line emission of the star forming region, since we are interested in the velocity structure and properties of the absorbing gas. In several cases, in order to extract as much information on the absorption lines as possible, the emission in wings of strong lines from the background source was removed using polynomial and exponential fitting routines.

As shown in Fig 1, the absorption spectra are highly structured. While all the background sources are in the Galactic plane along lines of sight that cross the molecular ring and the Sagittarius spiral arm once (except that toward W49N which crosses it twice), the number of absorption features is highly variable from one source to another: ranging from 1 to 20 components. Optical depths, defined as

$$\tau = -\ln\left(\frac{T}{T_c}\right), \quad (1)$$

are also highly variable from one species to another; several components are only detectable in HCO^+ (0-1), and the CN (0-1) spectra are unequivocally less overcast than all the other spectra. Complementary data have been obtained with the PdBI interferometer in the direction of W49N and W51 (Pety *et al.*, in preparation).

The hyperfine components of the $J = 0 - 1$ absorption lines of HNC (Bechtel *et al.* 2006) are too close to be individually resolved given the significant velocity dispersion of the gas. The hyperfine structure causes a systematic broadening that depends on the FWHM Δv_{real} of the velocity component: the broadening $\Delta v - \Delta v_{\text{real}}$ ranges² between 0.19 and 0.035 km s^{-1} for line FWHM varying from 0.3 to 3 km s^{-1} . In the case of HCN and CN (0-1), the separation of the hyperfine components is larger than most linewidths but the large number of velocity features along the lines of sight G10.62-0.38 and W49N induces a blending of the hyperfine components.

While absorption features above the noise level appear at all widths, down to the velocity resolution, we have not analysed the spectra to that level: **every feature we detect spans at least 3 spectrometer channels, between 0.3 and 0.4 km.s^{-1} depending on the frequency.**

3. Analysis

3.1. Excitation temperatures

We observed the HCO^+ (1-2) line toward 4 of the 6 sources listed in Tab. 1. As shown in Fig. 2, which displays the opacities $\tau_{\text{HCO}^+(0-1)}$ and $\tau_{\text{HCO}^+(1-2)}$ in the absorption lines channel by

¹ See <http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS> for more information about GILDAS softwares.

² This result on the line profile broadening is derived from the analysis of 560 synthetic spectra taking into account the hyperfine structure of HNC (line strength and velocity structure).

channel, the rms noise levels are low enough to compute accurate values of the excitation temperature toward W49N and W51. Toward G10.62-0.39 and G34.3+0.1, the correlation between $\tau_{\text{HCO}^+(0-1)}$ and $\tau_{\text{HCO}^+(1-2)}$ is looser and could be due to actual variations of the excitation temperature along the line of sight.

However, for the sake of simplicity, we assume that the absorbing gas on each line of sight is defined by a single excitation temperature T_{ex} , derived as

$$\frac{1 - \exp(-h\nu_2/kT_{\text{ex}})}{\exp(h\nu_1/kT_{\text{ex}}) - 1} = \frac{\int \tau_2 dv \left(\frac{\nu_2}{\nu_1}\right)^3 \frac{g_{u1}A_{ul1}}{g_{u2}A_{ul2}}, \quad (2)$$

where τ_1 and τ_2 are the line opacities per unit velocity, ν_1 and ν_2 the rest frequencies, g_{u1} and g_{u2} the upper level degeneracies, and A_{ul1} and A_{ul2} the Einstein's spontaneous emission coefficients of the molecular transitions HCO^+ (0-1) and (1-2) respectively. The results are listed in Tab. 3. For all sources, T_{ex} is found close to the temperature of the cosmic microwave background $T_{\text{cmb}} = 2.73 \text{ K}$.

Table 3. Excitation temperatures inferred from the $\tau_{\text{HCO}^+(1-2)}/\tau_{\text{HCO}^+(0-1)}$ ratio.

Source	T_{ex} (K)	errors ^a (K)	
		+	-
G10.62-0.38	3.0	1.4	0.5
G34.3+0.1	3.0	8.4	0.8
W49N	2.7	0.8	0.4
W51	2.9	1.1	0.5

^a The errors are derived from the results of numerical calculation which do not take into account the lower limit of 2.73 K set by the cosmic microwave background.

These low excitation temperatures suggest that HCO^+ , HNC and HCN, whose dipole moments are similar, are radiatively excited rather than collisionally. Using the Large Velocity Gradients (LVG) code by Schilke (private communication), we obtain an upper limit on the gas density: $n_{\text{H}} < 10^4 \text{ cm}^{-3}$. This constraint is not stringent because of the large critical densities of the transitions ($\sim 10^5$ and $\sim 10^6 \text{ cm}^{-3}$ for HCO^+ (1-0) and HNC and HCN (1-0) respectively).

Estimates of the gas densities are provided by the LVG analysis of emission lines observed at the velocities of the absorption components. Toward W49N, ^{12}CO and ^{13}CO (1-0) and (2-1) line observations provide H_2 densities all close to $5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ (Vastel *et al.* 2000). Including the $\text{Cl } ^3P_1 - ^3P_0$ line in the analysis of the CO lines, Plume *et al.* (2004) find lower densities, ranging between 1500 and 3000 cm^{-3} . In the following, we therefore adopt $n_{\text{H}} < 5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ as an upper limit of the gas density causing the absorption features.

3.2. Decomposition of the spectra into Gaussian components

The decomposition of the spectra in velocity components and the resulting column densities are inferred from a multi-Gaussian fitting procedure based on the Levenberg-Marquardt algorithm and the following sequence.

- One of the absorption spectra is decomposed from scratch into the minimal number of Gaussians required to fit the

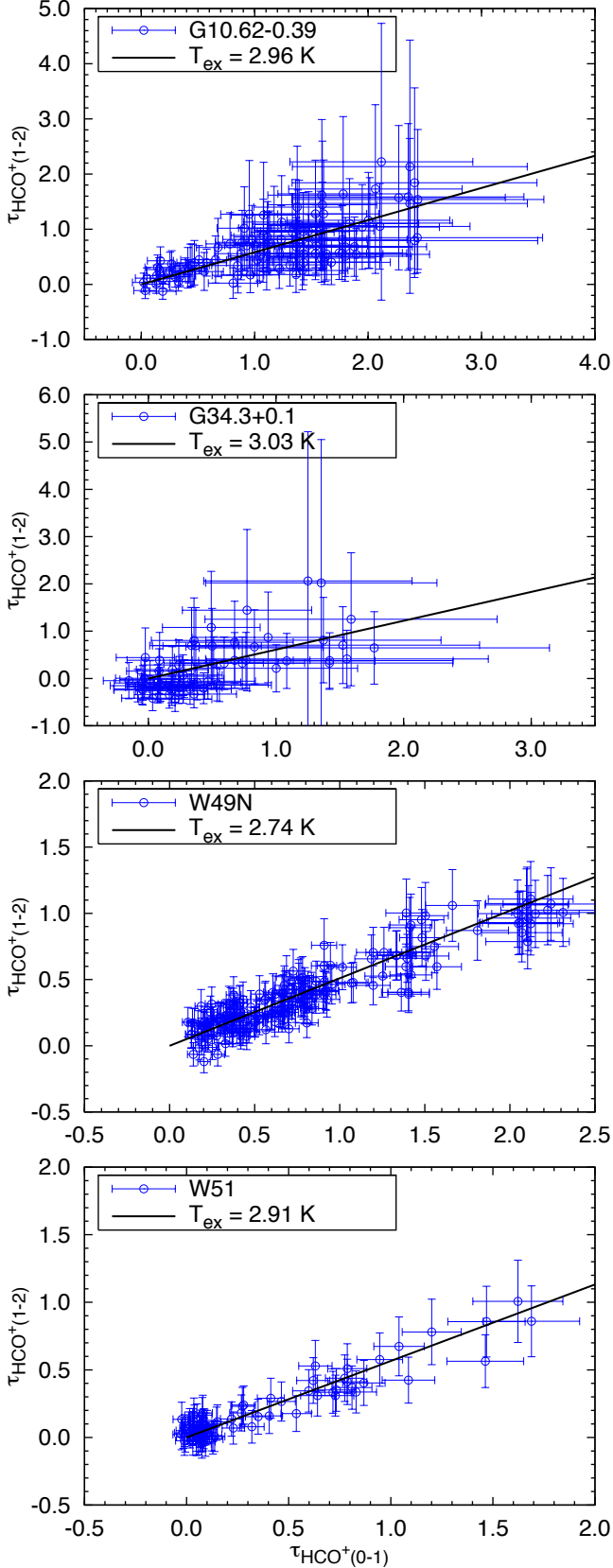


Figure 2. HCO⁺ (1-2) opacities as a function of HCO⁺ (0-1) opacities. The lines are the results of linear regressions whose only parameter is the excitation temperature T_{ex} .

data within the observational errors. We preferentially use the CN (0-1) transition because its hyperfine structure provides a valuable constraint on the line centroids.

- Based on the results of the previous step, the algorithm is then applied recursively to the others absorption spectra, ruling out a shift by more than a resolution element between the velocity components of each molecular species. In a few cases, a shift of at most 4 (~ 0.5 km s⁻¹) resolution elements is allowed because it ensures the convergence of the fitting routine: for example in regions of the spectra where many components are blended, as in the HCN (0-1) data at 59.5 km s⁻¹ toward W49N.

Thus, for each transition, the observed line profile (line/continuum) is written:

$$\frac{T_{\text{mb}}}{T_{\text{c}}}(\nu) = \exp \left[- \sum_{j=1}^{N_c} \sum_{k=1}^{N_h} \alpha_h(k) \tau_0(j) e^{-\frac{1}{2} \left[\frac{\nu - \nu_0(j) - \nu_{0h}(k)}{\sigma_{\nu(j)}} \right]^2} \right] \quad (3)$$

where T_{mb} and T_{c} are the main beam and the continuum temperatures, N_c and N_h are the numbers of components and hyperfine transitions³, τ_0 , ν_0 and σ_{ν} are the Gaussian parameters, and α_h and ν_{0h} are the LTE and optically thin line strengths relative to a reference hyperfine transition and the velocity shift associated to each hyperfine transition. As described in Appendix A, the column density associated to each velocity component is then derived assuming a single excitation temperature T_{ex} for all the levels of a given molecule.

For the components which are either saturated or too weak to be singled out by the fitting procedure, limits on the column densities are derived from the integrated optical depth over the corresponding velocity range. All the results are listed in Tabs. A.1-A.4 of Appendix A and, as an example, the outcome of the multi-Gaussian decomposition, applied to the absorption lines observed toward W49N, is shown in Fig. 3. We find that the widths of the Gaussian components have a continuous distribution with values ranging from 0.3 km s⁻¹ to 3.5 km s⁻¹, independently of the source or the molecular species. The peak optical depths range between 0.06 and 2.2 and the inferred column densities per velocity component span more than one order of magnitude on each line of sight.

3.3. Systematic errors on calculation of column densities

The uncertainties given in Tabs. A.1-A.4 are the formal 1- σ errors derived from the diagonal elements of the covariance matrix and do not take into account the systematic errors introduced by: (1) the finite velocity resolution, (2) the uncertainty on the excitation temperatures (see Tab. 3) and (3) the uncertainty on the continuum level.

We show in Appendix B that the finite velocity resolution introduces an error on the column densities smaller than 12%. Tab. 3 gives the uncertainties on the excitation temperature of the lowest rotational levels of HCO⁺, that affects the partition function, hence the column densities. Toward G10.62-0.38, W49N and W51, the uncertainties on T_{ex} are small, providing uncertainties on the column densities $<^{+50\%}_{-10\%}$. Toward G34.3+0.1, the inferred column densities could be underestimated by a factor of 3.

Finally, the uncertainty $\epsilon = \delta T_{\text{c}}/T_{\text{c}}$ on the continuum temperature (see Sect. 2) introduces an error $\delta\tau$ on the calculation of the optical depths:

$$\delta\tau \sim \epsilon - \ln(1 + \epsilon e^{\tau}). \quad (4)$$

³ N_h depends on the molecule

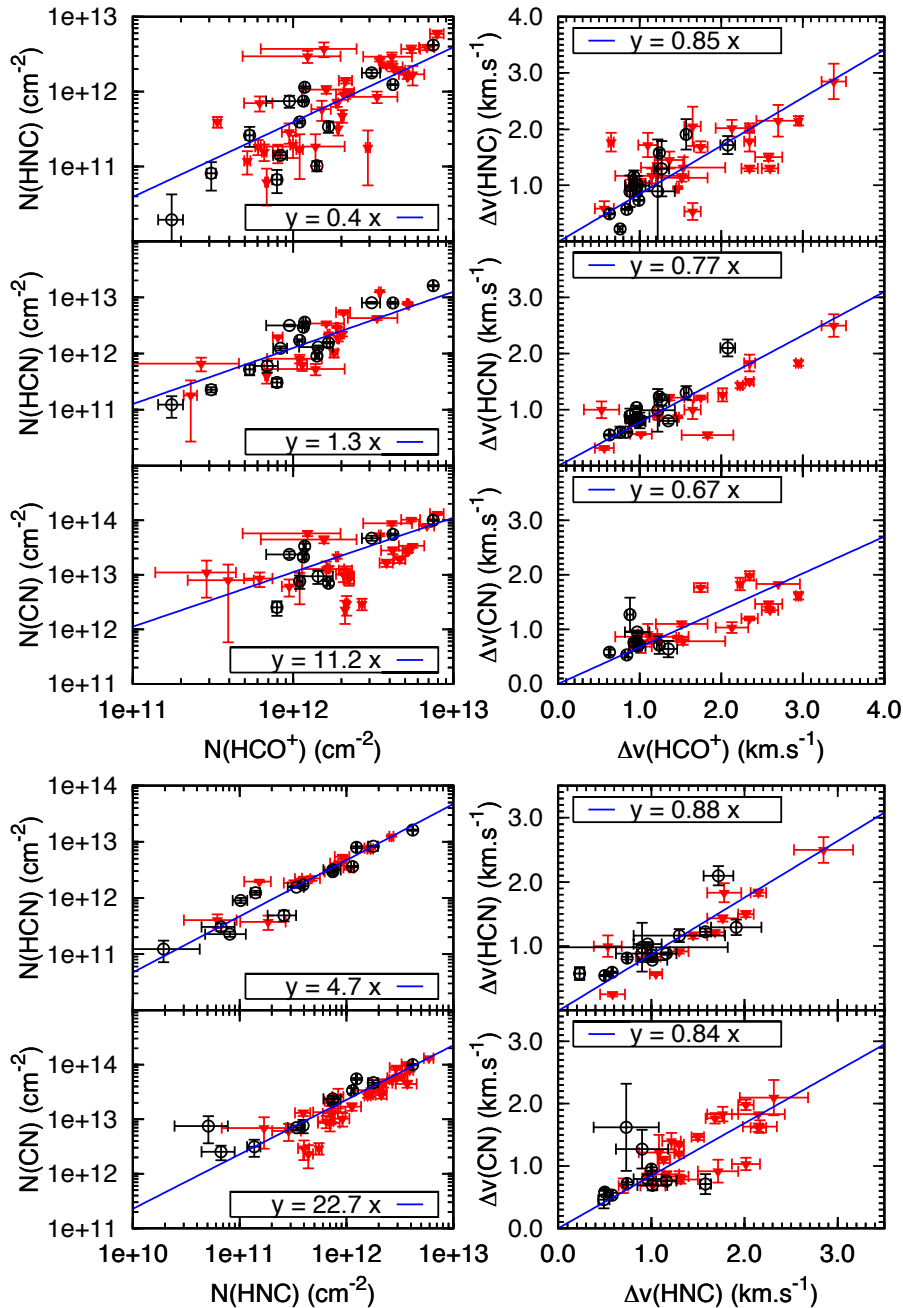


Figure 4. Comparisons of the column densities (left panels) and the FWHM (right panels) of HCO^+ , CN, HCN and HNC. The red filled symbols are from this work. The black open symbols are from Lucas & Liszt (1996) and Liszt & Lucas (2001). The solid lines result from a linear regression of the data of the present work unweighted by the fractional errors on N and Δv : $Y = \alpha X$.

This error is larger, in most cases, than those inferred from the fitting procedure, and for $\epsilon = 10\%$ the corresponding uncertainty on the column densities ranges from 16% to 62% when τ_0 varies between 0.5 and 2. All components with $\tau_0 > 2.2$ are thus considered as saturated. The components at 16 and 41 km s^{-1} of the G10.62-0.38 $\text{HCO}^+(0-1)$ spectrum are the only ones that fall in this category.

When all uncertainties are taken into account, the column densities are determined within a factor of 2, and within a factor of 3 for the absorption lines observed toward G34.3+0.1.

4. Results

4.1. Comparison of column densities and profile linewidths among species

Because the line centroids of a Gaussian component observed in several transitions coincide (see **Appendix A, Tabs. A.1 - A.4**), we propose that the corresponding velocity component has a physical reality, in support of the comparison between the optical depths in the different molecular lines and the resulting column densities.

The column densities and linewidths of all the unsaturated velocity components are displayed in Figs. 4 and 5 for sev-

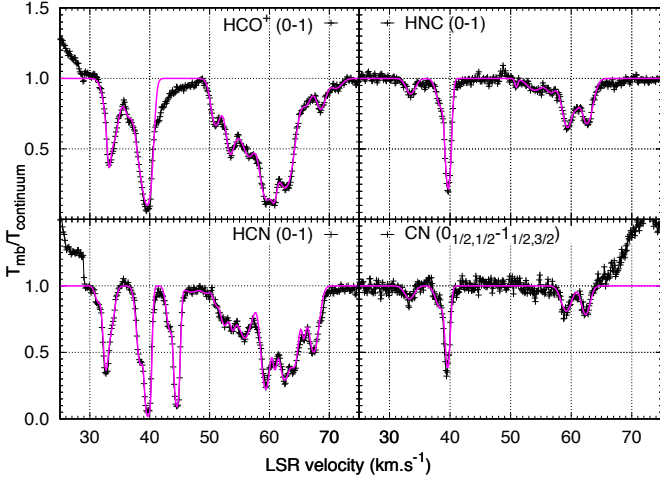


Figure 3. Observational data (black points) compared to the multi-Gaussian decomposition (thick purple line) of the HCO⁺, HNC, HCN and CN (0-1) absorption spectra observed toward W49N.

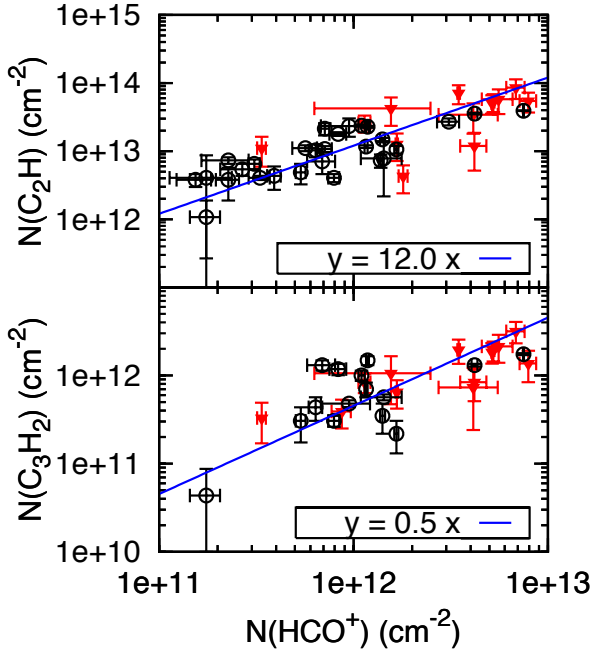


Figure 5. Comparisons of the column densities of HCO⁺, C₂H and *c*-C₃H₂. The column densities of C₂H and *c*-C₃H₂ are from Gerin *et al.* (2010a). The red filled symbols are from this work. The black open symbols are from Lucas & Liszt (1996, 2000). The solid lines result from a linear regression of the data of the present work unweighted by the fractional errors on N : $Y = \alpha X$.

eral pairs of species. These figures also include, for comparison, the results of previous studies of molecular absorption lines observed toward strong extragalactic mm-wave continuum sources (Lucas & Liszt 1996, 2000 ; Liszt & Lucas 2001) that mostly sample diffuse gas in the Solar Neighbourhood.

Although we have not made any assumption on the nature of a Gaussian velocity component, it is remarkable that (i) the range of the component linewidths (0.3 to 3.5 km s⁻¹) is about the same in both data sets, and (ii) the range of column densities of most molecular species (up to two orders of magnitude) is also similar in both sets. This result suggests that the gas components

sampled at high galactic latitude and toward the inner Galaxy share common kinematic properties. **Hence**, the linewidths of the components are likely due to turbulence rather than differential rotation of the galactic plane⁴. In the following, we compare the chemical and kinematic properties of these two ensembles. While the thick lines in Figs. 4 and 5 result from a linear regression unweighted by the fractional errors on the fitting parameters, the values given below come from weighted⁵ averages.

- Concerning the column densities of HNC, HCN and CN, Liszt & Lucas (2001) found tight linear correlations along lines of sight at high Galactic latitude, namely $N(\text{HCN})/N(\text{HNC}) = 4.8 \pm 1.1$ and $N(\text{CN})/N(\text{HNC}) = 33 \pm 12$. In comparison the mean ratios of the present work are $N(\text{HCN})/N(\text{HNC}) = 4.8 \pm 1.4$ and $N(\text{CN})/N(\text{HNC}) = 24.1 \pm 8.5$.
- Fig. 4 (top) shows that the correlations of the CN bearing molecules with HCO⁺ are looser and probably non linear with mean ratios: $N(\text{HNC})/N(\text{HCO}^+) = 0.5 \pm 0.3$, $N(\text{HCN})/N(\text{HCO}^+) = 1.9 \pm 0.9$ and $N(\text{CN})/N(\text{HCO}^+) = 12.9 \pm 6.5$.
- Last, the loose linear relation between the column densities of C₂H and HCO⁺ observed in Fig. 5 corresponds to a mean ratio $N(\text{C}_2\text{H})/N(\text{HCO}^+) = 8.32 \pm 5.64$ to be compared with $N(\text{C}_2\text{H})/N(\text{HCO}^+) = 14.5 \pm 6.7$ obtained by Liszt & Lucas (2001).

The linewidths of the Gaussian components of the HCO⁺, CN, HCN and HNC line profiles are close to be the same. We find that the CN, HCN and HNC line profiles are systematically narrower than those of HCO⁺ (by a factor of 0.7 to 0.9). In Fig. 4, the CN and HCN line profiles appear to be narrower than those of HNC (by a factor of 0.8 to 0.9) but this result is mostly due to the hyperfine structure of HNC that has not been taken into account in the decomposition. Once the correction discussed in Sect. 2 is applied, the significance of the linewidth difference disappears. The profiles of C₂H and C₃H₂ have been studied with a different method, and the components identified are not the same as those in the present study (Gerin *et al.* 2010a).

4.2. Estimation of the total hydrogen column densities along the lines of sight

In order to be able to compare the data to chemical models, molecular abundances must be derived and column densities of hydrogen measured. In particular, it is essential to determine whether the large dynamic ranges over which the correlations are observed (Figs. 4 and 5) are related to variations of the total column density of the gas sampled or/and of the physical and chemical conditions in the absorbing gas. The main difficulty is to estimate the fraction of molecular hydrogen that is not directly observable. Using $\lambda 21$ cm observations of HI, $\lambda 9$ cm observations of CH and the remarkable correlation between CH and H₂, $N(\text{CH})/N(\text{H}_2) = 4.3 \times 10^{-8}$ (Liszt & Lucas 2002), we evaluate the total amount of gas $N_{\text{H}} = N(\text{H}) + 2N(\text{H}_2)$ along the galactic

⁴ The rotation curve in the first quadrant provides displacements $\sim 70 - 100$ pc/km.s⁻¹ so that a component of 3 km.s⁻¹ (respectively 0.3 km.s⁻¹) would have a size of 300 pc (respectively 30 pc). This would correspond to densities $n_{\text{H}} < 40$ cm⁻³, below our estimates (see Sect. 4.3).

⁵ A weighted average makes more sense numerically but tends to favor the high column density points. In practice, both evaluations (weighted and unweighted) are meaningful since the errors are not known with high accuracy (see Sect. 3.3).

lines of sight, as in Godard *et al.* (2009) for the lines of sight studied by Liszt & Lucas (2001). The HI column density are inferred from VLA $\lambda 21$ cm absorption line observations (Koo *et al.* 1997; Fish *et al.* 2003). Wherever possible, we derive $N(\text{H}_2)$ from CH observations (Rydbeck *et al.* 1976, Gerin *et al.* 2010b).

An independent estimate of the total column density of gas toward the star forming regions is inferred from the analysis of the 2MASS survey (Cutie *et al.* 2003). Marshall *et al.* (2006) have measured the near infrared colour excess in large areas of the inner Galaxy ($|l| < 100^\circ$, $|b| < 10^\circ$) to obtain the visible extinctions ($A_V \sim 10A_K$), providing an estimate of the total hydrogen column density along the lines of sight.

Table 4. HI, H₂ and total hydrogen column densities.

Source	v_0 (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	$N(\text{H})^a$ (cm ⁻²) $\times 10^{21}$	$N(\text{H}_2)^c$ (cm ⁻²) $\times 10^{21}$	N_{H}^d (cm ⁻²) $\times 10^{21}$
W51	6.2	5.6	1.27	0.47	2.3
	11.8	6.0	0.58		
Source	v_{min} (km s ⁻¹)	v_{max} (km s ⁻¹)	$N(\text{H})^b$ (cm ⁻²) $\times 10^{21}$	$N(\text{H}_2)^c$ (cm ⁻²) $\times 10^{21}$	N_{H}^d (cm ⁻²) $\times 10^{21}$
G05.88-0.39	-31.3	-10.0	1.59		16
	-10.0	4.0	> 6.68		
	4.0	20.0	5.87		
	20.0	29.3	> 3.86		
G08.67-0.36	-1.7	11.3	4.80		14
	11.3	25.7	5.32		
	25.7	45.3	> 9.62		
G10.62-0.38	11.3	25.0	3.53		17
	25.0	30.6	2.61	15.8	
	30.6	47.3	5.54		
G34.3+0.1	-2.5	7.1	0.54		9
	7.1	20.0	2.01		
	20.0	34.1	4.42		
W49N	30.0	50.0	6.95	1.6	23
	50.0	78.2	7.23	4.0	

^a Gaussian decomposition from Koo (1997). The column densities have been scaled to a spin temperature of 100 K.

^b Inferred from the absorption profiles observed by Fish *et al.* (2003) with the VLA interferometer. A spin temperature of 100 K is assumed.

^c Estimation from the CH emission lines observed by Rydbeck *et al.* (1976) toward **W51** and **W49N**, the **CH absorption lines observed by Gerin *et al.* (2010b) toward G10.62-0.38**, and the correlation between CH and H₂, $N(\text{CH})/N(\text{H}_2) = 4.3 \times 10^{-8}$ (Liszt & Lucas 2002).

^d From models of the extinction at 2 μm by Marshall *et al.* (2006).

Tab. 4 lists the HI (and H₂, where available) column densities in selected velocity intervals, as well as the total hydrogen column densities inferred from extinction. **However the uncertainties on these estimations are large: (1) the error on the $N(\text{CH}) - N(\text{H}_2)$ relation is about a factor of 3 (Liszt & Lucas 2002); (2) this correlation holds in the local diffuse medium but has never been observed in the inner Galaxy material; and (3) because of the low resolution of the 2MASS survey (~ 15 arcmin), the error on the total hydrogen column den-**

sity (computed as the standard deviation of the extinction measured along the four closest lines of sight surrounding a given source) is larger than 30 %. Hence, while the two determinations agree with each other within 15% toward W51 and W49N, they differ by at least a factor of 2 toward G10.62-0.38.

According to the extinction measurements, the lines of sight sample between 1.3 (W51) and 12.5 (W49N) magnitudes of gas. The total velocity coverage of the absorption features is ~ 10 km s⁻¹ toward W51 and 48 km s⁻¹ toward W49N. Therefore, the average hydrogen column density *per velocity unit* is only twice larger along the line of sight toward W49N than along that toward W51. It is therefore possible to estimate the molecular abundances relative to the total hydrogen column density N_{H} for each velocity component, assuming that N_{H} scales with their linewidth according to $N_{\text{H}}/\Delta v = 2.2$ and 4.7×10^{20} cm⁻²/km s⁻¹ toward W51 and W49N respectively. This is equivalent to **assuming** a uniform HI optical depth in the gas components where we observe molecular absorption. Such an approximation underestimates the HI column density per unit velocity by no more than a factor 2. The total hydrogen column densities estimated with this method and given in Table A.1 for W49N and W51 are smaller by only 50% than those inferred from IR extinction. We therefore estimate that the total H column density per velocity component on these two lines of sight does not exceed 1.5 magnitude (or about 2.5×10^{21} cm⁻²). This result suggests that the HCO⁺ abundance in the different velocity components, defined as $X(\text{HCO}^+) = N(\text{HCO}^+)/N_{\text{H}}$, ranges between 5×10^{-10} and 5×10^{-9} toward both W49N and W51. For HCN, the scatter of abundances is also an order of magnitude among the components, with values ranging between 2×10^{-9} and 3×10^{-8} for W49N. A similar scatter is also found for HNC with abundances ~ 10 times smaller.

In summary, since the column densities of the Gaussian components span less than two orders of magnitude while their linewidths span only a factor ~ 10 (between 0.3 and 3.4 km s⁻¹), actual fluctuations of molecular abundances are therefore observed among the components.

4.3. Physical properties of the gas seen in absorption

The above average description is crude and is only meant to ascribe an average column density to a velocity interval, ignoring crowdings: the lines of sight toward distant star forming regions sample gas components with a broad distribution of densities, velocity dispersions and column densities. We have shown that the upper limit on the gas density is $n_{\text{H}} < 5 \times 10^3$ cm⁻³ (cf. Sect. 3.1) and that the total column densities per velocity components N_{H} are at most of the order of a few magnitudes, similar to those obtained along the high latitude lines of sight observed by Liszt & Lucas (2001). According to the definitions of Snow & McCall (2006), the gas sampled by these lines of sight is a mixture of diffuse ($n_{\text{H}} < 500$ cm⁻³ with a shielding from the UV field $A_V < 1$) and translucent gas (500 cm⁻³ $< n_{\text{H}} < 5000$ cm⁻³ and a shielding $1 < A_V < 2$). **Allowing the gas density to range between 30 cm⁻³ and 5×10^3 cm⁻³, the total N_{H} per velocity component of a few magnitudes translates into sizescales ranging between ~ 0.2 and ~ 40 pc. It is interesting that the corresponding range of velocity dispersions inferred from the linewidth-scale relation in the diffuse molecular gas (Falgarone *et al.* 2009) is ~ 0.2 – 5 km s⁻¹, very close to the observed range of component velocity dispersions. It suggests that the mixture of diffuse and translucent gas sampled by**

these lines of sight is entrained in the turbulent interstellar cascade.

In the following sections, we therefore study the chemistry of diffuse and translucent gas, and we compare the observed column densities to the results of PDR (PhotoDissociation Region) and TDR (Turbulent Dissipation Region) models.

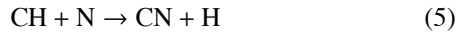
5. Comparison of observations to model predictions

The comparison of the PDR and TDR models has been discussed in detail in Godard *et al.* (2009). For both models and as shown in Tab. C.1 of Appendix C, the nitrogen gas phase chemistry has been updated according to the recent measurements and rate review. However neither the PDR nor the TDR chemical networks take into account the nitrogen grain surface chemistry: this assumption will be discussed in Sect. 5.4.

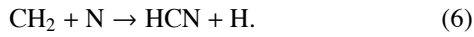
5.1. Gas phase nitrogen chemical networks in the PDR and TDR models

We recall here the main differences in the two PDR and TDR approaches. The networks of dominant reactions in the nitrogen gas phase chemistry are shown in Figs. C.1 & C.2 (Appendix C). While in both models, photodissociation largely dominates the destruction mechanisms of CN bearing molecules, there are several pathways that lead to their production.

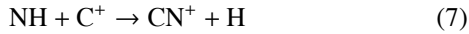
In the PDR model (Federman *et al.* 1994, Boger & Sternberg 2005), two main formation routes are at work. The first involves the hydrogenation chain of carbon and the formation of CH and CH₂, which in turn, leads to CN and HCN via the neutral-neutral reactions:



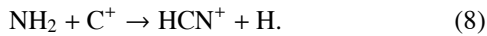
and



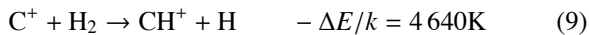
The second one involves the hydrogenation chain of nitrogen and the formation of NH and NH₂, followed by the ion-neutral reactions:



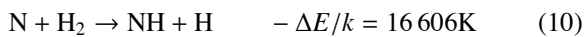
and



In the TDR model, intermittent dissipative structures are modelled as intense magnetized vortices. Because of both the differential rotation at the edge of the vortex and the ion-neutral drift, the gas is locally heated, and several key endoenergetic reactions such as

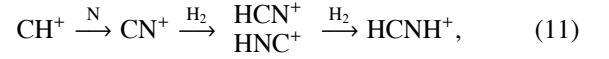


become efficient. A warm nitrogen chemistry is triggered locally (Fig. C.2, Appendix C). Although the temperatures reached in a vortex ($\sim 10^3$ K) are not sufficient to activate the reaction



(whose rate becomes large enough only at 7000 K, Crawford & Williams 1997), the pathways leading to the production of N bearing species are deeply modified and their abundances increase considerably. The opening of the endoenergetic route

C⁺ + H₂ triggers the enhancement of the production of CN bearing molecules through the ion-neutral reaction chains



and



followed by the dissociative recombination of HCNH⁺ and the photodissociation of HCN and HNC. Therefore, the key species here is CH₃⁺. Its reaction with atomic nitrogen is able to significantly enhance the production of HCNH⁺ compared to that in the PDR models, leading to HCN, HNC and CN. CH₃⁺ is also responsible for the enhancement of HCO⁺ by its reaction with atomic oxygen (see the discussion in Godard *et al.* 2009).

5.2. Comparison of PDR model predictions with the observations

The PDR model is a 1-dimensional chemical model in which a static slab of gas of uniform density and given thickness (or total column density of gas, noted N_{H} in the following) is illuminated by the ambient interstellar radiation field either on one side or on both sides (Le Petit *et al.* 2006). The computed column density of a molecular species to be compared to the observed values is therefore an integral performed over the slab thickness along a direction perpendicular to its surface.

To explore the role of the parameters in the Meudon PDR code (Le Petit *et al.* 2006) we computed several two-sided illuminated PDR models, as follows:

- based on the results of Sect. 4.2, the total column density of gas in the slab is either $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21}$ or $3.6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ (corresponding to 1 and 2 magnitudes respectively);
- Two values of χ are considered, $\chi = 1$ and $\chi = 3$, in order to bracket the ambient UV radiation field found to vary between the Solar Neighborhood (~ 8.5 kpc from the Galactic center) and the molecular ring (~ 4 kpc from the Galactic center) by a factor ~ 3 (Moskalenko *et al.* 2006);
- the gas density is set to $n_{\text{H}} = 10^2, 10^3$, and 10^4 cm^{-3} .

Each model was computed assuming a cosmic ray ionisation rate $\zeta = 3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ (Dalgarno 2006). The results on the column densities and the column density ratios of HCO⁺, HCN, HNC, CN and C₂H are given in Fig. 6 which also displays, for comparison, the ranges of observed values.

This figure shows that the constraints provided by the CN bearing molecules and by HCO⁺ cannot be reconciled in the framework of this model. On the one hand, both the range of column densities and column density ratios of CN, HCN, HNC and C₂H can be explained by PDR models for $N_{\text{H}} > 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ and a gas density larger than 300 cm^{-3} . But on the other hand, for the same range of density, not only the predicted correlation between the column densities of CN and HNC is clearly non-linear and mismatch the observed value by a factor larger than 10, but the column densities of HCO⁺ are also underestimated by at least one order of magnitude.

As expected, if the mean interstellar UV radiation field increases, the column densities of CN, HCN, HNC and C₂H decrease because the photodissociation is the main destruction process of all these molecules. Oppositely, when χ is multiplied by 3, the temperature at the edges of the PDR is twice

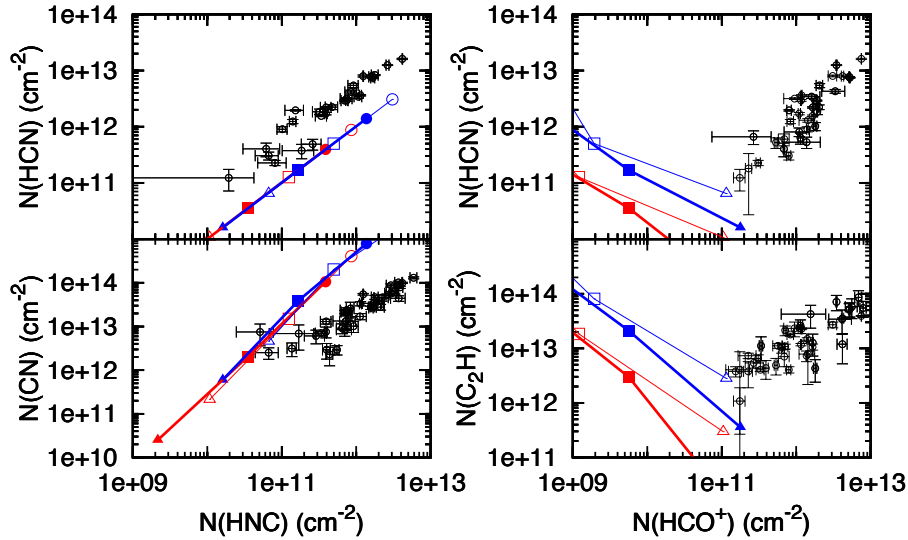


Figure 6. Observations compared to the predictions of PDR models. The data (open circles) are from Lucas & Liszt (2000), Liszt & Lucas (2001), Gerin *et al.* (2010a) and this work. The PDR models are computed for several densities: 10^2 (triangles), 10^3 (squares) and 10^4 (cm^{-3}). Red and blue curves correspond to $N_{\text{H}} = 1$ and 2 magnitudes respectively. Thin (empty symbols) and thick (filled symbols) curves correspond to $\chi = 1$ and $\chi = 3$.

larger and the $\text{O} + \text{H}^+$ charge exchange reaction (with an endothermicity of 227 K) is enhanced. Since this reaction is at the root of the formation of HCO^+ in low density UV dominated gas phase chemistry (Godard *et al.* 2009) and since the main destruction mechanism of HCO^+ is its dissociative recombination (whose rate is independent of χ), the column density of HCO^+ increases. All those behaviors holds for the ranges of density and radiative conditions explored in Fig. 6.

The dependence of the results on the cosmic ray ionisation rate ζ is slightly more complex. When ζ is multiplied by 10, the abundances of H^+ and H_3^+ rise by one order of magnitude⁶. Thus, both the hydrogenation chains of nitrogen and oxygen are stimulated by the reactions



and



respectively, while the hydrogenation chain of carbon, initiated by the radiative association



is independent of ζ . Therefore when ζ is multiplied by 10:

- the column density of HCO^+ increases by a factor of 10 whatever the gas density is ;
- since CN always originates from the carbon hydrogenation chain, its column density is independent of ζ ;
- since HCN and HNC originate from the carbon hydrogenation chain at large density and from the nitrogen hydrogenation chain at low density, their column densities are independent of ζ if $n_{\text{H}} > 300 \text{ cm}^{-3}$, and increase by a factor of 2 if $n_{\text{H}} < 300 \text{ cm}^{-3}$.

Nevertheless, even at low density, the impact of the cosmic ray ionization rate is not sufficient enough to account for the range of column densities observed in Fig 6.

5.3. Comparison of observations with TDR model predictions

The TDR code is a 1-dimensional model in which the chemical and thermal evolution of a turbulent dissipative burst - namely a magnetized vortex - is computed. The structure's dynamics and lifetime are controlled by the turbulent rate of strain a (in s^{-1}), the gas density n_{H} (in cm^{-3}) and the maximal orthoradial velocity $u_{\theta \text{max}}$ (in cm.s^{-1}). A random line of sight crossing several dissipative regions is then modelled by taking into account: the averaged turbulent dissipative rate observed in the CNM, and the long lasting thermal and chemical relaxation period that follows any dissipative burst. The resulting line of sight therefore intercepts three kinds of diffuse gas: (1) mainly the ambient medium (the corresponding filling factor is larger than 90 %) in which the chemistry is driven by the UV radiation field, (2) the active vortices where the gas is heated and the chemistry is enhanced by the dissipation of turbulent energy, and (3) the relaxation stages where the gas previously heated cools down to its original state.

Because of the strong experimental and observational constraints on $u_{\theta \text{max}}$, only two main parameters govern the TDR model: the turbulent rate of strain that describes the coupling between the large and small scales of turbulence and the gas density. However, both parameters are not independent because of the constraint imposed by the observed turbulent energy available in the CNM, namely $\bar{\epsilon}_{\text{obs}} \sim 2 \times 10^{-25} \text{ erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (Falgarone 1998, Hily-Blant *et al.* 2008). As a result, the influence of the parameters on the TDR model, fully discussed in Godard *et al.* (2009), is complex.

⁶ H^+ and H_3^+ are formed via the reaction chains $\text{H}_2 \xrightarrow{\text{crp}} \text{H}_2^+ \xrightarrow{\text{H}_2} \text{H}_3^+$ and $\text{He} \xrightarrow{\text{crp}} \text{He}^+ \xrightarrow{\text{H}_2} \text{H}^+$ respectively.

- The gas density n_{H} affects the chemistry itself but has several impacts due to the dynamics and the geometry of the line of

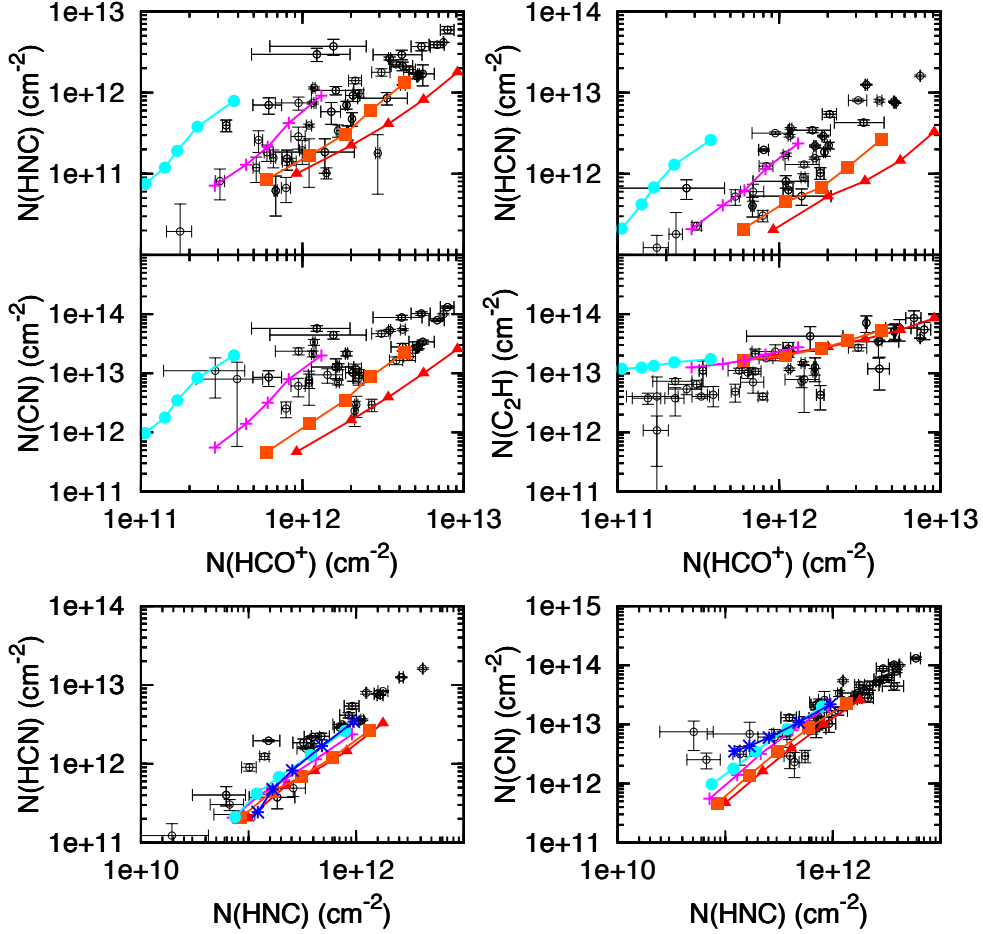


Figure 7. Observations compared to the predictions of TDR models. The data (open circles) are from Lucas & Liszt (2000), Liszt & Lucas (2001), Gerin *et al.* (2010a) and this work. The TDR models (filled symbols) are computed for several densities : 30 (triangles), 50 (squares), 100 (crosses), 200 (circles) and 500 (double crosses) cm^{-3} . All models are computed for $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$. The TDR models are computed for $A_{\text{V}} = 0.5$ and a varying along each curve between 10^{-12} (top right) and 10^{-10} s^{-1} (bottom left).

sight. For the range of parameters explored here, the dissipation of turbulent energy over one vortex is mainly due to ion-neutral friction and varies roughly as n_{H}^2 ; the vortex radius varies as $n_{\text{H}}^{-1/2}$, and their number along the line of sight as n_{H}^{-2} .

- While the dissipation of turbulent energy over one vortex and the number of vortices along the line of sight are nearly independent of the turbulent rate of strain a , their size and their lifetime vary roughly as $a^{-1/2}$ and a respectively.

As suggested by Godard *et al.* (2009) and by the present observations, we explore the TDR models in the range of parameters: $10^{-12} < a < 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ and $30 < n_{\text{H}} < 500 \text{ cm}^{-3}$ for an ambient radiation field characterized by $\chi = 1$. Since the influence of this parameter on the results of the PDR model (see Fig. 6) seems to be negligible compared to the role of N_{H} and n_{H} , we did not explore a larger range of values. The shielding from the ISRF is assumed uniform, $A_{\text{V}} = 0.5$ and the amount of gas sampled is fixed to $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$. Note that, in the TDR model, A_{V} is the actual shielding of the gas and is no longer identical to the total hydrogen column density sampled by the line of sight (as it is the case in the PDR model).

Fig. 7 displays the comparison between the observed molecular column densities and the predictions of the TDR models.

TDR models, without fine tuning of the parameters, are consistent with the data. Over a broad range of turbulent rates of strain $10^{-12} \text{ s}^{-1} \leq a \leq 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ and for a gas density $30 \text{ cm}^{-3} \leq n_{\text{H}} \leq 200 \text{ cm}^{-3}$, the absolute column densities and column density ratios of HCO^+ , C_2H , CN , HCN and HNC are reproduced. For CN-bearing species, all deriving from HCNH^+ , the agreement with the observations holds over a broader range of gas density : $30 \text{ cm}^{-3} \leq n_{\text{H}} \leq 500 \text{ cm}^{-3}$.

The column densities displayed in Fig. 7 are computed for a total column density of gas N_{H} corresponding to 1 mag. Since they are simply proportional to N_{H} , the computed values for larger (or smaller) values of N_{H} are easily inferred from the display. A trend, that was already found in Godard *et al.* (2009), is that the observed column densities are in better agreement with models of small turbulent rate of strain.

5.4. Grain surface chemistry

Therefore, if only the gas phase chemistry is taken into account, the predictions of UV dominated chemical models computed at moderate densities ($n_{\text{H}} < 300 \text{ cm}^{-3}$) are unable to explain the observed column densities of the CN bearing species. This result is in agreement with the previous stud-

ies of Wagenblast *et al.* (1993), Crawford & Williams (1997) and Liszt & Lucas (2001) which show that the predictions of purely gas phase PDR models fail by a factor of 7 to account for the CN abundances observed in the low density material toward ζ Per, and by factors of 30 and 40 to reproduce the NH abundances observed toward ζ Per and ζ Oph respectively.

In the present paper we explore the role of turbulent dissipation on the cyanide chemistry via the activation of the hydrogenation chain of ionized carbon followed by the reaction chains 11, 12 and 13. An ongoing related work is the comparison of the TDR models predictions to the Herschel-HIFI observations of nitrogen hydrides along W31C and W49N (Persson *et al.* 2010).

But there is an alternative possibility to the pure gas phase chemistry. It has been proposed that the grain surface chemistry dominates all the other formation processes of the nitrogen hydride NH₃, and is therefore responsible for the production of NH and CN in the diffuse ISM (van Dishoeck & Black 1988). Assuming a NH₃ grain formation rate coefficient of

$$5.4 \times 10^{-18} \left(\frac{T \text{ [K]}}{m(N) \text{ [amu]}} \right)^{0.5} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}, \quad (17)$$

corresponding to a surface reaction efficiency twice lower than that for the H₂ formation on grains, Wagenblast & Williams (1996) found that a UV dominated chemical model reproduces the CN and NH abundances observed toward ζ Per and ζ Oph. However, this approach is based on the assumption that if a nitrogen atom strikes and sticks to a grain, ammonia is quickly formed and comes off the grain. The resulting rate coefficient, namely the cross section of the grain multiplied by the average speed of nitrogen atoms, clearly set an upper limit to the efficiency of the grain surface chemistry.

6. Discussion

6.1. The UV radiation field

Although, as said above, the comparison of model predictions to observations is a difficult task because of the lack of information on the gas topology (density structure, division of the matter therefore shielding from the ambient UV field, homogeneity of the gas conditions among the different fragments) and the poorly known physical characteristics of what is called a ‘‘Gaussian-velocity component’’, we have three main constraints to guide the models.

In the Gaussian-velocity components, (i) the gas density is lower than $n_{\text{H}} = 5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$, (ii) where it is estimated, the column density of H₂ is between one fourth and four third that of atomic hydrogen (Table 4) and (iii) the average hydrogen column density per unit velocity interval ranges between 2 and 4 $10^{20} \text{ cm}^{-2}/\text{km s}^{-1}$. This implies that **the total hydrogen column density cannot be much larger than $3.6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$** and that the shielding from the ambient radiation field is efficient (otherwise the H₂ fraction would be small). According to PDR models, this imposes a narrow combination of the total column density N_{H} and ambient UV-field intensity χ . We are therefore confident that the gross properties of the UV illumination of the gas in the ‘‘Gaussian velocity-components’’ are well estimated.

6.2. The velocity field

The fact that the widths of the HCO⁺ components are systematically larger than those of the CN bearing species suggests an involvement of the velocity field in the production and the evolution of these species. Observations in the visible domain by Lambert *et al.* (1990), Crane *et al.* (1995) and Pan *et al.* (2004, 2005) already showed that the CH⁺ line profiles are broader and less Gaussian than those of CH and that the CH line profiles are broader than those of CN. It has been proposed that such behaviors are due to spatial confinement of the molecules whose production occurs hierarchically into denser and colder environments (Crawford 1995). But the differences observed among the linewidths **may also** bear the signatures of the dynamical processes at work in the formation of all those molecules convolved with their most different relaxation times (Godard *et al.* 2009). Last, the similarity between the results obtained along Galactic lines of sight and in the Solar Neighborhood also suggests a formation mechanism weakly dependent on the ambient UV field, i.e. **possibly driven** for instance by the dissipation of the ubiquitous turbulence.

7. Summary & conclusions

We have presented the analysis of single dish observations of mm absorption lines of HCO⁺, HNC, HCN and CN toward remote star forming regions in the Galactic plane. The density of the gas responsible for the absorption lines is constrained by the excitation temperature of the first rotational levels of HCO⁺ and, in two cases, by line emission of CO (and isotopes). An upper limit $n_{\text{H}} < 5 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ is obtained. The estimation of the total column densities along the lines of sight, combined with their H₂ fraction, where known, gives an upper limit on the extinction per velocity component, $A_{\text{V}} < 2$. These conditions suggest that the gas sampled along the lines of sight belongs to the diffuse and/or translucent media. Because the decomposition of the velocity structure into Gaussian components has been carried out recursively for all the molecules and hyperfine components, inter-comparisons of molecular abundances are feasible. The inferred velocity structure will be helpful to unravel the analysis of future observations with Herschel/HIFI.

Our main result is the similarity between the column densities per velocity component derived in the Galactic plane gas (this work) and those derived in the Solar Neighborhood in previous works. It is unexpected because the spatial scales of the Galactic environment sampled in this work are much larger. This suggests that the physical and chemical processes involved in the formation and destruction of the analysed species are similar in diffuse or translucent environments over the whole Galactic disk. **We also find that the HCO⁺ linewidths are always broader than those of the CN bearing molecules.**

We compare the observed column densities to two kinds of gas phase chemical models, namely the photodissociation region (PDR) and turbulent dissipation regions (TDR) models and find that: (1) the observed column densities of HCO⁺ cannot be reproduced by PDR models of diffuse or translucent gas, (2) the column densities of CN bearing species can be explained by PDR models applied to dense ($n_{\text{H}} > 3.10^2 \text{ cm}^{-3}$) and well shielded ($N_{\text{H}} > 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$) molecular gas, (3) the column densities and column density ratios of HCO⁺, CN, HCN, HNC and C₂H are reproduced simultaneously by TDR models of diffuse and translucent gas, over a broad range of turbulent rates of strain ($10^{-12} \text{ s}^{-1} \leq a \leq 10^{-10} \text{ s}^{-1}$), and gas densities ($30 \text{ cm}^{-3} \leq n_{\text{H}} \leq 200 \text{ cm}^{-3}$).

Acknowledgements. We are most grateful to Eric Herbst for the valuable information regarding the grain surface chemistry of nitrogen bearing species. We also thank the referee for providing constructive comments and help in improving the content of this paper.

References

- Adams N.G., Smith D., 1988, Chem. Phys. Lett. 144, 11
 Bechtel H.A., Steeves A.H., Field R.W., 2006, ApJ 649, 53
 Boger G.I., Sternberg A., 2005, ApJ 632, 302
 Brownsword R.A., Gatenby S.D., Herbert L.B., Smith I.W.M., Stewart D.W.A., Symonds A.C., 1996, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 92, 723
 Carral P., Welch W.J., 1992, ApJ 385, 244
 Cox P., Güsten R., Henkel C., 1988, A&A 206, 108
 Crane P., Lambert D.L., Sheffer Y. 1995, ApJS 99, 107
 Crawford I.A., 1995, MNRAS 277, 458
 Crawford I.A., Williams D.A., 1997, MNRAS 291, 53
 Falgarone E., 1998, in "Starbursts: Trigger, Nature and Evolution", eds. B. Guiderdoni & A. Kembhavi, EPS Sciences
Falgarone E., Pety J., Hily-Blant P., 2009, A&A 507, 355
 Falgarone E., Pineau des Forêts G., Roueff E., 1995, A&A 300, 870
 Federman S.R., Strom C.J., Lambert D.L., Cardelli J.A., Smith V.V., Joseph C.L., 1994, ApJ 424, 772
 Fehsenfeld F.C., 1976, ApJ 209, 638
 Fish V.L., Reid M.J., Wilner D.J., 2003, ApJ 587, 701
 Florescu-Mitchell A.I., Mitchell J.B.A., 2006, Physics Reports 430, 277
 Flower D.R., Pineau des Forêts G. 1998, MNRAS 297, 1182
Gerin M., Kaźmierczak M., Jastrzebska M., Falgarone E., Hily-Blant P., Godard B., De Luca M., 2010a, in preparation
Gerin M., Falgarone E., De Luca M., and the PRISMAS consortium, 2010b, in preparation
 Godard B., Falgarone E., Pineau des Forêts G., 2009, A&A , 495, 847
 Greaves J.S., Williams P.G., 1994, A&A 290, 259
 Gredel R. 1997, A&A 320, 929
 Gry C., Boulanger F., Nehmé C., Pineau des Forêts G., Habart E., Falgarone E. 2002, A&A 391, 675
 Hartmann J., 1904, ApJ 19, 268
 Hily-Blant P., Pety J., Guilloteau S., 2005, CLASS evolution: I. Improved OTF support, Tech rep., IRAM
 Hily-Blant P., Falgarone E., Pety J. 2008, A&A 481, 367
 Huntress W.T., 1977, ApJS 33, 495
 Joulain K., Falgarone E., Pineau des Forêts G., Flower D. 1998, A&A 340, 241
 Koo B.-C., 1997, ApJS 108, 489
 Lacour S., Ziskin V., Hébrard G. *et al.* 2005, A&A 627, 251
 Lambert D.L., Sheffer Y., Crane P. 1990, ApJL 359, L19
 Le Petit F., Nehmé C., Le Bourlot J., Roueff E. 2006, ApJS 160, 506
 Lesaffre P., Gerin M., Hennebelle P. 2007, A&A 469, 949
 Liszt H., Lucas R. 2001, A&A 370, 576
 Liszt H., Lucas R. 2002, A&A 391, 693
 Liszt H.S., Pety J., Lucas R., 2008, A&A 486, 493
 Lucas R., Liszt H. 1996, A&A 307, 237
 Lucas R., Liszt H. 2000, A&A 358, 1069
 Marshall D.J., Robin A.C., Reylé C., Schulteis M., Picaud S., 2006, A&A 453, 635
 Mookerjee B., Casper E., Mundy L.G., Looney L.W., 2007, ApJ 659, 447
 Moskalenko I.V., Porter T.A., Strong A.W., 2006, ApJ 640, L155
 Neufeld D.A., Kaufman M.J., Goldsmith P.F., Hollenbach D.J., Plume R. 2002, ApJ 580, 278
 Nyman L.-Å., 1983, A&A 120, 307
 Nyman L.-Å., Millar T.J., 1989, A&A 222, 231
 Olofsson G., Hjalmarson Å., Black J.H., *et al.* , 2009, in preparation
 Pan K., Federman SR, Cunha K. *et al.* 2004 ApJS 151 313
 Pan K., Federman SR, Sheffer Y. & Andersson B.G. 2005 ApJ 633 936
Persson C., Black J.H., Cernicharo J., Goicoechea J. and the PRISMAS consortium, 2010, in preparation
 Plume R., Kaufman M.J., Neufeld D.A. *et al.* , 2004, ApJ 605, 247
 Roberge W.G., Jones D., Lepp S., Dalgarno A., 1991, ApJS 77, 287
 Rydbeck O.E.H., Kollberg E., Hjalmarson A., Sume A., Ellder J., Irvine W.M., 1976, ApJS 31, 333
 Semaniak J., Minaev B.F., Derkach A.M., Hellberg F., Neau A., Rosén S., Thomas R., Larsson M., Danared H., Paál A., af Uglass M., 2001, ApJS 135, 275
 Sheehan C., Le Padellec A., Lennard W.N., Talbi D., Mitchell J.B.A., 1999, J. Phys. B 32, 3347
 Smith I.W.M., Herbst E., Chang Q., 2004, MNRAS 350, 323
 Snow T.P., McCall B.J. 2006, ARAA 44, 367
 Talbi D., Le Padellec A., Mitchell J.B.A., 2000, J. Phys. B 33, 3631
 Vastel C., Caux, E., Ceccarelli C., Castets A., Gry C., Baluteau J.P., 2000, 357, 994
 Viggiano A.A., Howarka F., Albritton D.L., Fehsenfeld F.C., Adams N.G., Smith D., 1980, ApJ 236, 492
 van Dishoeck E.F., Black J.H., 1988, in Millar T.J., Williams D.A., eds, Rate Coefficients in Astrochemistry. Kluwer, Dordrecht, p. 209
Wagenblast R., Williams D.A., 1996, Ap&SS 236, 257
Wagenblast R., Williams D.A., Millar T.J., Nejad L.A.M., 1993, MNRAS 260, 420
 Weselak T., Galazutdinov G., Musaev F., Krelowski J., 2008, A&A 484, 381
 Weselak T., Galazutdinov G., Musaev F., Krelowski J., 2008, A&A 479, 149

Appendix A: Gaussian decomposition and calculation of column densities

Tab. A.1 - A.4 contains the results of the Gaussian decomposition procedure that we have applied to the spectra. The column densities, given in the last columns, are derived assuming a single excitation temperature T_{ex} for all the levels of a given molecule as

$$N = Q(T_{\text{ex}}) \frac{8\pi\nu_0^3}{c^3} \frac{g_l}{g_u} \frac{1}{A_{ul}} \left[1 - e^{-h\nu_0/kT_{\text{ex}}} \right]^{-1} \int \tau dv \quad (\text{A.1})$$

where ν_0 , g_u , g_l and A_{ul} are the rest frequency, the upper and lower level degeneracies and the Einstein's coefficients of the observed transition. $Q(T_{\text{ex}})$ is the partition function, and c is the speed of light. We also remind that for a Gaussian profile of peak opacity τ_0 and FWHM $\Delta\nu$, the opacity integral is $\int \tau dv = 1/2 \sqrt{\pi/\ln 2} \tau_0 \Delta\nu$. For an excitation temperature of 2.73 K, Eq. A.1 becomes

$$N(\text{HCO}^+) = 1.10 \times 10^{12} \int \tau dv \quad \text{cm}^{-2}, \quad (\text{A.2})$$

$$N(\text{HNC}) = 1.78 \times 10^{12} \int \tau dv \quad \text{cm}^{-2}, \quad (\text{A.3})$$

$$N(\text{HCN}) = 3.43 \times 10^{12} \int \tau dv \quad \text{cm}^{-2} \quad (\text{A.4})$$

and

$$N(\text{CN}) = 4.97 \times 10^{13} \int \tau dv \quad \text{cm}^{-2} \quad (\text{A.5})$$

using the $\text{HCO}^+ J = 0 - 1$, $\text{HNC } J = 0 - 1$, $\text{HCN } J, F = 0, 1 - 1, 2$ and $\text{CN } J, F, F = 0, 1/2, 3/2 - 1, 1/2, 3/2$ transitions respectively.

Appendix B: Impact of the abscissa uncertainty on the multi-Gaussian decomposition procedure

In a spectrum, the possible velocity substructures are systematically erased due to the finite velocity resolution $\delta\nu$. This could be modelled as an uncertainty on the velocity position of each point. Unfortunately the errors on the abscissa are rarely included in non-linear fitting procedures because the system is considerably heavier to solve and because it often prevents convergence. To evaluate the resulting uncertainties on the fit parameters, namely the central opacity, the velocity centroid and the FWHM, we apply the fitting procedure on 3000 synthetic spectra of FWHM $\Delta\nu$ varying between between 0.3 and 3.4 km s^{-1} sampled with the finite spectral resolution of the observations $\delta\nu \sim 0.13 \text{ km s}^{-1}$. A noise is added to the x -coordinates of all the spectral points. The rms of all the measured linewidths $\Delta\nu'$ is found to scale as

$$\frac{\delta(\Delta\nu')}{\Delta\nu} = 0.45 \left(\frac{\delta\nu}{\Delta\nu} \right)^{3/2} \quad (\text{B.1})$$

and decreases from 0.04 to 0.01 km s^{-1} as the true linewidth increases from 0.3 to 3.4 km s^{-1} . These uncertainties are smaller than (or comparable to) those inferred from the fitting procedure and the resulting errors on the column densities are at most 12%. In comparison the resulting errors on central opacities and velocity centroids are negligible.

Appendix C: Cyanides chemical network

Figs. C.1 & C.2 show the main production and destruction pathways of the hydrogenation chains of carbon, nitrogen and cyano, resulting from the PDR ($n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$, $A_V = 0.4$) and TDR ($n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$, $A_V = 0.4$, $a = 10^{-11} \text{ s}^{-1}$) models respectively. These figures are simplified: for each species, only the reactions which altogether contribute at least to 70 percent of the total destruction and formation rate are displayed. Since these pathways depend on the chemical rates, and since the nitrogen and cyanide chemistry are still poorly known, we list the chemical rates we have adopted in our models for several reactions in Tab. C.1.

Table A.1. HCO⁺ (0-1) absorption line analysis results.

^a Source	ν_0 (km s ⁻¹)	$\Delta\nu$ (km s ⁻¹)	τ_0	$N(\text{HCO}^+)$ (10 ¹² cm ⁻²)	N_{H} (10 ²⁰ cm ⁻²)
G05.88-0.39	-4.92	1.13 ± 0.15	0.09 ± 0.01	0.13 ± 0.03	
G08.67-0.36	9.82	0.95 ± 0.12	1.60 ± 0.28	2.02 ± 0.58	
	11.71	1.40 ± 0.17	1.65 ± 0.28	3.08 ± 0.90	
	14.52	2.00 ± 0.18	1.41 ± 0.18	3.74 ± 0.83	
	17.76	1.17 ± 0.22	0.87 ± 0.20	1.34 ± 0.56	
	20.00	2.55 ± 0.63	1.08 ± 0.16	3.65 ± 1.45	
	22.00	1.02 ± 0.58	0.24 ± 0.17	0.32 ± 0.41	
G10.62-0.38	11.62	1.10 ± 0.12	0.43 ± 0.04	0.62 ± 0.12	
	16.38	2.35 ± 0.10	2.23 ± 0.14	6.84 ± 0.74	
	19.00	2.13 ± 0.20	1.50 ± 0.09	4.18 ± 0.64	
	22.20	2.70 ± 0.27	1.57 ± 0.13	5.57 ± 1.00	
	22.95	1.15 ± 0.45	0.82 ± 0.18	1.23 ± 0.75	
	24.98	1.65 ± 0.10	0.70 ± 0.06	1.51 ± 0.21	
	27.50	2.58 ± 0.17	1.61 ± 0.11	5.46 ± 0.74	
	29.00	1.53 ± 0.52	0.78 ± 0.20	1.56 ± 0.93	
	30.50	1.52 ± 0.32	2.09 ± 0.27	4.13 ± 1.39	
	40.91	2.60 ± 0.10	2.33 ± 0.14	7.93 ± 0.78	
	44.94	1.22 ± 0.05	1.30 ± 0.07	2.06 ± 0.21	
46.40	0.60 ± 0.10	0.26 ± 0.04	0.20 ± 0.07		
G34.3+0.1	9.80	0.53 ± 0.22	0.38 ± 0.12	0.27 ± 0.19	
	10.60	0.57 ± 0.12	1.86 ± 0.61	1.38 ± 0.72	
	11.70	1.37 ± 0.18	1.82 ± 0.39	3.34 ± 1.14	
	14.07	0.37 ± 0.08	0.77 ± 0.23	0.38 ± 0.20	
	27.00	1.02 ± 0.13	1.19 ± 0.20	1.61 ± 0.47	
	27.75	1.83 ± 0.32	0.45 ± 0.09	1.10 ± 0.41	
48.30	2.23 ± 0.20	0.94 ± 0.10	2.80 ± 0.54		
W49N	33.20	0.65 ± 0.03	0.44 ± 0.02	0.34 ± 0.02	3.0
	33.70	2.23 ± 0.03	0.63 ± 0.01	1.67 ± 0.02	10.5
	36.50	1.67 ± 0.12	0.29 ± 0.01	0.60 ± 0.03	7.8
	38.50	1.75 ± 0.08	0.91 ± 0.01	1.88 ± 0.03	8.2
	39.70	1.47 ± 0.02	2.01 ± 0.03	3.47 ± 0.05	6.9
	50.92	1.65 ± 0.10	0.35 ± 0.01	0.68 ± 0.02	7.8
	53.40	1.23 ± 0.10	0.30 ± 0.02	0.43 ± 0.03	5.8
	54.00	3.38 ± 0.15	0.51 ± 0.01	2.03 ± 0.04	15.9
	56.70	2.35 ± 0.07	0.69 ± 0.01	1.91 ± 0.03	11.0
	59.55	2.35 ± 0.05	1.89 ± 0.02	5.24 ± 0.07	11.0
	60.80	0.88 ± 0.05	0.77 ± 0.05	0.80 ± 0.06	4.1
	62.65	2.95 ± 0.03	1.48 ± 0.01	5.16 ± 0.05	13.9
	66.21	1.85 ± 0.07	0.19 ± 0.01	0.41 ± 0.01	8.7
68.58	1.80 ± 0.10	0.24 ± 0.01	0.52 ± 0.01	8.5	
71.11	2.25 ± 0.20	0.07 ± 0.00	0.19 ± 0.01	10.6	
W51	3.80	0.47 ± 0.12	0.10 ± 0.02	0.06 ± 0.03	1.0
	5.10	1.23 ± 0.05	0.72 ± 0.02	1.14 ± 0.08	2.7
	6.25	0.65 ± 0.03	1.05 ± 0.06	0.87 ± 0.10	1.4
	6.85	2.01 ± 0.05	0.70 ± 0.02	1.80 ± 0.10	4.4
	12.71	1.67 ± 0.18	0.10 ± 0.01	0.20 ± 0.04	3.7
^b Source	ν_{min} (km s ⁻¹)	ν_{max} (km s ⁻¹)	$\int \tau d\nu$ (km s ⁻¹)	$N(\text{HCO}^+)$ (10 ¹² cm ⁻²)	
G10.62-0.38	13.6	15.2	0.77 ± 0.08	0.94 ± 0.10	
	31.0	33.0	3.77 ± 0.31	4.63 ± 0.38	
	33.3	34.7	1.81 ± 0.15	2.23 ± 0.18	
	34.7	36.0	1.74 ± 0.16	2.13 ± 0.19	
	36.0	37.5	3.10 ± 0.29	3.82 ± 0.36	
	37.5	40.0	> 6.27	> 7.71	
W49N	41.0	47.0	0.90 ± 0.03	1.00 ± 0.04	

^a Multi-Gaussian decomposition. The column densities are derived assuming the excitation temperatures given in Tab. 3.^b Failure of the multi-gaussian decomposition. Column densities are inferred from the integral of the opacity assuming the excitation temperatures given in Tab. 3.^c Determined from the average total hydrogen column density per unit velocity $N_{\text{H}}/\Delta\nu = 2.2$ and 4.7×10^{20} cm⁻²/km.s⁻¹ toward W51 and W49N respectively.

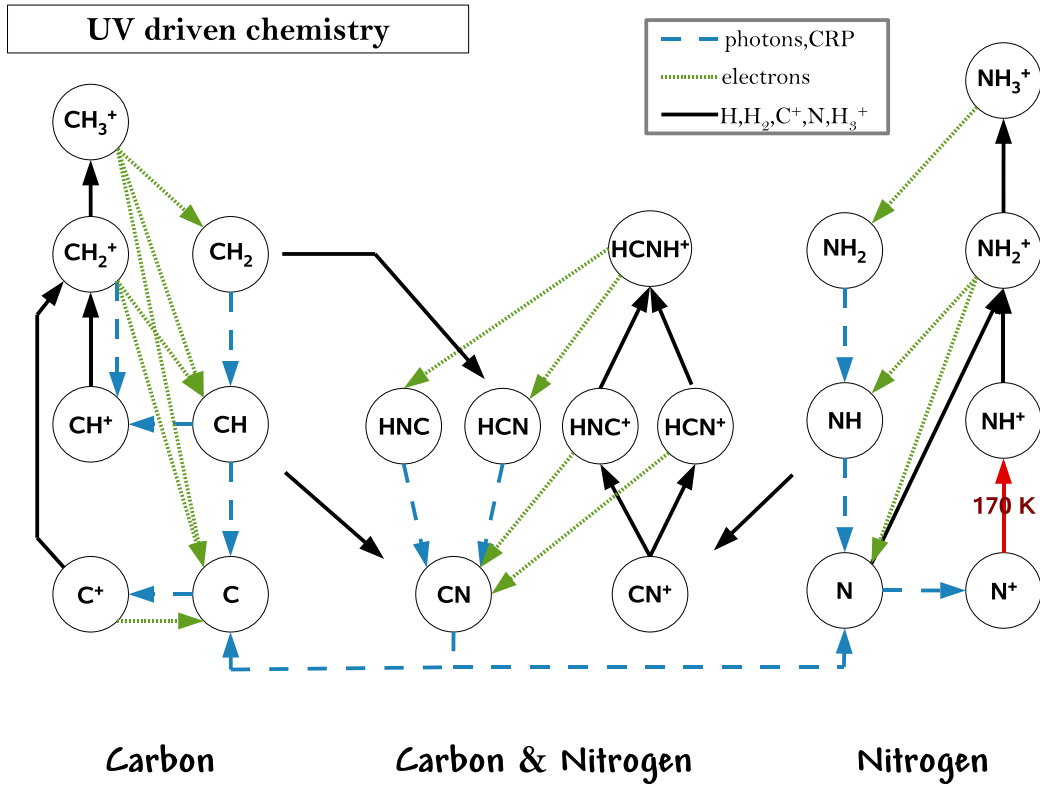


Figure C.1. Chemical network of a UV-dominated chemistry: $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ and $A_V = 0.4$. This figure is simplified: for each species, only the reactions which altogether contribute at least to 70 percent of the total destruction and formation rate are displayed. The red arrows show the endoenergetic reactions with the energy involved.

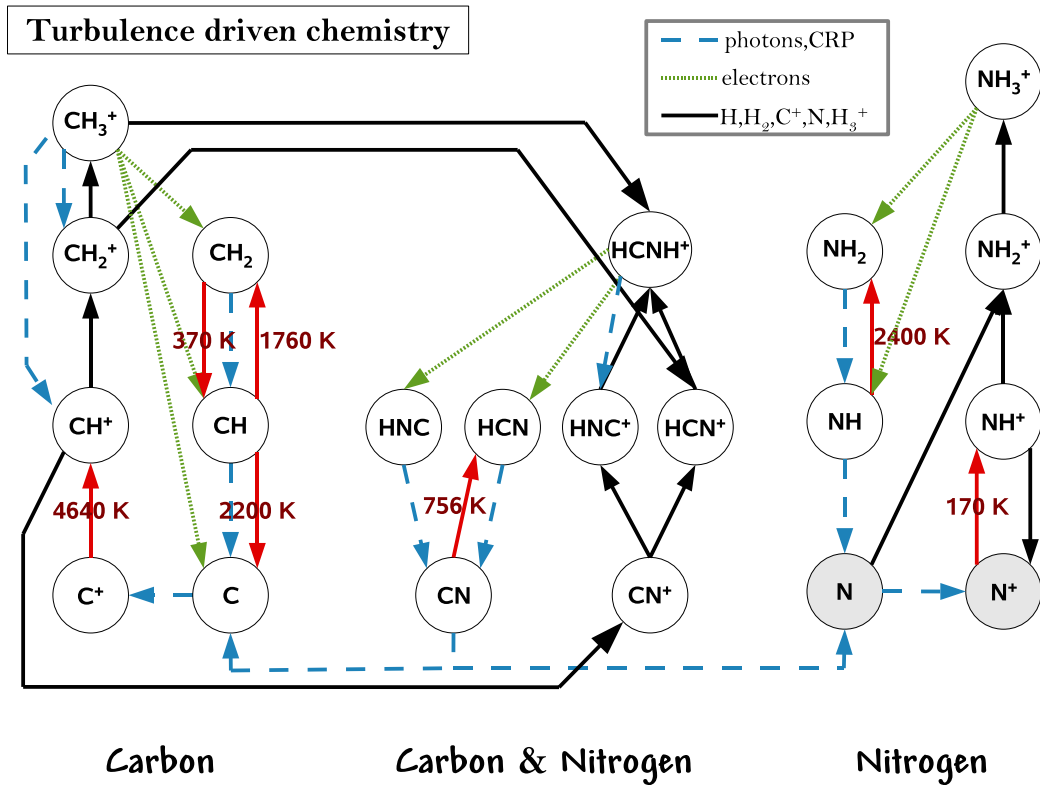


Figure C.2. Same as Fig. C.1 for a turbulence-dominated chemistry: $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$, $A_V = 0.4$ and $a = 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. For the sake of simplicity, the main destruction route of N ($N + \text{CH}_2^+ \rightarrow \text{HCN}^+ + \text{H}$) and the main formation pathway of N^+ (photodissociation of NO^+) are not displayed here.

Table A.2. HNC (0-1) absorption line analysis products.

^a					
Source	ν_0 (km s ⁻¹)	$\Delta\nu$ (km s ⁻¹)	τ_0	$N(\text{HNC})$ (10 ¹² cm ⁻²)	
G10.62-0.38	11.62	1.72 ± 0.22	0.19 ± 0.02	0.72 ± 0.17	
	14.42	1.23 ± 0.42	0.09 ± 0.02	0.24 ± 0.14	
	16.38	1.30 ± 0.05	1.43 ± 0.07	4.02 ± 0.33	
	19.16	2.01 ± 0.15	0.50 ± 0.03	2.19 ± 0.27	
	22.20	2.15 ± 0.28	0.38 ± 0.06	1.76 ± 0.51	
	22.95	1.17 ± 0.13	1.21 ± 0.08	3.06 ± 0.57	
	24.98	2.05 ± 0.35	0.13 ± 0.02	0.60 ± 0.18	
	27.80	1.50 ± 0.07	1.18 ± 0.08	3.82 ± 0.44	
	29.10	1.32 ± 0.18	1.16 ± 0.10	3.84 ± 0.85	
	30.25	1.13 ± 0.07	1.23 ± 0.10	3.02 ± 0.41	
	31.90	2.31 ± 0.37	0.45 ± 0.03	2.28 ± 0.50	
	34.00	1.08 ± 0.22	0.32 ± 0.04	0.76 ± 0.25	
	35.35	1.02 ± 0.13	0.53 ± 0.05	1.16 ± 0.26	
	36.51	1.22 ± 0.10	0.81 ± 0.05	2.12 ± 0.31	
	38.80	2.16 ± 0.18	0.72 ± 0.03	3.38 ± 0.45	
	40.91	1.30 ± 0.05	2.16 ± 0.14	6.10 ± 0.63	
	44.94	1.30 ± 0.10	0.34 ± 0.03	0.95 ± 0.15	
G34.3+0.1	10.60	0.58 ± 0.13	0.15 ± 0.03	0.19 ± 0.08	
	11.80	1.45 ± 0.15	0.28 ± 0.02	0.85 ± 0.15	
	27.00	1.05 ± 0.07	0.48 ± 0.03	1.06 ± 0.13	
W49N	33.50	1.77 ± 0.17	0.12 ± 0.01	0.39 ± 0.06	
	38.50	1.68 ± 0.10	0.22 ± 0.01	0.70 ± 0.08	
	39.70	0.95 ± 0.02	1.46 ± 0.04	2.63 ± 0.11	
	50.92	0.53 ± 0.15	0.06 ± 0.01	0.06 ± 0.03	
	54.00	2.85 ± 0.32	0.09 ± 0.01	0.47 ± 0.09	
	56.70	1.78 ± 0.18	0.10 ± 0.01	0.32 ± 0.06	
	59.40	2.01 ± 0.08	0.44 ± 0.01	1.67 ± 0.11	
	60.90	0.97 ± 0.13	0.08 ± 0.01	0.15 ± 0.04	
62.60	2.15 ± 0.08	0.39 ± 0.01	1.58 ± 0.11		
^b					
Source	ν_{\min} (km s ⁻¹)	ν_{\max} (km s ⁻¹)	$\int \tau d\nu$ (km s ⁻¹)	$N(\text{HNC})$ (10 ¹² cm ⁻²)	
G10.62-0.38	46.0	47.0	< 0.03	< 0.07	
	G34.3+0.1	9.0	10.1	< 0.03	< 0.06
		13.3	14.7	< 0.04	< 0.07
46.0		50.0	< 0.06	< 0.11	
W49N	35.0	37.0	0.09 ± 0.02	0.16 ± 0.04	
	41.0	47.0	0.11 ± 0.04	0.19 ± 0.06	
	65.0	67.3	0.10 ± 0.02	0.18 ± 0.04	
	67.3	69.7	0.07 ± 0.02	0.12 ± 0.04	
	69.7	72.5	< 0.02	< 0.04	
W51	3.0	5.5	0.09 ± 0.05	0.17 ± 0.10	
	5.5	9.5	0.09 ± 0.06	0.18 ± 0.12	
	11.0	14.0	< 0.06	< 0.11	

^a Same as Tab. A.1.^b Same as Tab. A.1.

Table A.3. HCN (0-1) absorption line analysis products.

^a				
Source	v_0 (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	τ_0	$N(\text{HCN})$ (10 ¹² cm ⁻²)
G10.62-0.38	44.97	0.92 ± 0.03	1.45 ± 0.07	5.40 ± 0.45
G34.3+0.1	10.10	1.00 ± 0.15	0.16 ± 0.02	0.66 ± 0.18
	10.60	0.32 ± 0.03	0.40 ± 0.04	0.53 ± 0.12
	11.80	1.22 ± 0.05	0.85 ± 0.03	4.27 ± 0.33
	27.00	0.57 ± 0.02	1.47 ± 0.06	3.44 ± 0.24
	27.75	0.55 ± 0.05	0.35 ± 0.03	0.81 ± 0.14
W49N	33.40	1.43 ± 0.05	0.42 ± 0.01	2.20 ± 0.06
	38.50	1.22 ± 0.03	0.65 ± 0.01	2.91 ± 0.06
	39.70	0.87 ± 0.02	3.94 ± 0.06	12.51 ± 0.18
	51.00	1.00 ± 0.17	0.11 ± 0.01	0.40 ± 0.11
	54.00	2.50 ± 0.20	0.24 ± 0.01	2.23 ± 0.21
	56.60	1.83 ± 0.15	0.28 ± 0.01	1.85 ± 0.22
	59.40	1.50 ± 0.05	1.35 ± 0.02	7.44 ± 0.10
	60.90	0.83 ± 0.05	0.64 ± 0.02	1.96 ± 0.05
62.55	1.83 ± 0.05	1.15 ± 0.01	7.73 ± 0.09	
W51	5.00	0.93 ± 0.12	0.17 ± 0.02	0.63 ± 0.14
	6.80	1.27 ± 0.12	0.20 ± 0.02	1.02 ± 0.17
^b				
Source	v_{\min} (km s ⁻¹)	v_{\max} (km s ⁻¹)	$\int \tau dv$ (km s ⁻¹)	$N(\text{HCN})$ (10 ¹² cm ⁻²)
W49N	69.7	72.5	0.03 ± 0.03	0.18 ± 0.15
W51	11.0	14.0	< 0.04	< 0.27

^a Same as Tab. A.1.^b Same as Tab. A.1.

Table A.4. CN (0-1) absorption line analysis products.

^a				
Source	ν_0 (km s ⁻¹)	$\Delta\nu$ (km s ⁻¹)	τ_0	$N(\text{CN})$ (10 ¹³ cm ⁻²)
G10.62-0.38	11.62	0.92 ± 0.18	0.16 ± 0.02	0.85 ± 0.25
	16.30	1.20 ± 0.03	1.16 ± 0.03	7.93 ± 0.45
	19.16	1.03 ± 0.10	0.47 ± 0.02	2.79 ± 0.42
	22.20	1.83 ± 0.00	0.32 ± 0.02	3.39 ± 0.25
	22.90	0.87 ± 0.05	1.16 ± 0.05	5.74 ± 0.62
	27.80	1.47 ± 0.05	1.23 ± 0.04	10.24 ± 0.75
	29.10	0.78 ± 0.07	0.99 ± 0.07	4.43 ± 0.66
	30.20	1.10 ± 0.05	1.39 ± 0.06	8.77 ± 0.75
	31.80	2.10 ± 0.28	0.38 ± 0.02	4.59 ± 0.80
	34.00	1.22 ± 0.28	0.19 ± 0.02	1.34 ± 0.45
	35.35	0.68 ± 0.07	0.44 ± 0.03	1.70 ± 0.27
	36.61	1.40 ± 0.13	0.50 ± 0.02	3.97 ± 0.55
	38.80	1.63 ± 0.10	0.66 ± 0.02	6.18 ± 0.60
	40.75	1.35 ± 0.03	1.70 ± 0.05	13.07 ± 0.68
	44.94	0.83 ± 0.08	0.22 ± 0.04	1.02 ± 0.29
G34.3+0.1	27.00	0.68 ± 0.12	0.86 ± 0.17	1.28 ± 0.47
W49N	33.30	1.83 ± 0.12	0.13 ± 0.01	1.30 ± 0.16
	38.40	1.77 ± 0.08	0.23 ± 0.01	2.16 ± 0.19
	39.60	0.85 ± 0.02	1.18 ± 0.03	5.31 ± 0.21
	59.20	1.98 ± 0.08	0.27 ± 0.01	2.84 ± 0.24
	62.40	1.62 ± 0.07	0.32 ± 0.01	2.69 ± 0.22
^b				
Source	ν_{\min} (km s ⁻¹)	ν_{\max} (km s ⁻¹)	$\int \tau d\nu$ (km s ⁻¹)	$N(\text{CN})$ (10 ¹³ cm ⁻²)
G10.62-0.38	13.6	15.2	0.18 ± 0.06	0.61 ± 0.21
	24.0	26.0	0.26 ± 0.07	0.92 ± 0.24
	46.0	47.0	< 0.04	< 0.15
G34.3+0.1	9.0	10.1	0.20 ± 0.13	1.10 ± 0.72
	10.1	11.0	< 0.11	< 0.60
	11.0	13.0	0.48 ± 0.18	2.59 ± 0.10
	13.3	14.7	0.15 ± 0.14	0.80 ± 0.75
	46.0	50.0	< 0.19	< 1.04
W49N	35.0	37.0	< 0.03	< 0.09
	41.0	47.0	< 0.05	< 0.16
	50.0	52.0	< 0.03	< 0.09
	52.5	55.5	0.09 ± 0.04	0.29 ± 0.12
	55.5	57.9	0.07 ± 0.03	0.23 ± 0.10
	60.3	61.3	0.09 ± 0.02	0.29 ± 0.07
W51	3.0	5.5	0.13 ± 0.08	0.69 ± 0.40
	5.5	9.5	< 0.09	< 0.49
	11.0	14.0	< 0.08	< 0.42

^a Same as Tab. A.1.^b Same as Tab. A.1.

Table C.1. Rates k of the main reactions of the cyanide chemistry. The photoreaction rates write $k = \alpha \cdot \exp(-\gamma A_V)$ while all the other reaction rates are derived as $k = \alpha \cdot (T/300\text{K})^\beta \exp(-\gamma/T)$ where T is the reaction temperature. Numbers in parenthesis are power of 10.

Reaction				α	β	γ	ref
CN	+ hv	→ C	+ N	4.64 (-10)	0.00	3.6	a
HCN	+ hv	→ CN	+ H	5.70 (-10)	0.00	2.6	a
HNC	+ hv	→ CN	+ H	5.70 (-10)	0.00	2.6	a
HCNH ⁺	+ e ⁻	→ HCN	+ H	9.45 (-07)	-0.65	0.0	b,c
HCNH ⁺	+ e ⁻	→ HNC	+ H	9.45 (-07)	-0.65	0.0	b,c
HCNH ⁺	+ e ⁻	→ CN	+ 2H	9.10 (-08)	-0.65	0.0	b,c
HCNH ⁺	+ e ⁻	→ CN	+ H ₂	1.80 (-08)	-0.65	0.0	b,c
H ₂ NC ⁺	+ e ⁻	→ HNC	+ H	1.75 (-07)	-0.50	0.0	d
H ₂ NC ⁺	+ e ⁻	→ CN	+ H ₂	1.75 (-07)	-0.50	0.0	d
HNC ⁺	+ e ⁻	→ CN	+ H	3.90 (-07)	-1.00	0.0	e,f
HCN ⁺	+ e ⁻	→ CN	+ H	3.90 (-07)	-1.00	0.0	e
CH ₃ ⁺	+ N	→ HCN ⁺	+ H ₂	2.20 (-11)	0.00	0.0	g
CH ₃ ⁺	+ N	→ HCNH ⁺	+ H	2.20 (-11)	0.00	0.0	g
CH ₃ ⁺	+ N	→ H ₂ NC ⁺	+ H	2.20 (-11)	0.00	0.0	g
CH ₂ ⁺	+ N	→ HCN ⁺	+ H	4.70 (-10)	0.00	0.0	
CH ₂ ⁺	+ N	→ HNC ⁺	+ H	4.70 (-10)	0.00	0.0	
CH ⁺	+ N	→ CN ⁺	+ H	1.90 (-10)	0.00	0.0	h
CH ₂	+ N	→ HCN	+ H	3.95 (-11)	0.17	0.0	i
CH	+ N	→ CN	+ H	2.00 (-10)	0.00	0.0	j
C ⁺	+ NH	→ CN ⁺	+ H	7.80 (-10)	0.00	0.0	
C ⁺	+ NH ₂	→ HCN ⁺	+ H	1.10 (-09)	0.00	0.0	
HCN ⁺	+ H ₂	→ HCNH ⁺	+ H	9.00 (-10)	0.00	0.0	k
HNC ⁺	+ H ₂	→ HCNH ⁺	+ H	9.00 (-10)	0.00	0.0	k

^a Roberge *et al.* (1991).^b Florescu-Mitchell & Mitchell (2006).^c Semaniak *et al.* (2001).^d Adams & Smith (1988).^e Sheehan *et al.* (1999).^f Talbi *et al.* (2000).^g Fehsenfeld (1976).^h Viggiano *et al.* (1980).ⁱ Smith *et al.* (2004).^j Brownsword *et al.* (1996).^k Huntress (1977).

3.4 Les solutions envisagées

Plusieurs travaux sont actuellement en développement dans le but d'expliquer les processus responsables de la richesse chimique et des signatures dynamiques du MIS diffus. Nombre d'entre eux sont dédiés à la résolution d'un seul problème. En voici quelques exemples. (1) Il a été proposé que CH^+ se forme dans le MIS via $\text{C}^+ + \text{H}_2^* \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$, c'est-à-dire grâce à l'énergie d'excitation de l'hydrogène moléculaire permettant de vaincre l'endothermicité de cette réaction (voir plus bas). (2) Concernant l'excitation de H_2 , Sternberg & Dalgarno (1995) suggèrent qu'elle est due aux processus de formation de l'hydrogène moléculaire sur les grains au cours duquel une partie de l'énergie de liaison de la molécule est transmise en énergie interne. (3) Le taux de recombinaison de HCO^+ proposé par Florescu-Mitchell & Mitchell (2006) permet, à lui seul, de rendre compte de la forte abondance de cette molécule dans le MIS diffus, sans qu'il soit nécessaire de s'écarter de l'approche suivie dans les modèles PDR. (4) Enfin, il est possible que l'abondance de H_3^+ soit due à l'augmentation du taux d'ionisation de H_2 par les rayons cosmiques, soit par augmentation du flux aux faibles énergies, soit par couplage des rayons cosmiques avec les lignes de champ magnétique. Tous ces mécanismes sont discutés dans Godard *et al.* (2009a).

Dans cette section, on s'intéresse aux modèles dynamiques, dont la qualité est qu'ils s'attachent à reproduire toutes les anomalies chimiques et leurs signatures dynamiques simultanément, en n'invoquant qu'un seul processus physique.

3.4.1 Le transport turbulent

Dans ce type de modèles, l'aspect aléatoire des mouvements turbulents est utilisé pour mélanger de manière efficace des parcelles de gaz ayant des conditions physiques bien différentes (extinction, fraction moléculaire, fraction d'ionisation, température, densité). Ce type de processus prend tout son sens aux interfaces entre 2 milieux distincts.

La seule méthode employée jusqu'à présent consiste à adopter une longueur caractéristique de mélange turbulent L_D et une équation d'évolution dynamique : en pratique le transport est supposé soit ballistique, soit diffusif. L'impact du transport turbulent est alors d'autant plus fort que le temps caractéristique de mélange est faible face au temps d'évolution chimique et thermique du gaz. Autrement dit, en fonction de L_D , certains processus chimiques seront stimulés et d'autres non (ceux qui arrivent rapidement à l'équilibre). Scalo & Elmegreen (2004) montrent que pour le temps le plus long d'évolution chimique d'un gaz atomique non ionisé, le transport turbulent cesse d'être efficace pour $n_{\text{H}} > 100 \text{ cm}^{-3}$.

Plusieurs modèles ont été développés pour étudier l'impact du transport turbulent sur : la chimie des coeurs protostellaires (Chièze *et al.* 1991), la chimie du CNM à l'interface entre les gaz froids atomique et moléculaire (Xie *et al.* 1995, Willacy *et al.* 2002), le mélange du CNM avec le WNM et la chimie induite (Lesaffre *et al.* 2007). Willacy *et al.* (2002) montrent notamment comment le mélange obtenu élargit l'échelle de transition H/H_2 , H_2 étant formé à la surface des grains à partir d'atomes d'hydrogène préalablement capturés.

Lesaffre *et al.* (2007) calculent l'enrichissement du CNM en molécules telles que OH, H_2O , CH^+ et H_3^+ : les densités de colonne augmentent de plus de facteur 10

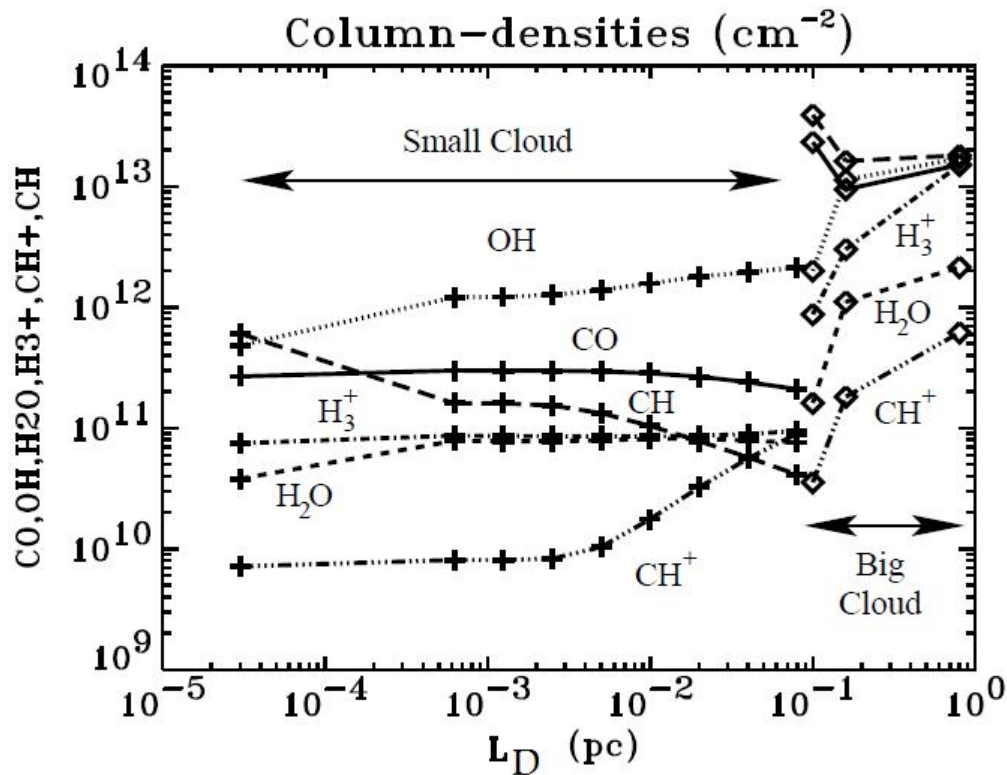


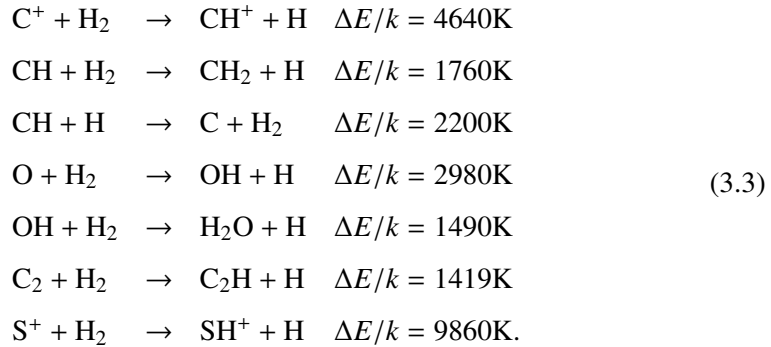
FIG. 3.8 – Résultat du modèle de mélange turbulent diffusif de Lesaffre *et al.* (2007) pour deux type de nuages, *petit* et *grand* (voir texte), en fonction de la longueur de diffusion. Les colonnes densité de plusieurs molécules sont calculées sur l'ensemble du nuage.

comparées à celles d'un gaz statique. Les résultats de leur modèle, pour 2 types de nuages, 1 *petit* ($L_{\text{CNM}} \sim 0.2$ pc & $L_{\text{WNM}} \sim 1.3$ pc) et 1 *grand* ($L_{\text{CNM}} \sim 1.5$ pc & $L_{\text{WNM}} \sim 9$ pc), sont affichés en Fig. 3.8 en fonction de la longueur de diffusion L_D . En dépit de l'efficacité du processus, les prédictions concernant les densités de colonne de CH^+ et H_3^+ sont un ordre de grandeur en dessous des valeurs observées (cf. Tab. 3.1).

3.4.2 La dissipation de l'énergie turbulente

Il s'agit de l'objet de cette thèse. L'analyse des réseaux chimiques (cf. annexe F) montre que des fluctuations de la température du gaz entre quelques 10^2 et 10^3 K suffisent à modifier significativement les vitesses de réactions telles que les recombinaisons dissociatives et permettent même de surmonter les barrières endoénergétiques de certaines réactions ion-neutre et neutre-neutre. Ainsi, les formations des espèces C,

CH^+ , OH , H_2O , C_2H , SH^+ sont stimulées par l'activation des réactions :



Et, en conséquence, les abondances de nombreuses autres molécules telles que CH_2^+ , CH_3^+ , HCO^+ , CO , CN , HCN , HNC , et CS , augmentent considérablement, les taux des mécanismes fins de destruction, principalement les photodissociations, étant indépendants de la température.

Plusieurs origines des variations de températures (qui doivent se produire à petite échelle, cf. Sect. 3.1) ont été proposées : le chauffage visqueux, par compression, et par friction ion-neutre (diffusion ambiplaire). Dans ce travail, nous étudions la dissipation d'énergie turbulente dans les modes solénoïdaux³. Nous présentons donc ici, 2 autres processus possibles, la reconnection magnétique et les chocs.

La reconnection magnétique

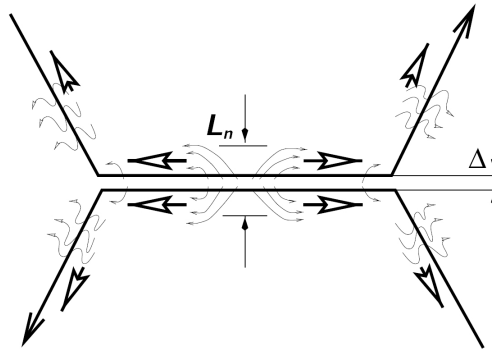


FIG. 3.9 – Schéma d'une régions de reconnection (Vishniac & Lazarian 1999). Celle-ci se déroule dans une couche de largeur Δ . Les lignes épaisses et fines correspondent respectivement aux vitesses des ions et des neutres. L'éjection du gaz est restreinte à la région L_n .

Malheureusement, la reconnection magnétique n'a jamais été étudiée dans le cadre de la chimie du MIS diffus. Toutefois le principe est tout à fait approprié au chauffage du gaz comme le montre la Fig. 3.9 (tirée de Vishniac & Lazarian 1999 qui étudie la vitesse de reconnection en fonction du chauffage induit, du type d'environnement

³solénoïdal = incompressible.

et de la vitesse de diffusion ambipolaire), schéma du mécanisme à 2D. L'idée est la suivante. Dans un fluide turbulent, les variations de la vitesse à petite échelle, induisent un contact entre des lignes de champ initialement de sens opposé, et dirrigées selon $\pm \mathbf{e}_x$ (horizontalement dans la Fig. 3.9). La zone de reconnection a une taille L_x , et sous l'effet de la pression et de la tension magnétique, le gaz ionisé est éjecté de la zone à une vitesse de l'ordre de la vitesse d'Alfvén le long des lignes de champ locales, c'est-à-dire selon $\pm \mathbf{e}_x$, et dans un volume restreint ΔL_x (en 2D encore une fois, cf. Fig. 3.9). Ce processus induit non seulement un chauffage des ions et des électrons, mais également de la friction ion-neutre qui chauffe le gaz et stimule la chimie.

Les chocs MHD (magnétohydrodynamique)

Les chocs se retrouvent partout dans la Galaxie, dans tous les milieux, l'exemple le plus connu étant les bras spiraux qui sont des ondes de choc à très grande échelle conduisant à la formation d'étoiles. En outre, bien que les chocs soient souvent observés de manière discrète dans le milieu interstellaire (les supernovae et les jets protostellaires forment des chocs de la taille caractéristique de l'échelle d'injection d'énergie mécanique), ils existent probablement à toutes les échelles, étant un mécanisme efficace de dissipation de l'énergie turbulente.

Au passage d'une onde de choc dans le MIS, le gaz est accéléré, comprimé et chauffé, puis refroidit radiativement⁴. Le principe consiste alors à évaluer, dans le référentiel du front de choc, le transfert d'énergie cinétique en énergies thermique, magnétique, et interne, comme le montre la Fig. 3.10 (Guillet 2008, Flower & Pineau des Forêts 2003). Dans le cas où la température d'équilibre du gaz post-choc est la même que celle du gaz pré-choc (choc dit *isotherme*), la longueur du choc est définie comme la taille (ou le temps écoulé) du phénomène transitoire entre ces 2 états. Celle-ci dépend de la densité du gaz n_H , de la vitesse du choc V_S , de l'intensité du champ magnétique B_0 ⁵ et de l'inclusion ou non de la chimie et des poussières chargées dans la description du choc.

Le modèle de choc de Flower & Pineau des Forêts (1998) résout, de manière couplée, l'évolution thermique et chimique d'une cellule de gaz chauffée dans un choc 1D stationnaire MHD à champ magnétique transverse se propageant dans un milieu homogène. Durant les 10 dernières années, ce modèle a été grandement développé, et récemment, un traitement approfondi des poussières (érosion, vaporisation, dynamique) a été ajouté par Guillet *et al.* (2007).

À partir de ce code numérique, l'impact des chocs à faible vitesse dans le MIS diffus sur les profils de raies et les abondances des espèces telles que CH^+ , CH , CO , OH , HCO^+ et $\text{H}_{2,J \geq 3}^*$ a été quantifié, notamment par Flower & Pineau des Forêts (1998), Gredel *et al.* (2002) et Falgarone *et al.* (2005). Ci-dessous sont exposés quelques résultats importants.

- Pour des conditions pré-choc $n_H = 20 \text{ cm}^{-3}$, $A_V = 0.1$ et $B_0 = 5 \mu\text{G}$: (1) il faut jusqu'à quelques dizaines de chocs (ce nombre décroît quand V_S augmente)

⁴Ce type de choc est appelé *choc radiatif*, qu'il ne faut pas confondre avec un *choc à précurseur radiatif*.

⁵En effet si $V_S < c_A$, c_A étant la vitesse d'Alfvén, il y a formation d'un précurseur magnétique : les ondes magnétosoniques perturbent le gaz ionisé, l'accélèrent, le chauffent et le compriment progressivement avant l'arrivée du front de choc.

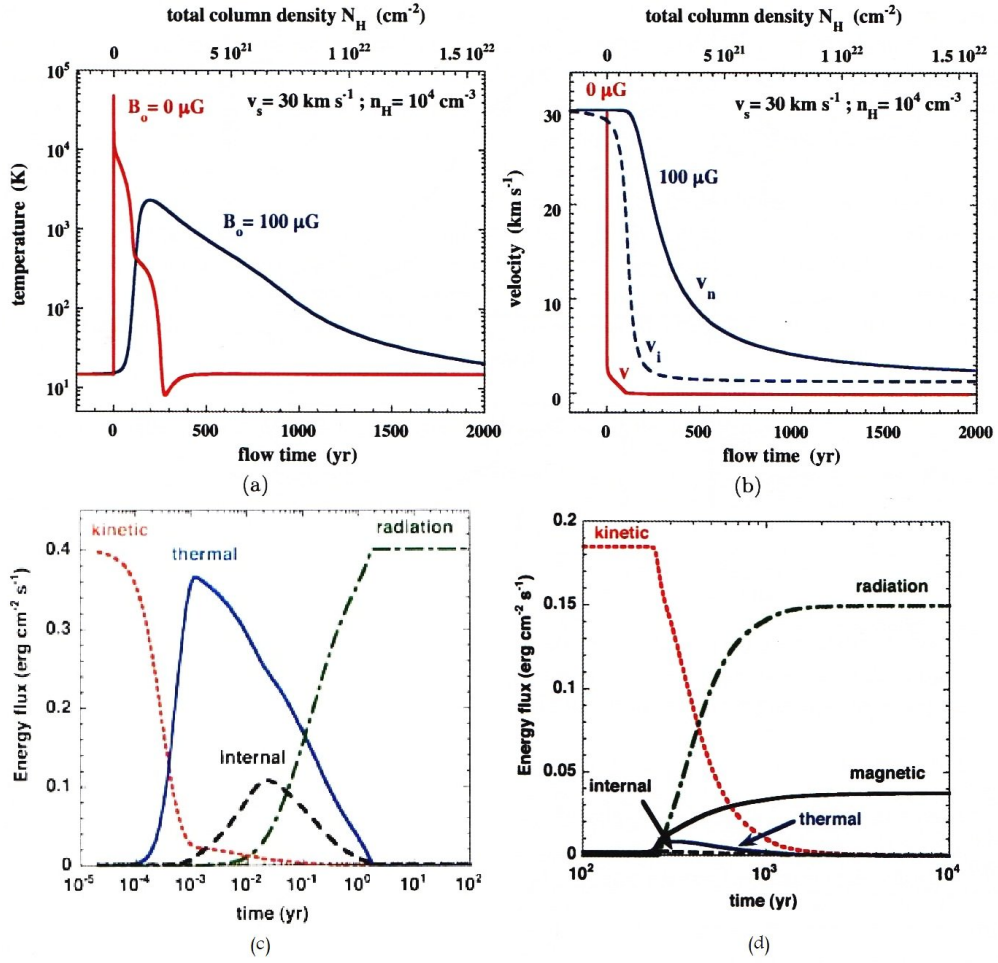


Fig. 3.10 – Figures extraites de Guillet (2008) et Flower & Pineau des Forêts (2003). Panneaux (a & b) : évolutions de la température (a) et des vitesses (b) en fonction du temps pour un choc hydrodynamique (HD, rouge) et magnétohydrodynamique (MHD, bleu), $B_0 = 100 \mu\text{G}$ avec $V_S = 30 \text{ km.s}^{-1}$ et $n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$. Panneaux (c & d) : décomposition du flux d'énergie totale en énergies cinétique, thermique, interne, radiative et magnétique, pour un choc HD avec $V_S = 15 \text{ km.s}^{-1}$ et $n_H = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ (c), et pour un choc MHD avec $B_0 = 100 \mu\text{G}$, $V_S = 25 \text{ km.s}^{-1}$ et $n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ (d).

pour reproduire les abondances observées de CH^+ ; (2) $n(\text{CH}^+)$ et $n(\text{CH})$ sont reproduit simultanément pour $7 < V_S < 9 \text{ km.s}^{-1}$ (cf. Fig. 3.11, panneau de gauche), et la limite inférieure de ce domaine change si B est plus petit; (3) les densités de colonnes résultantes de CN et C_2 sont $< 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ dans tous les cas; (4) pour $V_S = 8 \text{ km.s}^{-1}$, et pour un choc unique se propageant selon la ligne de visée (cas où le décalage suivant est maximum), il y a un décalage des raies d'absorptions prédites de CH et CH^+ d'environ 1 km.s^{-1} (cf. Fig. 3.11, panneau de droite).

- Pour des conditions pré-choc $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$, et $B_0 = 7 \mu\text{G}$: (1) il faut quelques

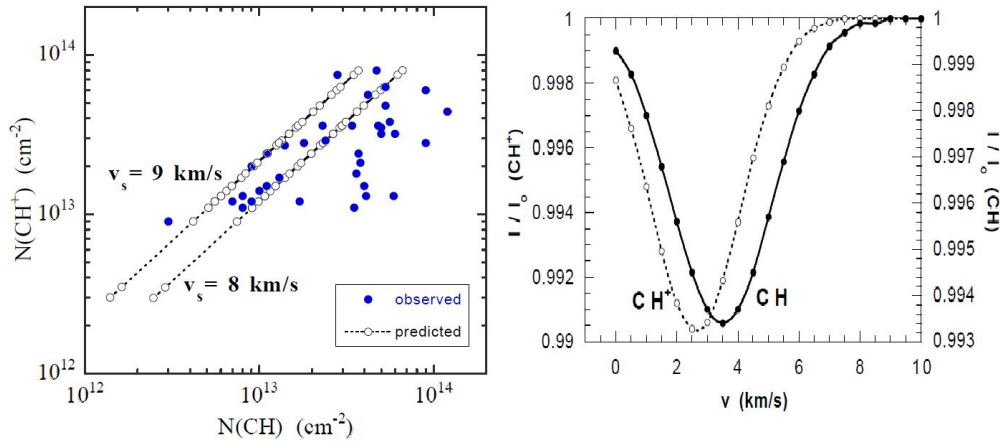


FIG. 3.11 – Panneau de gauche : densités de colonne (ronds pleins bleus) de CH et CH⁺ observées dans le MIS diffus par Gredel *et al.* (2002) et comparaison aux prédictions du modèle de choc (ronds vides) avec les paramètres $A_V = 0.1$ et $n_H = 20 \text{ cm}^{-3}$. Le long des 2 courbes, le nombre de chocs sur la ligne de visée varie. Panneau de droite : prédictions des profils en absorption de CH et CH⁺ produits dans un choc MHD de 8 km.s⁻¹ se propageant dans la direction de la ligne de visée.

dizaines de chocs disposés le long d'une ligne de visée de 15 mag d'extinction pour reproduire les densités de colonne observées de H_{2,J=3}^{*} au travers du disque Galactique (Falgarone *et al.* 2005, cf. Fig. 3.4); (2) $N(\text{H}_{2,J>3}^*)$ ne sont alors reproduites que pour $V_S > 8 \text{ km.s}^{-1}$.

Il semble donc que des chocs de faible vitesse soient nécessaires pour rendre compte des densités de colonne de CH⁺, CH, et H₂^{*} observées. Néanmoins, l'impact de tels chocs sur les densités de colonne d'autres molécules, comme HCO⁺, OH ou H₂O, n'a pas encore été étudié; tout comme les variations des prédictions sur l'espace des paramètres $\{n_H, B_0\}$ pour des chocs où $V_S < 10 \text{ km.s}^{-1}$. Il reste donc beaucoup d'analyses à réaliser pour déterminer l'influence des chocs MHD sur la thermochimie du milieu interstellaire diffus.

3.5 Conclusion

En conclusion, non seulement une large fraction de l'hydrogène atomique de la Galaxie semble être thermiquement instable, mais il existe de fortes fluctuations de la pression thermique dans le CNM (sur plus de 2 ordres de grandeur), 2 constats qui s'opposent clairement à la vision statique du milieu interstellaire. En outre, les analyses spectroscopiques des raies de transitions atomiques et moléculaires révèlent du gaz dont la richesse chimique et dont la dynamique (déduite des profils de raies) ne peuvent être expliquées dans le cadre des modèles PDR, c'est-à-dire en supposant que l'évolution thermique et chimique du MIS est dominée par le champ de rayonnement UV. Il est par contre envisageable que toutes ces caractéristiques proviennent de la dissipation de l'énergie suprathermique contenue dans la turbulence interstellaire. Dans les chapitres suivants, nous présenterons les principales propriétés de la turbulence, à

partir desquelles nous avons bâti le modèle TDR (Turbulent Dissipation Regions), qui constitue le coeur de cette thèse (cf. Chap. [7](#), [8](#) & [9](#)).

Deuxième partie

Dynamique d'un milieu turbulent Application au MIS

Chapitre 4

Propriétés générales de la turbulence

Sommaire

4.1	Caractérisation de la turbulence	97
4.1.1	Remarques	97
4.1.2	Définitions de la turbulence	98
4.1.3	Les hypothèses de travail	100
4.2	Deux approches complémentaires de la turbulence	100
4.2.1	Moyennes et viscosité turbulente	101
4.2.2	Approche spectrale	101
4.3	Conclusion	105

La notion d'écoulement turbulent est un domaine de recherche très vaste. Il serait donc trop ambitieux de vouloir tout décrire de manière exhaustive. C'est pourquoi, dans cette partie, nous nous bornons à présenter les résultats utiles à notre travail. Ce chapitre introductif se propose d'énoncer les propriétés générales de la turbulence, et avant tout les multiples descriptions possibles du problème posé. Quelques outils mathématiques nécessaires à l'étude des écoulements turbulents sont également introduits.

4.1 Caractérisation de la turbulence

4.1.1 Remarques

- Un écoulement *turbulent* est opposé à un écoulement *laminaire*. Dans ce dernier cas, deux expériences menées sur un même fluide avec des conditions initiales proches conduisent aux mêmes résultats en tout point de l'écoulement. Au contraire un écoulement turbulent est non prédictif. En effet, bien que deux expériences aux conditions initiales proches donnent des résultats statistiquement identiques, la connaissance de la vitesse en un point à un instant donné ne permet pas de connaître la vitesse en ce point un instant plus tard, ou alors au même instant mais à un autre endroit.

- La turbulence est caractérisée par des fluctuations importantes et apparemment aléatoires de la vitesse du fluide et des quantités physiques qui lui sont reliées (champ magnétique, température) en tout point de l'écoulement.
- La turbulence est contenue dans les équations de l'hydrodynamique ou de la magnétohydrodynamique, et dans l'équation de continuité (conservation de la masse). Tant que le libre parcours moyen des molécules reste petit devant la plus petite échelle de l'écoulement, on ne sort pas de leur domaine de validité.

4.1.2 Définitions de la turbulence

Définition via le nombre de Reynolds

Le nombre de Reynolds est obtenu à partir de l'équation de Navier-Stokes (cf. annexe B, Sect. B.1) qui régit la dynamique d'un écoulement incompressible. En évaluant le rapport entre le terme d'advection de la quantité de mouvement $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$ et son terme de diffusion $\nu\Delta\mathbf{u}$, on obtient le nombre sans dimension :

$$\text{Re} = \frac{u_l l}{\nu} \quad (4.1)$$

où l et u_l sont respectivement l'échelle considérée et la vitesse caractéristique de l'écoulement à cette échelle, et ν est la viscosité cinématique (cf. annexe B, Sect. B.2) qui contrôle la diffusion de la quantité de mouvement dans le fluide. Le nombre de Reynolds à l'échelle l est donc défini comme le rapport du temps caractéristique de diffusion visqueuse sur le temps caractéristique d'advection de la quantité de mouvement à l'échelle l .

Un écoulement est dit turbulent si le nombre de Reynolds à l'échelle intégrale L (qui est l'échelle d'injection de l'énergie cinétique dans le système) est grand. On appelle *turbulence développée* un écoulement avec $\text{Re} \geq 1000$. Ceci invite à réfléchir à la turbulence en terme d'échelles l ou de nombre d'onde $k = 2\pi/l$. A grand nombre de Reynolds, l'équation de conservation de la quantité de mouvement est dominée par le terme d'advection non linéaire $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$, qui a la propriété de "mélanger" les nombres d'onde. Ainsi l'énergie cinétique à grande échelle n'est pas diffusée mais uniquement transférée entre échelles par le terme d'advection. Une fois la microéchelle de Kolmogorov atteinte (pour laquelle $\text{Re} \sim 1$), le terme de diffusion $\nu\Delta\mathbf{u}$ devient comparable au terme d'advection, et la quantité de mouvement est diffusée.

Ainsi quand le nombre de Reynolds est grand, on observe une cascade turbulente, c'est-à-dire un transfert d'énergie sur un domaine de nombres d'onde k , appelé *domaine inertiel*.

Définition via le nombre de Reynolds minimum

Notons que le nombre de Reynolds hydrodynamique est une première manière de définir la turbulence. Cependant, il existe plusieurs définitions plus restrictives.

En effet, supposons que la viscosité cinématique ne soit pas la seule manière de diffuser, ou disons plutôt d'étaler la quantité de mouvement. Ce problème apparaît par exemple en magnétohydrodynamique (MHD) non idéale (les fluides neutre et ionisé sont découplés), où 2 termes supplémentaires sont à prendre en compte :

- le terme de diffusion magnétique ; et

- le terme de friction ion-neutre, souvent appelé *diffusion ambipolaire*.

Alors, si les temps de diffusion magnétique ou ambipolaire sont du même ordre que le temps caractéristique d'advection, l'écoulement n'est plus dominé par le terme $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$ des équations de la dynamique, il perd son domaine inertiel, et il n'y a plus de cascade turbulente. La plupart des propriétés citées dans la section précédente ne sont plus observées, comme par exemple les fluctuations spatio-temporelles importantes des grandeurs physiques.

Une autre définition à adopter serait donc : est turbulent tout écoulement pour lequel, à l'échelle intégrale, le processus dominant de diffusion de la quantité de mouvement a un temps caractéristique très supérieur au temps caractéristique d'advection.

En MHD non idéale, on définit ainsi deux nouveaux nombres sans dimension : le nombre de Reynolds magnétique

$$\text{Re}_m = \frac{c_A l}{\mu} \quad (4.2)$$

où $c_A = B/\sqrt{4\pi\rho}$ est la vitesse d'Alfvén (B est la valeur du champ magnétique qui dépend de l'échelle l), $\mu = c^2/(4\pi\sigma)$ est la diffusité magnétique (cf. annexe C), et σ est la conductivité qui vaut $1.2 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ dans le milieu interstellaire (Spitzer 1978); et le nombre de Reynolds de diffusion ambipolaire (Zweibel 2002)

$$\text{Re}_{AD} = \frac{4\pi\rho_i\rho_n\gamma u_l}{B^2} \quad (4.3)$$

où $\gamma = \langle\sigma u\rangle_{in}/(\mu_i + \mu_n)$, $\langle\sigma u\rangle_{in}$ est le taux de transfert de moment par collisions ion-neutre, et μ_i et μ_n sont les masses moléculaires moyennes des ions et des neutres (cf. annexe C).

Le premier s'obtient en évaluant le rapport entre le terme de transport des lignes de champ magnétique $\nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{u}_i)$ et leur terme de diffusion $\mu\nabla^2\mathbf{B}$, à partir de l'équation d'évolution du champ magnétique dans un milieu complètement ionisé (voir l'annexe C pour plus de détails). Le second s'obtient en écrivant l'équation d'évolution du champ magnétique dans un fluide partiellement ionisé, et en supposant d'une part que le champ magnétique est gelé dans le fluide ionisé (cf. annexe C), et d'autre part que la force de friction ion-neutre est égale à la force de Lorentz, si bien que la différence de vitesse entre les ions et les neutres est déterminée par les variations spatiales du champ magnétique : dans l'équation obtenue, le nombre de Reynolds ambipolaire est alors le rapport entre le terme de transport des lignes de champ magnétique $\nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{u}_n)$ dans le fluide neutre et leur terme de diffusion.

Une manière simple d'apprécier l'étendue du problème posé dans l'étude des écoulements turbulents est de considérer les différents nombres de Reynolds Re , Re_m et Re_{AD} comme des rapports d'échelles : entre l'échelle l (à laquelle ils sont évalués) et les échelles l_d , l_m et l_{AD} , pour lesquelles les différents processus de diffusion visqueuse, diffusité magnétique, et de diffusion ambipolaire dominant. La taille du domaine inertiel, et les processus qui dominant et contrôlent la cascade turbulente dépendent de ces grandeurs. Mais elles mêmes dépendent des fluctuations des champ de vitesse et magnétique à chaque échelle, ce qui les rend difficiles à évaluer. Toutefois, dans le cadre de la *turbulence développée de Kolmogorov* (théorie K41, Kolmogorov 1941), on obtient une expression simple de la longueur de dissipation visqueuse, la

microéchelle de Kolmogorov

$$l_d = K(\nu^3)^{1/4} \quad (4.4)$$

où $K = (l/u_l^3)^{1/4}$ est considéré comme constant quelle que soit l'échelle (voir le chapitre suivant).

Définition via la cascade turbulente

L'observation d'écoulements turbulents compressibles montre que l'énergie cinétique peut être transférée directement des grandes échelles vers les petites, sans passer par une cascade inertielle, par l'intermédiaire des chocs. Dans ce cas, c'est l'approche statistique, hypothèse de base des travaux sur la turbulence (voir les sections et le chapitre suivants), qui en souffre. Autrement dit une autre définition de la turbulence serait : est turbulent tout écoulement qui montre une cascade turbulente. Cette définition inclut la condition discutée dans la section précédente. Elle est néanmoins beaucoup plus restrictive, puisqu'il faut qu'il y ait transfert d'énergie cinétique entre toutes les échelles du domaine inertiel.

L'emploi du nombre de Reynolds hydrodynamique comme traceur de la turbulence est alors limité à un fluide neutre incompressible, et n'est donc qu'un indicateur dans le cas du milieu interstellaire.

4.1.3 Les hypothèses de travail

La turbulence étant caractérisée par de fortes fluctuations spatio-temporelles, l'approche la plus pertinente est l'approche statistique. On ne travaille plus sur les grandeurs, mais sur leur moyenne et leurs fluctuations autour de la moyenne.

La première hypothèse que l'on fera dans ce chapitre est de supposer la stationnarité. Ceci signifie que, bien que l'écoulement soit instable dans le détail, il est statistiquement stable. Autrement dit, bien que l'on soit incapable de prédire en détail les propriétés de l'écoulement, on peut prédire ses propriétés statistiques. La stationnarité de l'écoulement permet notamment de s'affranchir du choix entre la moyenne d'ensemble (sur un grand nombre d'expériences) et la moyenne temporelle.

En supposant également que les propriétés statistiques sont invariantes par translations spatiales, hypothèse d'homogénéité statistique, la moyenne ci-dessus peut également être obtenue en moyennant sur plusieurs régions de l'espace.

4.2 Deux approches complémentaires de la turbulence

Il existe 2 approches radicalement différentes pour appréhender les écoulements turbulents :

- La première consiste à s'intéresser aux comportements à grande échelle. C'est à dire, à dégager l'impact de la turbulence sur les valeurs moyennes des quantités physiques.
- La seconde consiste à regarder le comportement du système dans le détail, à toutes les échelles. Les valeurs moyennes sont alors ignorées et seules les fluctuations sont décrites.

Dans ce travail, nous nous intéressons à la seconde approche, et au comportement multi-échelle d'un écoulement turbulent. Toutefois il est utile de consacrer une petite section à la description du mouvement moyen dans un écoulement.

4.2.1 Moyennes et viscosité turbulente

À partir des hypothèses citées plus haut, on peut décomposer les quantités physiques en leur partie moyenne et leur partie fluctuante, par exemple \mathbf{U} et \mathbf{u} pour la vitesse, et réécrire alors les équations de conservation de la quantité de mouvement. Plaçons nous dans le cas hydrodynamique incompressible, on obtient (avec les conventions d'Einstein sur la sommation des indices) :

$$\frac{\partial U_i + u_i}{\partial t} + (U_j + u_j) \frac{\partial (U_i + u_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial (P + p)}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 (U_i + u_i)}{\partial x_j^2}. \quad (4.5)$$

En prenant la moyenne d'ensemble de cette équation, plusieurs termes disparaissent, et il vient

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j^2} \quad (4.6)$$

qui s'écrit encore, avec l'hypothèse d'incompressibilité ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$)

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i u_j}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j^2}. \quad (4.7)$$

Cette équation, appelée équation de Reynolds, décrit l'évolution de la vitesse moyenne U_i . Le terme $\rho \overline{u_i u_j}$ est le tenseur de Reynolds qui représente la rétroaction des fluctuations de vitesse sur l'écoulement moyen. Le calcul de ce tenseur de rang 2 est compliqué car il fait intervenir le tenseur de rang 3 $\rho \overline{u_i u_j u_k}$, qui lui même se calcule par le tenseur de rang 4, etc. Pour fermer le système d'équations, on introduit la viscosité turbulente ν_T (modèle de Boussinesq) définie par

$$-\rho \overline{u_i u_j} = -\rho \nu_T \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.8)$$

En réécrivant l'équation 4.7, on remarque alors que, dans ce modèle, la turbulence agit comme un terme supplémentaire de diffusion de la quantité de mouvement par augmentation de la friction des cellules fluides. Il existe d'autres manières de fermer le système (cf. Lesieur 1997), cependant cette approche n'est en général utilisée que dans le cas hydrodynamique incompressible. En MHD, et en turbulence compressible le nombre de termes *ouverts* (dont le calcul dépend de termes d'ordre supérieur) augmente, ce qui rend cette technique de fermeture assez limitée (puisque les résultats sont alors fortement dépendants du modèle adopté).

4.2.2 Approche spectrale

La turbulence est caractérisée par sa mémoire spatio-temporelle : les fluctuations d'un champ en un point et à un instant donné ne sont pas décorrélées de celles situées dans un certain voisinage. C'est pourquoi, s'intéresser aux comportements détaillés d'un fluide turbulent nécessite une description multipoints.

Comme nous le verrons dans le chapitre suivant l'approche spectrale consiste à analyser les champs dans l'espace de Fourier, afin de décire les mécanismes de contrôle de la cascade turbulente et prédire les interactions entre les nombres d'onde.

Dans les sections qui suivent, on introduit les outils mathématiques nécessaires. Par souci de simplicité, les raisonnements sont souvent appliqués au champ de vitesse, mais il peuvent être étendus à toute observable A , et en particulier au champ magnétique (normalisé à une vitesse) afin d'obtenir par exemple la densité spectrale d'énergie magnétique (dans le cas d'une turbulence MHD).

Autocorrélateur et spectre de puissance

Soit $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ un champ de vitesse de moyenne nulle d'un écoulement turbulent homogène. On définit le tenseur de corrélation des vitesses $C_{ij}(\mathbf{r})$:

$$C_{ij}(\mathbf{r}) = \langle u_i(\mathbf{x})u_j(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \rangle \quad (4.9)$$

qui ne dépend que des positions relatives séparées par \mathbf{r} et non des positions absolues dans le cas d'une turbulence homogène. Soit la transformée de Fourier du champ de vitesse $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k})$

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \iiint \mathbf{u}(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}d\mathbf{x}, \quad (4.10)$$

on définit le tenseur spectral du champ de vitesse $\Phi_{ij}(\mathbf{k})$ par la relation

$$\Phi_{ij}(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \iiint C_{ij}(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r}. \quad (4.11)$$

On définit enfin, avec ici encore les conventions d'Einstein, la densité spectrale d'énergie cinétique (ou spectre de puissance) $P(\mathbf{k})$

$$P(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\Phi_{ii}(\mathbf{k}) \quad (4.12)$$

et le spectre modal d'énergie cinétique $E(k)$

$$E(k) = \frac{1}{2} \iint \Phi_{ii}(k)dS(k) \quad (4.13)$$

où $S(k)$ est une sphère de rayon k dans l'espace de fourier et donc $dS(k) = 4\pi k^2 dk$. Dans le cas d'une turbulence isotrope, celui-ci vaut simplement :

$$E(k) = 2\pi k^2 \Phi_{ii}(k). \quad (4.14)$$

On a alors les relations suivantes :

$$P(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \langle \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k})\tilde{\mathbf{u}}^*(\mathbf{k}) \rangle \quad (4.15)$$

où $\tilde{\mathbf{u}}^*(\mathbf{k})$ est le complexe conjugué de $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k})$, et

$$\frac{1}{2}C_{ii}(\mathbf{0}) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \rangle = \iiint P(\mathbf{k})d\mathbf{k}. \quad (4.16)$$

La distribution de probabilité

Pour toute fonction aléatoire continue, on définit la fonction de distribution de probabilité (Probability Distribution Function, PDF) f telle que $f(X)dX$ soit la probabilité que la grandeur X soit comprise entre X et $X + dX$: avec $\int f(X)dX = 1$.

Les outils de base d'analyse des fonctions de distribution sont les moments statistiques (centrés ou non). Il est utile de rappeler ici ceux les plus utilisés :

$$\begin{aligned}
 \text{moyenne :} & & \langle X \rangle &= \int X f(X) dX \\
 \text{écart type :} & & \sigma &= \left(\int (X - \langle X \rangle)^2 f(X) dX \right)^{1/2} \\
 \text{coefficient d'assymétrie :} & & S &= \int \left(\frac{X - \langle X \rangle}{\sigma} \right)^3 f(X) dX \\
 \text{kurtosis :} & & K &= \int \left(\frac{X - \langle X \rangle}{\sigma} \right)^4 f(X) dX
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Notons que dans le cas d'une distribution gaussienne, $S = 0$ et $K = 3$.

Fonctions de structure

Par définition la fonction de structure d'ordre p d'une observable A est

$$S_p(l) = \langle |A(\mathbf{x} + \mathbf{l}) - A(\mathbf{x})|^p \rangle. \tag{4.18}$$

Appliquée au champ de vitesse elle s'écrit

$$S_p(l) = \langle |\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{l}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})|^p \rangle. \tag{4.19}$$

Les fonctions de structure sont des outils mathématiques de grande importance dans l'étude des écoulements turbulents, le but étant d'évaluer l'exposant ζ_p de la dépendance de S_p à l

$$S_p(l) \sim l^{\zeta_p} \tag{4.20}$$

de manière à décrire les fluctuations des grandeurs à toutes les échelles en fonction des propriétés de l'écoulement. Les incréments de vitesse, souvent utilisés en astrophysique, correspondent aux mesures de la fonction de structure d'ordre 1 du champ de vitesse.

Fonctions de transfert

Une dernière approche utile à l'analyse des écoulements turbulents consiste à décomposer les champs d'intérêt (scalaires ou vectoriels) en couches de nombre d'onde. Considérons par exemple un fluide incompressible partiellement ionisé et définissons les contributions spectrales \mathbf{u}_K et \mathbf{b}_K aux champs de vitesse et au champ magnétique d'une couche sphérique de nombres d'onde $K < |k| \leq K + 1$:

$$\mathbf{u}_K(\mathbf{x}) = \sum_{K < |k| \leq K+1} \tilde{\mathbf{u}}(k) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad \text{où} \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_K \mathbf{u}_K(\mathbf{x}) \tag{4.21}$$

$$\mathbf{b}_K(\mathbf{x}) = \sum_{K < |k| \leq K+1} \tilde{\mathbf{b}}(k) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad \text{où} \quad \mathbf{b}(\mathbf{x}) = \sum_K \mathbf{b}_K(\mathbf{x}) \tag{4.22}$$

où le champ magnétique \mathbf{b} est normalisé à une vitesse : $\mathbf{b} = \mathbf{B}/(4\pi\rho)^{1/2}$. Dans l'approximation de la MHD (magnétohydrodynamique) idéale, les fluides ionisés et neutres sont parfaitement couplés, et les équations de la dynamique qui régissent l'écoulement sont :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mu \nabla^2 \mathbf{b} \quad (4.24)$$

où ν , μ et \mathbf{f} sont respectivement les coefficients de viscosité cinématique et de diffusivité magnétique, et la force extérieure appliquée au fluide qui engendre la turbulence. On obtient alors les équations d'évolution des énergies cinétique et magnétique contenues dans la couche de nombre d'onde K , $E_u(K) = \iiint \mathbf{u}_K^2/2dx^3$ et $E_b(K) = \iiint \mathbf{b}_K^2/2dx^3$:

$$\frac{\partial E_u(K)}{\partial t} = \iiint \sum_Q [-\mathbf{u}_K \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{u}_Q + \mathbf{u}_K \cdot (\mathbf{b} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{b}_Q] - \nu |\nabla \mathbf{u}_K|^2 + \mathbf{f} \cdot \mathbf{u}_K \, dx^3 \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial E_b(K)}{\partial t} = \iiint \sum_Q [-\mathbf{b}_K \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{b}_Q + \mathbf{b}_K \cdot (\mathbf{b} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{u}_Q] - \mu |\nabla \mathbf{b}_K|^2 \, dx^3. \quad (4.26)$$

Ces deux équations font apparaître des termes qui mesurent le taux de transfert d'énergie entre les champs, depuis la couche de nombre d'onde Q dans la couche de nombre d'onde K , $\mathcal{T}_{uu}(Q, K)$, $\mathcal{T}_{bb}(Q, K)$, $\mathcal{T}_{bu}(Q, K)$ et $\mathcal{T}_{ub}(Q, K)$, que l'on appelle les fonctions de transfert :

$$\mathcal{T}_{uu}(Q, K) = - \iiint \mathbf{u}_K (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}_Q dx^3, \quad (4.27)$$

$$\mathcal{T}_{bb}(Q, K) = - \iiint \mathbf{b}_K (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{b}_Q dx^3, \quad (4.28)$$

$$\mathcal{T}_{bu}(Q, K) = + \iiint \mathbf{u}_K (\mathbf{b} \cdot \nabla) \mathbf{b}_Q dx^3, \quad (4.29)$$

$$\mathcal{T}_{ub}(Q, K) = + \iiint \mathbf{b}_K (\mathbf{b} \cdot \nabla) \mathbf{u}_Q dx^3. \quad (4.30)$$

Si $T_{\alpha\beta}(Q, K)$ est positif, alors, une quantité positive d'énergie est transférée de l'énergie du champ α contenue dans la couche Q à l'énergie du champ β contenue dans la couche K . Dans le cas contraire, le transfert se produit depuis la couche K vers la couche Q . Ces fonctions de transfert vérifient notamment

$$T_{\alpha\beta}(Q, K) = -T_{\beta\alpha}(K, Q), \quad (4.31)$$

et dans le cas d'un écoulement turbulent permanent, pour des couches de nombres d'onde Q et K en dehors de la zone de forçage (nombres d'onde impliqués dans la force extérieure \mathbf{f}) et appartenant également au domaine inertiel (les termes de diffusion peuvent alors être négligés) :

$$\sum_Q \langle T_{uu}(Q, K) + T_{bu}(Q, K) \rangle = 0 \quad (4.32)$$

$$\sum_Q \langle T_{ub}(Q, K) + T_{bb}(Q, K) \rangle = 0 \quad (4.33)$$

d'après les équations 4.25 & 4.26.

Les équations 4.27 - 4.30 ne donnent malheureusement pas le détail des transferts, en particulier quel est le nombre d'onde intermédiaire P , pour lequel les interactions entre les champs aux échelles Q et P d'une part, et P et K d'autre part, conduisent au transfert entre les couches Q et K . Pour faire cela, il faudrait étudier les termes tels que $\mathcal{T}_{uu}(Q|P, K) = \iiint \mathbf{u}_K (\mathbf{u}_P \cdot \nabla) \mathbf{u}_Q dx^3$ pour toutes les conjugaisons Q, P, K possibles, ce qui devient difficile pour des simulations numériques à haute résolution.

4.3 Conclusion

Ainsi, bien qu'il existe plusieurs manières de définir un écoulement turbulent, nous avons choisi ici d'adopter celle qui nous semble la plus adéquate ainsi que la plus restrictive, à savoir : est turbulent tout écoulement dont le processus dominant de diffusion de la quantité de mouvement a un temps caractéristique très supérieur au temps caractéristique d'advection, et qui montre un domaine inertiel et une cascade turbulente. Afin de réaliser des analyses spectrales et donc d'étudier la dynamique de l'écoulement en fonction de l'échelle et des conditions du fluide, de nombreux outils mathématiques sont nécessaires ; les plus utilisés étant les spectres de puissance, les fonctions de structures et les fonctions de transfert. Il en existe d'autres (comme la delta variance) mais nous nous sommes restreints ici à la présentation de ceux qui seront essentiels dans la compréhension des chapitres suivants.

Chapitre 5

Cascade turbulente : les lois d'échelles

Sommaire

5.1 Les invariants dans un fluide turbulent	107
5.1.1 Hydrodynamique incompressible	108
5.1.2 MHD incompressible	110
5.1.3 Le cas compressible	112
5.2 Intermittence	113
5.2.1 Autosimilarité et intermittence	113
5.2.2 Les traceurs de l'intermittence	114
5.2.3 Les modèles existants	115
5.3 Conclusion	118

C'est l'analyse phénoménologique qui conduit aux lois d'échelles décrivant le domaine inertiel de la cascade turbulente. Toutefois, deux propriétés limitent cette approche : (1) si les couplages restreints de l'hydrodynamique incompressible permettent de dériver un bon nombre de lois universelles, ce n'est pas le cas des couplages présents dans les écoulements turbulents MHD et/ou compressibles ; (2) l'une des caractéristiques intrinsèques de la turbulence est son intermittence spatio-temporelle caractérisée par des écarts aux lois d'échelles. Dans ce chapitre, nous introduisons tous ces concepts et donnons quelques résultats importants.

5.1 Les invariants dans un fluide turbulent

Les lois de conservation de certaines quantités physiques déterminent l'évolution d'un gaz, et toutes les propriétés dynamiques d'un milieu turbulent. Exprimées de manière locale elles donnent naissance aux équations d'évolution qui décrivent les transferts d'une cellule fluide à l'autre. Les annexes B & C donnent les détails de l'obtention des équations *locales*, en s'appuyant sur la théorie cinétique des gaz, la mécanique des fluides et les équations de Maxwell. C'est pourquoi, dans cette section, seuls les invariants globaux sont présentés, l'idée étant de décrire les mécanismes de contrôle de la cascade turbulente.

Ainsi, tout dérive des conservations de :

$$\begin{aligned}
 \text{la masse :} & \quad M = \iiint \rho dx^3 \\
 \text{la quantité de mouvement :} & \quad \mathbf{P} = \iiint \rho \mathbf{u} dx^3 \\
 \text{l'énergie :} & \quad E = \iiint e dx^3.
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

où ρ , \mathbf{u} et e sont respectivement la densité massique, la vitesse et la densité d'énergie du fluide. Et c'est uniquement au prix de certaines hypothèses supplémentaires que de nouveaux invariants apparaissent.

Comme on ne s'intéresse ici qu'à la cascade turbulente, on considère dans la suite un fluide parfait (non visqueux et non conducteur) : $\nu = \mu = 0$ (cf. Sect. B.2, annexe B). Ceci revient à étudier la turbulence dans la limite des nombres de Reynolds (hydrodynamique, magnétique, ambipolaire) très grands. Il est également intéressant de noter qu'un fluide parfait est nécessairement isentropique, c'est-à-dire sans échange de chaleur avec l'extérieur (par application du second principe de la thermodynamique¹).

5.1.1 Hydrodynamique incompressible

Il s'agit, et de loin, du cas le plus simple et le plus étudié par le passé. Les fonctions de transfert entre les différents modes et les différentes échelles sont grandement simplifiées, si bien qu'il est plus facile (mais pas facile !) d'étudier l'impact des invariants sur la dynamique de la cascade turbulente.

Invariants

Dans le cas d'un fluide parfait non ionisé, l'équation de conservation de l'énergie se réduit à la conservation de l'énergie cinétique du système². En ajoutant l'hypothèse d'incompressibilité, on obtient la conservation de l'énergie cinétique spécifique (en erg.g^{-1})

$$E = \frac{1}{2V} \iiint \mathbf{u}^2 dx^3 \tag{5.2}$$

où V est le volume occupé.

En prenant le rotationnel de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, et en utilisant l'incompressibilité, on obtient la loi de conservation de l'hélicité

$$H = \frac{1}{2V} \iiint \mathbf{u} \cdot \nabla \times \mathbf{u} dx^3 \tag{5.3}$$

où $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u}$ est la vorticité du fluide. Il a été proposé que la conservation de l'hélicité contrôle la cascade turbulente pour les grands nombres d'onde, c'est-à-dire aux petites échelles spatiales (Kurien *et al.* 2003).

¹Rappel du second principe : $\delta Q \leq T dS$ où δQ est la quantité d'énergie fournie au système par chauffage, T est la température, et dS est la variation d'entropie.

²Notons d'ailleurs, que dans ce cas idéal, la conservation de l'énergie découle alors simplement de la conservation de la quantité de mouvement.

Enfin, dans le cadre très restreint de la turbulence hydrodynamique incompressible 2D, on obtient, à partir de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, la conservation de l'enstrophie, définit comme

$$G = \frac{1}{2V} \iiint \omega^2 dx^3. \quad (5.4)$$

C'est cette propriété qui induit une cascade inverse en turbulence 2D : l'absence de l'étirement de la vorticit   $\omega \cdot \nabla \mathbf{u}$ dans son   quation d'  volution (cf.   quation 7.3, Sect. 7.1) conduit    des fusions de vortex vers des structures de plus grandes tailles, et non pas    leur d  stabilisation en structures de plus petites tailles.

Lois d'  chelles. Turbulence de Kolmogorov

Malheureusement, il n'existe encore aucune th  orie d  crivant en d  tail les transferts des quantit  s physiques au cours de la cascade turbulente, avec comme point de d  part unique l'  quation de Navier-Stokes et les conditions aux limites. Il est cependant possible d'obtenir quelques pr  dictions, moyennant des hypoth  ses suppl  mentaires.

Le mod  le de Kolmogorov (1941), d  veloppement de la description ph  nomologique de Richardson (1922) est fond   sur les trois hypoth  ses suivantes.

1. Tout d'abord l'  coulement est   tudi   loin des sources de la turbulence, si bien que les sym  tries de l'  quation de Navier-Stokes sont r  tablies aux   chelles inertielles.
2. L'invariance d'  chelle est   galement suppos  e. Autrement dit l'  coulement est autosimilaire dans le domaine inertiel. Ceci signifie que, pour une certaine gamme d'  chelles, les propri  t  s statistiques de l'  coulement sont ind  pendantes de l'  chelle. Cette hypoth  se est appel  e l'hypoth  se d'autosimilarit   de l'  coulement.
3. Enfin, on suppose que les interactions sont locales, c'est-  -dire que la densit   spectrale d'  nergie    l'  chelle l ne d  pend que des   chelles voisines, ou que les transferts non lin  aires ne se font qu'entre k (nombres d'onde) voisins.

Ces trois hypoth  ses conduisent ainsi aux lois d'  chelles bien connues de la turbulence hydrodynamique incompressible isotrope, que l'on peut d  river    partir d'une analyse dimensionnelle, ou en suivant l'approche plus rigoureuse de Frisch (1995). Ici, on se contente d'en faire un r  sum  . Soit u_l la vitesse caract  ristique de l'  coulement    l'  chelle l , τ_l le temps de retournement, ϵ le taux de transfert (depuis l'  chelle l) d'  nergie cin  tique sp  cifique, ε le taux de transfert de la densit   d'  nergie cin  tique, $E(k)$ le spectre modal d'  nergie cin  tique, $P(k)$ son spectre de puissance et $S_p^u(l)$ les fonctions de structures d'ordre p du champ de vitesse, on a :

$$\begin{aligned}
\tau_l &\sim l/u_l && \text{s}^{-1} \\
\epsilon &\sim u_l^3/l && \text{erg.g}^{-1}.\text{s}^{-1} \quad (\text{indépendant de } l) \\
\varepsilon &\sim \rho u_l^3/l && \text{erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1} \quad (\text{indépendant de } l) \\
S_2^{\mathbf{u}}(l) &= C_1 \epsilon^{2/3} l^{2/3} && \text{cm}^{-2}.\text{s}^{-2} \\
S_3^{\mathbf{u}}(l) &= \frac{4}{5} \epsilon l && \text{cm}^{-3}.\text{s}^{-3} \\
S_p^{\mathbf{u}}(l) &= C_p \epsilon^{p/3} l^{p/3} && \text{cm}^{-p}.\text{s}^{-p} \quad (C_p \text{ constants}) \\
E(k) &= E(l) \frac{dl}{dk} = E(l) l^2 = C_K \epsilon^{2/3} k^{-5/3} && \text{erg.cm.g}^{-1} \quad (C_K = 1.62 \text{ constante universelle}) \\
P(k) &= \frac{E(k)}{4\pi k^2} = \frac{C_K}{4\pi} \epsilon^{2/3} k^{-11/3} && \text{erg.cm}^3.\text{g}^{-1}.
\end{aligned} \tag{5.5}$$

On reconnaît ci-dessus, la loi des 4/5 de Kolmogorov, ainsi que le spectre modal en $k^{-5/3}$, deux lois qui ont été vérifiées expérimentalement depuis 70 ans.

5.1.2 MHD incompressible

Il y a plusieurs raisons qui font que l'étude de la turbulence MHD incompressible est bien plus compliquée que le cas précédent.

Tout d'abord, d'un point de vue phénoménologique, la turbulence MHD se distingue car :

- dans le cas HD incompressible, le champ de vitesse moyen n'a aucune influence sur la dynamique des petites échelles, et ce parce qu'il est possible de trouver une transformation galiléenne pour que ce champ s'annule ; ce raisonnement n'est pas applicable pour le champ magnétique moyen qui, de fait, est de grande importance pour la dynamique de toutes les échelles ;
- le champ magnétique moyen influençant la dynamique de toutes les échelles, la turbulence MHD est par nature anisotrope ; de ce fait, les symétries considérées plus haut ne sont plus applicables et le problème est souvent décomposé selon les directions parallèle et orthogonale au champ moyen.

Ensuite, d'un point de vue pratique, l'étude de la turbulence MHD nécessite de prendre en compte les différents transferts d'énergie qui peuvent se produire, c'est-à-dire, d'analyser toutes les fonctions de transfert $\mathcal{J}_{uu}(Q, K)$, $\mathcal{J}_{bb}(Q, K)$, $\mathcal{J}_{bu}(Q, K)$ et $\mathcal{J}_{ub}(Q, K)$ entre les différents champs et nombres d'onde Q et K (voir le chapitre précédent). Le champ d'investigation est donc bien plus grand. Le fait que le champ magnétique global influe sur la dynamique à chaque échelle induit des interactions et transferts entre des échelles très éloignées les unes des autres, comme le montre la Fig. 5.1 (Alexakis *et al.* 2005).

Bien que le travail présenté dans cette thèse fasse complètement abstraction de ces différents problèmes, il est utile de dire 2 mots sur le sujet, notamment pour souligner nos propres limitations.

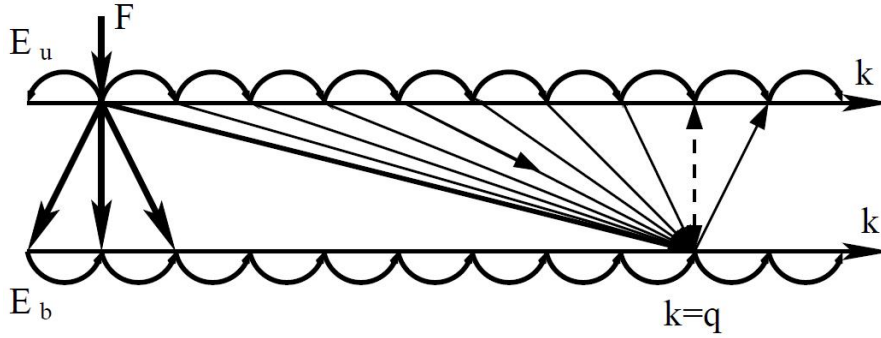


FIG. 5.1 – Schéma des fonctions de transfert d'énergie entre les champs (de vitesse et magnétique) et entre les échelles (Alexakis *et al.* 2005). L'épaisseur des traits indique l'importance du transfert (qui correspond à un taux d'énergie). Pour plus de détails, voir les définitions des grandeurs dans la Sect. 4.2.

Invariants

Ici, la conservation de l'énergie revient à la conservation de la somme de l'énergie cinétique et magnétique. Avec l'hypothèse d'incompressibilité, la quantité conservée est tout de même simplifiée à

$$E = \frac{1}{2V} \iiint (\mathbf{u}^2 + \mathbf{b}^2) dx^3. \quad (5.6)$$

où \mathbf{b} est le champ magnétique normalisé à une vitesse $\mathbf{b} = \mathbf{B}/(4\pi\rho)^{1/2}$.

Deux nouvelles grandeurs sont également conservées dans le cadre de la MHD incompressible (pour des raisons topologiques, voir par exemple les démonstrations de Yahalom & Lynden-Bell, 2007) : l'hélicité magnétique

$$H_M = \frac{1}{2V} \iiint (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) dx^3 \quad (5.7)$$

où \mathbf{a} est le potentiel vecteur du champ magnétique $\mathbf{b} = \nabla \times \mathbf{a}$, et la cross hélicité

$$H_{CM} = \frac{1}{2V} \iiint (\mathbf{u} \cdot \mathbf{b}) dx^3. \quad (5.8)$$

Bien que l'impact de ces nouvelles lois de conservation sur la dynamique et sur la cascade turbulente soit incertain et constitue encore aujourd'hui un sujet de recherche actif, il a été montré que l'hélicité magnétique obéit à une cascade inverse depuis les petites jusqu'aux grandes échelles. Concrètement, un forçage hélicoïdal à petite échelle peut engendrer un champ magnétique à grande échelle. Ceci est de grande importance en ce qui concerne l'effet dynamo (Mininni *et al.* 2005).

De plus, sans hélicité le transfert d'énergie (entre tous les modes, cinétique et magnétique) se fait de manière directe (vers les petites échelles), tandis qu'avec les hélicités cinétique et magnétique, ce transfert peut s'opérer en sens indirect. Ce sujet passionnant, notamment en ce qui concerne la rétroaction des petites échelles sur l'écoulement à grandes échelles est au coeur des multiples travaux de Alexakis, Mininni et Pouquet (2007 et références incluses).

Lois d'échelles

La turbulence MHD peut être vue comme le résultat d'interactions de paquets d'onde d'Alfvén se propageant dans des directions opposées (Kraichnan 1965).

Du fait de l'anisotropie inhérente au problème, on considère souvent une échelle λ parallèle au champ magnétique moyen, et une échelle l qui lui est perpendiculaire, de nombres d'onde associés k_{\parallel} et k_{\perp} . Les hypothèses adoptées sont alors les suivantes.

- Il y a équipartition entre énergie cinétique et magnétique³.
- Les échelle inertielles peuvent être entièrement décrites en se focalisant uniquement sur l'échelle perpendiculaire l .
- À l'instar de la turbulence de Kolmogorov, le taux de transfert d'énergie spécifique est considéré comme indépendant de l'échelle.
- Les interactions entre paquets d'onde d'Alfvén sont locales (dans l'espace de Fourier).

On distingue alors deux cas : celui où les interactions sont faibles, et celui où elles sont fortes (voir Goldreich & Sridhar, 1997 pour des explications plus détaillées). Dans le cas des interactions faibles, la cascade d'énergie le long de lignes de champ magnétique moyen est interdite. La vitesse parallèle et la dépendance du spectre de puissance aux nombres d'ondes parallèles sont dominés par les processus d'injection, quels qu'ils soient. Dans le cas d'interaction fortes, la cascade parallèle est autorisée. Il existe de nombreuses prédictions quant au spectre de puissance résultant en fonction du type de turbulence MHD. Ci-dessous sont listés quelques résultats :

	type de turbulence	référence	
$E(k) \sim k^{-3/2}$	isotrope	Kraichnan (1965)	
$E(k) \sim k_{\perp}^{-5/3}$	anisotrope forte	Goldreich & Sridhar (1997)	(5.9)
$E(k) \sim k_{\perp}^{-2}$	anisotrope faible	Galtier <i>et al.</i> (2000)	

Contrairement à la turbulence HD incompressible, il est fort possible qu'il n'existe aucune loi d'échelle universelle pour la turbulence MHD incompressible (Alexakis *et al.* 2007).

5.1.3 Le cas compressible

La turbulence compressible est bien plus difficile à décrire : d'une part le nombre d'invariants globaux se restreint à la masse, la quantité de mouvement et l'énergie totale du système ; d'autre part, les champs et les interactions à prendre en compte se multiplient. En effet, il est désormais nécessaire d'estimer simultanément les champs de vitesse, magnétique, de pression et de température contrairement à la turbulence incompressible où seuls les champs de vitesse et magnétique importent.

De plus, alors que tout écoulement qui se produit dans un fluide incompressible est nécessairement incompressible, la réciproque est fautive, c'est-à-dire qu'un fluide compressible peut être le témoin d'écoulements compressibles et/ou incompressibles (considérons l'atmosphère par exemple). Ainsi, pour bien cerner le sujet, il faut non

³Cette hypothèse vient de ce que l'on traite la turbulence comme des interactions de paquets d'onde d'Alfvén qui vérifient : $\delta \mathbf{u} = \pm \delta \mathbf{b}$ où $\delta \mathbf{u}$ et $\delta \mathbf{b}$ sont des perturbations des champs de vitesse et magnétique.

seulement s'intéresser au transfert d'énergie entre échelles mais également au couplage entre les modes compressibles et incompressibles.

Une approche possible est l'utilisation de la décomposition de Hodge Helmholtz⁴ dans les simulations numériques, qui permet d'exprimer le champ de vitesse \mathbf{u} comme la somme d'un champ compressible et d'un champ solénoïdal, respectivement \mathbf{u}_c et \mathbf{u}_s , qui vérifient $\nabla \times \mathbf{u}_c = 0$ et $\nabla \cdot \mathbf{u}_s = 0$. En turbulence compressible 3D, on observe ainsi des chocs et des ondes de raréfaction, mais aussi des structures de type vortex ou cisaillement.

Il existe certains termes dans les équations d'évolution de la vorticit  $\nabla \times \mathbf{u}$ et de la dilatation $\nabla \cdot \mathbf{u}$ qui couplent ces 2 modes. Vázquez-Semadeni *et al.* (1996) dérivent l'équation d'évolution de la dilatation dans le cas d'un fluide barotrope⁵ et obtiennent un terme de production proportionnel au carré de la vorticit . En dérivant l'équation d'évolution de la vorticit  potentielle $(\nabla \times \mathbf{u})/\rho$, ils obtiennent également le terme de production de vorticit  baroclinique, proportionnel à $\nabla P \times \nabla(1/\rho)$: ce terme induit un transfert des modes compressibles en modes solénoïdaux quand les gradients de pression et de densit  sont non alignés (par exemple dans un choc oblique).

5.2 Intermittence

Pour d crire cette propri t  essentielle des fluides turbulents, plaçons nous dans le cadre restreint de la turbulence hydrodynamique incompressible isotrope. Comme on l'a vu, l'hypoth se fondamentale   l'origine des lois de Kolmogorov est l'autosimilarit  du champ de vitesse dans le domaine inertiel. En r alit , comme le montrent de nombreuses exp riences, cette hypoth se n'est pas v rifi e : Landau & Lifshitz d s 1959, et Kolmogorov 2 ans plus tard, postul rent qu'une propri t  essentielle de la turbulence est son intermittence spatio-temporelle : celle-ci se traduit par des variations (dans l'espace et le temps) du taux de transfert d' nergie cin tique en fonction de l' chelle consid r e.

5.2.1 Autosimilarit  et intermittence

La Fig. 5.2 montre la diff rence entre ces 2 concepts. Alors qu'une fonction (de variable x) autosimilaire (illustr e ici par le mouvement brownien) a les m mes propri t s statistiques   toutes les  chelles, quelle que soit la portion de x consid r e, une fonction intermittente (illustr e par la fonction *escalier de Cantor*, aussi appel e *escalier du diable*) a des aspects tr s diff rents, en fonction de l' chelle, mais  galement en fonction de la portion choisie !

En turbulence, l' cart   l'autosimilarit  peut  tre vu, g om triquement, comme un ensemble de tourbillons, de diff rentes tailles, qui ne remplissent pas l'espace de la m me mani re en fonction de l' chelle.

Aux petites  chelles, l'intermittence se manifeste par l'apparition de structures coh rentes filamenteuses de forte vorticit  enchev tr es les unes dans les autres. Leur

⁴En pratique le moyen simple d'y parvenir est de calculer dans l'espace de Fourier les 2 quantit s $\mathbf{u}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k}$ et $\mathbf{u}(\mathbf{k}) \times \mathbf{k}$.

⁵Dans un fluide barotrope, les surfaces isobares correspondent  galement aux surfaces de m mes densit s.

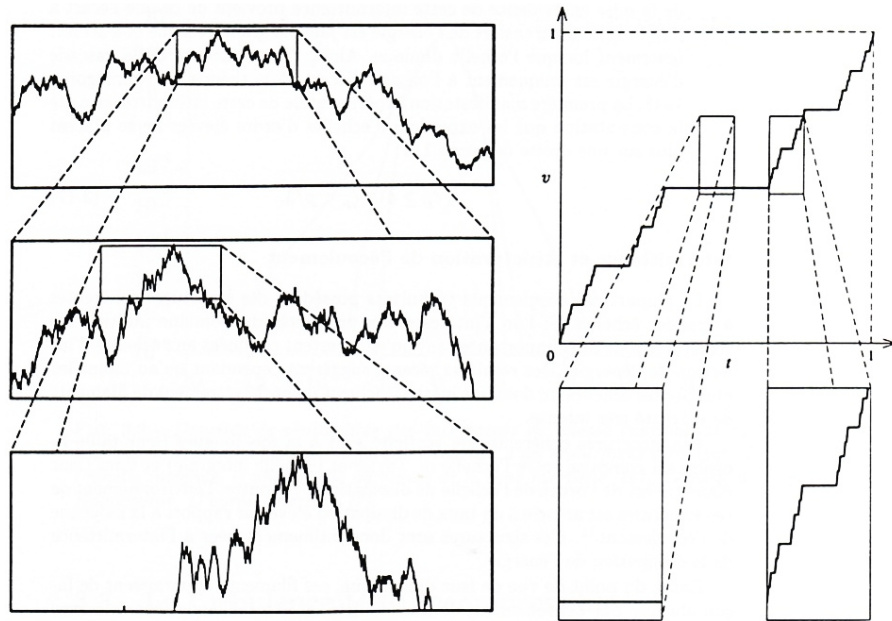


FIG. 5.2 – Exemples d'une fonction autosimilaire (gauche), le mouvement brownien, et d'une fonction intermittente (droite), *l'escalier du diable* (Frisch 1995).

diamètre descend jusqu'à la micro-échelle de Kolmogorov, tandis que leur longueur est comprise entre l'échelle de Taylor et l'échelle intégrale (Douady *et al.* 1991).

5.2.2 Les traceurs de l'intermittence

Variations spatio-temporelles

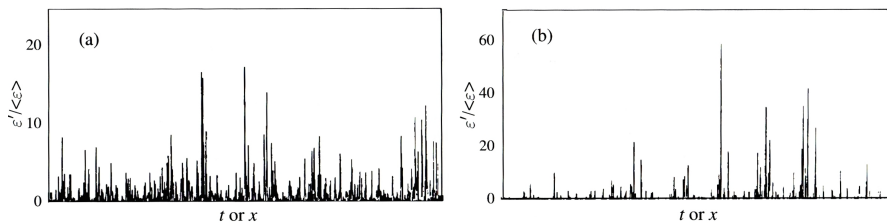


FIG. 5.3 – mesures du signal *représentatif* de la dissipation locale, $(\partial u/\partial t)^2$ en fonction du temps, pour deux écoulements : en laboratoire (a) et dans l'atmosphère (b) (Meneveau & Sreenivasan 1991).

L'un des traceurs de l'intermittence est le taux de transfert d'énergie cinétique en chaleur, appelé encore le taux de dissipation d'énergie cinétique. Celui-ci se mesure à petite échelle, et vaut, dans le cadre de la turbulence incompressible :

$$\varepsilon_d = \frac{\eta}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 = \frac{\eta}{2} \langle \omega^2 \rangle. \quad (5.10)$$

Selon la théorie de Kolmogorov, ce taux devrait être constant dans l'espace et le temps, et égal au taux de transfert d'énergie cinétique d'échelle en échelle. Pourtant les mesures expérimentales montrent que cette quantité est hautement intermittente. Ceci est illustré par la Fig. 5.3 qui montre les variations mesurées de $(\partial u / \partial t)^2$ (pour 2 écoulements), normalisées à la valeur moyenne (Meneveau & Sreenivasan 1991). L'intermittence dans un fluide turbulent est donc caractérisée, à petite échelle, par des bouffées spatio-temporelles de dissipation.

Ailes non-gaussiennes dans les PDF d'incrément de vitesse

Un résultat important obtenu par Kolmogorov concerne les fonctions de structures d'ordre p calculées sur le champ de vitesse. Dans le cadre de la théorie K41, celles-ci s'écrivent simplement

$$S_p^u(l) \sim l^{\zeta_p} \text{ avec } \zeta_p = \frac{p}{3}. \quad (5.11)$$

La Fig. 5.4 (panneau a) montre une compilation de mesures expérimentales de ces exposants (voir Frisch 1995 pour les références). Mis à part les triangles vides, qui correspondent à des mesures avec un fort biais statistique, et peuvent donc être écartées pour $p > 4$, on remarque que : non seulement les données expérimentales indépendantes sont en excellent accord les unes avec les autres, mais il existe aussi un écart entre ces mesures et les prédictions du modèle K41

$$\zeta_p < \frac{p}{3} \text{ pour } p \geq 4. \quad (5.12)$$

En outre, cet écart augmente avec p , et il semble clair, que les exposants des fonctions de structures ne suivent pas une loi linéaire. Ceci est une propriété forte de l'intermittence, qui a été confirmée par de nombreuses expériences.

Comme on le voit sur la Fig. 5.4 (panneau de droite), ce résultat sur les exposants des fonctions de structure se traduit par l'existence d'ailes non gaussiennes dans les PDFs d'incrément de vitesse (rappel : $S_1^u(l)$, cf. Chap. 4), associées à des fluctuations de grande amplitude. On remarque également que ces ailes non gaussiennes sont d'autant plus marquées qu'elles sont mesurées pour des petites distances l : l'intermittence augmente vers les petites échelles.

5.2.3 Les modèles existants

Il existe de nombreuses théories tenant compte de la nature intermittente de la turbulence, tel que le modèle de She & Levêque (1994), chacune ayant pour but premier de reproduire les mesures expérimentales des exposants des fonctions de structure. Seuls le β -modèle et le modèle multifractal seront présentés dans la suite. Les concepts introduits ici sont, en effet, largement suffisants pour appréhender les mesures réalisées dans le milieu interstellaire ainsi que l'approche adoptée dans la partie III.

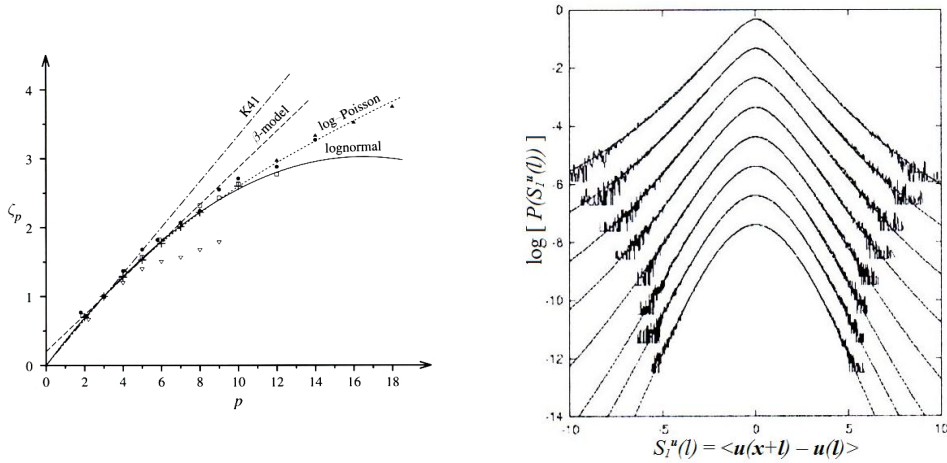


Fig. 5.4 – Panneau de gauche : exposants ζ_p des fonctions de structure en fonction de p (Frisch 1995). Panneau de droite : exemple de PDFs d'incrément de vitesse pour différentes valeurs de l , les ailes non gaussiennes étant de plus en plus marquées quand l diminue.

Le β -modèle

Il existe une manière simple de modifier la phénoménologie de la cascade de Richardson pour y incorporer l'intermittence. Frisch *et al.* (1978) supposent qu'à chaque échelle l , la fraction du volume occupé par les structures turbulentes de taille caractéristique rl (par exemple des rouleaux) décroît d'un facteur constant β . Ainsi, les échelles sont discrétisées : à chaque échelle $l = r^i L$ (L étant l'échelle intégrale), les structures issues de l'échelle $r^{i-1} L$ ne remplissent qu'une fraction β^i du volume total. Ce principe est exposé en Fig. 5.5 (panneau de gauche), mais à part cela, rien n'est modifié dans la cascade de Kolmogorov. On obtient alors la fraction du volume p_l occupée par les structures

$$p_l = \beta^i = \beta^{\frac{\ln(l/L)}{\ln(r)}} = \left(\frac{l}{L}\right)^{\frac{\ln(\beta)}{\ln(r)}} = \left(\frac{l}{L}\right)^{3-D} \quad (5.13)$$

où D est la dimension fractale de la cascade turbulente⁶. La Fig. 5.5 (panneau de droite) montre la dimension fractale obtenue pour des structures de type *tube* et de type *plan*.

En ce qui concerne la cascade d'énergie cinétique spécifique, on obtient alors les

⁶ $N = (L/l)^D$ objets sont nécessaires pour recouvrir un espace L de dimension fractale D . À 3 dimension, la fraction du volume occupée par les objets de dimension l est donc $Nl^3/L^3 = (l/L)^{3-D}$.

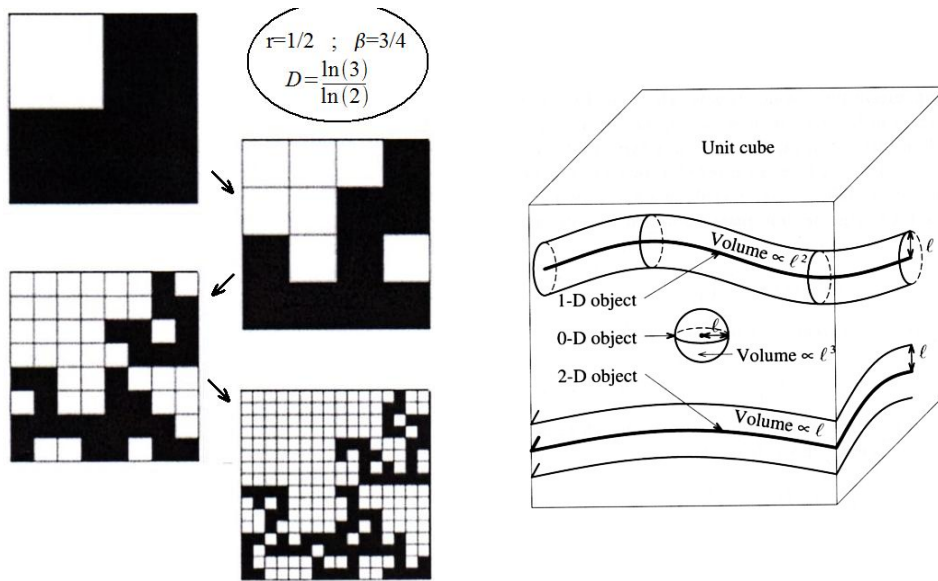


FIG. 5.5 – Panneau de gauche : exemple de cascade fractale pour $\beta = 3/4$. Panneau de droite : la probabilité qu'un élément de volume l^3 soit compris dans un objet de dimension D est l^{3-D} (tirée de Frisch 1995).

résultats suivants

$$\begin{aligned}
 E(l) &\sim u_l^2 \left(\frac{l}{L}\right)^{3-D} \\
 \epsilon &\sim \frac{u_l^3}{l} \left(\frac{l}{L}\right)^{3-D} = \frac{u_L^3}{L} \\
 u_l &\sim u_L \left(\frac{l}{L}\right)^{\frac{1}{3} - \frac{3-D}{3}} \\
 S_p^u(l) &\sim u_L^p \left(\frac{l}{L}\right)^{\frac{p}{3} + (3-D)(1-\frac{p}{3})} \\
 E(k) &\sim k^{-\left(\frac{5}{3} + \frac{3-D}{3}\right)}
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

Le taux de transfert d'énergie cinétique spécifique ϵ est conservé en moyenne, et ne dépend donc pas de l'échelle, mais ses fluctuations *locales* peuvent être très importantes. On remarque également que le spectre de puissance est plus raide que celui prédit par Kolmogorov. Enfin, il est intéressant de noter que ce modèle nécessite certaines améliorations, puisqu'il prédit une dépendance linéaire de ζ_p en p , ce qui est contraire aux observations (cf. Fig. 5.4).

Le modèle multifractal

Le modèle multifractal est une généralisation du β -modèle, en considérant que la cascade s'effectue vers plusieurs espaces et non pas vers un seul. On obtient ainsi des courbures successives de la fonction ζ_p en fonction de p . Habituellement, le modèle bifractal est présenté en premier pour fixer les idées et montrer qu'un tel modèle induit un changement de pente unique dans la fonction ζ_p . Ici on saute cette étape (voir Frisch 1995 pour une description du modèle bifractal).

L'aspect *courbe* de la fonction ζ_p invite à considérer une infinité continue d'exposants d'échelle h des incréments de vitesse, et non pas 1 (β -modèle) ou 2 (modèle bifractal). En fait, dans le modèle multifractal, tous les exposants sont permis, avec l'hypothèse : pour tout h , il existe un espace \mathcal{H} de dimension fractale $D(h)$ pour lequel, si $\mathbf{r} \in \mathcal{H}$:

$$\frac{\delta u_l(\mathbf{r})}{u_L} \sim \left(\frac{l}{L}\right)^h \quad (5.15)$$

où δu_l est l'incrément de vitesse pour l'espacement l . La fonction de structure d'ordre p est alors obtenue en sommant les contributions de différentes lois d'échelles, chacune étant multipliée par la probabilité $(l/L)^{3-D(h)}$ que l'élément de volume l^3 soit contenu dans l'espace \mathcal{H} , soit

$$\frac{\langle \delta S_p^u(l) \rangle}{u_L^p} = \frac{\langle \delta u_l^p(\mathbf{r}) \rangle}{u_L^p} \sim \int_h d\mu(h) \left(\frac{l}{L}\right)^{ph+3-D(h)} \quad (5.16)$$

où $d\mu(h)$ est le poids de chacun des exposants. Dans le domaine inertiel $l \ll L$, on comprend bien que seul le plus petit exposant domine, si bien que l'expression de ζ_p en fonction de p se réduit à

$$\zeta_p = \inf_h [ph + 3 - D(h)] \quad (5.17)$$

Ainsi la connaissance de la fonction $D(h)$ permet d'obtenir les lois d'échelles des fonctions de structure.

Bien que les prédictions de cette théorie concernant ζ_p soient en excellent accord avec l'expérience, son défaut majeur est qu'elle ne rend pas compte des structures cohérentes observées, telles que les vortex.

5.3 Conclusion

En résumé, en fonction des conditions du fluide et de la nature de l'écoulement, les analyses phénoménologiques de la turbulence permettent de décrire les spectres de puissance dans le domaine inertiel. Mais bien que des lois universelles soient obtenues pour des écoulements HD incompressibles, telles que la loi des 4/5 de Kolmogorov, il n'en va pas de même en ce qui concerne les écoulements MHD incompressibles et les écoulements compressibles. En outre, une propriété essentielle de la turbulence est son intermittence spatio-temporelle qui se manifeste par des écarts (mesurés expérimentalement) aux lois d'échelle issues de l'analyse phénoménologique ; les traceurs les plus utilisés étant les exposants des fonctions de structures d'ordre p pour $p \geq 4$. Et il n'existe pour l'instant aucun modèle qui prédise à la fois les propriétés multi-échelle (les valeurs observées des lois d'échelles) de l'écoulement, et ses propriétés dynamiques, notamment la formation de structures cohérentes à petites échelles.

Tous ces résultats et remarques soulèvent de nombreuses questions concernant la dynamique du milieu interstellaire. Celui-ci est-il turbulent ? D'où vient le forçage et quelle est la quantité d'énergie mécanique injectée dans le gaz ? Quelle est la nature de la turbulence et donc quelles sont les lois qui gouvernent le transfert d'énergie dans le domaine inertiel ? Et enfin, le MIS montre-t-il des signes de l'intermittence. Nous aborderons ces questions dans le chapitre qui suit.

Chapitre 6

Turbulence dans le MIS

Sommaire

6.1	Introduction	119
6.2	Les sources d'énergie turbulente	120
6.2.1	De grandes inconnues	120
6.2.2	Explosions de supernovae	120
6.2.3	La rotation différentielle de la Galaxie	122
6.2.4	Les flots bipolaires	122
6.3	Observations de la turbulence et de l'intermittence	123
6.3.1	Quelques grandeurs utiles	123
6.3.2	Les lois d'échelles dans le gaz	125
6.3.3	Les incréments des centroïdes de vitesse	129
6.4	Prédictions des simulations numériques	130
6.4.1	Principes et définitions	130
6.4.2	Quelques résultats	131
6.5	Conclusions	133

6.1 Introduction

La nature turbulente du milieu interstellaire est encore largement discutée dans la communauté scientifique. Et pour cause, après 60 ans de débat, il n'existe encore aucune preuve irréfutable. Les partisans d'un MIS turbulent s'appuient sur une somme d'indices qui devient de plus en plus conséquente avec le temps. Citons par exemple les découvertes des lois d'échelles dans les différentes phases du MIS (Larson 1981, Crovisier & Dickey 1983) et l'observation de la structure filamentaire du milieu diffus (Low *et al.* 1984, observations à 100 μm avec le satellite IRAS). Depuis les traceurs se sont multipliés, en faveur d'un gaz dont la structure hiérarchique provient de l'interaction d'ondes de choc et de mouvements turbulents supersoniques couplés au champ magnétique Galactique.

Comme présenté dans la partie I, l'idée d'un MIS turbulent est opposée à celle d'un gaz composé de différentes phases en équilibre de pression thermique, sans grande interaction les unes avec les autres, et en simple mouvement ballistique. De nos jours, cette vision du MIS s'appuie notamment sur les observations du gaz moléculaire :

celui-ci s'organise en structures hiérarchiques, depuis les complexes géants jusqu'aux coeurs denses, chaque entité vérifiant l'équilibre du viriel $GM/R \sim \sigma^2$, où σ est la dispersion de vitesse interne des nuages. Notons malgré tout qu'il s'agit d'un argument en faveur d'une dynamique indépendante de la turbulence, et non pas à l'encontre de la nature turbulente du MIS.

Dans ce chapitre, on s'intéresse aux sources probables d'injection d'énergie mécanique dans le MIS, ainsi qu'à leurs échelles associées. Seront présentées également les observations les plus connues (et les plus utiles pour mon travail) en faveur de la turbulence du milieu interstellaire. Il existe de nombreuses revues sur le sujet, mais ce chapitre s'inspire principalement des travaux de Falgarone *et al.* (2003), Mac Low & Klessen (2004), Elmegreen & Scalo (2004) et Scalo & Elmegreen (2004).

6.2 Les sources d'énergie turbulente

6.2.1 De grandes inconnues

Les échelles d'injection et surtout les processus physiques par lesquels l'énergie cinétique est transférée en énergie turbulente sont encore mal connus¹. La difficulté provient du fait que la distribution des sources d'injection de l'énergie turbulente est hautement hétérogène dans l'espace et dans le temps, tout comme l'est celle du gaz. En général, deux sources principales sont invoquées : les supernovae et la rotation différentielle de la galaxie. Mais il y a de nombreux autres processus physiques qui peuvent engendrer de la turbulence : les vents d'étoiles O et de protoétoiles, les régions HII en expansion, les chocs dans les bras spiraux dûs à la rotation de la galaxie, les instabilités de la mécanique des fluides dans le gaz (telles que l'instabilité Kelvin-Helmholtz), les interactions entre les galaxies, etc. Mais il est utile de rappeler que, quelle que soit la source considérée, le réservoir d'énergie sous jacent est toujours la gravité.

Tandis que la Fig. 6.1 donne la *fonction source*² obtenue par Norman & Ferrara (1996), les estimations plus récentes des contributions des différentes sources sont référencées dans la Tab. 6.2.1, avec les échelles d'injection associées ainsi que la valeur moyenne de l'énergie injectée à ces échelles. Certaines sources sont présentées plus en détail dans les sections suivantes.

Il est très important de comprendre que tous les taux donnés, et en particulier les calculs ci-dessous, correspondent à des valeurs moyennes d'injection d'énergie, reposant sur la distribution des sources dans la galaxie. Localement, l'injection d'énergie peut-être bien plus importante.

6.2.2 Explosions de supernovae

Mac Low & Klessen (2004) estiment qu'il s'agit de la contribution majeure des étoiles massives à l'injection d'énergie turbulente dans le MIS, dominant les vents

¹En réalité ce sont les couplages des sources d'énergies cinétique avec le gaz qui posent problème.

²Dans cette figure S_i représente la puissance volumique par unité de nombre d'onde de la source i . Cette grandeur est normalisée à un paramètre β qui mesure le rapport entre la taille caractéristique d'injection, et la distance parcourue par les ondes sonores quand le processus d'injection a atteint son expansion maximale.

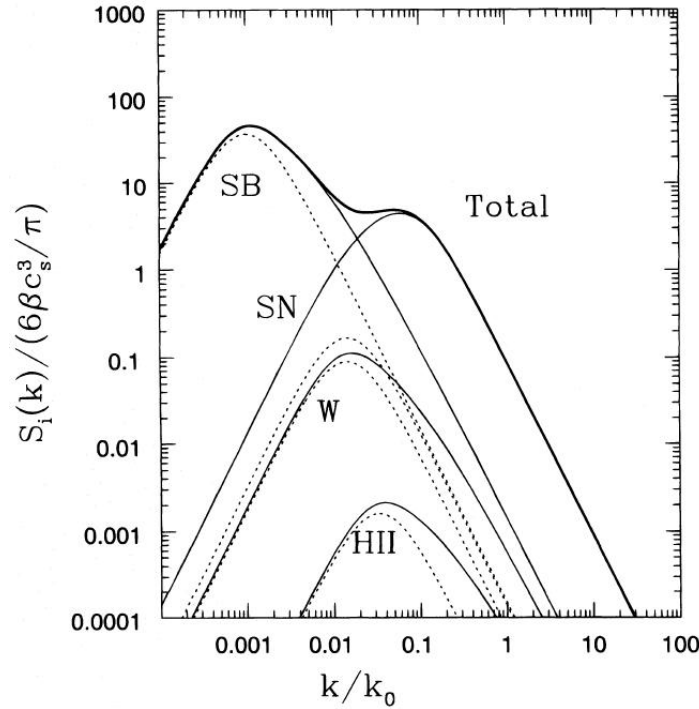


FIG. 6.1 – Puissance volumique S_i par unité de nombre d'onde ($k_0 \sim 1 \text{ pc}^{-1}$) pour la source i d'injection d'énergie cinétique dans le MIS : SB = super bulle ; SN = supernovae ; W = vents stellaire ; HII = régions HII. S_i est normalisée au paramètre β qui mesure le rapport entre la taille caractéristique d'injection, et la distance parcourue par les ondes sonores quand le processus d'injection a atteint son expansion maximale (Norman & Ferrara 1996).

stellaires et l'injection due aux régions HII d'au moins un ordre de grandeur.

L'efficacité du processus η_{SN} dépend de l'intensité du refroidissement dans le choc initial, qui bien sûr dépend des conditions physiques et chimiques du gaz dans lequel la supernova s'expand. Les simulations numériques de Thornton *et al.* (1998) donnent $\eta_{\text{SN}} \sim 0.1$.

Le taux de transfert en énergie turbulente $\dot{\epsilon}$ est alors donné par l'énergie moyenne contenue dans les supernovae $E_{\text{SN}} \sim 10^{51} \text{ erg}$ (cf. annexe A, Sect. A.1.1) et par le taux de supernovae dans la Galaxie $\tau_{\text{SN}} \sim 1 \text{ SN } (100\text{yr})^{-1}$. Pour un volume balayé par les supernovae de $\pi R_{\text{SN}}^2 H_{\text{SN}}$, où $R_{\text{SN}} \sim 15 \text{ kpc}$ et $H_{\text{SN}} \sim 100 \text{ pc}$, on obtient

$$\dot{\epsilon} = \eta_{\text{SN}} \frac{\tau_{\text{SN}} E_{\text{SN}}}{\pi R_{\text{SN}}^2 H_{\text{SN}}} \quad (6.1)$$

et finalement

$$\dot{\epsilon} \sim 3 \times 10^{-26} \text{ erg.cm.}^{-3}\text{s}^{-1}. \quad (6.2)$$

TAB. 6.1 – Sources d’injection de l’énergie cinétique dans le milieu interstellaire : échelles, efficacités, et taux de transfert en énergie turbulente $\dot{\epsilon}$.

Source	échelle d’injection (pc)	efficacité	$\dot{\epsilon}$ (erg.cm ⁻³ .s ⁻¹)	références
supernovae	50 - 500	0.1	3×10^{-26}	a,b,c
rotation Galactique			1.2×10^{-28}	d,c
vents d’étoiles O	100	0.01	1.0×10^{-27}	b
flots bipolaires	200	0.02	2×10^{-28}	c
chocs bras spiraux		0.1	5×10^{-28}	e

a Oey & Clarke (1997)

b Norman & Ferrara (1996)

c Mac Low & Klessen (2004)

d Sellwood & Balbus (1999)

e Elmegreen & Scalo (2004)

6.2.3 La rotation différentielle de la Galaxie

Le processus d’injection est similaire à la viscosité de cisaillement. En se représentant le disque Galactique comme un écoulement du gaz interstellaire en rotation, chaque cellule de fluide (qui correspondent ici à des nuages interstellaires) échange de l’énergie cinétique par collision et friction. Cet échange dépend de la courbe de rotation de la Galaxie, ainsi que du mécanisme de couplage entre les échelles.

Sellwood & Balbus (1999) étudient l’action du tenseur des contraintes de Maxwell résultant d’un gaz en rotation différentielle, dans un champ magnétique ayant une composante radiale non nulle. Celui-ci conduit à un accroissement des fluctuations non circulaires du champ de vitesse, et induit donc un transfert entre l’énergie de rotation et l’énergie turbulente. Le taux de transfert est évalué à

$$\dot{\epsilon} = 0.6 \frac{B^2}{8\pi} \Omega \quad (6.3)$$

où Ω est la vitesse de rotation angulaire de la Galaxie. Pour un champ magnétique de $6\mu\text{G}$, et une courbe de rotation plate $\Omega \sim 1.4 \times 10^{-16} \text{ rad.s}^{-1}$, on obtient

$$\dot{\epsilon} \sim 10^{-28} \text{ erg.cm}^{-3}\text{s}^{-1}. \quad (6.4)$$

6.2.4 Les flots bipolaires

Au cours de la formation stellaire, de la matière est éjectée à très haute vitesse dans la direction perpendiculaire au disque d’accrétion. Couplé au champ magnétique, ce processus, appelé flot bipolaire, est un moyen efficace d’évacuer le moment cinétique du gaz en accrétion, et ainsi de transférer une partie de l’énergie de l’accrétion en énergie turbulente.

L’efficacité η de ce processus dépend de la fraction de la masse accrétée qui est éjectée par l’étoile, ainsi que de la perte d’énergie dans le jet due au refroidissement

radiatif et au choc terminal. Mac Clow & Klessen (2004) évaluent $\eta \sim 0.02$. En adoptant une échelle de hauteur H des régions de formation d'étoiles dans la Galaxie, ils obtiennent un taux de transfert de

$$\dot{e} = \frac{1}{2} \eta \frac{\dot{\Sigma}_\star}{H} u_{\text{jet}}^2 \quad (6.5)$$

où $\dot{\Sigma}_\star$ est le taux d'accrétion par unité de surface et u_{jet} est la vitesse du jet. En prenant $u_{\text{jet}} \sim 200 \text{ km.s}^{-1}$ (vitesse d'échappement) et la valeur de $\dot{\Sigma}_\star$ donnée par McKee (1989), on obtient

$$\dot{e} \sim 2 \times 10^{-28} \left(\frac{H}{200 \text{ pc}} \right)^{-1} \text{ erg.cm.}^{-3} \text{ s}^{-1}. \quad (6.6)$$

6.3 Observations de la turbulence et de l'intermittence

Les propriétés de la turbulence sont observées dans toutes les phases du milieu interstellaire.

Quelles que soit les résolutions, les observations du MIS montrent des structures à toutes les échelles, pour de nombreux traceurs (raies et plusieurs types d'émission continuum) et dans toutes les directions. Il est cependant difficile de juger si toutes ces structures sont liées à la turbulence. Le problème étant que les origines possibles, c'est-à-dire, la turbulence, le potentiel gravitationnel de la Galaxie, les variations de la distribution des rayons cosmiques, du champ de rayonnement et du champ magnétique sont intimement couplées les unes aux autres.

Si le milieu est bien turbulent, l'autre difficulté est de déterminer sa nature.

6.3.1 Quelques grandeurs utiles

Le premier indice de la turbulence apparaît lors du calcul des grandeurs caractéristiques moyennes du milieu interstellaire, et en particulier du CNM. La Tab. 6.2 donne une estimation de certaines quantités physiques (moyennées) dans les nuages diffus atomique et moléculaire ainsi que dans les coeurs denses.

- n_{H} , T , B et L sont respectivement la densité, la température, l'intensité du champ magnétique et la taille caractéristique de ces environnements.
- u_{rms} est la dispersion de vitesse du gaz considéré à l'échelle L .
- λ est le libre parcours moyen des atomes (dans le cas du milieu froid atomique) et des molécules (dans le cas du milieu froid moléculaire et des coeurs denses), soit $\lambda = 1/n\sigma$, où σ est la section efficace de collision élastique : $\sigma_{\text{H-H}} = 5.7 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ (Spitzer 1978) pour un gaz atomique, $\sigma_{\text{H}_2\text{-H}_2} = 3 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ (Monchick *et al.* 1980) pour un gaz moléculaire.
- c_S et c_A sont respectivement la vitesse du son $c_S = \sqrt{\gamma P/\rho}$ (pour un gaz parfait en transformation adiabatique³) et la vitesse d'Alfvén $c_A = B/\sqrt{4\pi\rho}$.
- Re , Re_m sont les nombres de Reynolds hydrodynamique $\text{Re} = u_l l/\nu$ (l et ν sont respectivement l'échelle et la viscosité moléculaire) et magnétique $\text{Re}_m = c_A l/\mu$ (μ est la diffusivité magnétique, Spitzer 1978, cf. annexe C).

³Dans ce cas, la vitesse d'une onde sonore s'écrit $1/\sqrt{\rho\chi}$ où $\chi = 1/V\partial V/\partial P$ est le coefficient de compressibilité et V est le volume qui vérifie $PV^\gamma = \text{Cte}$. Rappel : $\gamma = c_p/c_v = 5/3$ (c_p et c_v sont les capacités calorifiques isobare et isochore) pour un gaz monoatomique, et $\gamma = 7/5$ pour un gaz diatomique.

TAB. 6.2 – Grandeurs caractéristiques utiles à l'étude de la turbulence dans les 3 composantes du CNM. Les définitions des diverses quantités sont données dans le texte.

	unité	CNM atomique	CNM moléculaire	coeurs denses
n_H	cm^{-3}	30	200	10^4
T	K	100	40	10
B	μG	10	20	100
L	pc	10	3	0.1
u_{rms}	km.s^{-1}	3.5	1	0.1
λ	AU	$3.9 \cdot 10^{-1}$	$2.2 \cdot 10^{-1}$	$4.4 \cdot 10^{-3}$
c_S	km.s^{-1}	1.1	$4.5 \cdot 10^{-1}$	$2.2 \cdot 10^{-1}$
c_A	km.s^{-1}	3.8	2.9	2.0
Re		$1.0 \cdot 10^7$	$9.4 \cdot 10^6$	$3.1 \cdot 10^6$
Re_m		$7.1 \cdot 10^{15}$	$1.0 \cdot 10^{16}$	$1.2 \cdot 10^{16}$
Λ	$\text{erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$	$5.0 \cdot 10^{-24}$	$4.0 \cdot 10^{-24}$	$3.5 \cdot 10^{-24}$
ε	$\text{erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$	$2.0 \cdot 10^{-25}$	$1.7 \cdot 10^{-25}$	$2.5 \cdot 10^{-25}$
l_d	AU	9.2	2.6	$2.1 \cdot 10^{-1}$
t_{dyn}	Myr	3	3	1
t_{grav}	Myr	5	1	0.2
t_{AD}	Myr	$5 \cdot 10^3$	10	0.2

- Λ est le taux de refroidissement moyen du milieu, tandis que ε est le taux de transfert de densité d'énergie cinétique dans la cascade turbulente.
- l_d est la micro-échelle de Kolmogorov $l_d = (v^3 \rho / \varepsilon)^{1/4}$.
- t_{dyn} , t_{grav} et t_{AD} sont respectivement le temps dynamique $t_{\text{dyn}} = L/u_{\text{rms}}$, le temps de contraction gravitationnelle (temps de chute libre) $t_{\text{grav}} = 1/\sqrt{4\pi G\rho}$, et le temps de diffusion du champ magnétique à l'intérieur du gaz neutre (temps de diffusion ambipolaire) $t_{\text{AD}} = 4\pi\langle\sigma u\rangle_{in}\rho_n\rho_i L^2/[(\mu_i + \mu_n)B^2]$.

Comme le montre la Tab. 6.2, les nombres de Reynolds hydrodynamiques calculés dans le gaz froid sont très grands, $\text{Re} \sim 10^7$ pour le milieu diffus. Et il en va de même pour les nombres de Reynolds magnétique, ce qui suggère que le milieu interstellaire est turbulent, dans le sens où la quantité de mouvement est uniquement advectée jusqu'aux échelles de dissipation. En général, cet argument est remis en question : d'une part parce qu'il est probable que l'échelle de diffusion ambipolaire (plus difficile à évaluer) soit plus grande que les échelles de diffusion hydrodynamique et magnétique, d'autre part parce que les processus de reconnection magnétique ne sont pas pris en compte, et enfin parce qu'un grand nombre de Reynolds n'implique pas nécessairement une cascade turbulente.

Un autre argument en faveur d'un milieu turbulent est l'observation des profils de raies. Les largeurs à mi-hauteur dérivées sont largement supérieures aux largeurs thermiques que l'on évalue dans les phases du MIS. L'estimation des dispersions de

vitesse et la comparaison à la vitesse du son et à la vitesse de propagation des ondes d'Alfvén montre notamment que si le milieu est bien turbulent, la turbulence y est supersonique et transalfvénique.

6.3.2 Les lois d'échelles dans le gaz

Quelles lois d'échelles

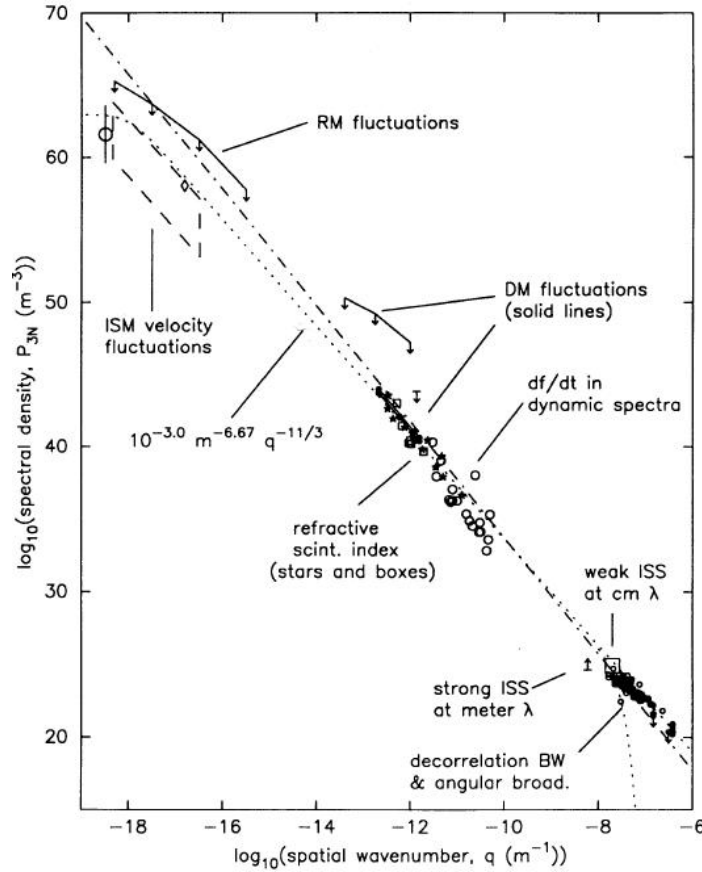


FIG. 6.2 – Spectre de puissance 3D de la densité électronique en fonction du nombre d'onde. Cette figure est le résultat d'une compilation de mesures effectuée par Armstrong *et al.* (1995). Les lignes en pointillés correspondent au spectre de Kolmogorov pour une échelle intégrale de 10^{20} cm des microéchelles de Kolmogorov de 10^7 cm et 10^{10} cm. La ligne en pointillés-trait correspond à un spectre de puissance en k^{-4} .

On a vu dans le Chap. 4 qu'un spectre de puissance peut-être défini pour toute observable A de la manière suivante

$$P(\mathbf{k}) = \tilde{A}(\mathbf{k})\tilde{A}(\mathbf{k})^*. \quad (6.7)$$

Mais il subsiste une difficulté majeure : vouloir relier ces spectres de puissance, et notamment les exposants β résultant de l'ajustement

$$P(\mathbf{k}) \sim k^{-\beta} \quad (6.8)$$

aux prédictions des modèles de la turbulence, qui, rappelons-le, ne concernent en général que le champ de vitesse. Dans son modèle de plasma anisotrope, Higdon (1986) trouve que les spectres de variations de densités électroniques observées par Armstrong *et al.* (1981, 1995) peuvent être imputables à une turbulence incompressible, l'idée étant la suivante : le champ de vitesse turbulent tord et translate les fluctuations de n'importe quelle quantité, tant que ces fluctuations ne jouent pas dans le bilan de pression et donc sur la dynamique du gaz ; si bien que le spectre de puissance observé est une empreinte du spectre de puissance de la vitesse. Cette quantité est alors appelée un scalaire passif.

C'est pour cette raison que, pour toute grandeur observée, on compare souvent directement son spectre de puissance au spectre de puissance de la vitesse prédit par les théories des turbulences HD, MHD, compressible et incompressible.

Un autre obstacle à la comparaison directe entre observations et prédictions théoriques provient des effets de projection des mesures astrophysiques. En fonction de la prise en compte (ou non) des variations des quantités physiques dans l'espace des vitesses, et dans les 2 directions de l'espace, les spectres obtenus doivent être comparés aux prédictions de la turbulence 3D ou 2D, ou même de dimension non entière. Autrement dit, le biais induit par la méthode de mesure doit être pris en compte.

Considérons par exemple un spectre de puissance obtenu à partir d'une carte ou chaque point correspond à un seul canal en vitesse : celui-ci est alors typiquement 2D. La moyenne (ou l'intégrale) de la quantité physique sur l'espace des vitesses conduit à un raidissement du spectre, équivalent à la transition 2D - 3D (Dickey 2006). Cet effet mesuré s'inscrit d'ailleurs en faveur de la turbulence comme processus dominant la dynamique du gaz, puisque les changements de pentes observées sont fréquemment de -2.7 à -3.6 , soit une transition en accord avec les prédictions de lois de puissance en turbulence incompressible 2D et 3D.

Les résultats

L'exemple le plus connu et le plus convainquant de la nature turbulente du MIS est sans aucun doute le spectre de puissance de la densité électronique observé par Armstrong *et al.* (1995) dans le milieu interstellaire local diffus et ionisé : combiné à des données obtenues à plus faible nombre d'onde (voir Armstrong *et al.* 1995) celui-ci, affiché en Fig. 6.2 couvre environ 10 ordres de grandeurs et l'exposant β résultant est de ~ 3.7 , c'est-à-dire proche des prédictions de la turbulence de Kolmogorov.

Mais les observations des signatures de la turbulence ne se limitent pas à la bulle locale. Bien qu'elles n'atteignent pas la gamme de nombres d'onde exposée plus haut, de nombreuses lois de puissance ont été obtenues au cours des 20 dernières années dans toutes les phases du MIS et avec un grand nombre de traceurs indépendants. Ainsi, on peut citer les mesures de spectres de puissance à partir :

- de l'émission intégrée et des centroides de vitesse du HI Galactique détecté en émission (Miville-Deschênes *et al.* 2003, Fig. 6.3) ;
- de l'opacité des raies HI vues en absorption (Deshpande *et al.* 2000) ;
- de l'intensité de ^{12}CO et ^{13}CO observé en émission (ex : Bensch *et al.* 2001) ;
- de cartes IRAS à $100\ \mu\text{m}$ obtenues à hautes latitudes Galactiques (Gautier *et al.* 1992) ;

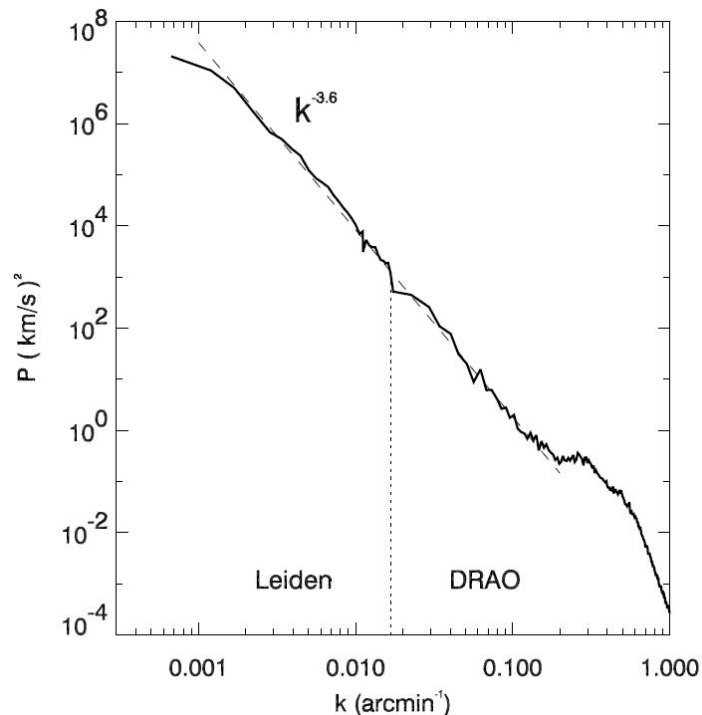


FIG. 6.3 – Spectre de puissance obtenu à partir des centroïdes de vitesse du HI vu en émission dans la région Ursa Major (Miville-Deschênes 2003). La ligne en pointillés sépare les domaines (en nombre d'onde) observés avec le DRAO (Dominion Radio Astrophysical Observatory) et dans le cadre du relevé Leiden/Dwingeloo.

- de l'intensité du HI extragalactique (LMC & SMC : Large and Small Magellanic Clouds) détecté en émission (ex : Stanimirovic *et al.* 2000) ;
- de la polarisation de la lumière stellaire (Fosalba *et al.* 2002)

Une partie de ces résultats sont exposés en Fig. 6.4, qui résulte d'une compilation (Falgarone *et al.* 2004) de pentes β mesurées dans le MIS, en fonction du domaine d'échelles sur lequel le spectre de puissance est observé. Avant tout, il est bon de noter que les sauts de pentes en fonction de l'échelle, comme par exemple celle observée par Elmegreen *et al.* (2001), sont attribués à une transition entre la turbulence 2D et 3D : dans ce cas précis, l'échelle étudiée dépasse la largeur de la couche HI de la galaxie extérieure, qui n'est alors plus observée comme un volume mais comme une surface.

Pour comprendre cette figure, il faut donc prendre en compte deux aspects : la nature de la turbulence, ainsi que la (ou les) dimension(s) fractale(s) du milieu. Ainsi plusieurs facettes de la turbulence du MIS sont accessibles dans cette figure. Tout d'abord, on remarque que les pentes obtenues par les mesures de l'intensité des raies HI en émission diffèrent sensiblement de celles issues du HI en absorption, montrant les particularités du WNM et du CNM. On remarque également que les mesures effectuées sur le HI en absorption et sur le gaz moléculaire s'accordent assez bien aux mêmes échelles. Enfin, et surtout, on remarque que β , mesuré dans le CNM, augmente quand l'échelle diminue.

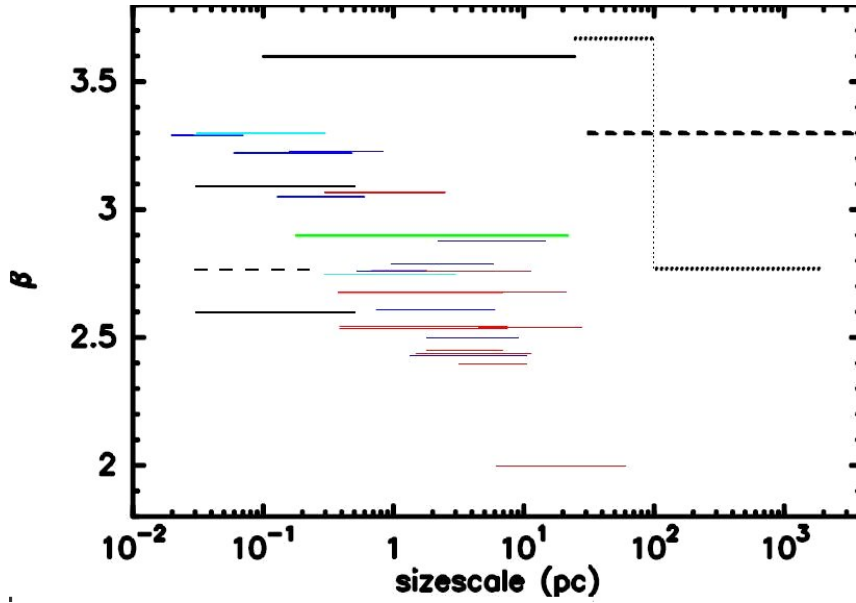


FIG. 6.4 – Indices spectraux β obtenues à partir des cartes d'intensités de raies atomiques et moléculaires en fonction du domaine d'échelles sur lesquelles les lois de puissance $P(k) \propto k^{-\beta}$ sont observées. Ces résultats proviennent des intensités des raies ^{12}CO et ^{13}CO (lignes fines) cartographiées pour des nuages à haute latitude galactique et des régions de formation d'étoiles (Bensch *et al.* 2001, Plume *et al.* 2000, Simon & Bensch 2002), des intensités à $100 \mu\text{m}$ (ligne épaisse verte) cartographiées pour des lignes de visée à haute latitude galactique (Gautier *et al.* 1992), des intensités du HI extragalactique vu en émission et cartographiées pour le LMC (lignes épaisses en pointillés, Elmegreen *et al.* 2001) et pour le SMC (ligne épaisse en tirets, Stanamirovic & Lazarian 2001), des intensités du HI galactique vu en émission (ligne épaisse noire, Miville-Deschênes *et al.* 2003) et en absorption (ligne fine en tirets, Deshpande *et al.* 2000). Les barres d'erreurs sur les mesures de β sont comprises entre 0.05 et 0.3.

Il est possible que ce dernier comportement soit dû à la nature multifractale du gaz froid. En effet, il existe une relation (Stutzki *et al.* 1998) entre la dimension fractale D , la pente α du spectre de masse, et β : $\beta = D(3 - \alpha)$. Comme $\alpha \sim 1.82$ ne varie pas dans les nuages moléculaires, la variation de β entre 2 et 3.3 observée en Fig. 6.4 pourrait provenir d'une augmentation de la dimension fractale de 1.7 à 2.8. Il est même probable qu'à petite échelle, la valeur de β dans le CNM rejoint celle mesurée dans le WNM (3.6), conduisant à une dimension fractale $D = 3$: cette jonction aurait lieu en dessous de 10^{-2} pc, mais n'a toutefois pas été observée.

Puisqu'à la fois la nature de la turbulence et la topologie du milieu influe sur les lois de puissance mesurées, il est difficile de prédire à ce stade, le type de turbulence qui domine dans le MIS. Cependant, si l'on considère que le WNM est isotrope, les exposants observés sont proches du coefficient $-11/3$ prédit par Kolmogorov pour un écoulement turbulent incompressible.

6.3.3 Les incréments des centroïdes de vitesse

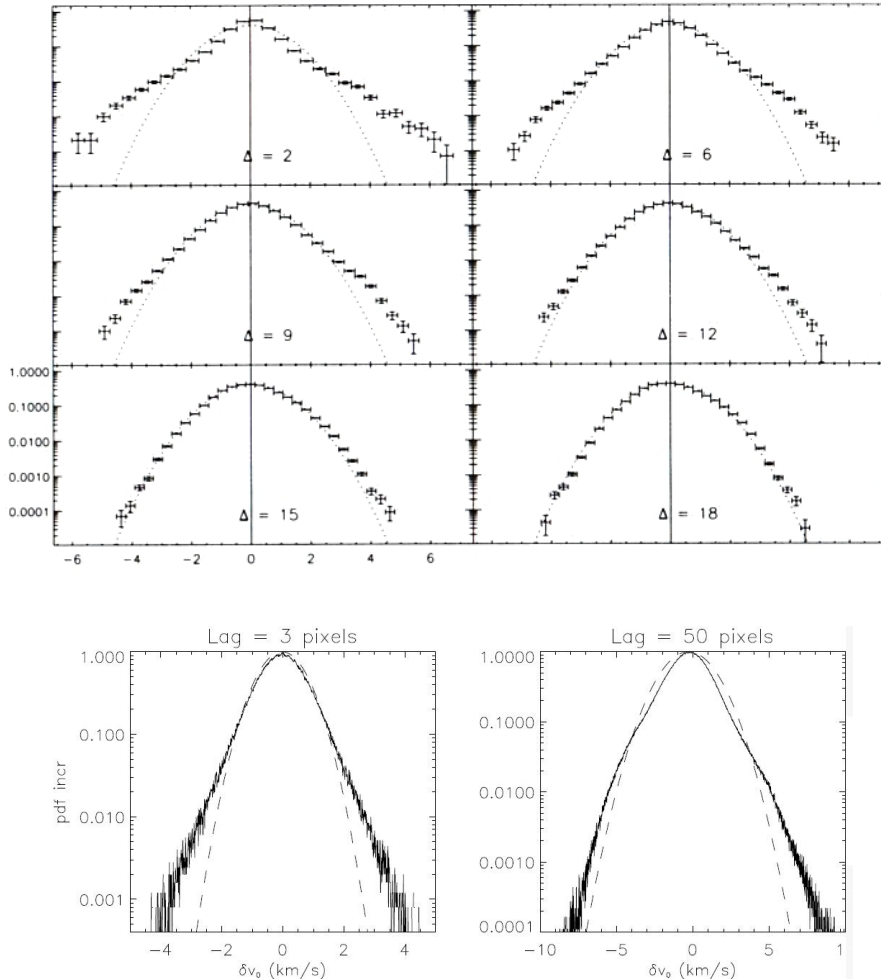


FIG. 6.5 – Distributions normalisées des incréments des centroïdes de vitesse observés entre 2 points distants de Δ (panneaux du haut), noté Lag (panneaux du bas). Les mesures des centroïdes de vitesse proviennent d'observations de la raie ^{12}CO cartographiée dans le nuage moléculaire L1512S, pour Δ mesuré en unités de 16 secondes d'arc (panneaux du haut, Pety 1999), et d'observations de la raie HI à 21 cm cartographiée dans un nuage HI de la constellation Ursa Major, pour un Lag mesuré en unités de 1 seconde d'arc (Miville-Deschênes *et al.* 1999).

Les traces de l'intermittence de la turbulence interstellaire sont plus subtiles et sujettes à de plus virulents débats. Comme nous l'avons montré en Sect. 5.2, l'intermittence se manifeste par l'organisation fractale ou multifractale de la cascade turbulente ainsi que par une dépendance non linéaire en p des fonctions de structure de vitesse d'ordre p .

Les analyses de la structure spatiale du HI vu en émission (Wakker 1990), du CO (Falgarone *et al.* 1991), de l'intensité de la poussière à $100\ \mu\text{m}$ (Chappell & Scalo

2001) ont révélé la nature fractale du MIS froid dans toutes ses composantes, ainsi que son organisation hiérarchique. Malheureusement, il est impossible de distinguer le processus responsable (champ gravitationnel, distribution des rayons cosmiques, du champ de rayonnement, etc...) et donc d'en tirer une preuve irréfutable en faveur de l'intermittence. Il s'agit seulement d'un indice supplémentaire.

Les distributions de probabilités (PDF) des incréments des centroïdes de vitesse sont donc les traceurs les plus prometteurs de l'intermittence. C'est pourquoi elles ont été amplement étudiées, dans plusieurs environnements, depuis les coeurs denses à partir de cartes contenant quelques 10^4 spectres de la raie ^{12}CO (2 – 1) (Pety 1999), jusqu'au gaz diffus chaud via les cartes HI (Miville-Deschênes *et al.* 1999), en passant par les nuages moléculaires et l'étude des cartes en ^{13}CO (Miesch *et al.* 1999). Comme le montre la Fig. 6.5, provenant des travaux de Pety (1999) et Miville-Deschênes *et al.* (1999), plus la distance sur laquelle les incréments sont calculés est petite, plus les ailes des PDFs obtenues ont un comportement non Gaussien. Ces fortes probabilités d'événements rares sont associées à des gradients de vitesse importants mesurés dans des structures de petites tailles, et qui peuvent indiquer des chocs ou des cisaillements à petite échelle (Pety & Falgarone 2003).

6.4 Prédictions des simulations numériques

Quelle est l'importance des modes incompressibles dans la turbulence interstellaire ? Ou, autrement dit, quelle quantité d'énergie cinétique contiennent-ils, en comparaison des modes compressibles ? En effet, cette question est soulevée par les mesures des exposants des spectres de puissance dans le CNM, qui sont proches de $-11/3$, et donc comparables aux prédictions issues de la turbulence de Kolmogorov (cf. Sect. 5.1.1). Pour y répondre, nous nous intéressons aux prédictions des simulations numériques de turbulence compressible, HD et MHD.

Il s'agit d'un sujet très vaste et qui s'est grandement développé durant les 20 dernières années : il nous est donc impossible d'en donner une description exhaustive. C'est pourquoi seuls la démarche employée dans les simulations et quelques résultats sont présentés ici.

6.4.1 Principes et définitions

Comme nous l'avons vu dans le Chap. 5, un écoulement turbulent peut être compressible ou non, purement hydrodynamique ou magnétohydrodynamique. Et c'est l'objet des expériences en laboratoire et des simulations numériques que de décrire les propriétés statistiques de l'écoulement en fonction des conditions physiques du fluide. Mais, de manière simplifiée, les simulations de turbulence se distinguent les unes des autres selon les 4 critères suivants.

1. Le forçage : il s'agit de la manière dont on injecte l'énergie mécanique à l'intérieur du système. En général on applique une perturbation au champ de vitesse, de moyenne nulle sur l'ensemble du cube de la simulation. Si la perturbation est périodique, on parle de régime *entretenu* ; dans le cas contraire il s'agit d'un régime dit *en déclin*. Souvent, dans le premier cas, cette perturbation correspond à une fonction harmonique où à la somme de fonctions harmoniques, si bien

que l'énergie mécanique est injectée à un certain nombre d'onde k_f ou dans une gamme de nombres d'ondes $k_{f1} - k_{f2}$. Alors, la pulsation ω de ces perturbations détermine le type de forçage : si $\omega/k > c_S$ où c_S est la vitesse du son dans le milieu, le forçage est dit compressible, sinon il est incompressible. Notons tout de même que dans certaines conditions, si l'écoulement montre des instabilités, telles que la MRI (magnetorotational instability) le système est auto-forcé (Stone *et al.* 1996, Proctor & Weiss 1982).

2. La résolution R : il s'agit du nombre de points de la simulation, qui actuellement, ne dépasse pas 2000^3 . Dû à la viscosité numérique qui diffuse les champs scalaires et vectoriels à l'échelle de la maille, ce nombre est égal au nombre de Reynolds de la simulation, et fixe donc le domaine inertiel (le domaine de nombre d'onde) de la cascade turbulente. Ainsi, dans toute simulation, si aucun autre terme diffusif n'est ajouté dans les équations d'évolution des champs, la diffusion se produit à la même échelle pour tous⁴.
3. Les conditions aux limites : celles-ci peuvent être périodiques, ouvertes (Audit & Hennebelle 2005) ou fermées (Bushby *et al.* 2008). Les résultats que l'on présente ci-dessous correspondent à des simulations avec des conditions aux limites périodiques.
4. Les conditions du fluide : il s'agit ici de la densité et de l'équation d'état du gaz, de la température (si l'évolution n'est pas isotherme), et surtout, dans le cas d'écoulements turbulents MHD, de l'orientation du champ magnétique, ainsi que sa valeur moyenne sur l'ensemble du domaine étudié.

6.4.2 Quelques résultats

Dans ce qui suit, R est la résolution de la simulation, \mathcal{M}_S et \mathcal{M}_A sont les nombres de Mach turbulent et magnétique

$$\mathcal{M}_S = \frac{\sigma}{c_S} \quad (6.9)$$

$$\mathcal{M}_A = \frac{\sigma}{c_A} \quad (6.10)$$

où σ est la dispersion de vitesse et c_S et c_A sont les vitesses du son et d'Alfvén. χ est le rapport entre les énergies cinétiques contenues dans les modes compressibles E_C et incompressibles E_I

$$\chi = \frac{E_C}{E_I}. \quad (6.11)$$

Enfin, le champ magnétique B_0 est paramétrisé par la grandeur

$$\beta = \frac{c_S^2 4\pi\rho}{B_0} \quad (6.12)$$

qui est proportionnelle au rapport des pressions thermique et magnétique.

La Fig. 6.6 montrent les résultats de simulations numériques d'écoulements hydrodynamiques turbulents réalisées par Porter *et al.* (2002). Le nombre de Mach initial

⁴Il s'agit d'un effet numérique regrettable puisqu'en réalité, pour un écoulement MHD par exemple, l'échelle de diffusion du champ magnétique est différente de l'échelle de diffusion visqueuse, ce qui peut avoir un impact non négligeable sur l'écoulement (Fromang & Stone 2009, Fromang *et al.* 2007).

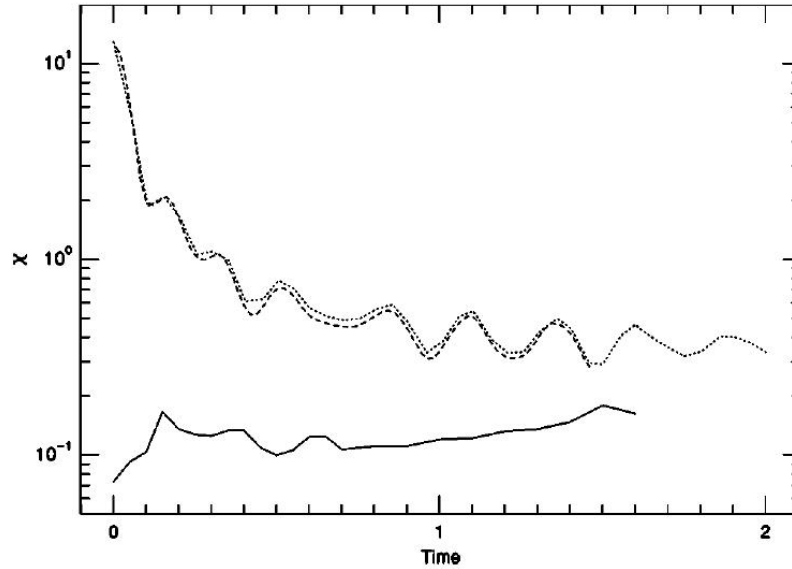


Fig. 6.6 – Rapport $\chi = E_C/E_I$ entre les énergies cinétiques contenues dans les modes compressibles et incompressibles en fonction du temps, obtenu dans des simulations 3D d'écoulements hydrodynamiques turbulents en déclin (Porter *et al.* 2002). $R = 256^3$ et $\chi_0 = 0.1$ (courbe solide), $R = 128^3$ et $\chi_0 = 0.9$ (courbe en tirets) et $R = 64^3$ et $\chi_0 = 0.9$ (courbe en pontillés).

$\mathcal{M}_S \sim 1$ et le forçage est tel que la turbulence est observée en déclin. Les 3 courbes correspondent à différentes résolutions et valeurs initiales de χ : $R = 256^3$ et $\chi_0 = 0.1$ (courbe solide), $R = 128^3$ et $\chi_0 = 0.9$ (courbe en tirets) et $R = 64^3$ et $\chi_0 = 0.9$ (courbe en pontillés). Dans tous les cas, après quelques temps de retournement, l'écoulement est dominé par les modes incompressibles qui contiennent plus de 70 % de l'énergie cinétique totale. En ce qui concerne les simulations en régime entretenu, Porter *et al.* (1992, 1994, 2002) montrent que la grandeur χ est de l'ordre de 10 %, et ce, quel que soit le type de forçage⁵.

La Fig. 6.7 montre les composantes solénoïdal et compressible des spectres de puissance du champ de vitesse, obtenu dans des simulations d'écoulements MHD compressibles et turbulents réalisées par Vestuto *et al.* (2003). Le régime est entretenu, la résolution est de 256^3 , le nombre de Mach turbulent $\mathcal{M}_S \sim 5$, et le fluide est considéré comme étant isotherme. Les 4 panneaux de la Fig. 6.7 correspondent à différentes valeurs du paramètre β , et donc du champ magnétique B_0 (supposé initialement uniforme) et du nombre de Mach magnétique \mathcal{M}_A . Comme on peut le constater, pour β variant entre 0.01 et ∞ , les modes incompressibles contiennent une majeure partie de l'énergie cinétique totale (plus de 70 %). En outre Vestuto *et al.* (2003) observent que lorsque l'intensité du champ magnétique décroît, χ croît, et les pentes des ajustement en loi de puissance des spectres se raidissent : $P_I(k) \sim k^{-4.0}$ pour un champ fort ($\beta = 0.01$) et $P_I(k) \sim k^{-4.9}$ pour un champ magnétique nul ($\beta \rightarrow \infty$) où P_I est le

⁵À l'exception d'un forçage purement compressible dans un écoulement hydrodynamique (Vásquez-Semadeni *et al.* 1998).

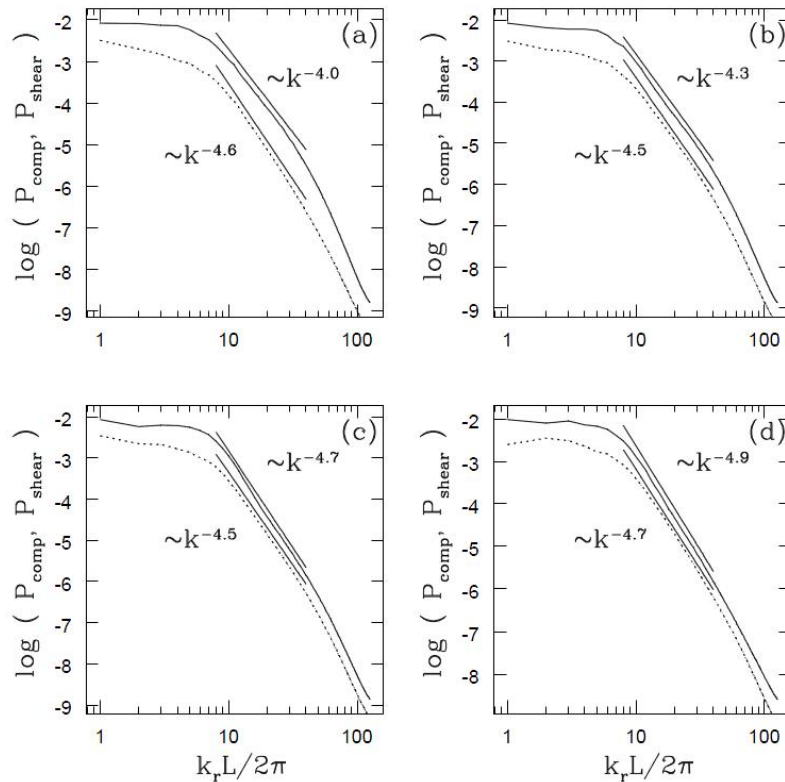


FIG. 6.7 – Composantes compressible et incompressible du spectre de puissance de la vitesse obtenues dans des simulations 3D d’écoulements MHD entretenus (Vestuto *et al.* 2003). Le paramètre $\beta = 0.01$ (panneau a), $\beta = 0.1$ (panneau b), $\beta = 1.0$ (panneau c) et $\beta \rightarrow \infty$ (panneau d). Les autres paramètres des simulations sont décrits dans le texte. Les ajustements en loi de puissance des spectres dans le domaine inertiel sont également montrés. La grandeur $\chi = 12\%$ (panneau a), $\chi = 19\%$ (panneau b), $\chi = 21\%$ (panneau c) et $\chi = 24\%$ (panneau d).

spectre de puissance du champ de vitesse des modes incompressibles.

6.5 Conclusions

Ainsi, il existe de nombreux indices en faveur d’un milieu interstellaire turbulent, les plus convaincants étant les calculs des nombres de Reynolds dans le CNM et les spectres de puissance obtenus à partir des mesures d’intensités des raies atomiques et moléculaires : ces spectres, qui sont probablement les empreintes du spectre de puissance de la vitesse, révèlent en effet un domaine inertiel qui couvre plusieurs ordres de grandeur. En outre, les analyses des PDFs des incréments des centroïdes de vitesse (obtenues à partir de cartes ^{12}CO et HI) montrent les signatures attendues de l’intermittence, une propriété essentielle de tout écoulement turbulent.

La nature de la turbulence interstellaire est, quant à elle, plus incertaine. Bien que le milieu soit compressible, les mesures des indices spectraux déduits des spectres

de puissance observés dans le CNM et le WNM (galactique et extragalactique) sont proches de la valeur $-11/3$ (en tenant compte de la dimension fractale de chaque milieu observé), correspondant à celle prédite par Kolmogorov dans le cadre de la turbulence incompressible. Ce résultat surprenant n'est pas en désaccord avec les prédictions de nombreuses simulations numériques d'écoulements turbulents compressibles hydrodynamiques et magnétohydrodynamiques : celles-ci montrant que l'énergie contenue dans les modes incompressibles (solénoïdaux) domine celle contenue dans les modes compressibles, y compris quand le forçage est compressible, pour peu que l'écoulement (supposé en régime permanent) évolue sur une période suffisamment longue (typiquement plusieurs fois le temps de retournement du système). Autrement dit, les simulations montrent qu'au cours du temps, une grande fraction de l'énergie cinétique totale d'un écoulement turbulent est transférée des modes compressibles vers les modes incompressibles (grâce à l'évolution des chocs inclinés qui engendre de la vorticit  baroclynique).

C'est dans cet esprit que nous abordons la partie III. En nous plaçant aux échelles dissipatives de la turbulence, nous présentons un modèle de structures cohérentes incompressibles, supposées être la source principale de la dissipation de l'énergie turbulente injectée à grande échelle dans le gaz (le mécanisme le plus efficace semble être l'injection d'énergie mécanique par les supernovae). Puis, après une analyse détaillée des caractéristiques dynamiques d'une structure, que nous appelons dans la suite *structure dissipative*, nous étudions son impact sur la chimie du gaz ; d'abord son impact local, puis son influence sur la composition chimique à grande échelle, c'est-à-dire le long d'une ligne de visée aléatoire qui traverse le milieu interstellaire diffus.

Troisième partie

Physico-chimie induite par la dissipation de l'énergie turbulente dans le MIS diffus

Chapitre 7

Les structures cohérentes du modèle TDR

Sommaire

7.1	Introduction : principe et justification de la méthode	138
7.2	Les équations d'évolution dynamique	141
7.2.1	Composantes radiale et axiale de la vitesse	141
7.2.2	Vorticité et composante orthoradiale de la vitesse	141
7.2.3	Quelle est la signification physique d'un vortex ?	142
7.3	D'où vient la dissipation d'énergie ?	142
7.3.1	Transfert d'énergie cinétique en chaleur	142
7.3.2	Processus de refroidissement	143
7.4	Contraintes sur les paramètres dynamiques	143
7.4.1	Les grandeurs caractéristiques d'un vortex	143
7.4.2	Contraintes sur la vorticité centrale ω_0	144
7.4.3	Contraintes sur la coupure radiale β	146
7.5	Discussion sur les vortex	147
7.5.1	Autres types de vortex	147
7.5.2	Comparaison avec le modèle de Burgers	149
7.5.3	Les vortex sont-ils proches des cisaillements plans ?	149

Le modèle TDR (Turbulent Dissipation Regions) vise à étudier l'impact de la dissipation de l'énergie turbulente sur la chimie et l'évolution thermique du milieu interstellaire. Pour cela, on suppose que les structures cohérentes de la turbulence, observées en laboratoire et dans les simulations numériques (voir le chapitre précédent), sont les principaux acteurs de la dissipation¹ : c'est pourquoi, de manière abusive, on les appellera souvent dans la suite des *structures dissipatives*. Reste donc à décrire leur dynamique, et à identifier les processus chimiques et thermiques qui leur sont propres dans le MIS. Dans ce chapitre, nous énonçons les équations d'évolution du fluide neutre dans la structure que nous avons choisi d'étudier et qui nous paraît la plus représentative pour des écoulements incompressibles observés aux échelles dissipatives (voir Sect. 7.5) : le vortex de Nolan & Farrell (noté NF dans la suite).

¹En réalité, on sait que seulement une fraction de l'énergie turbulente totale est dissipée via des phénomènes dynamiques violents et intermittents.

7.1 Introduction : principe et justification de la méthode

Dans le chapitre précédent, nous avons montré l'importance des modes incompressibles dans un fluide turbulent, et particulièrement en ce qui concerne le milieu interstellaire diffus. C'est pourquoi les structures dissipatives du modèle TDR sont des solutions des équations simplifiées de la mécanique des fluides dans le cas d'écoulements incompressibles (équations de Navier-Stokes)

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \eta \Delta \mathbf{u} \quad (7.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (7.2)$$

Les démonstrations des équations de conservation de la quantité de mouvement, de l'énergie, et de la masse d'un fluide sont faites de manière rigoureuse en annexe B dans le cas général (dont les équations ci-dessus découlent). On remarque immédiatement que le terme de pression thermique a été volontairement négligé dans l'Eq. 7.1, une approximation qui sera justifiée dans le Chap. 9. Notons également que cette équation est obtenue en considérant la viscosité dynamique η comme constante dans l'espace. En pratique, puisque la dynamique du fluide est ici découplée de son évolution thermique, η est aussi supposée constante dans le temps.

Dans ce travail, nous avons choisi de modéliser des structures de type *vortex*, c'est à dire des solutions de l'équation d'Helmholtz, obtenue en prenant le rotationnel de l'équation 7.1 :

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \omega = (\omega \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nu \nabla^2 \omega \quad (7.3)$$

où $\omega = \nabla \times u$ est la vorticité.

Une hypothèse supplémentaire du modèle TDR est l'hypothèse de symétrie des structures dissipatives en fonction de leur dimension fractale D . Si celle-ci est supposée égale à 2 (feuilles de cisaillement), il est naturel d'invoquer des invariances selon les 2 directions parallèles aux feuilles afin d'obtenir des équations d'évolution simples du champ de vitesse ; en revanche pour $D = 1$ (structures filamentaire), l'hypothèse de base est l'axisymétrie.

Ici, nous choisissons de modéliser des tubes de vorticité. Les mesures de dimensions fractales de la cascade turbulente du gaz interstellaire étant délicates (dues entre autre aux effets de projection des observables), et de toute manière limitées aux échelles inertielles, ce choix repose sur les arguments suivants.

1. La Fig. 7.1 résume le principe et le résultat de l'expérience de turbulence incompressible de Douady, Couder et Brachet (1991). Un fluide est maintenu en rotation rapide dans une cuve via l'action de deux cylindres tournant en sens opposé et disposés aux extrémités de la cuve (counter rotating flows). La formation de filaments de forte vorticité est alors observée. Alors que la cuve de l'expérience mesure 23 cm de hauteur et 15 cm de diamètre, les filaments sont très fins (un dixième de mm) et ont une longueur comparable à l'échelle d'injection d'énergie (une dizaine de cm), plus précisément entre l'échelle de Taylor et l'échelle intégrale. Enfin, bien que ces structures aient effectivement une durée de vie très faible comparée à celles des tourbillons à plus larges échelles, elles

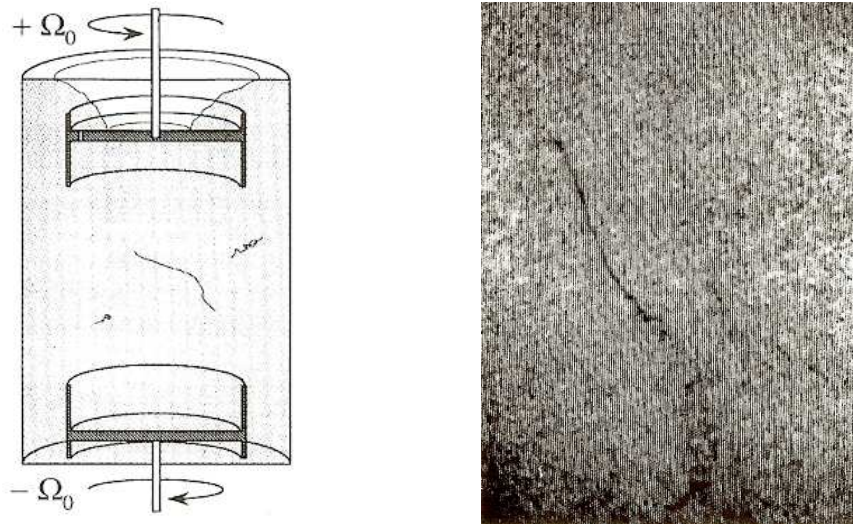


FIG. 7.1 – Expérience de Douady, Couder et Brachet (1991). Panneau de gauche : schéma de l'expérience : Ω_0 est la vitesse angulaire des cylindres en rotation. Panneau de droite : photo de l'expérience. La cuve est remplie d'eau pétillante. Les parties sombres révèlent les zones de basse pression où les bulles grossissent et percolent.

sont plus stables. En effet avant d'être détruites (ou plutôt avant qu'elles se déstabilisent), elles tournent typiquement une dizaine de fois sur elles-mêmes alors que pour le reste des tourbillons, la durée de vie est de l'ordre de leur temps de retournement.

2. Dans les études, numériques et en laboratoire, des phénomènes atmosphériques intenses, tels que les ouragans, les cyclones et les tornades, les structures de type *vortex* apparaissent comme des solutions naturelles et reproductibles des équations de Navier-Stokes. Une revue de ces différents travaux est proposée par Ding (2004). La Fig. 7.2 montre les directions de la vitesse en coupe axiale pour différents vortex obtenues par Nolan & Farrell (1999), en fonction de la valeur du paramètre $S = Cr_0/2Q$, appelé le rapport de tournoiement, où C et r_0 sont respectivement la circulation² du fluide et le rayon caractéristique à l'entrée du vortex, et Q est le taux d'écoulement (en $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$) dans la direction axiale. Comme observé en laboratoire, quand S augmente le vortex évolue en différents états. Pour S suffisamment grand, le vortex change en une structure dite à 2 *cellules*, où la circulation au coeur du vortex est inversée et où le rayon pour lequel la vitesse orthoradiale est maximale augmente significativement.

²En mécanique des fluides, la circulation C est l'intégrale curviligne sur une trajectoire fermée L (qui définit par ailleurs une surface S) de la vitesse. Son expression et sa relation à la vorticit   ω sont donc :

$$C = \oint_L \mathbf{u} \cdot d\mathbf{l} = \iint_S \omega \cdot d\mathbf{S}. \quad (7.4)$$

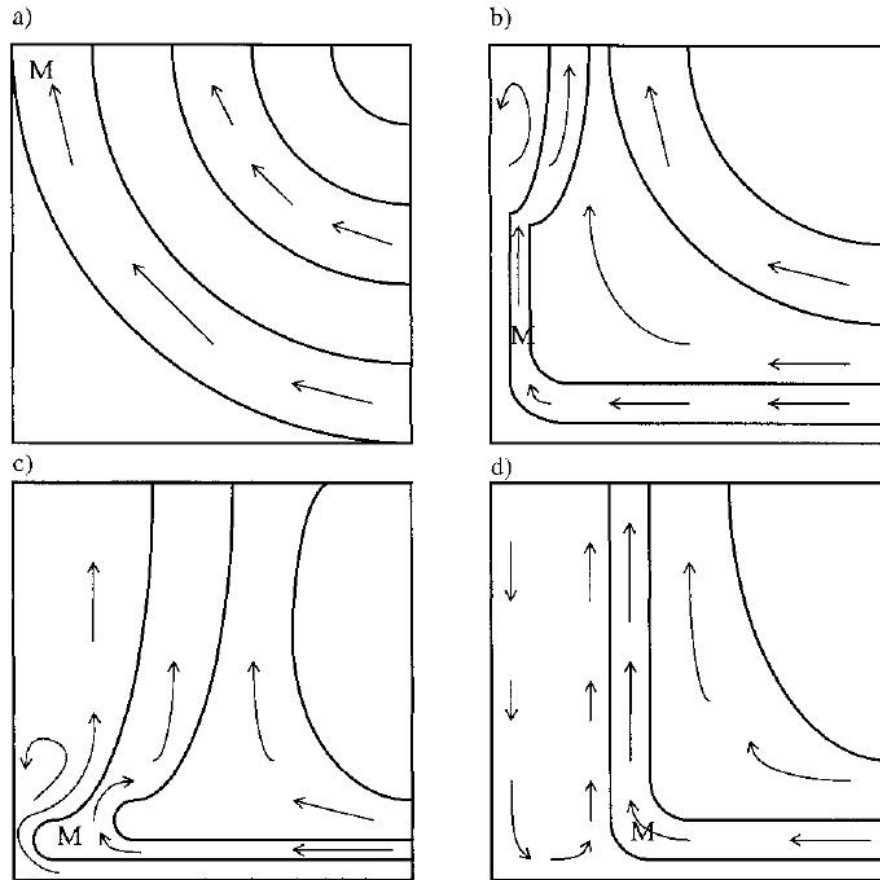


FIG. 7.2 – Illustration (coupes axiales) de 4 états de tornades observés numériquement et en laboratoire (Nolan & Farrell 1999). Quand S (voir le texte principal pour la définition) augmente, le vortex passe de l'état dit *faible* (panneau a), à l'état dit à 2 *cellules* (panneau d) où le coeur de la structure est inactif, en passant par les états transitoires (c & d). Les flèches indiquent les directions de la vitesse et les symboles "M" montrent les positions du maximum de la vitesse orthoradiale.

- Un vortex de Burgers a été récemment observé par Nagaoka *et al.* (2002) dans un plasma en rotation, à l'aide du dispositif Hyper-I (High Density Plasma Experiment) au NIFS (National Institut for Fusion Science, Toki, Japon) : il s'agit de la première détection de vortex dans un fluide ionisé magnétisé produit en laboratoire. Dans cette expérience, le plasma composé d'hélium a une densité moyenne de 10^{12} cm^{-3} et occupe une cuve cylindrique de 30 cm de diamètre et de 200 cm de longueur. Le vortex de Burgers identifié via la mesure des composantes radiale et axiale de la vitesse a un diamètre d'environ 6 cm, une longueur de plus de 1 m, et l'épaisseur de la transition avec le milieu ambiant est de 1.2 cm. La densité dans cette structure est nettement inférieure (d'environ un facteur 10) à celle du plasma environnant, et la vitesse de la couche externe du vortex est supérieure à la vitesse du son.

7.2 Les équations d'évolution dynamique

7.2.1 Composantes radiale et axiale de la vitesse

Outre l'axisymétrie, une dernière hypothèse, qui conduit à des solutions simples et stationnaires de l'équation d'Helmholtz, consiste à donner une forme arbitraire à la vitesse radiale ne dépendant pas de z , $u_r(r, z) = u_r(r)$. Alors que pour le vortex de Burgers, elle s'écrit $u_r(r) = -a/2r$, l'expression proposée par Nolan & Farrell (1999) et que nous adoptons dans ce travail est :

$$u_r(r) = -\frac{a}{2}r \cdot e^{-\beta r^\alpha} \quad (7.5)$$

où a est le taux d'étirement (exprimé en s^{-1}) qui sera discuté plus bas, et α et β sont des coefficients qui déterminent les conditions aux bords (radialement) du vortex. Ainsi, dans le cas des vortex de Burgers, $\alpha = \beta = 0$, autrement dit, le vortex s'étend sur tout l'espace et le champ de vitesse radial est divergent quand $r \rightarrow \infty$, ce qui a peu de sens physique.

L'hypothèse d'incompressibilité (Eq. 7.2) et l'axisymétrie donnent directement accès à la composante axiale de la vitesse :

$$u_z(z) - u_z(0) = az \cdot \left[1 - \beta \frac{\alpha}{2} r^\alpha \right] \cdot e^{-\beta r^\alpha} \quad (7.6)$$

où l'on remarque que, lorsque r est petit, on obtient $u_z \sim az$, ce qui correspond à l'expression de la vitesse axiale d'un vortex de Burgers.

7.2.2 Vorticité et composante orthoradiale de la vitesse

L'équation d'Helmholtz (Eq. 7.3) projetée selon z donne

$$\frac{\partial \omega_z}{\partial t} + u_r \cdot \frac{\partial}{\partial r} \omega_z = \omega_z \cdot \frac{\partial}{\partial z} u_z + \frac{\nu}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \omega_z}{\partial r} \right). \quad (7.7)$$

En supposant un régime stationnaire ($\partial/\partial t = 0$), les équations 7.5 et 7.6 donnent alors :

$$\frac{a}{2} e^{-\beta r^\alpha} \left[2\omega_z - \beta \alpha r^\alpha \omega_z + r \frac{\partial \omega_z}{\partial r} \right] + \frac{\nu}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \omega_z}{\partial r} \right) = 0 \quad (7.8)$$

$$\frac{a}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \omega_z e^{-\beta r^\alpha} \right] + \nu \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \omega_z}{\partial r} \right) = 0. \quad (7.9)$$

En intégrant par rapport à r de l^∞ à r et en considérant ν comme étant constante dans l'espace et le temps, on obtient :

$$\frac{a}{2} r \omega_z e^{-\beta r^\alpha} + \nu \frac{\partial \omega_z}{\partial r} = 0, \quad (7.10)$$

et finalement (pour $\alpha \neq 0$) :

$$\ln \left(\frac{\omega_z}{\omega_0} \right) = -\frac{a}{2\nu} \cdot \left[\beta^{-\frac{2}{\alpha}} \frac{r^2}{\alpha} \int_\beta^{\beta' r^\alpha} \beta'^{\frac{2}{\alpha}-1} e^{-\beta' r^\alpha} d\beta' \right]_0^r \quad (7.11)$$

où $\omega_0 = \omega_z(0)$. L'intégrale sur β est analytique si l'exposant $\frac{2}{\alpha} - 1$ est un entier, c'est-à-dire si $\alpha = 1$ ou 2 . Dans la suite, nous avons considéré $\alpha = 2$ en nous appuyant sur les travaux de Nolan & Farrell (1998). La vorticité et la vitesse orthoradiale s'expriment donc

$$\omega_z = \omega_0 \cdot e^{-\frac{a}{4\nu\beta} [1 - e^{-\beta r^2}]} \quad (7.12)$$

$$u_\theta = \frac{1}{r} \int_0^r r' \cdot \omega_0 \cdot e^{-\frac{a}{4\nu\beta} [1 - e^{-\beta r'^2}]} dr'. \quad (7.13)$$

7.2.3 Quelle est la signification physique d'un vortex ?

La réponse à cette question est donnée dans l'équation 7.9, réécrite ici :

$$\frac{a}{2} \frac{\partial}{\partial r} [r^2 \omega_z e^{-\beta r^2}] + \nu \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \omega_z}{\partial r} \right) = 0 \quad (7.14)$$

Le premier terme provient des forces d'advection, proportionnelles au taux d'étirement a , qui compriment radialement le vortex (voir l'expression de la grandeur r_0 dans la section suivante, Eq. 7.18), l'étirent selon son axe, ou plus précisément augmentent le flux de vorticité à travers la section du vortex. Le second terme provient des forces de diffusion dues à la viscosité moléculaire qui tendent, au contraire, à étaler radialement la vorticité. Un vortex est simplement un équilibre entre ces 2 processus compétitifs.

7.3 D'où vient la dissipation d'énergie ?

Dans un fluide, l'énergie n'est pas dissipée par le terme $\nu \Delta \mathbf{u}$ de l'équation de Navier Stokes. Ce terme correspond uniquement à un transfert de moment cinétique d'une cellule du fluide à une cellule voisine, et en aucun cas à une perte.

La dissipation d'énergie dans un fluide provient des effets combinés :

1. du transfert d'énergie cinétique en énergie interne dû à la conservation de l'énergie totale du système ;
2. et des processus de refroidissement du gaz, c'est-à-dire de transfert d'énergie vers l'extérieur du système.

7.3.1 Transfert d'énergie cinétique en chaleur

L'équation d'évolution de l'énergie interne est démontrée en annexe B (Sect. B.1.3). Dans l'équation B.16, si l'on néglige le processus de conduction thermique (voir annexe B), il y a 2 termes responsables du transfert d'énergie cinétique en chaleur : $-P \nabla \cdot \mathbf{u}$ et $\pi_{ij} \partial u_i / \partial x_j$ (avec les notations d'Einstein). Dans le cas d'un fluide incompressible, l'expression du tenseur des contraintes est simplifiée (à comparer avec l'Eq. B.22, Sect. B.2)

$$\pi_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (7.15)$$

et les 2 termes introduits plus haut se limitent à ce que l'on appellera par la suite le *taux de chauffage visqueux* Γ_{mn} :

$$\Gamma_{mn} = \eta \sum_{i,j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (7.16)$$

Avec la condition d'axisymétrie, on obtient alors :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & -\frac{u_\theta}{r} & 0 \\ \frac{\partial u_\theta}{\partial r} & \frac{u_r}{r} & \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \\ \frac{\partial u_z}{\partial r} & 0 & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{pmatrix} \text{ et}$$

$$\pi = \eta \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} & \frac{\partial u_z}{\partial r} \\ \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} & 2\frac{u_r}{r} & \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \\ \frac{\partial u_z}{\partial r} & \frac{\partial u_\theta}{\partial z} & 2\frac{\partial u_z}{\partial z} \end{pmatrix},$$

et finalement,

$$\frac{\Gamma_{nn}}{\eta} = 2\left(\frac{\partial u_r}{\partial r}\right)^2 + \left[\frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r}\right]^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial r}\right)^2 + 2\left(\frac{u_r}{r}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial z}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)^2. \quad (7.17)$$

Il s'agit de l'objet du chapitre 9 que de mesurer l'impact de ce terme de chauffage sur la chimie du gaz diffus. Notons d'ores et déjà que le terme dominant de cette équation est $[\partial u_\theta / \partial r - u_\theta / r]^2$. Mais comme nous allons le voir dans le chapitre suivant, ce terme n'est pas la seule source de chauffage. La couplage du champ magnétique avec le gaz induit un autre terme de transfert de l'énergie cinétique en chaleur.

7.3.2 Processus de refroidissement

Le refroidissement d'un milieu est dû au transfert d'énergie interne vers le milieu extérieur. Ce terme (qui n'apparaît pas dans l'Éq. B.16 de l'annexe B, puisqu'au contraire cette équation provient de la conservation d'énergie totale du système) peut avoir plusieurs origines. Alors que dans les expériences sur Terre le refroidissement d'un fluide est sans doute assuré par conduction thermique aux bords du système (aux parois en contact avec le milieu extérieur), les refroidisseurs du milieu interstellaire sont les raies de désexcitation des atomes et des molécules. Du à la faible densité du gaz, au champ de vitesse, et à la faible quantité totale de matière, les photons émis s'échappent du milieu, emportant ainsi une certaine quantité d'énergie. Tous ces processus sont décrits dans le Chap. 2.

7.4 Contraintes sur les paramètres dynamiques

Les paramètres libres du vortex sont la vorticit  centrale ω_0 , la coupure radiale β et le taux d' tirement a . Ici on parlera uniquement des 2 premiers param tres. En effet, une contrainte additionnelle sur le taux d' tirement est obtenue en  tudiant le couplage du gaz avec le champ magn tique   l'int rieur d'un vortex et ne peut donc  tre introduite que dans le chapitre suivant.

7.4.1 Les grandeurs caract ristiques d'un vortex

  partir des  quations obtenues ci-dessus, on peut d'ores et d j   valuer les grandeurs caract ristiques propres aux vortex et qui seront tr s utiles pour la suite.

- L'équation 7.12 fait apparaître un rayon caractéristique de diffusion de la vorticité, autrement dit la taille r_0 d'un vortex. Cette quantité dépend de la densité (à travers la viscosité ν) et du taux d'étirement a :

$$r_0 = \left[\frac{4\nu}{a} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (7.18)$$

- La vitesse radiale maximale atteinte pendant le parcours d'une cellule fluide à l'intérieur du vortex est :

$$u_{r \max} = \frac{e^{-1/2}}{2\sqrt{2}} \frac{a}{\sqrt{\beta}}. \quad (7.19)$$

- Si $\beta = 0$, le temps que met une particule fluide à traverser le vortex dans la direction radiale depuis le point r jusqu'au point kr (avec $k < 1$) s'exprime

$$\tau_c = \int_r^{kr} \frac{dr'}{u_r(r')} = \frac{2}{a} \ln(1/k). \quad (7.20)$$

Par définition, dans la suite, τ_c est évalué pour $k = 1/2$.

Dans le cas général, la fonction ci-dessus est non intégrable, mais le résultat reste tout de même valable pour $\beta < 1/10 \times a/4\nu$, c'est à dire si la longueur caractéristique de décroissance de la vitesse radiale $1/\sqrt{\beta}$ est grande devant r_0 .

- La période du vortex est définie comme étant le temps de rotation d'une particule fluide en $r = r_0$. La encore, si $\beta < 1/10 \times a/4\nu$, cette quantité s'exprime de manière simple :

$$\tau_P = \frac{r_0}{u_\theta(r_0)} = \frac{2}{\omega_0(1 - e^{-1})}. \quad (7.21)$$

- Les termes de chauffage moyen s'expriment quant à eux³

$$\bar{\Gamma}_{nm} = \frac{1}{(Kr_0)^2} \int_0^{Kr_0} \Gamma_{nm}(r) r dr, \quad (7.22)$$

$$\bar{\Gamma}_{in} = \frac{1}{(Kr_0)^2} \int_0^{Kr_0} \Gamma_{in}(r) r dr \quad (7.23)$$

et finalement

$$\bar{\Gamma}_{\text{turb}} = \frac{1}{(Kr_0)^2} \int_0^{Kr_0} [\Gamma_{nm}(r) + \Gamma_{in}(r)] r dr \quad (7.24)$$

avec pour choix $K = 5$ dans la suite. Ce choix de K correspond à la taille pour laquelle $\bar{\Gamma}_{\text{turb}}(K) > 99\% \bar{\Gamma}_{\text{turb}}(\infty)$.

7.4.2 Contraintes sur la vorticité centrale ω_0

De nombreux travaux numériques et expérimentaux ont été conduits dans le but d'analyser la statistique des tubes de vorticité (taille, vitesse, circulation de la vitesse, temps de vie) dans les écoulements turbulents incompressibles hydrodynamiques en fonction du nombre de Reynolds et de la viscosité du fluide. Mais alors que l'approche numérique est limitée par le nombre de Reynolds qui dépasse difficilement 2000 dans

³L'expression analytique du terme Γ_{in} , déjà citée plus haut, sera donnée dans le chapitre suivant.

les simulations les plus récentes, les expériences en laboratoire et en soufflerie permettent d'explorer une gamme plus importante.

Considérons l'expérience de Mouri & Hori (2009) : un écoulement turbulent⁴ dans un tunnel de 18 m de longueur (axe des x) et de section $3 \text{ m} \times 2 \text{ m}$ (selon y et z). L'écoulement turbulent est obtenu de 2 manières : soit en plaçant des obstacles physiques (des cubes de taille caractéristique $0.06 \times 0.21 \times 0.11 \text{ m}^3$) le long des parois du tunnel ; soit en plaçant un conduit rectangulaire (de dimensions $1.3 \times 1.4 \text{ m}^2$) à l'entrée du tunnel. Les composantes u_x et u_y de la vitesse peuvent alors être mesurées le long d'une coupe unidimensionnelle (selon x), à l'aide de sondes disposées de manière régulières dans l'écoulement (séparées typiquement de 1.25 mm) et positionnées là où la turbulence est développée ($x \sim 15 \text{ m}$).

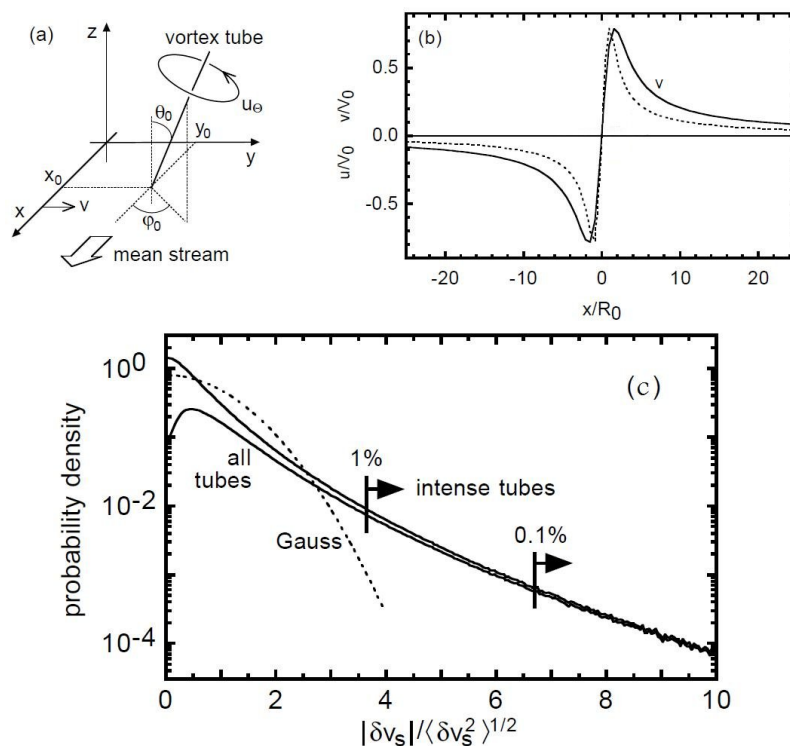


FIG. 7.3 – Figures issues des travaux de Mouri & Hori (2009). Panneau (a) : schéma des conventions adoptées concernant l'inclinaison d'un tube de vortécité par rapport à l'écoulement moyen. Panneau (b) : prédictions du profil moyen (pour des inclinaisons quelconques des vortex) de vitesse dans la direction normale à l'écoulement (courbe continue) et du profil de vitesse obtenu pour un vortex vérifiant $x_0 = y_0 = \theta_0 = 0$ (courbe en pointillés). Panneau (c) : densité de probabilité $|\delta u| / \langle \delta u^2 \rangle^{1/2}$ où $|\delta u| = |u(x + \delta x) - u(x)|$ pour $Re = 719$ (distribution gaussienne en pointillés). Les flèches indiquent les critères de selection des vortex intenses adoptés par Mouri *et al.* (2007).

La statistique des tubes de vortécité est alors obtenue en se donnant un modèle de vortex (généralement il s'agit du vortex de Burgers) dont on extrait les caractéris-

⁴Les tailles caractéristiques sont celles utilisées au MRI (Meteorological Research Institut).

tiques fondamentales à l'aide des mesures de u_x et u_y . En effet, il suffit de comparer ces mesures au profil de la vitesse u_y des vortex considérés, moyennés sur toutes les inclinaisons et positions possibles. Les panneaux (a & b) de la Fig. 7.3 (Mouri & Hori 2009) montrent un schéma de l'inclinaison d'un vortex de Burgers dans l'écoulement ainsi que les profil de vitesse u_y moyen théorique (noté v). Il est utile de noter que c'est la simplicité du modèle de Burgers qui permet de telles études : la méthode n'est par exemple pas applicable aux tourbillons spiraux de Lundgren (1982).

La grande difficulté de ce type d'expérience est la contamination des mesures par des vortex proches les uns des autres. C'est pourquoi dans la plupart des travaux précédents, seuls les événements rares étaient pris en compte, en analysant uniquement les données pour lesquelles les incréments de vitesses selon x sont suffisamment élevés (ceci correspond à des vortex intenses dont l'inclinaison θ_0 est pratiquement nulle), comme le montre le panneau (c) de la Fig. 7.3. On distingue ainsi les travaux de :

- Belin *et al.* (1996) qui analysent les vortex intenses dans des écoulements où $Re < 700$;
- Mouri *et al.* (2007) qui analysent les vortex intenses dans des écoulements où $300 < Re < 2000$;
- Mouri & Hori (2009) qui analysent tous les vortex dans des écoulements où $300 < Re < 2000$.

Les résultats de ces différentes expériences concernant les rayons caractéristiques R_0 et les vitesses orthoradiales maximales V_0 sont en accord les uns avec les autres et corroborent les résultats obtenus dans les simulations numériques de Jimenez *et al.* (1997) et Tanahashi *et al.* (2004). À savoir :

- $R_0 \sim 5 - 7 \times l_d$ pour les vortex intenses et $R_0 \sim 8 - 9 \times l_d$ pour une statistique simultanée de tous les vortex, où l_d est la micro-échelle de Kolmogorov (voir le chapitre précédent).
- $V_0 \sim 0.4 - 0.8 \times \langle u^2 \rangle^{1/2}$ pour les vortex intenses et $V_0 \sim 0.1 - 0.3 \times \langle u^2 \rangle^{1/2}$ pour une statistique simultanée de tous les vortex, où $\langle u^2 \rangle^{1/2}$ est la dispersion de vitesse turbulente de l'écoulement.

Pour toutes ces raisons (numériques & expérimentales), et parce que nous considérons justement des phénomènes intenses traceurs de l'intermittence de la turbulence, nous avons choisi d'explorer les valeurs de la vorticité centrale des vortex NF dont la vitesse orthoradiale maximale correspondante est de l'ordre de la dispersion de vitesse observée dans les nuages atomiques et moléculaires à l'échelle de 1 pc (Crovisier 1981, Joncas *et al.* 1992, Miville-Deschênes *et al.* 2003, Falgarone 1998), soit

$$2 < \langle u_{pc}^2 \rangle^{1/2} < 4 \text{ km.s}^{-1}. \quad (7.25)$$

Une plus ample discussion de ces valeurs observationnelles est abordée par Godard *et al.* (2009a).

7.4.3 Contraintes sur la coupure radiale β

Comme expliqué dans la Sect. 7.4.1, le paramètre β peut être contraint par un argument de simplicité. Pour que les Éqs. 7.20 & 7.21 soient valides il faut que

$$\beta < 5 \times 10^{-21} a. \quad (7.26)$$

La même condition est obtenue si l'on s'intéresse à la variation de la vitesse orthoradiale u_θ . En effet, tant que le terme $\exp(-a/4\nu\beta)$ est petit, u_θ ne dépend pas de β sur le rayon r_0 , et sa valeur maximale peut être évaluée analytiquement.

À l'origine, le vortex de type NF fut adopté dans ce travail pour empêcher que la vitesse radiale ne diverge radialement et ainsi assurer la stabilité numérique du code que nous présenterons dans le Chap. 9. En fait, ceci revient à considérer que la dissipation visqueuse dans un vortex est principalement due à sa rotation et non pas à un flux radial de matière. La contrainte naturelle est donc de supposer que la vitesse radiale $u_{r \max}$ est plus petite que la vitesse du son. Et ainsi

$$\beta > 4.6 \times 10^{-12} a^2. \quad (7.27)$$

Les modèles numériques d'intégration des équations du mouvement montrent que tant que le paramètre β est borné au domaine

$$4.6 \times 10^{-12} a^2 < \beta < 5 \times 10^{-21} a. \quad (7.28)$$

β n'a aucune influence ni sur la dynamique, ni sur l'évolution thermique et chimique de la structure. C'est pourquoi ces conditions seront appliquées dans la suite.

7.5 Discussion sur les vortex

7.5.1 Autres types de vortex

Comment justifier le choix des vortex NF parmi les nombreux modèles existant des structures de vorticit   ? C'est l'objet de ce paragraphe.

Un vortex est d  fini comme une r  gion incompressible de l'espace, poss  dant un champ de vorticit   non nulle, et entour  e par un   coulement irrotationnel. Dans cet esprit, en turbulence, l'analyse de la dynamique et du champ de vitesse associ  s aux vortex a 2 objectifs.

- Le premier est de d  crire les m  canismes de transfert d'  nergie cin  tique dans la cascade turbulente. Dans ce cas, un vortex est vu comme une structure   ph  m  re d'  chelle caract  ristique l dont la dynamique r  sulte de la somme : (1) des forces d'advection internes    la structure, (2) des interactions avec les vortex environnants d'  chelles l' , et (3) des contraintes externes li  es aux mouvements compressibles qui l'entourent (Pullin & Saffman 1998). Le but ici est d'obtenir les lois d'  chelles observ  es exp  rimentalement en mod  lisant des d  stabilisations successives d'une structure donn  e de taille l en structures similaires mais de tailles inf  rieures. Les vortex consid  r  s ne sont pas n  cessairement des solutions des   quations de Navier-Stokes.
- Le second est de d  crire la dynamique d'un   coulement turbulent aux   chelles dissipatives. Dans ce cas, un vortex est vu comme un acteur de la dissipation et une attention particuli  re est accord  e : (1)    la formation de la structure (celle-ci ne provient pas n  cessairement de la d  stabilisation de structures similaires de plus grande taille), et (2)    sa stabilit   (son temps de vie). Ici, les vortex sont n  cessairement des solutions des   quations de Navier-Stokes.

Ci-dessous, nous présentons quelques vortex qui apparaissent régulièrement dans la littérature⁵.

- Le *vortex de Hill* est un objet sphérique de rayon R animé d'une vitesse d'ensemble $U\mathbf{e}_z$. En coordonnées cylindriques (r, θ, z) , les lignes de vorticit e forment des cercles autour de l'axe z , et on a donc $\omega = \omega_\theta \mathbf{e}_\theta$, avec $\omega_\theta = 15U/2R^2 \times r$.  tant par d efinition un mod ele stationnaire non visqueux, il ne peut  tre utilis e pour d ecrire les domaines inertiels et dissipatifs de la turbulence (Pullin & Saffman 1998). Par contre, il pourrait convenir pour l' chelle int egrale du syst eme.
- Le *vortex toroidal* (ou anneau de vorticit e) est une structure axisym etrique (ou elliptique) anim ee d'une vitesse d'ensemble $U(t)\mathbf{e}_z$ dont l' volution d epend de la forme du vortex, de sa taille et de la vitesse initiale du processus de formation. En coordonnées cylindriques, la vorticit e est identique   celle d'un vortex de Hill pour $r < R$ o  R est le rayon caract eristique du coeur, et s'exprime sous la forme $\omega = \omega_\theta(r, \theta, z, t)\mathbf{e}_\theta$ pour $R < r < R'$ o  R' est le rayon maximal de l'anneau : de multiples expressions de $\omega_\theta(r, \theta, z, t)$ existent, c'est pourquoi elles ne sont pas donn ees ici. Les vortex toroidaux sont non stationnaires mais ils sont souvent  tudi es dans la limite $\nu = 0$ et sont donc rarement pris en compte aux  chelles dissipatives. La description de la cascade turbulente via l'interaction d'anneaux de vorticit e est un sujet attrayant et des exposants de l'ordre de $-5/3$ sont trouv es dans les simulations num eriques. Quant aux m ecanismes de formation des anneaux de vorticit e, ils ont  t e grandement  tudi es dans le pass e : les mod eles existants sont d ecrits par Benteboula (2006).
- Le *vortex spiral  tir e de Lundgren* (1982) est une solution exacte, non axisym etrique et non stationnaire des  quations de Navier-Stokes. L'id ee ici est de d ecrire toute la cascade avec un seul vortex qui  volue au cours du temps. Dans ce mod ele, la vorticit e peut s' crire sous la forme $\omega(r, \theta, z, t) = \exp(at) \times \omega(\rho, \theta, \tau)\mathbf{e}_z$, o  a est une constante (en s^{-1}), et les variables ρ et τ sont des variables d'espace et de temps qui s'expriment $\rho = r\exp(at)$ et $\tau = (\exp(at) - 1)/a$: si bien qu'au cours du temps, la vorticit e est concentr ee et le rayon caract eristique du vortex diminue. En outre, la fonction $\omega(\rho, \theta, \tau)$ s' crit comme la somme de fonctions sym etriques (qui cro t lentement sous l'action de la viscosit e) et antisym etriques (d'o  na t la structure spirale) dont l'amplitude d ecro t lentement dans le temps : si bien que le vortex de Lundgren est une structure de vorticit e qui s' tend sur un rayon R   l'instant initial et tend vers un vortex de Burgers de rayon R' ($R' < R$) quand $t \rightarrow \infty$. Le vortex de Lundgren peut  tre utilis e pour d ecrire aussi bien les  chelles inertielles que dissipatives. En effet, en supposant que le milieu turbulent contient un nombre constant de vortex⁶ et que chacun est form e   un temps et selon une orientation diff erents, le spectre modal d' nergie cin etique (voir Chap. 4) peut  tre calcul e et on obtient $E(k) \sim k^{-5/3}$ en accord avec les pr edictions de la turbulence de Kolmogorov⁷ ; en outre les param etres peuvent  tre contr ol es de mani ere   ce que le rayon final R' atteigne

⁵De nombreux autres vortex ne sont pas discut es ici, tels que le *vortex de Rankine*, le *vortex de Lamb-Oseen* et le *vortex de Lamb-Chaplygin*. On peut trouver une description d etaill ee de ces structures dans Tryggesson (2007).

⁶Le taux de formation est donc constant et un m ecanisme de destruction ad hoc des vortex de Burgers finalement obtenus est adopt e.

⁷Notons  galement que, par d efinition, le vortex  tir e de Lundgren est auto-similaire.

les échelles de dissipation. Toutefois, la cascade ne résulte ni de l'interaction de structures ni des contraintes externes, ce qui est en désaccord avec l'expérience. Enfin, bien que pour une viscosité nulle, les équations conduisent à des feuilles de vorticit  enroul es, le m canisme de formation de ces vortex n'est pas d crit puisqu'il d pend de fonctions arbitraires (pour plus de d tail, voir Pullin & Saffman 1993).

- Les vortex filamenteux axisym triques de type *Burgers* ou *NF* ont  t  pr sent s dans les sections pr c dentes.  tant des structures stationnaires, elles sont peu adapt es   la description du domaine inertiel (  moins de mod liser leurs interactions). Le spectre modal obtenu pour une distribution al atoire de vortex de diff rentes tailles et orientations est $E(k) \sim k^{-1} \exp(-k^2)$. En revanche ces vortex offrent des expressions simples de la vitesse et de la vorticit , et sont identiques aux vortex spiraux de Lundgren pour les  chelles dissipatives.

C'est donc   la fois (1) pour des arguments de simplicit , et (2) parce qu'il est adapt    la description des  chelles dissipatives, que nous adoptons le vortex NF dans ce travail.

Par surcro t, un m canisme de formation de ces structures stationnaires (qui peut- tre aussi utilis  pour former des vortex spiraux  tir s) a  t  propos  par Neu (1984). Dans un milieu turbulent des rouleaux peuvent se former par des instabilit s hydrodynamiques telles que l'instabilit  de Kelvin-Helmholtz. Si l'on consid re que ces tourbillons sont connect s entre eux, ils forment alors des nappes de vorticit  compos es de vortex de tailles inf rieures dont les sens de rotations sont altern s. Ces nappes ce d stabilisent pour former des vortex filamenteux de type *Burgers*.

7.5.2 Comparaison avec le mod le de Burgers

Comme nous l'avons d j  mentionn  plus haut, le vortex de Burgers est un cas particulier du vortex $NF(\alpha, \beta)$ pour $\beta = \alpha = 0$. Pour  tayer davantage notre choix du param tre $\alpha = 2$, la Tab. 7.1 compare les principales caract ristiques physiques des vortex de Burgers avec celles des vortex NF (cas $\alpha = 2$). On remarque ainsi que notre choix est motiv  par le profil de la composante radiale de la vitesse. Emp cher u_r de diverger quand $r \rightarrow \infty$ assure la convergence des codes num riques d velopp s dans les chapitres suivants, mais limite  galement les composantes $(\partial u_r / \partial r)^2$ et $(u_r / r)^2$ du terme de chauffage visqueux Γ_m (cf. Eq. 7.17), ce qui simplifie grandement la comparaison entre les vortex : le chauffage et l' volution chimique du gaz contenu dans toute structure dissipative sont li s   sa rotation diff rentielle et non pas au flux de mati re dans la direction radiale. En outre la composante axiale de la vitesse n'est plus ind pendante de r dans le cas des vortex NF, ce qui est plus satisfaisant : le vortex NF ne remplit pas tout l'espace (comme le vortex de Burgers mais peut- tre limit    un rayon total R_{\max} tel que $\omega(R_{\max}) \sim \omega_\infty$ (voir Tab. 7.1).

7.5.3 Les vortex sont-ils proches des cisaillements plans ?

Cette question est soulev e par les simulations num riques de turbulence qui montrent, qu'en pr sence d'un champ magn tique, les zones de forte vorticit  et celles de fort courant $c/4\pi \nabla \times \mathbf{B}$ s'organisent sous forme de nappes. Il est donc judicieux de tester si la structure vortex d crite dans ce chapitre peut  tre modifi e de mani re simple

	vortex de Burgers	vortex NF
$u_r(r \rightarrow \infty)$	∞	0
$ u_r _{max}$	∞	$\frac{e^{-1/2} a}{2\sqrt{2}\sqrt{\beta}}$
$r u_r _{max}$	∞	$\sqrt{\frac{1}{2\beta}}$
$u_z(r \rightarrow \infty)$	az	0
$u_{z,min}$	az	$az(-e^{-2})$
$r_{u_{z,min}}$	–	$\sqrt{\frac{2}{\beta}}$
$\omega_z(r \rightarrow \infty)$	0	$\omega_0 e^{-\frac{a}{4v\beta}} = \omega_\infty$
$u_\theta(r \rightarrow \infty)$	0	$\infty \left(u_\theta \sim \frac{\omega_\infty}{2} \cdot r \right)$

TAB. 7.1 – Caractéristiques dynamiques radiales des vortex de Burgers et NF.

pour modéliser également la dissipation d'énergie turbulente (et donc son impact sur la chimie) dans un cisaillement pur.

Considérons l'écoulement 2D d'un fluide newtonien (cf. définition dans l'annexe B.1) incompressible entre les 2 plans $y = \pm h$ avec pour conditions aux limites : $\mathbf{u}(h) = U_{\max} \mathbf{e}_x$ et $\mathbf{u}(-h) = -U_{\max} \mathbf{e}_x$. La condition d'incompressibilité et l'invariance selon \mathbf{e}_x impliquent que $u_y = \text{Cte}$. Les conditions aux limites donnent $u_y = 0$. L'invariance selon \mathbf{e}_x , l'équation de Navier-Stokes projetée sur \mathbf{e}_x et \mathbf{e}_y et les conditions aux limites permettent enfin d'obtenir la forme de l'écoulement stationnaire :

$$u_x(y) = \frac{U_{\max}}{h} y$$

Si l'on pose $h = \sqrt{4\nu/a}$, on peut comparer directement l'expression de u_x avec le développement limité de u_θ (pour r petit) dans un vortex NF :

$$u_x(y) = \sqrt{\frac{a}{4\nu}} U_{\max} y \quad (7.29)$$

$$u_\theta(r) = \frac{1}{0.64} \sqrt{\frac{a}{4\nu}} U_{\theta\max} r. \quad (7.30)$$

Ainsi, comme pour un vortex (où seule la direction radiale compte), seule la direction transverse compte pour un cisaillement plan et l'on trouve des expressions hautement similaires pour les composante u_x et u_θ (pour r petit).

Mais qu'en est-il du terme de transfert d'énergie cinétique en chaleur Γ_{nn} ? Dans le cas d'un cisaillement plan ce terme se réduit simplement à

$$\Gamma_{nn} = \text{Cte} \sim 4\rho \left(\frac{a}{10^{-10} \text{s}^{-1}} \right) \text{ erg.cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}, \quad (7.31)$$

si bien que l'on peut considérer l'écoulement comme un créneau de dissipation visqueuse sur la distance $2\sqrt{4\nu/a}$. La Fig. 7.4 montre la comparaison entre les termes $\bar{\Gamma}_{nn}$ obtenus pour un vortex et pour un cisaillement en fonction de a et n_H .

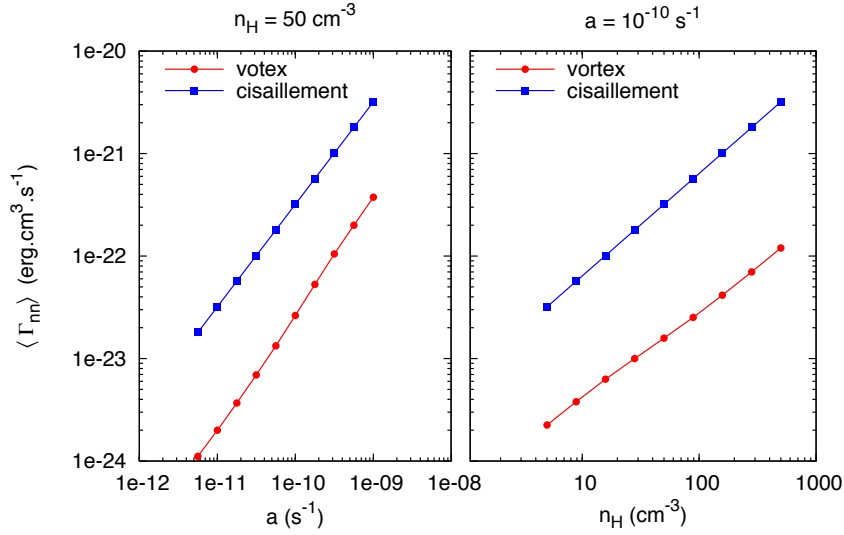


FIG. 7.4 – Comparaison des fonctions de chauffage moyennes dans des structures de types “cisaillement” et “vortex” en fonction de a et n_{H} . Concernant les vortex, ces résultats proviennent d’un code d’intégration des équations de la dynamique présentées dans la Sect. 9.1.

En conclusion, non seulement les concepts de *vortex* et de *cisaillement* sont similaires, mais les expressions des vitesses sont semblables : seules les variations des vitesses selon \mathbf{e}_x (cisaillements) ou \mathbf{e}_θ (vortex) importent. De plus la Fig. 7.4 montre que les transferts moyens d’énergie cinétique en chaleur sur la longueur caractéristique r_0 ont les mêmes dépendances en a et n_{H} pour les vortex et les cisaillements, leur rapport étant constant (~ 10). Le modèle d’évolution thermique et chimique d’une structure de type vortex peut donc être adapté de manière très simple pour traiter des structures de type cisaillement plan. Seuls les effets de géométrie induiront des différences lors de la construction d’une ligne de visée contenant des structures dissipatives (voir Sect. 9.2).

Chapitre 8

Vortex magnétisé

Sommaire

8.1 Principes et justifications	153
8.1.1 Découplage ion-neutre	153
8.1.2 Variables & conditions initiales	154
8.1.3 Équations d'évolution en coordonnées cylindriques	154
8.2 Méthode d'intégration	155
8.2.1 Introduction	155
8.2.2 Schémas numériques du code <i>Vortex-Dynamics.f95</i>	157
8.2.3 Les conditions aux bords	159
8.3 Résultats	159
8.3.1 Paramètres	159
8.3.2 Évolution vers un état stationnaire	160
8.3.3 Terme de chauffage turbulent induit	162
8.4 Contraintes sur le taux d'étirement a	163
8.5 Conclusion	163

Alors que l'évolution du fluide neutre est déterminée analytiquement, aucune hypothèse n'est faite quant à l'évolution du champ magnétique et des ions. Dans ce chapitre nous décrivons le code numérique que nous avons développé, *Vortex-Dynamics.f95*, dans le but de calculer l'évolution du champ de vitesse des ions, ainsi que du champ magnétique dans un vortex NF (Nolan & Farrell 1998, voir chapitre précédent).

8.1 Principes et justifications

8.1.1 Découplage ion-neutre

Dans un fluide turbulent, nous considérons qu'un vortex NF s'est formé et que le champ de vitesse des neutres est entièrement décrit par les équations données dans le chapitre précédent. Nous nous intéressons alors à l'impact de ce champ de vitesse sur la dynamique des ions et sur l'évolution du champ magnétique. Une telle approche repose sur l'hypothèse que les mouvements des particules ionisées (principalement l'ion atomique C^+ , majoritaire dans le milieu diffus) n'exerce aucune rétroaction sur l'évolution dynamique du fluide neutre. À la fin de ce chapitre, nous présenterons le

domaine de variation du taux d'étirement a pour lequel cette approximation est valide. Notons tout de même que cette hypothèse est radicalement différente de la notion de *découplage ion-neutre* total où les 2 fluides évoluent de manières complètement indépendantes.

8.1.2 Variables & conditions initiales

L'objectif du code Vortex-Dynamics.f95 est de calculer les évolutions couplées des 6 variables suivantes en fonction du temps sur toute la structure : les composantes du champ de vitesse des ions u_{ir} , $u_{i\theta}$ et u_{iz} et du champ magnétique B_r , B_θ et B_z (en coordonnées cylindriques r, θ, z).

En principe, le problème à résoudre devrait être 3D si l'on considère une orientation quelconque du champ magnétique ambiant. Ici, nous avons choisi d'étudier le cas *simple* où \mathbf{B} est initialement aligné avec la vorticit , c'est dire $\mathbf{B} = B_z \mathbf{e}_z$. Cette hypoth se est  tay e par plusieurs simulations num riques 3D d' coulements turbulents incompressible MHD (Brandenburg *et al.* 1996, Mininni *et al.* 2006 a & b). Ainsi, si l'on choisit de plus une condition axisym trique pour le champ de vitesse initial des ions, le syst me ne d pend plus que des variables r et z . Nous supposons qu'initialement les ions sont au repos : $\mathbf{u}_i = 0$.

8.1.3  quations d' volution en coordonn es cylindriques

Les  quations d' volution du champ de vitesse et du champ magn tique d'un fluide ionis  sont pr sent es dans l'annexe C, ainsi que les simplifications qui s'appliquent dans le cas du milieu interstellaire. Le syst me d' quations   résoudre s' crit alors

$$\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} + (\mathbf{u}_i \cdot \nabla) \mathbf{u}_i = -\frac{1}{\rho_i} \nabla P_i + \gamma \rho_n (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_i) + \frac{1}{4\pi\rho_i} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad (8.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{u}_i) = 0 \quad (8.2)$$

o  $\gamma = \langle \sigma u \rangle_{in} / (\mu_i + \mu_n)$, et $\langle \sigma u \rangle_{in}$ est le taux de transfert de moment par collision ion-neutre moyenn  sur la ditribution de vitesse relative u (cf. annexe C).

  l'instar du raisonnement appliqu  dans le chapitre pr c dent sur la dynamique du fluide neutre, nous n gligeons dans l' quation 8.1 le terme de gradient de pression des ions $1/\rho_i \nabla P_i$ (la validit  de cette hypoth se est confirm e dans le chapitre suivant, Sect. 9.4). Si bien qu'avec l'hypoth se d'axisym trie, le syst me se r duit  

$$\frac{\partial u_{ir}}{\partial t} + u_{ir} \frac{\partial u_{ir}}{\partial r} + u_{iz} \frac{\partial u_{ir}}{\partial z} - \frac{u_{i\theta}^2}{r} = \rho_n \gamma (u_{nr} - u_{ir}) + \frac{1}{4\pi\rho_i} \left[\left(\frac{\partial B_r}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial r} \right) B_z - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r B_\theta) B_\theta \right] \quad (8.3)$$

$$\frac{\partial u_{i\theta}}{\partial t} + u_{ir} \frac{\partial u_{i\theta}}{\partial r} + u_{iz} \frac{\partial u_{i\theta}}{\partial z} + \frac{u_{i\theta} u_{ir}}{r} = \rho_n \gamma (u_{n\theta} - u_{i\theta}) + \frac{1}{4\pi\rho_i} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r B_\theta) B_r + \frac{\partial B_\theta}{\partial z} B_z \right] \quad (8.4)$$

$$\frac{\partial u_{iz}}{\partial t} + u_{ir} \frac{\partial u_{iz}}{\partial r} + u_{iz} \frac{\partial u_{iz}}{\partial z} = \rho_n \gamma (u_{nz} - u_{iz}) + \frac{1}{4\pi\rho_i} \left[-\frac{\partial B_\theta}{\partial z} B_\theta - \left(\frac{\partial B_r}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial r} \right) B_r \right] \quad (8.5)$$

$$\frac{\partial B_r}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} (B_z u_{ir} - B_r u_{iz}) = 0 \quad (8.6)$$

$$\frac{\partial B_\theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (B_\theta u_{iz} - B_z u_{i\theta}) - \frac{\partial}{\partial r} (B_r u_{i\theta} - B_\theta u_{ir}) = 0 \quad (8.7)$$

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r (B_z u_{ir} - B_r u_{iz})] = 0. \quad (8.8)$$

Le problème traité est donc un système d'équations aux dérivées partielles, avec des conditions initiales connues. Les principes numériques, que nous avons utilisés dans le cadre de cette thèse pour résoudre ce problème, sont amplement décrits dans la littérature (en particulier dans l'ouvrage *Numerical recipes*, Press *et al.* 2007). C'est pourquoi seules les grandes lignes sont présentées ici.

8.2 Méthode d'intégration

8.2.1 Introduction

Choix des différences finies

Bien qu'il existe de nombreuses autres techniques de résolution des équations aux dérivées partielles, telles que la méthode des éléments finis ou l'approche spectrale, le code Vortex-Dynamics.f95 est fondé sur la méthode des différences finies. Celle-ci consiste à adopter un maillage temporel (symbolisé par les indices n par la suite) et spatial (symbolisé par les indices i par la suite), puis à calculer une valeur approchée des dérivées d'une grandeur A par ses variations (finies) sur une maille, comme par exemple :

Approximation	type de différence	erreur
$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{A^{n+1} - A^n}{\Delta t}$	avant	$\mathcal{O}(\Delta t)$
$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{A^n - A^{n-1}}{\Delta t}$	arrière	$\mathcal{O}(\Delta t)$
$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{A^{n+1} - A^{n-1}}{2\Delta t}$	centrée	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$

(8.9)

où \mathcal{O} est une fonction qui mesure l'erreur (en fonction du pas Δt) associée à chaque calcul de dérivée.

Schémas numériques

On définit un schéma numérique comme étant la manière de réécrire une équation aux dérivées partielles sous la forme de différences finies. Bien qu'il existe une multitude de schémas différents, on distingue 2 grandes familles : les schémas explicites et implicites. Prenons par exemple l'équation de diffusion

$$\frac{\partial A}{\partial t} = D \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \quad (8.10)$$

où D est le coefficient de diffusion. En utilisant un schéma explicite on écrira par exemple

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\Delta t} = D \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (8.11)$$

si bien que la quantité A_i^{n+1} est calculée à partir de ses valeurs en plusieurs points au pas de temps précédent n . Tandis qu'en utilisant un schéma implicite, l'expression approchée de l'équation 8.10 s'écrit par exemple

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\Delta t} = D \frac{A_{i+1}^{n+1} - 2A_i^{n+1} + A_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}. \quad (8.12)$$

Dans ce cas, les dérivées spatiales sont calculées au temps $n + 1$, et les valeur de A aux points i sont obtenues en inversant une matrice de la taille du système (ce qui requiert généralement N_x^3 opérations si N_x est le nombre de subdivisions spatiales), qui dans le cas ci-dessus est trigonale, ce qui diminue grandement le nombre d'opérations nécessaires ($\sim 3^3 \times N_x$).

Les analyses de stabilité de Von Neumann consistent à décomposer la solution numérique en ondes élémentaires (ou modes de Fourier) et à étudier l'évolution de chaque composante dans le temps en fonction du schéma utilisé. On trouve alors qu'un mode de nombre d'onde k s'écrit au temps n , $\xi^n \exp(ikx)$ où ξ est le facteur d'amplification. En insérant cette expression dans les équations discrétisées, on peut alors déduire des conditions pour lesquelles, aucun mode n'est amplifié dans le temps. De telles analyses montrent que le grand avantage des schémas d'intégration implicites est qu'ils sont inconditionnellement stables. En d'autres termes, quels que soient les pas de temps Δt et spatial Δx , $|\xi| \leq 1$. Alors que les schémas explicites possèdent un critère de stabilité : dans le cas ci-dessus, soit Δx fixé, il faut choisir Δt tel que $2D\Delta t/\Delta x^2 < 1$, ce qui limite le pas de temps à des valeurs en général très petites.

Quel schéma choisir ?

Tout dépend du système d'équations à résoudre, le prérequis étant de s'assurer que le schéma soit stable. Une fois cette condition remplie, le schéma peut-être adapté dans le but d'augmenter la précision du résultat : (1) en réduisant autant que possible l'effet de la viscosité numérique qui dissipe les ondes sur un domaine de longueur d'onde proche de la résolution spatiale ; (2) en réduisant l'erreur liée au calcul des dérivées spatiales et temporelles, c'est-à-dire en augmentant l'ordre auquel ces dérivées sont calculées (voir plus haut).

A priori, un schéma implicite semble être le meilleur choix, puisqu'il est inconditionnellement convergent. Toutefois, des complications apparaissent si l'équation à résoudre est non linéaire comme par exemple :

$$\frac{\partial A}{\partial t} = A \frac{\partial A}{\partial x}. \quad (8.13)$$

En effet, dans ce cas, il faut résoudre à chaque pas de temps un système de N_x équations non linéaires (N_x est le nombre de mailles spatiales), et non plus simplement inverser une matrice (résolution de N_x équations linéaires), pour obtenir le champ A au pas de temps suivant. Ce genre de problème peut être résolu en utilisant la méthode de Newton-Raphson, mais celle-ci est très coûteuse en temps numérique. Une autre possibilité consiste à linéariser l'équation en adoptant le schéma :

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(A_i^n \frac{A_{i+1}^{n+1} - A_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + A_i^{n+1} \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2\Delta x} \right). \quad (8.14)$$

Mais dans ce cas, il faut vérifier que la grandeur A ne varie pas trop sur un pas de temps ; en pratique que $(A_i^{n+1} - A_i^n)/A_i^n < 1\%$. Il est donc nécessaire d'ajuster le pas de temps au cours de la simulation pour remplir cette condition, ce qui peut rendre les schémas implicites moins efficaces (plus coûteux en temps pour une même précision) que les schémas explicites.

8.2.2 Schémas numériques du code Vortex-Dynamics.f95

Plusieurs versions

Forts de ces remarques introductives, revenons au problème que nous avons posé au début de chapitre et considérons le vecteur \mathbf{U} défini par

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_{ir} \\ u_{i\theta} \\ u_{iz} \\ B_{ir} \\ B_{i\theta} \\ B_{iz} \end{pmatrix}. \quad (8.15)$$

Les équations 8.3-8.8 peuvent alors se réduire sous la forme :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial F(\mathbf{U})}{\partial r} + \frac{\partial G(\mathbf{U})}{\partial z} + L\left(\mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial r}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z}\right) = 0 \quad (8.16)$$

où F et G sont des fonctions non linéaires de \mathbf{U} , tandis que L est une fonction linéaire de \mathbf{U} et de ses dérivées.

Le système d'équations aux dérivées partielles est donc non linéaire et sans plus d'informations, il est difficile de choisir quel schéma numérique adopter (voir la section précédente). C'est non seulement pour cette raison, mais également pour vérifier nos résultats, que nous avons choisi de développer trois versions différentes du code Vortex-Dynamics.f95, que nous noterons dans la suite $v1$, $v2$ et $v3$. La première, $v1$, est fondée sur le schéma d'intégration explicite dit *sous le vent* :

$$\frac{\partial A}{\partial t} = A \frac{\partial A}{\partial x} \quad \rightarrow \quad \frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\Delta t} = \begin{cases} A_i^n \frac{A_i^n - A_{i-1}^n}{\Delta x} & \text{si } A_i^n < 0 \\ A_i^n \frac{A_{i+1}^n - A_i^n}{\Delta x} & \text{si } A_i^n > 0 \end{cases} ; \quad (8.17)$$

tandis que la seconde, $v2$, utilise un schéma d'intégration implicite linéarisé, à savoir

$$\frac{\partial A}{\partial t} = A \frac{\partial A}{\partial x} \quad \rightarrow \quad \frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\Delta t} = A_i^n \frac{A_{i+1}^{n+1} - A_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x}. \quad (8.18)$$

La troisième version, $v3$, utilise le même schéma que la version $v2$, mais fait intervenir la méthode ADI (Alternating-Direction Implicit method), que nous présentons dans la section qui suit.

La méthode ADI (Aternating-Direction Implicit method)

La méthode ADI, sur laquelle la version v3 de notre code numérique est fondée, est une application de la méthode de séparation des opérateurs dans la résolution d'équations aux dérivées partielles. En effet, supposons que le système s'écrive

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \mathcal{L}(A) = \mathcal{L}_1(A) + \mathcal{L}_2(A) + \dots + \mathcal{L}_m(A) \quad (8.19)$$

où les \mathcal{L}_j sont des opérateurs qui ne sont pas nécessairement linéaires. Notons \mathcal{M}_j une méthode d'itération qui inclut tous les termes de l'opérateur total \mathcal{L} , mais qui est stable uniquement pour l'opérateur \mathcal{L}_j (les termes régis par cet opérateur ne divergent pas). Alors, on peut obtenir, à partir du champ A_i^n , le champ A_i^{n+1} en subdivisant l'itération en m étapes successives de pas de temps $\Delta t/m$:

$$\begin{aligned} A^{n+1/m} &= \mathcal{M}_1(A^n, \Delta t/m) \\ A^{n+2/m} &= \mathcal{M}_2(A^{n+1/m}, \Delta t/m) \\ &\dots \\ A^{n+1} &= \mathcal{M}_m(A^{n+(m-1)/m}, \Delta t/m). \end{aligned} \quad (8.20)$$

Revenons donc à notre problème et notamment à la résolution de l'équation 8.16. Comme on peut le constater, celle-ci fait intervenir des dérivées selon r et selon z . La méthode ADI consiste à traiter séparément ces opérateurs, et donc à subdiviser l'étape du calcul des \mathbf{U}^{n+1} en fonction des \mathbf{U}^n , de pas de temps Δt , en deux étapes intermédiaires de pas de temps $\Delta t/2$, chacune consacrée à l'évolution de \mathbf{U} selon une direction (r ou z). Ainsi, si l'on dénote i les indices spatiaux dans la direction radiale r , et k les indices spatiaux dans la direction axiale z , le schéma numérique adopté dans la version v3 du code Vortex-Dynamics.f95 est le suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{U}_{i,k}^{n+1/2} - \mathbf{U}_{i,k}^n}{\Delta t/2} &= c_{i,k}^n \frac{\mathbf{U}_{i+1,k}^{n+1/2} - \mathbf{U}_{i-1,k}^{n+1/2}}{2\Delta r} + d_{i,k}^n \frac{\mathbf{U}_{i,k+1}^n - \mathbf{U}_{i,k-1}^n}{2\Delta z} \\ \frac{\mathbf{U}_{i,k}^{n+1} - \mathbf{U}_{i,k}^{n+1/2}}{\Delta t/2} &= c_{i,k}^{n+1/2} \frac{\mathbf{U}_{i+1,k}^{n+1/2} - \mathbf{U}_{i-1,k}^{n+1/2}}{2\Delta r} + d_{i,k}^{n+1/2} \frac{\mathbf{U}_{i,k+1}^{n+1} - \mathbf{U}_{i,k-1}^{n+1}}{2\Delta z} \end{aligned} \quad (8.21)$$

où $c_{i,k}$ et $d_{i,k}$ sont des termes qui dépendent de \mathbf{U} (puisque les opérateurs F et G de l'équation 8.16 sont non linéaires), et où, pour simplifier, nous n'avons pas pris en compte le terme $L(\mathbf{U})$ de l'équation 8.16 (qui correspond au terme de friction ion-neutre inclus dans les équations du code Vortex-Dynamics.f95).

L'avantage de la méthode ADI est la réduction du temps de calcul. En effet, dans les versions v2 et v3, nous employons un schéma implicite linéarisé : il s'agit donc d'inverser une matrice à chaque pas de temps. Avec ou sans ADI, cette matrice est *diagonale par blocs* : si l'on note l la taille d'un bloc et L la taille de la matrice, le nombre d'opérations nécessaires pour l'inversion est $N_o \sim L \times l^3$. Mais bien qu'avec la méthode ADI il faille inverser 2 matrices par pas de temps, la taille des blocs l est très inférieure à leur taille dans le cadre de la méthode sans ADI, si bien que la durée d'une itération est bien plus courte.

8.2.3 Les conditions aux bords

Il reste, pour résoudre entièrement le problème posé, à définir les conditions aux bords du domaine d'intégration. Dans les simulations numériques on distingue généralement 4 catégories différentes.

- Les conditions de Dirichlet : dans ce cas, toutes les variables du problème ont des valeurs fixées aux bords du domaine en fonction du temps. Il s'agit de conditions réflexives : toute onde se propageant vers l'extérieur du domaine est réfléchi en atteignant les bornes avec un déphasage donné par les conditions aux limites.
- Les conditions de Neumann : ici, ce sont les composantes des gradients, dans la direction normale aux bords du domaine, qui sont fixées en fonction du temps. De manière similaire aux conditions de Dirichlet, toute onde est réfléchi aux bords du domaine avec un déphasage donné par les conditions aux limites.
- Les conditions périodiques : dans ce cas, une onde arrivant aux bords du domaine continue à se propager selon la même direction en partant du bord opposé.
- Les conditions dites sortantes : celles-ci sont particulièrement délicates à réaliser, bien qu'elles soient très utiles puisqu'elles permettent, en théorie, aux ondes de quitter le domaine d'intégration.

Dans notre code numérique, nous avons appliqué les conditions de Neumann, en imposant que les gradients des champs de vitesse et magnétique soient nuls aux limites du domaine. Comme nous l'avons remarqué, cela induit une réflexion des ondes, qui viennent perturber, dans le vortex, la dynamique des ions que l'on cherche à étudier. C'est pourquoi nous fixons la taille de notre domaine d'intégration de manière à ce que les ondes, issues des perturbations induites par le champ de vitesse du fluide neutre, atteignent à peine les bords du domaine d'intégration quand la simulation prend fin.

8.3 Résultats

8.3.1 Paramètres

Les paramètres de la version v3 du code vortex-Dynamics.f95 sont affichés dans la Tab. 8.1, ainsi que les gammes sur lesquelles ils ont été étudiés. On distingue 4 types de paramètres.

- Les résolutions adoptées dans les directions radiale et axiale N_r et N_z .
- Les paramètres qui déterminent le type de vortex NF considéré, à savoir le taux d'étirement a et les vitesses radiale et orthoradiale maximales $u_{\theta \max}$ et $u_{r \max}$.
- Les paramètres de contrôle des conditions physiques du milieu, la densité n_H , la fraction d'ionisation x_i , les masses moléculaires moyennes des neutres et des ions μ_n et μ_i (exprimées en u.m.a., unité de masse atomique), et la valeur du champ magnétique initial, qui est homogène et aligné selon l'axe du vortex.
- Et enfin, la longueur (selon z) du vortex L_V et la longueur caractéristique de la fonction d'apodisation adoptée dans la direction axiale C_V . Ces deux derniers paramètres sont de grande importance pour la dynamique du fluide ionisé à l'intérieur d'un vortex, puisque ceux sont eux qui induisent une torsion des lignes de champ magnétique dans la structure, en introduisant d'importants gradients

TAB. 8.1 – Paramètres physiques et numériques du code Vortex-Dynamics.f95.

Paramètre	unité	valeur par défaut	gamme
N_r		300	40 - 300
N_z		300	40 - 300
a	s^{-1}	5×10^{-10}	
$u_{\theta \max}$	$km.s^{-1}$	3.5	
$u_{r \max}$	$km.s^{-1}$	1.0	
n_H	cm^{-3}	50	
x_i		1.4×10^{-4}	
μ_n	u.m.a.	1.1	
μ_i	u.m.a.	12	
B_0	μG	10	5 - 10
L_V	UA	200	100 - 200
C_V	UA	$L_V/2$	$L_V/4 - L_V/2$

du champ de vitesse dans la direction axiale. La fonction d'apodisation adoptée $A(z)$ est choisie pour des raisons numériques. En effet, pour éviter que le pas de temps nécessaire à la convergence de l'intégration soit trop petit (cf. Sect. 8.2), il faut choisir une longueur d'apodisation C_V suffisamment grande, en comparaison de la longueur du vortex L_V . En outre, afin d'assurer la continuité axiale du champ de vitesse des neutres et de ses dérivées, nous avons choisi une fonction du type : $A(z) = \sin(\pi z/2C_V)$.

8.3.2 Évolution vers un état stationnaire

Les résultats de la version v3 du code numérique sont présentés dans la Fig. 8.1 (panneau a) qui montre l'évolution temporelle de la vitesse maximale des ions dans le plan perpendiculaire à l'axe de révolution ($|\mathbf{u}_{i\perp}|_{\max} = (u_{ir}^2 + u_{i\theta}^2)_{\max}^{1/2}$), pour 4 modèles différents (cf. Tab. 8.2). Tandis que les panneaux (b & c) montrent les composantes axiale et orthoradiale du champ magnétique pour le modèle de référence à $t = 100$ ans. Et comme nous l'avons mentionné plus haut, ces résultats ont été vérifiés à l'aide des versions v1 et v2.

		M_0	M_1	M_2	M_3
B_0	μG	10	5	10	10
L_V	UA	200	200	100	200
C_V	UA	100	100	50	50

TAB. 8.2 – Paramètres des 4 modèles exposés dans la Fig. 8.1 (panneau a). La densité n_H et le taux d'étirement a sont fixés : $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$, $a = 5 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$.

Ainsi les ions, initialement immobiles, sont entraînés par le mouvement prédéfini du fluide neutre. Mais puisque le champ magnétique est gelé dans le fluide ionisé (cf. annexe C), et parce que le vortex a une longueur finie L_V , ces mouvements en-

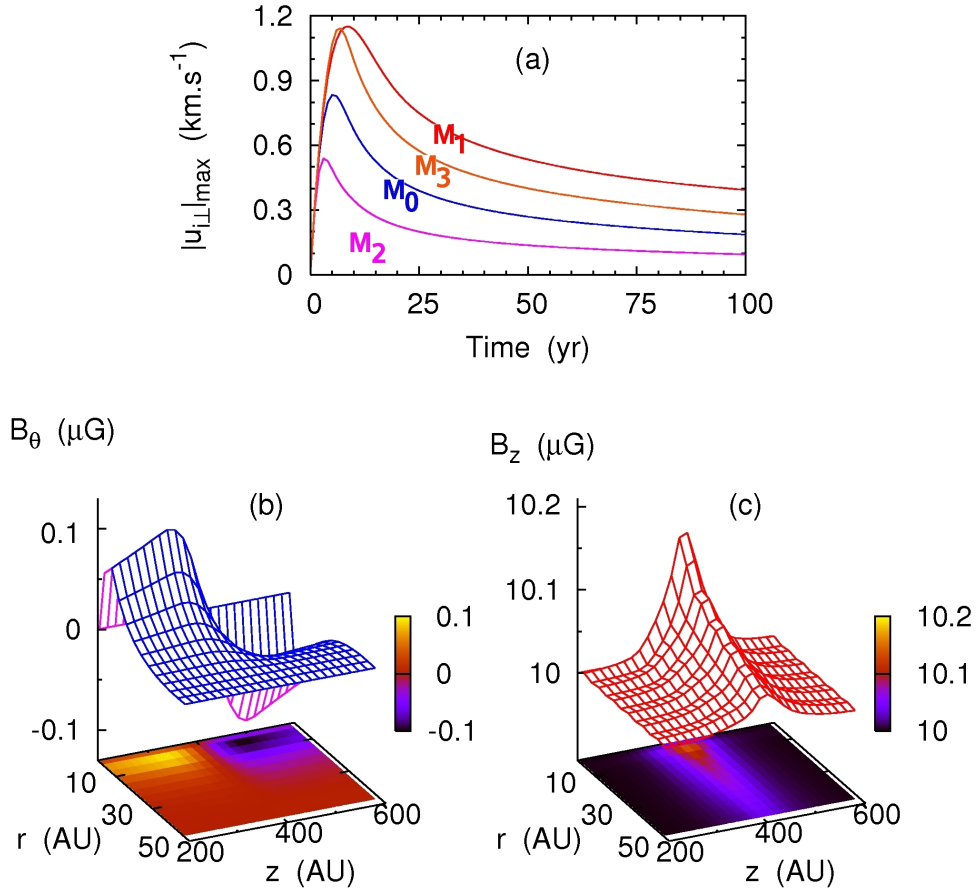


FIG. 8.1 – Résultats du code Vortex-Dynamics.f95, version v3. Panneau (a) : évolution de la vitesse maximale des ions dans le plan perpendiculaire à l'axe de révolution $|u_{i\perp}|_{\max}$; les différentes courbes correspondent à différents modèles (cf. Tab. 8.2). Panneaux (b & c) : composantes orthoradiale et axiale du champ magnétique à $t = 100$ ans, en fonction de r et de z pour le modèle de référence (cf. Tab. 8.1).

gendrent une torsion et une compression de lignes de champ autour et le long de l'axe de révolution. En réponse, le champ magnétique exerce sur les ions une force opposée au mouvement, somme de la force de tension magnétique et du gradient de pression magnétique (Eq. 8.23). Au bout d'un temps court (~ 100 ans) face au temps de vie du vortex (comparer ce temps à τ_V , Fig. 6 de Godard *et al.* 2009a, pour le modèle équivalent), $|u_{i\perp}|_{\max} < 0.4 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$, et est donc négligeable en comparaison de la composante de la vitesse des neutres dans le plan perpendiculaire à l'axe. Notons que les variations du champ magnétique (responsables du ralentissement des ions) sur l'ensemble de la structure sont très faibles ; de l'ordre de 1 % de la valeur du champ magnétique ambiant : les lignes de champ ne sont que très légèrement torsadées et comprimées.

Pour le modèle de référence, la structure atteint un état stationnaire au bout de 100

ans. De plus, nous trouvons que le terme d'advection $(\mathbf{u}_i \cdot \nabla)\mathbf{u}_i$ de l'équation 8.1 est très faible en comparaison des autres termes : l'état stationnaire résulte donc uniquement d'un équilibre entre les forces volumiques spécifiques de friction ion-neutre

$$F_{in} = \gamma \rho_n (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_i) \quad (8.22)$$

et de Lorentz

$$F_L = \frac{1}{4\pi\rho_i} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\rho_i} (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{B} - \frac{1}{8\pi\rho_i} \nabla(|\mathbf{B}|^2) \quad (8.23)$$

où l'on a séparé ici les termes de tension et de gradient de pression magnétique.

On remarque enfin, sur la Fig. 8.1 (panneau b) que le champ magnétique orthoradial est antisymétrique en z par rapport à un point z_0 . Ceci vient du fait que nous avons centré le vortex en z_0 . En effet, comme l'indique l'équation 7.6 qui donne la composante axiale de la vitesse du fluide neutre, pour $z > z_0$ l'écoulement à lieu dans le sens des z croissants, tandis que dans le cas inverse, l'écoulement axial est dirigé dans le sens des z décroissants. Cela implique un changement de signe de la force de friction ion-neutre, projetée selon z , et finalement un changement de signe de la composante orthoradiale B_θ du champ \mathbf{B} (voir l'équation 8.5).

8.3.3 Terme de chauffage turbulent induit

Ainsi, quand le vortex a atteint l'état stationnaire, les vitesses d'ensemble des fluides neutres et ionisés sont très différentes. La principale conséquence de ce processus (dans l'étude de l'évolution thermique et chimique du MIS diffus) est sa contribution au chauffage du gaz. En effet, les collisions élastiques entre les ions et les neutres sont sources de transfert de l'énergie cinétique en énergie thermique. Le taux de chauffage résultant correspond à la puissance de la force de friction ion-neutre, exprimée dans le référentiel barycentrique. Dans ce référentiel, les vitesses des neutres \mathbf{u}_{nb} et des ions \mathbf{u}_{ib} s'écrivent :

$$\mathbf{u}_{nb} = \frac{\mu_i}{\mu_n + \mu_i} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_i) \quad \text{et} \quad \mathbf{u}_{ib} = \frac{\mu_n}{\mu_n + \mu_i} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_n). \quad (8.24)$$

Si bien que le taux de chauffage des neutres par friction avec les ions s'exprime

$$\Gamma_{in} = \frac{\rho_n \rho_i}{\mu_n + \mu_i} \langle \sigma u \rangle_{in} \frac{\mu_i}{\mu_n + \mu_i} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_n)^2 \quad (8.25)$$

tandis que le taux de chauffage des neutres par friction avec les électrons s'écrit

$$\Gamma_{en} = \frac{\rho_n \rho_e}{\mu_n + \mu_e} \langle \sigma u \rangle_{en} \frac{\mu_e}{\mu_n + \mu_e} (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_n)^2 \quad (8.26)$$

où $\langle \sigma u \rangle_{in}$ et $\langle \sigma u \rangle_{en}$ sont les taux de transfert de moment par collisions ion-neutre et électron-neutre. De manière similaire, on obtient la contribution au chauffage des ions et des électrons par le fluide neutre

$$\Gamma_{ni} = \frac{\mu_n}{\mu_i} \Gamma_{in} \quad \text{et} \quad \Gamma_{ne} = \frac{\mu_n}{\mu_e} \Gamma_{en} \quad (8.27)$$

Ces expressions supposent que les électrons sont entièrement couplés avec les ions. Ceci sera justifié dans le chapitre qui suit.

8.4 Contraintes sur le taux d'étirement a

Il existe plusieurs contraintes qui réduisent le champ d'investigation du paramètre a : le taux d'étirement.

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, a détermine la taille caractéristique radiale r_0 d'un vortex $r_0^2 = 4\nu/a$ (cf. équation 7.18). Ainsi, la première condition vient du fait que le modèle doit nécessairement vérifier l'approximation fluide, c'est-à-dire que r_0 soit toujours grand (nous prenons un facteur 10 pour le calcul ci-dessous) en comparaison du libre parcours moyen des particules du gaz. Nous prenons une section efficace de collision élastique H-H de $\sigma_{\text{H-H}} \sim 5.7 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ (Spitzer 1978), et une section efficace de collision élastique H₂-H₂ de $\sigma_{\text{H}_2\text{-H}_2} \sim 3 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ (Monchick *et al.* 1980). Que l'on considère un gaz atomique ou moléculaire, les conditions résultantes sur a sont similaires, à savoir :

$$a < 2 \times 10^{-9} \left(\frac{n_{\text{H}}}{50 \text{ cm}^{-3}} \right) \text{ s}^{-1}. \quad (8.28)$$

Une seconde contrainte est fournie par la comparaison de la période d'un vortex τ_P et le temps que met une particule fluide à traverser la structure dans la direction radiale τ_c (cf. Sect. 7.4). Il faut en effet que le premier soit inférieur au second, ce qui donne une limite supérieure sur a un peu moins restrictive que celle énoncée ci-dessus, soit

$$a < 9 \times 10^{-9} \left(\frac{n_{\text{H}}}{50 \text{ cm}^{-3}} \right) \text{ s}^{-1}. \quad (8.29)$$

Enfin, dans l'étude de la dynamique du fluide ionisé dans une structure de type vortex, la première hypothèse a été de supposer que les ions n'ont aucune action sur la dynamique du fluide neutre, présentée dans le chapitre précédent. Cette hypothèse revient à considérer que la force volumique spécifique de friction exercée par les ions sur les neutres $\gamma\rho_i(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_i)$ est négligeable (ici encore nous prenons un facteur 10 pour le calcul qui suit) en comparaison de la force volumique spécifique d'advection des neutres $(\mathbf{u}_n \cdot \nabla)\mathbf{u}_n$. Ceci est vérifié pour :

$$a > 5 \times 10^{-13} \left(\frac{n_{\text{H}}}{50 \text{ cm}^{-3}} \right) \text{ s}^{-1}. \quad (8.30)$$

On remarque que toutes ces limites dépendent de la densité du gaz n_{H} . Quand celle-ci augmente, les valeurs possibles du paramètre a sont décalées vers des coefficients d'étirement plus grands. Puisque dans le chapitre suivant, nous étudions des vortex se développant dans le gaz interstellaire diffus ($10 < n_{\text{H}} < 500 \text{ cm}^{-3}$), nous limitons donc le domaine d'exploration du taux d'étirement à

$$10^{-12} < a < 10^{-9} \text{ s}^{-1}. \quad (8.31)$$

8.5 Conclusion

Les structures dissipatives de la turbulence que nous étudions sont des vortex magnétisés. Nous avons vu dans le chapitre précédent que l'écoulement des neutres induit nécessairement un transfert d'énergie cinétique en chaleur par friction visqueuse. Dans

ce chapitre, nous nous sommes intéressés à la dynamique du fluide ionisé et à l'évolution du champ magnétique. Et nous avons montré que la structure atteint rapidement (en comparaison du temps de vie d'un vortex) un état stationnaire dans lequel la vitesse des ions est pratiquement nulle (en comparaison avec la vitesse des neutres) et le champ magnétique est très légèrement hélicoïdal et comprimé autour de et selon l'axe de révolution. Enfin, la grande différence de vitesse d'ensemble entre les fluides neutre et ionisé engendre un processus de chauffage du gaz par friction ion-neutre que nous pouvons quantifier.

Le code *Vortex-Dynamics.f95* a été peu exploré. L'espace des paramètres n'a été étudié qu'en fonction des paramètres numériques (tels que les résolutions) et très peu en fonction des paramètres physiques d'un vortex et du gaz ambiant. En effet, notre principal souci était de vérifier la validité de la méthode d'intégration (en développant plusieurs versions et en étudiant les instabilités numériques possibles). Nous projetons néanmoins d'améliorer ce code et d'étudier de manière plus approfondie les prédictions obtenues en fonctions des autres paramètres, en priorité la densité et le taux d'étirement a .

Dans le chapitre qui suit, nous étudions l'évolution thermique et chimique du gaz à l'intérieur d'un vortex magnétisé que nous supposons à l'état stationnaire. Ceci est la première étape du développement du modèle que nous avons baptisé le modèle TDR (Turbulent Dissipation Regions).

Chapitre 9

Le modèle TDR : Turbulent Dissipation Regions

Sommaire

9.1	Description du code Thermo-chimie.f95	166
9.1.1	Méthodologie et architecture	166
9.1.2	Les entrées-sorties	169
9.1.3	Les équations d'évolution	170
9.1.4	Lecture & analyse des résultats	174
9.2	Description du modèle TDR	174
9.2.1	Variables et équations	176
9.2.2	Paramètres et contraintes énergétiques	177
9.3	Article Godard <i>et al.</i> 2009a	179
9.4	Les résultats complémentaires	202
9.4.1	Un vortex s'expand-il sous l'effet de la température	202
9.4.2	Évolution des abondances durant la phase de relaxation	203
9.4.3	Importance des différentes phases	206
9.4.4	Prédictions pour les futures observations	210
9.5	Conclusions	211

Outre le code d'intégration des équations d'évolution du fluide ionisé et du champ magnétique dans un vortex NF, présenté dans le chapitre précédent, le modèle TDR comprend 2 autres codes numériques distincts écrit en langage Fortran 95, *Thermo-chimie.f95* et *Los.f95*.

- Alors que le premier calcule l'évolution thermique et chimique d'un gaz piégé dans un vortex NF à l'état stationnaire, et quantifie donc l'impact **local** de la dissipation de l'énergie turbulente,
- le second évalue son influence à **grande échelle**, en calculant les densités de colonne et les propriétés statistiques d'une ligne de visée aléatoire au travers du gaz interstellaire diffus turbulent, et donc peuplé de structures dissipatives.

Dans ce chapitre, nous présentons les principes, les paramètres, les variables, les équations et l'architecture de ces codes. Tandis que les résultats principaux et leurs comparaisons aux observations sont discutés dans Godard *et al.* (2009a, 2009b), ce chapitre (ainsi que l'annexe D) exposent les résultats complémentaires.

9.1 Description du code Thermo-chimie.f95

9.1.1 Méthodologie et architecture

Tandis que la Fig. 9.1 décrit de manière schématique les principales étapes du code Thermo-chimie.f95, la Fig. 9.2 présente son architecture numérique et répertorie les fonctions qui le composent.

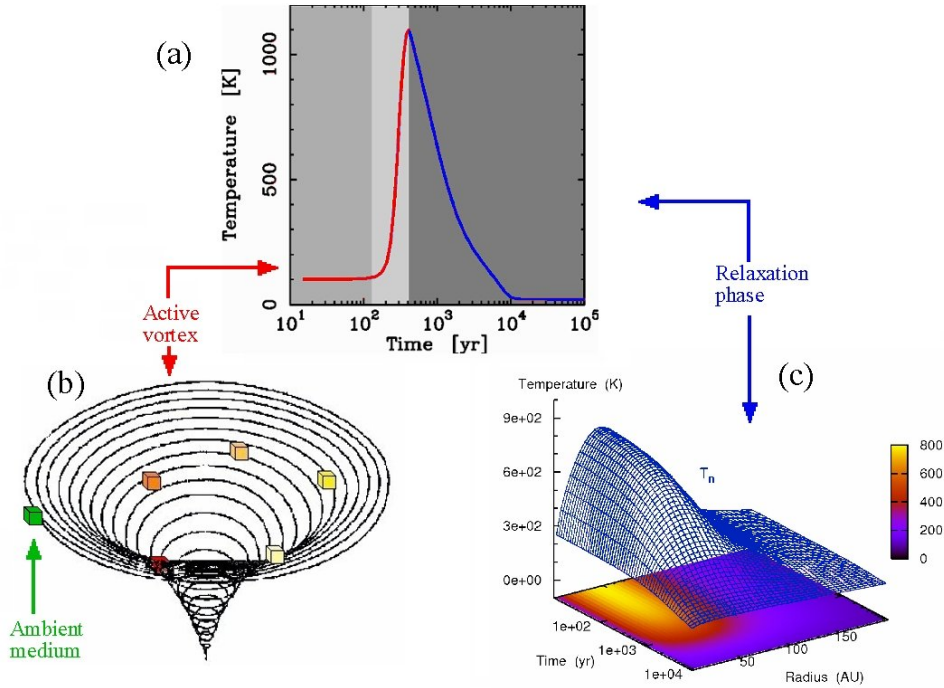


FIG. 9.1 – Description schématique des différentes étapes du code Thermo-chimie.f95. Panneau (a) : évolution de la température d’une cellule fluide durant son parcours dans le vortex actif (rouge) puis durant la phase de relaxation (bleu) après la destabilisation du vortex (Hily-Blant, comm. priv.). Panneau (b) : schéma d’un vortex et vue lagrangienne de l’évolution d’une particule fluide à l’intérieur du vortex actif. Panneau (c) : évolution de la température de chaque cellule fluide composant un vortex en phase de relaxation, en fonction donc de la position et du temps (Godard *et al.* 2009a).

Soit une cellule fluide caractéristique du milieu interstellaire diffus se retrouvant piégée (ou plutôt entraînée) dans une structure dissipative de la turbulence de type vortex. Comme on peut le voir dans la Fig. 9.1 (panneau a), son évolution peut-être décomposée en 3 étapes successives (notées respectivement **Ambient medium**, **Active vortex** et **Relaxation phase** dans la Fig. 9.1).

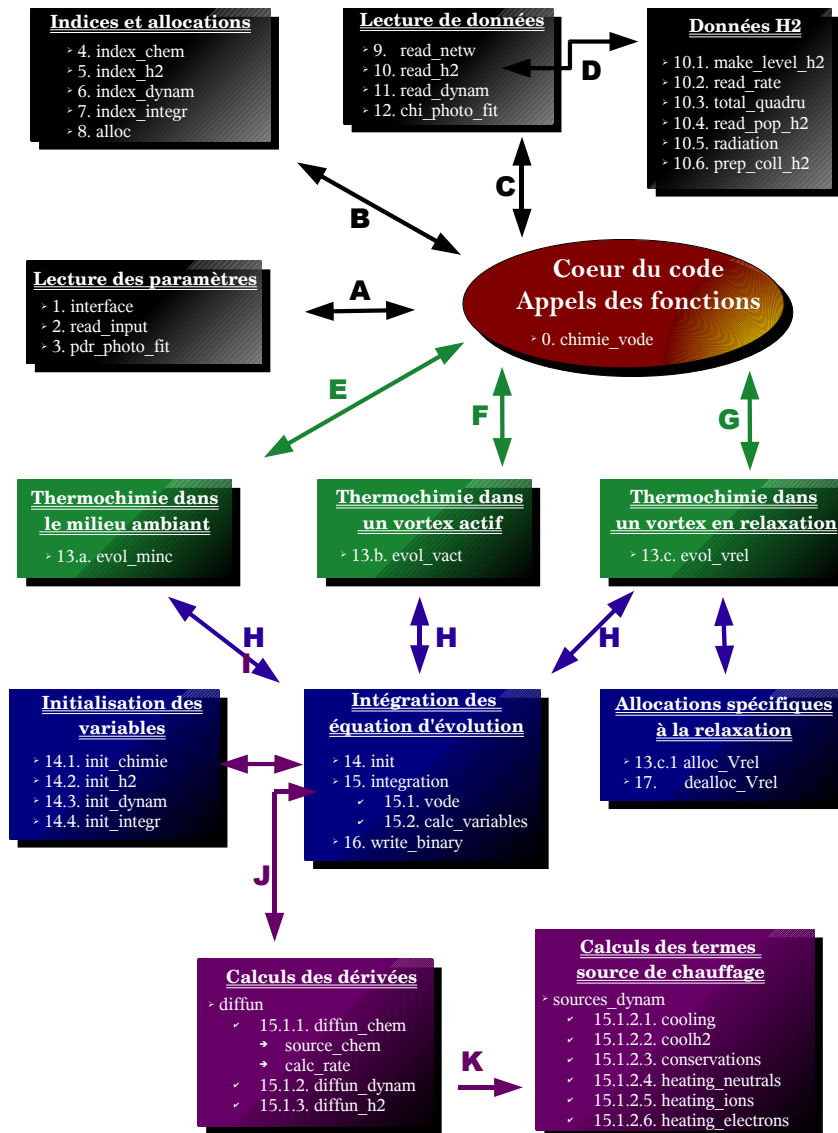
1. La cellule est aux bords du vortex (panneau b) et sa composition chimique ainsi que sa température sont celles du MIS diffus, c’est-à-dire contrôlées principalement par le champ de rayonnement UV ambiant.
2. La cellule pénètre dans le vortex et sa dynamique est alors couplée à son évolution chimique et thermique (panneau b & courbe rouge dans le panneau a) :

les termes de chauffage turbulent Γ_{m} et Γ_{in} , présentés dans les 2 chapitres précédents, provoquent une augmentation rapide de la température. Cet effet, combiné à la différence de vitesse ion-neutre (issue elle-même de la forme du champ magnétique dans la structure, cf. Chap. 8), est suffisant pour activer certaines réactions chimiques (voir la Sect. 3.4, Chap. 3), telles que $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$ ($\Delta E/k = 4640$ K), et ainsi modifier la composition de la cellule fluide.

3. Une fois le vortex détruit, la cellule met du temps à refroidir (panneau c et courbe bleue dans le panneau a) et à atteindre un nouvel état d'équilibre chimique : les évolutions thermique et des abondances des espèces chimiques ont d'ailleurs des temps caractéristiques différents, qui dépendent principalement de la densité du gaz et du champ de rayonnement ambiant. On appelle ces processus, les inerties thermique et chimique d'un gaz, c'est-à-dire sa capacité à résister à évoluer vers un autre état. L'état final qu'atteint la particule fluide dépend de l'équation d'état choisie : si l'on considère une évolution isochore, l'état final est identique à l'état initial (avant d'entrer dans le vortex) ; en revanche, si une évolution isobare est choisie, les densité et température finales de la cellule fluide vérifient la relation $n_{H,f} \times T_f = n_{H,0} \times T_{vor}$, où $n_{H,0}$ et T_0 sont respectivement sa densité initiale (avant d'entrer dans le vortex), et sa température dans le vortex (au moment ou celui-ci est détruit).

L'objectif du code Thermo-chimie.f95 est donc d'intégrer les équations différentielles couplées qui régissent l'évolution dynamique, thermique et chimique (celles-ci sont décrites plus bas) des particules fluides qui composent un vortex, et ce successivement pour les étapes 1., 2. et 3. : le résultat de chaque étape correspondant aux conditions initiales de l'étape suivante. Quand le vortex est actif la cellule fluide est suivie de manière lagrangienne si bien que la variable d'intégration peut aussi bien être le temps t que le rayon r (position radiale de la cellule dans la structure). En revanche, quand le vortex se destabilise et commence la phase de relaxation (appelée dans la suite vortex en relaxation), l'approche devient eulérienne : en effet, l'entraînement dû au vortex a disparu. Et l'évolution du gaz est calculée en chaque point en fonction du temps. Ainsi, le code Thermo-chimie.f95 est successivement 1D (étapes 1. et 2.) puis 2D (étape 3.)

Comme l'indique la Fig. 9.2 le code est composé de plusieurs couches (correspondant aux différentes couleurs) visant à résoudre de manière cohérente les 3 types d'évolution. Après la lecture des paramètres et des données nécessaires (comme par exemple le réseau chimique utilisé ou les taux de collisions de H_2), ainsi que l'initialisation des tableaux (couche noire dans la Fig. 9.2), les fonctions `evol_minc`, `evol_vact` et `evol_vrel` (cf. Fig. 9.2) appellent le même intégrateur (couche bleue), qui utilise les fonctions de calcul des dérivées de chaque variable pour évaluer celle-ci au pas de temps suivant. Il faut de noter que l'appel de l'intégrateur, symbolisé **H** dans la Fig. 9.2 s'effectue en boucle dans le cas des fonctions `evol_vact` et `evol_vrel` : en effet, en ce qui concerne le vortex actif, la boucle permet d'adapter la valeur de ω_0 (la vortacité au centre du vortex, cf. Chap. 7) afin d'obtenir la valeur choisie de la vitesse orthoradiale maximale $u_{\theta,max}$ (celle-ci est en effet un paramètre d'entrée, voir la section suivante) ; en ce qui concerne la phase de relaxation, la boucle s'effectue sur toutes les positions radiales (du vortex), et leurs évolutions en fonction du temps sont donc calculées séparément.



Architecture du code Thermo-chimie.f95

FIG. 9.2 – Architecture du code Thermo-chimie.f95. Les couleurs des boîtes correspondent aux différentes couches du code : lecture des paramètres et des données et initialisation des tableaux et des index (en noir), appels des fonctions evol_minc, evol_vact et evol_vrel (en vert, voir texte), appel de l'intégrateur, initialisation des variables et écriture des résultats (en bleu), et calculs des dérivées (en violet). L'ordre d'utilisation d'une couche, ou d'une sous couche est indexé par une lettre, tandis que l'ordre des appels des diverses fonctions est indiqué par un nombre.

9.1.2 Les entrées-sorties

Les paramètres

TAB. 9.1 – Paramètres physiques du code numérique Thermo-chimie.f95. Les paramètres de contrôle de l'intégrateur VODE (Brown *et al.* 1989) ne sont pas présents dans cette table, ni les paramètres de contrôle des équations d'état des phases ambiantes et de relaxation.

Paramètre	unité	valeur par défaut	gamme
χ		1	
ζ	s^{-1}	3×10^{-17}	$1 - 10 \times 10^{-17}$
n_H	cm^{-3}	50	10 – 500
A_V		0.4	0.1 – 1
T_{init}	K	100	
a	s^{-1}	10^{-11}	$10^{-12} - 10^{-9}$
$u_{\theta \max}$	$cm.s^{-1}$	3.5	2 - 4
$u_r \max$	$cm.s^{-1}$	1.0	0.2 - 2

La Tab. 9.1 liste les paramètres d'entrée du code Thermo-chimie.f95. Ceux-ci fixent les conditions du milieu dans lequel la cellule fluide considérée évolue au cours du temps. On distingue 4 catégories.

- Les paramètres qui déterminent la nature du milieu ambiant à savoir : (1) le champ de rayonnement (ISRF) auquel le milieu est soumis χ (en unité du champ de Draine, cf. Sect. 1.1), (2) l'extinction A_V c'est-à-dire la protection de la particule fluide de l'ISRF par le milieu ambiant, (3) le taux d'ionisation par les rayons cosmiques ζ , (4) la température initiale du gaz T_{init} et (5) sa densité n_H .
- Les paramètres de choix de l'équation d'état du gaz dans les phases ambiante et de relaxation. Pour le moment, le code Thermo-chimie.f95 permet l'emploi d'évolutions isochore ou isobare.
- Les paramètres qui contrôlent la forme (étiré ou non) et la taille (radiale) du vortex, et qui ont été présentés dans les 2 chapitres précédents, soit (6) le taux d'étirement a , et (7 & 8) les vitesses orthoradiale et radiale maximales $u_{\theta \max}$ et $u_r \max$.
- Les paramètres de contrôle de l'intégrateur, qui ne figurent pas dans la Tab. 9.1. Les principaux sont le pas de temps initial Δt_{init} , le facteur multiplicatif du pas de temps à chaque itération $f_{\Delta t}$, et le temps maximal d'intégration t_{\max} .

Les variables

À chaque pas de temps, et pour chaque phase (milieu ambiant, vortex actif, phase de relaxation), le code Thermo-chimie.f95 calcule l'évolution :

- de 11 variables dynamiques, à savoir (1) la position r de la particule fluide, (2, 3, 4 & 5) les vitesses radiales et orthoradiales des neutres et des ions u_{nr} , u_{ir} , $u_{n\theta}$ et $u_{i\theta}$, (6, 7, 8 & 9) leurs densités en nombre et en masse n_n , n_i , ρ_n et ρ_i , et (10 & 11) leur température T_n et T_i ;

- de N_{chim} variables chimiques, à savoir les abondances de chaque espèce considérée ;
- et des abondances des niveaux rovibrationnels de H_2 ; puisque la température du gaz ne dépasse jamais 2000 K dans nos simulations, le nombre de niveaux de H_2 pris en compte est réduit à 18 (soit $T_{\text{ex}} < 10^4 \text{K}$).

Bien que les évolutions des neutres et des ions soient traitées de manière séparée, les ions et les électrons sont traités comme un seul et unique fluide. En effet, comme on le montre en annexe C, la différence de vitesse entre les ions et les électrons est au plus $\Delta u \sim 1 \text{ cm.s}^{-1}$ dans le milieu interstellaire diffus, une valeur faible comparée aux vitesses atteintes par les neutres durant la phase active, et aux vitesses thermiques des ions et des neutres. En outre, le temps caractéristique d'échange thermique entre les ions et les électrons (Spitzer 1978),

$$\tau_{T_{ie}} \sim 0.1 \left(\frac{T}{1000 \text{ K}} \right)^{3/2} \left(\frac{n_i}{3 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-3}} \right)^{-1} \text{ an}, \quad (9.1)$$

est très court en comparaison des temps d'évolution dynamique, thermique et chimique des ions et des neutres dans les 3 phases étudiées. Si bien que les électrons peuvent être considérés comme parfaitement couplés au fluide ionisé.

Le nombre N_{chim} d'espèces dépend du réseau chimique adopté par l'utilisateur. Actuellement notre réseau, présenté en annexe F, comporte 90 espèces dont la liste est donnée en Tab. F.1 (contenant également leurs enthalpies de formation respectives).

Temps d'exécution et espace mémoire

Si les évolutions thermique et chimique de chaque phase (ambiante, vortex actif, vortex en relaxation) sont calculées, le code Thermo-chimie.f95 s'exécute en environ 5 min, la phase de relaxation calculant toujours l'évolution temporelle de 50 points régulièrement espacés dans le vortex. Les fichiers de sortie créés sont 3 fichiers binaires (un pour chaque phase) qui comprennent les paramètres donnés en entrée, les valeurs des variables pour chaque pas de temps (environ 250, 300 et 150 pour les phases ambiante, active et de relaxation respectivement), ainsi que les valeurs de certaines variables intermédiaires importantes : les détails des taux de chauffage et de refroidissement, les masses moléculaires moyennes des neutres et des ions et les viscosités dynamique et cinématique. Au total, l'espace mémoire occupé par ces 3 fichiers est de : $\sim 0.5 \text{ Mo}$ (mégaoctet) pour la phase ambiante, $\sim 0.5 \text{ Mo}$ pour la phase active et $\sim 11 \text{ Mo}$ pour la phase de relaxation.

9.1.3 Les équations d'évolution

D'après les Chaps. 7 & 8 et les explications données dans les sections ci-dessus, la position d'une particule fluide, ainsi que ses vitesses radiale et orthoradiale vérifient

les équations différentielles suivantes :

phase ambiante & phase de relaxation	phase active
$\frac{dr}{dt} = 0$	$\frac{dr}{dt} = -\frac{a}{2}r \cdot e^{-\beta r^2}$
$\frac{du_{nr}}{dt} = 0$	$\frac{du_{nr}}{dt} = \left(\frac{a}{2}\right)^2 r (1 - 2\beta r^2) \cdot e^{-2\beta r^2}$
$\frac{du_{ir}}{dt} = 0$	$\frac{du_{ir}}{dt} = 0$
$\frac{du_{n\theta}}{dt} = 0$	$\frac{du_{n\theta}}{dt} = \frac{1}{r} \frac{a}{2} \cdot e^{-\beta r^2} \cdot \frac{d}{dt} \left[\int_{r_{\text{init}}}^r r' \omega_0 \cdot e^{-\frac{a}{4\beta} (1 - e^{-\beta r'^2})} dr' \right]$
$\frac{du_{i\theta}}{dt} = 0$	$\frac{du_{i\theta}}{dt} = 0$

(9.2)

où l'on remarque que la vitesse des ions à l'intérieur d'un vortex actif est considérée comme constante sur toute la structure. Dans la suite nous adoptons $u_{ir} = u_{i\theta} = 0$, une hypothèse justifiée par les résultats du code d'intégration des équations de la dynamique régissant l'évolution des ions et du champ magnétique dans un vortex, le code Vortex-Dynamics.f95 présenté dans le chapitre précédent. Il serait en revanche tout à fait envisageable de fournir un profil de vitesse des ions en fonctions des paramètres a , $u_{\theta \text{ max}}$ et $u_{r \text{ max}}$, mais une telle approche restreindrait considérablement l'exploration des paramètres du modèle TDR, en raison de la grande différence entre les temps d'exécution des codes Vortex-Dynamics.f95 et Thermo-chimie.f95. En outre, la vitesse des ions étant très faible pour toute position dans le vortex, le gain de cette approche serait minime : les termes de chauffage turbulent induits ne seraient que peu modifiés.

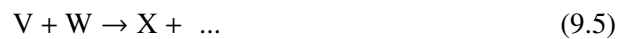
Soit U_n et U_i les densités d'énergie thermique des neutres et des ions pour une particule fluide de l'écoulement. Quelle que soit la phase étudiée, ces grandeurs vérifient les équations suivantes :

$$\frac{dU_n}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\frac{3}{2} n_n k T_n \right] = B_n + \Gamma_{nn} + \Gamma_{in} + \Gamma_{en} \quad (9.3)$$

$$\frac{dU_i}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\frac{3}{2} n_i k T_i \right] = B_i + B_e + \frac{\mu_n}{\mu_i} \Gamma_{in} + \frac{\mu_n}{\mu_e} \Gamma_{en} \quad (9.4)$$

qui régissent donc l'évolution des températures T_n et T_i d'une particule fluide. En ce qui concerne les phases ambiante et de relaxation, les équations ci-dessus sont simplifiées puisque les termes de chauffage turbulent Γ_{nn} , Γ_{in} et Γ_{en} sont nuls. Les termes B_n , B_i et B_e correspondent à la somme des termes de chauffage et de refroidissement des neutres, des ions et des électrons, qui ont été présentés dans le Chap. 2.

Considérons maintenant une espèce chimique X et son abondance $n(X)$ (en cm^{-3}). Supposons que X soit formée par la réaction



et détruite par



de vitesses respectives k_F et k_D (en $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$). La variation de $n(X)$ s'écrit donc

$$\frac{dn(X)}{dt} = k_F n(V)n(W) - k_D n(X)n(Y). \quad (9.7)$$

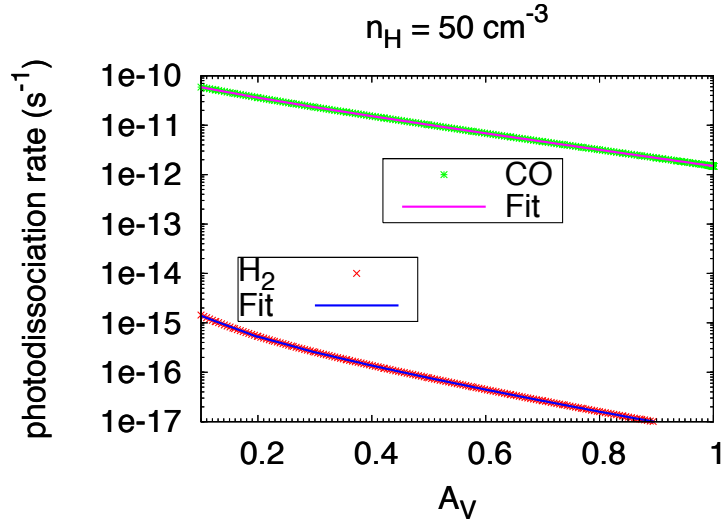


FIG. 9.3 – Comparaison des taux de photodissociation de H_2 et CO obtenus par le modèle PDR avec les ajustements de ces taux sous la forme $\alpha\chi\exp(-\beta A_V)$.

L'équation d'évolution de $n(X)$ s'obtient donc en sommant les contributions de toutes les réactions impliquées dans la formation ($N_{\text{RF}}(X)$ = nombre de réactions de formation) et la destruction ($N_{\text{RD}}(X)$ = nombre de réactions de destruction) de l'espèce X , soit :

$$\frac{dn(X)}{dt} = \sum_{j=1}^{N_{\text{RF}}(X)} k_{F,j} n(V_j) n(W_j) - n(X) \sum_{j=1}^{N_{\text{RD}}(X)} k_{D,j} n(Y_j). \quad (9.8)$$

Le réseau chimique (ensemble de réactions par lesquelles les atomes et les molécules interagissent) que nous utilisons est présenté en annexe F et comporte 1515 réactions incluant la formation de H_2 sur les grains, les photoprocessus et les réactions avec les rayons cosmiques. Le code Thermo-chimie.f95 comporte toutefois une spécificité importante concernant les taux de photodissociation. En effet, les processus impliqués dans la photodissociation d'une molécule ne sont pas les mêmes en fonction de l'espèce considérée. Cette remarque a déjà été faite dans la Sect. 2.5 du Chap. 2 : alors que certaines molécules, telles que CH^+ ou NH , sont photodissociées de manière directe, d'autres, telles que H_2 et CO sont donc photodissociées dans les raies. Ainsi, dans un nuage du MIS, la photodissociation de H_2 aux bords du nuage protège les molécules H_2 et CO situées à des extinctions plus grandes. Pour tenir compte de cet écrantage par H_2 , on utilise les résultats du modèle PDR de Meudon (Le Petit *et al.* 2006) qui résout en chaque point le transfert de rayonnement en tenant compte de l'absorption

des grains dans le continu et des transitions discrètes de H, H₂ et CO et qui réalise donc une analyse explicite des taux de photodissociation de H₂ et CO. Comme le montre la Fig. 9.3, des ajustements de ces taux sous la forme $\alpha\chi\exp(-\beta A_V)$ ont été effectués et sont utilisés dans le code Thermo-chimie.f95. On remarque que l'accord est tel qu'on ne peut distinguer, sur la Fig. 9.3, les taux calculés par le modèle PDR et les taux déduits de l'ajustement.

À partir des équations d'évolution de la densité de chaque espèce chimique, on peut déduire les équations d'évolution des densités (en nombre et en masse) des ions et des neutres, à savoir :

$$\frac{dn_n}{dt} = \sum_{j=1}^{N_n} \frac{dn(X_j)}{dt} \quad (9.9)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{dn(X_j)}{dt} \quad (9.10)$$

$$\frac{d\rho_n}{dt} = \sum_{j=1}^{N_n} m_j \frac{dn(X_j)}{dt} \quad (9.11)$$

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} m_j \frac{dn(X_j)}{dt} \quad (9.12)$$

où N_n et N_i sont respectivement les nombres d'espèces neutres et ionisées pris en compte dans le réseau chimique, et m_j est la masse de l'espèce X_j . Dans le réseau que nous avons adopté, $N_n = 36$ et $N_i = 54$ (voir annexe F).

Enfin, en ce qui concerne les populations des niveaux rovibrationnels de H₂, les équations d'évolution s'obtiennent en tenant compte des mécanismes d'excitation et de désexcitation de chaque niveau. Considérons un niveau l , et notons A_{ul} et C_{ul} les probabilités (en s⁻¹) de transition radiative spontanée et collisionnelle d'un niveau u quelconque vers le niveau l . Alors la variation de la densité $n(\text{H}_{2,l})$ s'écrit :

$$\frac{dn(\text{H}_{2,l})}{dt} = \sum_{u=1}^{N_{\text{levH}_2}} n(\text{H}_{2,u}) (A_{ul} + C_{ul}). \quad (9.13)$$

où N_{levH_2} est le nombre de niveaux de H₂ considérés. La molécule H₂ étant symétrique, elle ne possède pas de moment dipolaire permanent. Les transitions radiatives sont donc de type quadrupolaire électrique, avec la règle de sélection $\Delta J = \pm 2$. C'est pourquoi, il est courant de considérer que la molécule H₂ existe sous 2 formes distinctes : le ortho-H₂ pour lequel le spin nucléaire total de la molécule vaut 1 (ceci correspond aux niveaux J impairs) et le para-H₂ où le spin nucléaire total vaut 0 (ceci correspond aux niveaux J pairs). Selon la règle de sélection énoncée plus haut, il n'y a pas de transition radiative entre les niveaux ortho et para. Pour les transitions collisionnelles, nous adoptons l'approche de Le Bourlot *et al.* (1999) qui tiennent compte de l'excitation de H₂ par collisions non réactives (la règle de sélection s'applique) avec H, He, et H₂, ainsi que par collisions réactives avec H (il y a alors transition entre les niveaux ortho et para). Dans cette approche, les probabilités de transitions non réactives avec H, He et H₂ proviennent des calculs de Flower & Roueff (1998b), Flower *et al.* (1998) et de Flower & Roueff (1998a).

On remarque finalement que toutes les équations présentées dans cette section sont des équations différentielles couplées du premier ordre. Dans le code Thermo-chimie.f95, la résolution de ce système se fait via l'utilisation de l'intégrateur VODE¹ (Brown *et al.* 1989) spécialement construit pour traiter des problèmes raides, c'est-à-dire des systèmes d'équations où les constantes de temps impliquées couvrent des ordres de grandeur.

9.1.4 Lecture & analyse des résultats

L'analyse des résultats du code Thermo-chimie.f95 est assurée par un code interactif de lecture des fichiers binaires, appelé Los.f95. Selon les choix de l'utilisateur, ce code permet :

- d'étudier les évolutions des réactions chimiques, des termes de chauffage et de refroidissement, ainsi que de chaque variable dans n'importe quelle phase, en fonction du temps ou de la position à l'intérieur de la structure vortex ;
- de construire une ligne de visée aléatoire dans le milieu interstellaire diffus qui tient compte de la quantité totale d'énergie turbulente dissipée dans le milieu ; c'est le modèle TDR (Turbulent Dissipation Regions).

9.2 Description du modèle TDR

La Fig. 9.4 décrit, de manière schématique, les principes du modèle TDR. A partir des résultats du code Thermo-chimie.f95, une ligne de visée aléatoire traversant le milieu interstellaire diffus est modélisée via le code Los.f95. Comme le montre le panneau (a) de la Fig. 9.4, on suppose que toute ligne de visée traversant le milieu diffus intercepte : plusieurs vortex en phase active ; et plusieurs empreintes de vortex éteints dont le gaz est en phase de relaxation thermique et chimique (appelées dans la suite *vortex en relaxation* ou *phases de relaxation*). Les quantités importantes et observables dans le milieu interstellaire (telles que les densités de colonne, les profils de raies moléculaires, le taux de dissipation d'énergie turbulente,...) s'obtiennent alors en intégrant les profils (de densité, d'énergie dissipée, de vitesse,...) le long de la ligne de visée (panneau b, Fig. 9.4).

En tout point de la ligne de visée, le champ de rayonnement est supposé avoir la même intensité et le milieu interstellaire le même écrantage A_V . En outre, tous les vortex de la ligne de visée sont supposés identiques. Ces hypothèses ont pour objectif de pouvoir étudier séparément l'impact de chaque paramètre du modèle sur la composition chimique à grande échelle. Comme le montrent Godard *et al.* (2009a), l'unicité des vortex est loin d'être une mauvaise approximation, tous les résultats étant similaires sur une vaste gamme de paramètres $\{a, u_{\theta \max}\}$. En revanche, concernant le champ de rayonnement, l'approche suivie dans le modèle TDR est différente de celle des modèles PDR : dans les TDRs, la quantité de matière échantillonnée par la ligne de visée ne croît pas avec l'extinction. La distribution de matière étant fractale, on considère que la matière échantillonnée dans le milieu diffus est un ensemble de petites structures, chacune peu échantillonnée de l'ISRF, mais pouvant à elles toutes constituer des quantités de matière importantes. C'est donc à petite échelle que la prise en compte du

¹Celui-ci est en accès libre à l'adresse <http://www.netlib.org/ode/vode.f/>

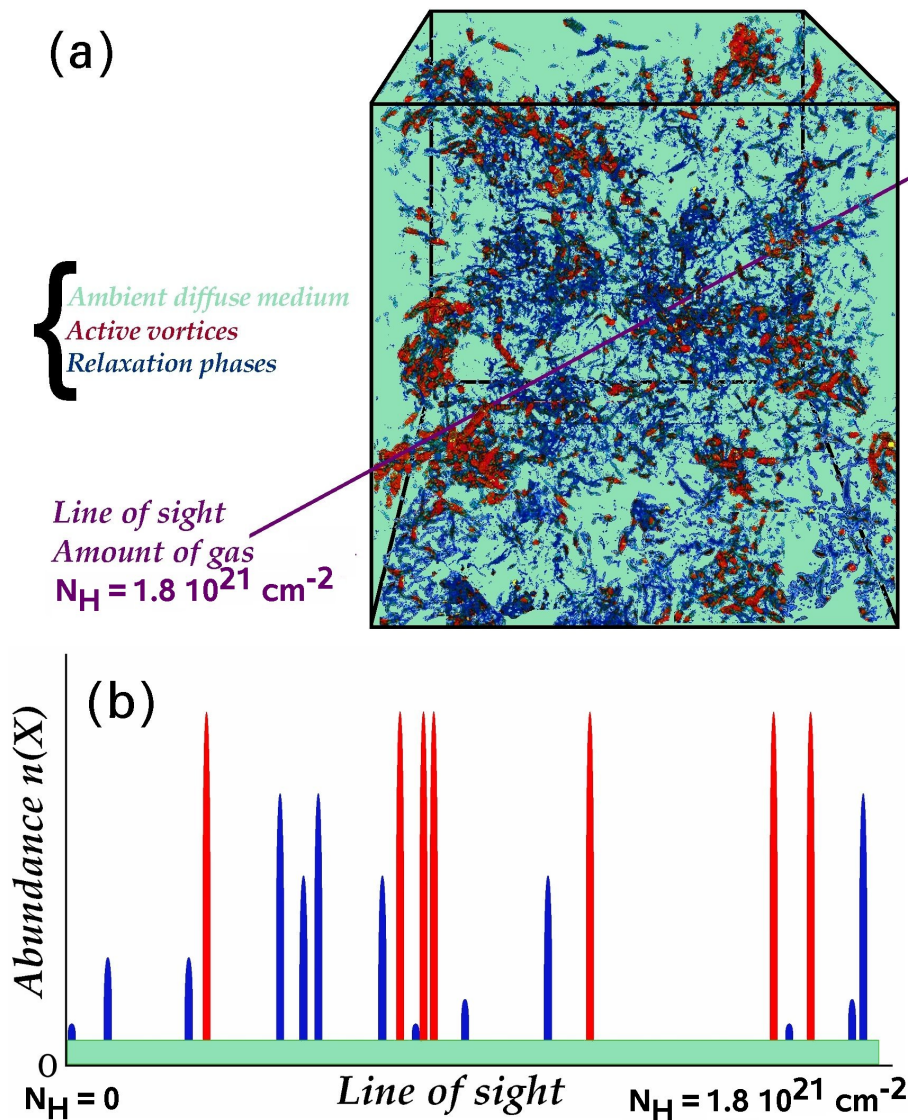


FIG. 9.4 – Description schématique du modèle TDR. Panneau (a) : vision artistique du modèle obtenue à partir d'une simulation hydrodynamique de turbulence incompressible ; le milieu interstellaire diffus turbulent est composé d'une phase ambiante (vert), de zones de dissipation intermittente de l'énergie turbulente (rouge), et d'empreintes de vortex en phase de relaxation (bleu) ; une ligne de visée aléatoire, échantillonnant par convention une quantité de matière $n_H = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$, intercepte chaque phase. Panneau (b) : schéma des fluctuations de l'abondance d'une espèce X le long de la ligne de visée ; les couleurs correspondent à celles des différentes phases dans le panneau (a).

transfert et de l'atténuation du rayonnement à l'intérieur d'une couche de gaz est de grande importance.

Outre l'avantage de pouvoir étudier l'effet de l'atténuation de l'ISRF de manière

indépendante, l'hypothèse A_V constant le long de la ligne de visée nous permet également de normaliser tous nos résultats à une certaine quantité de matière. Dans la suite, nous normalisons toutes les densités de colonne des espèces chimiques à une densité de colonne totale de protons

$$N_H = N(\text{H}) + 2N(\text{H}_2) = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}. \quad (9.14)$$

9.2.1 Variables et équations

Dans les sections qui suivent les indices MA , VA et VR font respectivement référence aux phases ambiante (**M**ilieu **A**mbiant), active (**V**ortex **A**ctif), et de relaxation (**V**ortex en **R**elaxation).

Pour des raisons numériques, ainsi que pour faciliter l'analyse des résultats, l'abondance d'une espèce X dans un vortex actif et dans une phase de relaxation n'est comptée, dans le bilan total d'une ligne de visée, que comme un gain ou une perte par rapport à l'abondance de X dans le milieu ambiant. Cette idée est exposée dans la Fig. 9.4 (panneau b) : si les vortex n'ont aucune influence sur l'abondance d'une molécule, comme par exemple H_2 , alors, les quantités de H_2 contenues dans les phases active et de relaxation sont nulles. Ainsi, soient $N_{VA}(X)$ et $N_{VR}(X, t)$ les densités de colonne de l'espèce X dans un vortex actif et dans une phase de relaxation ($N_{VR}(X, t)$ dépend alors du temps), ces grandeurs sont calculées de la manière suivante :

$$N_{VA}(X) = \int_0^{Kr_0} [n_{VA}(X, r) - n_{MA}(X)] dr \quad (9.15)$$

et

$$N_{VR}(X, t) = \int_0^{Kr_0} [n_{VR}(X, r, t) - n_{MA}(X)] dr \quad (9.16)$$

où $K = 5$ (cf. Chap. 7).

La densité de colonne totale de l'espèce X est alors obtenue selon l'équation :

$$N(X) = N_{MA}(X) + \mathcal{N}_{VA} \left[N_{VA}(X) + \frac{1}{\tau_{VA}} \int_0^\infty N_{VR}(X, t) dt \right] \quad (9.17)$$

où

$$N_{MA}(X) = n_{MA}(X) \times \frac{N_H}{n_H} \quad (9.18)$$

est la contribution du milieu ambiant à la densité de colonne de X , et \mathcal{N}_{VA} et τ_{VA} sont respectivement le nombre de vortex actifs le long de la ligne de visée et leur temps de vie. On remarque ainsi une relation de proportionnalité entre le temps de vie des vortex actifs, leur nombre et la densité de colonne de l'espèce X issue des phases de relaxation $N_{VR}(X)$. En effet, ces trois quantités sont reliées par

$$N_{VR}(X) = \frac{\mathcal{N}_{VA}}{\tau_{VA}} \int_0^\infty N_{VR}(X, t) dt. \quad (9.19)$$

Autrement dit, si l'on fixe \mathcal{N}_{VA} , le rapport entre les contributions des phases active et de relaxation à la densité de colonne totale de X est proportionnel au rapport de leurs

temps de vie respectifs. On définit alors le temps de relaxation de l'espèce X, $\tau_{VR}(X)$, de la manière suivante :

$$\frac{\int_0^{\tau_{VR}(X)} N_{VR}(X, t) dt}{\int_0^{\infty} N_{VR}(X, t) dt} = 90\%. \quad (9.20)$$

Plusieurs définitions de $\tau_{VR}(X)$ étaient possibles : par exemple, le temps au bout duquel l'abondance de X dépasse une certaine limite (comparée à l'abondance dans le milieu ambiant). Ce n'est pas la définition donnée par l'équation 9.20 : en effet, au cours de la phase de relaxation, l'abondance d'une espèce, même faiblement en excès, peut contribuer de manière non négligeable à sa densité de colonne totale si elle est se maintient longtemps.

À partir de l'équation 9.17, on définit les contributions de chacune des phases à $N(X)$, calculées en pourcentage de $N(X)$,

$$f_{MA}(X) = \frac{N_{MA}(X)}{N(X)} \quad (9.21)$$

pour le milieu ambiant,

$$f_{VA}(X) = \frac{N_{VA} \times N_{VA}(X)}{N(X)} \quad (9.22)$$

pour les phases actives, et

$$f_{VR}(X) = \frac{N_{VA} \times \frac{1}{\tau_{VA}} \int_0^{\infty} N_{VR}(X, t) dt}{N(X)} \quad (9.23)$$

pour les phases de relaxation.

D'autres grandeurs, liées à la dissipation de l'énergie turbulente interstellaire ainsi qu'à sa nature intermittente peuvent également être calculées. Ainsi, le facteur de remplissage, c'est à dire le pourcentage du volume total occupé par les vortex actifs est obtenu via

$$f_{VA} = N_{VA} \frac{2Kr_0 n_H}{N_H}, \quad (9.24)$$

tandis que le taux de dissipation moyen d'énergie par l'ensemble des vortex vaut

$$\bar{\epsilon}_{VA} = N_{VA} \bar{\Gamma}_{\text{Turb}} \times \frac{2Kr_0 n_H}{N_H} \text{ erg.cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}, \quad (9.25)$$

et l'énergie totale dissipée par un vortex durant son temps de vie τ_{VA} s'écrit

$$E_{VA} = \pi (Kr_0)^2 \bar{\Gamma}_{\text{Turb}} L_{VA} \tau_{VA} \text{ erg} \quad (9.26)$$

où $\bar{\Gamma}_{\text{Turb}}$ et r_0 ont été définis dans le Chap. 7 et L_{VA} est la longueur des vortex.

9.2.2 Paramètres et contraintes énergétiques

Outre les paramètres du code Thermo-chimie.f95, présentés dans la Sect. 9.1.2, le modèle TDR nécessite 2 grandeurs supplémentaires permettant d'évaluer le nombre de vortex actifs et en phase de relaxation le long de la ligne de visée, autrement dit, permettant d'évaluer N_{VA} et τ_{VA} que nous avons définis dans la section précédente. Après de nombreux essais (voir plus bas), et puisque les principales observables de la

turbulence interstellaire sont les taux de transfert d'énergie en fonction de l'échelle, nous avons choisi 2 paramètres qui déterminent à eux seuls l'énergie dissipée le long de la ligne de visée : $\bar{\varepsilon}_{VA}$, le taux moyen de dissipation, et E_{VA} , l'énergie totale dissipée par un vortex durant son temps de vie. En d'autres termes, ces 2 quantités sont considérées constantes quel que soit le modèle.

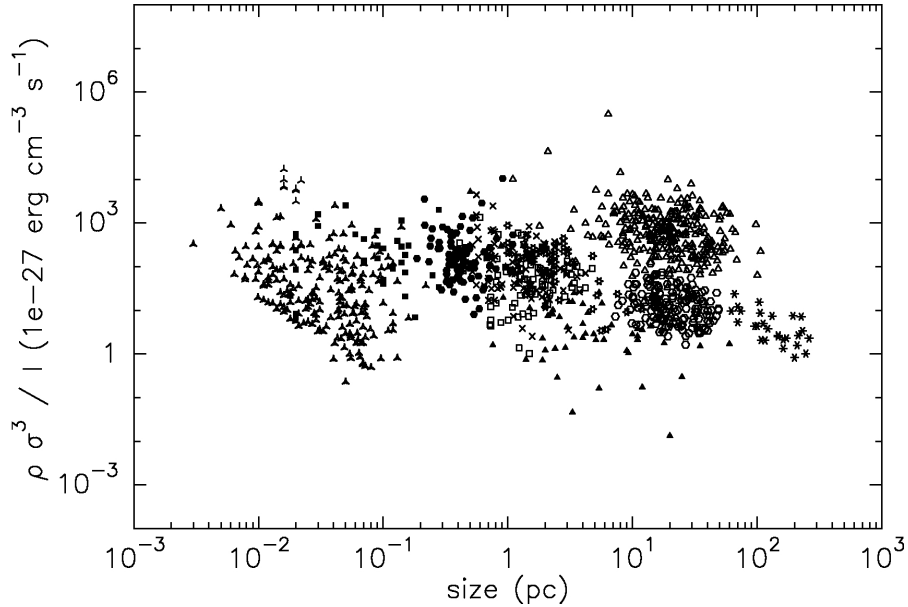


FIG. 9.5 – Taux de transfert d'énergie cinétique ε_l en fonction de l'échelle l . Cette figure est obtenue à partir de la compilation de données issues d'observations du gaz moléculaire détecté en émission ^{12}CO (1-0) (Falgarone *et al.* 1998).

Ici, nous faisons l'hypothèse que le taux moyen de dissipation $\bar{\varepsilon}_{VA}$ est égal au taux de transfert de l'énergie cinétique ε_l dans la cascade turbulente interstellaire. Ainsi $\bar{\varepsilon}_{VA}$ est contraint par les mesures des dispersion de vitesses internes σ_l des nuages moléculaires de taille l via les observations de la transition ^{12}CO (1-0). En effet, celles-ci donnent le taux de transfert d'énergie cinétique à l'échelle l défini par (cf. Chap. 5)

$$\varepsilon_l = \frac{1}{2} \rho \frac{\sigma_l^3}{l}. \quad (9.27)$$

La Fig. 9.5 montre les résultats de la compilation d'observations du gaz détecté en émission ^{12}CO (1-0) pour des structures dont la taille est comprise entre 10^{-2} et 10^3 pc. Bien qu'elles fluctuent sur environ 3 ordres de grandeurs, les mesures de ε_l s'arrangent autour d'une moyenne bien définie $\bar{\varepsilon}_{\text{obs}} = 2 \times 10^{-25} \text{ erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$, indépendante de l'échelle l . De surcroît, cette valeur moyenne est la même que celle déduite des observations du HI froid appartenant au CNM (Falgarone *et al.* 1999). Dans le modèle TDR, nous adoptons donc cette valeur pour $\bar{\varepsilon}_{VA}$, tout en explorant la gamme $\log(\bar{\varepsilon}_{VA}) = \log(\bar{\varepsilon}_{\text{obs}}) \pm 1$.

Il n'existe malheureusement aucune mesure directe de la quantité E_{VA} , ni dans le milieu interstellaire, ni dans les expériences de turbulence en laboratoire. Le temps de vie des structures cohérentes de la turbulence est en effet très peu contraint. Dans

nos modèles, le paramètre E_{VA} est fixé de manière à ce que le temps de vie τ_{VA} des structures dissipatives soit supérieur à leur période τ_P (cf. Chap 7). Cette estimation étant très incertaine, nous avons exploré l'impact de ce paramètre sur une gamme de valeurs couvrant un facteur 100.

Une discussion approfondie de ces paramètres est abordée dans Godard *et al.* (2009a, voir la section suivante). Il est néanmoins important de signaler que le choix de ces paramètres n'a pas été immédiat, ayant été adopté après de nombreux essais dont voici deux exemples.

- À l'origine, le nombre de vortex actifs le long d'une ligne de visée était fixé de manière à reproduire les densités de colonne observées de CH^+ , cet ion moléculaire étant sans aucun doute le traceur le plus important de la dissipation de l'énergie turbulente. Nous avons alors poussé notre analyse jusqu'à rechercher les régions de l'espace des paramètres $\{a, n_H\}$ qui minimisent les fonctions $\chi^2 = [N(X) - N_{\text{obs}}(X)]^2$ pour certaines espèces X . Cette méthode a été abandonnée parce qu'elle supposait que l'abondance relative de CH^+ est uniforme dans le MIS, alors que les observations montrent qu'elle fluctue sur plus de deux ordres de grandeur (Crane *et al.* 1995, Gredel 1997, Weselak *et al.* 2008a); d'autre part, elle introduisait un biais par lequel les abondances de toutes les molécules formées principalement dans les vortex étaient nécessairement corrélées à celle de CH^+ ; enfin, sans aucun contrôle sur le taux de dissipation moyen, celui-ci pouvait dépasser les valeurs déduites des observations de la raie ^{12}CO (1-0) cartographiée en émission.
- À l'origine, le temps de vie d'un vortex actif était déterminé à partir de sa période : $\tau_{VA} = 10 \times \tau_P$ (cf. Chap 7). Cependant, cette approche était insatisfaisante : en effet, non seulement la constante de proportionnalité était fixée de manière arbitraire sans aucune contrainte observationnelle ou expérimentale, mais la quantité totale d'énergie dissipée par un vortex variait fortement sur l'espace des paramètres, ce qui était peu approprié pour la comparaison entre différents modèles.

9.3 Article Godard *et al.* 2009a

La turbulence supersonique est un réservoir important d'énergie suprathermique dans le milieu interstellaire diffus, et sa dissipation, par nature intermittente dans l'espace et le temps, est suffisante pour modifier la chimie du gaz. Dans cet article, nous calculons l'évolution thermique et chimique d'une cellule de gaz piégée à l'intérieur d'une structure dissipative de la turbulence, un vortex magnétisé. Cette évolution est contrôlée par 2 processus de chauffage turbulents, la dissipation visqueuse due à la viscosité moléculaire, et la friction ion-neutre. Nous modélisons alors une ligne de visée aléatoire au travers du gaz interstellaire diffus en tenant compte des durées relatives de la bouffée de dissipation d'énergie à l'intérieur d'un vortex, et des relaxations chimiques et thermique après déstabilisation du vortex. Le paramètre clé du modèle est le taux d'étirement a , qui, combiné à la densité du gaz, détermine la taille d'un vortex, son taux moyen de dissipation d'énergie, ainsi que les importances relatives des termes de chauffage visqueux et liés à la friction ion-neutre.

Ce modèle, appelé TDR (Turbulent Dissipation Regions), reproduit simultanément

les densités de colonne de CH^+ , CH , OH , HCO^+ , H_2O , C_2H et des états excités de la molécule H_2 , ainsi que les corrélations observées entre ces molécules dans le milieu interstellaire diffus. Non seulement ces résultats sont obtenus sous la contrainte énergétique issue des observations des propriétés de la turbulence dans le CNM, mais ils sont également reproductibles pour une gamme étendue des principaux paramètres (le taux d'étirement a et la densité du gaz n_{H}). Nous trouvons enfin que l'enrichissement chimique du MIS diffus est d'autant plus efficace que la dissipation s'effectue via la friction ion-neutre, dans des structures de grandes tailles (quelques centaines d'unités astronomiques) et de court temps de vie (de quelques dizaines à quelques centaines d'années).

Models of turbulent dissipation regions in the diffuse interstellar medium

B. Godard¹, E. Falgarone¹, and G. Pineau des Forêts^{2,1}

¹ LRA/LERMA, CNRS UMR 8112, École Normale Supérieure & Observatoire de Paris, Paris, France
e-mail: godard@lra.ens.fr

² Institut d'Astrophysique Spatiale, CNRS UMR 8617, Université Paris-Sud, Orsay, France

Received 14 August 2008 / Accepted 11 December 2008

ABSTRACT

Aims. Supersonic turbulence is a large reservoir of suprathermal energy in the interstellar medium. Its dissipation, because it is intermittent in space and time, can deeply modify the chemistry of the gas. This is clearly seen in the framework of shock chemistry. Intense turbulent dissipation also occurs in regions of large velocity shears, sharing with shocks the property of intermittency. Whether these bursts of dissipation, short-lived and localized, have a measurable impact on molecular abundances in the diffuse medium, and how the chemical enrichment they drive compares to observations, are the questions we address here.

Methods. We further explore a hybrid method to compute the chemical and thermal evolution of a magnetized dissipative structure, under the energetic constraints provided by the observed properties of turbulence in the cold neutral medium. For the first time, we model a random line of sight by taking into account the relative duration of the bursts with respect to the thermal and chemical relaxation timescales of the gas. The key parameter is the turbulent rate of strain a due to the ambient turbulence. With the gas density, it controls the size of the dissipative structures, therefore the strength of the burst. It also sets the relative importance of viscous dissipation and ion-neutral friction in the gas heating and chemical enrichment.

Results. For a large range of rates of strain and densities, the models of turbulent dissipation regions (TDR) reproduce the CH⁺ column densities observed in the diffuse medium and their correlation with highly excited H₂. They do so without producing an excess of CH. As a natural consequence, they reproduce the abundance ratios of HCO⁺/OH and HCO⁺/H₂O, and their dynamic range of about one order of magnitude observed in diffuse gas. Large C₂H and CO abundances, also related to those of HCO⁺, are another outcome of the TDR models that compare well with observed values. Neutral carbon exceeds the abundance expected at ionization equilibrium, in agreement with fine-structure line observations. The abundances and column densities computed for CN, HCN and HNC are one order of magnitude above PDR model predictions, although still significantly smaller than observed values. The dependence of our results on the rate of strain and density reveals that the chemical enhancements are in better agreement with observations if the dissipation is dominated by ion-neutral friction, involving shear structures of thickness ~ 100 AU.

Key words. astrochemistry – turbulence – ISM: molecules – ISM: kinematics and dynamics – ISM: structure – ISM: clouds

1. Introduction

The diffuse medium has a major contribution to the mass of the interstellar medium (ISM) in galaxies like the Milky Way and as such is a key player in the star formation process. Although it is the first component of the ISM to have been discovered, and later on extensively analyzed through absorption measurements of atoms, ions and molecules (see the review of Snow & McCall 2006), its structure and properties remain a challenge in many respects:

- (1) long thought to consist of two stable phases – the warm and cold neutral medium (WNM at temperatures $T \sim 8000$ K and CNM at $T \sim 100$ K) in thermal pressure equilibrium – a significant fraction of its emission is now detected at temperatures covering the whole range between those of the CNM and WNM (Heiles & Troland 2003);
- (2) the CNM is turbulent with supersonic velocities, yet the velocity and density power spectra carry the signature of the Kolmogorov power spectrum for incompressible turbulence (Miville-Deschênes et al. 2003);
- (3) its spatial and velocity structure is even a greater challenge since it has to reconcile the existence of structures observed at all scales in emission and a remarkable similarity of line

profiles observed in absorption (see the discussion in Liszt & Lucas 1998 who question the elusive dimensionality of the diffuse medium). Since many tracers of the kinematics and small-scale structure of the diffuse ISM are molecular lines, clues are likely to be found in its surprisingly rich, but poorly understood, chemistry.

One major puzzle in this chemistry, raised by the detection of CH⁺ in almost every line of sight sampling the CNM, persisted for decades because no formation path was found to be efficient enough in the diffuse ISM (Black et al. 1975; Black & Dalgarno 1977). It is rooted in the fact that in such diffuse gas, CH⁺ forms via a highly endoenergetic reaction $C^+ + H_2$ ($\Delta E/k = 4640$ K) unlikely to proceed at the low temperatures of the CNM. Similarly, one way to activate the oxygen chemistry in the diffuse medium, and therefore the formation of OH and H₂O, involves the reaction of O + H₂ which has an energy barrier of 2980 K.

A possibly related issue is the existence of rotationally excited H₂ in the diffuse gas. FUSE observations have revealed large populations in the $J > 2$ levels of H₂, inconsistent with fluorescence generated by the ambient UV field (Sonnentrucker et al. 2003; Gry et al. 2002; Nehmé et al. 2008a,b; Martin-Zaïdi et al. 2005; Lacour et al. 2005). This excited H₂ could be

localized in circumstellar material¹, but it also has been detected in the direction of late B stars, devoid of circumstellar matter, as in the data of Gry et al. (2002). Stellar UV photons are therefore unlikely to contribute significantly to the UV-pumping of H₂. In particular Lacour et al. (2005) find an increase of the Doppler parameter of the H₂ lines with J , supporting the existence of a warm component that cannot be heated by UV photons. They argue that this warm component cannot be due to H₂ formation pumping, as proposed by Sternberg & Dalgarno (1995) in dense PDRs, because it would require an H₂ formation rate larger than that inferred from observations, and would not reproduce the observed column densities of CH⁺ found to correlate with excited H₂ (Spitzer et al. 1974; Snow 1976, 1977; Frisch & Jura 1980; Lambert & Danks 1986).

ISO-SWS observations further support the possible existence of a small fraction of warm gas in the Galactic diffuse medium by revealing its pure rotational line emission (Falgarone et al. 2005). Interestingly, the ratio $N(\text{H}_2)_{\text{warm}}/N_{\text{H}} \sim 2 \times 10^{-4}$, where $N(\text{H}_2)_{\text{warm}}$ is the H₂ column density in levels $J \geq 3$, is the same across the Galactic diffuse medium as in the direction of nearby late B stars. Recent *Spitzer* observations have confirmed the ISO-SWS line flux values (Verstraete et al., in preparation).

Both the observed abundances of CH⁺ and column densities of rotationally excited H₂ suggest that large amounts of suprathermal energy are deposited in the cold diffuse medium. One obvious reservoir of suprathermal energy in the ISM is its turbulent kinetic energy. Attempts at incorporating this energy in the chemical networks of magneto-hydrodynamical (MHD) shocks have been partly successful at reproducing the observed properties of the diffuse medium (Pineau des Forêts et al. 1986; Draine & Katz 1986; Flower & Pineau des Forêts 1998). Other routes have been explored, involving dynamic interactions of the gas and the star cluster in the Pleiades (White 1984, 2003; Ritchey et al. 2006), turbulent transport between the WNM and CNM (Lesaffre et al. 2007) and turbulent dissipation taking place in regions of large velocity shears. Turbulence being intermittent in space and time (see the review of Anselmetti et al. 2001), velocity shears may locally be large enough to drive large local heating rates and trigger the endoenergetic reactions of carbon and oxygen chemistries in the diffuse ISM (Falgarone et al. 1995). Along these lines, Joulain et al. (1998, hereafter J98) have explored the role of ion-neutral decoupling induced, in the weakly ionized diffuse medium, by the sharp gas accelerations in the regions of largest velocity-shear and its impact on ion-neutral chemistry, in particular the formation of CH⁺ and HCO⁺. Falgarone et al. (2006) have analysed the thermal and chemical relaxation phase in the evolution of a gas chemically enriched in a dissipation burst.

The observational data probing the molecular diversity and richness of the diffuse ISM are not restricted to CH⁺ and HCO⁺. In their long-lasting effort dedicated to unravelling molecular abundances in the diffuse ISM, Liszt & Lucas (2002, and references therein) have provided us with invaluable constraints. Not only did they show that the abundances of several molecules stay proportional to each other, with very well defined abundance ratios, but they found that the column densities of these molecules vary by more than one order of magnitude across clouds that all have about the same total hydrogen column density,

corresponding to diffuse and translucent clouds. They also revealed the remarkable similarity of HCO⁺ and OH line profiles, all the more surprising for an ion and a neutral species, differently coupled to the magnetic field. On the contrary, the high-spectral resolution spectra of Crane et al. (1995) convincingly showed that the CH⁺ line profiles are definitely broader and less Gaussian than those of CH, along the same lines of sight, while Lambert et al. (1990) found that, in the direction of ζ Oph, the CH line profiles could be seen as the sum of a broad component similar to the CH⁺ profile, and a narrow one, close to that of the CN line. A similar result was obtained by Pan et al. (2004, 2005) towards stars of the CepOB2 and CepOB3 regions. These sets of results suggest that the velocity field is involved in the origin and the evolution of these molecules, and does so differently for each species.

It is therefore challenging to compare these available observations with models of a random line of sight across the diffuse ISM, where active dissipation bursts coexist with others in their relaxation phase. In particular, the possibility that a number of transient events may dominate the observed molecular column densities has never been addressed. This is what we do in the present paper. We restrict our study to densities lower than $n_{\text{H}} = 200 \text{ cm}^{-3}$ because, as will be seen, at higher densities and for the turbulent energy observed in the CNM, turbulent dissipation does not heat the gas enough to open the endoenergetic barriers mentioned above. We cannot rule out, though, rare dissipation bursts of exceptional intensity that would be able to heat still denser gas to the required temperature. We extend the previous studies in a way that allows us to explore the parameter domain, in particular those characterizing the ambient turbulence. We also extend the chemical network. We model a random line of sight across the diffuse medium and compare the predicted column densities of a variety of molecular species to the observations. The dynamic steady state is computed and described in Sect. 2, the chemistry in the active dissipation and relaxation phases is presented in Sects. 3 and 4. The modelling of a line of sight is discussed in Sect. 5. Comparisons of computed column densities with observations, as well as excitation diagrams of H₂, are shown in Sect. 6 and these results are discussed in Sect. 7.

2. Steady state of a magnetized vortex in a weakly-ionized diffuse gas

2.1. The neutral flow

Turbulence in the diffuse ISM is supersonic with respect to its cold phase, the CNM. Supersonic turbulence dissipates in shocks and regions of large velocity shear (Kritsuk et al. 2007). Their respective importance has been studied in numerical simulations. Porter et al. (1992, 1994) and Pavlovski et al. (2006) showed that most of the turbulent kinetic energy is rapidly transferred to high wavenumber non-compressible modes, once the shocks generated by supersonic turbulence have started to interact, reducing the role of compressible modes (shocks) in turbulent dissipation. In the so-called quiescent ISM (i.e. far from star forming regions), the smooth observed lineshapes support the view of a turbulence devoid of strong shocks (Falgarone et al. 1994) implying that the dissipation preferentially occurs in shear-layers.

Dissipative structures are modelled as shear-layers belonging to a solution of the Helmholtz equation for vorticity, close to the Burgers vortex adopted in J98: this analytical solution has the merit that it has only two free parameters that describe the balance between the stretching action of the large scales and the diffusion of vorticity across the vortex edge, at small scale. It

¹ Here, we deliberately overlook most of the early Copernicus results on H₂ high- J lines obtained in the direction of hot stars (e.g. Spitzer et al. 1973; Savage et al. 1977; Shull & Beckwith 1982) that led to the conclusion that excited H₂ absorption is occurring in circumstellar material heated/shocked by the star itself.

provides an analytical framework in which we can compute the effect of partial decoupling between ions and neutrals upon the steady state configuration of velocity and magnetic field and thus explore the effect of both the ion-neutral friction and viscous heating upon the chemical network.

The modified Burgers vortex is an axisymmetric solution elaborated in atmospheric sciences by Nolan & Farrell (1998). It is identical to the Burgers vortex at small radii r , in cylindrical coordinates (r, θ, z) , and differs from it at large radii in the sense that the radial inflow velocity is not divergent at infinity:

$$u_r(r) = -\frac{a}{2}r \cdot e^{-\beta r^2} \quad (1)$$

where a is the turbulent rate of strain (in s^{-1}) and β (in cm^{-2}) describes the cut-off of the radial velocity. The axial velocity u_z , the vorticity ω_z and the orthonormal velocity u_θ are inferred from the Helmholtz and continuity equations:

$$u_z(r) = az \cdot e^{-\beta r^2} \cdot (1 - \beta r^2), \quad (2)$$

$$\omega_z(r) = \omega_0 \cdot e^{-\frac{a}{4\beta} [1 - e^{-\beta r^2}]}, \quad (3)$$

$$u_\theta(r) = \frac{1}{r} \int_0^r r' \omega_z(r') dr' \quad (4)$$

where ω_0 is the peak of vorticity and ν is the kinematic viscosity. Any vortex is therefore entirely defined by three parameters, a , β and ω_0 .

Note that, according to the radial dependence of the vorticity, the same equilibrium vortex radius r_0 as for the Burgers vortex can be defined,

$$r_0^2 = 4\nu/a \quad (5)$$

involving the two quantities that act on it, the rate of strain a and the viscosity ν . Accordingly, the vortex crossing time

$$\tau_c = \int_r^{kr} \frac{dr'}{u_r(r')} = \frac{2}{a} \ln(1/k) \quad (6)$$

for any constant $k < 1$ depends only on the rate of strain, while the vortex period, defined as

$$P = \frac{r_0}{u_\theta(r_0)} \quad (7)$$

depends on ν , a , and ω_0 .

Because vorticity is radially non uniform there is a differential rotation of the fluid within the structure which induces a viscous dissipation rate:

$$\Gamma_{\text{nn}} = \sum_{i,j} \pi_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (8)$$

where π_{ij} is the stress tensor. This rate is written in cylindrical coordinates:

$$\frac{\Gamma_{\text{nn}}}{\eta} = \left[\frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} \right]^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{u_r}{r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 \quad (9)$$

where $\eta = \rho\nu$ is the dynamic viscosity in a gas of density ρ . It is computed for hydrogen atoms using the Kay & Laby (1966) tables of physical and chemical constants: $\eta = 6 \times 10^{-6} T_k^{1/2} \text{ g cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$ where T_k is the gas kinetic temperature.

In all the following, it is assumed that the fluid description of the gas motions is justified because the mean free path

of H atoms $\lambda_{\text{H-H}} = 0.23(n_{\text{H}}/50 \text{ cm}^{-3})^{-1} \text{ AU}$ in the diffuse medium, for a H-H elastic collision cross section² $\sigma_{\text{H-H}} = 5.7 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ (Spitzer 1978), is smaller than all the lengthscales involved in the model.

2.2. Interstellar constraints on the vortex parameters

As said above, each vortex is defined by a set of three independent parameters, a , β and ω_0 . The cut-off parameter β has no influence either on the dynamics or on the chemistry of the structure as long as u_r is small compared to $u_{\theta, \text{max}}$. Hereafter, β is chosen in order to satisfy this condition. In other words, turbulent dissipation in the vortex happens through radial vorticity distribution, not through a radial flux of matter. In these conditions, the dominant contribution to the viscous dissipation is the first term in Eq. (9).

Numerical simulations of incompressible turbulence (Jimenez 1997) and experiments (Belin et al. 1996) have shown that the maximum tangential velocity of filaments of vorticity $u_{\theta, \text{max}} \sim \omega_0 r_0$ is of the order of the rms velocity dispersion of the ambient turbulence σ_{turb} . Since the equilibrium radius r_0 is set by the rate of strain a (Eq. (5)), ω_0 is also determined. In the case of interstellar turbulence, it implies that the orthonormal velocity in the vortex is supersonic with respect to the cold gas. It is noteworthy that slightly supersonic Burgers vortices have been found in experiments of rotating magnetized plasmas by Nagaoka et al. (2002) in conjunction with an inner density hole. Moreover, as will be seen later, the gas being violently and rapidly heated in the layers of largest orthonormal velocity, the Mach number there is likely to drop below unity. The only free parameter left in the vortex description is therefore the rate of strain a , although the gas density is in fact a free parameter that determines the vortex size, through the kinematic viscosity ν (Eq. (5)).

2.3. Magnetic field configuration and ionized flow

The configuration of the magnetic field and ions reached once the above vortex has developed in the partially ionized gas is numerically computed. The ions are *initially* at rest, threaded by a uniform magnetic field parallel to the z axis, $\mathbf{B}_0 = B_0 \mathbf{k}$. The ions are predominantly C^+ , the neutrals are mainly composed of H and H_2 and the ionization degree, $x = 2 \times 10^{-4}$, is weak³. At $t = 0$, the ions are suddenly put into motion by friction with the vortex that developed in the neutral gas i.e. the three components of the neutral gas velocity \mathbf{u}_n are those of the vortex given by Eqs. (1), (2) and (4). Boundary conditions are provided by the assumption that the vortex has a finite length L_V , apodised over a length C_V .

The alignment of ω with the ambient magnetic field is supported by the results of numerical simulations. Brandenburg et al. (1996) showed that in MHD turbulence, magnetic field and vorticity vectors tend to align with each other. More recently Mininni et al. (2006a,b) observed a similar behaviour in their 1536³ numerical simulations.

Under these assumptions, we compute the two-dimensional time-dependent evolution of the ion velocity \mathbf{u}_i and the magnetic field \mathbf{B} . We neglect the retro-action of the ions upon the

² For comparison the H_2 - H_2 elastic collision cross section is $\sigma_{\text{H}_2\text{-H}_2} \sim 3 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ (Monchick et al. 1980).

³ Computed for a diffuse molecular cloud of density $n_{\text{H}} \sim 50 \text{ cm}^{-3}$, temperature $T_k \sim 100 \text{ K}$, illuminated by the standard interstellar radiation field (ISRF).

Table 1. Parameters of the four models of Fig. 1. The density n_{H} and the turbulent rate of strain are fixed: $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$, $a = 5 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$.

			M_0	M_1	M_2	M_3
Magnetic field	B	μG	10	5	10	10
Vortex length	L_V	AU	200	200	100	200
Apodisation length	C_V	AU	100	100	50	50

neutral motions because, for densities in the range $10\text{--}200 \text{ cm}^{-3}$ and an ion-neutral drift velocity comparable to u_{n} (see Fig. 1), the friction force F_{in} they exert on the neutrals is negligible compared to the advection force in the vortical motion: $F_{\text{in}} \sim 10^{-3}(l/10 \text{ AU}) \times \rho_{\text{n}} u_{\text{n}} \cdot \nabla u_{\text{n}}$, l being the spatial scale for the variation of u_{n} , in the range 10 to 100 AU. The neutrals velocity components are therefore those of the vortex (Eqs. (1), (2) and (4)) at any time.

In the interstellar medium \mathbf{B} is frozen in the charged fluid (Spitzer 1978) and its evolution is simply written:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{u}_{\text{i}}) = 0. \quad (10)$$

Neglecting the pressure gradients in the evolution equation of the ionized flow (this assumption is justified in Sect. 7) leads to:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_{\text{i}}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{i}} \cdot \nabla) \mathbf{u}_{\text{i}} = \frac{\langle \sigma v \rangle_{\text{in}}}{(\mu_{\text{n}} + \mu_{\text{i}})} \rho_{\text{n}} (\mathbf{u}_{\text{n}} - \mathbf{u}_{\text{i}}) + \frac{1}{4\pi\rho_{\text{i}}} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad (11)$$

where μ_{n} and μ_{i} are the mean mass per particle of the neutrals (H, H_2) and ions (mostly C^+) respectively. $\langle \sigma v \rangle_{\text{in}} = 2.2 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ is the momentum transfer rate coefficient between the ionized and neutral fluids calculated by Flower & Pineau des Forêts (1995, Appendix A), and close to the Langevin rate.

We integrate Eqs. (10) and (11) by means of a two dimensional implicit scheme using the Alternating Direction Implicit method (ADI). To validate our approach we also use two other integration schemes: an explicit and an implicit without the ADI method. The results of our 300×200 points grid simulations are displayed in Fig. 1. Panel (a) shows the evolution of $|u_{\text{i}\perp}|_{\text{max}}$, the maximum ion velocity component perpendicular to the axis z , as a function of time. The curves correspond to the four models presented in Table 1. Panels (b) and (c) show the orthoradial and axial components of \mathbf{B} for the model M_0 at $t = 100 \text{ yr}$.

Figure 1a shows that the ions, initially at rest, are put into motion by the friction force from the neutrals in the vortex. This motion (including its boundary conditions) generates an orthoradial component B_{θ} of \mathbf{B} and a gradient of B_z . These terms in turn induce magnetic tension and pressure gradient (see Eq. (10)), two forces resisting the orthoradial entrainment exerted by the neutrals. After $\sim 100 \text{ yr}$, $|u_{\text{i}\perp}|_{\text{max}} < 0.4 \text{ km s}^{-1}$ which is small compared to $|u_{\text{n}\perp}|$ in the vortex (see Fig. 2 in Sect. 3.2) for all models. A steady state is reached in which the ions are almost back to rest and the magnetic field slightly helical (Fig. 1b). A large and steady state drift is set between the ion and neutral orthoradial velocities with an amplitude close to the orthoradial velocity of the neutrals in the vortex.

Such a drift has a deep impact on the chemistry of the gas, as was shown by J98, and contributes to the dissipation of its turbulent energy. The additional heating term due to the ion-neutral friction is written:

$$\Gamma_{\text{in}} = \frac{\rho_{\text{n}}\rho_{\text{i}}}{\mu_{\text{n}} + \mu_{\text{i}}} \langle \sigma v \rangle_{\text{in}} \frac{\mu_{\text{i}}}{\mu_{\text{n}} + \mu_{\text{i}}} (\mathbf{u}_{\text{i}} - \mathbf{u}_{\text{n}})^2. \quad (12)$$

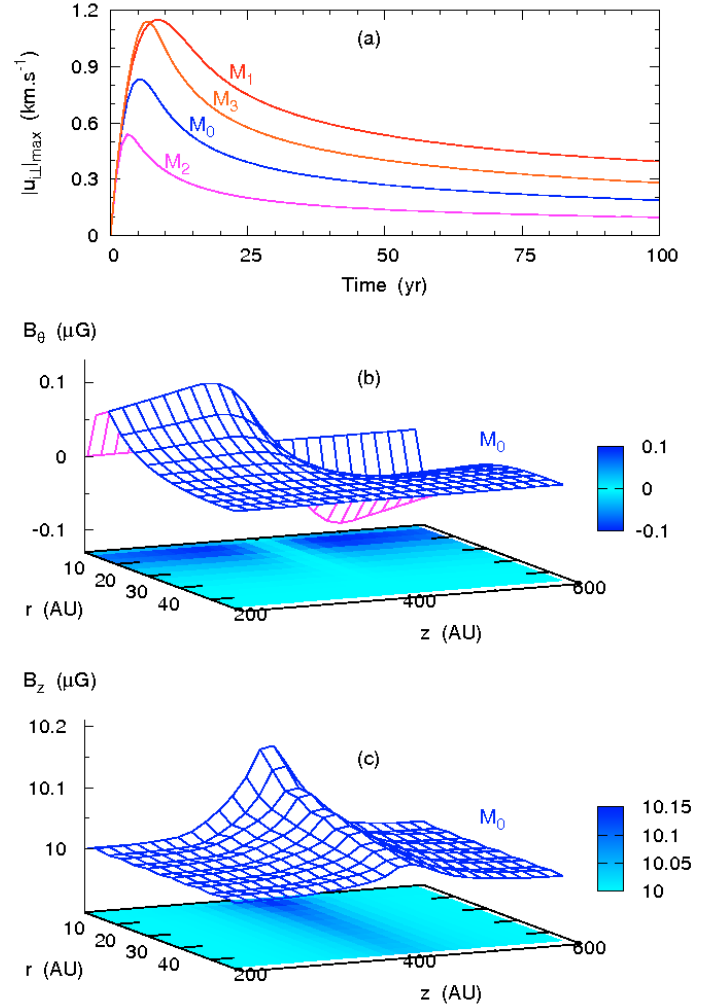


Fig. 1. Magnetic properties of the vortex. Panel a): evolution of $|u_{\text{i}\perp}|_{\text{max}}$, the maximum ion velocity component perpendicular to the axis z , as a function of time. The different curves correspond to the models M_0 , M_1 , M_2 and M_3 , (see Table 1). Panels b) and c): orthoradial and axial components of the magnetic field at $t = 100 \text{ yr}$ for the model M_0 as functions of r and z .

We also found that there is only a very small ion-neutral drift in the z direction because the magnetic field is only slightly helical. Since in addition the contributions of the spatial variations of u_z to the heating term Γ_{nn} are negligible (Eq. (9)), we consider the vortex as invariant along the axis z and restrict our study of the spatial and time dependences to those occurring radially.

In the next sections we focus on the rapid thermal and chemical evolution of the gas trapped in such a steady state structure, and follow its thermal and chemical relaxation, once the vortex has blown-up.

3. The active phase

3.1. Numerical modelling

As in J98, we follow the Lagrangian evolution of a fluid particle trapped in the steady state vortex configuration. Because the vortex crossing time τ_c (see Sect. 2.1) is comparable to the chemical timescales, we compute non-equilibrium chemistry coupled to the time-dependent thermal evolution. The initial gas temperatures and molecular abundances are those of a steady state diffuse cloud of density n_{H} , illuminated by the ambient interstellar

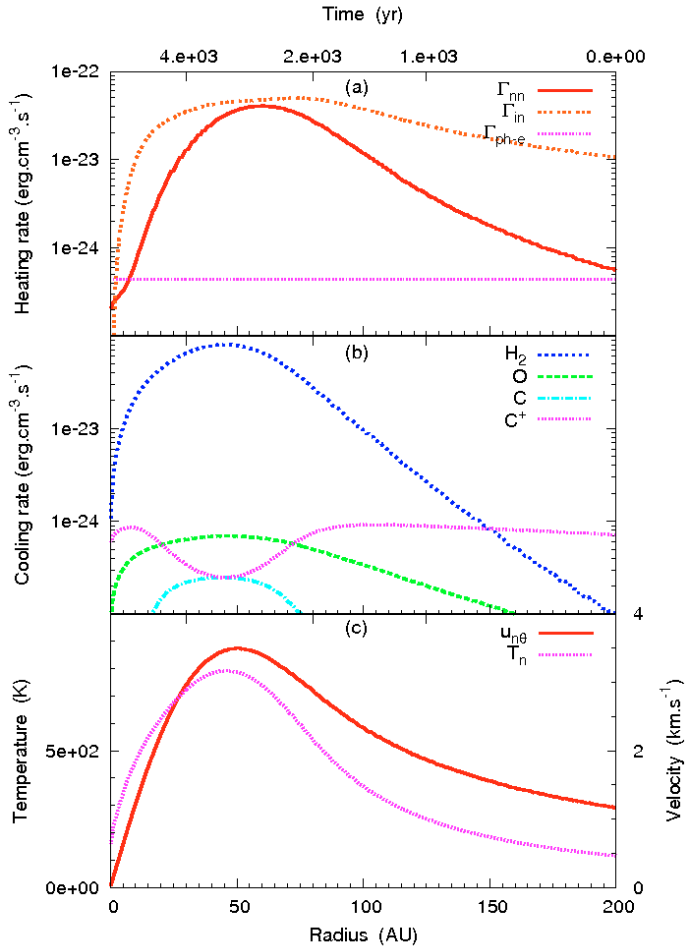


Fig. 2. Vortex physical properties as functions of the radius (bottom axis) or time (top axis, arbitrary origin) for the reference model: $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$, $n_{\text{H}} = 30 \text{ cm}^{-3}$ and $A_{\text{V}} = 0.4 \text{ mag}$. Panel **a**): the heating terms Γ_{nn} due to the viscous dissipation, Γ_{in} due to the ion-neutral friction and $\Gamma_{\text{ph-e}}$ due to the photoelectric effect. Panel **b**): the dominant cooling terms due to the radiative desexcitation of H_2 (pure rotational lines), C, O and C^+ (fine-structure lines). Panel **c**): the temperature and orthoradial velocity of the neutrals.

radiation field (ISRF) (Draine 1978) scaled by the factor χ , and shielded by the extinction A_{V} . The cosmic ray ionization rate ζ and the elemental abundances are given in Table 2.

The neutrals and the ions are treated separately⁴ and a fluid particle is defined at each time by its position r , the neutral and ionized velocity fields \mathbf{u}_{n} and \mathbf{u}_{i} , the mass densities ρ_{n} and ρ_{i} , the temperatures of the neutrals T_{n} and ions T_{i} , and the abundances $n(X)$ of each species. The system therefore comprises 11 dynamic time-dependent variables ($r, n_{\text{i}}, n_{\text{n}}, \rho_{\text{i}}, \rho_{\text{n}}, T_{\text{i}}, T_{\text{n}}, u_{\text{nr}}, u_{\text{n}\theta}, u_{\text{ir}}, u_{\text{i}\theta}$). Our chemical network originates from the Meudon PDR code (Le Petit et al. 2006). It incorporates 90 species interacting through 1524 reactions. Those include the formation of H_2 on dust, the photoprocesses and the processes induced by the cosmic rays. We also compute the time-dependent evolution of the populations of the 18 first ro-vibrational levels of H_2 (corresponding to $T_{\text{ex}} < 10^4 \text{ K}$).

⁴ The ions and the electrons are treated as a unique fluid at a temperature T_{i} because: (1) the ion-electron velocity drift induced by the magnetic field fluctuations in the model is $\sim 1 \text{ cm s}^{-1}$, negligible compared to the thermal velocities; (2) the ion-electron temperature equipartition time is $\sim 0.1 (T/1000 \text{ K})^{3/2} (n_{\text{i}}/3 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-3})^{-1} \text{ yr}$ (Spitzer 1978), also negligible compared to the dynamic timescales.

Table 2. Physical conditions and elemental abundances of the gas in the TDR models.

Density	n_{H}	cm^{-3}	10–200	
Radiation field	χ		1	
Extinction	A_{V}	mag	0.1–1	
Cosmic ray ionization rate	ζ	s^{-1}	3×10^{-17}	a
Elemental abundances			$[X]/[H]$	
Helium	[He]		1.00×10^{-1}	
Carbon	[C]		1.38×10^{-4}	
Oxygen	[O]		3.02×10^{-4}	
Nitrogen	[N]		7.94×10^{-5}	
Sulfur	[S]		1.86×10^{-5}	
Iron	[Fe]		1.50×10^{-8}	

a – Dalgarno (2006).

The system of variables is therefore driven by a set of 119 first-order coupled differential equations that are integrated along the fluid particle trajectory. To ensure that the time step is consistent with the variations of all dependent variables we use the DVODE differential equation solver (Brown et al. 1989).

The evolution of the thermal energy densities U_{n} and U_{i} is given by:

$$\frac{dU_{\text{n}}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} n_{\text{n}} k T_{\text{n}} \right) = B_{\text{n}} + \Gamma_{\text{nn}} + \Gamma_{\text{in}} + \Gamma_{\text{en}} \quad (13)$$

$$\frac{dU_{\text{i}}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} n_{\text{i}} k T_{\text{i}} \right) = B_{\text{i}} + B_{\text{e}} + \frac{\mu_{\text{n}}}{\mu_{\text{i}}} \Gamma_{\text{in}} + \frac{\mu_{\text{n}}}{\mu_{\text{e}}} \Gamma_{\text{en}} \quad (14)$$

where B_{n} , B_{i} and B_{e} are the sums of all the heating and cooling rates of the neutrals, the ions and the electrons respectively, not induced by turbulent dissipation, and Γ_{nn} and Γ_{in} the heating rates induced by turbulent dissipation defined in the previous section. Γ_{en} is the heating rate due to the electron-neutral drift, a term taken into account in the code but negligible compared to Γ_{nn} and Γ_{in} . The cooling rates include the radiative deexcitation of the ro-vibrational levels of H_2 , of the fine structure levels of C^+ , C and O and of the rotational levels of H_2O , OH and CO.

Lastly, since ions and neutrals are decoupled, we use the approximation of Flower et al. (1985) for the calculation of the chemical rate coefficients. The cross-section of a 2-species reaction is integrated over a Maxwellian velocity distribution at an effective temperature

$$T_{\text{eff}} = \frac{m_1 T_2 + m_2 T_1}{m_1 + m_2} + \frac{1}{3k} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} u_{\text{D}}^2 \quad (15)$$

where m_1, m_2, T_1 and T_2 are respectively the masses and the temperatures of the 2 reactants and u_{D} their relative drift velocity.

3.2. Thermal evolution of the gas

Figure 2 displays the main properties of a reference model where $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$, $n_{\text{H}} = 30 \text{ cm}^{-3}$ and $A_{\text{V}} = 0.4 \text{ mag}$. The vortex has an equilibrium radius $r_0 = 38 \text{ AU}$ and generates an average turbulent heating rate, $\bar{\Gamma}_{\text{turb}} = 3.4 \times 10^{-23} \text{ erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ defined as:

$$\bar{\Gamma}_{\text{turb}} = 2/(Kr_0)^2 \int_0^{Kr_0} [\Gamma_{\text{nn}}(r) + \Gamma_{\text{in}}(r)] r dr. \quad (16)$$

The integration domain extends to the radius Kr_0 where the turbulent heating has no significant influence on the gas temperature and chemistry ($K \sim 5$).

In the model presented here, the heating rate is dominated everywhere by ion-neutral friction (Fig. 2a). For higher values of the turbulent rate of strain a , r_0 decreases (see Sect. 5.3) and the importance of the viscous dissipation increases because $u_{n\theta}$ is fixed by the ambient turbulence.

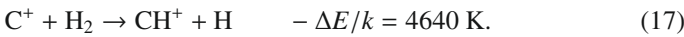
The gas in the vortex never reaches thermal balance and the thermal inertia is visible by comparing Figs. 2a and c where the peak temperature of the fluid particle is reached a few hundred years after the peak of the heating rate. Emission in the pure rotational lines of H_2 is by far the dominant coolant in the layers where $T_n \gtrsim 200$ K (Fig. 2c) while the cooling rate due to the ionized carbon C^+ decreases in the warmest layers. This is due to the chemical evolution (see Sect. 3.3).

Last, some chemical clues are provided in Fig. 2c. The neutral-neutral reactions only depend on the temperature T_n while the ion-neutral reactions depend on the ion-neutral drift. In Eq. (15), the second term of the right hand side reaches 1000 K as $u_D \sim 3$ km s $^{-1}$, an effective temperature higher than the peak kinetic temperature in the vortex. A comparison of the shapes of the orthoradial velocity $u_{n\theta}$ and the neutral temperature T_n shows that the endo-energetic ion-neutral chemistry is activated earlier in the fluid particle evolution than the neutral-neutral chemistry. For each type of vortex, the relative importance of those two chemical regimes is different.

3.3. Chemical evolution of the gas

The chemical evolution of the gas during the vortex active phase is similar to that reported in J98, although the chemical network is updated and includes nitrogen- and sulfur-bearing molecules. The outline of this network is given in Appendix C where we display the main production and destruction routes of the molecules of interest (1) in the ambient diffuse medium ($n_H = 30$ cm $^{-3}$ and $A_V = 0.4$ mag) and (2) in the vortex for the reference model at a radius $r = r_0$.

The most important reaction route opened by the dissipative structure is the endothermic hydrogenation of C^+ :



Besides the direct production of CH^+ , this reaction is responsible for most of the chemical richness of the vortex as shown in Fig. C.2 (Appendix C): it enhances the production of CH_3^+ via the successive hydrogenation by H_2 of CH^+ and CH_2^+ . CH_3^+ , in turn, enhances the production of molecules including CH and C via the dissociative recombination with electrons, HCO^+ and CO via

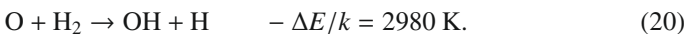


and CN, HCN and HNC via



The production of CH_3^+ is also at the origin of C_2H and CS since these molecules are both products of CH (through the reactions $CH + C^+ \rightarrow C_2^+ + H$ and $CH + S^+ \rightarrow CS^+ + H$ respectively).

The second main reaction, absent in the ambient medium, which plays an important role in the chemical evolution of the vortex is:



Besides the direct production of OH it triggers the production of H_2O via

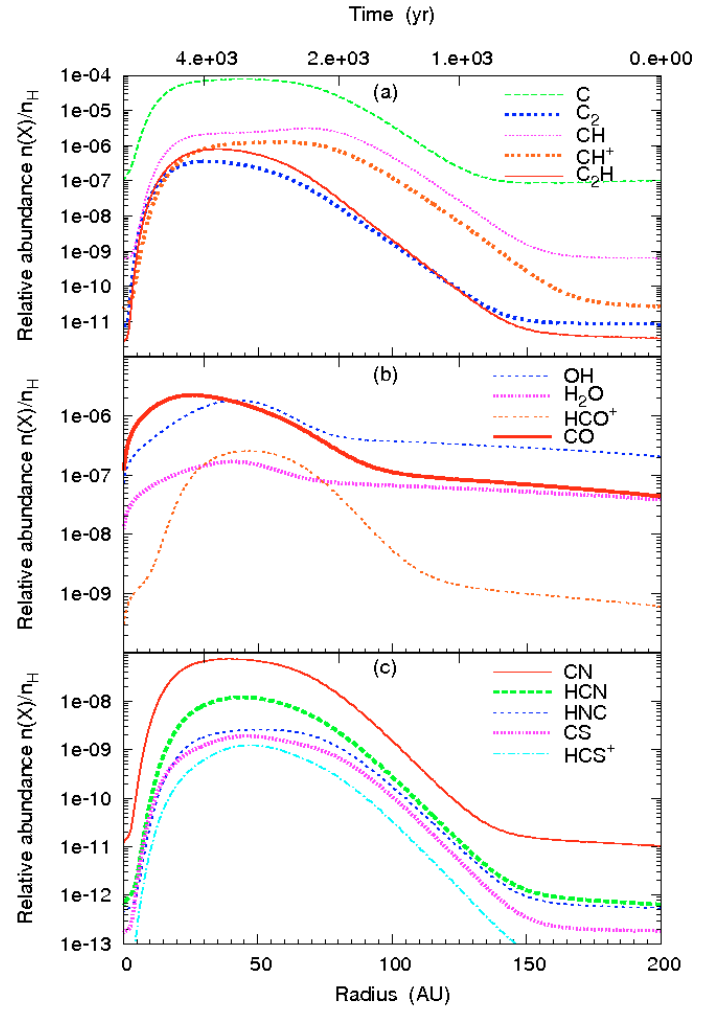


Fig. 3. Fractional abundances relative to $n_H = n(H) + 2n(H_2)$ of selected species as functions of the radius (bottom axis) or time (top axis, arbitrary origin) for the reference model: $a = 3 \times 10^{-11}$ s $^{-1}$, $n_H = 30$ cm $^{-3}$ and $A_V = 0.4$ mag.

and O_2 via

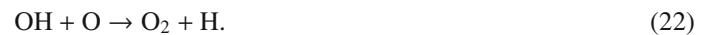


Figure 3 displays the evolution of several relative abundances in the magnetized vortex. The impact of the turbulent heating is such that most species abundances rise from 2 to 5 orders of magnitude within the structure. The formation of vortices in the turbulent gas flow therefore has specific chemical signatures that we expect to observe in the diffuse medium. One remarkable example is HCO^+ . Since this molecule is a direct product of CH_3^+ (in the vortex) it becomes related to almost all the species whose abundance is enhanced in the vortex.

Time (and space) stratification is also visible in Fig. 3: the chemical enrichments occur successively, because the ion-neutral chemistry is triggered earlier than the neutral-neutral chemistry (see previous section) and because the chemical inertia of each species is different.

4. The relaxation phase

4.1. Numerical modelling

Once the burst of turbulent dissipation is over, some chemical signatures imprinted in the gas persist for several thousand years

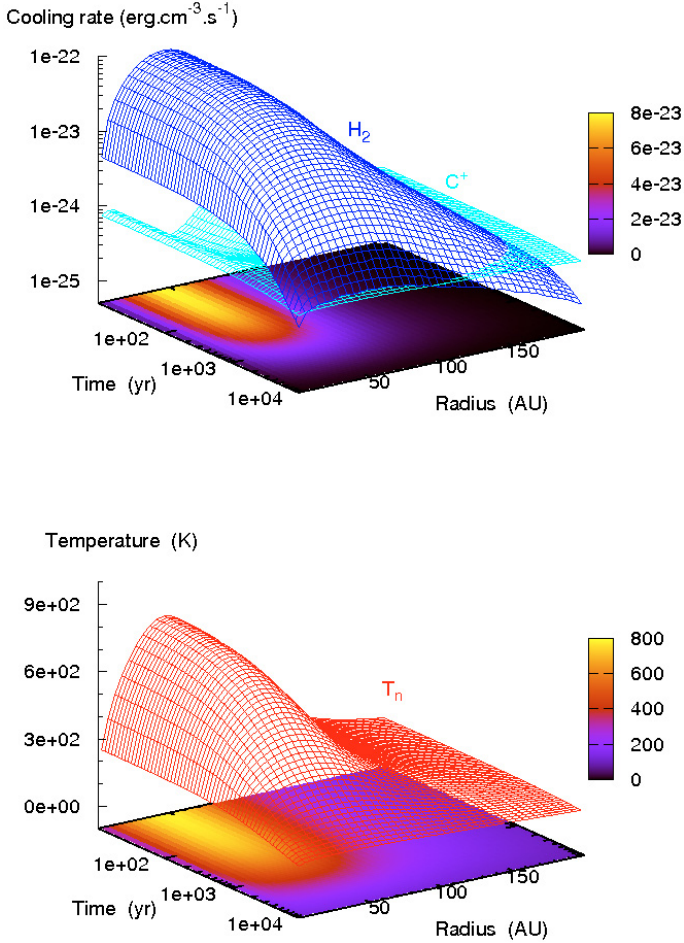


Fig. 4. Vortex thermal features during the relaxation phase, as functions of the radius and time (after the vortex blow-up) for the reference model: $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$, $n_{\text{H}} = 30 \text{ cm}^{-3}$ and $A_{\text{V}} = 0.4 \text{ mag}$. An isochoric relaxation is assumed. *Top panel:* the main cooling terms, i.e. the radiative desexcitation of H_2 and C^+ . *Bottom panel:* the temperature of the neutrals.

as shown by Falgarone et al. (2006). To compute the chemical and thermal relaxation of the gas, we assume that, once the vortex has vanished, the gas is dynamically frozen: $\mathbf{u} = 0$. The previous Lagrangian approach is switched to Eulerian, and we compute the time-dependent evolution of each cell in the vortex. The initial conditions of the relaxation are the conditions of the active stage at every position. The thermal Eqs. (13) and (14) are still valid with $\Gamma_{\text{nn}} = 0$ and $\Gamma_{\text{in}} = 0$.

While the numerical code has been conceived to treat isobaric or isochoric relaxation, all the results presented in this paper were obtained assuming isochoric relaxation, because it allows us to better disentangle what is due to the chemistry itself from what is due to the gas density. In particular, it shows more clearly the role of the relaxation timescales of the molecules, i.e. only driven by the chemical network and the thermal evolution, independently of the gas density.

4.2. Thermal evolution of the gas

Figure 4 displays the main cooling rates (top panel) and gas temperature (bottom panel) as functions of time and position in the vortex (after the vortex blow-up). It shows that as in the active phase, the cooling rate during the relaxation phase is dominated by the emission in the pure rotational lines of H_2 . In the model

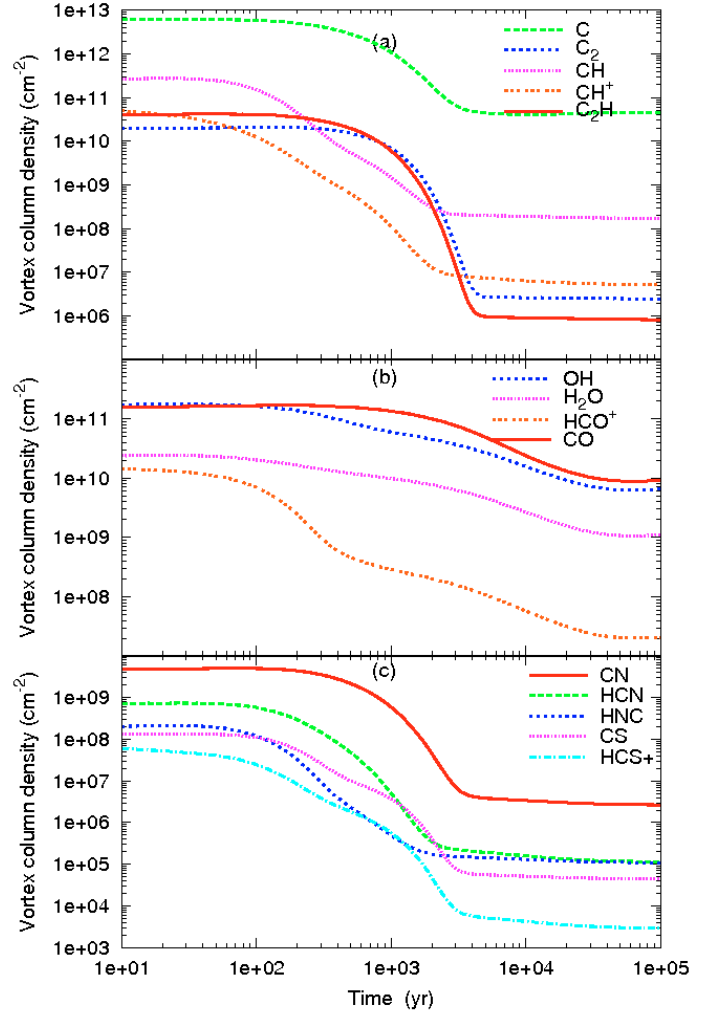


Fig. 5. Column densities of selected species, integrated across the reference vortex, as functions of time during an isochoric relaxation phase.

presented here ($n_{\text{H}} = 30 \text{ cm}^{-3}$), other cooling agents (mainly C^+) become dominant at $t \sim 10^4 \text{ yr}$.

4.3. Chemical evolution of the gas

During relaxation, the cooling of the gas causes all the endo-energetic reactions triggered during the dissipative burst to slow down and stop, one after the other. The gas loses its chemical enrichment at a speed that depends on the molecular species. This is illustrated in Fig. 5 that displays the time-dependent evolution of the column density $N_{\text{VR}}(X, t)$ of selected species X integrated across the vortex.

For most species (CO , C_2 , OH , H_2O , C_2H ...) the signature of the turbulent dissipation persists over more than 10^3 yr . The characteristic timescales (e-folding times) differ between species by more than a factor of 30 ($\approx 2 \times 10^2 \text{ yr}$ for CH^+ and $7 \times 10^3 \text{ yr}$ for CO). The existence of the relaxation phases modifies the correlations between molecular abundances. One example is provided by HNC and C_2H that follow a similar enhancement in the active phase (see Fig. 3) and have markedly different behaviours in the relaxation phase.

The richest phases are not necessarily those contributing the most to the observable column densities because they have short lifetimes. In the next section, we detail how we take

time-variability into account in our modelling of a random line of sight across the diffuse medium.

5. Modelling of a line of sight

In turbulent flows, the spatial distribution of the regions of highest dissipation rate (extrema of velocity shear, extrema of negative velocity divergence i.e. shocks) is far from space-filling, one of the aspects of the intermittent nature of turbulence. The filling factor of these extrema has been computed in numerical simulations of mildly compressible (Pety & Falgarone 2000) or supersonic MHD turbulence (Pavlovski et al. 2006; Pan & Padoan 2008). Moisy & Jimenez (2004) have shown that the regions of intense vorticity tend to form filaments, while regions of most intense dissipation rather form sheets or ribbons, all of them being organized in clusters, probing the organization of small-scale intermittent structures.

For our purpose, we assume that any line of sight intercepts a number of vortices, either active or in their relaxation phase. The total number of vortices per line of sight is constrained by the average transfer rate of turbulent energy per unit volume available in the cascade.

5.1. Method

Any line of sight samples three kinds of diffuse gas: (1) the ambient medium in which the chemistry is computed as steady state UV-dominated chemistry; (2) a number N_{VA} of active vortices and (3) a number of relaxation phases related to N_{VA} . We also consider that the line of sight is homogeneous and characterized by its density n_H and uniform shielding A_V from the ISRF. Such an approximation is useful to test the importance of each parameter (a , n_H and A_V) on the final chemical state of the gas. Last, we assume that all the vortices in the line of sight are identical: they all have the same turbulent rate of strain a . In the following section we show why a more realistic description, with a distribution of rate of strain values, would not provide very different results, namely because, as it will be seen, the results depend weakly on a .

The contribution of one active phase of duration τ_V to the total column density of a species X is $N_{VA}(X)$. The contribution of the relaxation phase of that species is computed by assuming that the longer its relaxation timescale, the greater the contribution of the relaxation phase in the observed column density so that the chemical composition of a line of sight is entirely determined by the number of active vortices N_{VA} and their lifetime τ_V . The resulting column density of a species X is:

$$N(X) = N_{VA}(X) \left[N_{VA}(X) + 1/\tau_V \int_0^\infty N_{VR}(X, t) dt \right] + N_M(X) \quad (23)$$

where $N_M(X)$ is the contribution of the ambient medium.

5.2. Constraints provided by the energy available in the turbulent cascade

5.2.1. The number of active vortices

The number of active vortices N_{VA} in a line of sight and their lifetime τ_V , are constrained by the turbulent energy available in the cascade and its transfer rate. In turbulent flows, the transfer rate of kinetic energy at scale l of characteristic velocity u_l is, on average:

$$\varepsilon_l = \frac{1}{2} \rho \frac{u_l^3}{l} \quad (24)$$

The Kolmogorov scaling of turbulence, valid for incompressible turbulence, postulates that this transfer rate is scale-independent. In the highly compressible interstellar medium, one would expect this quantity to differ from one scale to another. Measurements of the internal velocity dispersion of clouds of size l combined with their density provide an estimate of the turbulent energy transfer rate at this scale. A compilation of CO(1–0) line observations of interstellar structures of size ranging between 10^{-2} and 10^3 pc shows that ε_l is remarkably independent of the scale in the Galaxy and that there is a large scatter (by a factor of 100) about a well defined average value $\bar{\varepsilon}_{obs} \sim 2 \times 10^{-25}$ erg cm $^{-3}$ s $^{-1}$ (Falgarone 1998; Hily-Blant et al. 2008). A similar value holds for turbulence in the HI CNM and in non-star-forming dense cores (Falgarone 1999). The uniformity of this value across the local ISM suggests that the turbulent cascade encompasses the different regions of the cold medium, and that the transfer is driven by turbulence at the same rate, in all media, whatever the gas density.

We adopt the above value of $\bar{\varepsilon}_{obs}$ in our model as representative of the turbulent energy transfer rate through scales. We thus impose that, at any time, the dissipation rate in all the active vortices in a line of sight is equal to the average energy transfer rate in the turbulent cascade, so that:

$$\bar{\varepsilon}_{obs} = N_{VA} \bar{\Gamma}_{turb} 2Kr_0/L \quad (25)$$

where L is the depth of the line of sight, inferred from $L = N_H/n_H$. This fixes the number of active vortices in a given line of sight⁵. This number and many of the results are therefore proportional to $\bar{\varepsilon}_{obs}$.

5.2.2. The velocity dispersion of the ambient turbulence

The energy transfer rate depends on the density, velocity dispersion and timescale. We thus need to know the amount of turbulent energy available in the CNM component of the diffuse medium, or the rms turbulent velocity in the CNM. It is this quantity that sets the angular velocity of the vortex (see Sect. 2.2). This quantity is difficult to determine on observational grounds, because of the mixture of WNM and CNM in the HI emission spectra and because of the lack of spatial information for the absorption spectra (dominated by the CNM). We adopt a rms velocity dispersion $\sigma_{turb} = 3.5$ km s $^{-1}$ for the CNM turbulence derived from the HI maps of a high latitude cirrus in the Polaris Flare (Joncas et al. 1992; Miville-Deschênes et al. 2003) in which HI emission is well correlated with the 100 μ m emission of dust, probing column densities of gas representative of the CNM. This value is consistent with those quoted in Crovisier (1981) for the CNM. It is comparable to the geometric mean of the two smallest values, $FWHM = 4.9$ and 12.0 km s $^{-1}$ inferred by Haud & Kalberla (2007) from the Gaussian decomposition of the HI profiles of the Leiden/Argentine/Bonn survey of galactic HI (Hartmann & Burton 1997). Last, this rms velocity dispersion is consistent with the approximate equipartition between magnetic and turbulent energy inferred by Heiles & Troland (2005) from the median value of the magnetic field estimated in the diffuse medium $B = 6 \mu$ G.

⁵ N_{VA} also depends on the angle of inclination of the vortices along the line of sight. Because the dynamics and the chemistry in a vortex do not depend on the axial coordinates z and because the model is axisymmetric, this angle has no influence on the final results. N_{VA} is thus defined for vortices perpendicular to the line of sight.

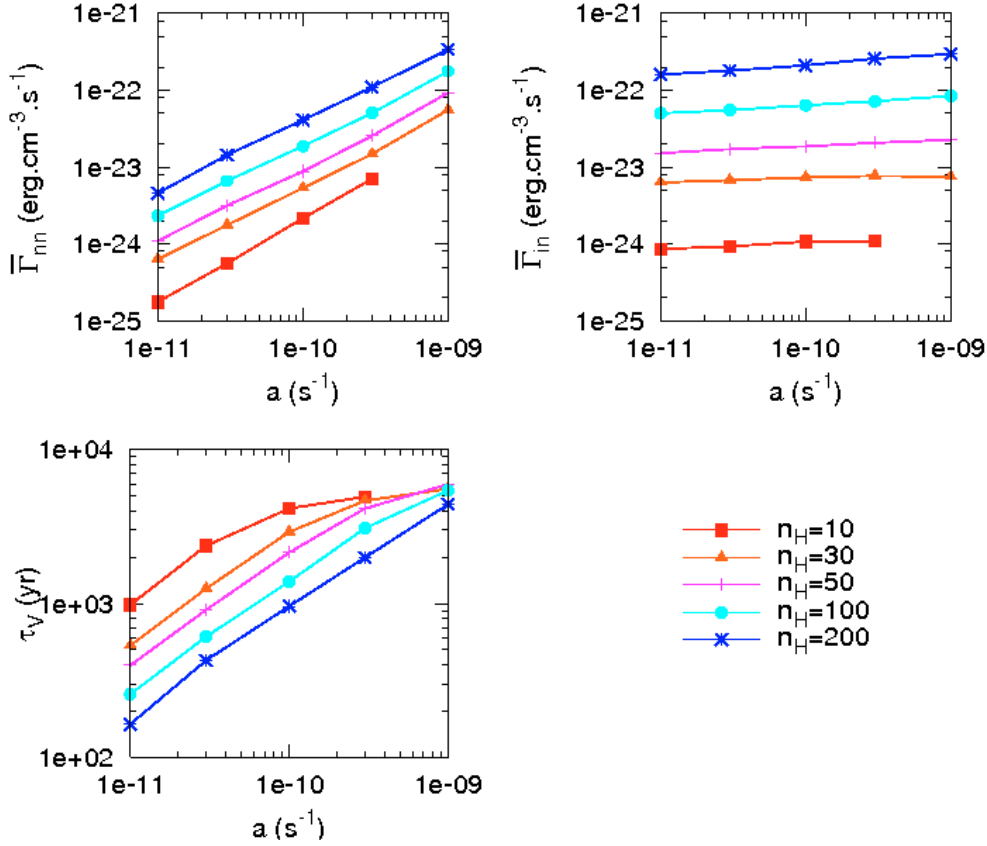


Fig. 6. Main physical properties of the TDR models as functions of the turbulent rate of strain a for several values of the density n_{H} . *Top panels:* the vortex heating terms $\bar{\Gamma}_{\text{vn}}$ due to the viscous dissipation (*left*) and $\bar{\Gamma}_{\text{in}}$ due to the ion-neutral friction (*right*). *Bottom panel:* the vortex lifetime τ_{v} .

5.2.3. The lifetime of the active phase

The lifetime of an active vortex, τ_{v} , is controlled by the large-scale motions of the ambient turbulence that feed energy into the small-scale structures (Moffatt et al. 1994). It may exceed the period of the vortex as suggested by a variety of experiments in incompressible turbulence (e.g. Douady et al. 1991). This lifetime is uncertain, though, and its value in our model is constrained by energetic considerations.

We assume that, for simplicity, all the vortices explored in the models dissipate the same total energy over their lifetime τ_{v}

$$E = \pi(Kr_0)^2 \bar{\Gamma}_{\text{turb}} L_{\text{V}} \tau_{\text{v}}. \quad (26)$$

This constraint fixes the lifetime τ_{v} of the vortex i.e. the time during which turbulent dissipation is active. In order to stay in the vortex framework we impose that τ_{v} is larger than the vortex period P , which sets a lower limit to E . The influence of this parameter on the results is discussed in Appendix B.

5.3. The role of the rate of strain and density under the energetic constraints

Once $\bar{\varepsilon}_{\text{obs}}$, σ_{turb} and E are given, a line of sight is therefore defined by only three independent parameters: the turbulent rate of strain a , the gas density n_{H} and the shielding A_{V} .

To help the reader understand the chemical results presented in the next section, we discuss the roles of the rate of strain and gas density because the above constraints on the energy dissipation rate actually couple a and n_{H} that should be independent parameters. This is so because the two energy constraints (transfer rate and energy) involve the equilibrium radius r_0 that primarily

depends on a but also on n_{H} , via the density dependence of the kinematic viscosity (see Sect. 2.1). These trends are illustrated in Figs. 6 and 7 that also display the dependence of several key quantities on a and n_{H} .

Figure 6 shows that, as expected, $\Gamma_{\text{vn}} \sim an_{\text{H}}$ is almost proportional to a because the higher the rate of strain, the smaller the equilibrium radius and the larger the velocity shear. Γ_{in} is almost independent of a and increases with density as $\Gamma_{\text{in}} \propto u_{\text{D}} n_{\text{H}}^2$ so that, depending on a and n_{H} , two regimes exist: one at low density and high rate of strain where the turbulent heating is dominated by viscous dissipation, and the other (small a , high density) where this heating is dominated by the ion-neutral friction. The rate of strain a therefore plays an important role in the nature of the warm chemistry triggered in the vortex. This figure also displays the run of τ_{v} with the rate of strain for different densities, as a result of the constraint on the total energy E dissipated in each vortex.

Figure 7 shows that r_0 is small in the former regime and reaches values of the order of 100 AU in the regime where ion-neutral friction dominates. The peak gas temperature reached in the vortex, T_{max} , is also shown: it is higher in the regime where viscous dissipation dominates because the orthoradial velocity is fixed and thin vortices induce large velocity shears, thus large viscous heating. However, the thermal inertia of the gas prevents it from reaching much higher temperatures, because the most efficient vortices (large a) are short-lived. The range of a and n_{H} explored in our study covers these two regimes and we quantify the chemical effects of turbulent dissipation as it changes from dominated by ion-neutral friction to dominated by viscous dissipation.

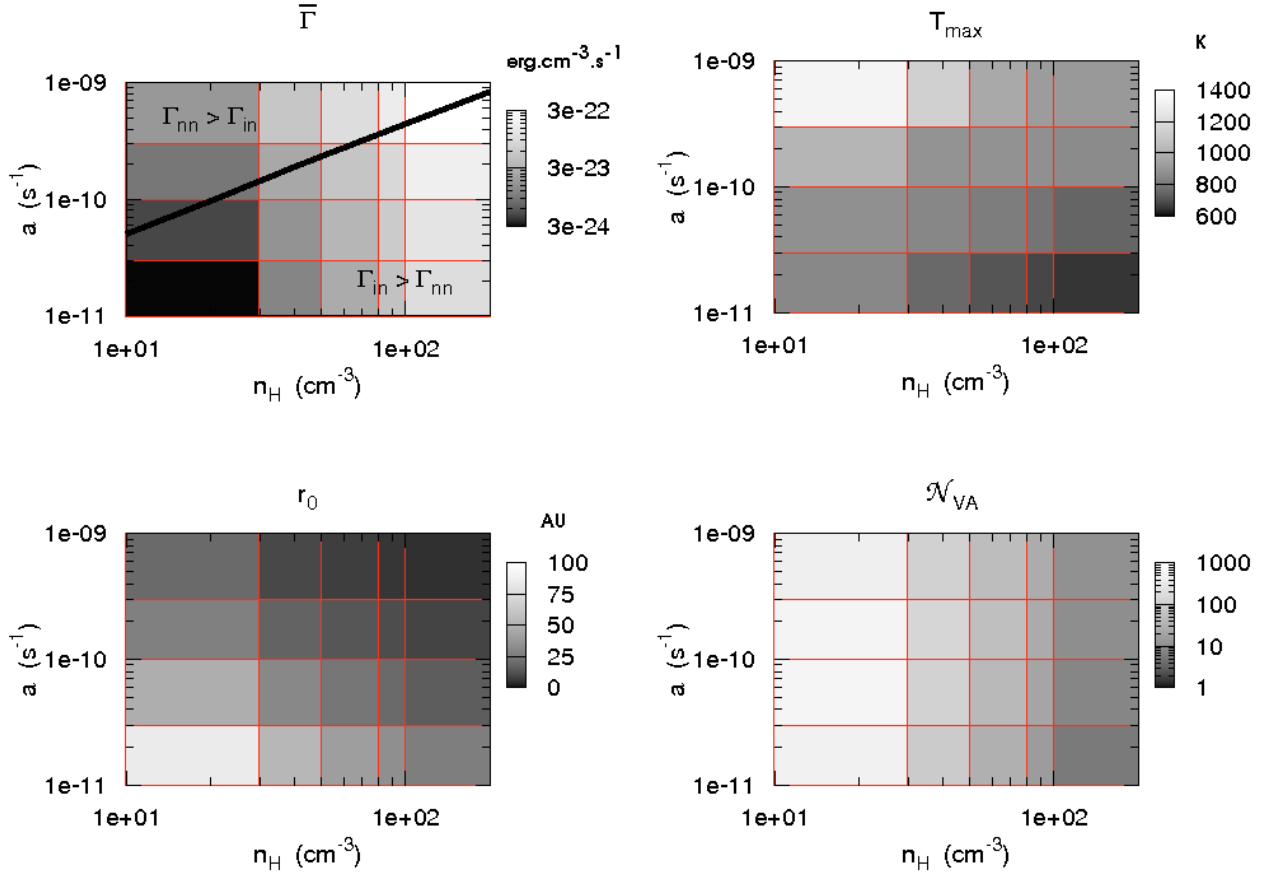


Fig. 7. Main physical properties of the TDR models as functions of the turbulent rate of strain a and of the density n_H of the gas. *Top panels:* the vortex turbulent heating rate $\bar{\Gamma}_{\text{turb}}$ (*left*) and the vortex maximum temperature T_{max} (*right*). *Bottom panels:* the vortex radius r_0 (*left*) and the number of active vortices \mathcal{N}_{VA} along a line of sight sampling one magnitude of gas (*right*).

Last, we find that the number of active vortices \mathcal{N}_{VA} (computed for a line of sight sampling one magnitude of gas) is roughly independent of a and decreases almost as n_H^{-2} as the density increases. This is because $\bar{\epsilon}_{\text{obs}}$ is fixed (see previous section), and because of the combined dependences of r_0 , $\bar{\Gamma}_{\text{turb}}$ and L on a and n_H (see Eq. (25)). We note that \mathcal{N}_{VA} reaches large values at low density (up to several hundreds along lines of sight of several tens of parsecs). However the filling factor of the vortices

$$f_v = \mathcal{N}_{\text{VA}} \frac{2Kr_0}{L} \quad (27)$$

never exceeds $f_v = 4 \times 10^{-2}$, its lowest values being $f_v \sim 10^{-4}$ at high densities and rates of strain.

5.4. The respective contribution of each chemical regime

Three different chemical regimes enter our line of sight modelling, associated with the active phase, the relaxation phase and the ambient medium. Their respective contributions to the integrated column density of a species X (see Eq. (23)),

$$f_M(X) = N_M(X)/N(X) \quad (28)$$

$$f_{\text{VA}}(X) = \mathcal{N}_{\text{VA}}(X)N_{\text{VA}}(X)/N(X) \quad (29)$$

$$f_{\text{VR}}(X) = \mathcal{N}_{\text{VA}}(X) \int_0^\infty N_{\text{VR}}(X, t) dt / N(X) \tau_V \quad (30)$$

depend on this species and are given in Tables 3 and 4.

For numerical reasons the contributions $f_{\text{VA}}(X)$ and $f_{\text{VR}}(X)$ are computed as excesses of the density $n(X)$ in the active and relaxation phases respectively, above its value in the ambient medium. Hence $N_M(X) = f_M(X) \times N(X)$ is the column density of the species X along a line of sight without vortices of total column density $N_H = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$.

Tables 3 and 4 show that all the regimes have a significant contribution, although most of the selected species are predominantly formed in the vortices.

6. Results: comparison with the observations

We have computed 150 different models exploring the parameter space as follows:

- 6 densities ($n_H = 10, 30, 50, 80, 100, 200 \text{ cm}^{-3}$);
- 5 rates of strain ($a = 1, 3, 10, 30, 100 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$);
- 5 UV shieldings ($A_V = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$).

The turbulent rate of strain extends over two orders of magnitude, the largest value corresponding to the condition $r_0 \gg \lambda_{\text{HH}}$ for all densities, the smallest being the limit of validity of our analytical approach.

In this section, we present the results of our line of sight models (named Turbulent Dissipation Regions models or TDR models) on the same displays as large sets of observational data. We also compare these data with results obtained from PDR models (two-side illuminated slabs of uniform density, Meudon PDR code, Le Petit et al. 2006), computed with the

Table 3. Physical and chemical characteristics of two TDR-models defined by their parameters n_{H} , A_{V} and a . $f_{\text{M}}(X)$, $f_{\text{VA}}(X)$ and $f_{\text{VR}}(X)$ are the contributions of the ambient medium, the active and the relaxation phases respectively, to the column density $N(X)$ of the species X . All models are computed for $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$. The relative abundances are given in the last columns. Numbers in parenthesis are powers of 10.

Parameters										
n_{H}	30 cm^{-3}				100 cm^{-3}					
A_{V}	0.1 mag				0.1 mag					
a	3 (-11) s^{-1}				3 (-11) s^{-1}					
Physical properties										
$\bar{\Gamma}_{\text{turb}}$	9.3 (-24) $\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$				6.9 (-23) $\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$					
T_{amb}	114 K				58 K					
T_{max}	1000 K				807 K					
τ_{v}	1070 yr				506 yr					
r_0	40 AU				21 AU					
N_{VA}	215				17					
f_{v}	2.2 (-2)				2.9 (-3)					
Chemical properties										
Species	$f_{\text{M}}(X)$ %	$f_{\text{VA}}(X)$ %	$f_{\text{VR}}(X)$ %	$N(X)$ cm^{-2}	$N(X)/N_{\text{H}}$	$f_{\text{M}}(X)$ %	$f_{\text{VA}}(X)$ %	$f_{\text{VR}}(X)$ %	$N(X)$ cm^{-2}	$N(X)/N_{\text{H}}$
H	100	0 ^a	0 ^a	7.0 (20)	3.9 (-01)	100	0 ^a	0 ^a	2.8 (20)	1.6 (-02)
H ₂	100	0 ^a	0 ^a	5.5 (20)	3.1 (-01)	100	0 ^a	0 ^a	7.6 (20)	4.2 (-01)
H ₃ ⁺	81	5	14	2.9 (13)	1.6 (-08)	93	2	5	1.2 (13)	6.7 (-09)
C	19	65	35	4.4 (14)	2.4 (-07)	68	23	9	5.6 (14)	3.1 (-07)
CH	5	86	9	8.1 (12)	4.5 (-09)	22	69	9	7.9 (12)	4.4 (-09)
CH ⁺	0.2	96	4	2.2 (13)	1.2 (-08)	2	95	3	1.3 (12)	7.2 (-10)
C ₂	0.5	72	28	4.0 (11)	2.2 (-10)	3	46	51	1.4 (12)	7.8 (-10)
C ₂ H	0.1	76	24	6.3 (11)	3.5 (-10)	0.4	61	39	3.5 (12)	1.9 (-09)
OH	52	17	31	8.7 (13)	4.8 (-08)	63	18	19	2.3 (13)	1.3 (-08)
H ₂ O	57	11	32	1.3 (13)	7.2 (-09)	68	14	18	3.6 (12)	2.0 (-09)
H ₃ O ⁺	35	23	42	1.3 (13)	7.2 (-09)	32	40	28	1.1 (12)	6.1 (-10)
CO	57	16	27	2.6 (13)	1.4 (-08)	67	12	21	3.0 (13)	1.7 (-08)
HCO ⁺	14	69	17	8.4 (11)	4.7 (-10)	11	77	12	3.7 (11)	2.1 (-10)
O ₂	67	11	22	3.8 (10)	2.1 (-11)	80	10	10	4.1 (10)	2.3 (-11)
SH ⁺	0.1	98	2	6.2 (11)	3.4 (-10)	0.2	98	2	2.1 (11)	1.2 (-10)
CS	3	85	12	1.8 (09)	1.0 (-12)	11	69	20	7.0 (09)	3.9 (-12)
HCS ⁺	0.6	93	7	1.1 (09)	6.1 (-13)	1	89	10	1.9 (09)	1.1 (-12)
CN	1	79	20	2.3 (11)	1.3 (-10)	8	63	29	1.6 (11)	8.9 (-11)
HCN	0.5	88	12	3.3 (10)	1.8 (-11)	3	81	16	2.6 (10)	1.4 (-11)
HNC	2	89	9	5.9 (09)	3.3 (-12)	17	74	9	4.0 (09)	2.2 (-13)

^a For the reason given in Sect. 5.4 $f_{\text{VA}}(\text{H}) = f_{\text{VR}}(\text{H}) = f_{\text{VA}}(\text{H}_2) = f_{\text{VR}}(\text{H}_2) = 0$, because the densities of H and H₂ are not modified in the vortex.

same conditions as in the TDR models: $\chi = 1$, $\zeta = 3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ and with the same chemical network.

The amount of gas along the line of sight in the PDR and TDR models is normalized to $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ because, as will be shown later, it corresponds to most of the data collected in the visible, UV and radio ranges.

6.1. Ultraviolet and visible observations towards nearby stars

An important clue for the understanding of the diffuse ISM chemistry is provided by the combined observations of CH and CH⁺ (Gredel et al. 1993; Crane et al. 1995; Gredel 1997; Pan et al. 2004, 2005; Sheffer et al. 2008). Although CH⁺ is known to be overabundant, the column densities of CH are in agreement with the predictions of the PDR models. Because the two species are tightly related by the chemistry (see Figs. C.1 and C.2 in Appendix C), the difficulty of any modelling is then to understand the physics which leads to an enhancement of CH⁺ without changing the amount of CH. Another important clue lies in the correlation, mentioned in the Introduction, between CH⁺ and the pure rotational $J \geq 3$ levels of H₂.

The CH⁺, CH and excited H₂ observational data are displayed in Fig. 8 with the prediction of several PDR models (left panels) and TDR models (right panels), computed for diffuse gas of density between 10 and 200 cm^{-3} . As mentioned above, we restrict our analysis to diffuse gas illuminated by the ambient ISRF, and have therefore removed all the data corresponding to lines of sight toward hot stars.

The TDR models predict column densities of CH⁺ in good agreement with the observations for low densities ($n_{\text{H}} \leq 100 \text{ cm}^{-3}$). This density limit corresponds to the observed average turbulent energy to which we scale our computations (Eq. (25)): if $\bar{\epsilon}_{\text{obs}}$ was larger, this limit would be larger too. Most gratifying is the fact that this is achieved without producing an excess of CH. It is so because, in the vortex, CH is a product of CH⁺ (its production is therefore enhanced by the turbulent dissipation, see Appendix C) but its destruction is also enhanced since it proceeds through endo-energetic reactions (CH + H, $-\Delta E/k = 2200 \text{ K}$ and CH + H₂, $-\Delta E/k = 1760 \text{ K}$). Note that in panels (c, d), because of the assumed homogeneity of the gas (uniform A_{V} and n_{H} along the line of sight), the column densities computed in the TDR models are proportional to N_{H} , hence the straight lines.

Table 4. Same as Table 3.

Parameters										
n_{H}	30 cm ⁻³				100 cm ⁻³					
A_{V}	0.4 mag				0.4 mag					
a	3 (-11) s ⁻¹				3 (-11) s ⁻¹					
Physical properties										
$\bar{\Gamma}_{\text{turb}}$	8.5 (-24) erg cm ⁻³ s ⁻¹				6.2 (-23) erg cm ⁻³ s ⁻¹					
T_{amb}	79 K				42 K					
T_{max}	830 K				710 K					
τ_{v}	1250 yr				610 yr					
r_0	38 AU				20 AU					
N_{VA}	246				19					
f_{v}	2.4 (-2)				3.2 (-3)					
Chemical properties										
Species	$f_{\text{M}}(X)$ %	$f_{\text{VA}}(X)$ %	$f_{\text{VR}}(X)$ %	$N(X)$ cm ⁻²	$N(X)/N_{\text{H}}$	$f_{\text{M}}(X)$ %	$f_{\text{VA}}(X)$ %	$f_{\text{VR}}(X)$ %	$N(X)$ cm ⁻²	$N(X)/N_{\text{H}}$
H	100	0 ^a	0 ^a	2.0 (20)	1.1 (-01)	100	0 ^a	0 ^a	7.9 (19)	4.4 (-02)
H ₂	100	0 ^a	0 ^a	8.0 (20)	4.4 (-01)	100	0 ^a	0 ^a	8.6 (20)	4.8 (-01)
H ₃ ⁺	77	6	17	5.9 (13)	3.3 (-08)	92	2	6	1.4 (13)	7.8 (-09)
C	19	56	25	1.3 (15)	7.2 (-07)	76	13	11	1.4 (15)	7.8 (-07)
CH	2	87	11	3.6 (13)	2.0 (-08)	20	66	14	1.5 (13)	8.3 (-09)
CH ⁺	0.2	96	4	1.3 (13)	7.2 (-09)	3	93	4	6.0 (11)	3.3 (-10)
C ₂	0.3	57	43	4.2 (12)	2.3 (-09)	3	30	67	4.2 (12)	2.3 (-09)
C ₂ H	0.1	68	32	7.4 (12)	4.1 (-09)	0.4	52	47	1.0 (13)	5.6 (-09)
OH	47	24	29	8.4 (13)	4.7 (-08)	34	31	35	1.5 (13)	8.3 (-09)
H ₂ O	50	20	30	1.3 (13)	7.2 (-09)	39	27	34	2.4 (12)	1.3 (-09)
H ₃ O ⁺	20	46	34	9.9 (12)	5.5 (-09)	11	59	30	7.0 (11)	3.9 (-09)
CO	45	15	40	1.2 (14)	6.7 (-08)	35	11	54	9.1 (13)	5.1 (-08)
HCO ⁺	6	82	12	2.2 (12)	1.2 (-09)	3	84	13	4.9 (11)	2.7 (-10)
O ₂	64	16	20	6.9 (10)	3.8 (-11)	52	19	29	4.4 (10)	2.4 (-11)
SH ⁺	0.02	97	3	1.7 (12)	9.4 (-10)	0.03	96	4	4.9 (11)	2.7 (-10)
CS	1	82	17	1.9 (10)	1.1 (-11)	9	61	30	3.0 (10)	1.7 (-11)
HCS ⁺	0.2	92	8	9.2 (09)	5.1 (-12)	1	86	13	6.1 (09)	3.4 (-12)
CN	2	67	31	8.8 (11)	4.9 (-10)	10	46	44	4.7 (11)	2.6 (-10)
HCN	1	84	15	1.0 (11)	5.6 (-11)	3	75	2	5.7 (10)	3.2 (-11)
HNC	2	87	11	2.7 (10)	1.5 (-11)	18	69	13	1.2 (10)	6.7 (-12)

^a Same as Table 3.

The dissipation of turbulent energy is also a plausible explanation for the excitation of the pure rotational levels of molecular hydrogen: the TDR models reproduce not only the CH⁺ to H₂^{*}($J = 4$) column density ratio but also a significant fraction of the large dynamic range (2 orders of magnitude) over which the correlation is observed (Figs. 8e, f). We recall that all the column densities of species dominated by the warm chemistry are proportional to $\bar{\epsilon}_{\text{obs}}$ and may be under- or over-estimated by about a factor of 10.

An encouraging result is also shown in Figs. 8g, h. Gry et al. (2002) and Lacour et al. (2005) found that the H₂ excitation diagrams obtained in the direction of stars later than B2 cannot be reproduced with the stellar UV excitation only. For comparison we display a PDR and a TDR model, both computed for $n_{\text{H}} = 100 \text{ cm}^{-3}$, a value close to the optimal density found by Nehmé et al. (2008b) toward HD 102065.

The dependence of the TDR models on the density significantly differs from those of the PDR models. They share the same dependence of the chemistry on gas density but the TDR models have the additional dependence on density of the number of vortices and their size. The column density of CH⁺ is therefore highly dependent on n_{H} (varies roughly as n_{H}^{-2}) while those of CH and H₂^{*}($J \geq 3$) are almost insensitive to the density in the range of parameters explored. Last, the turbulent rate of

strain a has a weak effect: all the column densities decrease by less than a factor of 10 when a increases by a factor of 100.

6.2. Submillimeter and millimeter observations: absorption lines towards continuum sources

Conspicuous correlations have been observed in the diffuse ISM among the observed column densities of OH, H₂O, HCO⁺, CO, C₂H, CN, HCN and HNC seen in absorption along lines of sight towards extragalactic radio sources or star forming regions. The column densities of several species appear to be linearly correlated. Some are tight correlations such as $N(\text{OH})/N(\text{HCO}^+) = 27 \pm 7$ (Lucas & Liszt 1996), $N(\text{CN})/N(\text{HCN}) = 6.8 \pm 1$, and $N(\text{HNC})/N(\text{HCN}) = 0.21 \pm 0.05$ (Liszt & Lucas 2001) in the direction of extragalactic radio sources. Others are looser correlations, still linear, such as $N(\text{H}_2\text{O})/N(\text{HCO}^+) \sim 6$ (Olofsson et al., submitted) and $N(\text{H}_2\text{O})/N(\text{OH}) \sim 0.3$ (Neufeld et al. 2002) found in several velocity components towards galactic star forming regions. The column densities of CO and C₂H appear non-linearly correlated to those of HCO⁺ (Liszt & Lucas 1998; Lucas & Liszt 2000). In all cases, these correlations are observed over a dynamic range of column densities as large as 30–100.

To determine whether these large dynamic ranges correspond to actual variations of molecular relative abundances or

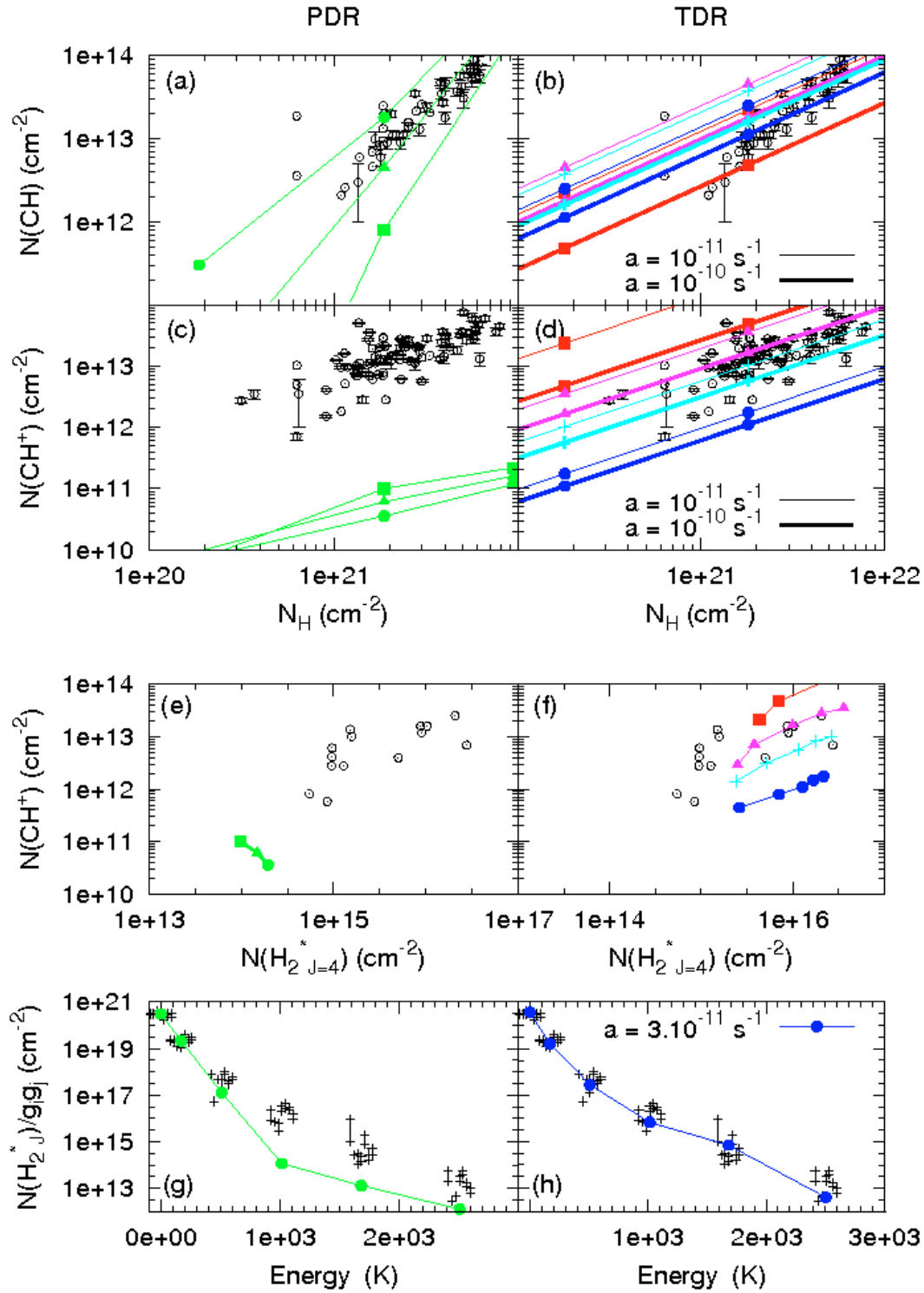


Fig. 8. Observations compared to PDR models (*left panels*) and to TDR models (*right panels*). Data (open circles) – CH column densities are from Crane et al. (1995) and Gredel (1997). CH⁺ column densities are from Crane et al. (1995), Gredel (1997) and Weselak et al. (2008). H₂^{*}_{J=4} column densities are from Spitzer et al. (1974), Snow (1976, 1977), Frisch (1980), Frisch & Jura (1980) and Lambert & Danks (1986). The excitation diagrams of H₂ are from Gry et al. (2002) and Lacour et al. (2005). The data on panels e), f) and g), h) are scaled to $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ and $N(\text{H}_2) = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$ respectively, and correspond to lines of sight toward stars of type later than B2. For clarity, on panels g), h), the points for a given level are slightly shifted on the abscissa. PDR and TDR models (filled symbols) – Computed for several densities: 10 (squares), 30 (triangles), 50 (crosses) and 100 cm^{-3} (circles). All the TDR models are computed for $A_{\text{V}} = 0.2$. The models of panels e), f) and g), h) have been scaled as the data. In panel f) the TDR models are computed for a varying along each curve between 10^{-11} (top right) and 10^{-9} s^{-1} (bottom left).

are due to a large range of column densities of gas sampled, we have estimated the total amount of gas $N_{\text{H}} = N(\text{HI}) + 2N(\text{H}_2)$

along the lines of sight used in our study, whenever it was possible. Using the $\lambda 21 \text{ cm}$ observations of HI (Du Puy et al. 1969;

Radhakrishnan et al. 1972; Lazareff 1975; Dickey et al. 1978) on the one side, and the measurement of the $\lambda 9$ cm line of CH and the remarkable correlation between CH and H_2 in the diffuse ISM (Liszt & Lucas 2002) on the other side, we estimated the total H column density for several lines of sight displayed in Figs. 9 and 10. We found that most lines of sight sample about 1 mag of gas, with the exception of the upper point of panels (a, b) that corresponds to $2.5 \times 10^{21} < N_H < 3.6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ and the lowest for which $N_H = 6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$. The next 2 points both verify $N_H \geq 1.2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$. The dynamic range of 30–100 observed on the column densities in Figs. 9 and 10 is therefore due in a small part to the amount of gas on the line of sight, and the actual dynamic range of observed relative abundances, $N(X)/N_H$, remains as large as about 10 along these diffuse lines of sight.

All these data are displayed in Figs. 9 and 10. The left panels show the predictions of several PDR models while the right panels display those of the TDR models for comparison (normalized to 1 magnitude of diffuse gas sampled on the line of sight). The calculations were made assuming a recombination rate of HCO^+ of $k = 2.4 \times 10^{-7} (T/300 \text{ K})^{-0.69} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (Ganguli 1988). This recombination rate being critical for some of the molecules presented here, we discuss the impact of this choice in Appendix A.

6.2.1. OH, H_2O and HCO^+

For these molecules, the PDR models predict linear correlations between their abundances, but they fail to reproduce the observed ratios and the observed dynamic range of absolute abundances.

The TDR models, without fine-tuning of the parameters, are consistent with the data over a broad range of gas densities $10 \text{ cm}^{-3} \leq n_H \leq 200 \text{ cm}^{-3}$ and rates of strain $10^{-11} \text{ s}^{-1} \leq a \leq 10^{-10} \text{ s}^{-1}$. Better agreement is obtained for small values of the rate of strain, i.e. a chemistry dominated by ion-neutral drift heating. Not only are the abundance ratios correctly reproduced by the TDR models, but the dynamic ranges are also reproduced even with a single value of $\bar{\epsilon}_{\text{obs}}$. Moreover these results are obtained without producing water abundances in excess of observed values. The models at high densities are consistent with the upper limit reported in HST-GHRS observations by Spaans et al. (1998).

6.2.2. C_2H and HCO^+

In the case of C_2H , we find that the observed column densities are reproduced by several models, something that the PDR models cannot even approach. The average abundance ratio $N(C_2H)/N(HCO^+) = 14.5 \pm 6.7$ (Lucas & Liszt 2000) is reproduced for almost the same models that match the observed column densities of OH and H_2O : $30 \text{ cm}^{-3} \leq n_H \leq 200 \text{ cm}^{-3}$ and rates of strain $10^{-11} \text{ s}^{-1} \leq a \leq 10^{-10} \text{ s}^{-1}$.

6.2.3. CO and HCO^+

In the case of CO, the TDR models are closer to the observed column densities than the PDR model predictions, and again, high densities and low rates of strain are more favorable. In Appendix B we show, however, that if the energy dissipated in a vortex lifetime τ_V is reduced by a factor of 10 (i.e. the importance of the relaxation phase is increased by a factor of 10), the whole range of observed CO column densities is naturally reproduced for $n_H \geq 100 \text{ cm}^{-3}$ without significantly modifying the results regarding the other molecules.

The clumpiness and large fluctuations of density along the line of sight – often required to find an agreement between observed and predicted column densities in UV-driven chemical models (e.g. Black & Dalgarno 1977; Le Petit et al. 2006) – are not required here.

6.2.4. CN, HCN and HNC

The TDR models fail to reproduce the high column densities observed for CN, HCN and HNC, although the results are one to two orders of magnitude above the PDR models predictions. This discrepancy might be due to the nitrogen chemistry which involves neutral-neutral reactions whose rates are poorly known (Pineau des Forêts et al. 1990; Boger & Sternberg 2005).

6.3. The departure of carbon from ionization equilibrium

Figure 11 shows that the neutral carbon abundance predicted by the TDR models is higher by up to a factor of 10 than that of the PDR models where carbon is in ionization balance. This may be related to the finding of Fitzpatrick & Spitzer (1997) that the electron density inferred from C and C^+ is higher than those inferred from other pairs of ions and neutrals (Mg, S, Ca).

7. Discussion

7.1. The gas homogeneity

In our TDR models, the ambient chemistry is not treated with accurate UV radiative transfer. Instead, we assume that all the CNM on the line of sight has the same shielding from the ambient UV radiation field, no matter its density and column density. This takes into account the fractal structure of the CNM (Elmegreen et al. 2001) also found in the numerical simulations of Audit & Hennebelle (2005) and similar to that of edges of molecular clouds (Falgarone et al. 1991) and translucent molecular clouds (Stutzki et al. 1998). It also takes into account the fact that fragments that bear molecules are not isolated in space but are shielded from the ambient UV field by their neighbouring fragments (see Dobbs et al. 2008). This however does not have a major impact on our results for all the species that form predominantly in the warm chemistry, i.e. most of the species discussed here.

7.2. The assumption of isochoric evolution

During the vortex stage, the incompressibility is reasonably justified. (1) Radially, the advection force is 3 to 10^3 times larger than the neutral thermal pressure gradients $\nabla_r (n_n k T_n)$ over the whole structure. Since it is also 10^2 to 10^3 times greater than the friction force F_{in} (see Sect. 2.3), $\nabla_r (n_n k T_n) \sim 1 - 30 F_{\text{in}}$. The ion thermal pressure gradients $\nabla_r (n_i k T_i) \sim 2 \times 10^{-4} \nabla_r (n_n k T_n)$ are consequently negligible compared to F_{in} . The assumption in Eq. (11), involved in the computation of the steady state, is therefore justified. (2) Along the z axis $\nabla_z (n_n k T_n)$ is smaller than the advection force as long as $a \geq 10^{-10} \text{ s}^{-1}$. For $a \leq 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ these terms are comparable. In this case, the axial expansion timescale is ~ 1000 yr, within a factor of 3 of the vortex lifetime (see Fig. 6).

During the relaxation phase, the thermal pressure gradients are dominant and therefore drive its dynamical evolution. According to the temperature gradients of Fig. 2 (panel c), the inner regions ($r \leq 0.5 r_0$) should be compressed while the outer regions ($r \geq 1.5 r_0$) should expand. The characteristic timescales

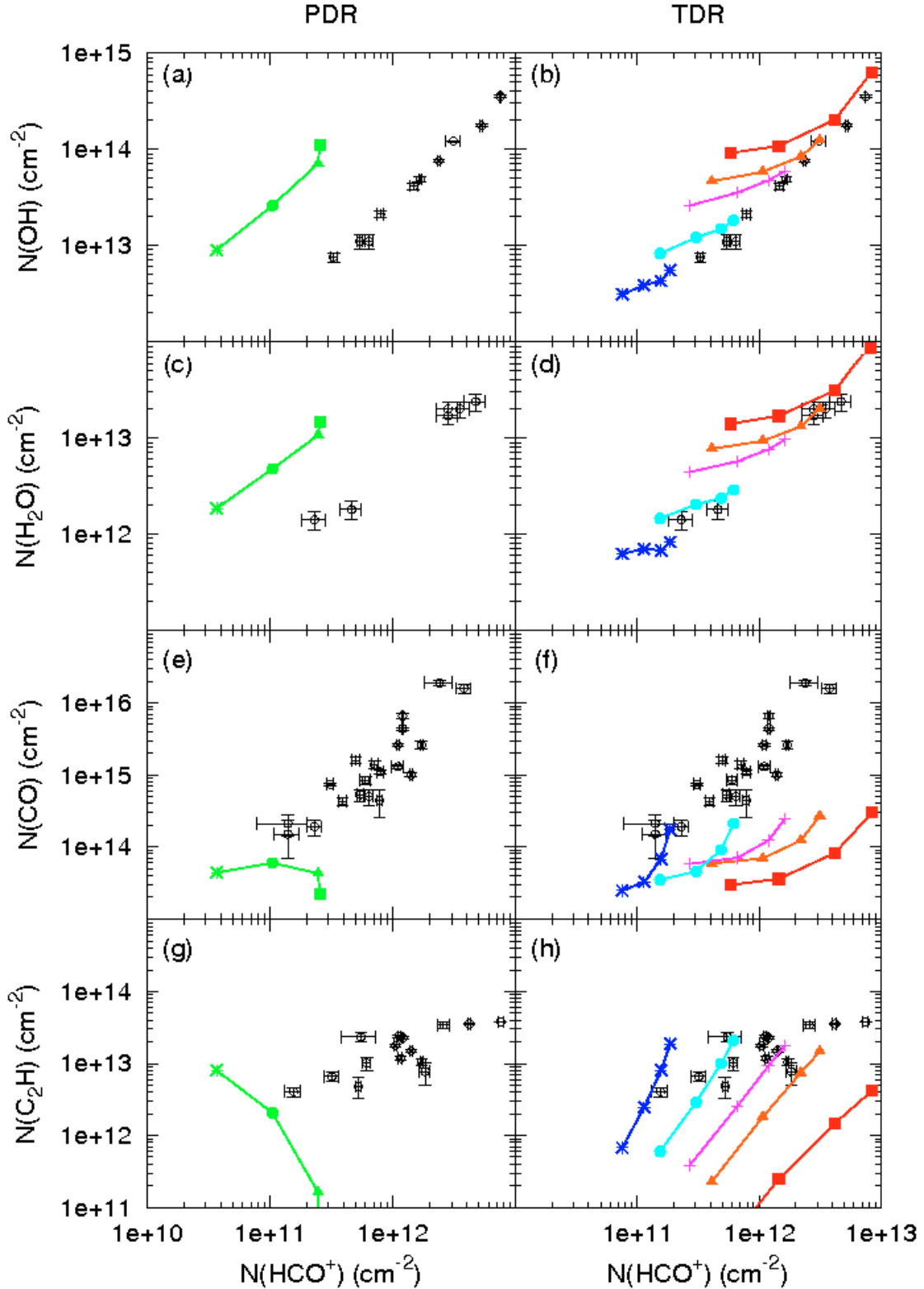


Fig. 9. Observations compared to PDR models (*left panels*) and to TDR models (*right panels*). Data (open circles) – the data of panels a), b), c), d), e), f) and g), h) are from Lucas & Liszt (1996), Olofsson et al. (submitted to A&A), Liszt & Lucas (1998) and Lucas & Liszt (2000) respectively. PDR and TDR models (filled symbols) – computed for several densities: 10 (squares), 30 (triangles), 50 (crosses), 100 (circles) and 200 (double crosses) cm^{-3} . All models are computed for $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ and the HCO^+ recombination rate of Ganguli et al. (1988). The TDR models are computed for $A_{\text{V}} = 0.4$ and a varying along each curve between 10^{-11} (top right) and $3 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ (bottom left).

associated with those motions are found to be short compared to the chemical timescales (see Sect. 4.3). However, an isochoric relaxation was assumed because the regions that are chemically

the richest and have the largest contribution to the column densities are those where the thermal pressure gradients are the smallest ($0.5r_0 \leq r \leq 1.5r_0$).

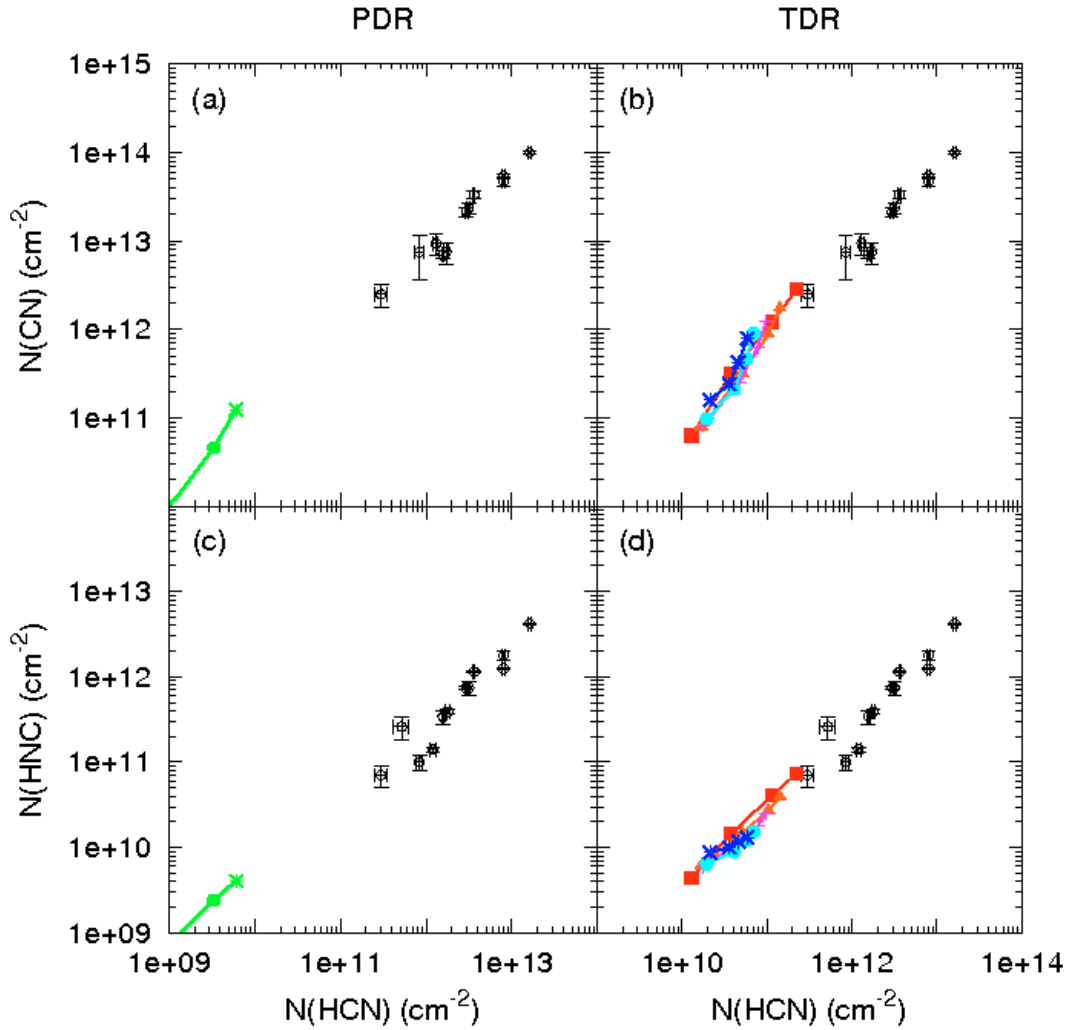


Fig. 10. Observations compared to PDR models (*left panels*) and to TDR models (*right panels*). Data (open circles) – the data are from Liszt & Lucas (2001). PDR and TDR models (filled symbols) – same as Fig. 9.

7.3. Loosening the vortex framework

The vortex is a model that has the great and unique advantage of analytically coupling the large and small scales, but the knowledge we have of its lifetime is drawn from laboratory experiments only. This lifetime τ_v however plays an important role in the modelling of a diffuse line of sight: Eq. (23) shows that if a species is predominantly produced during the relaxation phase, its column density is proportional to $1/\tau_v$.

We have made the choice in Sect. 5.2.3 to infer τ_v from the total energy E dissipated in the vortex, under the constraint that τ_v remains larger than the vortex period. We show in Appendix B how the TDR model results are modified when E (and therefore τ_v) is ten times larger or smaller than the adopted value. As expected, the impact of E is greater for the molecules that have a long relaxation time. Figure B.1 shows that a small value of E leads to a better agreement with the available observations. This is shown for OH and CO but the same behavior is observed for CN, HCN and HNC. Such a result is in favour of very short bursts of turbulent dissipation, for which τ_v may become (at small a) shorter than the vortex period.

A non steady state model of a short-lived but intense velocity-shear may thus be more realistic and produce an equivalent chemical enrichment. This suggests that the vortex framework is not essential.

7.4. The chemistry

One source of uncertainties is undoubtedly linked to the chemistry itself. While the results are weakly dependent on the dynamic parameters a and n_H , a few reaction rates are critical. This is illustrated by Fig. A.1 that displays the predictions of the PDR and TDR models for a recent value (measured in the laboratory, Mitchell & Mitchell 2006) of the recombination rate of HCO^+ .

The uncertainties on other chemical rates such as the recombination rate of HCNH^+ (Mitchell & Mitchell 2006) and the CN photodissociation rate (Kopp 1996), and neglected reactions (with negative ions for instance, see Dalgarno & MacCray 1973) might affect our modelling.

In this respect, a promising route would be to further link the observations of Sect. 6.1 and those of Sect. 6.2 by using the species that are detectable in both UV and radio domains: for instance CH, CN, OH and CO. These molecules would permit us to establish valuable correlations between CH^+ and the oxygen bearing species. It would also be a way to evaluate the column density of molecular hydrogen using two independent methods: the remarkable correlation between CH and H_2 (Liszt & Lucas 2002) and the less reliable correlation between CN and H_2 (Liszt & Lucas 2001).

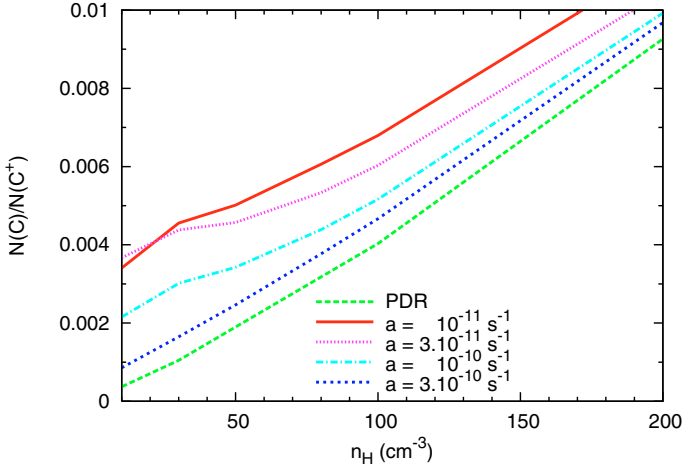


Fig. 11. Column densities ratio $N(C)/N(C^+)$ computed with the PDR and TDR codes, as functions of the density n_H .

8. Conclusions and perspectives

We have built TDR models of diffuse gas in which the gas temperature and chemistry are driven by small-scale bursts of turbulence dissipation. We use the framework of a modified Burgers vortex to analytically couple the large scales of the ambient turbulence to the small scales where dissipation actually occurs, and to compute the ion-neutral drift generated by the large neutral accelerations in the vortex. The resulting timescales are short and comparable to those of chemical evolution, which necessitates a non-equilibrium thermal and chemical approach.

The main feature of these TDR models is that, for the first time, we quantify the coexistence on a random line of sight across the medium, of a number of vortices in a stage of active dissipation with gas in thermal and chemical relaxation, after the end of the dissipation burst. We also constrain the number of dissipative structures on a line of sight by the average turbulent energy available in the local ISM and its transfer rate in the cascade. The key parameter is the turbulent rate of strain a due to the ambient turbulence.

We find that these bursts of dissipation, short-lived and localized, fill at most a few percent of a random line of sight but have a measurable impact on the molecular abundances in the diffuse medium. For a broad range of rates of strain and densities, the TDR models reproduce the CH^+ column densities observed in the diffuse medium and their correlation with highly excited H_2 . They do so without producing an excess of CH .

As a natural consequence, they reproduce the correct abundance ratios of HCO^+/OH and HCO^+/H_2O , and the dynamic range of about one order of magnitude over which they are observed. Larger C_2H and CO abundances than found in other types of models, are additional outcomes of the TDR models that compare reasonably well with the observed values and their relation to the HCO^+ abundances. Those results are found for a broad range of physical parameters, with rates of strain in the range $10^{-11} s^{-1} \leq a \leq 10^{-10} s^{-1}$.

We find that neutral carbon exceeds the abundance expected at ionization equilibrium, in agreement with fine-structure line observations. The abundances and column densities computed for CN , HCN and HNC are one order of magnitude above PDR predictions and close to the observed values, although a discrepancy still exists.

The comparison with observed column densities favors chemical enrichment dominated by ion-neutral friction, involving shear structures of radius ~ 100 AU or more. It also favors

short dissipation bursts. Most of the species are then produced during the relaxation phase. In this case, their line profile loses the dynamic signatures of the vortex. The fact that some species are formed in the active phases and some others in the relaxation phases might explain the discrepancy among the physical gas parameters inferred from different species along similar lines of sight.

It is foreseeable that the vortex framework and the assumption of an isochoric relaxation will have to be superseded by numerical simulations to:

- (1) compute the decoupling of magnetic field and neutrals in the intense small-scale velocity-shears generated by intermittency, with boundary conditions imposed by large scale turbulence,
- (2) take into account the effect of the field on the velocity shears,
- (3) accurately involve all the pressure gradients (thermal and magnetic) in the relaxation phase, and
- (4) take advantage of the huge amount of information contained in the shape of the line profiles. The difficulty will remain to couple the large and small scales, over at least 5 orders of magnitude, that is critical to satisfy the energy requirements of the TDR models and is currently beyond the numerical capabilities.

Acknowledgements. We are indebted to Pierre Hily-Blant for the many improvements he made in the code formerly used in J98. We are most grateful to John Black for pointing out the uncertainties concerning the HCO^+ recombination rate and to Brian Mitchell for the detailed informations regarding the past and most recent laboratory measurements of this reaction. We thank Javier Goicoechea for the valuable discussions on chemistry in UV-dominated environments. We also thank the referee for the thorough and encouraging comments on this manuscript.

Appendix A: The recombination of HCO^+

One critical reaction rate of our work is the recombination of HCO^+ which determines the equilibrium between the oxygen bearing molecules (OH , CO , H_2O , ...). The associated rate k has varied over more than an order of magnitude during the last 30 years among various experiments.

Adams et al. (1982) and Amano (1990) performed measurements of k (studying respectively a flowing and a stationary afterglow plasma) in a temperature range of $100 K \leq T \leq 300 K$ and found respectively $1.1 \times 10^{-7} cm^3 s^{-1}$ at 300 K and $3.1 \times 10^{-7} cm^3 s^{-1}$ at 273 K. In 1988 Ganguli et al. (stationary afterglow plasma) explored the high energy domain $293 K \leq T \leq 5500 K$ and obtained a scaling law:

$$k = 2.4 \times 10^{-7} \times (T/300 K)^{-0.69} cm^3 s^{-1}. \quad (A.1)$$

In approximately the same range of energy (but with the merged beam measurement technique) Le Padellec et al. (1997) obtained

$$k = 1.7 \times 10^{-7} (T/300 K)^{-1.2} cm^3 s^{-1}. \quad (A.2)$$

Later the same group (Mitchell & Mitchell 2006) revised their previous value by taking into account the exploration of the low energy domain (≤ 0.01 eV). They found:

$$k = 0.7 \times 10^{-7} \times (T/300 K)^{-0.5} cm^3 s^{-1}. \quad (A.3)$$

More recently Korolov et al. (in press, flowing afterglow plasma) performed measurements in the range $150 K \leq T \leq 270 K$. They obtained results in good agreement with those of Le Padellec et al. (1997), this is to say a steep dependence on the temperature:

$$k = 2.0 \times 10^{-7} \times (T/300 K)^{-1.3} cm^3 s^{-1}. \quad (A.4)$$

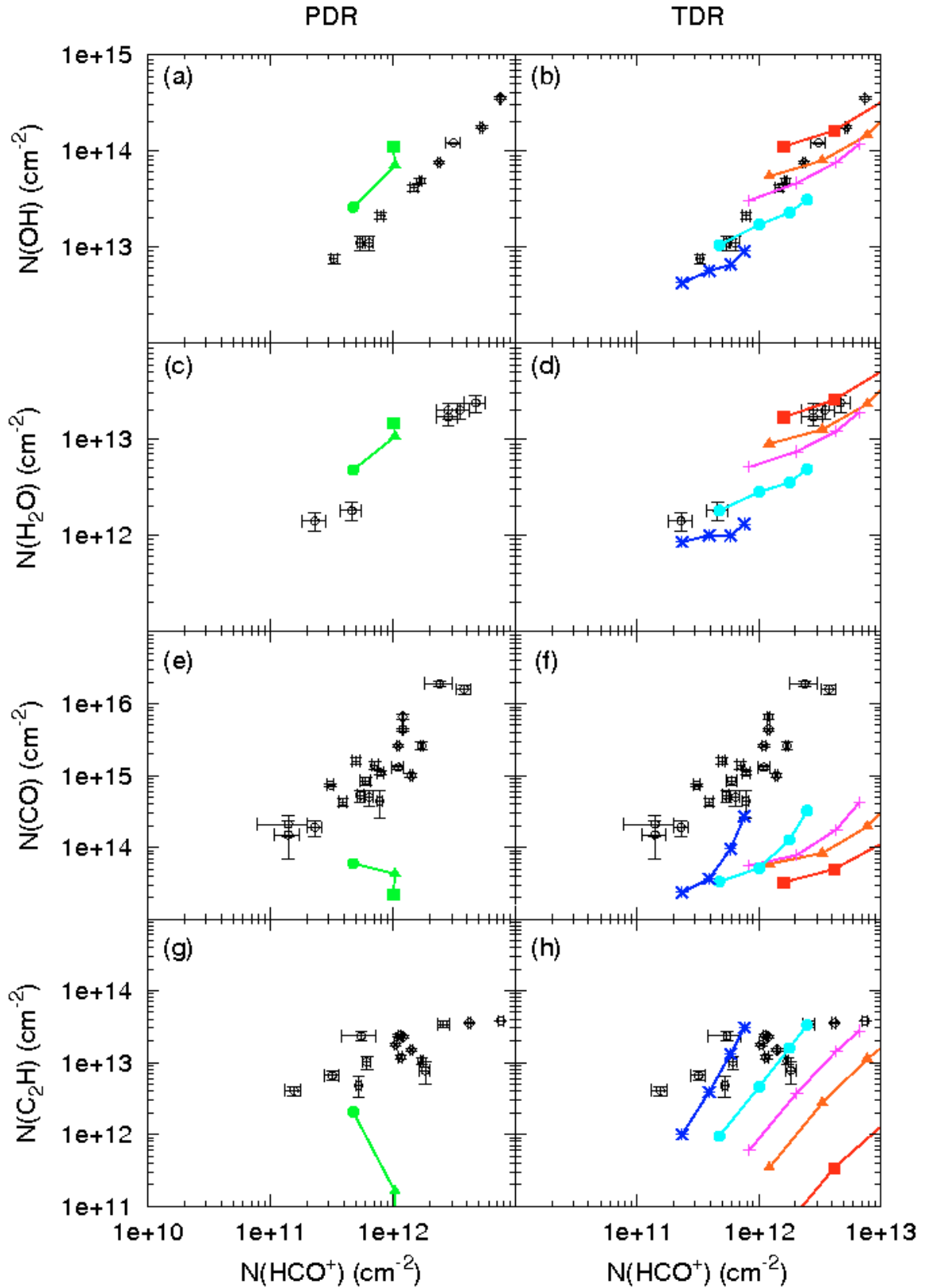


Fig. A.1. Observations compared to PDR models (*left panels*) and to TDR models (*right panels*). Data (open circles) – same as Fig. 9. PDR and TDR models (filled symbols) – same as Fig. 9 except for the recombination rate of HCO^+ chosen to be $0.7 \times 10^{-7} (T/300 \text{ K})^{-0.5} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ (Mitchell & Mitchell 2006).

Figure A.1 displays the results we obtain with the TDR and PDR models assuming the rate of Mitchell & Mitchell (2006) which is the smallest yet found. In comparison Fig. 9 was

obtained assuming the rate of Ganguli et al. (1988) which is one of the highest and is usually adopted in other chemical networks (UMIST database; OSU database).

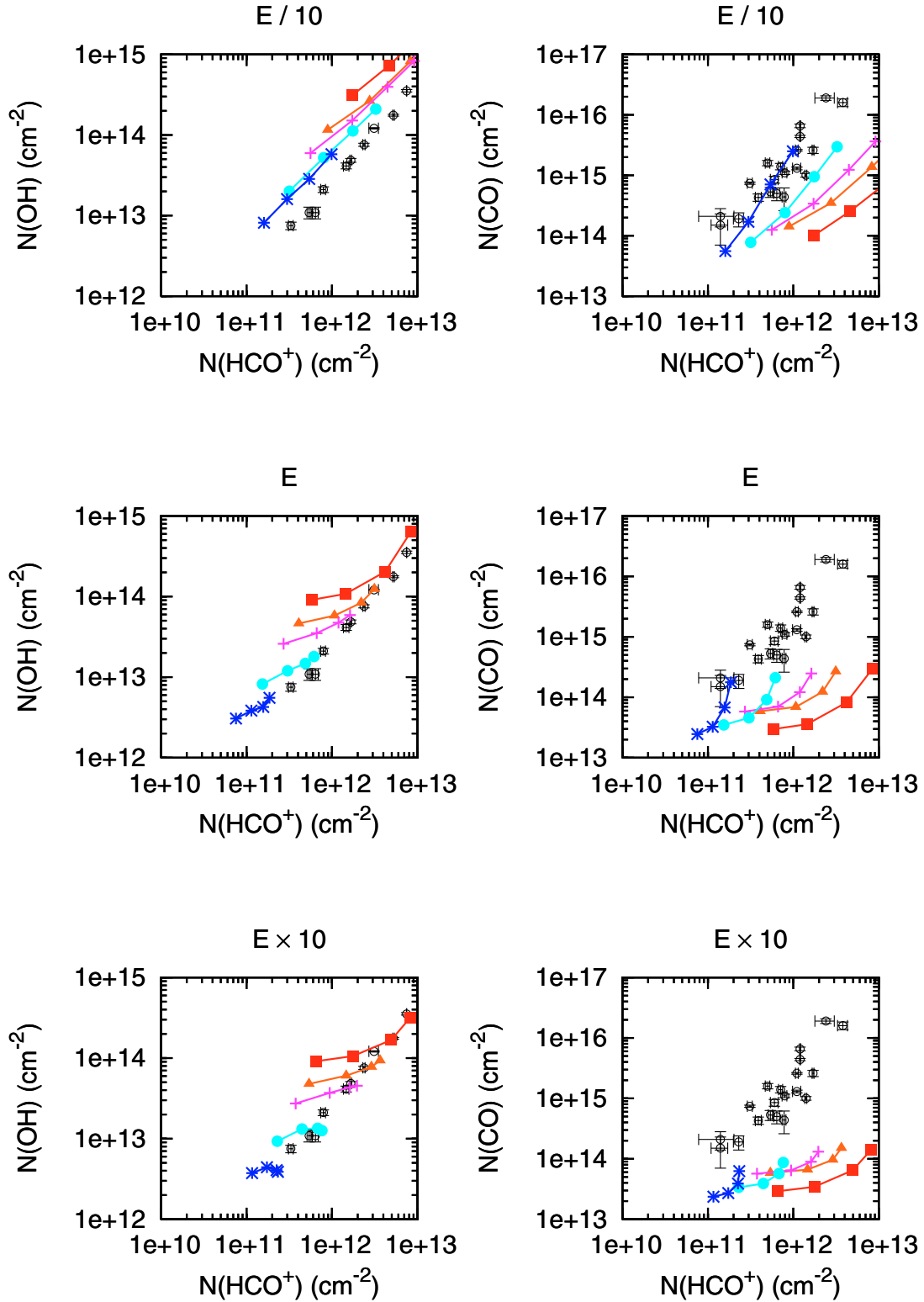


Fig. B.1. Observations compared to the TDR models. The data are from Lucas & Liszt (1996) and Liszt & Lucas (1998). The TDR models are scaled to $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ and are computed for several values of the total energy E dissipated by a vortex: from 0.1 (*top panels*) to 10 times (*bottom panels*) that of the reference model. The symbols are the same as in Fig. 9.

Appendix B: Influence of the total energy E dissipated per vortex

Figure B.1 illustrates the effect on the column densities of OH, CO and HCO^+ of varying the energy dissipated in the vortex E by two orders of magnitude.

Figure B.1 suggests that small values of E lead to better agreement with the observations. Smaller amounts of dissipated energy, in our framework, means shorter vortex lifetimes, that accordingly give a larger relative importance to the relaxation phase (Eq. (23)). In the models displayed on the top panels, the lifetime is such that the relaxation phase dominates the

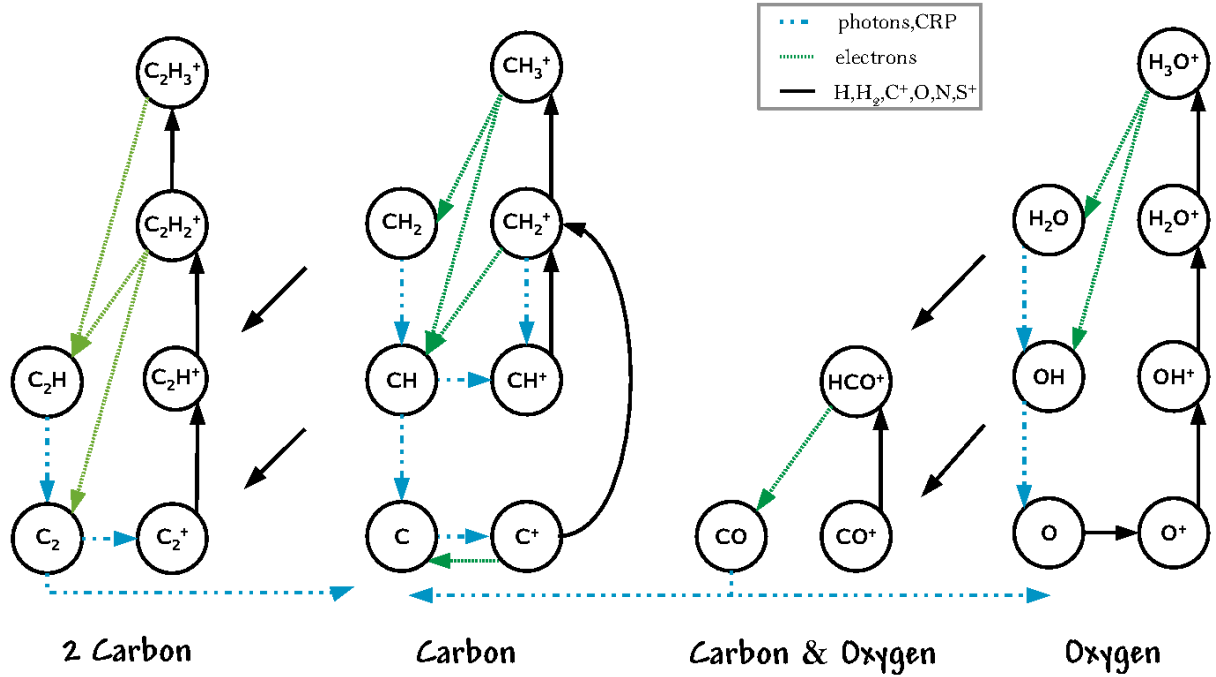


Fig. C.1. Chemical network of a UV-dominated chemistry: $n_{\text{H}} = 30 \text{ cm}^{-3}$ and $A_{\text{V}} = 0.4$. This figure is simplified: for each species only the dominant reaction of production and the dominant reaction of destruction are displayed.

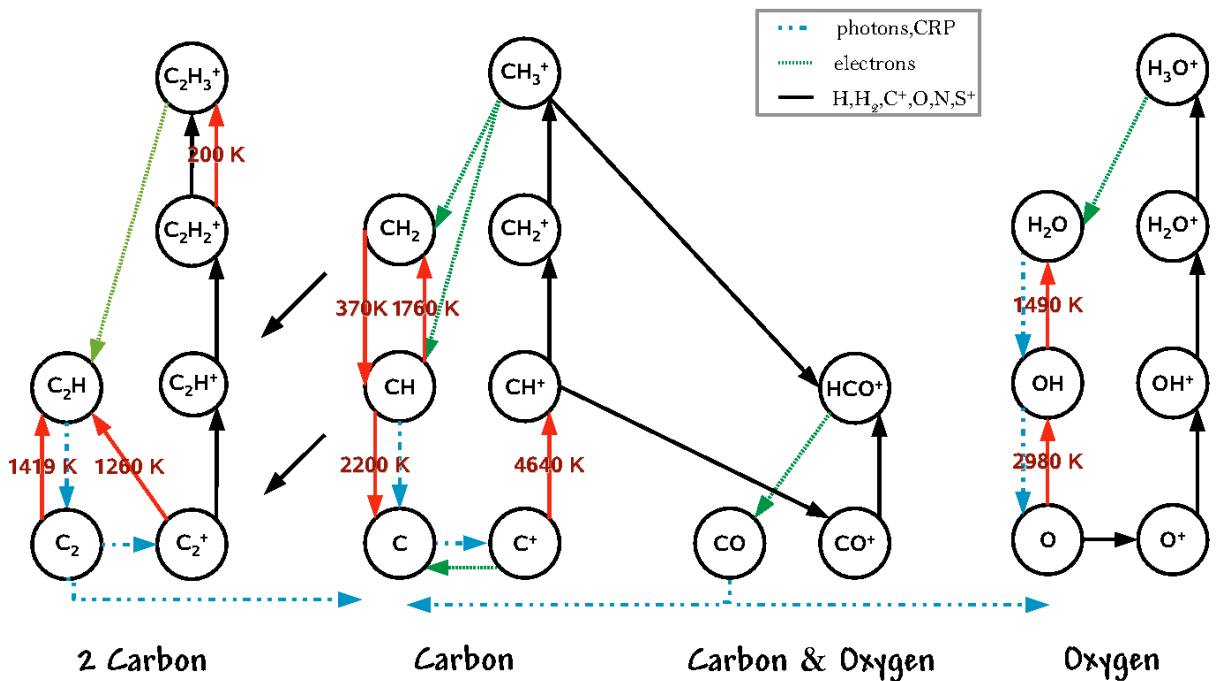


Fig. C.2. Same as Fig. C.1 for a turbulence-dominated chemistry: $n_{\text{H}} = 30 \text{ cm}^{-3}$, $A_{\text{V}} = 0.4$, $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ at a radius $r = r_0$. The red arrows show the endoenergetic reactions with the energy involved.

production of almost all the species we are interested in, namely CH, C₂H, OH, H₂O, HCO⁺, CO, CN, HCN and HNC.

Appendix C: UV-dominated versus turbulence-dominated chemical networks

Figures C.1 and C.2 display the main production and destruction routes of the molecules of interest in the ambient UV-dominated

diffuse medium and in the vortex for the reference TDR model at a radius $r = r_0$ respectively.

These figures are simplified: *only* the dominant reaction of production and the dominant reaction of destruction of the species are shown. For example one would expect the reaction $\text{O} + \text{H}_3^+ \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}_2$ to be displayed in Fig. C.1. But in the model presented here, the efficiency of this reaction on the production of OH⁺ is only 12%, while the efficiency of $\text{O}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$ is 86%. Therefore it does not appear on the diagram.

References

- Adams, N. G., Smith, D., & Alge, E. 1982, *J. Chem. Phys.*, 81, 4
- Amano, T. 1990, *J. Chem. Phys.*, 92, 11
- Anselmet, F., Antonia, R. A., & Danaila, L. 2001, *Planet. Space. Sci.*, 49, 1177
- Audit, E., & Hennebelle, P. 2005, *A&A*, 433, 1
- Belin, F., Maurer, J., Tabeling, P., & Willaime, H. 1996, *J. Phys.*, 6, 573
- Black, J. H., & Dalgarno, A. 1977, *ApJS*, 34, 405
- Black, J. H., Dalgarno, A., & Oppenheimer, M. 1975, *ApJ*, 199, 633
- Boger, G. I., & Sternberg, A. 2005, *ApJ*, 632, 302
- Brandenburg, A., Jennings, R. L., Nordlund, A., et al. 1996, *J. Fluid Mech.*, 306, 325
- Brown, P. N., Byrne, G. D., & Hindmarsh, A. C. 1989, *J. Sci. Stat. Comput.*, 10, 1038
- Crane, P., Lambert, D. L., & Sheffer, Y. 1995, *ApJS*, 99, 107
- Crovisier, J. 1981, *A&A*, 94, 162
- Dalgarno, A. 2006, *PNAS*, 103, 33
- Dalgarno, A., & McCray, R. A. 1973, *ApJ*, 181, 95
- Dickey, J. M., Salpeter, E. E., & Terzian, Y. 1978, *ApJS*, 36, 77
- Dobbs, C., Glover, S., Clark, P., & Klessen, R. 2008, *MNRAS*, 389, 1097
- Douady, S., Couder, Y., & Brachet, M. E. 1991, *Phys. Rev. Lett.*, 67, 8
- Draine, B. 1978, *ApJS*, 36, 59
- Draine, B. T., & Katz, N. 1986, *ApJ*, 310, 392
- Du Puy, D., Schmitt, J., McClure, R., van den Bergh, S., & Racine, R. 1969, *ApJ*, 156, L135
- Elmegreen, B. G., Kim, S., & Staveley-Smith, L. 2001, *ApJ*, 58, 749
- Falgarone, E. 1998, in *Starbursts: Trigger, Nature and Evolution*, ed. B. Guiderdoni, & A. Kembhavi (EPS Sciences)
- Falgarone, E. 1999, in *Interstellar Turbulence*, ed. J. Franco, & A. Carraminana (Cambridge University Press)
- Falgarone, E., Philipps, T. G., & Walker, C. K. 1991, *ApJ*, 378, 186
- Falgarone, E., Lis, D. C., Phillips, T. G., et al. 1994, *ApJ*, 436, 728
- Falgarone, E., Pineau des Forêts, G., & Roueff, E. 1995, *A&A*, 300, 870
- Falgarone, E., Verstraete, L., Pineau des Forêts, G., & Hily-Blant, P. 2005, *A&A*, 433, 997
- Falgarone, E., Pineau des Forêts, G., Hily-Blant, P., & Schilke, P. 2006, *A&A*, 452, 511
- Fitzpatrick, E. L., & Spitzer, L. 1997, *ApJ*, 475, 623
- Flower, D. R., & Pineau des Forêts, G. 1995, *MNRAS*, 275, 1049
- Flower, D. R., & Pineau des Forêts, G. 1998, *MNRAS*, 297, 1182
- Frisch, P. C. 1980, *ApJ*, 241, 697
- Frisch, P. C., & Jura, M. 1980, *ApJ*, 242, 560
- Ganguli, B., Biondi, M. A., Johnsen, R., & Dulane, J. L. 1988, *Phys. Rev.*, 37, 7
- Gredel, R. 1997, *A&A*, 320, 929
- Gredel, R., Van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 1993, *A&A*, 269, 477
- Gry, C., Boulanger, F., Nehmé, C., et al. 2002, *A&A*, 391, 675
- Haud, U., & Kalberla, P. M. W. 2007, *A&A*, 466, 555
- Hartmann, L., & Burton, W. B. 1997, *Atlas of Galactic Neutral Hydrogen* (Cambridge University Press)
- Heiles, C., & Troland, T. H. 2003, *ApJ*, 586, 1067
- Heiles, C., & Troland, T. H. 2005, *ApJ*, 624, 773
- Hily-Blant, P., Falgarone, E., & Pety, J. 2008, *A&A*, 481, 367
- Jimenez, J. 1997, *Euromech Colloquium*, 384
- Joncas, G., Boulanger, F., & Dewdney, P. E. 1992, *ApJ*, 397, 165
- Joulain, K., Falgarone, E., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. 1998, *A&A*, 340, 241
- Kay, G. W. C., & Laby, T. H. 1966, *Tables of physical and chemical constants* (London: Longmans)
- Kopp, M. 1996, Ph.D. Thesis, Université Paris 7
- Kritsuk, A. G., Norman, M. L., Padoan, P., & Wagner, R. 2007, *ApJ*, 665, 416
- Lacour, S., Ziskin, V., Hébrard, G., et al. 2005, *A&A*, 433, 251
- Lambert, D. L., & Danks, A. C. 1986, *ApJ*, 303, 401
- Lambert, D. L., Sheffer, Y., & Crane, P. 1990, *ApJ*, 359, L19
- Lazareff, B. 1975, *A&A*, 42, 25
- Le Padellec, A., Sheehan, C., Talbi, D., & Mitchell, J. B. A. 1997, *J. Phys. B*, 30, 319
- Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., & Roueff, E. 2006, *ApJS*, 160, 506
- Lesaffre, P., Gerin, M., & Hennebelle, P. 2007, *A&A*, 469, 949
- Liszt, H. S., & Lucas, R. 1998, *A&A*, 339, 561
- Liszt, H., & Lucas, R. 2001, *A&A*, 370, 576
- Liszt, H., & Lucas, R. 2002, *A&A*, 391, 693
- Liszt, H., Lucas, R., & Pety, J. 2006, *A&A*, 448, 253
- Lucas, R., & Liszt, H. 1996, *A&A*, 307, 237
- Lucas, R., & Liszt, H. 2000, *A&A*, 358, 1069
- Lucas, R., & Liszt, H. 2002, *A&A*, 384, 1054
- Martin-Zaidi, C., Deleuil, M., Le Bourlot, J., et al. 2005, *A&A*, 484, 225
- Mininni, P. D., Alexakis, A., & Pouquet, A. 2006a, *Phys. Rev.*, 74, 1
- Mininni, P. D., Pouquet, A. G., & Montgomery, D. C. 2006b, *Phys. Rev. Lett.*, 97, 24
- Mitchell, A. I., & Mitchell, J. B. A. 2006, *Phys. Rep.*, 430, 277
- Miville-Deschênes, M. A., Joncas, G., Falgarone, E., & Boulanger, F. 2003, *A&A*, 411, 109
- Moffatt, H. K., Kida, S., & Ohkitani, K. 1994, *J. Fluid Mech.*, 259, 241
- Moisy, F., & Jimenez, J. 2004, *J. Fluid Mech.*, 513, 111
- Monchick, L., & Schaefer, J. 1980, *J. Chem. Phys.*, 73, 61, 53
- Nehmé, C., Gry, C., Boulanger, F., et al. 2008a, *A&A*, 483, 471
- Nehmé, C., Le Bourlot, J., Boulanger, F., Pineau des Forêts, G., & Gry, C. 2008b, *A&A*, 483, 485
- Nagaoka, K., Okamoto, A., Yoshimura, S., Kono, M., & Tanaka, M. Y. 2002, *Phys. Rev. Lett.*, 89, 7
- Neufeld, D. A., Kaufman, M. J., Goldsmith, P. F., Hollenbach, D. J., & Plume, R. 2002, *ApJ*, 580, 278
- Nolan, D. S., & Farrell, B. F. 1999, *J. Atmos. Sci.*, 56, 2908
- Pan, L., & Padoan, P. 2008, *ApJ*, in press
- Pan, K., Federman, S. R., Cunha, K., et al. 2004, *ApJS*, 151, 313
- Pan, K., Federman, S. R., Sheffer, Y., & Andersson, B. G. 2005, *ApJ*, 633, 936
- Pavlovski, G., Smith, M. D., & Mac Low, M.-M. 2006, *MNRAS*, 368, 943
- Pety, J., & Falgarone, E. 2000, *A&A*, 356, 279
- Pineau des Forêts, G., Flower, D. R., Hartquist, T. W., & Dalgarno, A. 1986, *MNRAS*, 220, 801
- Pineau des Forêts, G., Roueff, E., & Flower, D. R. 1990, *MNRAS*, 244, 668
- Porter, D. H., Pouquet, A., & Woodward, P. R. 1992, *Phys. Rev. Lett.*, 68, 21
- Porter, D. H., Pouquet, A., & Woodward, P. R. 1994, *Phys. Fluids*, 6, 2133
- Radhakrishnan, V., Murray, J. D., Lockhart, P., & Whittle, P. J. 1972, *ApJS*, 24, 15
- Ritchey, A. M., Martinez, M., Pan, K., et al. 2006, *ApJ*, 649, 788
- Savage, B. D., Drake, J. F., Budich, W., & Bohlin, R. C. 1977, *ApJ*, 216, 291
- Sheffer, Y., Rogers, M., Federman, S. R., et al. 2008, *ApJ*, 687, 1075
- Shull, J. M., & Beckwith, S. 1982, *A&A*, 20, 163
- Snow, T. P. 1976, *ApJ*, 204, 759
- Snow, T. P. 1977, *ApJ*, 216, 724
- Snow, T. P., & McCall, B. J. 2006, *ARA&A*, 44, 367
- Sonnentrucker, P., Friedman, S. D., Welty, D. E., et al. 2003, *ApJ*, 596, 350
- Spaans, M., Neufeld, D., Lepp, S., Melnick, G. J., & Stauffer, J. 1998, *ApJ*, 503, 780
- Spitzer, L. 1978, *Physical processes in the interstellar medium* (New York: J. Wiley & Sons)
- Spitzer, L., Drake, J. F., Morton, D. C., et al. 1973, *ApJ*, 181, L116
- Spitzer, L., Cochran, W. D., & Hirshfeld, A. 1974, *ApJS*, 28, 373
- Sternberg, A., & Dalgarno, A. 1975, *ApJS*, 99, 565
- Stutzki, J., Bensch, F., Heithausen, A., et al. 1998, *A&A*, 336, 697
- Weselak, T., Galazutdinov, G., Musaev, F., & Krelowski, J. 2008, *A&A*, 479, 149
- White, R. E. 1984, *ApJ*, 284, 695
- White, R. E. 2003, *ApJS*, 148, 487

9.4 Les résultats complémentaires

Avant d'aborder cette section, il est nécessaire de donner ici un bref résumé des dépendances de certaines grandeurs clés en fonction des paramètres du modèle TDR (Godard *et al.* 2009a, section précédente, Figs. 6 & 7).

- Les termes de chauffage moyens dans un vortex $\bar{\Gamma}_{in}$ et $\bar{\Gamma}_{m}$ sont respectivement proportionnels à $a n_H$ et $u_{\theta \max} n_H^2$, et ainsi, en fonction de a et n_H , on remarque 2 régimes distincts : à faible densité et à fort taux d'étirement, le chauffage est dominé par la friction visqueuse, tandis qu'à plus haute densité et pour un faible taux d'étirement, le chauffage est dominé par la friction ion-neutre.
- La taille r_0 d'un vortex est, quant à elle, proportionnelle à $(a n_H)^{-1/2}$ et varie de quelques UA à quelques centaines d'UA, tandis que le nombre de vortex, dont la valeur est donnée par le taux de dissipation moyen le long d'une ligne de visée, est indépendant de a , et varie approximativement en n_H^{-2} entre quelques uns et quelques milliers.
- La température maximale atteinte par une particule fluide au cours de son parcours dans un vortex actif, ne varie que très peu sur l'espace des paramètres (moins d'un facteur 3) et est d'autant plus grande que a est grand et que n_H est petit.

9.4.1 Un vortex s'expand-il sous l'effet de la température

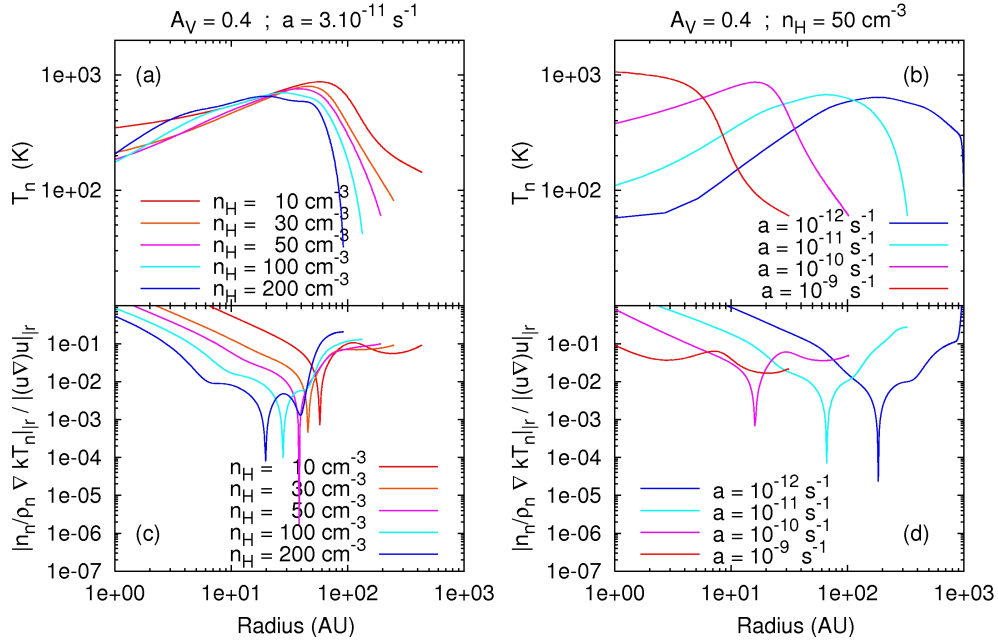


FIG. 9.6 – Panneaux (a & b) : température des neutres T_n en fonction de la position radiale de la particule fluide dans un vortex. Panneaux (c & d) : rapport du module des forces spécifiques (par unité de masse) $n_n/\rho_n \nabla(kT_n)$ et $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$, projetées selon r , en fonction de la position radiale de la particule fluide dans un vortex.

Cette question est soulevée par les profils de température de la cellule fluide durant son parcours dans un vortex actif, affichés dans la Fig. 9.6 (panneaux a & b) pour plusieurs valeurs des paramètres $\{a, n_H\}$. En effet, cette figure montre que les cellules fluides qui composent le vortex sont soumises à une force provenant des gradients de température. Or, nous rappelons que, selon l'approche suivie dans le Chap. 7, la structure vortex est obtenue en résolvant l'équation d'Helmholtz qui régit l'évolution de la vorticit   ω dans un   coulement incompressible, soit

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\omega = (\omega \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nu \nabla^2 \omega \quad (9.28)$$

o   l'on n  glige justement le terme li   aux gradients de pression thermique (expression    comparer    l'equation de Navier-Stokes, annexe B). Pour que le mod  le ait un sens, il faut donc v  rifier que la force sp  cifique (par unit   de masse) $n_n/\rho_n \nabla(kT_n)$ soit toujours n  gligeable devant la force sp  cifique d'advection $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$. De plus, comme seul le mouvement radial importe, puisque le mod  le est axisym  trique et puisque les termes de chauffage li  s    l'  coulement axial sont n  gligeables, seules les composantes radiales de ces forces doivent   tre compar  es. La Fig. 9.6 (panneaux c & d) montre le rapport des modules de ces forces (projet  es radialement) en fonction de la position de la particule fluide dans le vortex, et ce pour plusieurs valeurs des param  tres $\{a, n_H\}$. Comme on peut le constater, sur plus de 90 % de la structure, $|n_n/\rho_n \nabla(kT_n)|_r$ est de l'ordre du dixi  me de la force d'advection projet  e selon r , ce qui justifie non seulement l'approximation utilis  e en adoptant l'equation 9.28, mais   galement le fait que nous ayons n  glig   les forces dues aux gradients de pression thermique du fluide ionis   lorsque nous avons calcul   l'evolution de la vitesse des ions et du champ magn  tique dans le vortex (cf. Chap. 8). En effet, en ce qui concerne le mouvement des ions dans la structure, la force issue des gradients de pression thermique des ions, doit   tre compar  e    la force de friction que le fluide neutre exerce sur le fluide ionis   F_{ni} . Ces forces v  rifient respectivement : $|n_i/\rho_i \nabla(kT_i)|_r \sim 1/10 |n_n/\rho_n \nabla(kT_n)|_r$ et $|F_{ni}|_r \sim 1/10 |(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}|_r$.

Notons que la taille caract  ristique des vortex   tudi  s appara  t   galement dans la Fig. 9.6. Sur l'ensemble de l'espace des param  tres, celle-ci varie de quelques UA    10^3 UA. De plus, on remarque que, dans certains cas - en l'occurrence quand n_H et a sont petits - les gradients de pression thermique deviennent non n  gligeables lorsque la cellule fluide est proche de l'axe de r  volution. Dans tous les cas, la compression du gaz qui en r  sulte ne concerne au maximum que quelques pourcents de la quantit   de mati  re contenue dans un vortex. C'est pourquoi nous n  gligeons, dans ce travail, cet aspect de la dynamique.

9.4.2   volution des abondances durant la phase de relaxation

La densit   du gaz lui conf  re une certaine inertie thermique et chimique. C'est pourquoi, lors de la d  stabilisation d'un vortex, les particules fluides qui le composent mettent un certain temps    retrouver les abondances et la temp  rature qu'elles avaient avant leur chauffage par dissipation de l'  nergie turbulente. Ce processus, que nous appelons la phase de relaxation, est expos   dans la Fig. 9.7 qui montre l'evolution des abondances de certaines esp  ces sur toute la structure en fonction du temps pour $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. On remarque ainsi que, non seulement l'enrichissement chimique se maintient sur des p  riodes de l'ordre de 10^2    10^4

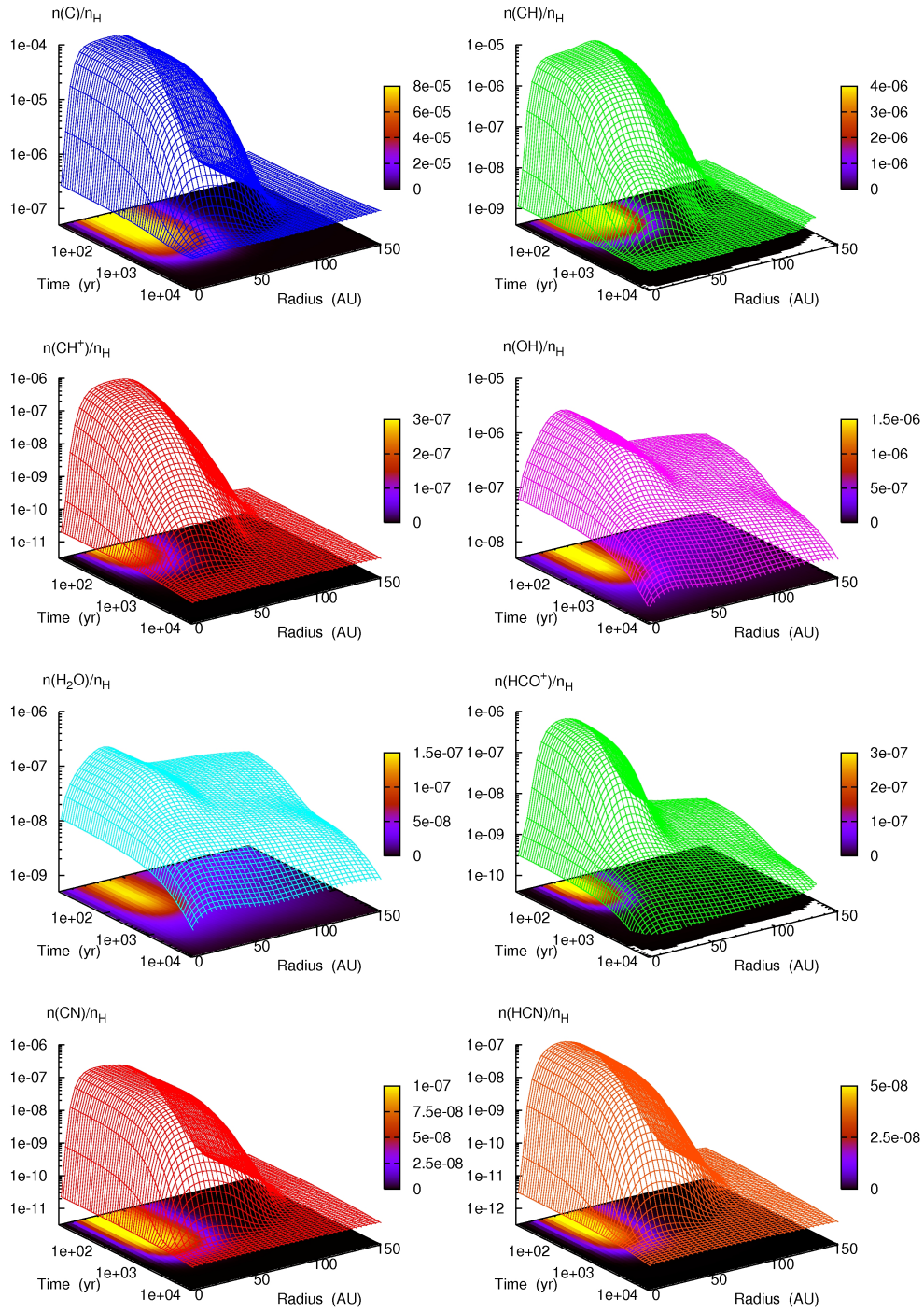


FIG. 9.7 – Évolution des abondances de certaines espèces en fonction du temps et de la position dans le vortex durant la phase de relaxation. Les paramètres du modèle sont : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

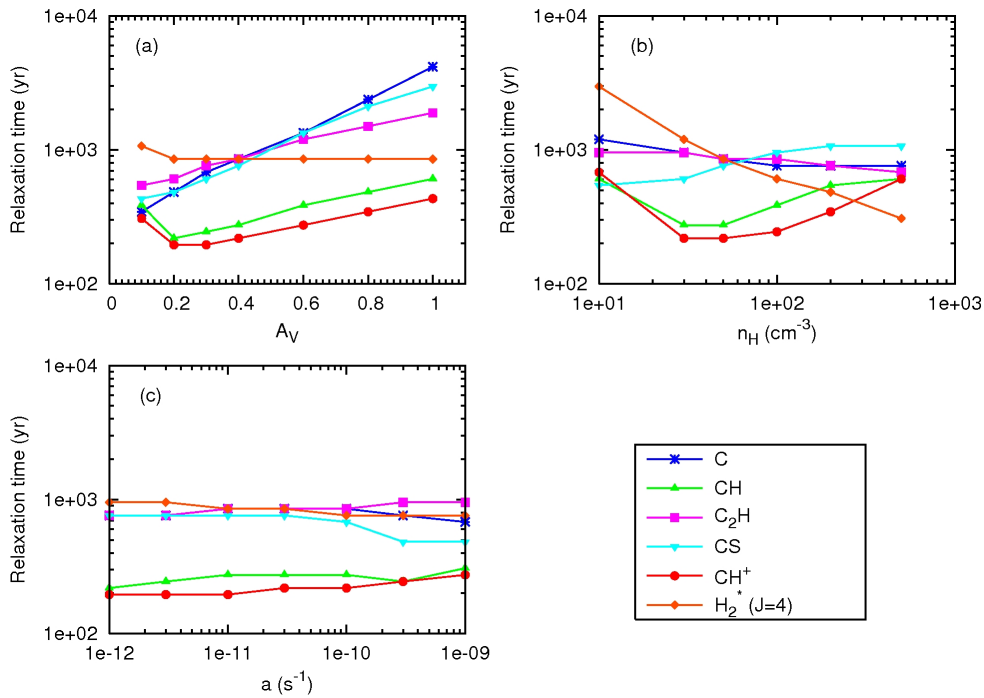


FIG. 9.8 – Temps de relaxation $\tau_{VR}(X)$ (cf. Sect. 9.2.1) pour plusieurs espèces chimiques X , en fonction des paramètres A_V (panneau a), n_H (panneau b) et a (panneau c). Lorsqu'un paramètre varie, les autres sont fixés aux valeurs : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

ans, mais l'empreinte laissée par les vortex actif dépend des espèces considérées. Le code de couleur utilisé sur les plans Oxy de la Fig. 9.7 permet également d'évaluer les temps de décroissance caractéristiques des abondances ainsi que les régions sur lesquelles l'enrichissement chimique du gaz est important : pour le modèle présent, la taille de ces régions varie de 20 à 50 UA en fonction de l'espèce étudiée, et les temps de décroissance entre 10^2 et 10^4 ans (pour CO, dont l'évolution n'est pas affichée dans la Fig. 9.7).

Comme nous l'avons expliqué dans la Sect. 9.2.1 de ce chapitre, les temps caractéristiques obtenus ci-dessus ne sont pas nécessairement représentatifs de la durée de l'enrichissement chimique après déstabilisation d'un vortex, puisqu'une importante chute de l'abondance d'une espèce peut être compensée par une importante longévité. Les Figs. 9.8 & 9.9 montre les variations des temps de relaxation (tels qu'il sont définis dans la Sect. 9.2.1) en fonction du taux d'étirement a , de la densité du gaz n_H et de l'extinction A_V . On remarque que les paramètres déterminants sont n_H et A_V . En effet, a ne contrôle que les termes de chauffage visqueux et par friction ion-neutre durant la phase active, et donc n'a d'influence sur la phase de relaxation que dans la mesure où il est à l'origine des températures initiales des particules fluides sur le point de refroidir ; or Godard *et al.* (2009a) montrent qu'en fonction du taux d'étirement a , la température atteinte par une particule fluide ne varie que très peu (moins d'un facteur 2). En outre, en première approximation, seuls les mécanismes de destruction importent durant la

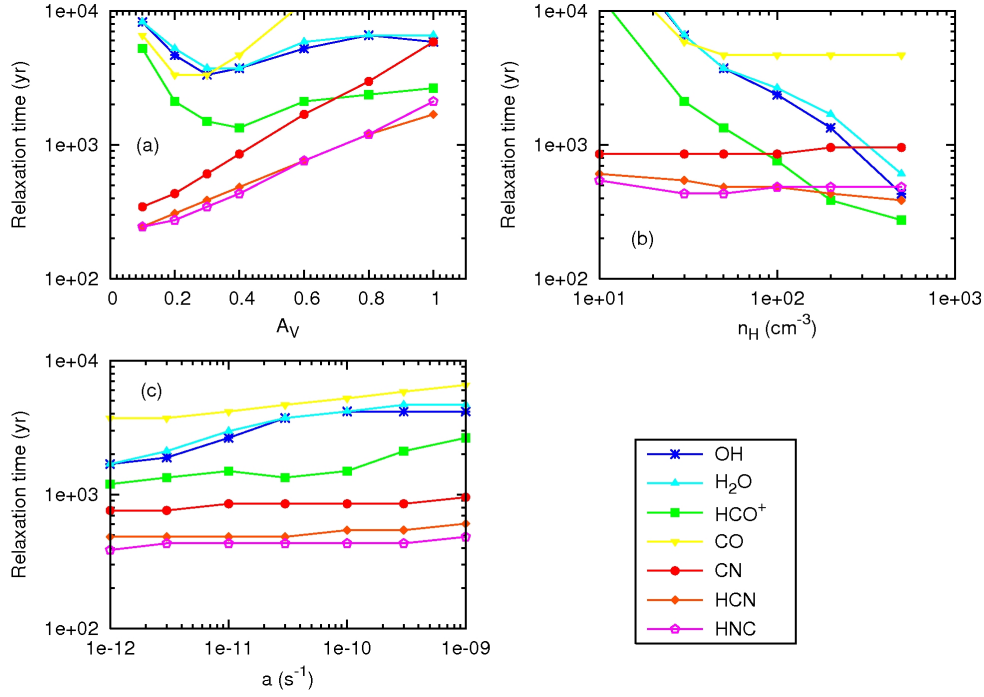
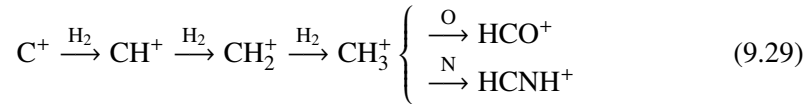


Fig. 9.9 – Temps de relaxation $\tau_{VR}(X)$ (cf. Sect. 9.2.1) pour plusieurs espèces chimiques X , en fonction des paramètres A_V (panneau a), n_H (panneau b) et a (panneau c). Lorsqu'un paramètre varie, les autres sont fixés aux valeurs : $A_V = 0.4$, $n_H = 50$ cm $^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11}$ s $^{-1}$.

phase de relaxation : ceux-ci étant principalement les processus de photodissociation, photoionisation et recombinaison électronique, ils dépendent peu de la température initiale, et donc de a .

Dans les Figs. 9.8 & 9.9, on remarque enfin des familles de molécules, dont les temps de relaxation évoluent de manière similaire en fonction des paramètres du modèle : (1) CH et CH $^+$, (2) C, CS et C $_2$ H, (3) OH, H $_2$ O et HCO $^+$, et finalement (4) CN, HCN et HNC. Il est intéressant de noter que ces familles ne sont pas les mêmes que celles qui apparaissent lors du chauffage turbulent : en effet, durant la phase active les évolutions des abondances de HCO $^+$, CN, HCN et HNC sont davantage couplées à celle de CH $^+$, et ce parce que la chaîne de réactions



est activée par la dissipation de l'énergie turbulente.

9.4.3 Importance des différentes phases

La Fig. 9.10 montre le pourcentage du volume total occupé par les vortex actifs, défini par (cf. Sect. 9.2.1)

$$f_{VA} = (10 \times Kr_0) \times N_{VA} \frac{n_H}{n_H}. \quad (9.30)$$

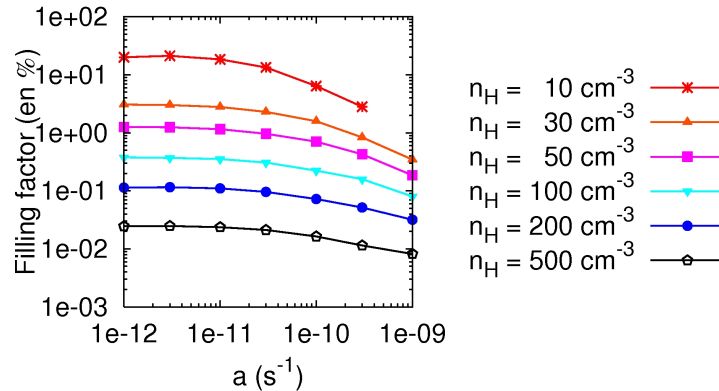


FIG. 9.10 – Pourcentage du volume total occupé par les vortex actifs en fonction du taux d'étirement a et pour une densité du gaz variant entre 10^1 et $5 \times 10^2 \text{ cm}^{-3}$.

Ainsi, en fonction des modèles, f_{VA} varie de 0.02 % à 20 % du volume total. En outre, les effets couplés, ou plutôt les dépendances du nombre de vortex et de leur taille en fonction des paramètres (voir l'introduction de cette section) font que le taux d'étirement a n'a que peu d'influence sur f_{VA} qui est donc essentiellement déterminé par la densité du gaz. En d'autres termes, plus la densité est grande, plus le taux de chauffage par vortex est grand, et donc plus le nombre de vortex diminue, pour satisfaire la contrainte énergétique globale sur $\bar{\varepsilon}_{VA}$.

Les Figs. 9.11 & 9.12, montrent, quant à elles, l'importance (en pourcentages) de chacune des phases dans le bilan total des densités de colonne de plusieurs espèces. Pour une espèce, et dans chaque panneau, ces grandeurs sont accessibles en projetant un point dans la base de coordonnées décrite par les hauteurs du triangle équilatéral. Par exemple, pour le point bleu le plus proche de la base dans le panneau (a) de la Fig. 9.11, on obtient : $\sim 65 \%$ de la densité de colonne totale du carbone neutre provient de la phase ambiante, $\sim 10 \%$ des phases actives et $\sim 25 \%$ des phases de relaxation.

Les Figs. 9.11 & 9.12 synthétisent une grande partie des résultats du modèle TDR, et montrent notamment l'importance de prendre en compte la dissipation de l'énergie turbulente pour décrire la composition chimique du MIS diffus : en effet, les contributions des vortex (actifs ou en relaxation) aux densités de colonne des espèces considérées sont importantes. Voici, ci-dessous, les principaux comportements observés.

- Avant tout, les sites de formation des espèces chimiques varient de manière similaire pour toutes les molécules en fonction des paramètres.

En effet, on remarque que plus A_V est grand, moins les molécules sont formées dans les phases actives, et plus elles le sont dans la phase ambiante. Ceci vient du fait que la plupart des molécules sont détruites par photodissociation. Si l'on diminue ce processus en augmentant A_V , l'importance relative de la phase ambiante augmente, car les vortex n'occupent qu'une faible fraction du volume total.

De la même manière, plus la densité est grande, plus les molécules sont formées dans la phase ambiante. Ce comportement est principalement lié au fait que le nombre de vortex actifs (et donc que le nombre de phases de relaxation) diminue en fonction de la densité : $\mathcal{N}_{VA} \propto n_H^{-2}$ (voir l'introduction de cette section).

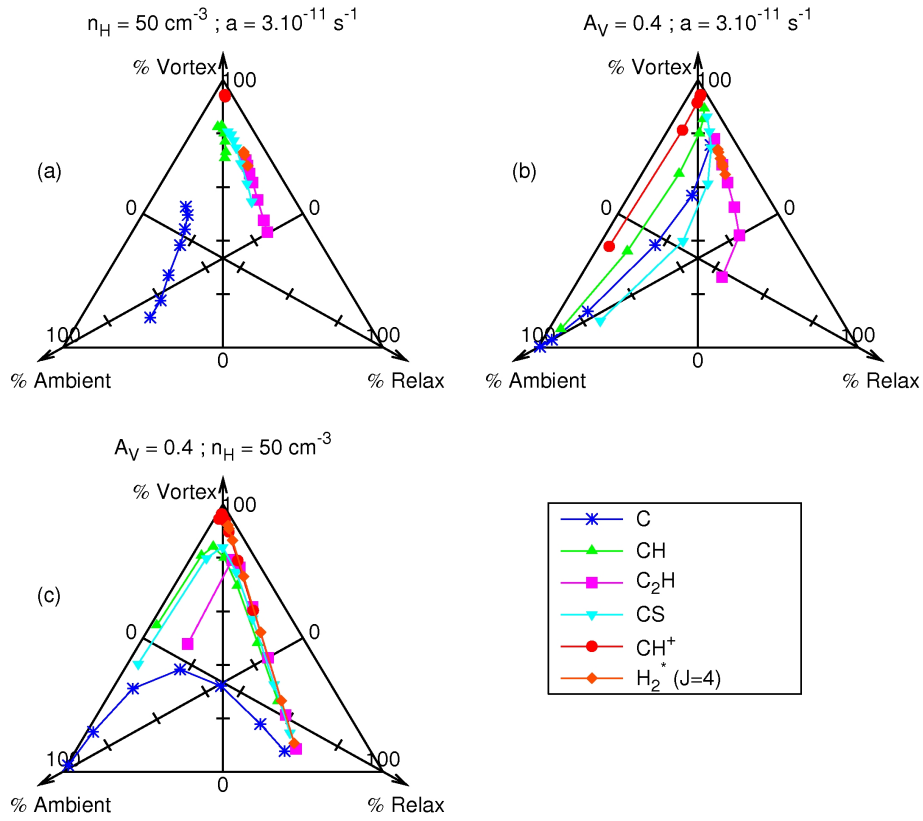


FIG. 9.11 – Contribution (en pourcentages) de chacune des phases (ambiante, vortex actif, relaxation) aux densités de colonne totales de plusieurs espèces. Dans un triangle, ces contributions s’obtiennent en projetant les points sur les 3 hauteurs. Dans chaque panneau, un paramètre varie, A_V (panneau a), n_H (panneau b) et a (panneau c), tandis que les paramètres restant sont fixés aux valeurs : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Dans chaque panneau, plus A_V et n_H sont faibles, plus les molécules sont formées dans les vortex actifs, et plus a est grand, plus les molécules sont formées dans le milieu ambiant.

Ainsi, bien que le chauffage soit très efficace aux fortes densités dans un vortex (Godard *et al.* 2009a), la quantité d’énergie contenue en moyenne dans la turbulence interstellaire n’est pas suffisante pour alimenter un grand nombre de structures dissipatives, et l’impact chimique résultant est de plus en plus faible. Enfin, les pourcentages de formation des espèces dans chaque phase montrent un comportement *en cloche* en fonction du taux d’étirement a . À faible a , le temps de vie des vortex actifs est très court (Godard *et al.* 2009a, Fig. 6), et l’importance des phases de relaxation est d’autant plus grande (selon l’Éq. 9.19). Puis, quand a augmente, les phases actives sont de plus en plus importantes pour la même raison. Et quand a est très grand, la taille des vortex est très petite, et leur temps d’évolution dynamique (c’est-à-dire le temps que met une particule fluide à traverser radialement la structure) est trop court comparé aux temps

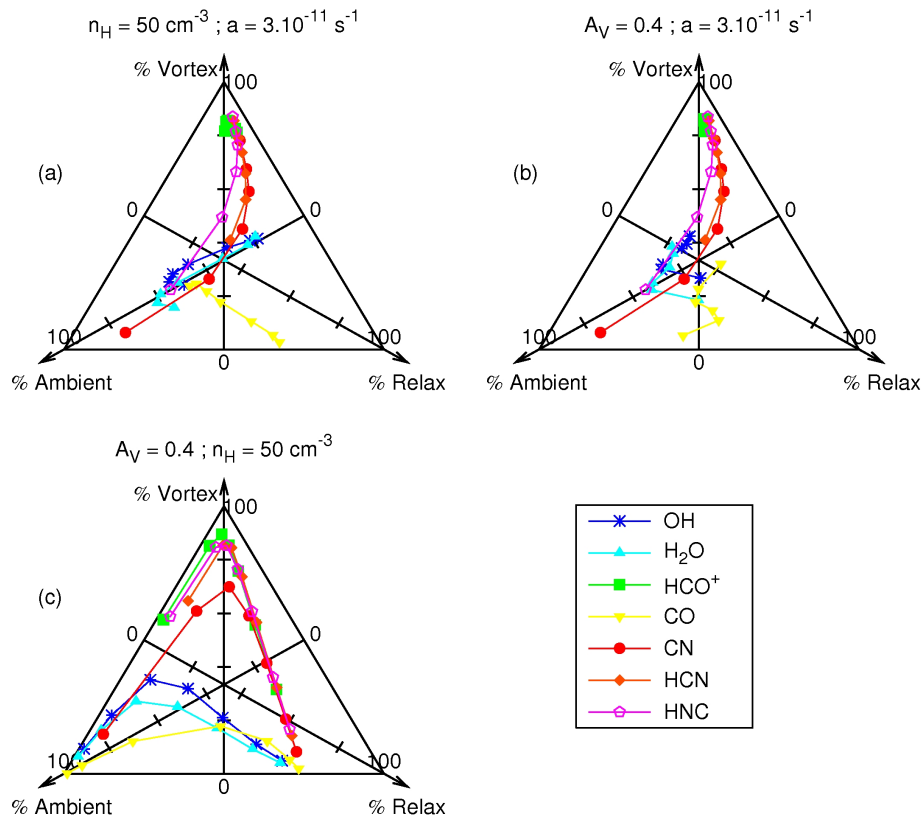


FIG. 9.12 – Contribution (en pourcentages) de chacune des phases (ambiante, vortex actif, relaxation) aux densités de colonne totales de plusieurs espèces. Dans un triangle, ces contributions s’obtiennent en projetant les points sur les 3 hauteurs. Dans chaque panneau, un paramètre varie, A_V (panneau a), n_H (panneau b) et a (panneau c), tandis que les paramètres restant sont fixés aux valeurs : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Dans chaque panneau, plus A_V et n_H sont faibles, plus les molécules sont formées dans les vortex actifs, et plus a est grand, plus les molécules sont formées dans le milieu ambiant.

d’évolution chimique pour que le chauffage turbulent permette une augmentation significative des abondances des espèces chimiques. Si bien que quand a est grand, les vortex ont moins d’influence sur la composition chimique globale du milieu.

- On remarque également dans les Figs. 9.11 & 9.12 que les espèces chimiques se regroupent en familles, selon leur site de formation dans le cadre des modèles TDR en fonction des paramètres : OH, H₂O et CO sont principalement formés dans les phases ambiante et de relaxation et très peu (moins de 40 %) dans la phase active ; les sites de formation de CN, HCN, HNC et C₂H varient de manière similaire en fonction des paramètres, et ces molécules sont formées principalement dans les phase active et de relaxation ; enfin, CH⁺, HCO⁺ et H_{2,J=4}^{*} sont principalement formées dans la phase active (à plus de 40 %), et

ce, quel que soit le modèle. On remarque tout de même, qu'alors que le site de formation de CH^+ dépend fortement de la densité, ce n'est pas le cas pour HCO^+ et $\text{H}_{2,J=4}^*$.

- L'atome C est une espèce un peu à part dans cette figure. Globalement, il est principalement formé dans le milieu ambiant ; toutefois, pour certains modèles, et notamment aux faibles densités, l'impact de la dissipation turbulente peut induire un enrichissement du milieu en carbone neutre, comme ce fut discuté dans Godard *et al.* (2009a).

9.4.4 Prédictions pour les futures observations

Tandis que Godard *et al.* (2009 a & b) comparent les prédictions des modèles TDR avec de nombreuses observations du milieu interstellaire diffus (principalement les abondances des espèces chimiques), la Fig. 9.13 établit quelques prédictions intéressantes à comparer aux futures observations. Cette figure, obtenue en compilant les résultats de 168 modèles, montre non seulement les corrélations attendues entre les densités de colonne de plusieurs espèces et celle de HCO^+ , mais également les domaines de variation des abondances puisque chaque modèle correspond à une ligne de visée ayant une quantité de matière totale : $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$.

On remarque ainsi les corrélations suivantes

$$\log_{10} [N(\text{CH}^+)] = \frac{5}{4} \log_{10} [N(\text{HCO}^+)] - 2 \pm \log_{10}(3), \quad (9.31)$$

$$\log_{10} [N(\text{H}_{2,J=4}^*)] = \frac{1}{2} \log_{10} [N(\text{HCO}^+)] + 10.3 \pm \log_{10}(2), \quad (9.32)$$

$$\log_{10} [N(\text{SH}^+)] = \frac{3}{4} \log_{10} [N(\text{HCO}^+)] + 2.8 \pm \log_{10}(2), \quad (9.33)$$

et

$$\log_{10} [N(\text{CH})] = \frac{3}{4} \log_{10} [N(\text{HCO}^+)] + 4.5 \pm \log_{10}(2) \text{ pour } N(\text{HCO}^+) > 10^{11} \text{ cm}^{-2}. \quad (9.34)$$

tandis que les densités de colonne de C, O_2 , NH et particulièrement de C_2 ne sont pas corrélées à celle de HCO^+ . On remarque également que les abondances des espèces varient de 3 à 5 ordres de grandeur et sont maximales pour des densités et des taux d'étirement faibles, c'est à dire un chauffage turbulent entièrement assuré par la friction ion-neutre. Tous ces comportements sont donc principalement contrôlés par les paramètres n_{H} et a mais il est intéressant de noter que la plupart des rapports d'abondances restent constants (même si il n'y pas de corrélation) à densité constante alors que a varie sur 3 ordres de grandeur. De telles prédictions sont de grande importance, en particulier suite au lancement du satellite spatial Herschel et de l'instrument embarqué HIFI (Heterodyne Instrument for the Far-Infrared) qui permettra, d'observer simultanément les transitions fondamentales de NH, CH^+ et H_2O , et donc d'en déduire les rapports d'abondances $n(\text{NH})/n(\text{HCO}^+)$, $n(\text{H}_2\text{O})/n(\text{HCO}^+)$, $n(\text{CH}^+)/n(\text{HCO}^+)$ et $n(\text{CH})/n(\text{HCO}^+)$, à l'aide des observations précédentes (Godard *et al.* 2009b, Crane *et al.* 1995, Gredel 1997, Weselak 2008, Olofsson, comm. priv.)

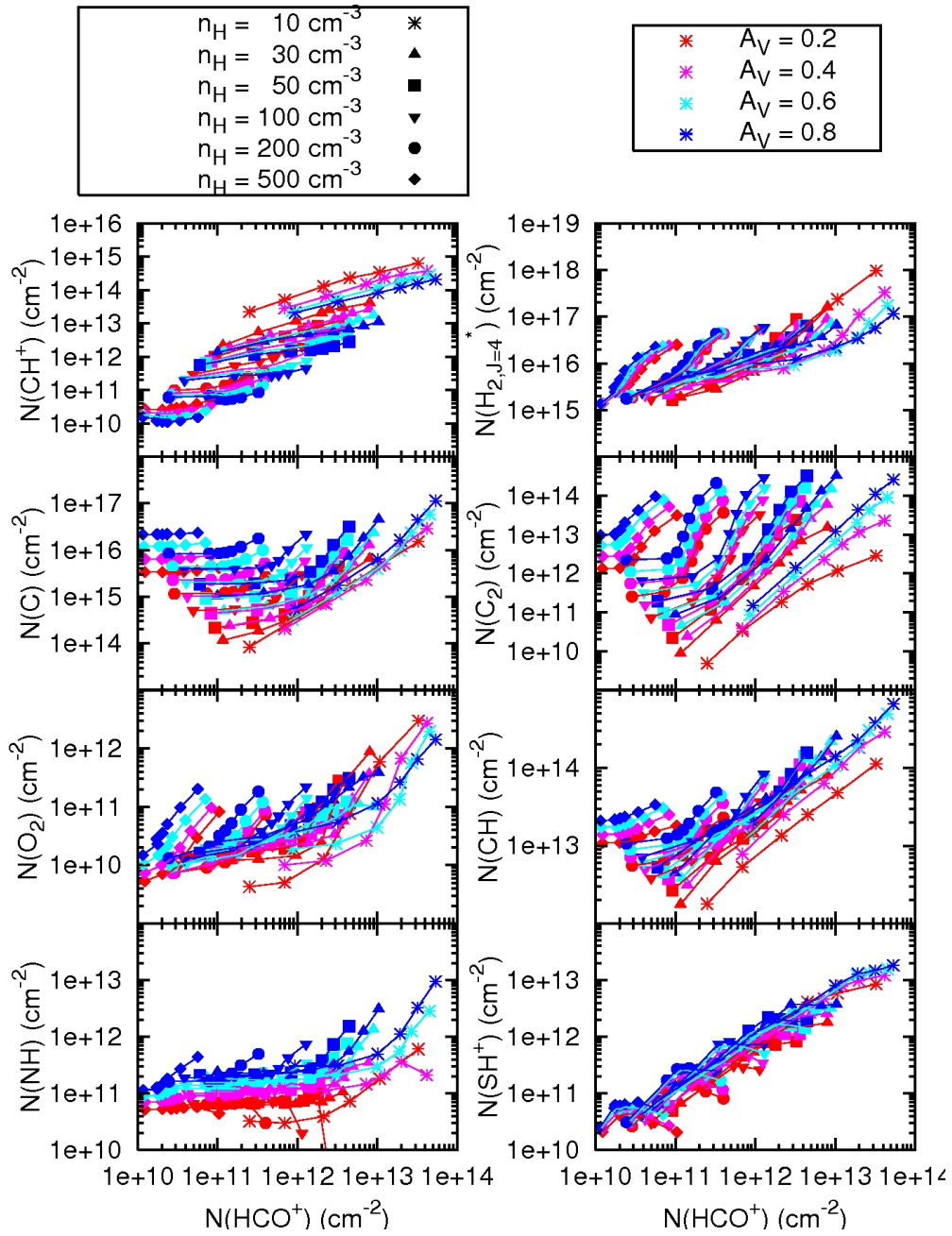


FIG. 9.13 – Prédications de 168 modèles TDR concernant les densités de colonne de plusieurs molécules. Dans chaque panneau, le taux d'étirement varie le long de chaque courbe entre 10^{-12} et 10^{-9} s^{-1} par intervalles logarithmiques.

9.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons présenté les codes numériques qui composent le modèle TDR, à savoir, Thermo-chimie.f95 et Los.f95. A l'aide du premier, l'évolution

thermique et chimique induite par la dissipation de l'énergie turbulente à l'intérieur d'une structure cohérente de type vortex est calculée. Le second code permet, quant à lui, d'analyser les résultats et de construire une ligne de visée aléatoire au travers du gaz interstellaire diffus. Celle-ci traverse plusieurs vortex, soit en phase active, soit en phase de relaxation, dont les nombres respectifs sont fixés par l'énergie contenue dans la turbulence du MIS à grande échelle. Alors que dans l'article, nous avons comparé les résultats de ce modèle avec les multiples observations du MIS diffus, nous avons présenté dans le reste de ce chapitre un certain nombre de résultats complémentaires : les plus importants étant les sites de formation des molécules dans le cadre du modèle TDR, et les prédictions des densités de colonne de plusieurs molécules ainsi que de leur rapport, qui pourront être comparées aux futures observations, notamment celles issues du satellite Herschel-HIFI.

Conclusions & perspectives

Résumés

Durant ces 3 années de thèse, nous avons non seulement poursuivi les observations du milieu interstellaire diffus dans le but de découvrir d'autres traceurs d'une chimie qui n'est pas gouvernée par le champ de rayonnement UV, mais nous avons également réalisé une analyse des processus dissipatifs de la turbulence, induits par la viscosité moléculaire et le découplage ion-neutre. Nous avons développé de nouveaux outils qui quantifient l'impact de cette dissipation d'énergie sur la chimie du milieu diffus. La portée de cette étude réside dans la confrontation systématique des résultats avec les nombreuses observations du MIS diffus.

Analyse des observations du gaz diffus galactique

L'observatoire spatial Herschel vient d'être lancé. L'instrument embarqué de spectroscopie hétérodyne dans le domaine submillimétrique (HIFI) permet de détecter de nombreuses raies de transitions rotationnelles non observables depuis le sol (notamment CH^+ $J = 1 - 0$, et les transitions fondamentales de H_2O ortho et para).

L'un des objectifs du programme clef PRISMAS (PRobing InterStellar Molecules with Absorption line Studies, P.I. : Maryvonne Gerin) sur le temps garanti HIFI est de caractériser la chimie du milieu diffus avec une sensibilité inégalée. Pour la première fois, les sondages du milieu diffus se font de façon homogène pour toutes les espèces (sur les mêmes lignes de visée en direction de régions de formation d'étoiles), y compris CH^+ qui jusqu'à présent ne pouvait y être observée que dans le domaine visible. De plus, la haute résolution spectrale de HIFI permet d'accéder pour cette espèce d'origine encore problématique, à la structure de son champ de vitesse.

En préparation de ces futures observations, nous avons analysé les raies de HCO^+ (1-0) et (2-1), H^{13}CO^+ (1-0), HNC (1-0), HN^{13}C (1-0), HCN (1-0) et (2-1), et CN (1-0) et (2-1) mesurées en absorption sur le continuum de 5 régions de formation d'étoiles massives dans la Galaxie avec l'antenne 30m de l'IRAM. Ces sources lointaines sont dans le plan galactique et le gaz détecté en absorption a des propriétés différentes, à priori, du gaz diffus au voisinage solaire. Il est donc étonnant de détecter des composantes en vitesse dont les densités de colonne et les rapports d'abondances sont les mêmes que ceux obtenus par Liszt & Lucas (2001) le long de lignes de visée à haute latitude galactique.

Pour chaque source, la structure en vitesse a été évaluée via un ajustement gaussien (à l'aide d'un code que nous avons développé, fondé sur la méthode Levenberg-Marquardt) appliqué simultanément à tous les spectres. La grande résolution spectrale

des données et l'utilisation de plusieurs molécules ainsi que des transitions hyperfines de HCN et CN augmentent grandement la qualité de l'ajustement, qui servira donc de guide pour les futures observations Herschel-HIFI. Nous trouvons un élargissement systématique des raies de HCO^+ par rapport à celles de HNC, et des raies de HNC par rapport à celles de HCN et CN, ce dernier résultat ne pouvant être expliqué par l'élargissement naturel lié à la structure hyperfine de HNC. Ceci suggère que le champ de vitesse est impliqué dans la formation de ces molécules.

Le modèle TDR

Principes & résultats

Le modèle TDR constitue une avancée dans l'étude de la chimie hors équilibre gouvernée par l'énergie turbulente : (1) les structures dissipatives modélisées sont des vortex magnétisés dont la dynamique est désormais contrainte par la turbulence ambiante, via le taux d'étirement², qui est le paramètre clef du modèle ; (2) l'évolution des ions et du champ magnétique est soigneusement calculée par un code numérique 2D bi-fluides ; (3) pour la première fois, l'enrichissement chimique du gaz le long d'une ligne de visée quelconque est quantifié en tenant compte des bouffées de dissipation d'une part et des temps de relaxation thermique et chimiques du gaz d'autre part, sous la contrainte énergétique fournie par les observations des propriétés de la turbulence dans le CNM ; (4) l'espace des paramètres est exploré de manière exhaustive pour permettre une analyse complète et simultanée des nombreuses observables prédites par le modèle.

Le modèle TDR est composé de 3 codes numériques distincts que nous avons développés et présentés dans ce manuscrit :

- L'évolution des ions et du champ magnétique dans un vortex de Burgers modifié est calculée avec un code de dynamique 2D utilisant la méthode d'intégration ADI (Alternating Direction Implicit). Pour valider les résultats obtenus, 2 autres codes ont été développés : un schéma explicite et l'autre implicite sans ADI.
- L'évolution chimique et thermique du gaz piégé dans un vortex à l'état stationnaire est calculée avec un code de chimie hors équilibre 1D. Le même code est utilisé pour évaluer les conditions initiales (abondances des espèces, températures) ainsi que la relaxation du gaz postérieure à la déstabilisation du vortex.
- L'analyse spatio-temporelle des vortex (dissipatifs ou en phase de relaxation) et du réseau chimique, la construction des observables et le calcul des densités de colonne sont assurés par un code interactif d'analyse de données.

Une ligne de visée quelconque au travers du MIS diffus turbulent est alors composée de 3 environnements différents : le milieu ambiant dont l'évolution chimique est dominée par les photons UV, les vortex actifs, et les phases de relaxation. Le nombre de vortex est fixé par l'observation dans le MIS du taux de transfert d'énergie turbulente. Suivant le modèle, ce nombre varie de plusieurs (< 10) à plusieurs centaines par ligne de visée échantillonnant une quantité de matière totale de $N_{\text{H}} = 1.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$.

La comparaison aux observations suggère que les structures de cisaillement de $\sim 100 \text{ UA}$, ayant un temps de vie court ($\sim 100 \text{ ans}$) et dont la dissipation d'énergie est

²Les vortex étudiés sont des structures de vorticit  en  quilibre entre l' tirement d    la turbulence et la diffusion mol culaire.

dominée par le découplage ion-neutre, ont des résultats qui sont davantage en accord avec les données.

Dans de tels modèles la prise en compte des phases de relaxation est d'une grande importance. Nous proposons (Godard *et al.* 2009) de commencer à réfléchir à l'impact thermique et chimique d'un vortex dans un état non stationnaire, c'est-à-dire dont le temps de vie devient plus petit que la période de rotation autour de l'axe de symétrie.

Les limitations du modèle TDR

Les principales faiblesses du modèle sont liées au manque de contraintes observationnelles et expérimentales concernant la taille des structures cohérentes de la turbulence interstellaire, et surtout leur temps de vie que nous avons été forcé de fixer à l'aide d'arguments sur l'énergie dissipée. En outre, le manque de contraintes sur la répartition spatiale des structures dissipatives dans le milieu interstellaire, ne permet pas de faire des prédictions concernant les profils de raies qui dépendent de bien trop de paramètres libres, comme par exemple l'inclinaison moyenne des structures le long de la ligne de visée et leur distribution en taille et en vitesse. Le modèle souffre enfin d'un traitement sommaire du transfert de rayonnement dans l'UV : l'extinction est considérée uniforme pour tout le gaz échantillonné par la ligne de visée, et bien que cette méthode ait un avantage certain sur l'analyse des résultats, elle n'est sans doute pas appropriée pour la description de nuages interstellaires de petite taille.

C'est pourquoi plusieurs projets sont en cours de développement, de manière à inclure le modèle TDR dans une description dynamique à grande échelle du MIS diffus, c'est-à-dire à coupler les résultats de nos modèles à ceux des simulations 3D HD et MHD de la turbulence interstellaire et à ceux des modèles PDR.

Les projets

Poursuite des observations du milieu diffus

Analyse des données IRAM-PdBI

Dans le MIS, toutes les molécules ne sont pas formées dans les mêmes environnements, ni par les mêmes processus physiques. La Fig. 3 de Godard *et al.* (2009b), qui affiche les spectres observés en absorption en direction de W49N (et leur ajustement gaussien) en est un exemple frappant : dans les intervalles de vitesse 35-38 et 41-49 km.s⁻¹, aucune décomposition gaussienne n'est appliquée puisque ces composantes absorbantes n'apparaissent que sur le spectre HCO⁺ (1-0) et non pas sur les spectres CN, HCN et HNC (1-0). L'observation des raies moléculaires est fondamentale car elle est la seule méthode connue pour remonter à la structure spatiale (imbrication des différents environnements) et finalement aux variations des conditions physiques le long d'une ligne de visée, puisque chaque espèce a ses propres spécificités.

2 des 8 sources cibles du programme clé PRISMAS, W51 et W49N, ont été observées dans 8 transitions moléculaires dont HCO⁺ (1-0) et HCN (1-0) avec l'interféromètre du plateau de Bure (PdBI). Le projet consiste à analyser ces données à la lumière des résultats des observations IRAM-30m (Godard *et al.* 2009b) et de quantifier les variations à petite échelle (résolution du PdBI : 6 arcsec en configuration D)

des propriétés physiques et chimiques (températures et abondances) du gaz vu en absorption. Ce traitement permettra de contraindre davantage la modélisation du champ de vitesse du gaz absorbant. Une telle étude est essentielle pour les futures comparaisons entre les observations réalisées à résolutions angulaires différentes (27 arcsec avec l'antenne 30m de l'IRAM à 88 GHz, 36 arcsec avec le télescope spatial Herschel à 500 GHz).

Analyse des données du satellite Herschel-HIFI

Les molécules cibles d'une partie du programme PRISMAS sont des hydrures légers (tels que CH, CH⁺, NH, H₂O, H₃O⁺ ou OH⁺), c'est-à-dire des espèces à la base de la chimie en phase de gazeuse.

L'un des résultats attendus est la comparaison des densités de colonne et des champs de vitesse de HCO⁺ et CH⁺, ces molécules étant étroitement liées par la chimie dans le MIS diffus (Godard *et al.* 2009a). L'information contenue dans les profils de raies sera confrontée aux prédictions des modèles de chimie hors équilibre, à savoir les modèles de chocs MHD (Flower & Pineau des Forêts 1998) et les modèles TDR (Godard *et al.* 2009a).

Le second objectif est de comparer ces nouvelles données avec les multiples observations (en HI, HCO⁺, H₂O, OH, H₃⁺,...) réalisées avec les satellites ISO (Infrared Space Observatory), SWAS (Submillimeter Wave Astronomy), Odin, et les radiotélescopes au sol. Les corrélations possibles entre les densités de colonne, sont de grande importance dans la compréhension des mécanismes chimiques et physiques à l'origine de la formation de ces espèces.

Analyses statistiques de simulations du milieu interstellaire

Davantage d'informations sur la structure du milieu, la nature de la turbulence, et le couplage entre le gaz faiblement ionisé et le champ magnétique sont requises, de manière à contraindre les modèles de chimie actuels, et notamment d'en extraire des prédictions fiables concernant la structure en vitesse associée à chaque espèce. C'est pourquoi il devient désormais nécessaire de combiner les modèles de chimie 1D (PDR, chocs, TDR) avec une description plus réaliste de la dynamique du gaz diffus. Une perspective intéressante, dont la réalisation s'appuyera sur les projets financés Star Format (consortium AstroNet, P.I. : Patrick Hennebelle) et SCHISM (Structure and CHemistry of the InterStellar Medium, ANR, P.I. : Jérôme Pety), est la construction d'outils d'analyse statistique de cubes de données issus de simulations numériques 3D HD et MHD du milieu interstellaire diffus (obtenues avec le code RAMSES, Teyssier 2002) ou de simulations MHD à beaucoup plus grand nombre de Reynolds (Alexakis *et al.* 2005)

Le travail préliminaire consiste à dresser un bilan énergétique de ces simulations. (1) Les densités d'énergie magnétique, thermique et cinétique seront évaluées en fonction du temps. (2) Dans le cas de simulations de turbulence compressible, le champ de vitesse sera décomposé en 2 champs distincts, irrotationnel et solénoïdal (décomposition de Helmholtz-Hodge). (3) Les fonctions de transfert d'énergie d'un mode à l'autre et d'une échelle à l'autre seront évaluées selon la méthode décrite par Alexakis *et al.* (2005).

Le coeur du projet est le développement d'un outil de reconnaissance des structures cohérentes qui occupent une place importante dans le bilan énergétique (transport, transfert, dissipation). Le défi est aussi bien théorique que numérique, puisqu'il s'agit de trouver des critères de sélection des bouffées spatio-temporelles de dissipation d'énergie.

Une attention particulière sera dédiée aux structures de forte vorticit  et/ou de fort cisaillement, puisqu'elles peuvent  tre combin es au mod le de chimie 1D TDR, afin de pr dire des profils de raies de multiples esp ces chimiques   confronter aux observations du milieu diffus.

Introduction du m lange turbulent dans le mod le PDR

L'une des faiblesses du code TDR est qu'il ne traite pas le transfert de rayonnement UV dans le gaz diffus. Toutes les simulations sont effectu es pour une m me extinction, une approche qui se justifie (Godard *et al.* 2009a) et qui pr sente des avantages au niveau de l'analyse des donn es, mais qui peut  galement  tre critiqu e. Pour tenir compte de l'impact de la turbulence sur la chimie, tout en traitant de mani re rigoureuse le transfert de rayonnement, il serait int ressant d'introduire la notion de m lange turbulent dans le mod le PDR de Meudon.

En effet, comme le montrent les observations, le milieu interstellaire diffus est structur , et principalement compos  de 2 phases, une phase chaude et t nue le WNM (Warm Neutral Medium, $T \sim 8000$ K, $n \sim 0.4$ cm⁻³) et une phase froide et plus dense, le CNM (Cold Neutral Medium, $T \sim 60$ K, $n \sim 50$ cm⁻³) en  quilibre de pression. La diffusion turbulente permet d'injecter dans le WNM une quantit  d'hydrog ne mol culaire, form  dans le CNM, pour activer la production de nombreuses esp ces mol culaires (Lesaffre *et al.*, 2007).

Contrairement au mod le PDR, la diffusion est un probl me   deux conditions aux limites. Il s'agit donc de modifier la structure de l'int grateur du code, en y impl mentant la m thode du tir (les valeurs initiales sont choisies ad hoc, puis sont corrig es par une m thode it rative) ou la m thode de relaxation (dans ce cas, les  quations diff rentielles sont remplac es par des  quations aux diff rences finies ; un maillage du domaine d'int gration est alors n cessaire). Ceci permet de produire une grille de mod le en fonction du coefficient de diffusion, qui serait mis   la disposition de la communaut  scientifique via la base de donn e de l'Observatoire Virtuel (en collaboration avec F. Le Petit).

Enfin, les outils d'interpr tation de donn es du code PDR peuvent  tre utilis s pour pr dire les profils de raies, les abondances et les rapports d'abondances de nombreuses esp ces mol culaires qui seront compar s aux observations du milieu diffus. La cible principale est H₃⁺. En effet, cet ion est   la base de la chimie en phase de gazeuse. D terminer son origine dans le MIS diffus est donc d'une importance capitale (Snow & McCall, 2006).

Annexes

Annexe A

Organisation du MIS

Dans une galaxie, le milieu interstellaire est loin d'être homogène, les observations montrant de forts contrastes de densité (environ 8 ordres de grandeur), de température, de fraction d'ionisation, d'intensités du champ magnétique et du champ de rayonnement : à titre d'exemple, environ la moitié de la masse du MIS est contenue dans seulement $\sim 1 - 2\%$ du volume qu'il occupe et les observations révèlent l'existence de larges cavités de très faible densité, y compris dans les régions les plus denses.

Dans ce chapitre, nous présentons brièvement les observations des principales composantes du MIS, les variations spatiales des quantités de matière, ainsi que les modèles statiques de base, le modèle à 2 phases et celui à 3 phases. Ce bilan s'appuie sur plusieurs revues récentes : celle de Cox (2005) qui discute les équilibres de pression conduisant au modèle à 3 phases du milieu interstellaire ainsi que leurs imbrications spatiales ; celle de McKee (1995) qui effectue une démonstration détaillée des modèles à 2 et 3 phases ; celle de Ferrière (2001) qui s'intéresse au bilan observationnel des différentes composantes (traceurs, évaluation des densités et de la structure spatiale moyennée) ; et bien sûr la revue de Snow & McCall (2006) dédiée au milieu interstellaire diffus.

A.1 Les composantes du gaz interstellaire

A.1.1 États des lieux

Le milieu interstellaire est composé d'un certain nombre de composantes caractérisées par différentes températures, densités et fractions d'ionisation. Celles-ci ont pour origine l'hétérogénéité (thermique, chimique, énergétique) du milieu, couplée aux processus de chauffage, de refroidissement et d'ionisation (les potentiels et les taux d'ionisation ainsi que les taux de recombinaison des espèces élémentaires sont donnés en Tab. A.1) du gaz, aux explosions de supernovae, et à la variation locale du champ de gravité. On différencie ainsi : le HIM (Hot Intercloud Medium), le WIM (Warm Ionized Medium), le WNM (Warm Neutral Medium), le CNM (Cold Neutral Medium), les nuages moléculaires, et les régions HII, dont les caractéristiques physiques sont données en Tab. A.2. C'est l'un des buts des travaux portant sur le MIS que d'expliquer leur origine et de décrire leurs interactions.

Dans ce chapitre, on se concentrera principalement sur le WNM, le CNM, le

TAB. A.1 – Ionisation des espèces élémentaires. Les nombres entre parenthèses sont des puissances des 10.

Élément	Énergie d'ionisation	Taux d'ionisation ^a		Vitesse de recombinaison ^b	
	(eV)	(s ⁻¹)		(cm ³ .s ⁻¹)	
	E_i	a	b	a	b
N	14.53	6.30 (-17)	–	3.80 (-12)	-0.62
O	13.62	8.40 (-17)	–	3.40 (-12)	-0.64
H	13.60	1.38 (-17)	–	3.61 (-12)	-0.75
C	11.26	2.20 (-10)	2.96	4.40 (-12)	-0.61
S	10.36	5.90 (-10)	2.58	3.90 (-12)	-0.63
Si	8.15	3.10 (-09)	1.91	4.90 (-12)	-0.60
Fe	7.90	2.80 (-10)	1.86	3.70 (-12)	-0.65

^a Si $E_i < 13.6$ eV, il s'agit ici du taux d'ionisation par les photons mis sous la forme $a \exp(-bA_V)$ où A_V est l'extinction dans le visible. Sinon, il s'agit du taux d'ionisation par les rayons cosmiques, obtenus en prenant $\zeta = 3 \times 10^{-17}$ s⁻¹ et en tenant compte de l'ionisation par les photons secondaires (cf. Chap. 2).

^b Vitesse de recombinaison sous la forme $a(T/100K)^b$ où T est la température de réaction (voir section 2.2.1).

TAB. A.2 – Caractéristiques physiques des phases du milieu interstellaire. Densités n_H , températures T , masses surfaciques Σ_{\odot} dans le voisinage solaire et masses totales M dans la Galaxie sont obtenues à partir des revues de Ferrière (2005), Lequeux (2002) et Tielens (2005).

Composante	n_H (cm ⁻³)	T (K)	Σ_{\odot} (M _⊙ .pc ⁻²)	M (10 ⁹ M _⊙)
HIM	7.0×10^{-3}	10 ⁶	0.3	≥ 1.6
WIM	$2.0 - 5.0 \times 10^{-1}$	$0.6 - 1.0 \times 10^4$	1.4	1.0
WNM	$2.0 - 5.0 \times 10^{-1}$	$0.6 - 1.0 \times 10^4$	3.5	2.8
CNM	$2.0 - 5.0 \times 10^1$	$0.5 - 1.5 \times 10^2$	3.5	2.2
nuage moléculaire	$10^2 - 10^6$	$0.5 - 5.0 \times 10^1$	2.5	1.3 -2.5

HIM et les nuages moléculaires, qui sont au coeur de cette thèse, et qui contiennent d'ailleurs l'essentiel de la masse.

A.1.2 Le modèle à 2 phases

Ce modèle est obtenu en effectuant le bilan thermique d'un gaz principalement atomique (en considérant une densité de colonne totale suffisamment faible) soumis à diverses sources de chauffage et d'ionisation (celles-ci sont décrites plus en détail dans le Chap. 2).

L'hypothèse de base est de supposer que seule la pression thermique importe !

C'est-à-dire que les pressions magnétique, cinétique et celle exercée par les rayons cosmiques (décrites dans le Chap. 1) ne varient pas dans le milieu. Supposons par exemple un champ magnétique statique, la pression magnétique ne varie pas le long des lignes de champ.

La première étape consiste alors à calculer les abondances des espèces atomiques et moléculaires qui ont un effet primordial dans la fonction de refroidissement Λ du milieu. L'étape suivante est de calculer $\Lambda(n_H, T, x_i)$ ainsi que la fonction de chauffage $\Gamma(n_H, T, x_i)$ (ces deux termes sont décrits dans le Chap. 2) en fonction de la densité du milieu n_H , de sa température T et des abondances relatives des espèces x_i , pour finalement évaluer le *refroidissement net* $\mathcal{L} = \Lambda - \Gamma$.

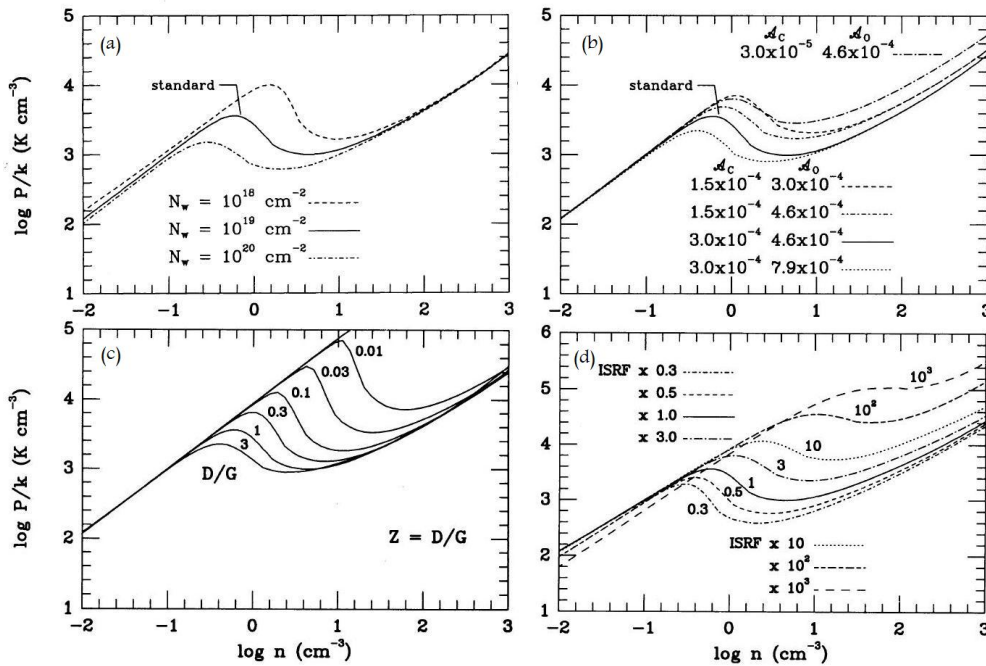


FIG. A.1 – Pression thermique P/k en fonction de la densité (Wolfire *et al.* 1995). Panneau (a) : pour plusieurs valeurs de la densité de colonne notée ici N_w (10^{19} cm^{-2} étant la référence). Panneau (b) : pour plusieurs valeurs des abondances (élémentaires relatives à l'hydrogène) en carbone et oxygène A_C & A_O (référence : 3×10^{-4} et $4.6 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-3}$). Panneau (c) : pour différentes valeurs de la métallicité Z , la référence étant $Z = D/G$ (rapport d'abondances entre les poussières et le gaz). Panneau (d) : pour plusieurs valeurs du champ de rayonnement interstellaire (la référence étant le champ de Draine).

La Fig. A.1 montre les résultats du modèle de Wolfire *et al.* (1995) appliqué au gaz interstellaire dans le plan $P - n_H$. Dans ce modèle, les mécanismes de chauffage et d'ionisation par le champ de radiation UV, les rayons cosmiques et les rayons X sont pris en compte, ainsi que le refroidissement dû aux raies de structures fines de C^+ , O , C , Si , Si^+ , Fe , Fe^+ , à la transition électronique $\text{Ly}\alpha$, et à la recombinaison sur les petits grains.

Dans chaque panneau sont affichées les courbes $\mathcal{L} = 0$. Pour un modèle donné,

au dessus de cette courbe, $\Lambda > \Gamma$, et respectivement $\Lambda < \Gamma$ en dessous. L'intersection d'une droite de pression donnée avec cette courbe donne les points d'équilibre thermique (chauffage = refroidissement). En fonction des cas on peut obtenir de 1 à 3 points, dont au maximum 2 sont des positions thermiquement stables pour des perturbations isobares.

À une pression d'équilibre $P/k = 3000 \text{ K.cm}^{-3}$ (Kulkarni & Heiles, 1987), on trouve alors pour le CNM et WNM, $n_{\text{H}} = 61 \text{ cm}^{-3}$ et $T = 45 \text{ K}$ et $n_{\text{H}} = 0.37 \text{ cm}^{-3}$ et $T = 7300 \text{ K}$. La Fig. A.1 montre également l'impact de la densité de colonne totale du gaz, des abondances élémentaires, du rapport d'abondance grains/gaz et du champ de rayonnement. En fonction de ces différents paramètres, le domaine de pression sur lequel 2 positions d'équilibre sont trouvées se restreint (plus N_w est grand, plus C est déplété, plus l'abondance de grains est élevée et plus le champ de rayonnement est fort) et peut même disparaître.

A.1.3 Le modèle à 3 phases

Cela fait maintenant plus de 30 ans que les observations ont révélé la présence de la composante coronale du milieu interstellaire, le HIM (Hot Intercloud Medium). Celle-ci fut découverte par :

- la détection dans les spectres *Copernicus* (Jenkins & Meloy 1974) de larges raies d'absorption dues à la présence d'espèces hautement ionisées dans le milieu (telles que O^{5+} ou N^{4+}), qui ne peuvent apparaître qu'à très haute température (au moins 10^5 K);
- l'émission dans le domaine des rayons X qui est associée au rayonnement thermique d'une phase très chaude ($\sim 10^6 \text{ K}$, Williamson *et al.* 1974). La densité du milieu déduite du relevé réalisé avec le satellite *ROSAT* (Röntgensatellit) est de $n_{\text{H}} \sim 0.0065 \text{ cm}^{-3}$ (Snowden *et al.* 1998).

C'est la prise en compte des explosions d'étoiles se produisant à un taux de $k_{\text{SNR}} \sim 2 \times 10^{-2} \text{ an}^{-1}$ (en moyenne dans notre galaxie) qui permet d'expliquer l'existence du HIM. Après l'explosion, l'énergie mécanique ($\sim 10^{51} \text{ erg}$) est en partie rayonnée au niveau du choc avec le milieu interstellaire ambiant, en partie convertie en énergie thermique (la nouvelle cavité formée est chauffée), et en partie redistribuée en énergie cinétique qui alimente la turbulence du gaz. Dans le modèle à 3 phases, bien que le HIM ne soit jamais à l'équilibre thermique (il refroidit lentement), la stationnarité est supposée : le nombre d'explosions de supernovae et la quantité de HIM formée égale la quantité de HIM qui disparaît par refroidissement.

Le temps de refroidissement adiabatique¹ de la bulle de gaz chaude en expansion est très long ($\tau_{\text{SNR}} \sim 10^6 \text{ ans}$). Dans certains cas, les effets combinés de k_{SNR} , τ_{SNR} et du volume final occupé par la supernova peuvent conduire à leur percolation, formant ainsi un réseau de tunnels connectés et remplis de gaz coronal. Ce processus dépend ainsi du paramètre de porosité Q

$$Q = k_{\text{SNR}} \tau_{\text{SNR}} V_{\text{SNR}} \quad (\text{A.1})$$

¹On rappelle qu'un système adiabatique est un système clos, sans échange de chaleur avec l'extérieur.

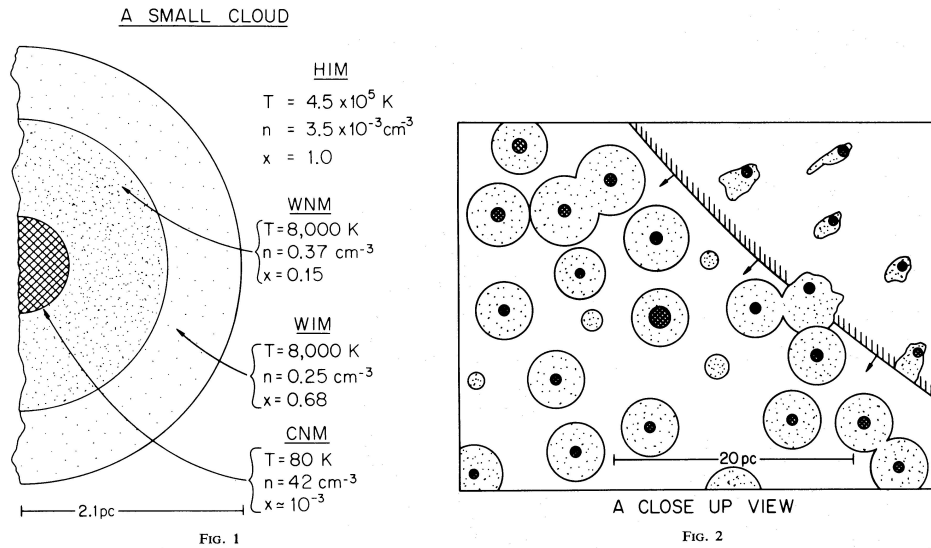


FIG. A.2 – Schéma du modèle à trois phases du milieu interstellaire (McKee & Ostriker 1977). Panneau de gauche : bulle de CNM entourée par le gaz HI chaud, le tout plongé dans le HIM. Panneau de droite : expansion d’une supernovae dans le milieu interstellaire.

qui dépend des mécanismes de refroidissement du gaz coronal et qui conduit à la fraction volumique de gaz coronal

$$f_{\text{HIM}} = \frac{Q}{1 + Q}. \quad (\text{A.2})$$

Dans le modèle de McKee & Ostriker (1977), dont est extraite la Fig. A.2, celle-ci atteint 70 % du volume du milieu interstellaire local.

A.2 Répartition du gaz dans la Galaxie

Les étoiles de notre Galaxie sont réparties dans un disque fin, de rayon ~ 30 kpc et d’épaisseur $\sim 400 - 600$ pc, et dans 2 structures sphériques, le bulbe de rayon $\sim 2 - 3$ kpc, et le halo qui s’étend jusqu’à 30 kpc. Dans le disque fin se développent les bras spiraux révélés par le rayonnement stellaire mais également par toutes les observations atomiques et moléculaires, notamment de l’hydrogène atomique neutre. Le système solaire se situe quant à lui à environ 8.5 kpc du centre galactique et à environ 15 pc de hauteur (par rapport au plan, Cohen 1995). Comment s’organisent les différentes phases du milieu interstellaire, d’un point de vue purement géométrique, est la question abordée dans cette section.

Ce sont les multiples relevés de la Galaxie, réalisés depuis les dernières 40 années qui ont apporté la réponse.

- Le gaz moléculaire fut le premier à être découvert (CH, CH⁺, CN dans les années 40). Depuis ce sont les relevés en CO (ex : Burton *et al.* 1975, observations NRAO 11m) et H₂ (ex : Savage *et al.* 1977, observations *Copernicus*) ainsi que

les compilations de relevés (Dame *et al.* 2001) qui ont donnés la structure du gaz dans la Galaxie.

- En ce qui concerne les observations du HI galactique, on peut citer par exemple les relevés de la raie Ly α (Jenkins & Savage 1974) ainsi que ceux de la raie de structure fine à 21 cm (Dickey & Lockman 1990, Diplas & Savage 1991, Heiles & Troland 2003, Mohan *et al.* 2004, Kalberla *et al.* 2005).

A.2.1 Radialement

Nous sommes dans le plan galactique. La Fig. A.2.1 montre le problème que cela pose si l'on souhaite avoir une idée de la structure radiale du milieu interstellaire. Tout dépend de notre capacité à associer, dans un spectre, une certaine composante en vitesse à une position dans la Galaxie, en d'autres termes d'avoir une idée de la courbe de rotation.

L'effet Doppler ne donnant que la composante de la vitesse le long de la ligne de visée, il est important de noter que cette transformation n'est pas une bijection. La connaissance de la courbe de rotation seule ne permet pas, a priori, de résoudre l'ambiguïté en distance indiquée par les points 1 et 1' dans la Fig. A.2.1. En effet, soit ω_A et ω_S les vitesses angulaires d'un point quelconque A et du soleil autour du centre galactique GC (cf Fig. A.2.1), l la longitude galactique du point A et R_S la distance du soleil à GC. Alors la vitesse du point A projetée le long de la ligne de visée vaut :

$$u_A = R_S(\omega_A - \omega_S)\sin l \quad (\text{A.3})$$

si bien que 2 points à la même distance galactocentrique et sur la même droite définie par la longitude galactique l ont la même vitesse projetée. Toutefois, si l'on ne se soucie que de la structure radiale, alors cette indétermination n'est pas importante².

La Fig. A.4 donne les variations des quantités de matière contenue dans les composantes atomique ionisée, atomique neutre et moléculaire, moyennées sur l'angle azimutal galactocentrique, en fonction de la distance au centre galactique.

La composante moléculaire présente un maximum entre 3 et 7 kpc appelé l'anneau moléculaire : environ 65% de l'intensité en ^{12}CO émane de cette région, bien que les études sur le sujet ne soient pas complètement en accord (Fig. A.4, Bronfman *et al.* 1988, Clemens *et al.* 1988). La différence observée a sans doute deux origines. Tout d'abord, alors que les résultats de Clemens *et al.* (1988) proviennent d'un relevé CO dans le premier quadrant Galactique (Fig. A.2.1), ceux de Bronfman *et al.* (1988) sont issus de la compilation de relevés dans le premier et quatrième quadrant. La différence entre les 2 mesures peut-être due à la non axisymétrie du système. Mais il est également possible que cette différence soit liée aux calibrations instrumentales (les rapports CO/H $_2$ choisis étant très proches : respectivement $N(\text{H}_2) = 2.8$ et $3.0 \times 10^{20} \int T(\text{CO}) dv$ pour Bronfman *et al.* 1988 et pour Clemens *et al.* 1988). Au delà de R_\odot , les mesures deviennent plus délicates mais la quantité de gaz moléculaire semble décroître rapidement.

La composante HI tracée en Fig. A.4 (courbe composite obtenue avec les travaux de Dickey & Lockman 1990 et Diplas & Savage 1991) s'étend radialement jusqu'à 30

²Dans certains cas, il est possible de résoudre cette ambiguïté, par exemple si on analyse des spectres en absorption (Fish *et al.* 2003).

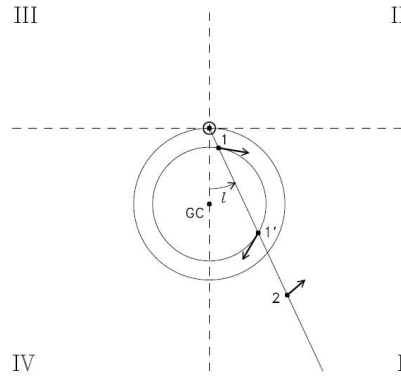


FIG. A.3 – Schéma de la Galaxie vue de haut (Ferrière 2001). GC montre la position du centre galactique et \odot la position du soleil. l est la longitude galactique, tandis que les régions I, II, III et IV indiquent les quadrants. La Galaxie tourne dans le sens des aiguilles d’une montre autour de GC, et d’autant plus rapidement (en vitesse angulaire, jusqu’au rayon où la courbe de rotation est plate) que la distance à GC est petite.

kpc. Elle montre une dépression pour $R < 3.5$ kpc, un plateau pour $3.5 < R < 14$ kpc, ainsi qu’une décroissance exponentielle³ pour $R > 14$ kpc.

En comparant les observations HI en absorption et en émission, on peut obtenir la fraction de HI froid dans la Galaxie. Celle-ci est à peu près constante pour $R > 5$ kpc (~ 0.5) et décroît brutalement d’un facteur 2 pour $R < 5$ kpc. Enfin, depuis les premiers relevés de la raie $\text{Ly}\alpha$ détectée en absorption en direction d’étoiles brillantes, on sait que le système solaire est situé dans une cavité asymétrique dénuée de HI appelée la *bulle locale* d’une taille de l’ordre de 100 pc.

A.2.2 Verticalement

Verticalement, on associe à chaque composante du gaz une distribution en densité moyenne de la forme d’une exponentielle ou d’une gaussienne. Ces choix ne sont pas totalement arbitraires puisqu’ils reposent sur l’idée de l’équilibre hydrostatique d’un gaz isotherme soumis seulement à la gravité qu’exerce le disque Galactique⁴. Ainsi Cox (2005) trouve les densités suivantes (en cm^{-3}), issues de mesures de densités de colonne totales combinées à des modèles de profils verticaux de densités, pour le gaz

³Cette dernière partie de la courbe est très incertaine : les lignes de visée dont elle provient sont très différentes les unes des autres, et la moyenne n’a alors que peu de sens physique.

⁴Pour s’en convaincre, il suffit seulement de résoudre les systèmes d’équations d’un gaz soumis à un champ de gravité constant g ou variable $g(z)$: respectivement $\frac{dP(z)}{dz} = -\rho g$ et $\frac{1}{\rho(z)} \frac{dP(z)}{dz} = z \frac{dg(z)}{dz}$ et $P = C_s^2 \rho$ ou P , ρ et C_s sont la pression thermique du gaz, sa masse volumique et la vitesse du son.

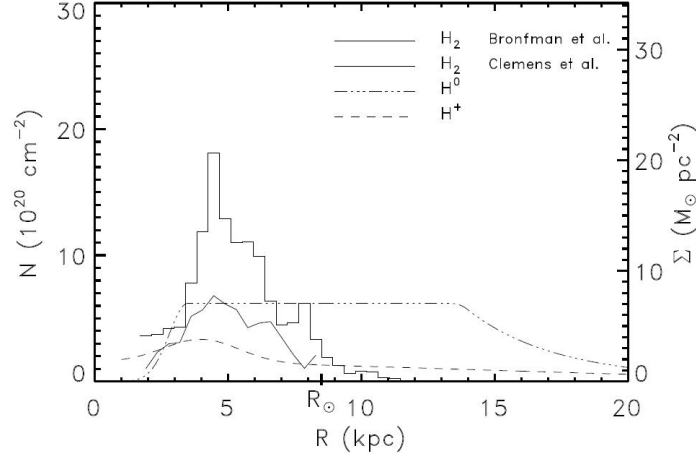


FIG. A.4 – Densité de colonne d’hydrogène intégrée dans la direction perpendiculaire au disque galactique, et densité massique surfacique, les deux calculées dans des modèles axisymétriques, et donc données en fonction de la distance au centre. Cette figure est une compilation de données (Ferrière 2001).

dans le voisinage solaire :

$$\begin{aligned}
 \text{gaz moléculaire : } n_{\text{H}} &= 0.580 \exp[-(z/81\text{pc})^2] \\
 \text{gaz HI froid : } n_{\text{H}} &= 0.350 \exp[-(z/127\text{pc})^2] \\
 \text{gaz HI chaud a : } n_{\text{H}} &= 0.103 \exp[-(z/318\text{pc})^2] \\
 \text{gaz HI chaud b : } n_{\text{H}} &= 0.063 \exp[-z/403\text{pc}] \\
 \text{régions HII : } n_{\text{H}} &= 0.015 \exp[-z/70\text{pc}] \\
 \text{HII diffus : } n_{\text{H}} &= 0.025 \exp[-z/1000\text{pc}].
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

On note ici que la composante HI chaud est bien mieux décrite si elle est décomposée en la somme de 2 profils, une gaussienne et une exponentielle. On remarque également que l’échelle de hauteur H du HIM n’est pas citée. Il a fallu des générations d’instruments pour obtenir plusieurs évaluations indépendantes de cette grandeur, dont voici un bref résumé :

- Spectres d’absorption O^{5+} *Copernicus* + *FUSE* (Savage *et al.* 2000) : $H \sim 2.7 \pm 0.4$ kpc (exponentielle).
- Spectres d’absorption N^{4+} *IUE* + *HST* (Sembach & Savage 1992) : $H \sim 3.9 \pm 1.4$ kpc (exponentielle).

Toutes ces échelles de hauteur varient en fonction de la distance au centre galactique. Ainsi, l’échelle de la composante moléculaire augmente en $R^{0.58}$, tandis que celle du HI augmente plus que linéairement, atteignant ~ 3 kpc à un rayon de 20 kpc.

A partir des profils de densité observés, on peut déduire la distribution verticale de la pression gravitationnelle du gaz, que l’on peut alors comparer avec la pression thermique (en prenant les températures données en Tab. A.2). Le résultat est montré en

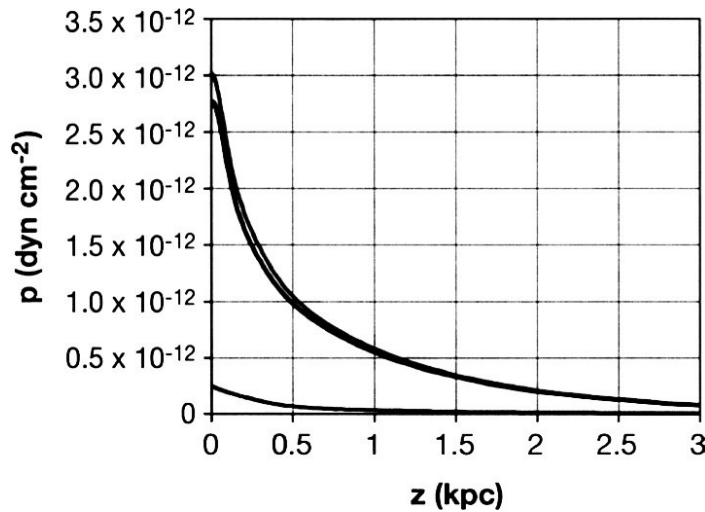


FIG. A.5 – Comparaison des distributions (en hauteur z dans la Galaxie) de la pression gravitationnelle (courbe du haut) et de la pression thermique (courbe du bas, la contribution du HIM n'est pas prise en compte). La différence entre ces 2 courbes est également affichée. Cette figure est extraite de Cox (2005).

Fig. A.5, la pression thermique correspondant au maximum à 10% de la pression totale. Les termes de pression non thermique (rayons cosmiques, magnétique, cinétique) correspondent chacun à 1/3 de la pression restante (cf. Chap. 1).

A.2.3 Imbrication des phases

Il s'agit sans aucun doute de la question la plus cruciale. Savoir comment ces phases sont imbriquées les unes dans les autres, quelles sont leurs surfaces d'interaction, leur topologie locale et leur organisation à grande échelle. Cette connaissance de la géométrie est essentielle pour quiconque souhaite décrire l'état et l'évolution du milieu interstellaire. Mais malheureusement, il n'existe pour l'instant aucune certitude sur le sujet.

En effet, les observations depuis la Terre sont limitées par :

- les effets de projection. Il est très difficile, à partir d'une observable, de remonter à la distribution spatiale de matière le long de la ligne de visée. En général, les approximations faites (homogénéité du gaz observé, forme des profils adoptée dans l'analyse des raies, etc...) sont hasardeuses et suppriment une partie des informations sur la structure 3D.
- les méthodes d'observations. Que l'on détecte des espèces en absorption, en émission, en utilisant un télescope à antenne unique ou un interféromètre, le milieu observé n'est pas le même et les contraintes varient. En émission, un cartographie est possible au prix de fortes approximations, tandis qu'en absorption, la structure spatiale est inaccessible. Et les interféromètres suppriment systématiquement la composante à grande échelle.
- les types d'instruments associés à chaque longueur d'onde. En fonction du traqueur sélectionné pour étudier telle ou telle phase, les instruments utilisés ont des

résolutions et sensibilités différentes. Si bien que la comparaison et la conciliation entre différentes observables sont délicates.

- la physico-chimie sous jacente. Les supposés *traceurs* de chaque phase peuvent être des espèces minoritaires (comme par exemple CO pour les nuages moléculaires). Il est difficile alors de relier toute variation d'abondance à une variation de la quantité totale de matière le long de la ligne de visée, plutôt qu'à une variation locale des conditions physiques du gaz (densité, température, pour ne citer qu'elles). Ce problème est réabordé dans le nouveau modèle physico-chimique de Glover *et al.* (2009) concernant le monoxyde de carbone, et sa corrélation avec la densité et l'extinction A_V .

Structure du gaz HI

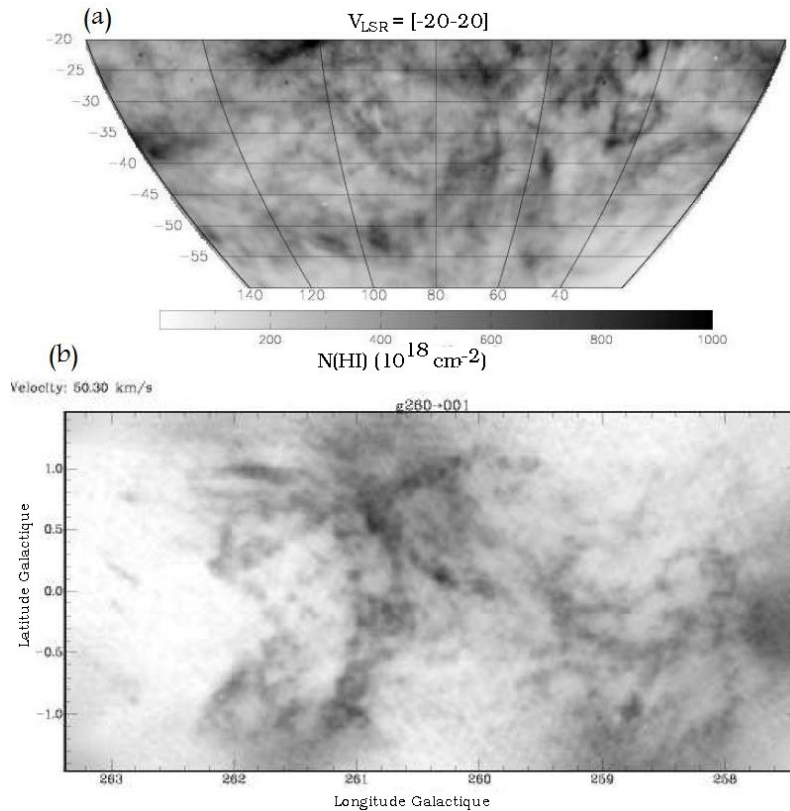


FIG. A.6 – Carte HI à haute résolution (Hartman & Burton 1997) : (a) d'un champ $120^\circ \times 30^\circ$ centré en $(l = 80^\circ, b = -40^\circ)$ pour des vitesses comprises entre -20 et 20 km.s^{-1} ; (b) d'un champ $6^\circ \times 3^\circ$ centré en $(l = 260.5^\circ, b = 0^\circ)$ pour des vitesses de $30\text{-}50 \text{ km.s}^{-1}$.

Les cartes à haute résolution spatiale de la raie à 21 cm de HI montrent clairement que le milieu interstellaire, et en particulier le CNM, a une géométrie bien différente de celle suggérée par le modèle de McKee & Ostriker (Fig. A.2). Le HI froid est structuré en feuilles ou en filaments, comme l'indique la Fig. A.6 (Hartman & Burton 1997).

Ce résultat est observé à toutes les échelles, et notamment dans les travaux de Miville-Deschênes *et al.* (2003) qui présentent un relevé de la raie HI à 21 cm dans un champ à haute latitude galactique.

Annexe B

Les invariants d'un gaz

B.1 En théorie cinétique des gaz

B.1.1 Système à N particules

Soit la probabilité pour que N particules soient aux points $(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1), \dots, (\mathbf{q}_N, \mathbf{p}_N)$ de l'espace des phases¹ : $f_N(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$. f_N étant une densité de probabilité, son intégrale sur tout l'espace des phases vaut 1. En écrivant que la dérivée totale par rapport au temps de f_N est nulle, on obtient l'équation d'évolution de la densité de probabilité du système, l'équation de Liouville :

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \left(\dot{\mathbf{q}}_i \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{q}_i} + \dot{\mathbf{p}}_i \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \right) = 0 \quad (\text{B.1})$$

Cette équation étant difficile à résoudre, on introduit les fonctions de probabilité à une particule, définies par l'intégrale de f_N sur les $6(N-1)$ dimensions restantes de l'espace des phases :

$$f_1(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, t) = N \int f_N d\mathbf{q}_2 d\mathbf{p}_2 \cdots d\mathbf{q}_N d\mathbf{p}_N \quad (\text{B.2})$$

Autour d'un point (\mathbf{q}, \mathbf{p}) le nombre de particules contenues dans un hypercube de volume $d\mathbf{q}d\mathbf{p}$ est donnée par $f_1 d\mathbf{q}d\mathbf{p}$. Si les particules ne subissent pas de collisions, à l'instant $t + dt$ elles seront autour d'un point de l'espace des phases de coordonnées :

$$\begin{cases} \mathbf{q}' &= \mathbf{q} + \frac{\mathbf{p}}{m} dt \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} + \mathbf{F} dt \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

où \mathbf{F} est la force extérieure appliquée sur les particules. Le nombre de particules étant conservé, $f_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{q}d\mathbf{p} = f_1(\mathbf{q}', \mathbf{p}', t) d\mathbf{q}'d\mathbf{p}'$, on en déduit que :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{q}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (\text{B.4})$$

En faisant l'hypothèse du *chaos moléculaire*², Boltzmann prit en compte les collisions entre particules. Le terme de droite de l'équation Eq. B.4 est alors remplacé par l'intégrale de collision I_c dont le calcul est donné par Diu *et al.* (1989). On obtient ainsi l'équation de Boltzmann.

¹Les \mathbf{q}_i et \mathbf{p}_i correspondent respectivement au vecteurs position et quantité de mouvement

²Les particules sont statistiquement indépendantes avant une collision

B.1.2 Approche *continue*

L'approche *continue* consiste à étudier cette équation sur des volumes suffisamment grands (typiquement supérieurs à l^3 où l est le libre parcours moyen) pour que les variables telles que la densité, la température ou l'énergie puissent être définies. Celles-ci correspondent à des valeurs moyennes de quantités microscopiques χ (voir plus bas) sur le volume l^3 :

$$\langle \chi \rangle = \frac{1}{n} \int \chi f(\mathbf{q}, \mathbf{v}, t) d^3v \quad (\text{B.5})$$

où n est le nombre de particules par unité de volume $n = \int f d^3v$, et \mathbf{v} est la vitesse $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$.

En multipliant l'équation de Boltzmann par χ , puis en intégrant sur toutes les vitesses, on obtient l'évolution de $\langle \chi \rangle$. Avec les conventions d'Einstein (sommation sur les indices répétés) et en supposant que la force \mathbf{F} derive d'un potentiel V :

$$\int \left(\chi \frac{\partial f}{\partial t} + \chi v_k \frac{\partial f}{\partial q_k} - \chi \frac{\partial V}{\partial q_k} \frac{\partial f}{\partial v_k} \right) d^3v = \int \chi I_c d^3v \quad (\text{B.6})$$

Pour la masse, les 3 composantes de la vitesse et l'énergie cinétique, le terme de droite est nul (Diu *et al.* 1989) et il vient l'équation de conservation

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \langle \chi \rangle) + \frac{\partial}{\partial q_k} (n \langle v_k \chi \rangle) + n \frac{\partial V}{\partial q_k} \left\langle \frac{\partial \chi}{\partial v_k} \right\rangle = 0. \quad (\text{B.7})$$

B.1.3 Équations de conservations

L'équation de conservation appliquée à la masse, les composantes de la vitesse et l'énergie cinétique donne respectivement :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_k} (\rho u_k) = 0 \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial q_k} [\rho (u_i u_k + \langle w_k w_i \rangle)] + \rho \frac{\partial V}{\partial q_i} = 0 \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho}{2} (\mathbf{u}^2 + \langle \mathbf{w}^2 \rangle) \right] + \rho \frac{\partial V}{\partial q_k} u_k + \\ & \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\frac{\rho}{2} (\mathbf{u}^2 u_k + 2u_i \langle w_i w_k \rangle + \langle \mathbf{w}^2 \rangle u_k + \langle w_k \mathbf{w}^2 \rangle) \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

où le champ de vitesse a été décomposé au préalable $\mathbf{v} = \mathbf{u} + \mathbf{w}$ avec $\langle \mathbf{v} \rangle = \mathbf{u}$ et $\langle \mathbf{w} \rangle = 0$. Alors que le terme $\rho u_i u_k$ représente l'advection d'une cellule fluide, le terme $\rho \langle w_i w_k \rangle$ peut être décomposé en

$$\rho \langle w_i w_k \rangle = \frac{1}{3} \rho \langle \mathbf{w}^2 \rangle \delta_{ik} - \pi_{ik} \quad (\text{B.11})$$

où δ_{ik} est l'indice de Kroneker et π_{ik} est le *tenseur des contraintes* qui représente l'ensemble des forces de déformation de la particule fluide et qui sera présenté plus en détail dans les sections suivantes. A l'échelle du libre parcours moyen l , $P = \frac{1}{3} \rho \langle \mathbf{w}^2 \rangle$

n'est autre que la pression thermique, reliée à l'énergie spécifique interne ε et à la température du gaz T par

$$\rho\varepsilon = \frac{3}{2}P = \frac{3}{2}nkT. \quad (\text{B.12})$$

Finalement les équations B.9 et B.10 s'écrivent³

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\rho \nabla V - \nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} \quad (\text{B.13})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho}{2} \mathbf{u}^2 + \rho\varepsilon \right] + \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\frac{\rho}{2} \mathbf{u}^2 u_k + (\rho\varepsilon + P)u_k + \frac{\rho}{2} \langle w_k \mathbf{w}^2 \rangle - u_i \pi_{ik} \right] = -\rho \frac{\partial V}{\partial q_k} u_k \quad (\text{B.14})$$

En multipliant l'équation B.13 par \mathbf{u} , puis en soustrayant le résultat de l'équation B.14, on obtient les 2 équations régissant l'évolution de l'énergie cinétique et de l'énergie interne (où de la température) dans le gaz⁴

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho}{2} \mathbf{u}^2 \right) + \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\frac{\rho}{2} \mathbf{u}^2 u_k \right) = -\rho u_i \frac{\partial V}{\partial q_i} - u_i \frac{\partial P}{\partial q_i} + u_i \frac{\partial \pi_{ik}}{\partial q_i} \quad (\text{B.15})$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \varepsilon = -P \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{C} + \Gamma \quad (\text{B.16})$$

où \mathbf{C} et Γ sont respectivement définis par $C_k = \rho/2 \langle w_k \mathbf{w}^2 \rangle$ et $\Gamma = \pi_{ik} \partial u_i / \partial q_k$.

B.2 En mécanique des fluides

B.2.1 Les théorèmes de transport

En mécanique des fluides, ces mêmes équations de conservations de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont obtenues par le théorème de *transport de Leibniz* généralisé à trois dimensions

$$\frac{d}{dt} \iiint_{VC(t)} f(\mathbf{r}, t) d\tau = \iiint_{VC(t)} \frac{\partial f}{\partial t} d\tau + \iint_{SC(t)} f(\mathbf{r}, t) \mathbf{V}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{S} \quad (\text{B.17})$$

où $VC(t)$ est un volume de contrôle, $SC(t)$ est la surface de contrôle, $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ est la vitesse de déplacement de la surface de contrôle, et f peut-être soit une fonction scalaire soit une fonction vectorielle. Dans le cas d'une fonction scalaire, on peut appliquer le théorème de Green-Ostrograsky on obtient

$$\frac{d}{dt} \iiint_{VC(t)} f(\mathbf{r}, t) d\tau = \iiint_{VC(t)} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot \left(f \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \right) \right] d\tau \quad (\text{B.18})$$

mieux connu sous le nom de théorème de *transport de Reynolds*. En remplaçant f par ρ ou par $\rho\varepsilon + 1/2\rho\mathbf{u}^2$ dans l'Éq. B.18, et par $\rho\mathbf{u}$ dans l'Éq. B.17, puis en appliquant respectivement la loi de conservation de la masse, le premier principe de la thermodynamique, et le principe fondamental de la dynamique, on obtient les équations de la section précédente. Ici il n'y a donc pas démonstration rigoureuse des lois de conservations mais uniquement des expressions des équations locales correspondantes.

³Attention, il y a une petite manipulation à faire pour sortir ρ des dérivées temporelles et spatiales dans l'équation B.13, notamment se servir de la conservation de la masse, Eq. B.8.

⁴Là aussi, un peu d'agilité avec la densité massique ρ est nécessaire.

B.2.2 Le tenseur des contraintes σ

Le tenseur des contraintes σ est la force de contact par unité de surface s'appliquant à la surface d'une particule fluide. Comme ni la translation globale de la particule fluide, ni sa rotation n'interviennent dans le transfert de quantité de mouvement d'une cellule fluide à l'autre (la divergence de ces 2 termes étant identiquement nulle), le tenseur σ est symétrique : on peut donc le décomposer sous la forme

$$\sigma_{ik} = -P\delta_{ik} + \pi_{ik} \quad (\text{B.19})$$

où le cas d'un fluide au repos nous indique que P est la pression s'exerçant sur la particule fluide. π est appelé le *tenseur des contraintes visqueuses*.

Il y a 2 approximations faites pour écrire ce tenseur d'une manière assez simple. La première consiste à considérer un **fluide newtonien**, c'est à dire que le tenseur des contraintes visqueuses dépend uniquement et linéairement des valeur instantanées des déformations pures⁵

$$\pi_{ik} = A_{ikjl}e_{jl} \quad (\text{B.20})$$

où là encore les convention d'Einstein sont utilisées et où

$$e_{jl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_j} \right). \quad (\text{B.21})$$

La seconde consiste à considérer le milieu comme étant isotrope ce qui simplifie énormément le tenseur de rang 4 \mathbf{A} : au lieu de 81 coefficients, seuls 2 subsistent et finalement

$$\pi_{ik} = \eta(2e_{ik} - \frac{2}{3}\delta_{ik}e_{ll}) + \zeta\delta_{ik}e_{ll} \quad (\text{B.22})$$

Au final dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (Eq. B.13), la force liée aux contraintes visqueuses s'écrit

$$\nabla \cdot \pi = \eta\nabla^2 \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{1}{3}\eta\right) \nabla [\nabla \cdot \mathbf{u}]. \quad (\text{B.23})$$

Cette équation pouvant prêter à confusion quant à l'utilisation du Laplacien vecteur, il est bon de l'écrire aussi en fonction des composantes :

$$[\nabla \cdot \pi]_i = \eta\Delta u_i + \left(\zeta + \frac{1}{3}\eta\right) \frac{\partial}{\partial x_i} [\nabla \cdot \mathbf{u}]. \quad (\text{B.24})$$

La viscosité η est appelée la viscosité de cisaillement où dynamique et est reliée à la viscosité cinématique $\nu = \eta/\rho$. ζ est la viscosité de volume et est en général faible en comparaison de η . L'équation (Eq. B.23) révèle 2 termes de transfert de moment, l'un lié à la friction des cellules fluides voisines, l'autre lié à la compression des cellules fluides voisines.

⁵Dans le cas général, il devrait pouvoir s'agir d'une fonction a priori quelconque de e .

B.3 Transfert de la chaleur

Reprenons l'équation d'évolution de l'énergie interne (Eq. B.16) mise en place dans en section B.1 :

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\varepsilon = -P\nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{C} + \Gamma. \quad (\text{B.25})$$

où $C_k = \rho/2\langle w_k \mathbf{w}^2 \rangle$ et $\Gamma = \pi_{ik} \partial u_i / \partial q_k$. Le terme $-P\nabla \cdot \mathbf{u}$ correspond au travail des forces de pression, tandis que $\nabla \cdot \mathbf{C}$ et Γ sont des termes de transfert de chaleur d'une cellule fluide à une cellule fluide voisine, provenant respectivement des gradients de température et de la friction visqueuse entre ces cellules.

B.3.1 Conduction thermique

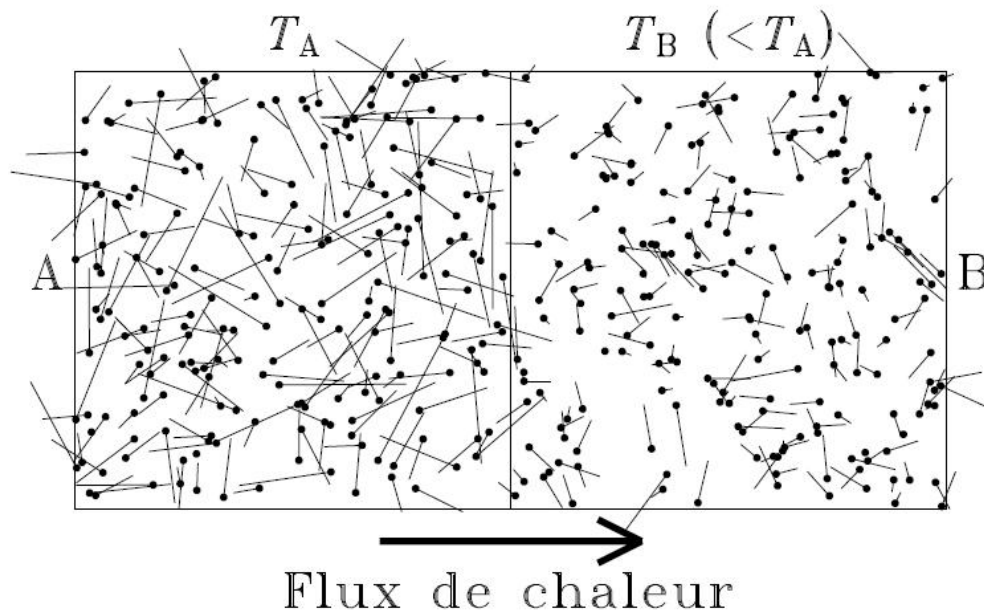


FIG. B.1 – Schéma explicatif du processus microscopique de conduction thermique entre deux volumes de fluide A et B à des températures T_A et T_B (Charbonneau 2007).

Comme l'indique l'équation B.12, la température, du point de vue microscopique, est une mesure de la dispersion de vitesse, et donc de l'énergie cinétique moyenne des constituants microscopiques. La Fig. B.1 (Charbonneau 2007) montre le principe de la conduction thermique, à l'échelle microscopique. Les particules traversant du volume A vers le volume B ont, en moyenne, une énergie cinétique plus grande que celle traversant de B vers A. Les collisions inévitables entre les constituants microscopiques engendrent donc un transfert d'énergie, même si le nombre de particules dans chaque volume reste constant. Ce transfert est représenté par le terme $\nabla \cdot \mathbf{C}$ de l'équation B.16, où \mathbf{C} est le flux de chaleur. C'est Newton qui a postulé en premier une relation linéaire

entre \mathbf{C} est le gradient de température

$$\mathbf{C} = -\kappa \nabla T \quad (\text{B.26})$$

une expression qui fait intervenir le coefficient de transport κ (en $\text{erg.K}^{-1}.\text{cm}^{-1}.\text{s}^{-1}$), appelé la conductivité thermique, et où le signe moins provient du fait que la chaleur s'écoule du "chaud" vers le "froid".

B.3.2 Chauffage visqueux

La diffusion visqueuse provient des échanges de quantité de mouvement par collisions entre des constituants microscopiques présentant un gradient de vitesse à l'échelle macroscopique. Reprenons la Fig. B.1 mais imaginons cette fois que les températures dans les volumes A et B soient égales et que B soit animé d'une vitesse d'ensemble dans une direction \mathbf{l} . Le nombre moyen de particules échangées entre les 2 éléments de volume est nul (autant de A vers B que l'inverse), mais les particules provenant de B fournissent une quantité de mouvement non nul dans la direction \mathbf{l} : si bien que $dp_l/dt > 0$ en A et < 0 en B. Le processus est donc analogue à la conduction thermique à la différence près que ce qui est échangé entre les volumes A et B n'est pas de l'énergie cinétique, mais une composante de la quantité de mouvement. Ce transfert provoque un chauffage représenté par le terme Γ de l'équation B.16. Comme nous l'avons vu dans la section précédente, l'expression du tenseur des contraintes visqueuses π dans le cadre d'un fluide newtonien isotrope simplifie le calcul de Γ . Si en outre, on considère un fluide incompressible, la trace du tenseur des déformations pures \mathbf{e} (elle même égale à $\nabla \cdot \mathbf{u}$) est nulle, et donc Γ s'écrit :

$$\Gamma = \eta \sum_{i,j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (\text{B.27})$$

qui fait intervenir le coefficient de transport η (en $\text{g.cm}^{-1}.\text{s}^{-1}$), appelé viscosité dynamique.

B.3.3 Conductivité et viscosité

Les deux coefficients de transport κ et η , présentés plus haut, peuvent être calculés à partir des propriétés physiques et cinétiques des constituants microscopiques du fluide étudié. En considérant un gaz parfait et une distribution maxwellienne des vitesses, on obtient les ordres de grandeurs de ces coefficients (Guyon *et al.* 2001)

$$\kappa \sim \frac{1}{2} \rho c_v \lambda u_T \sim \frac{1}{2} \rho c_v \lambda \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (\text{B.28})$$

$$\eta \sim \frac{1}{3} \rho \lambda u_T \sim \frac{1}{3} \rho \lambda \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (\text{B.29})$$

où c_v est la capacité calorifique à volume constant (qui pour un gaz parfait monoatomique vaut $3k/2$), λ est le libre parcours moyen des particules de masse m , u_T est la vitesse thermique, approximée ici à la vitesse quadratique moyenne, et ρ est la densité du gaz. En intégrant ces expressions dans l'équation d'évolution de l'énergie

interne (Eq. B.16), on peut comparer les importances relatives des transferts d'énergie par conduction et par diffusion visqueuse. On obtient

$$\frac{\Gamma}{\nabla \cdot \mathbf{C}} \sim \mathcal{M}_S^2 \left(\frac{l_T}{l_u} \right)^2 \quad (\text{B.30})$$

où \mathcal{M}_S est le nombre de Mach, et l_T et l_u sont les échelles caractéristiques de variations de la température et de la vitesse. Dans le modèle TDR, les échelles l_T et l_u étant similaires, ce rapport est de l'ordre de 10. C'est pourquoi dans notre travail, nous avons négligé la conduction thermique.

Annexe C

Les équations de la MHD

C.1 Évolution du champ magnétique dans un fluide ionisé

C.1.1 Simplifications dans le milieu interstellaire

Les équations de Maxwell régissent l'évolution du champ magnétique dans un milieu¹ :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{E} &= 4\pi\rho \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Dans le cas du milieu interstellaire, ces équations peuvent être simplifiées en effectuant plusieurs approximations. Tout d'abord, on peut négliger le courant de déplacement $\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$. Cette approximation est valable si les vitesses des charges sont petites devant la vitesse de la lumière. La seconde approximation consiste à négliger la différence de vitesse entre les particules ionisées et les électrons. Pour la justifier, nous allons étudier le courant \mathbf{j} . Celui-ci s'écrit en fonction des densités et des vitesses ioniques et électroniques :

$$\mathbf{j} = Zen_i \mathbf{u}_i - en_e \mathbf{u}_e \quad (\text{C.2})$$

Or, le milieu étant globalement neutre, la charge $\rho = Zen_i - en_e$ est nulle. Le courant s'écrit donc $\mathbf{j} = -en_e v'_e$, où v'_e est la différence de vitesse entre les électrons et les ions. Cette différence de vitesse peut donc être évaluée dans le cas astrophysique qui nous intéresse par la dernière équation de Maxwell. En effet, soit un nuage de taille $L \sim 10$ pc, ayant une densité électronique $n_e \sim 10^{-2} \text{ cm}^{-3}$ et baignant dans un champ magnétique de $10 \mu\text{G}$, on trouve :

$$|v'_e| \approx \frac{cB}{4\pi en_e L} \sim 5 \cdot 10^{-3} \left(\frac{L}{10 \text{ pc}} \right)^{-1} \text{ km.s}^{-1} \quad (\text{C.3})$$

Cette valeur de v'_e étant très inférieure aux autres vitesses caractéristiques du nuages qui atteignent quelques km.s^{-1} , on peut la négliger dans notre travail. La dernière

¹Attention, ces expressions sont différentes de celles que l'on trouve dans la littérature pour la simple raison que ces gredins d'astrophysiciens travaillent en cgs.

approximation consiste à relier \mathbf{j} au champ électrique. Dans le référentiel des ions on a :

$$m_e \frac{d\mathbf{v}'_e}{dt} = -e \left(\mathbf{E}' + \frac{\mathbf{v}'_e}{c} \times \mathbf{B}' \right) - m_e \nu_c \mathbf{v}'_e \quad (\text{C.4})$$

où ν_c est la fréquence de collisions ion-électron. Finalement on obtient la loi d'Ohm :

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}' = \frac{n_e e^2}{m_e \nu_c} \mathbf{E}' \quad (\text{C.5})$$

où σ est la conductivité.

C.1.2 Équation d'évolution du champ magnétique

Puisque l'on considère que les vitesses des ions et des électrons sont faibles face à la vitesse de la lumière (première approximation), on peut utiliser les relations de passage non relativistes entre le référentiel des ions et celui du laboratoire. Dans ce cas :

$$\begin{aligned} \mathbf{B}' &= \mathbf{B} \\ \mathbf{E}' &= \mathbf{E} + \frac{\mathbf{u}_i}{c} \times \mathbf{B}. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

En utilisant ces relations ainsi que la loi d'Ohm dans l'équation d'induction de Faraday, on obtient :

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{j}}{\sigma} - \frac{\mathbf{u}_i}{c} \times \mathbf{B}. \quad (\text{C.7})$$

Il ne reste qu'à exprimer le courant en fonction de \mathbf{B} et en utilisant l'expression du rotationnel de \mathbf{E} , on obtient finalement l'équation d'évolution du champ magnétique :

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{u}_i) = \mu \nabla^2 \mathbf{B} \quad (\text{C.8})$$

où l'on voit apparaître la diffusivité magnétique $\mu = c^2/4\pi\sigma$.

C.1.3 Équation du champ gelé

Dans le cas du milieu interstellaire l'équation C.8 peut encore être simplifiée. Dans cette équation, l'ordre de grandeur du temps de diffusion magnétique est donné par $\tau_{\text{diff}} \sim L^2/\mu$ où L est l'échelle de variation de \mathbf{B} . La conductivité σ du milieu interstellaire diffus² $\sigma \sim 10^{11} \text{ s}^{-1}$ est très grande. À l'échelle de quelques AU, qui est l'échelle minimale considérée dans ce travail, on obtient donc un temps de diffusion magnétique $\tau_{\text{diff}} \sim 10^{13}$ ans. Celle-ci est largement supérieure aux échelles de temps que l'on considère.

L'équation C.8 se réduit donc à l'équation du champ gelé

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{u}_i) = 0 \quad (\text{C.9})$$

appelée ainsi car elle implique une conservation du flux de champ magnétique au travers d'une surface se déplaçant à la vitesse du fluide ionisé ; autrement dit, les lignes de champ se déplacent avec le fluide.

²Obtenue en prenant une densité électronique $n_e \sim 10^{-2} \text{ cm}^{-3}$, et une fréquence de collision ion-électron $\nu_c \sim 2.5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ (Spitzer 1978).

C.2 Évolution du champ de vitesse du fluide ionisé

Un fluide partiellement ionisé contient a priori trois composantes : les neutres, les ions et les électrons. Dans la section précédente, on a montré que les vitesses des électrons et des ions sont semblables dans le milieu interstellaire diffus (par rapport aux vitesses que l'on considère). De plus le temps d'équipartition des températures des ions et des électrons est donné par Spitzer (1978)

$$0.1 \left(\frac{T}{1000\text{K}} \right)^{3/2} \left(\frac{n_i}{3 \cdot 10^{-3} \text{cm}^{-3}} \right)^{-1} \text{ an} \quad (\text{C.10})$$

C'est pourquoi, dans ce travail, les ions et les électrons sont traités comme un seul et unique fluide.

Dans un gaz partiellement ionisé, une cellule du fluide ionisé est soumise à l'action de 4 forces.

- La force de Lorentz qui s'écrit sous la forme

$$\mathbf{F}_L = Z e n_i \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{u}_i}{c} \times \mathbf{B} \right) - e n_e \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{u}_e}{c} \times \mathbf{B} \right). \quad (\text{C.11})$$

En utilisant la quatrième équation de Maxwell et le fait que le fluide est globalement neutre on obtient alors

$$\mathbf{F}_L = \frac{1}{4\pi} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}. \quad (\text{C.12})$$

qui peut être réécrit de manière à faire apparaître les termes de pression et de tension magnétique, soit

$$\mathbf{F}_L = \frac{1}{4\pi} (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{B} - \frac{1}{8\pi} \nabla (|\mathbf{B}|^2). \quad (\text{C.13})$$

- Les forces de friction qu'exercent les neutres sur les ions et les électrons qui s'expriment

$$\mathbf{F}_{in} = \frac{\rho_n \rho_i}{\mu_n + \mu_i} \langle \sigma u \rangle_{in} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_i) + \frac{\rho_n \rho_e}{\mu_n + \mu_e} \langle \sigma u \rangle_{en} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_e) \quad (\text{C.14})$$

où $\langle \sigma u \rangle_{in}$ et $\langle \sigma u \rangle_{en}$, μ_n , μ_i et μ_e sont respectivement les taux de transfert de moment par collisions ion-neutre et électron-neutre, et les masses moyennes par particules³ des neutres, des ions et des électrons. Dans l'équation ci-dessus, le deuxième terme est négligeable face au premier (Balbus & Hawley, comm. priv.), si bien que l'on a simplement

$$\mathbf{F}_{in} = \frac{\rho_n \rho_i}{\mu_n + \mu_i} \langle \sigma u \rangle_{in} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_i) \quad (\text{C.15})$$

où $\langle \sigma u \rangle_{in} = 2.2 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ est donné par Flower & Pineau des Forêts (1995, Appendice A).

- La force provenant du gradient de pression thermique du fluide ionisé.
- Et la force d'advection $\rho_i (\mathbf{u}_i \cdot \nabla) \mathbf{u}_i$.

³Rappelons que $1.1 < \mu_n < 2.4$, $\mu_i = 12$ car l'ion dominant du milieu diffus est C^+ et $\mu_e = 10^{-3}$.

En tenant compte de ces différentes composantes, et en supposant l'incompressibilité, on obtient finalement l'équation d'évolution du champ de vitesse du fluide ionisé dans le milieu interstellaire diffus, soit

$$\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} + (\mathbf{u}_i \cdot \nabla) \mathbf{u}_i = -\frac{1}{\rho_i} \nabla P_i + \frac{\rho_n}{\mu_n + \mu_i} \langle \sigma u \rangle_{in} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_i) + \frac{1}{4\pi\rho_i} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad (\text{C.16})$$

que nous avons utilisé dans notre travail pour calculer les évolutions couplées des champs de vitesse et magnétique à l'intérieur d'une structure cohérente de la turbulence de type vortex (cf. Chap. 8).

Annexe D

Chimie dans un vortex magnétisé

Dans ce chapitre, nous présentons quelques résultats complémentaires du modèle TDR : l'analyse des réseaux chimiques.

D.1 Comparaisons des chaînes de réactions dominantes dans le milieu ambiant et dans un vortex magnétisé

Les Figs. D.1, D.2, D.3 & D.4 comparent les réactions qui contrôlent la formation et la destruction de plusieurs espèces : (1) dans un milieu dont la chimie est gouvernée par le rayonnement UV (panneaux du haut) ; et (2) dans un vortex magnétisé où la dissipation de l'énergie turbulente active certaines réactions clef endoénergétiques (panneaux du bas). Les énergies impliquées dans ce type de réaction sont indiquées en K. Pour chaque diagramme, seules les réactions qui, au total, participent à plus de 70 % à la formation ou à la destruction des espèces sont affichées. Nous avons surlignées en gris les espèces pour lesquelles le diagramme ne montre pas (par souci de simplicité) les réactions responsables de l'évolution de leurs abondances : ceci ne concerne que les atomes N et N⁺.

Un schéma récurrent apparaît dans chaque figure : le réseau impliqué dans l'hydrogénation du carbone neutre et ionisé. En effet, on remarque que les modifications de cette chaîne de réactions, dues à la dissipation d'énergie par frictions visqueuse et ion-neutre dans le vortex, et en particulier l'augmentation du taux de formation de CH₃⁺, sont responsables de nombreux changements sur l'ensemble du réseau chimique.

D.2 Évolution des taux des réactions dans un vortex magnétisé

Les Figs. D.14-D.18 montrent, quant à elles, pour plusieurs espèces X, l'évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(X)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé. Seules les réactions qui, en un point au moins du vortex, contribuent à plus de 30 % à la formation ou à la destruction de l'espèce X sont prises en compte dans ces figures. Comme on peut le constater pour chaque espèce considérée ici, les importances relatives des réactions sont modifiées à l'intérieur d'un vortex. De plus, même si le taux d'une réaction ne dépend pas de la température, l'augmentation

des abondances des espèces réactantes est suffisante pour que la contribution de cette réaction à $dn(X)/dt$ augmente significativement.

D.2. ÉVOLUTION DES TAUX DES RÉACTIONS DANS UN VORTEX MAGNÉTISÉ 247

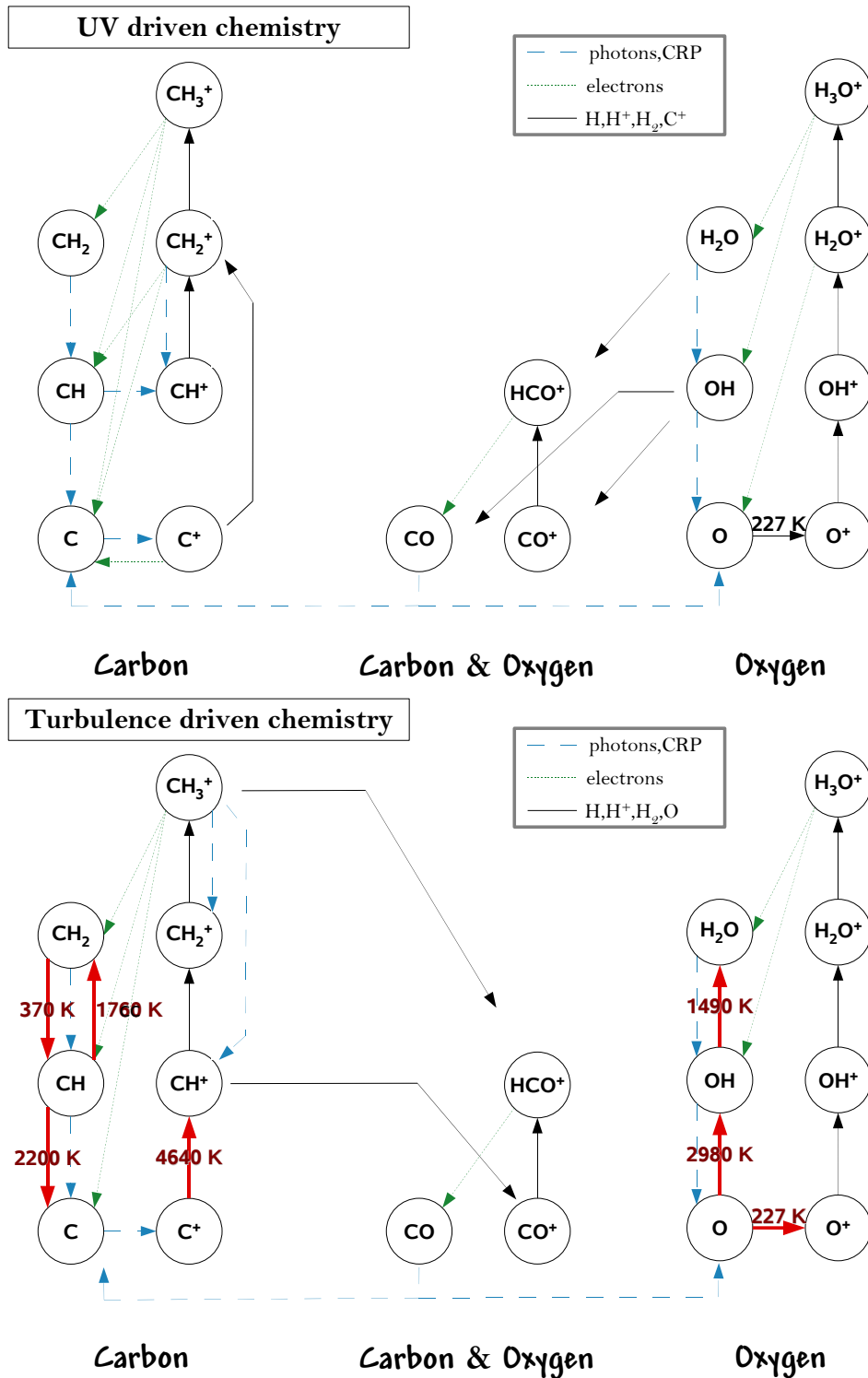


FIG. D.1 – Réseau de réactions qui contrôle l'évolution des abondances des espèces affichées, dans le milieu diffus (panneau du haut) pour $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $A_V = 0.4$, et dans un vortex magnétisé (panneau du bas) pour $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Pour chaque espèce, seules les réactions qui, au total, contribuent à plus de 70 % à leur formation et à leur destruction sont affichées. Les énergies impliquées dans les réactions endoénergétiques sont également affichées (en K).

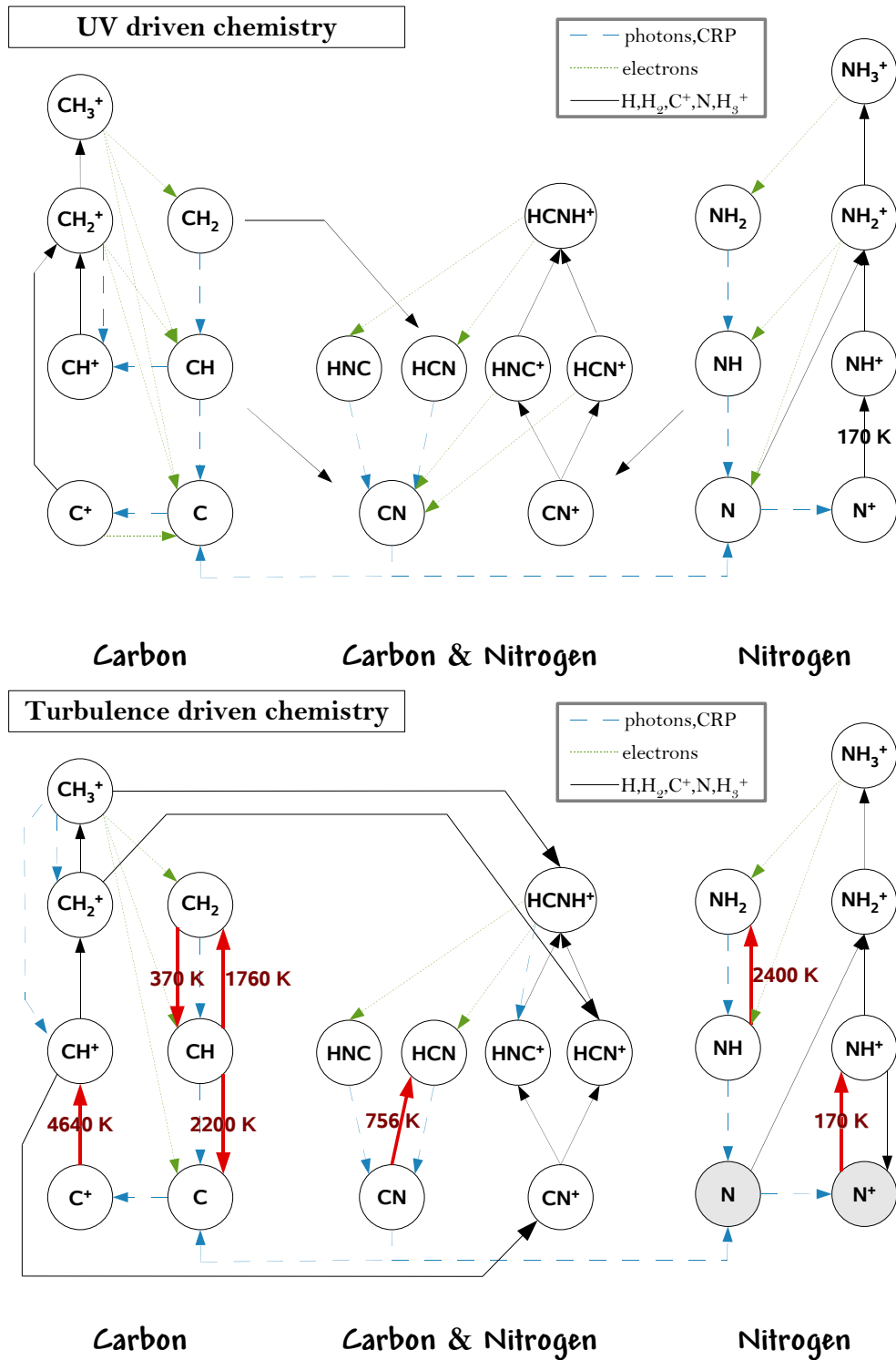


FIG. D.2 – Réseau de réactions qui contrôle l'évolution des abondances des espèces affichées, dans le milieu diffus (panneau du haut) pour $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $A_{\text{V}} = 0.4$, et dans un vortex magnétisé (panneau du bas) pour $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Pour chaque espèce, seules les réactions qui, au total, contribuent à plus de 70 % à leur formation et à leur destruction sont affichées. Les énergies impliquées dans les réactions endoénergétiques sont également affichées (en K). Les réactions qui gouvernent la formation et la destruction de N et N⁺ ne sont pas affichées ici (par souci de simplicité).

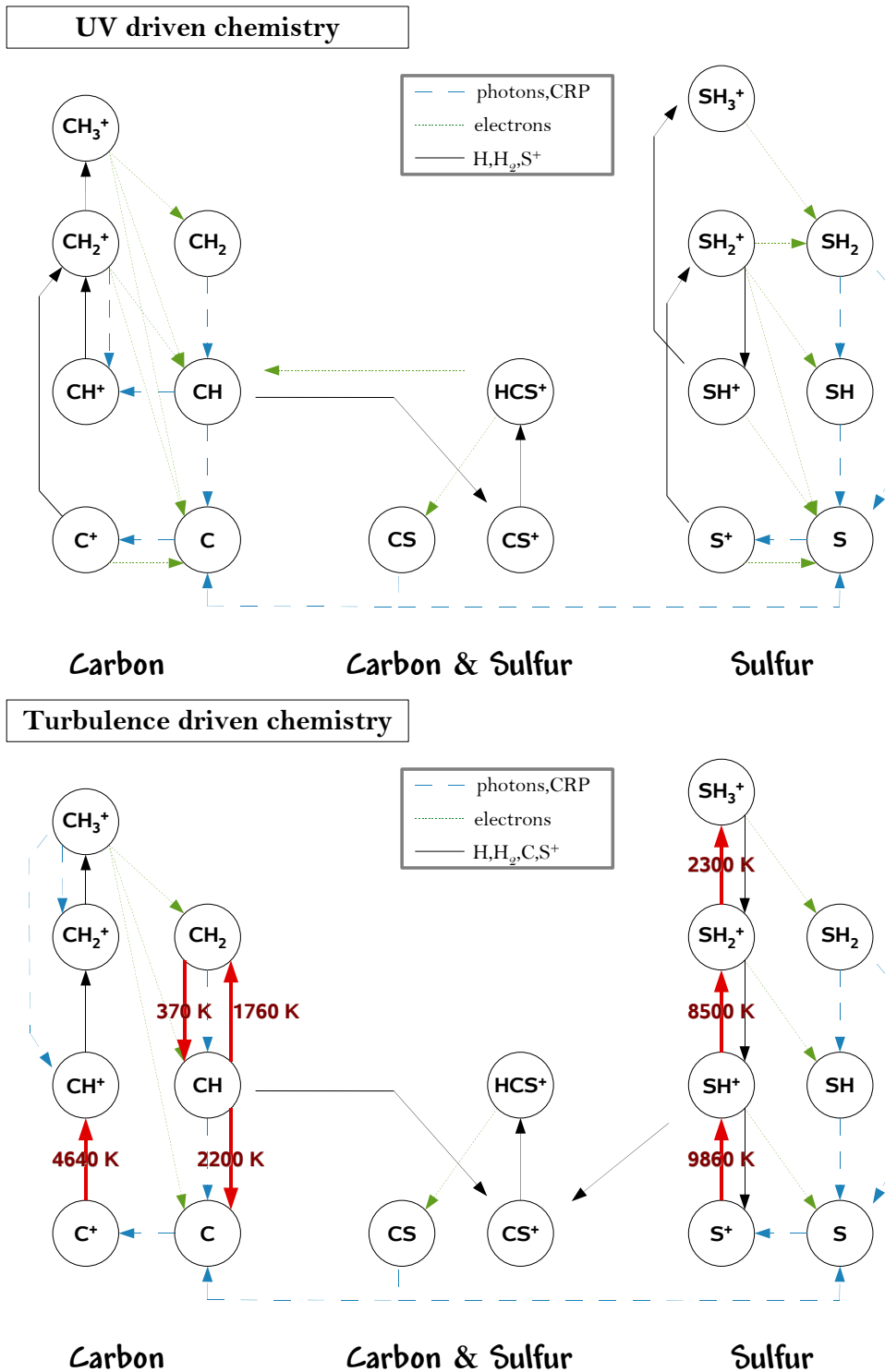


FIG. D.3 – Réseau de réactions qui contrôle l'évolution des abondances des espèces affichées, dans le milieu diffus (panneau du haut) pour $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $A_V = 0.4$, et dans un vortex magnétisé (panneau du bas) pour $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Pour chaque espèce, seules les réactions qui, au total, contribuent à plus de 70 % à leur formation et à leur destruction sont affichées. Les énergies impliquées dans les réactions endoénergétiques sont également affichées (en K).

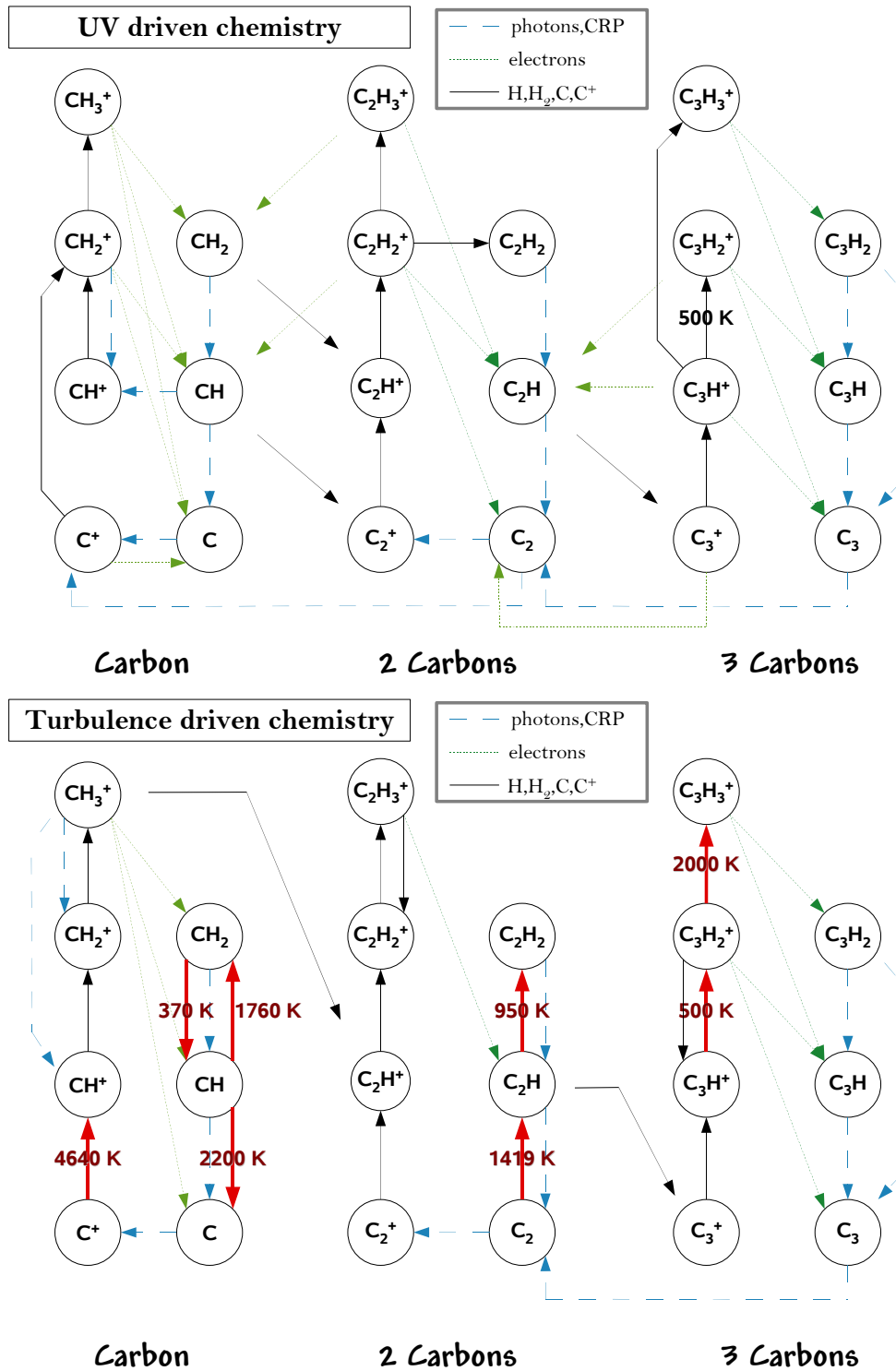


FIG. D.4 – Réseau de réactions qui contrôle l'évolution des abondances des espèces affichées, dans le milieu diffus (panneau du haut) pour $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $A_{\text{V}} = 0.4$, et dans un vortex magnétisé (panneau du bas) pour $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Pour chaque espèce, seules les réactions qui, au total, contribuent à plus de 70 % à leur formation et à leur destruction sont affichées. Les énergies impliquées dans les réactions endoénergétiques sont également affichées (en K).

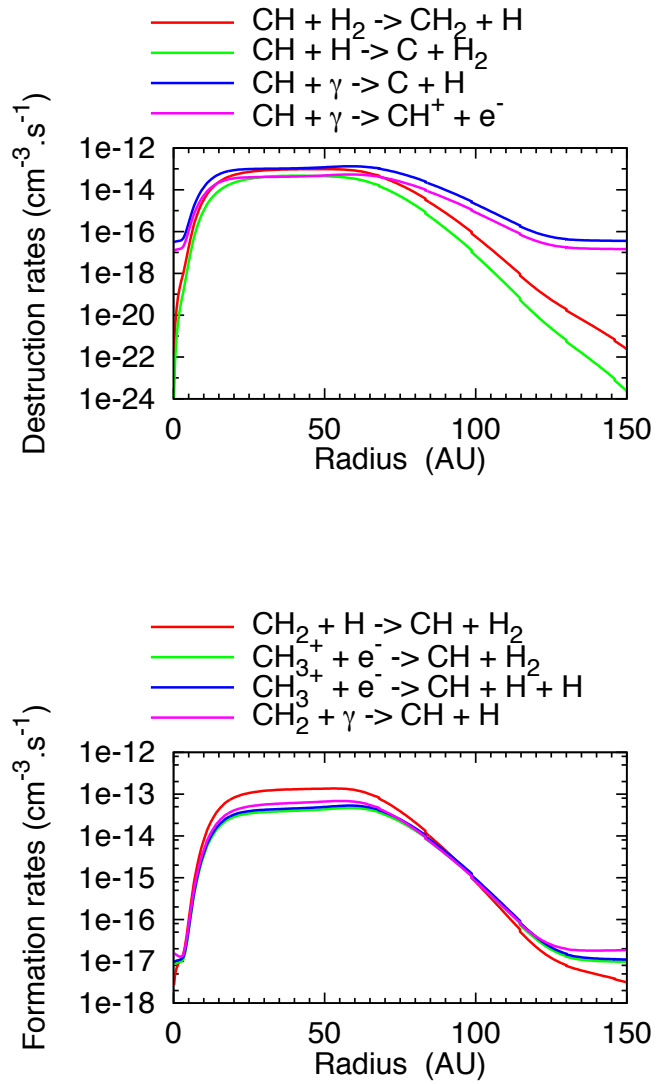


FIG. D.5 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CH})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

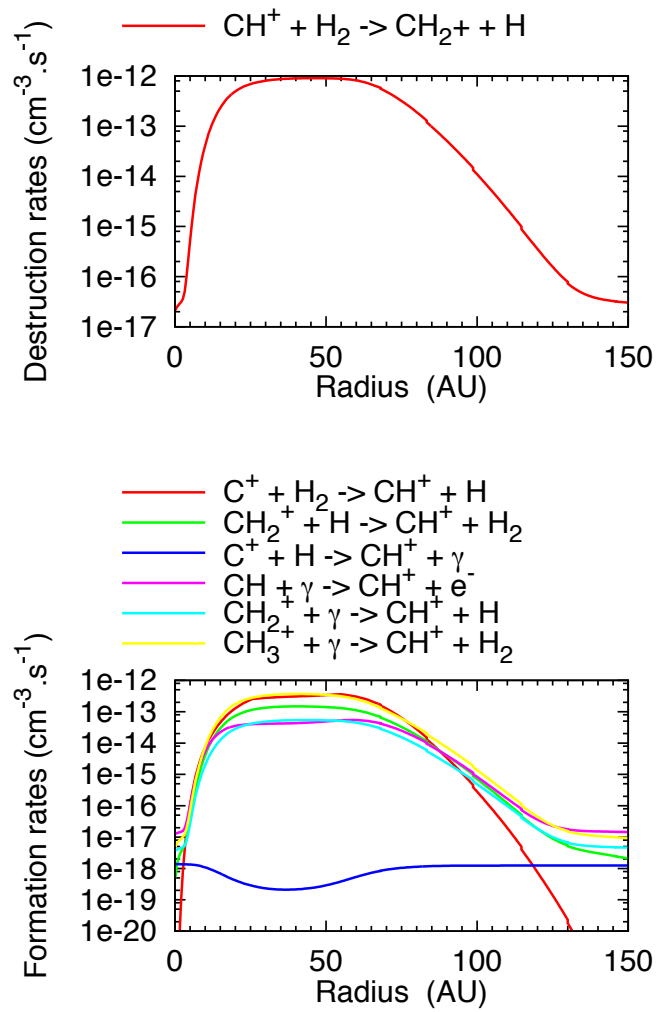


FIG. D.6 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CH}^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

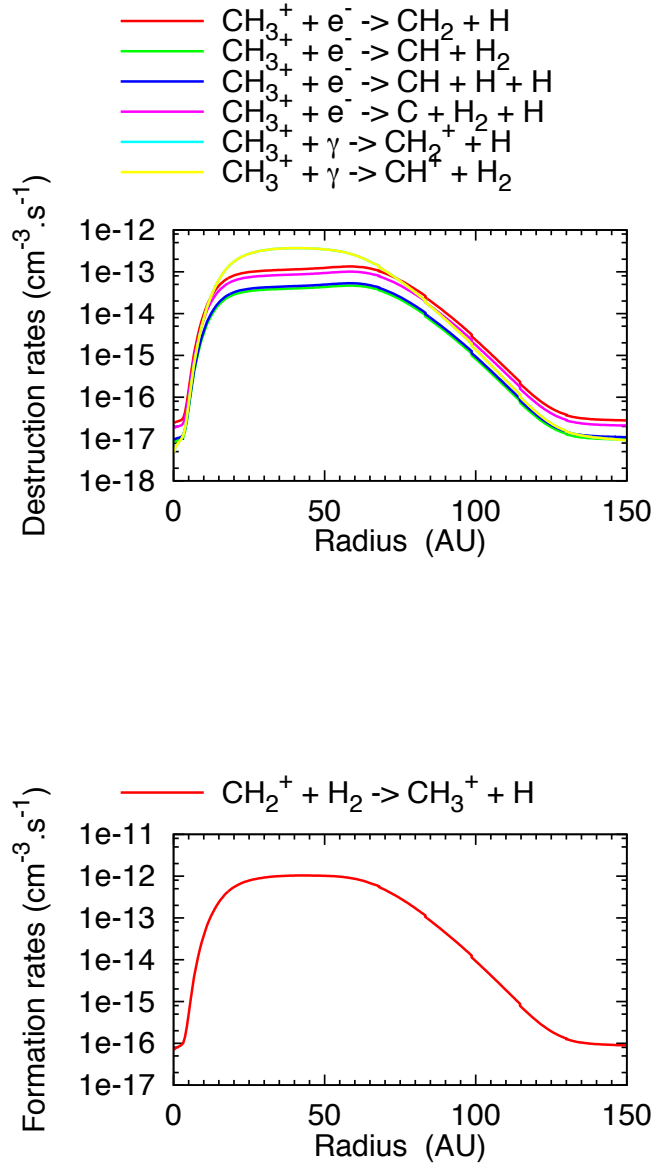


FIG. D.7 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CH}_3^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

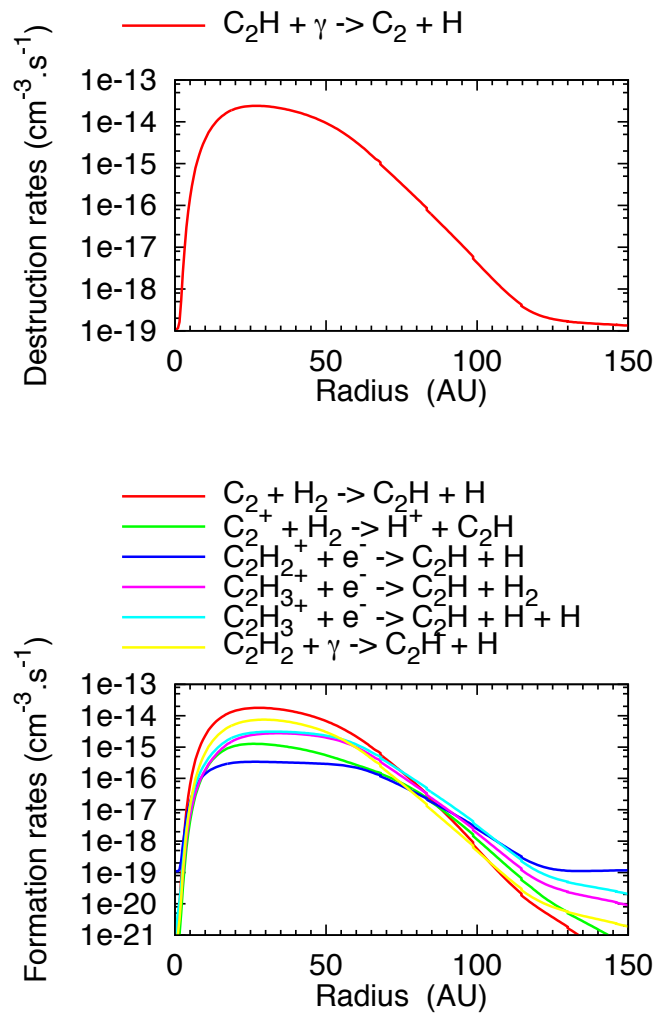


FIG. D.8 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(C_2H)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

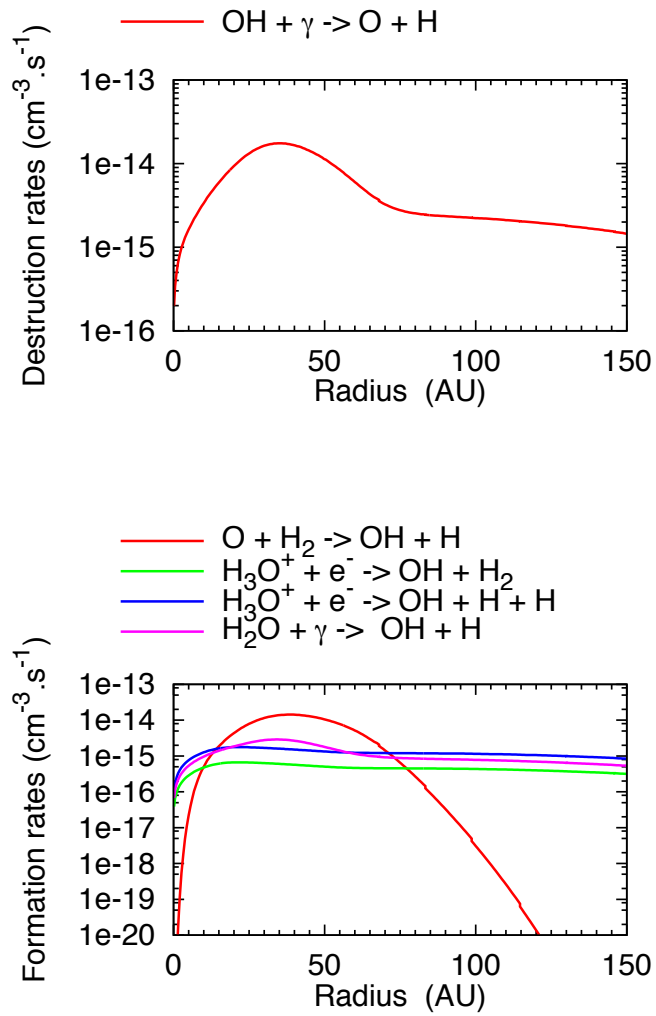


FIG. D.9 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{OH})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_H = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

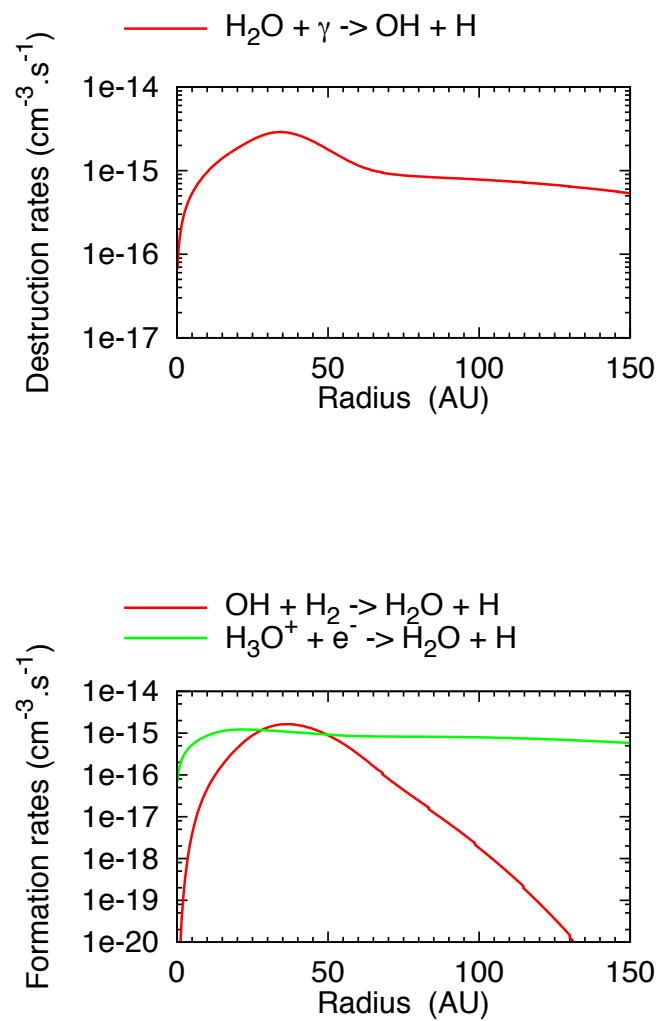


FIG. D.10 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{H}_2\text{O})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

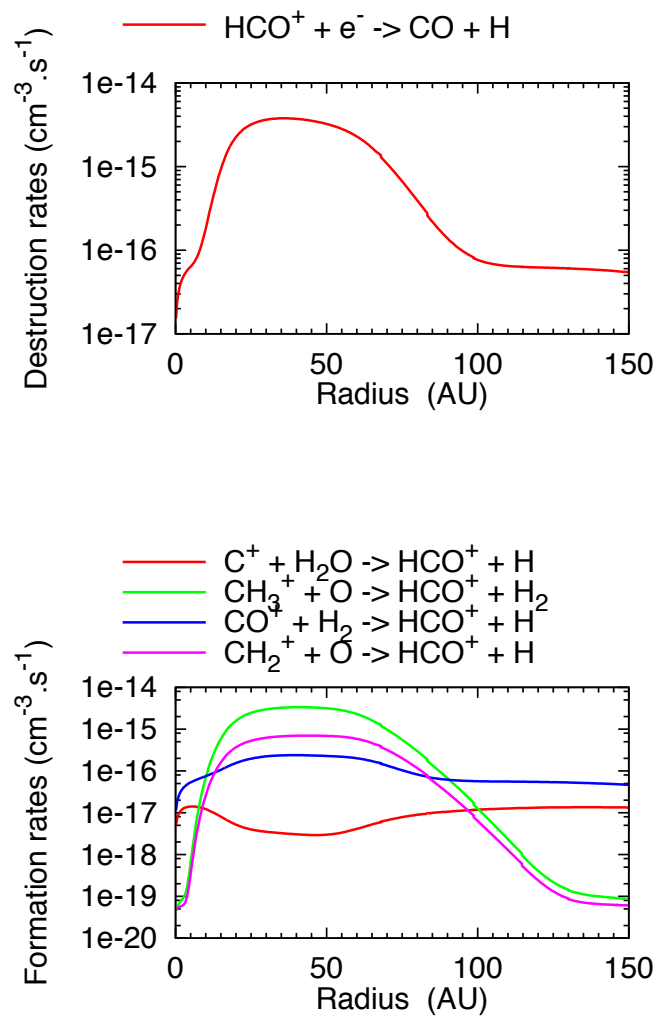


FIG. D.11 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{HCO}^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

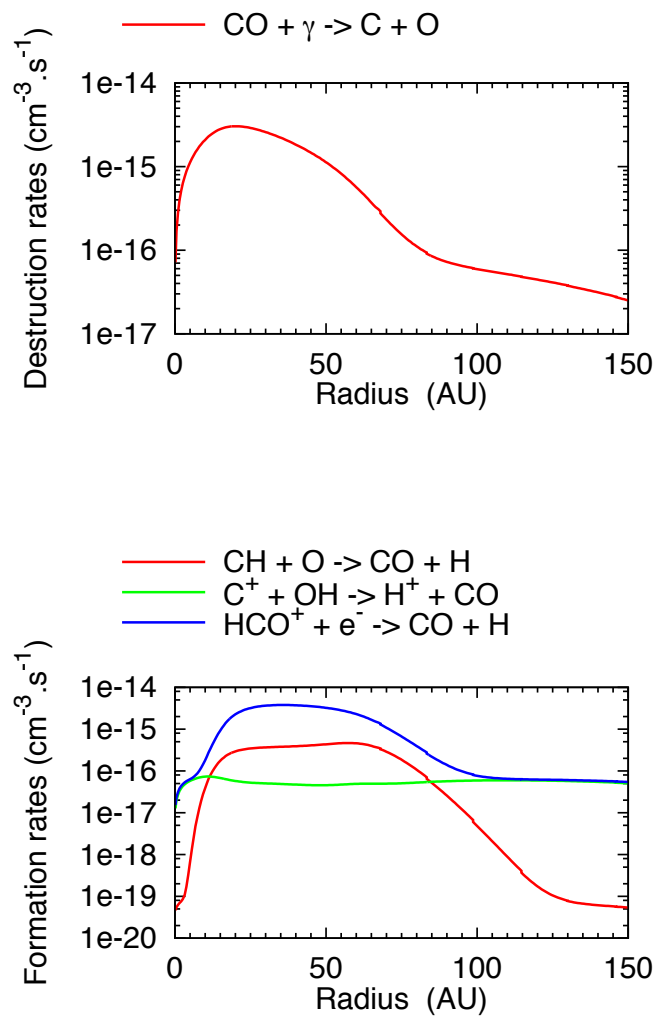


FIG. D.12 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CO})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

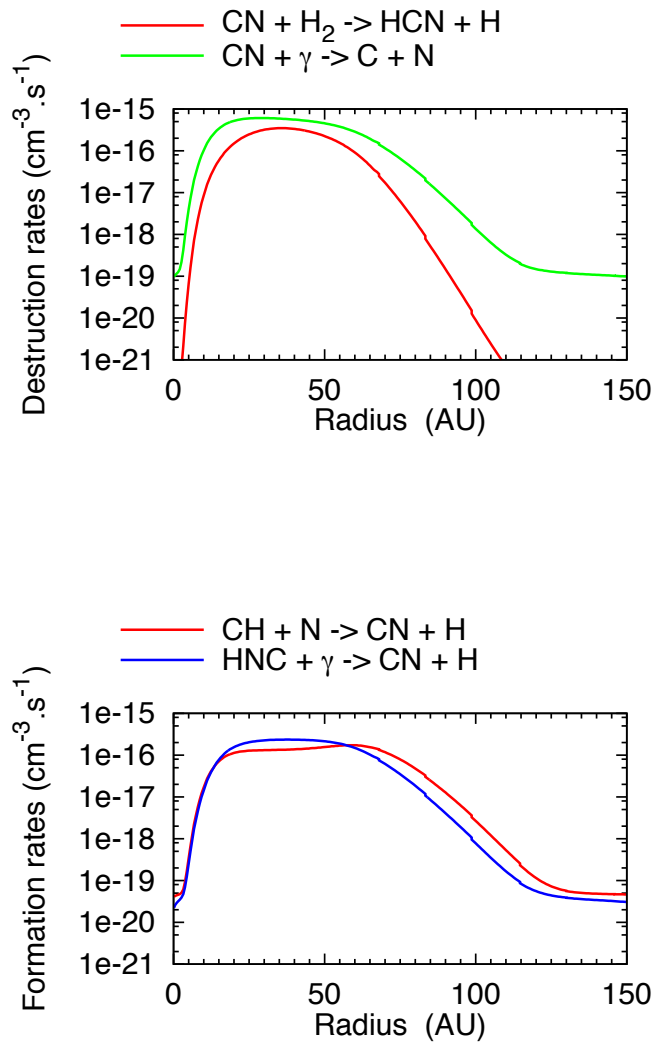


FIG. D.13 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CN})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

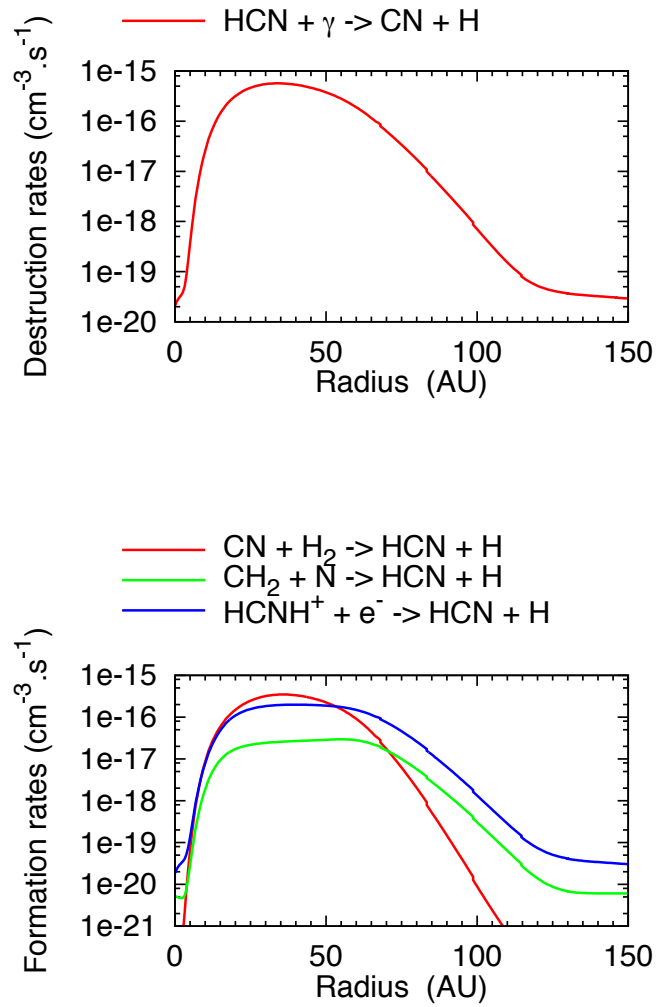


FIG. D.14 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{HCN})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

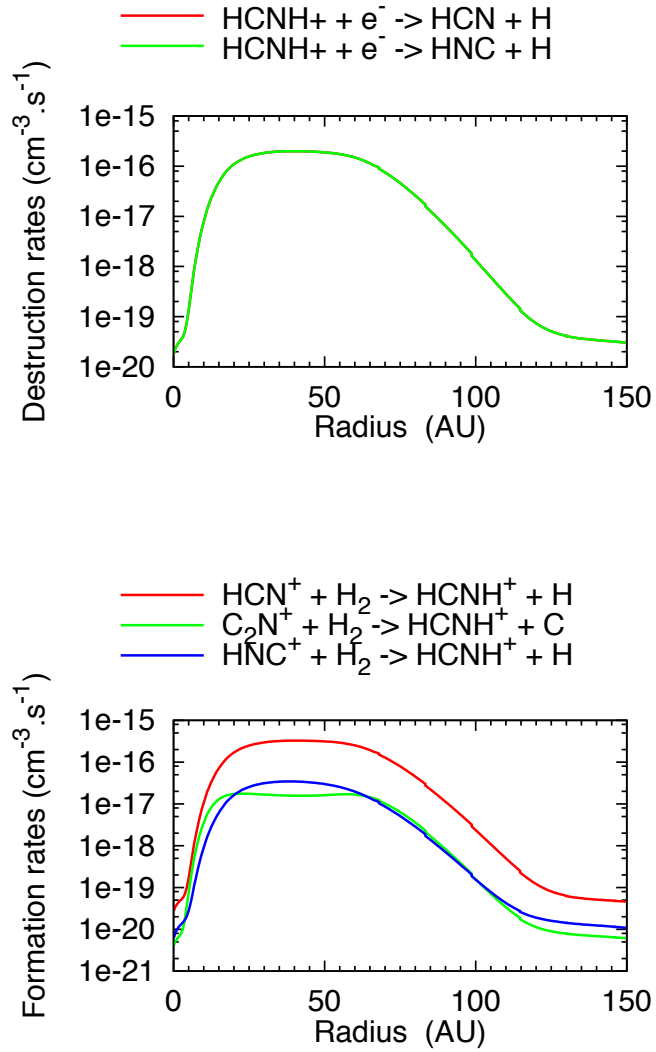


FIG. D.15 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{HCNH}^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

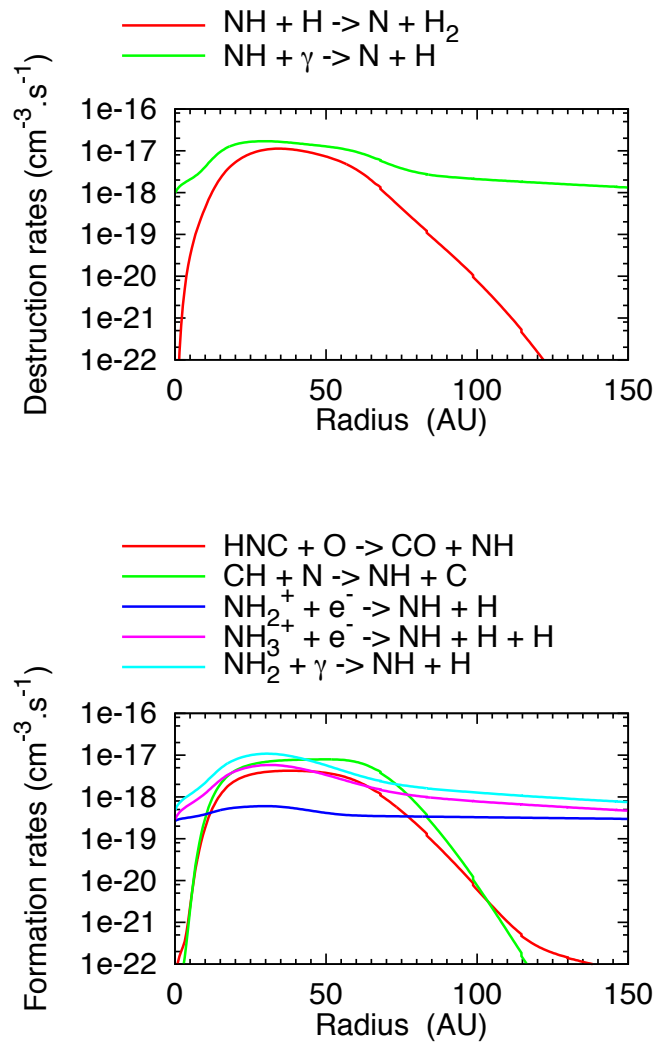


FIG. D.16 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{NH})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

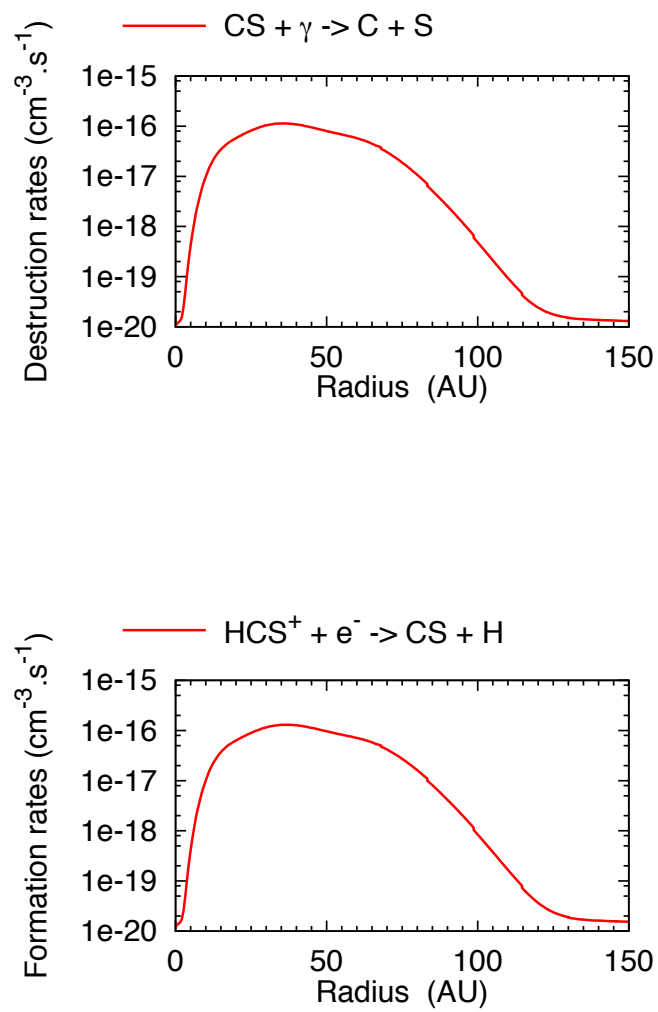


FIG. D.17 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{CS})/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

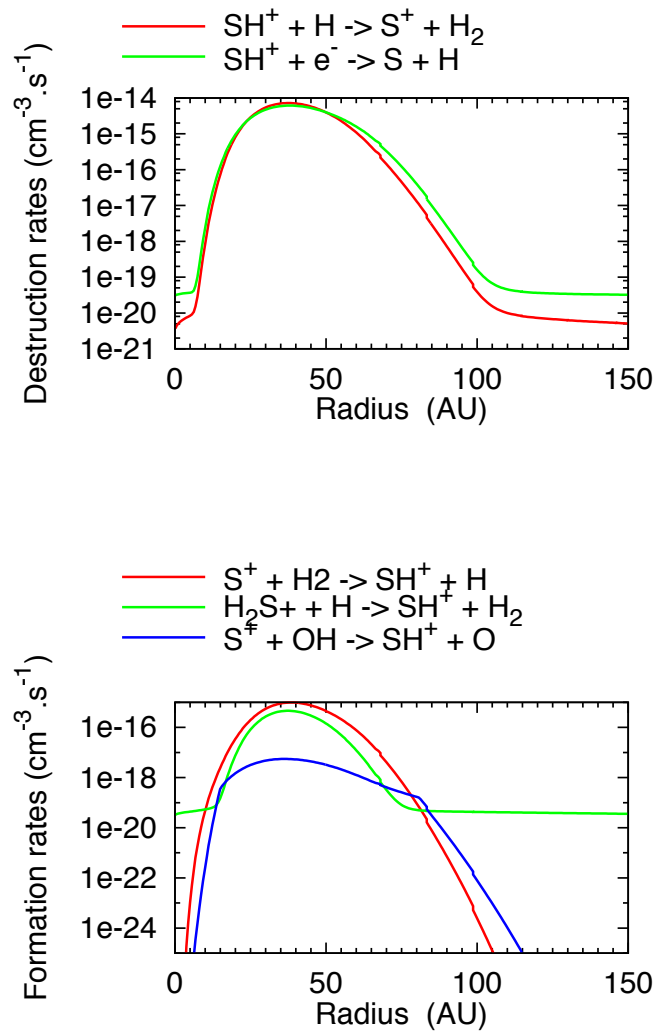


FIG. D.18 – Évolution de la contribution des réactions dominantes à $dn(\text{SH}^+)/dt$ en fonction de la position r dans un vortex magnétisé, défini par le jeu de paramètres : $A_V = 0.4$, $n_{\text{H}} = 50 \text{ cm}^{-3}$ et $a = 3 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$.

Annexe E

Quelques outils mathématiques

E.1 Opérateurs en coordonnées cylindriques

Soit le système de coordonnées cartésiennes usuel ($\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$) et le repère de coordonnées cylindriques ($\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_z$), on note dans cette section F et \mathbf{V} des champs scalaire et vectoriel quelconques.

$$\nabla F = \frac{\partial F}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial F}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{\partial F}{\partial z} \mathbf{e}_z \quad (\text{E.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rV_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial V_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial V_z}{\partial z} \quad (\text{E.2})$$

$$\nabla \times \mathbf{V} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial V_z}{\partial \theta} - \frac{\partial V_\theta}{\partial z} \right) \mathbf{e}_r + \left(\frac{\partial V_r}{\partial z} - \frac{\partial V_z}{\partial r} \right) \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (rV_\theta) - \frac{\partial V_r}{\partial \theta} \right) \mathbf{e}_z \quad (\text{E.3})$$

$$\nabla^2 F = \frac{\partial^2 F}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial F}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} \quad (\text{E.4})$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{V} &= \left[\frac{\partial^2 V_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V_r}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 V_r}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial V_\theta}{\partial \theta} - \frac{V_r}{r^2} \right] \mathbf{e}_r \\ &+ \left[\frac{\partial^2 V_\theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 V_\theta}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_\theta}{\partial r} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial V_r}{\partial \theta} - \frac{V_\theta}{r^2} \right] \mathbf{e}_\theta \\ &+ \left[\frac{\partial^2 V_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_z}{\partial r} \right] \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

E.2 Les relations utiles

Ci-dessous sont rappelées quelques relations utiles dans la reformulation des équations de la dynamique. En ce qui concerne un champ unique scalaire ou vectoriel (relations 1-4) et en ce qui concerne 2 champs couplés (relations 5-10) :

1. $\nabla \cdot (\nabla F) = \nabla^2 F$
 2. $\nabla \times (\nabla F) = 0$
 3. $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{V}) = 0$
 4. $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{V}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{V}) - \nabla^2 \mathbf{V}$
 5. $\nabla(F_1 F_2) = F_2 \nabla F_1 + F_1 \nabla F_2$
 6. $\nabla \cdot (F \mathbf{V}) = \mathbf{V} \nabla F + F(\nabla \cdot \mathbf{V})$
 7. $\nabla \times (F \mathbf{V}) = (\nabla F) \times \mathbf{V} + F(\nabla \times \mathbf{V})$
 8. $\nabla \cdot (\mathbf{V}_1 \times \mathbf{V}_2) = \mathbf{V}_2 \cdot (\nabla \times \mathbf{V}_1) - \mathbf{V}_1 \cdot (\nabla \times \mathbf{V}_2)$
 9. $\nabla \times (\mathbf{V}_1 \times \mathbf{V}_2) = (\nabla \cdot \mathbf{V}_2) \mathbf{V}_1 - (\nabla \cdot \mathbf{V}_1) \mathbf{V}_2 + (\mathbf{V}_2 \cdot \nabla) \mathbf{V}_1 - (\mathbf{V}_1 \cdot \nabla) \mathbf{V}_2$
 10. $\nabla(\mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{V}_2) = \mathbf{V}_1 \times (\nabla \times \mathbf{V}_2) + \mathbf{V}_2 \times (\nabla \times \mathbf{V}_1) + (\mathbf{V}_2 \cdot \nabla) \mathbf{V}_1 + (\mathbf{V}_1 \cdot \nabla) \mathbf{V}_2$
- (E.6)

E.3 Molécules observées dans le milieu interstellaire

Molécules hydrogénées					
H_2	HD	H_3^+	H_2D^+		
Molécules carbonées					
<i>CH</i>	CH⁺	C_2	CH_2	C_2H	* C_3
CH_3	C_2H_2	C_3H	c- C_3H	* CH_4	C_4
c- C_3H_2	H_2CCC	C_4H	* C_5	* C_2H_4	C_5H
H_2C_4	* HC_4H	CH_3C_2H	C_6H	* HC_6H	H_2C_6
* C_7H	CH_3C_4H	C_8H	* C_6H_6		
Molécules oxygénées					
<i>OH</i>	<i>CO</i>	CO⁺	H_2O	HCO	HCO⁺
HOC⁺	C_2O	CO_2	H₃O⁺	HOCO⁺	H_2CO
C_3O	CH_2CO	$HCOOH$	H₂COH⁺	CH_3OH	CH_2CHO
CH_2CHOH	CH_2CHCHO	HC_2CHO	C_5O	CH_3CHO	c- C_2H_4O
CH_3OCHO	CH_2OHCHO	CH_3COOH	CH_3OCH_3	CH_3CH_2OH	CH_3CH_2CHO
$(CH_3)_2CO$	$HOCH_2CH_2OH$	$C_2H_5OCH_3$	$(CH_2OH)_2CO$		
Molécules azotées					
<i>NH</i>	<i>CN</i>	N_2	<i>NH₂</i>	HCN	HNC
N₂H⁺	NH_3	HCNH⁺	H_2CN	$HCCN$	C_3N
CH_2CN	CH_2NH	HC_2CN	HC_2NC	NH_2CN	C_3NH
CH_3CN	CH_3NC	HC₃NH⁺	* HC_4N	C_5N	CH_3NH_2
CH_2CHCN	HC_5N	CH_3C_3N	CH_3CH_2CN	HC_7N	CH_3C_5N
HC_9N	HC_11N				
Molécules azotées et oxygénées					
NO	HNO	N_2O	$HNCO$	NH_2CHO	
Autres espèces					
SH	CS	SO	SO⁺	NS	SiH
* SiC	SiN	SiO	SiS	HCl	* $NaCl$
* $AlCl$	* KCl	HF	* AlF	* CP	PN
H_2S	C_2S	SO_2	OCS	HCS⁺	c- SiC_2
* $SiCN$	* $SiNC$	* $NaCN$	* $MgCN$	* $MgNC$	* $AlNC$
H_2CS	$HNCS$	C_3S	c- SiC_3	* SiH_4	* SiC_4
CH_3SH	C_5S	FeO			
Notes					
- Les espèces en italiques ont été identifiées en absorption dans le visible ou l'ultraviolet					
- Les ions moléculaires sont en gras					
- Les * indiquent les molécules détectées dans les enveloppes circumstellaires					
- Ce tableau provient de http://astrochemistry.net					

Annexe F

Fichiers de chimie

Таб. F.1 – Liste des espèces chimiques prises en compte dans le modèle TDR, et enthalpies de formation associées ΔH_0 (en kcal/mol).

Espèce	ΔH_0	Espèce	ΔH_0	Espèce	ΔH_0	Espèce	ΔH_0
H	51.634	NH ₃	-9.299	CH ₅ ⁺	216.000	C ₂ N ⁺	410.000
H ₂	0.000	CN	103.200	O ⁺	373.000	HC ₂ N ⁺	166.000
He	0.000	HCN	32.390	O ₂ ⁺	278.400	HCN ⁺	346.000
C	169.980	HNC	48.000	OH ⁺	309.000	HNC ⁺	336.000
CH	141.600	N ₂	0.000	H ₂ O ⁺	233.700	HCNH ⁺	226.000
CH ₂	93.900	NO	21.460	H ₃ O ⁺	143.000	H ₂ NC ⁺	178.000
CH ₃	34.800	S	65.600	CO ⁺	295.970	N ₂ ⁺	359.298
CH ₄	-15.970	SH	32.600	HCO ⁺	197.300	N ₂ H ⁺	247.500
O	58.980	H ₂ S	-4.230	HCO ₂ ⁺	141.000	NO ⁺	235.330
O ₂	0.000	CS	63.000	C ₂ ⁺	476.000	HNO ⁺	256.800
OH	9.250	SO	1.200	C ₂ H ⁺	404.000	S ⁺	304.000
H ₂ O	-57.100	SO ₂	-70.300	C ₂ H ₂ ⁺	317.500	SH ⁺	271.800
CO	-27.200	OCS	-34.000	C ₂ H ₃ ⁺	267.900	H ₂ S ⁺	237.000
CO ₂	-93.965	Fe	98.700	C ₃ ⁺	479.000	H ₃ S ⁺	190.000
C ₂	198.200	H ⁺	365.200	C ₃ H ⁺	381.000	CS ⁺	324.000
C ₂ H	113.300	H ₂ ⁺	355.700	C ₃ H ₂ ⁺	330.000	HCS ⁺	243.000
C ₂ H ₂	54.320	H ₃ ⁺	265.000	C ₃ H ₃ ⁺	282.000	SO ⁺	239.200
C ₃	194.000	He ⁺	567.000	N ⁺	447.690	HSO ⁺	150.000
C ₃ H	126.000	C ⁺	429.700	NH ⁺	401.100	HSO ₂ ⁺	143.000
C ₃ H ₂	26.000	CH ⁺	387.000	NH ₂ ⁺	302.700	HOCS ⁺	181.000
N	112.530	CH ₂ ⁺	331.000	NH ₃ ⁺	224.900	Fe ⁺	280.240
NH	90.000	CH ₃ ⁺	262.000	NH ₄ ⁺	151.000		
NH ₂	46.200	CH ₄ ⁺	272.000	CN ⁺	429.300		

Les 2 tableaux de cette annexe montrent les atomes et les molécules pris en compte dans le modèle TDR ainsi que le réseau de réactions par lequel ces espèces interagissent entre elles.

Les vitesses de réaction binaires sont sous la forme :

$$k = \gamma(T_{\text{eff}}/300 \text{ K})^\alpha \exp(-\beta/T_{\text{eff}}) \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}. \quad (\text{F.1})$$

Les processus faisant intervenir les photons ou les rayons cosmiques s'effectuent respectivement au taux

$$\chi \gamma(T_{\text{eff}}/300 \text{ K})^\alpha \exp(-\beta A_V) \text{ s}^{-1}, \quad (\text{F.2})$$

et

$$\zeta \gamma(T_{\text{eff}}/300 \text{ K})^\alpha \exp(-\beta A_V) \text{ s}^{-1}. \quad (\text{F.3})$$

Le réseau présenté est issu d'une compilation des réseaux chimiques utilisés dans le modèle de choc MHD (Flower *et al.* 1998) et le modèle PDR (Le Petit *et al.* 2006), et des bases de données en ligne telles que UMIST¹ (University of Manchester - Institut of Science and Technology, Woodall *et al.* 2007) ou OSU² (Ohio State University database). De nombreux codes ont été créés dans le but d'analyser ces différents réseaux, de les transformer dans un format standard, de les comparer deux à deux et si besoin de les combiner. Une attention particulière est accordée aux méthodes d'obtention des taux et des vitesses de réaction, aux gammes de températures pour lesquelles ceux-ci sont jugés valables par les différents auteurs, ainsi qu'aux rapports de branchements.

¹<http://www.udfa.net>

²<http://www.physics.ohio-state.edu/~eric/research.html>.

n°	Réaction chimique				γ	α	β
1	H	+ H	→ H ₂		1.40 10 ⁻¹⁷	0.5	0.0
2	C	+ CRP	→ C ⁺	e ⁻	5.10 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
3	CH	+ CRP	→ C	H	7.56 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
4	CH ₂	+ CRP	→ CH	H	1.00 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
5	CH ₂	+ CRP	→ CH ₂ ⁺	e ⁻	5.00 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
6	CH ₃	+ CRP	→ CH ₃ ⁺	e ⁻	5.00 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
7	CH ₃	+ CRP	→ CH ₂	H	5.00 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
8	CH ₃	+ CRP	→ CH	H ₂	5.00 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
9	CH ₄	+ CRP	→ CH ₂	H ₂	2.27 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
10	CH ⁺	+ CRP	→ C	H ⁺	1.83 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
11	OH	+ CRP	→ O	H	5.22 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
12	H ₂ O	+ CRP	→ OH	H	9.80 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
13	O ₂	+ CRP	→ O	O	7.30 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
14	O ₂	+ CRP	→ O ₂ ⁺	e ⁻	8.80 10 ⁺⁰¹	0.0	0.0
15	CO ₂	+ CRP	→ CO	O	3.42 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
16	C ₂	+ CRP	→ C	C	4.74 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
17	C ₂ H	+ CRP	→ C ₂	H	8.16 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
18	C ₂ H ₂	+ CRP	→ C ₂ H	H	1.03 10 ⁺⁰⁴	0.0	0.0
19	C ₂ H ₂	+ CRP	→ C ₂ H ₂ ⁺	e ⁻	2.62 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
20	C ₃	+ CRP	→ C ₂	C	2.24 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
21	C ₃ H	+ CRP	→ C ₃	H	8.16 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
22	C ₃ H ₂	+ CRP	→ C ₃ H	H	8.16 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
23	CO	+ CRP	→ C	O	6.80 10 ⁺⁰²	1.2	0.0
24	CN	+ CRP	→ C	N	2.12 10 ⁺⁰⁴	0.0	0.0
25	N ₂	+ CRP	→ N	N	1.00 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
26	NH	+ CRP	→ N	H	1.00 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
27	NH	+ CRP	→ NH ⁺	e ⁻	5.00 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
28	HCN	+ CRP	→ CN	H	3.00 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
29	HNC	+ CRP	→ CN	H	3.00 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
30	NH ₂	+ CRP	→ NH	H	8.10 10 ⁺⁰¹	0.0	0.0
31	NH ₂	+ CRP	→ NH ₂ ⁺	e ⁻	6.10 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
32	NH ₃	+ CRP	→ NH	H ₂	5.41 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
33	NH ₃	+ CRP	→ NH ₂	H	1.32 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
34	NH ₃	+ CRP	→ NH ₃ ⁺	e ⁻	5.43 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
35	NO	+ CRP	→ N	O	4.27 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
36	NO	+ CRP	→ NO ⁺	e ⁻	4.30 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
37	S	+ CRP	→ S ⁺	e ⁻	1.00 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
38	SO	+ CRP	→ S	O	5.00 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
39	CS	+ CRP	→ S	C	2.12 10 ⁺⁰⁴	0.0	0.0
40	SH	+ CRP	→ S	H	1.46 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
41	OCS	+ CRP	→ CO	S	5.37 10 ⁺⁰³	0.0	0.0

n°	Réaction chimique				γ	α	β
42	H ₂ S	+ CRP	→ SH	H	5.07 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
43	H ₂ S	+ CRP	→ H ₂ S ⁺	e ⁻	1.55 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
44	SO ₂	+ CRP	→ SO	O	2.00 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
45	Fe	+ CRP	→ Fe ⁺	e ⁻	1.50 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
46	H	+ CRP	→ H ⁺	e ⁻	4.60 10 ⁻⁰¹	0.0	0.0
47	He	+ CRP	→ He ⁺	e ⁻	5.00 10 ⁻⁰¹	0.0	0.0
48	N	+ CRP	→ N ⁺	e ⁻	2.10 10 ⁺⁰⁰	0.0	0.0
49	O	+ CRP	→ O ⁺	e ⁻	2.80 10 ⁺⁰⁰	0.0	0.0
50	CO	+ CRP	→ CO ⁺	e ⁻	3.00 10 ⁺⁰⁰	0.0	0.0
51	H ₂	+ CRP	→ H	H	1.00 10 ⁻⁰¹	0.0	0.0
52	H ₂	+ CRP	→ H ⁺	H e ⁻	2.20 10 ⁻⁰²	0.0	0.0
53	H ₂	+ CRP	→ H ₂ ⁺	e ⁻	9.30 10 ⁻⁰¹	0.0	0.0
54	H ₂ S	+ CRP	→ H ₂	S	5.15 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
55	CH ⁺	+ CRP	→ C ⁺	H	2.10 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
56	C ₂ H	+ CRP	→ C ₂ H ⁺	e ⁻	5.97 10 ⁺⁰³	0.0	0.0
57	CS	+ CRP	→ CS ⁺	e ⁻	5.97 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
58	SO	+ CRP	→ SO ⁺	e ⁻	5.97 10 ⁺⁰²	0.0	0.0
59	CH ₂	+ H	→ CH	H ₂	4.70 10 ⁻¹⁰	0.0	370.0
60	O	+ H ₂	→ OH	H	1.55 10 ⁻¹³	2.8	2980.0
61	O ₂	+ H	→ OH	O	1.63 10 ⁻⁰⁹	-0.9	8750.0
62	OH	+ H	→ O	H ₂	7.00 10 ⁻¹⁴	2.8	1950.0
63	OH	+ H ₂	→ H ₂ O	H	9.54 10 ⁻¹³	2.0	1490.0
64	H ₂ O	+ H	→ OH	H ₂	5.24 10 ⁻¹²	1.9	9265.0
65	C	+ H ₂	→ CH	H	1.16 10 ⁻⁰⁹	0.5	14100.0
66	CH	+ H ₂	→ CH ₂	H	2.38 10 ⁻¹⁰	0.0	1760.0
67	CH ₂	+ H ₂	→ CH ₃	H	5.18 10 ⁻¹¹	0.2	6400.0
68	CH ₃	+ H ₂	→ CH ₄	H	3.00 10 ⁻¹⁰	0.0	5460.0
69	C ₂	+ H ₂	→ C ₂ H	H	1.60 10 ⁻¹⁰	0.0	1419.0
70	C ₂ H	+ H ₂	→ C ₂ H ₂	H	1.14 10 ⁻¹¹	0.0	950.0
71	CH	+ H	→ C	H ₂	1.16 10 ⁻⁰⁹	0.5	2200.0
72	CH ₃	+ H	→ CH ₂	H ₂	5.18 10 ⁻¹¹	0.2	5600.0
73	CH ₄	+ H	→ CH ₃	H ₂	3.00 10 ⁻¹⁰	0.0	6560.0
74	O ₂	+ C	→ CO	O	3.30 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
75	OH	+ CO	→ CO ₂	H	4.40 10 ⁻¹³	-1.1	390.0
76	OH	+ C	→ CO	H	3.10 10 ⁻¹¹	-0.4	0.0
77	OH	+ O	→ O ₂	H	3.10 10 ⁻¹¹	-0.4	0.0
78	CH	+ O	→ HCO ⁺	e ⁻	2.40 10 ⁻¹⁴	0.5	0.0
79	CH	+ O	→ CO	H	9.50 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
80	CH ₂	+ O	→ CO	H H	2.00 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
81	CH ₃	+ O	→ CO	H ₂ H	1.80 10 ⁻¹⁰	0.5	0.0
82	C ₂	+ O	→ CO	C	5.00 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
83	C ₂ H	+ O	→ CO	CH	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	250.0

n°	Réaction chimique				γ	α	β
84	C ₂ H	+ O ₂	→ CO ₂	CH	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2000.0
85	C ₃	+ O	→ CO	C ₂	5.00 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
86	C ₃ H	+ O	→ C ₂ H	CO	5.00 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
87	C ₃ H ₂	+ O	→ C ₂ H ₂	CO	5.00 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
88	C ⁺	+ H ₂	→ CH ⁺	H	1.50 10 ⁻¹⁰	0.0	4640.0
89	CH ⁺	+ H	→ C ⁺	H ₂	1.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
90	CH ⁺	+ H ₂	→ CH ₂ ⁺	H	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
91	CH ₂ ⁺	+ H	→ CH ⁺	H ₂	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	400.0
92	CH ₂ ⁺	+ H ₂	→ CH ₃ ⁺	H	7.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
93	CH ₃ ⁺	+ H ₂	→ CH ₄ ⁺	H	2.00 10 ⁻¹⁰	0.0	32500.0
94	CH ₃ ⁺	+ H	→ CH ₂ ⁺	H ₂	7.00 10 ⁻¹⁰	0.0	10560.0
95	CH ₄ ⁺	+ H	→ CH ₃ ⁺	H ₂	2.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
96	CH ₄ ⁺	+ H ₂	→ CH ₅ ⁺	H	4.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
97	CH ₅ ⁺	+ H	→ CH ₄ ⁺	H ₂	4.00 10 ⁻¹¹	0.0	4000.0
98	H ⁺	+ H ₂	→ H ₂ ⁺	H	6.40 10 ⁻¹⁰	0.0	21300.0
99	H ₂ ⁺	+ H ₂	→ H ₃ ⁺	H	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
100	H ₃ ⁺	+ H	→ H ₂ ⁺	H ₂	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	20000.0
101	H ⁺	+ O	→ O ⁺	H	6.00 10 ⁻¹⁰	0.0	227.0
102	H ⁺	+ O ₂	→ O ₂ ⁺	H	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
103	H ⁺	+ OH	→ OH ⁺	H	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
104	H ⁺	+ H ₂ O	→ H ₂ O ⁺	H	8.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
105	H ⁺	+ CH	→ CH ⁺	H	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
106	H ⁺	+ CH ₂	→ CH ⁺	H ₂	1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
107	H ⁺	+ CH ₂	→ CH ₂ ⁺	H	1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
108	H ⁺	+ CH ₃	→ CH ₃ ⁺	H	3.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
109	H ⁺	+ CH ₄	→ CH ₃ ⁺	H ₂	2.28 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
110	H ⁺	+ CH ₄	→ CH ₄ ⁺	H	1.52 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
111	H ⁺	+ CO ₂	→ HCO ⁺	O	4.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
112	H ₂ ⁺	+ C	→ CH ⁺	H	2.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
113	H ₂ ⁺	+ O	→ OH ⁺	H	1.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
114	H ₂ ⁺	+ CO	→ HCO ⁺	H	2.16 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
115	H ₂ ⁺	+ CO	→ CO ⁺	H ₂	6.44 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
116	H ₂ ⁺	+ OH	→ OH ⁺	H ₂	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
117	H ₂ ⁺	+ H ₂ O	→ H ₂ O ⁺	H ₂	3.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
118	H ₂ ⁺	+ H ₂ O	→ H ₃ O ⁺	H	3.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
119	H ₂ ⁺	+ CH	→ CH ⁺	H ₂	7.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
120	H ₂ ⁺	+ CH	→ CH ₂ ⁺	H	7.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
121	H ₂ ⁺	+ CH ₂	→ CH ₃ ⁺	H	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
122	H ₂ ⁺	+ CH ₂	→ CH ₂ ⁺	H ₂	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
123	H ₃ ⁺	+ O	→ OH ⁺	H ₂	8.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
124	H ₃ ⁺	+ OH	→ H ₂ O ⁺	H ₂	1.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
125	H ₃ ⁺	+ CO	→ HCO ⁺	H ₂	1.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0

n°	Réaction chimique				γ	α	β
126	H ₃ ⁺	+ CO ₂	→ HCO ₂ ⁺	H ₂	2.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
127	H ₃ ⁺	+ H ₂ O	→ H ₃ O ⁺	H ₂	4.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
128	H ₃ ⁺	+ C	→ CH ⁺	H ₂	2.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
129	H ₃ ⁺	+ CH	→ CH ₂ ⁺	H ₂	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
130	H ₃ ⁺	+ CH ₂	→ CH ₃ ⁺	H ₂	1.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
131	H ₃ ⁺	+ CH ₃	→ CH ₄ ⁺	H ₂	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
132	H ₃ ⁺	+ CH ₄	→ CH ₅ ⁺	H ₂	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
133	He ⁺	+ H ₂	→ H ⁺	H He	1.10 10 ⁻¹³	-0.2	0.0
134	He ⁺	+ OH	→ OH ⁺	He	5.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
135	He ⁺	+ OH	→ O ⁺	H He	5.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
136	He ⁺	+ H ₂ O	→ OH ⁺	H He	2.30 10 ⁻¹⁰	-0.9	0.0
137	He ⁺	+ H ₂ O	→ H ₂ O ⁺	He	4.86 10 ⁻¹¹	-0.9	0.0
138	He ⁺	+ H ₂ O	→ H ⁺	OH He	1.64 10 ⁻¹⁰	-0.9	0.0
139	He ⁺	+ CO	→ C ⁺	O He	1.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
140	He ⁺	+ O ₂	→ O ⁺	O He	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
141	He ⁺	+ CO ₂	→ CO ⁺	O He	7.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
142	He ⁺	+ CO ₂	→ O ⁺	CO He	1.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
143	He ⁺	+ CO ₂	→ C ⁺	O ₂ He	4.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
144	He ⁺	+ CH	→ C ⁺	H He	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
145	He ⁺	+ CH ₂	→ C ⁺	H ₂ He	7.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
146	He ⁺	+ CH ₂	→ CH ⁺	H He	7.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
147	He ⁺	+ CH ₃	→ CH ⁺	H ₂ He	9.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
148	He ⁺	+ CH ₃	→ CH ₂ ⁺	H He	9.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
149	He ⁺	+ CH ₄	→ H ⁺	CH ₃ He	4.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
150	He ⁺	+ CH ₄	→ CH ⁺	H ₂ H He	2.56 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
151	He ⁺	+ CH ₄	→ CH ₂ ⁺	H ₂ He	8.48 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
152	He ⁺	+ CH ₄	→ CH ₃ ⁺	H He	8.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
153	He ⁺	+ CH ₄	→ CH ₄ ⁺	He	1.60 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
154	C ⁺	+ OH	→ CO ⁺	H	1.42 10 ⁻⁰⁹	-0.3	0.0
155	C ⁺	+ OH	→ H ⁺	CO	1.42 10 ⁻⁰⁹	-0.3	0.0
156	C ⁺	+ H ₂ O	→ HCO ⁺	H	2.43 10 ⁻⁰⁹	-0.6	0.0
157	C ⁺	+ O ₂	→ O ⁺	CO	5.15 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
158	C ⁺	+ O ₂	→ CO ⁺	O	3.15 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
159	C ⁺	+ CO ₂	→ CO ⁺	CO	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
160	C ⁺	+ CH	→ C ₂ ⁺	H	3.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
161	C ⁺	+ CH	→ CH ⁺	C	3.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
162	C ⁺	+ CH ₂	→ CH ₂ ⁺	C	5.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
163	C ⁺	+ CH ₂	→ C ₂ H ⁺	H	5.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
164	C ⁺	+ CH ₄	→ C ₂ H ₂ ⁺	H ₂	3.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
165	C ⁺	+ CH ₄	→ C ₂ H ₃ ⁺	H	9.75 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
166	O ⁺	+ H	→ H ⁺	O	6.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
167	O ⁺	+ H ₂	→ OH ⁺	H	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0

n°	Réaction chimique	γ	α	β
168	$O_2^+ + C \rightarrow CO^+$	$5.20 \cdot 10^{-11}$	0.0	0.0
169	$O_2^+ + C \rightarrow C^+$	$5.20 \cdot 10^{-11}$	0.0	0.0
170	$OH^+ + H_2 \rightarrow H_2O^+$	$1.01 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
171	$H_2O^+ + H_2 \rightarrow H_3O^+$	$8.30 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
172	$H_3O^+ + H \rightarrow H_2O^+$	$6.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	20500.0
173	$H_3O^+ + C \rightarrow HCO^+$	$1.01 \cdot 10^{-11}$	0.0	0.0
174	$H_3O^+ + CH \rightarrow CH_2^+$	$6.80 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
175	$H_3O^+ + CH_2 \rightarrow CH_3^+$	$9.40 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
176	$CH_3^+ + O \rightarrow HCO^+$	$3.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
177	$CH_3^+ + O \rightarrow H_3^+$	$1.30 \cdot 10^{-11}$	0.0	0.0
178	$CH_5^+ + O \rightarrow H_3O^+$	$2.16 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
179	$CH_5^+ + CO \rightarrow HCO^+$	$9.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
180	$CH_5^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+$	$3.70 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
181	$CO^+ + H_2 \rightarrow HCO^+$	$1.30 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
182	$CO^+ + H \rightarrow H^+$	$7.50 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
183	$HCO^+ + H \rightarrow CO^+$	$1.30 \cdot 10^{-09}$	0.0	24500.0
184	$HCO^+ + C \rightarrow CH^+$	$1.10 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
185	$HCO^+ + CH \rightarrow CH_2^+$	$6.30 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
186	$HCO^+ + CH_2 \rightarrow CH_3^+$	$8.60 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
187	$HCO^+ + CH_3 \rightarrow CH_4^+$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	9060.0
188	$HCO^+ + CH_4 \rightarrow CH_5^+$	$9.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	4920.0
189	$HCO^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+$	$2.50 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
190	$HCO^+ + O_2 \rightarrow HCO_2^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	1450.0
191	$HCO_2^+ + O \rightarrow HCO^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
192	$HCO^+ + OH \rightarrow HCO_2^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
193	$HCO_2^+ + H \rightarrow HCO^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	7500.0
194	$HCO_2^+ + CO \rightarrow HCO^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
195	$HCO^+ + CO_2 \rightarrow HCO_2^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	5000.0
196	$HCO_2^+ + CH_4 \rightarrow CH_5^+$	$7.80 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
197	$C_2^+ + H_2 \rightarrow C_2H^+$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
198	$C_2^+ + H_2 \rightarrow H^+$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0	1260.0
199	$C_2H^+ + H_2 \rightarrow C_2H_2^+$	$1.70 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
200	$C_2H_2^+ + H_2 \rightarrow C_2H_3^+$	$5.00 \cdot 10^{-10}$	0.0	800.0
201	$C_3^+ + H_2 \rightarrow C_3H^+$	$3.00 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
202	$C_3H^+ + H_2 \rightarrow C_3H_2^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	500.0
203	$C_3H_2^+ + H_2 \rightarrow C_3H_3^+$	$1.00 \cdot 10^{-10}$	0.0	2000.0
204	$H^+ + C_2H \rightarrow C_2^+$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
205	$H^+ + C_2H \rightarrow C_2H^+$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
206	$H^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
207	$H^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_2^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
208	$H^+ + C_3H \rightarrow C_3^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
209	$H^+ + C_3H \rightarrow C_3H^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0

n°	Réaction chimique	γ	α	β
210	$H^+ + C_3H_2 \rightarrow C_3H^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
211	$H^+ + C_3H_2 \rightarrow C_3H_2^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
212	$He^+ + C_2H \rightarrow C^+$	$5.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
213	$He^+ + C_2H \rightarrow CH^+$	$5.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
214	$He^+ + C_2H \rightarrow C_2^+$	$5.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
215	$He^+ + C_2H_2 \rightarrow CH^+$	$7.70 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
216	$He^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2^+$	$1.61 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
217	$He^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H^+$	$8.75 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
218	$He^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_2^+$	$2.45 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
219	$He^+ + C_3H \rightarrow C_3^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
220	$He^+ + C_3H_2 \rightarrow C_3H^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
221	$He^+ + C_3H_2 \rightarrow C_3^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
222	$H_3^+ + C_2H \rightarrow C_2H_2^+$	$1.70 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
223	$H_3^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_3^+$	$2.90 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
224	$H_3^+ + C_3H \rightarrow C_3H_2^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
225	$H_3^+ + C_3H_2 \rightarrow C_3H_3^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
226	$C^+ + C_2H \rightarrow C_3^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
227	$C^+ + C_2H_2 \rightarrow C_3H^+$	$2.20 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
228	$HCO^+ + C_2H \rightarrow C_2H_2^+$	$7.80 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
229	$HCO^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_3^+$	$1.36 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
230	$HCO^+ + C_3H \rightarrow C_3H_2^+$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
231	$HCO^+ + C_3H_2 \rightarrow C_3H_3^+$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
232	$H_3O^+ + C_2H \rightarrow C_2H_2^+$	$2.20 \cdot 10^{-10}$	0.0	2870.0
233	$H_3O^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_3^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	7330.0
234	$H_3O^+ + C_3H \rightarrow C_3H_2^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
235	$H_3O^+ + C_3H_2 \rightarrow C_3H_3^+$	$3.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
236	$C_2H_2^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+$	$2.20 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
237	$C_2H_3^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+$	$1.11 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
238	$C_3H^+ + H_2O \rightarrow HCO^+$	$2.48 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
239	$C_3H^+ + H_2O \rightarrow C_2H_3^+$	$2.02 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
240	$H^+ + Fe \rightarrow Fe^+$	$7.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
241	$H_3^+ + Fe \rightarrow Fe^+$	$4.90 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
242	$C^+ + Fe \rightarrow Fe^+$	$2.60 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
243	$HCO^+ + Fe \rightarrow Fe^+$	$1.90 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
244	$H_3O^+ + Fe \rightarrow Fe^+$	$3.10 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
245	$O_2^+ + Fe \rightarrow Fe^+$	$1.10 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
246	$N + H_2 \rightarrow NH$	$8.66 \cdot 10^{-10}$	0.5	14600.0
247	$NH + H_2 \rightarrow NH_2$	$5.25 \cdot 10^{-12}$	0.8	6700.0
248	$NH_2 + H_2 \rightarrow NH_3$	$6.22 \cdot 10^{-11}$	0.5	6300.0
249	$CN + H_2 \rightarrow HCN$	$3.53 \cdot 10^{-13}$	3.3	756.0
250	$NH + H \rightarrow N$	$8.66 \cdot 10^{-10}$	0.5	2400.0
251	$NH_2 + H \rightarrow NH$	$5.25 \cdot 10^{-12}$	0.8	2200.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
252	NH ₃	+ H	6.22 10 ⁻¹¹	0.5	5700.0
253	NH	+ O	2.90 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
254	NH ₂	+ O	3.50 10 ⁻¹²	0.5	0.0
255	NH ₃	+ O	2.50 10 ⁻¹²	0.0	3020.0
256	CN	+ O	1.80 10 ⁻¹¹	0.5	50.0
257	NH ₃	+ OH	2.30 10 ⁻¹²	0.0	800.0
258	NH	+ C	1.10 10 ⁻¹⁰	0.5	0.0
259	CH	+ N	2.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
260	CN	+ N	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	50.0
261	CN	+ O ₂	1.35 10 ⁻¹¹	0.0	50.0
262	NH	+ N	5.00 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
263	OH	+ N	5.30 10 ⁻¹¹	0.0	50.0
264	O ₂	+ N	3.30 10 ⁻¹²	1.0	3150.0
265	NO	+ C	1.10 10 ⁻¹⁰	0.5	0.0
266	NO	+ N	3.40 10 ⁻¹¹	0.0	50.0
267	NO	+ O	7.50 10 ⁻¹³	1.0	1950.0
268	HNC	+ H	1.36 10 ⁻¹³	4.5	0.0
269	HNC	+ O	2.00 10 ⁻¹⁰	0.5	200.0
270	HNC	+ OH	2.00 10 ⁻¹⁰	0.5	200.0
271	HNC	+ O ₂	2.00 10 ⁻¹¹	0.5	2000.0
272	NH ₂	+ C	2.00 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
273	CH ₂	+ N	3.45 10 ⁻¹¹	0.2	0.0
274	CH ₃	+ N	2.00 10 ⁻¹¹	0.5	0.0
275	CH ₅ ⁺	+ HNC	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
276	CH ₅ ⁺	+ HCN	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	5120.0
277	N ⁺	+ H ₂	6.50 10 ⁻¹⁰	0.0	170.0
278	NH ⁺	+ H ₂	1.27 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
279	NH ⁺	+ H ₂	2.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
280	NH ₂ ⁺	+ H ₂	2.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
281	NH ₃ ⁺	+ H ₂	2.40 10 ⁻¹²	0.0	0.0
282	NH ⁺	+ H	6.52 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
283	NH ₂ ⁺	+ H	1.27 10 ⁻⁰⁹	0.0	24000.0
284	NH ₃ ⁺	+ H	2.25 10 ⁻¹⁰	0.0	12800.0
285	NH ₄ ⁺	+ H	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	11000.0
286	CN ⁺	+ H ₂	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
287	HCN ⁺	+ H	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	15800.0
288	HCN ⁺	+ H ₂	9.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
289	HCNH ⁺	+ H	9.80 10 ⁻¹⁰	0.0	34400.0
290	N ₂ ⁺	+ H ₂	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
291	N ₂ H ⁺	+ H	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	30300.0
292	N ₂ H ⁺	+ H ₂	1.80 10 ⁻⁰⁹	0.0	8300.0
293	H ⁺	+ HNC	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
294	H ⁺	+ HCN	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	7850.0
295	H ⁺	+ NH	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
296	H ⁺	+ NH ₂	2.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
297	H ⁺	+ NH ₃	5.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
298	H ⁺	+ CN	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	6150.0
299	H ⁺	+ HCN	1.10 10 ⁻⁰⁸	0.0	0.0
300	H ⁺	+ NO	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
301	He ⁺	+ NH	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
302	He ⁺	+ NH ₂	8.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
303	He ⁺	+ NH ₃	8.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
304	He ⁺	+ NH ₃ ⁺	2.64 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
305	He ⁺	+ NH ₃	1.76 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
306	He ⁺	+ NH ₃	1.76 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
307	He ⁺	+ CN	8.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
308	He ⁺	+ CN	8.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
309	He ⁺	+ HCN	1.46 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
310	He ⁺	+ HCN	6.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
311	He ⁺	+ HCN	7.75 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
312	He ⁺	+ HCN	2.48 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
313	He ⁺	+ HNC	1.55 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
314	He ⁺	+ HNC	1.55 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
315	He ⁺	+ N ₂	7.92 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
316	He ⁺	+ N ₂	4.08 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
317	He ⁺	+ NO	1.38 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
318	He ⁺	+ NO	2.24 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
319	H ₃ ⁺	+ N	4.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
320	H ₃ ⁺	+ NH	1.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
321	H ₃ ⁺	+ NH ₂	1.80 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
322	H ₃ ⁺	+ NH ₃	9.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
323	H ₃ ⁺	+ CN	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
324	H ₃ ⁺	+ CN	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
325	H ₃ ⁺	+ CN	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
326	H ₃ ⁺	+ HCN	4.75 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
327	H ₃ ⁺	+ HCN	4.75 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
328	H ₃ ⁺	+ HNC	4.75 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
329	H ₃ ⁺	+ HNC	4.75 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
330	H ₃ ⁺	+ N ₂	1.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
331	H ₃ ⁺	+ NO	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
332	H ₃ O ⁺	+ NH ₃	2.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
333	H ₃ O ⁺	+ HCN	4.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
334	HCNH ⁺	+ H ₂ O	4.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	2460.0
335	H ₃ O ⁺	+ HNC	2.25 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
336	H ₃ O ⁺	+ HNC	2.25 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
337	HCNH ⁺	+ H ₂ O	4.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	10300.0
338	HCO ⁺	+ NH	6.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
339	NH ₂ ⁺	+ CO	6.40 10 ⁻¹⁰	0.0	61000.0
340	HCO ⁺	+ NH ₂	8.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
341	HCO ⁺	+ NH ₃	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
342	HCO ⁺	+ HCN	3.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
343	HCO ⁺	+ HNC	1.85 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
344	HCO ⁺	+ HNC	1.85 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
345	HCO ₂ ⁺	+ NO	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
346	C ⁺	+ NH	7.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
347	C ⁺	+ NH ₂	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
348	C ⁺	+ NH ₃	5.29 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
349	C ⁺	+ NH ₃	2.07 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
350	C ⁺	+ NH ₃	0.00 10 ⁺⁰⁰	0.0	0.0
351	C ⁺	+ NH ₃	1.56 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
352	C ⁺	+ HCN	3.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
353	C ⁺	+ HNC	3.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
354	C ⁺	+ NO	3.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
355	C ⁺	+ NO	9.02 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
356	N ⁺	+ CO	9.02 10 ⁻¹⁰	0.0	154000.0
357	O ₂ ⁺	+ N	7.84 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
358	O ₂ ⁺	+ NH ₃	2.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
359	O ₂ ⁺	+ NO	4.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
360	CH ₂ ⁺	+ N	9.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
361	C ₂ H ⁺	+ N	8.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
362	CH ₃ ⁺	+ N	2.20 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
363	CH ₃ ⁺	+ N	2.20 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
364	CH ₃ ⁺	+ N	2.20 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
365	C ₂ H ₂ ⁺	+ N	1.25 10 ⁻¹²	0.0	0.0
366	C ₂ H ₂ ⁺	+ N	1.25 10 ⁻¹²	0.0	26000.0
367	C ₂ H ₂ ⁺	+ N	8.75 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
368	C ₂ H ₂ ⁺	+ N	1.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
369	N ⁺	+ O ₂	2.81 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
370	N ⁺	+ O ₂	2.37 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
371	N ⁺	+ O ₂	3.30 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
372	N ⁺	+ CO	8.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
373	N ⁺	+ CO	1.46 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
374	N ⁺	+ NO	4.51 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
375	N ⁺	+ NO	7.95 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
376	NH ₃ ⁺	+ H ₂ O	2.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
377	NH ₄ ⁺	+ OH	2.50 10 ⁻¹⁰	0.0	34000.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
378	N ₂ H ⁺	+ O	1.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
379	N ₂ H ⁺	+ H ₂ O	2.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
380	N ₂ H ⁺	+ CO	8.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
381	HCO ⁺	+ N ₂	8.80 10 ⁻¹⁰	0.0	11200.0
382	N ₂ H ⁺	+ CO ₂	1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
383	HCO ₂ ⁺	+ N ₂	1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	64000.0
384	N ₂ H ⁺	+ NH ₃	2.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
385	NH ₄ ⁺	+ N ₂	2.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	104000.0
386	N ₂ H ⁺	+ NO	3.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
387	C ₂ N ⁺	+ NH ₃	1.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
388	C ₂ N ⁺	+ NH ₃	4.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
389	C ₂ N ⁺	+ NH ₃	4.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
390	C ₂ N ⁺	+ NH ₃	4.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
391	C ₂ N ⁺	+ NH ₃	4.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
392	HNO ⁺	+ C	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
393	HNO ⁺	+ CO	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
394	HNO ⁺	+ CO ₂	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
395	HNO ⁺	+ OH	6.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
396	HNO ⁺	+ H ₂ O	2.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
397	NO ⁺	+ Fe	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
398	S	+ H ₂	1.04 10 ⁻¹⁰	0.1	9620.0
399	SH	+ H ₂	6.41 10 ⁻¹²	0.1	8050.0
400	SH	+ H	2.50 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
401	H ₂ S	+ H	1.29 10 ⁻¹¹	0.0	860.0
402	SO	+ H	5.90 10 ⁻¹⁰	-0.3	11100.0
403	SO ₂	+ H	9.25 10 ⁻⁰⁹	-0.7	14700.0
404	OCS	+ H	1.70 10 ⁻¹¹	0.0	2000.0
405	SH	+ O	1.60 10 ⁻¹⁰	0.0	100.0
406	SH	+ O	1.70 10 ⁻¹¹	0.7	950.0
407	H ₂ S	+ O	1.40 10 ⁻¹¹	0.0	1920.0
408	H ₂ S	+ OH	6.30 10 ⁻¹²	0.0	80.0
409	CS	+ O	2.70 10 ⁻¹⁰	0.0	760.0
410	CS	+ OH	1.55 10 ⁻¹³	1.1	800.0
411	S	+ O ₂	5.19 10 ⁻¹²	0.0	265.0
412	SO	+ O	6.60 10 ⁻¹³	0.0	2760.0
413	SO	+ O ₂	1.40 10 ⁻¹²	0.0	2820.0
414	SO	+ OH	1.96 10 ⁻¹⁰	-0.2	0.0
415	SO	+ N	1.73 10 ⁻¹¹	0.5	750.0
416	SO	+ C	7.20 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
417	SO	+ C	1.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
418	SO ₂	+ O	9.27 10 ⁻¹¹	-0.5	9140.0
419	OCS	+ O	2.60 10 ⁻¹¹	0.0	2250.0

n°	Réaction chimique					γ	α	β
420	CH	+ S	→ CS	H		1.10 10 ⁻¹²	0.0	0.0
421	CH	+ S	→ SH	C		1.73 10 ⁻¹¹	0.5	4000.0
422	OH	+ S	→ SO	H		1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	100.0
423	SH	+ C	→ CS	H		2.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
424	SH	+ C	→ CH	S		1.20 10 ⁻¹¹	0.6	5880.0
425	SH	+ CO	→ OCS	H		5.95 10 ⁻¹⁴	1.1	8330.0
426	S ⁺	+ H ₂	→ SH ⁺	H		2.20 10 ⁻¹⁰	0.0	9860.0
427	SH ⁺	+ H ₂	→ H ₂ S ⁺	H		1.90 10 ⁻¹⁰	0.0	8500.0
428	H ₂ S ⁺	+ H ₂	→ H ₃ S ⁺	H		1.40 10 ⁻¹¹	0.0	2300.0
429	CS ⁺	+ H ₂	→ HCS ⁺	H		4.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
430	SH ⁺	+ H	→ S ⁺	H ₂		1.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
431	H ₂ S ⁺	+ H	→ SH ⁺	H ₂		2.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
432	H ₃ S ⁺	+ H	→ H ₂ S ⁺	H ₂		6.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
433	SO ⁺	+ H	→ S ⁺	OH		6.10 10 ⁻¹⁰	0.0	11385.0
434	H ⁺	+ S	→ S ⁺	H		1.00 10 ⁻¹⁵	0.0	0.0
435	H ⁺	+ SH	→ SH ⁺	H		1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
436	H ⁺	+ SH	→ S ⁺	H ₂		1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
437	H ⁺	+ H ₂ S	→ H ₂ S ⁺	H		7.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
438	H ⁺	+ CS	→ CS ⁺	H		4.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
439	H ⁺	+ SO	→ SO ⁺	H		3.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
440	H ⁺	+ OCS	→ SH ⁺	CO		5.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
441	H ₃ ⁺	+ S	→ SH ⁺	H ₂		2.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
442	H ₃ ⁺	+ SH	→ H ₂ S ⁺	H ₂		1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
443	H ₃ ⁺	+ H ₂ S	→ H ₃ S ⁺	H ₂		3.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
444	H ₃ ⁺	+ CS	→ HCS ⁺	H ₂		2.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
445	H ₃ ⁺	+ SO	→ HSO ⁺	H ₂		1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
446	H ₃ ⁺	+ SO ₂	→ HSO ₂ ⁺	H ₂		1.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
447	H ₃ ⁺	+ OCS	→ HOCS ⁺	H ₂		1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
448	He ⁺	+ SH	→ S ⁺	H	He	1.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
449	He ⁺	+ H ₂ S	→ S ⁺	H ₂	He	3.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
450	He ⁺	+ H ₂ S	→ SH ⁺	H	He	4.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
451	He ⁺	+ H ₂ S	→ H ₂ S ⁺	He		3.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
452	He ⁺	+ CS	→ C ⁺	S	He	1.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
453	He ⁺	+ CS	→ S ⁺	C	He	1.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
454	He ⁺	+ SO	→ O ⁺	S	He	8.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
455	He ⁺	+ SO	→ S ⁺	O	He	8.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
456	He ⁺	+ OCS	→ CS ⁺	O	He	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
457	He ⁺	+ OCS	→ S ⁺	CO	He	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
458	He ⁺	+ OCS	→ CO ⁺	S	He	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
459	He ⁺	+ OCS	→ O ⁺	CS	He	7.60 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
460	He ⁺	+ SO ₂	→ S ⁺	O ₂	He	8.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
461	He ⁺	+ SO ₂	→ SO ⁺	O	He	3.44 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0

n°	Réaction chimique					γ	α	β
462	C ⁺	+ S	→ S ⁺	C		1.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
463	C ⁺	+ SH	→ CS ⁺	H		1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
464	C ⁺	+ H ₂ S	→ HCS ⁺	H		1.28 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
465	C ⁺	+ H ₂ S	→ H ₂ S ⁺	C		4.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
466	C ⁺	+ CS	→ CS ⁺	C		1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	700.0
467	C ⁺	+ SO	→ S ⁺	CO		2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
468	C ⁺	+ SO	→ CS ⁺	O		2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
469	C ⁺	+ SO	→ SO ⁺	C		2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
470	C ⁺	+ SO	→ CO ⁺	S		2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
471	C ⁺	+ OCS	→ CS ⁺	CO		1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
472	C ⁺	+ SO ₂	→ SO ⁺	CO		2.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
473	CH ⁺	+ S	→ S ⁺	CH		4.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
474	CH ⁺	+ S	→ SH ⁺	C		4.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
475	CH ⁺	+ S	→ CS ⁺	H		4.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
476	CH ⁺	+ SO	→ OH ⁺	CS		1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
477	CH ⁺	+ SO	→ SH ⁺	CO		1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
478	CH ₃ ⁺	+ S	→ HCS ⁺	H ₂		1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
479	CH ₃ ⁺	+ SO	→ HOCS ⁺	H ₂		9.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
480	CH ₅ ⁺	+ S	→ SH ⁺	CH ₄		1.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
481	H ₃ O ⁺	+ S	→ SH ⁺	H ₂ O		3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	4930.0
482	H ₃ O ⁺	+ H ₂ S	→ H ₃ S ⁺	H ₂ O		1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
483	HCO ⁺	+ S	→ SH ⁺	CO		3.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
484	HCO ⁺	+ SH	→ H ₂ S ⁺	CO		8.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
485	HCO ⁺	+ CS	→ HCS ⁺	CO		1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
486	HCO ⁺	+ SO	→ HSO ⁺	CO		7.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
487	HCO ⁺	+ H ₂ S	→ H ₃ S ⁺	CO		1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
488	HCO ⁺	+ OCS	→ HOCS ⁺	CO		1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
489	O ₂ ⁺	+ S	→ SO ⁺	O		5.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
490	O ₂ ⁺	+ S	→ S ⁺	O ₂		5.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
491	O ₂ ⁺	+ H ₂ S	→ H ₂ S ⁺	O ₂		1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
492	S ⁺	+ CH	→ CS ⁺	H		6.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
493	S ⁺	+ CH ₂	→ HCS ⁺	H		1.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
494	S ⁺	+ OH	→ SO ⁺	H		6.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
495	S ⁺	+ OH	→ SH ⁺	O		2.90 10 ⁻¹⁰	0.0	8820.0
496	S ⁺	+ SH	→ SH ⁺	S		9.70 10 ⁻¹⁰	0.0	350.0
497	S ⁺	+ NO	→ NO ⁺	S		3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
498	S ⁺	+ NH ₃	→ NH ₃ ⁺	S		1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
499	S ⁺	+ O ₂	→ SO ⁺	O		2.30 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
500	NH ₃ ⁺	+ H ₂ S	→ NH ₄ ⁺	SH		6.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
501	HNO ⁺	+ S	→ SH ⁺	NO		1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
502	N ₂ H ⁺	+ S	→ SH ⁺	N ₂		1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
503	SH ⁺	+ O	→ SO ⁺	H		2.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0

n°	Réaction chimique				γ	α	β
504	SH ⁺	+ O	→ S ⁺	OH	2.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
505	SH ⁺	+ S	→ S ⁺	SH	9.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
506	SH ⁺	+ C	→ CS ⁺	H	9.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
507	SH ⁺	+ CH	→ CH ₂ ⁺	S	5.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
508	SH ⁺	+ OH	→ H ₂ S ⁺	O	3.10 10 ⁻¹⁰	0.0	7500.0
509	SH ⁺	+ OH	→ H ₂ O ⁺	S	4.30 10 ⁻¹⁰	0.0	9200.0
510	SH ⁺	+ H ₂ O	→ H ₃ O ⁺	S	6.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
511	SH ⁺	+ H ₂ S	→ H ₂ S ⁺	SH	5.00 10 ⁻¹⁰	0.0	1000.0
512	SH ⁺	+ H ₂ S	→ H ₃ S ⁺	S	5.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
513	SH ⁺	+ NO	→ NO ⁺	SH	3.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
514	SH ⁺	+ NH ₃	→ NH ₃ ⁺	SH	5.25 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
515	SH ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	S	9.75 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
516	H ₂ S ⁺	+ O	→ SH ⁺	OH	3.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
517	H ₂ S ⁺	+ O	→ SO ⁺	H ₂	3.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
518	H ₂ S ⁺	+ C	→ HCS ⁺	H	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
519	H ₂ S ⁺	+ S	→ S ⁺	H ₂ S	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
520	H ₂ S ⁺	+ SH	→ SH ⁺	H ₂ S	5.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
521	H ₂ S ⁺	+ NO	→ NO ⁺	H ₂ S	3.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
522	H ₂ S ⁺	+ H ₂ O	→ H ₃ O ⁺	SH	8.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
523	H ₂ S ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	SH	1.36 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
524	H ₂ S ⁺	+ NH ₃	→ NH ₃ ⁺	H ₂ S	3.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
525	H ₃ S ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	H ₂ S	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
526	H ₃ S ⁺	+ HCN	→ HCNH ⁺	H ₂ S	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
527	HCS ⁺	+ O	→ HCO ⁺	S	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
528	SO ⁺	+ NH ₃	→ NH ₃ ⁺	SO	1.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
529	S ⁺	+ Fe	→ Fe ⁺	S	1.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
530	SH ⁺	+ Fe	→ Fe ⁺	SH	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
531	SO ⁺	+ Fe	→ Fe ⁺	SO	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
532	H ₂ S ⁺	+ Fe	→ Fe ⁺	H ₂ S	1.80 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
533	C ⁺	+ CH ₃	→ C ₂ H ⁺	H ₂	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
534	C ⁺	+ CH ₃	→ C ₂ H ₂ ⁺	H	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
535	C ⁺	+ CH ₃	→ CH ₃ ⁺	C	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
536	H ⁺	+ C ₂	→ C ₂ ⁺	H	3.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
537	H ⁺	+ C ₃	→ C ₃ ⁺	H	4.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
538	He ⁺	+ H	→ H ⁺	He	1.90 10 ⁻¹⁵	0.0	0.0
539	He ⁺	+ C ₂	→ C ⁺	C	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
540	He ⁺	+ C ₂	→ C ₂ ⁺	He	5.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
541	He ⁺	+ CH	→ CH ⁺	He	3.83 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
542	He ⁺	+ H ₂	→ H ₂ ⁺	He	9.60 10 ⁻¹⁵	0.0	0.0
543	He ⁺	+ O ₂	→ O ₂ ⁺	He	3.30 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
544	He ⁺	+ C ₃	→ C ⁺	C ₂	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
545	He ⁺	+ C ₃	→ C ₂ ⁺	C	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0

n°	Réaction chimique				γ	α	β	
546	He ⁺	+ CO ₂	→ O ₂ ⁺	C	He	1.10 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
547	He ⁺	+ HCN	→ C ⁺	N	H	3.70 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
548	He ⁺	+ HNC	→ C ⁺	N	H	4.43 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
549	He ⁺	+ HNC	→ NH ⁺	C	He	4.43 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
550	He ⁺	+ SO ₂	→ O ₂ ⁺	S	He	8.15 10 ⁻¹⁰	-0.5	0.0
551	N ⁺	+ Fe	→ Fe ⁺	N		1.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
552	N ⁺	+ C ₂	→ C ₂ ⁺	N		1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
553	N ⁺	+ CH	→ CH ⁺	N		3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
554	N ⁺	+ CH	→ CN ⁺	H		3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
555	N ⁺	+ CN	→ CN ⁺	N		1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
556	N ⁺	+ NH	→ N ₂ ⁺	H		3.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
557	N ⁺	+ NH	→ NH ⁺	N		3.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
558	N ⁺	+ OH	→ NO ⁺	H		3.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
559	N ⁺	+ OH	→ OH ⁺	N		3.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
560	N ⁺	+ C ₂ H	→ C ₂ H ⁺	N		9.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
561	N ⁺	+ CH ₂	→ CH ₂ ⁺	N		1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
562	N ⁺	+ CO ₂	→ CO ⁺	NO		2.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
563	N ⁺	+ H ₂ O	→ H ₂ O ⁺	N		2.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
564	N ⁺	+ H ₂ S	→ H ₂ S ⁺	N		1.06 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
565	N ⁺	+ HCN	→ HCN ⁺	N		1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
566	N ⁺	+ NH ₂	→ NH ₂ ⁺	N		1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
567	N ⁺	+ OCS	→ S ⁺	CO	N	3.08 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
568	N ⁺	+ OCS	→ CS ⁺	NO		7.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
569	N ⁺	+ NH ₃	→ N ₂ H ⁺	H ₂		2.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
570	N ⁺	+ NH ₃	→ NH ₂ ⁺	NH		2.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
571	N ⁺	+ NH ₃	→ NH ₃ ⁺	N		2.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
572	N ⁺	+ CH ₄	→ HCN ⁺	H ₂	H	5.60 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
573	N ⁺	+ CH ₄	→ CH ₃ ⁺	N	H	4.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
574	N ⁺	+ CH ₄	→ CH ₃ ⁺	NH		4.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
575	N ⁺	+ CH ₄	→ HCNH ⁺	H	H	3.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
576	N ⁺	+ CH ₄	→ HCNH ⁺	H ₂		3.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
577	N ⁺	+ CH ₄	→ CH ₄ ⁺	N		2.80 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
578	O ⁺	+ Fe	→ Fe ⁺	O		2.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
579	O ⁺	+ C ₂	→ C ₂ ⁺	O		4.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
580	O ⁺	+ C ₂	→ CO ⁺	C		4.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
581	O ⁺	+ CH	→ CH ⁺	O		3.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
582	O ⁺	+ CH	→ CO ⁺	H		3.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
583	O ⁺	+ CN	→ NO ⁺	C		1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
584	O ⁺	+ N ₂	→ NO ⁺	N		1.20 10 ⁻¹²	0.0	0.0
585	O ⁺	+ NH	→ NH ⁺	O		3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
586	O ⁺	+ NH	→ NO ⁺	H		3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
587	O ⁺	+ NO	→ NO ⁺	O		1.70 10 ⁻¹²	0.0	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
588	O ⁺	+ O ₂ ⁺ → O ₂ ⁺	3.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
589	O ⁺	+ OH → O ₂ ⁺	3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
590	O ⁺	+ OH → OH ⁺	3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
591	O ⁺	+ C ₂ H → CO ⁺	4.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
592	O ⁺	+ C ₂ H → C ₂ H ⁺	4.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
593	O ⁺	+ CH ₂ → CH ₂ ⁺	9.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
594	O ⁺	+ CO ₂ → O ₂ ⁺	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
595	O ⁺	+ H ₂ O → H ₂ O ⁺	3.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
596	O ⁺	+ H ₂ S → H ₂ O	2.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
597	O ⁺	+ H ₂ S → H ₂ S ⁺	1.80 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
598	O ⁺	+ HCN → CO ⁺	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
599	O ⁺	+ HCN → NO ⁺	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
600	O ⁺	+ HCN → HCO ⁺	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
601	O ⁺	+ NH ₂ → NH ₂ ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
602	O ⁺	+ OCS → S ⁺	2.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
603	O ⁺	+ SO ₂ → O ₂ ⁺	8.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
604	O ⁺	+ NH ₃ → NH ₃ ⁺	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
605	O ⁺	+ CH ₄ → CH ₃ ⁺	1.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
606	O ⁺	+ CH ₄ → CH ₄ ⁺	8.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
607	S ⁺	+ C ₂ → CS ⁺	8.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
608	S ⁺	+ H ₂ S → H ₂ S ⁺	4.40 10 ⁻¹¹	-0.5	0.0
609	C ₂ ⁺	+ C → C ⁺	1.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
610	C ₂ ⁺	+ N → C ⁺	4.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
611	C ₂ ⁺	+ O → CO ⁺	3.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
612	C ₂ ⁺	+ S → S ⁺	5.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
613	C ₂ ⁺	+ S → CS ⁺	5.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
614	C ₂ ⁺	+ C ₂ → C ₃ ⁺	8.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
615	C ₂ ⁺	+ CH → CH ⁺	3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
616	C ₂ ⁺	+ CH → C ₃ ⁺	3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
617	C ₂ ⁺	+ NH → C ₂ H ⁺	3.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
618	C ₂ ⁺	+ NH → C ₂ N ⁺	3.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
619	C ₂ ⁺	+ NO → NO ⁺	3.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
620	C ₂ ⁺	+ O ₂ → CO ⁺	8.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
621	C ₂ ⁺	+ CH ₂ → CH ₂ ⁺	4.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
622	C ₂ ⁺	+ CH ₂ → C ₃ H ⁺	4.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
623	C ₂ ⁺	+ H ₂ O → C ₂ H ⁺	4.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
624	C ₂ ⁺	+ HCN → C ₃ H ⁺	7.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
625	C ₂ ⁺	+ NH ₂ → NH ₂ ⁺	4.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
626	C ₂ ⁺	+ CH ₄ → C ₂ H ⁺	2.38 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
627	C ₂ ⁺	+ CH ₄ → C ₂ H ₂ ⁺	1.82 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
628	C ₂ ⁺	+ CH ₄ → C ₃ H ⁺	1.96 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
629	C ₂ ⁺	+ CH ₄ → C ₃ H ₂ ⁺	2.87 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
630	C ₂ ⁺	+ CH ₄ → C ₃ H ₃ ⁺	1.05 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
631	CH ⁺	+ C → C ₂ ⁺	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
632	CH ⁺	+ Fe → Fe ⁺	2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
633	CH ⁺	+ N → CN ⁺	1.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
634	CH ⁺	+ O → CO ⁺	3.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
635	CH ⁺	+ C ₂ → C ₃ ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
636	CH ⁺	+ CH → C ₂ ⁺	7.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
637	CH ⁺	+ CN → C ₂ N ⁺	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
638	CH ⁺	+ NH → CN ⁺	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
639	CH ⁺	+ NO → NO ⁺	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
640	CH ⁺	+ O ₂ → CO ⁺	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
641	CH ⁺	+ O ₂ → HCO ⁺	9.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
642	CH ⁺	+ OH → CO ⁺	7.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
643	CH ⁺	+ C ₂ H → C ₃ ⁺	9.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
644	CH ⁺	+ CH ₂ → C ₂ H ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
645	CH ⁺	+ CO ₂ → HCO ⁺	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
646	CH ⁺	+ H ₂ O → HCO ⁺	2.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
647	CH ⁺	+ H ₂ O → H ₃ O ⁺	5.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
648	CH ⁺	+ H ₂ S → HCS ⁺	6.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
649	CH ⁺	+ H ₂ S → H ₃ S ⁺	6.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
650	CH ⁺	+ HCN → C ₂ N ⁺	3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
651	CH ⁺	+ HCN → HCNH ⁺	2.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
652	CH ⁺	+ HNC → HCNH ⁺	1.80 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
653	CH ⁺	+ NH ₂ → HCN ⁺	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
654	CH ⁺	+ OCS → HCS ⁺	1.05 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
655	CH ⁺	+ OCS → HOCS ⁺	8.55 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
656	CH ⁺	+ C ₂ H ₂ → C ₃ H ₂ ⁺	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
657	CH ⁺	+ NH ₃ → H ₂ NC ⁺	1.84 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
658	CH ⁺	+ NH ₃ → NH ₃ ⁺	4.59 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
659	CH ⁺	+ NH ₃ → NH ₄ ⁺	4.05 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
660	CH ⁺	+ CH ₄ → C ₂ H ₂ ⁺	1.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
661	CH ⁺	+ CH ₄ → C ₂ H ₃ ⁺	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
662	CN ⁺	+ C → C ⁺	1.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
663	CN ⁺	+ H → H ⁺	6.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
664	CN ⁺	+ O → O ⁺	6.50 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
665	CN ⁺	+ S → S ⁺	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
666	CN ⁺	+ C ₂ → C ₂ ⁺	8.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
667	CN ⁺	+ CH → CH ⁺	6.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
668	CN ⁺	+ CO → CO ⁺	6.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
669	CN ⁺	+ NH → NH ⁺	6.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
670	CN ⁺	+ NO → NO ⁺	8.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
671	CN ⁺	+ O ₂ → NO ⁺	8.60 10 ⁻¹¹	0.0	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
672	CN ⁺	+ O ₂ ⁺	7.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
673	CN ⁺	+ OH ⁺	6.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
674	CN ⁺	+ C ₂ H ⁺	8.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
675	CN ⁺	+ CH ₂ ⁺	8.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
676	CN ⁺	+ H ₂ O	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
677	CN ⁺	+ H ₂ O	1.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
678	CN ⁺	+ H ₂ O	4.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
679	CN ⁺	+ HCN	2.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
680	CN ⁺	+ NH ₂	9.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
681	CO ⁺	+ C	1.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
682	CO ⁺	+ N	8.10 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
683	CO ⁺	+ O	1.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
684	CO ⁺	+ S	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
685	CO ⁺	+ C ₂	8.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
686	CO ⁺	+ CH	3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
687	CO ⁺	+ CH	3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
688	CO ⁺	+ NH	3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
689	CO ⁺	+ NH	3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
690	CO ⁺	+ NO	3.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
691	CO ⁺	+ O ₂	1.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
692	CO ⁺	+ OH	3.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
693	CO ⁺	+ OH	3.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
694	CO ⁺	+ C ₂ H	3.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
695	CO ⁺	+ C ₂ H	3.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
696	CO ⁺	+ CH ₂	4.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
697	CO ⁺	+ CH ₂	4.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
698	CO ⁺	+ H ₂ O	1.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
699	CO ⁺	+ H ₂ O	8.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
700	CO ⁺	+ H ₂ S	2.44 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
701	CO ⁺	+ HCN	3.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
702	CO ⁺	+ NH ₂	4.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
703	CO ⁺	+ NH ₂	4.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
704	CO ⁺	+ SO ₂	1.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
705	CO ⁺	+ NH ₃	4.12 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
706	CO ⁺	+ NH ₃	2.02 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
707	CO ⁺	+ CH ₄	4.55 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
708	CO ⁺	+ CH ₄	7.93 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
709	CS ⁺	+ C	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
710	CS ⁺	+ Fe	1.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
711	CS ⁺	+ O	6.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
712	CS ⁺	+ CH ₄	5.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
713	H ₂ ⁺	+ H	6.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
714	H ₂ ⁺	+ N	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
715	H ₂ ⁺	+ C ₂	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
716	H ₂ ⁺	+ C ₂ H ⁺	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
717	H ₂ ⁺	+ CN	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
718	H ₂ ⁺	+ CN	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
719	H ₂ ⁺	+ N ₂	2.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
720	H ₂ ⁺	+ NH	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
721	H ₂ ⁺	+ NH	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
722	H ₂ ⁺	+ NO	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
723	H ₂ ⁺	+ NO	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
724	H ₂ ⁺	+ O ₂	8.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
725	H ₂ ⁺	+ OH	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
726	H ₂ ⁺	+ C ₂ H	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
727	H ₂ ⁺	+ C ₂ H	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
728	H ₂ ⁺	+ CO ₂	1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
729	H ₂ ⁺	+ CO ₂	2.35 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
730	H ₂ ⁺	+ H ₂ S	7.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
731	H ₂ ⁺	+ H ₂ S	2.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
732	H ₂ ⁺	+ HCN	2.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
733	H ₂ ⁺	+ NH ₂	2.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
734	H ₂ ⁺	+ C ₂ H ₂	4.80 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
735	H ₂ ⁺	+ C ₂ H ₂	4.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
736	H ₂ ⁺	+ NH ₃	5.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
737	H ₂ ⁺	+ CH ₄	2.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
738	H ₂ ⁺	+ CH ₄	1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
739	H ₂ ⁺	+ CH ₄	1.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
740	N ₂ ⁺	+ C	1.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
741	N ₂ ⁺	+ Fe	4.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
742	N ₂ ⁺	+ H	1.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
743	N ₂ ⁺	+ N	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
744	N ₂ ⁺	+ O	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
745	N ₂ ⁺	+ O	1.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
746	N ₂ ⁺	+ S	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
747	N ₂ ⁺	+ C ₂	8.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
748	N ₂ ⁺	+ CH	6.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
749	N ₂ ⁺	+ CN	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
750	N ₂ ⁺	+ CO	7.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
751	N ₂ ⁺	+ NH	6.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
752	N ₂ ⁺	+ NO	4.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
753	N ₂ ⁺	+ O ₂	5.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
754	N ₂ ⁺	+ OH	6.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
755	N ₂ ⁺	+ C ₂ H	7.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0

n°	Réaction chimique	γ	α	β
756	$N_2^+ + CH_2 \rightarrow CH_2^+ + N_2$	$8.70 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
757	$N_2^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + N_2$	$2.20 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
758	$N_2^+ + H_2O \rightarrow N_2H^+ + OH$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
759	$N_2^+ + H_2S \rightarrow S^+ + H_2$	$2.25 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
760	$N_2^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + N_2$	$1.50 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
761	$N_2^+ + HCN \rightarrow HCN^+ + N_2$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
762	$N_2^+ + NH_2 \rightarrow NH_2^+ + N_2$	$8.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
763	$N_2^+ + OCS \rightarrow S^+ + CO$	$1.04 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
764	$N_2^+ + NH_3 \rightarrow NH_3^+ + N_2$	$1.90 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
765	$N_2^+ + CH_4 \rightarrow CH_2^+ + H_2$	$7.00 \cdot 10^{-11}$	0.0	0.0
766	$N_2^+ + CH_4 \rightarrow CH_3^+ + N_2$	$9.30 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
767	$NH^+ + C \rightarrow CH^+ + N$	$1.60 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
768	$NH^+ + N \rightarrow N_2^+ + H$	$1.30 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
769	$NH^+ + O \rightarrow OH^+ + N$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
770	$NH^+ + S \rightarrow S^+ + NH$	$6.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
771	$NH^+ + C_2 \rightarrow C_2H^+ + N$	$4.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
772	$NH^+ + C_2 \rightarrow C_2N^+ + H$	$4.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
773	$NH^+ + C_2 \rightarrow HCN^+ + C$	$4.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
774	$NH^+ + CH \rightarrow CH_2^+ + N$	$9.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
775	$NH^+ + CN \rightarrow HCN^+ + N$	$1.60 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
776	$NH^+ + CO \rightarrow HCO^+ + N$	$1.60 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
777	$NH^+ + N_2 \rightarrow N_2H^+ + N$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
778	$NH^+ + NH \rightarrow NH_2^+ + N$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
779	$NH^+ + NO \rightarrow NO^+ + NH$	$7.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
780	$NH^+ + NO \rightarrow N_2H^+ + O$	$1.78 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
781	$NH^+ + O_2 \rightarrow NO^+ + OH$	$2.00 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
782	$NH^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + NH$	$4.50 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
783	$NH^+ + OH \rightarrow H_2O^+ + N$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
784	$NH^+ + C_2H \rightarrow C_2H_2^+ + N$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
785	$NH^+ + CH_2 \rightarrow CH_3^+ + N$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
786	$NH^+ + CO_2 \rightarrow HNO^+ + CO$	$3.85 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
787	$NH^+ + CO_2 \rightarrow HCO_2^+ + N$	$3.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
788	$NH^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + NH$	$1.05 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
789	$NH^+ + H_2O \rightarrow HNO^+ + H_2$	$3.50 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
790	$NH^+ + H_2O \rightarrow NH_2^+ + OH$	$8.75 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
791	$NH^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + N$	$2.10 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
792	$NH^+ + H_2O \rightarrow NH_3^+ + O$	$1.75 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
793	$NH^+ + HCN \rightarrow HCNH^+ + N$	$1.80 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
794	$NH^+ + HNC \rightarrow HCNH^+ + N$	$1.80 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
795	$NH^+ + NH_2 \rightarrow NH_3^+ + N$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
796	$NH^+ + NH_3 \rightarrow NH_3^+ + NH$	$1.80 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
797	$NH^+ + NH_3 \rightarrow NH_4^+ + N$	$6.00 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0

n°	Réaction chimique	γ	α	β
798	$O_2^+ + C_2 \rightarrow CO^+ + CO$	$4.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
799	$O_2^+ + CH \rightarrow CH^+ + O_2$	$3.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
800	$O_2^+ + CH \rightarrow HCO^+ + O$	$3.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
801	$O_2^+ + NH \rightarrow HNO^+ + O$	$3.20 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
802	$O_2^+ + CH_2 \rightarrow CH_2^+ + O_2$	$4.30 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
803	$O_2^+ + NH_2 \rightarrow NH_2^+ + O_2$	$8.70 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
804	$OH^+ + C \rightarrow CH^+ + O$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
805	$OH^+ + N \rightarrow NO^+ + H$	$8.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
806	$OH^+ + O \rightarrow O_2^+ + H$	$7.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
807	$OH^+ + S \rightarrow S^+ + OH$	$4.30 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
808	$OH^+ + S \rightarrow SO^+ + H$	$4.30 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
809	$OH^+ + C_2 \rightarrow C_2^+ + OH$	$4.80 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
810	$OH^+ + C_2 \rightarrow C_2H^+ + O$	$4.80 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
811	$OH^+ + CH \rightarrow CH^+ + OH$	$3.50 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
812	$OH^+ + CH \rightarrow CH_2^+ + O$	$3.50 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
813	$OH^+ + CN \rightarrow HCN^+ + O$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
814	$OH^+ + CO \rightarrow HCO^+ + O$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
815	$OH^+ + N_2 \rightarrow N_2H^+ + O$	$3.60 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
816	$OH^+ + NH \rightarrow NH_2^+ + O$	$3.60 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
817	$OH^+ + NO \rightarrow NO^+ + OH$	$3.60 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
818	$OH^+ + NO \rightarrow HNO^+ + O$	$6.10 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
819	$OH^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + OH$	$5.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
820	$OH^+ + OH \rightarrow H_2O^+ + O$	$7.00 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
821	$OH^+ + C_2H \rightarrow C_2H^+ + OH$	$4.50 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
822	$OH^+ + C_2H \rightarrow C_2H_2^+ + O$	$4.50 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
823	$OH^+ + CH_2 \rightarrow CH_2^+ + OH$	$4.80 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
824	$OH^+ + CH_2 \rightarrow CH_3^+ + O$	$4.80 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
825	$OH^+ + CO_2 \rightarrow HCO_2^+ + O$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
826	$OH^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + OH$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
827	$OH^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + O$	$1.30 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
828	$OH^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + OH$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
829	$OH^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + O$	$8.20 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
830	$OH^+ + HCN \rightarrow HCNH^+ + O$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
831	$OH^+ + HNC \rightarrow HCNH^+ + O$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
832	$OH^+ + NH_2 \rightarrow NH_2^+ + OH$	$5.00 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
833	$OH^+ + NH_2 \rightarrow NH_3^+ + O$	$5.00 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
834	$OH^+ + NH_3 \rightarrow NH_3^+ + OH$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
835	$OH^+ + NH_3 \rightarrow NH_4^+ + O$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
836	$OH^+ + CH_4 \rightarrow H_3O^+ + CH_2$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
837	$OH^+ + CH_4 \rightarrow CH_5^+ + O$	$1.95 \cdot 10^{-10}$	0.0	0.0
838	$C_2H^+ + C \rightarrow C_3^+ + H$	$1.10 \cdot 10^{-09}$	0.0	0.0
839	$C_2H^+ + N \rightarrow CH^+ + CN$	$9.00 \cdot 10^{-11}$	0.0	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
840	C_2H^+	+ O	$\rightarrow HCO^+$	0.0	0.0
841	C_2H^+	+ S	$\rightarrow S^+$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0
842	C_2H^+	+ CH	$\rightarrow CH_2^+$	$3.20 \cdot 10^{-10}$	0.0
843	C_2H^+	+ CH	$\rightarrow C_3H^+$	$3.20 \cdot 10^{-10}$	0.0
844	C_2H^+	+ NO	$\rightarrow NO^+$	$1.20 \cdot 10^{-10}$	0.0
845	C_2H^+	+ CH ₂	$\rightarrow CH_3^+$	$4.40 \cdot 10^{-10}$	0.0
846	C_2H^+	+ CH ₂	$\rightarrow C_3H_2^+$	$2.20 \cdot 10^{-10}$	0.0
847	C_2H^+	+ HCN	$\rightarrow C_2H_2^+$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0
848	C_2H^+	+ HCN	$\rightarrow HCNH^+$	$9.50 \cdot 10^{-10}$	0.0
849	C_2H^+	+ HNC	$\rightarrow HCNH^+$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0
850	C_2H^+	+ NH ₂	$\rightarrow NH_3^+$	$4.60 \cdot 10^{-10}$	0.0
851	C_2H^+	+ NH ₃	$\rightarrow NH_4^+$	$5.50 \cdot 10^{-10}$	0.0
852	C_2H^+	+ CH ₄	$\rightarrow C_2H_2^+$	$3.74 \cdot 10^{-10}$	0.0
853	C_2H^+	+ CH ₄	$\rightarrow C_3H_3^+$	$1.87 \cdot 10^{-10}$	0.0
854	C_2N^+	+ H ₂	$\rightarrow HCNH^+$	$8.10 \cdot 10^{-10}$	0.0
855	C_2N^+	+ CH ₄	$\rightarrow C_2H_3^+$	$4.20 \cdot 10^{-10}$	0.0
856	C_2N^+	+ CH ₄	$\rightarrow HCNH^+$	$7.00 \cdot 10^{-11}$	0.0
857	C_2N^+	+ H ₂ O	$\rightarrow HCO^+$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0
858	C_2N^+	+ H ₂ O	$\rightarrow HCNH^+$	$1.30 \cdot 10^{-10}$	0.0
859	C_2N^+	+ C ₂ H ₂	$\rightarrow C_3H^+$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0
860	C_2N^+	+ C ₂ H ₂	$\rightarrow HCNH^+$	$1.30 \cdot 10^{-10}$	0.0
861	C_2N^+	+ H ₂ S	$\rightarrow HCS^+$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0
862	CH_2^+	+ C	$\rightarrow C_2H^+$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0
863	CH_2^+	+ O	$\rightarrow HCO^+$	$7.50 \cdot 10^{-10}$	0.0
864	CH_2^+	+ S	$\rightarrow HCS^+$	$1.40 \cdot 10^{-09}$	0.0
865	CH_2^+	+ C ₂	$\rightarrow C_3H^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0
866	CH_2^+	+ CH	$\rightarrow C_2H_2^+$	$7.20 \cdot 10^{-10}$	0.0
867	CH_2^+	+ NH	$\rightarrow HCNH^+$	$7.50 \cdot 10^{-10}$	0.0
868	CH_2^+	+ NO	$\rightarrow NO^+$	$4.20 \cdot 10^{-10}$	0.0
869	CH_2^+	+ O ₂	$\rightarrow HCO^+$	$9.10 \cdot 10^{-10}$	0.0
870	CH_2^+	+ O ₂	$\rightarrow HCO_2^+$	$4.70 \cdot 10^{-10}$	0.0
871	CH_2^+	+ C ₂ H	$\rightarrow C_3H_2^+$	$4.75 \cdot 10^{-10}$	0.0
872	CH_2^+	+ CH ₂	$\rightarrow C_2H_3^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0
873	CH_2^+	+ H ₂ S	$\rightarrow HCS^+$	$1.10 \cdot 10^{-09}$	0.0
874	CH_2^+	+ NH ₂	$\rightarrow HCNH^+$	$1.00 \cdot 10^{-09}$	0.0
875	CH_2^+	+ NH ₃	$\rightarrow NH_4^+$	$1.30 \cdot 10^{-09}$	0.0
876	H_2O^+	+ C	$\rightarrow CH^+$	$1.10 \cdot 10^{-09}$	0.0
877	H_2O^+	+ Fe	$\rightarrow Fe^+$	$1.50 \cdot 10^{-09}$	0.0
878	H_2O^+	+ N	$\rightarrow HNO^+$	$1.90 \cdot 10^{-10}$	0.0
879	H_2O^+	+ O	$\rightarrow O_2^+$	$4.00 \cdot 10^{-11}$	0.0
880	H_2O^+	+ S	$\rightarrow S^+$	$4.30 \cdot 10^{-10}$	0.0
881	H_2O^+	+ S	$\rightarrow HSO^+$	$4.30 \cdot 10^{-10}$	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
882	H_2O^+	+ C ₂	$\rightarrow C_2^+$	$4.70 \cdot 10^{-10}$	0.0
883	H_2O^+	+ C ₂	$\rightarrow C_2H^+$	$4.70 \cdot 10^{-10}$	0.0
884	H_2O^+	+ CH	$\rightarrow CH^+$	$3.40 \cdot 10^{-10}$	0.0
885	H_2O^+	+ CH	$\rightarrow CH_2^+$	$3.40 \cdot 10^{-10}$	0.0
886	H_2O^+	+ CO	$\rightarrow HCO^+$	$5.00 \cdot 10^{-10}$	0.0
887	H_2O^+	+ NH	$\rightarrow H_3O^+$	$7.10 \cdot 10^{-10}$	0.0
888	H_2O^+	+ NO	$\rightarrow NO^+$	$1.20 \cdot 10^{-09}$	0.0
889	H_2O^+	+ O ₂	$\rightarrow O_2^+$	$4.30 \cdot 10^{-10}$	0.0
890	H_2O^+	+ OH	$\rightarrow H_3O^+$	$6.90 \cdot 10^{-10}$	0.0
891	H_2O^+	+ C ₂ H	$\rightarrow C_2H^+$	$4.40 \cdot 10^{-10}$	0.0
892	H_2O^+	+ C ₂ H	$\rightarrow C_2H_2^+$	$4.40 \cdot 10^{-10}$	0.0
893	H_2O^+	+ CH ₂	$\rightarrow CH_2^+$	$4.70 \cdot 10^{-10}$	0.0
894	H_2O^+	+ CH ₂	$\rightarrow CH_3^+$	$4.70 \cdot 10^{-10}$	0.0
895	H_2O^+	+ H ₂ O	$\rightarrow H_3O^+$	$2.10 \cdot 10^{-09}$	0.0
896	H_2O^+	+ H ₂ S	$\rightarrow H_2S^+$	$8.90 \cdot 10^{-10}$	0.0
897	H_2O^+	+ H ₂ S	$\rightarrow H_3S^+$	$7.00 \cdot 10^{-10}$	0.0
898	H_2O^+	+ HCN	$\rightarrow HCNH^+$	$2.10 \cdot 10^{-09}$	0.0
899	H_2O^+	+ HNC	$\rightarrow HCNH^+$	$1.10 \cdot 10^{-09}$	0.0
900	H_2O^+	+ NH ₂	$\rightarrow NH_2^+$	$4.90 \cdot 10^{-10}$	0.0
901	H_2O^+	+ NH ₂	$\rightarrow NH_3^+$	$4.90 \cdot 10^{-10}$	0.0
902	H_2O^+	+ NH ₃	$\rightarrow NH_3^+$	$2.20 \cdot 10^{-09}$	0.0
903	H_2O^+	+ NH ₃	$\rightarrow NH_4^+$	$9.00 \cdot 10^{-10}$	0.0
904	H_2O^+	+ CH ₄	$\rightarrow H_3O^+$	$1.30 \cdot 10^{-09}$	0.0
905	H_3^+	+ C ₂	$\rightarrow C_2H^+$	$1.80 \cdot 10^{-09}$	0.0
906	H_3^+	+ C ₃	$\rightarrow C_3H^+$	$2.00 \cdot 10^{-09}$	0.0
907	HCN^+	+ C	$\rightarrow CH^+$	$1.10 \cdot 10^{-09}$	0.0
908	HCN^+	+ H	$\rightarrow H^+$	$3.70 \cdot 10^{-11}$	0.0
909	HCN^+	+ O	$\rightarrow O^+$	$6.50 \cdot 10^{-11}$	0.0
910	HCN^+	+ S	$\rightarrow S^+$	$5.70 \cdot 10^{-10}$	0.0
911	HCN^+	+ C ₂	$\rightarrow C_2H^+$	$8.40 \cdot 10^{-10}$	0.0
912	HCN^+	+ CH	$\rightarrow CH_2^+$	$6.30 \cdot 10^{-10}$	0.0
913	HCN^+	+ CO	$\rightarrow HCO^+$	$1.40 \cdot 10^{-10}$	0.0
914	HCN^+	+ NH	$\rightarrow NH_2^+$	$6.50 \cdot 10^{-10}$	0.0
915	HCN^+	+ NO	$\rightarrow NO^+$	$8.10 \cdot 10^{-10}$	0.0
916	HCN^+	+ O ₂	$\rightarrow O_2^+$	$3.20 \cdot 10^{-10}$	0.0
917	HCN^+	+ OH	$\rightarrow H_2O^+$	$6.30 \cdot 10^{-10}$	0.0
918	HCN^+	+ C ₂ H	$\rightarrow C_2H_2^+$	$7.90 \cdot 10^{-10}$	0.0
919	HCN^+	+ CH ₂	$\rightarrow CH_3^+$	$8.70 \cdot 10^{-10}$	0.0
920	HCN^+	+ CO ₂	$\rightarrow HCO_2^+$	$2.10 \cdot 10^{-10}$	0.0
921	HCN^+	+ H ₂ O	$\rightarrow H_2O^+$	$1.80 \cdot 10^{-09}$	0.0
922	HCN^+	+ H ₂ O	$\rightarrow H_3O^+$	$8.50 \cdot 10^{-10}$	0.0
923	HCN^+	+ HCN	$\rightarrow HCNH^+$	$1.60 \cdot 10^{-09}$	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
924	HNC ⁺	+ HNC	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
925	HNC ⁺	+ NH ₂	9.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
926	HNC ⁺	+ NH ₃	8.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
927	HNC ⁺	+ NH ₃	1.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
928	HNC ⁺	+ CH ₄	1.04 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
929	HNC ⁺	+ CH ₄	2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
930	HCO ⁺	+ C ₂	8.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
931	HCO ⁺	+ OH	2.33 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
932	HCO ⁺	+ C ₃	1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
933	HCS ⁺	+ NH ₃	1.62 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
934	HNC ⁺	+ C	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
935	HNC ⁺	+ S	5.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
936	HNC ⁺	+ C ₂	8.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
937	HNC ⁺	+ CH	6.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
938	HNC ⁺	+ H ₂	7.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
939	HNC ⁺	+ NH	6.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
940	HNC ⁺	+ NO	8.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
941	HNC ⁺	+ OH	6.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
942	HNC ⁺	+ C ₂ H	7.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
943	HNC ⁺	+ CH ₂	8.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
944	HNC ⁺	+ H ₂ O	8.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
945	HNC ⁺	+ HCN	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
946	HNC ⁺	+ NH ₂	9.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
947	HNC ⁺	+ NH ₃	1.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
948	HNO ⁺	+ C ₂	8.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
949	HNO ⁺	+ CH	4.40 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
950	HNO ⁺	+ NH	3.80 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
951	HNO ⁺	+ C ₂ H	2.00 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
952	HNO ⁺	+ CH ₂	7.11 10 ⁻¹⁰	-0.5	0.0
953	HNO ⁺	+ HCN	7.20 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
954	HNO ⁺	+ HNC	6.52 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
955	HNO ⁺	+ NH ₂	2.20 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
956	HNO ⁺	+ NH ₃	1.70 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
957	HNO ⁺	+ CH ₄	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
958	N ₂ H ⁺	+ C	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
959	N ₂ H ⁺	+ C ₂	8.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
960	N ₂ H ⁺	+ CH	4.50 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
961	N ₂ H ⁺	+ NH	3.80 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
962	N ₂ H ⁺	+ OH	4.70 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
963	N ₂ H ⁺	+ C ₂ H	2.00 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
964	N ₂ H ⁺	+ CH ₂	7.19 10 ⁻¹⁰	-0.5	0.0
965	N ₂ H ⁺	+ HCN	7.30 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
966	N ₂ H ⁺	+ HNC	6.63 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
967	N ₂ H ⁺	+ NH ₂	2.20 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
968	N ₂ H ⁺	+ C ₂ H ₂	1.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
969	N ₂ H ⁺	+ CH ₄	9.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
970	NH ₂ ⁺	+ N	9.10 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
971	NH ₂ ⁺	+ O	7.20 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
972	NH ₂ ⁺	+ S	4.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
973	NH ₂ ⁺	+ C ₂	9.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
974	NH ₂ ⁺	+ CH	3.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
975	NH ₂ ⁺	+ CH	3.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
976	NH ₂ ⁺	+ CN	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
977	NH ₂ ⁺	+ CN	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
978	NH ₂ ⁺	+ NH	7.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
979	NH ₂ ⁺	+ NO	9.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
980	NH ₂ ⁺	+ O ₂	2.10 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
981	NH ₂ ⁺	+ C ₂ H	9.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
982	NH ₂ ⁺	+ CH ₂	4.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
983	NH ₂ ⁺	+ CH ₂	4.90 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
984	NH ₂ ⁺	+ H ₂ O	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
985	NH ₂ ⁺	+ H ₂ O	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
986	NH ₂ ⁺	+ H ₂ O	3.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
987	NH ₂ ⁺	+ H ₂ S	3.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
988	NH ₂ ⁺	+ H ₂ S	2.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
989	NH ₂ ⁺	+ H ₂ S	1.80 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
990	NH ₂ ⁺	+ HCN	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
991	NH ₂ ⁺	+ HNC	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
992	NH ₂ ⁺	+ NH ₂	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
993	NH ₂ ⁺	+ NH ₃	1.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
994	NH ₂ ⁺	+ NH ₃	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
995	C ₂ H ₂ ⁺	+ C	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
996	C ₂ H ₂ ⁺	+ C	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
997	C ₂ H ₂ ⁺	+ C	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
998	C ₂ H ₂ ⁺	+ Fe	2.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
999	C ₂ H ₂ ⁺	+ O	5.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1000	C ₂ H ₂ ⁺	+ CH	2.30 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1001	C ₂ H ₂ ⁺	+ NO	3.80 10 ⁻¹⁰	-0.5	0.0
1002	C ₂ H ₂ ⁺	+ CH ₂	3.66 10 ⁻¹⁰	-0.5	0.0
1003	C ₂ H ₂ ⁺	+ H ₂ S	9.80 10 ⁻¹⁰	-0.5	0.0
1004	C ₂ H ₂ ⁺	+ HNC	2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1005	C ₂ H ₂ ⁺	+ NH ₂	1.10 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1006	C ₂ H ₂ ⁺	+ NH ₃	1.20 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1007	C ₂ H ₂ ⁺	+ NH ₃	5.50 10 ⁻¹⁰	-0.5	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
1008	C ₃ H ⁺	+ NO	→ NO ⁺	-0.5	0.0
1009	C ₃ H ⁺	+ H ₂ S	→ HCS ⁺	-0.5	0.0
1010	C ₃ H ⁺	+ H ₂ S	→ C ₂ H ₃ ⁺	-0.5	0.0
1011	C ₃ H ⁺	+ NH ₃	→ H ₂ NC ⁺	-0.5	0.0
1012	C ₃ H ⁺	+ NH ₃	→ NH ₃ ⁺	-0.5	0.0
1013	C ₃ H ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1014	C ₃ H ⁺	+ CH ₄	→ C ₂ H ₃ ⁺	0.0	0.0
1015	CH ₃ ⁺	+ C	→ C ₂ H ⁺	0.0	0.0
1016	CH ₃ ⁺	+ C	→ C ₂ H ₂ ⁺	0.0	0.0
1017	CH ₃ ⁺	+ Fe	→ Fe ⁺	0.0	0.0
1018	CH ₃ ⁺	+ C ₂	→ C ₃ H ⁺	0.0	0.0
1019	CH ₃ ⁺	+ CH	→ C ₂ H ₂ ⁺	-0.5	0.0
1020	CH ₃ ⁺	+ NH	→ HCNH ⁺	-0.5	0.0
1021	CH ₃ ⁺	+ NO	→ NO ⁺	-0.5	0.0
1022	CH ₃ ⁺	+ C ₂ H	→ C ₃ H ₂ ⁺	-0.5	0.0
1023	CH ₃ ⁺	+ C ₂ H	→ C ₃ H ₃ ⁺	-0.5	0.0
1024	CH ₃ ⁺	+ CH ₂	→ C ₂ H ₃ ⁺	-0.5	0.0
1025	CH ₃ ⁺	+ C ₂ H ₂	→ C ₃ H ₃ ⁺	0.0	0.0
1026	CH ₃ ⁺	+ C ₃ H	→ C ₃ H ⁺	-0.5	0.0
1027	CH ₃ ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1028	HCNH ⁺	+ CH	→ CH ₂ ⁺	-0.5	0.0
1029	HCNH ⁺	+ CH ₂	→ CH ₃ ⁺	-0.5	0.0
1030	HCNH ⁺	+ CH ₂	→ CH ₃ ⁺	-0.5	0.0
1031	HCNH ⁺	+ NH ₂	→ NH ₃ ⁺	-0.5	0.0
1032	HCNH ⁺	+ NH ₂	→ NH ₃ ⁺	-0.5	0.0
1033	HCNH ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1034	HCNH ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1035	H ₃ O ⁺	+ CS	→ HCS ⁺	-0.5	0.0
1036	H ₃ O ⁺	+ C ₃	→ C ₃ H ⁺	0.0	0.0
1037	H ₃ O ⁺	+ NH ₂	→ NH ₃ ⁺	-0.5	0.0
1038	H ₃ S ⁺	+ HNC	→ HCNH ⁺	0.0	0.0
1039	HCO ₂ ⁺	+ C	→ CH ⁺	0.0	0.0
1040	HCO ₂ ⁺	+ H ₂ O	→ H ₃ O ⁺	-0.5	0.0
1041	HCO ₂ ⁺	+ C ₂ H ₂	→ C ₂ H ₃ ⁺	0.0	0.0
1042	HCO ₂ ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1043	H ₂ O ₂ ⁺	+ H ₂ O	→ H ₃ O ⁺	0.0	0.0
1044	H ₂ O ₂ ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	0.0	0.0
1045	NH ₃ ⁺	+ Fe	→ Fe ⁺	0.0	0.0
1046	NH ₃ ⁺	+ O	→ HNO ⁺	0.0	0.0
1047	NH ₃ ⁺	+ C ₂	→ C ₂ H ₂ ⁺	0.0	0.0
1048	NH ₃ ⁺	+ CH	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1049	NH ₃ ⁺	+ NH	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
1050	NH ₃ ⁺	+ NO	→ NO ⁺	-0.5	0.0
1051	NH ₃ ⁺	+ OH	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1052	NH ₃ ⁺	+ CH ₂	→ CH ₃ ⁺	-0.5	0.0
1053	NH ₃ ⁺	+ NH ₂	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1054	NH ₃ ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1055	NH ₃ ⁺	+ CH ₄	→ NH ₄ ⁺	0.0	0.0
1056	C ₂ H ₃ ⁺	+ C	→ C ₃ H ⁺	0.0	0.0
1057	C ₂ H ₃ ⁺	+ C	→ C ₃ H ₂ ⁺	0.0	0.0
1058	C ₂ H ₃ ⁺	+ H	→ C ₂ H ₂ ⁺	0.0	0.0
1059	C ₂ H ₃ ⁺	+ O	→ CH ₃ ⁺	0.0	0.0
1060	C ₂ H ₃ ⁺	+ C ₂ H	→ C ₂ H ₂ ⁺	-0.5	0.0
1061	C ₂ H ₃ ⁺	+ H ₂ S	→ H ₃ S ⁺	-0.5	0.0
1062	C ₂ H ₃ ⁺	+ HCN	→ HCNH ⁺	-0.5	0.0
1063	C ₂ H ₃ ⁺	+ HNC	→ HCNH ⁺	-0.5	0.0
1064	C ₂ H ₃ ⁺	+ C ₃ H	→ C ₃ H ₂ ⁺	-0.5	0.0
1065	C ₂ H ₃ ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	-0.5	0.0
1066	C ₂ H ₃ ⁺	+ C ₃ H ₂	→ C ₃ H ₃ ⁺	-0.5	0.0
1067	C ₃ H ₂ ⁺	+ H	→ C ₃ H ⁺	0.0	0.0
1068	C ₃ H ₂ ⁺	+ O	→ HCO ⁺	0.0	0.0
1069	CH ₄ ⁺	+ O	→ CH ₃ ⁺	0.0	0.0
1070	CH ₄ ⁺	+ CO	→ HCO ⁺	0.0	0.0
1071	CH ₄ ⁺	+ O ₂	→ O ₂ ⁺	0.0	0.0
1072	CH ₄ ⁺	+ CO ₂	→ HCO ₂ ⁺	0.0	0.0
1073	CH ₄ ⁺	+ H ₂ O	→ H ₃ O ⁺	0.0	0.0
1074	CH ₄ ⁺	+ H ₂ S	→ H ₂ S ⁺	0.0	0.0
1075	CH ₄ ⁺	+ H ₂ S	→ H ₃ S ⁺	0.0	0.0
1076	CH ₄ ⁺	+ OCS	→ HOCS ⁺	0.0	0.0
1077	CH ₄ ⁺	+ C ₂ H ₂	→ C ₂ H ₂ ⁺	0.0	0.0
1078	CH ₄ ⁺	+ C ₂ H ₂	→ C ₂ H ₃ ⁺	0.0	0.0
1079	CH ₄ ⁺	+ C ₂ H ₂	→ C ₃ H ₃ ⁺	0.0	0.0
1080	CH ₄ ⁺	+ NH ₃	→ NH ₃ ⁺	0.0	0.0
1081	CH ₄ ⁺	+ NH ₃	→ NH ₄ ⁺	0.0	0.0
1082	CH ₄ ⁺	+ NH ₃	→ CH ₅ ⁺	0.0	0.0
1083	CH ₄ ⁺	+ CH ₄	→ CH ₅ ⁺	0.0	0.0
1084	NH ₄ ⁺	+ C	→ HCNH ⁺	0.0	0.0
1085	NH ₄ ⁺	+ C	→ H ₂ NC ⁺	0.0	0.0
1086	C ₃ H ₃ ⁺	+ O	→ C ₂ H ₃ ⁺	0.0	0.0
1087	CH ₅ ⁺	+ C	→ CH ⁺	0.0	0.0
1088	CH ₅ ⁺	+ C	→ C ₂ H ₃ ⁺	0.0	0.0
1089	CH ₅ ⁺	+ C ₂	→ C ₂ H ⁺	0.0	0.0
1090	CH ₅ ⁺	+ CH	→ CH ₂ ⁺	-0.5	0.0
1091	CH ₅ ⁺	+ NH	→ NH ₂ ⁺	-0.5	0.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
1092	CH ₅ ⁺	+ OH → H ₂ O ⁺	5.20 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1093	CH ₅ ⁺	+ C ₂ H → C ₂ H ₂ ⁺	2.30 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1094	CH ₅ ⁺	+ CH ₂ → CH ₃ ⁺	7.97 10 ⁻¹⁰	-0.5	0.0
1095	CH ₅ ⁺	+ HCN → HCNH ⁺	8.50 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1096	CH ₅ ⁺	+ HNC → HCNH ⁺	7.67 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1097	CH ₅ ⁺	+ NH ₂ → NH ₃ ⁺	2.50 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1098	CH ₅ ⁺	+ C ₂ H ₂ → C ₂ H ₃ ⁺	1.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
1099	CH ₅ ⁺	+ NH ₃ → NH ₄ ⁺	2.00 10 ⁻⁰⁹	-0.5	0.0
1100	CN ⁺	+ H ₂ → HNC ⁺	7.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1101	C	+ CH → C ₂	6.59 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1102	C	+ NO → CO	9.00 10 ⁻¹¹	-0.2	0.0
1103	C	+ CH ₂ → C ₂ H	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1104	C	+ C ₂ H → C ₃	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1105	C	+ NH ₂ → HCN	3.40 10 ⁻¹¹	-0.4	0.0
1106	C	+ SO ₂ → CO	7.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1107	C	+ CH ₃ → C ₂ H ₂	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1108	C	+ C ₂ H ₂ → C ₃ H	7.25 10 ⁻¹¹	-0.1	0.0
1109	C	+ C ₂ H ₂ → C ₃	1.45 10 ⁻¹⁰	-0.1	0.0
1110	C	+ CH ₂ → CH	2.69 10 ⁻¹²	0.0	23600.0
1111	C	+ NH ₂ → CH	9.61 10 ⁻¹³	0.0	10500.0
1112	C	+ CN → C ₂	4.98 10 ⁻¹⁰	0.0	18100.0
1113	C	+ N ₂ → CN	8.70 10 ⁻¹¹	0.0	22600.0
1114	C	+ CO → C ₂	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	52800.0
1115	H	+ HCN → CN	6.19 10 ⁻¹⁰	0.0	12500.0
1116	H	+ NO → O	9.30 10 ⁻¹⁰	-0.1	35200.0
1117	H	+ NO → N	3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	24900.0
1118	H	+ CO ₂ → CO	2.51 10 ⁻¹⁰	0.0	13300.0
1119	N	+ C ₂ → CN	5.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1120	N	+ CH ₂ → HNC	3.95 10 ⁻¹¹	0.2	0.0
1121	N	+ C ₃ → CN	1.00 10 ⁻¹³	0.0	0.0
1122	N	+ CH ₃ → HCN	3.32 10 ⁻¹³	0.0	0.0
1123	O	+ NH → NO	1.16 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1124	O	+ CH ₂ → CO	8.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1125	O	+ NH ₂ → NO	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1126	S	+ C ₂ → CS	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1127	S	+ CH ₂ → CS	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1128	CH	+ NO → HCN	1.20 10 ⁻¹¹	-0.1	0.0
1129	CH	+ O ₂ → CO	3.80 10 ⁻¹¹	-0.5	0.0
1130	CH	+ C ₂ H ₂ → C ₃ H ₂	4.20 10 ⁻¹⁰	-0.2	16.0
1131	CH	+ C ₂ → C ₃	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1132	CN	+ NO → N ₂	1.60 10 ⁻¹³	0.0	0.0
1133	CN	+ OH → HCN	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	1000.0

n°	Réaction chimique		γ	α	β
1134	CN	+ NH ₃ → NH ₂	1.38 10 ⁻¹¹	-1.1	0.0
1135	NH	+ NH → N ₂	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1136	NO	+ NH ₂ → N ₂	1.70 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1137	OH	+ OH → H ₂ O	1.65 10 ⁻¹²	1.1	50.0
1138	OH	+ NH ₂ → NH	1.50 10 ⁻¹²	0.0	0.0
1139	OH	+ NH ₂ → NH ₃	9.18 10 ⁻¹⁴	0.0	0.0
1140	H	+ C ₂ → CH	4.67 10 ⁻¹⁰	0.5	30450.0
1141	H	+ C ₂ H ₂ → C ₂ H	3.80 10 ⁻¹⁰	0.0	13634.0
1142	H	+ CO → OH	1.10 10 ⁻¹⁰	0.5	77700.0
1143	H ₂	+ O ₂ → OH	3.16 10 ⁻¹⁰	0.0	21890.0
1144	C	+ NH → N	1.73 10 ⁻¹¹	0.5	4000.0
1145	C	+ OH → O	2.25 10 ⁻¹¹	0.5	14800.0
1146	C	+ CS → S	1.44 10 ⁻¹¹	0.5	20435.0
1147	CH	+ N → NH	3.03 10 ⁻¹¹	0.7	1207.0
1148	CH	+ O → OH	2.52 10 ⁻¹¹	0.0	2381.0
1149	CH	+ CH ₄ → CH ₃	2.28 10 ⁻¹¹	0.7	3000.0
1150	CH	+ N ₂ → HCN	5.60 10 ⁻¹³	0.9	10128.0
1151	CH	+ NO → CN	1.40 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1152	N	+ CH ₂ → NH	9.96 10 ⁻¹³	0.0	20380.0
1153	N	+ OH → O	1.88 10 ⁻¹¹	0.1	10700.0
1154	N	+ CO ₂ → NO	3.20 10 ⁻¹³	0.0	1710.0
1155	N	+ CS → S	3.80 10 ⁻¹¹	0.5	1160.0
1156	CH ₂	+ CH ₂ → CH ₃	4.00 10 ⁻¹⁰	0.0	5000.0
1157	CH ₂	+ CH ₂ → C ₂ H ₂	1.80 10 ⁻¹⁰	0.0	400.0
1158	CH ₂	+ CH ₂ → C ₂ H ₂	2.63 10 ⁻⁰⁹	0.0	6013.0
1159	CH ₂	+ O → OH	4.98 10 ⁻¹⁰	0.0	6000.0
1160	CH ₂	+ CH ₄ → CH ₃	7.13 10 ⁻¹²	0.0	5050.0
1161	CH ₂	+ OH → O	1.44 10 ⁻¹¹	0.5	3000.0
1162	CH ₂	+ OH → H ₂ O	1.44 10 ⁻¹¹	0.5	3000.0
1163	CH ₂	+ CN → HCN	5.30 10 ⁻¹²	0.0	2500.0
1164	CH ₂	+ N ₂ → HCN	8.00 10 ⁻¹²	0.0	18000.0
1165	CH ₂	+ NO → HCN	3.65 10 ⁻¹²	0.0	0.0
1166	CH ₂	+ O ₂ → CO ₂	3.65 10 ⁻¹¹	-3.3	1443.0
1167	CH ₂	+ O ₂ → CO ₂	2.92 10 ⁻¹¹	-3.3	1443.0
1168	CH ₂	+ O ₂ → CO	2.48 10 ⁻¹⁰	-3.3	1443.0
1169	NH	+ NH → N ₂	1.70 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1170	NH	+ CH ₄ → CH ₃	6.63 10 ⁻¹⁶	6.1	5895.0
1171	NH	+ OH → NH ₂	2.93 10 ⁻¹²	0.1	5800.0
1172	NH	+ OH → H ₂ O	3.11 10 ⁻¹²	1.2	0.0
1173	NH	+ NH ₃ → NH ₂	5.25 10 ⁻¹⁰	0.0	13470.0
1174	NH	+ H ₂ O → OH	1.83 10 ⁻¹²	1.6	14090.0
1175	NH	+ CN → HCN	2.94 10 ⁻¹²	0.5	1000.0

n°	Réaction chimique			γ	α	β
1176	NH	+ NO	\rightarrow N ₂	5.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1177	NH	+ NO	\rightarrow N ₂	1.46 10 ⁻¹¹	-0.6	37.0
1178	CH ₃	+ CH ₃	\rightarrow CH ₄	7.13 10 ⁻¹²	0.0	5052.0
1179	CH ₃	+ OH	\rightarrow CH ₄	3.27 10 ⁻¹⁴	2.2	2240.0
1180	CH ₃	+ OH	\rightarrow H ₂ O	1.20 10 ⁻¹⁰	0.0	1400.0
1181	CH ₃	+ NH ₃	\rightarrow CH ₄	9.55 10 ⁻¹⁴	0.0	4890.0
1182	CH ₃	+ H ₂ O	\rightarrow OH	2.30 10 ⁻¹⁵	3.5	6681.0
1183	CH ₃	+ CN	\rightarrow HCN	9.21 10 ⁻¹²	0.7	1500.0
1184	CH ₃	+ NO	\rightarrow HCN	4.00 10 ⁻¹²	0.0	7900.0
1185	O	+ CH ₄	\rightarrow OH	2.29 10 ⁻¹²	2.2	3820.0
1186	O	+ H ₂ O	\rightarrow OH	1.85 10 ⁻¹¹	0.9	8571.0
1187	O	+ CN	\rightarrow NO	3.81 10 ⁻¹¹	0.5	14545.0
1188	O	+ C ₂ H ₂	\rightarrow C ₂ H	5.30 10 ⁻⁰⁹	0.0	8520.0
1189	O	+ C ₂ H ₂	\rightarrow CO	8.39 10 ⁻¹²	1.0	1197.0
1190	O	+ HCN	\rightarrow CN	6.21 10 ⁻¹⁰	0.0	12439.0
1191	O	+ HCN	\rightarrow CO	7.30 10 ⁻¹³	1.1	3742.0
1192	O	+ N ₂	\rightarrow NO	2.51 10 ⁻¹⁰	0.0	38602.0
1193	O	+ CO ₂	\rightarrow O ₂	2.46 10 ⁻¹¹	0.0	26567.0
1194	O	+ CS	\rightarrow SO	4.68 10 ⁻¹¹	0.5	28940.0
1195	O	+ OCS	\rightarrow CO ₂	8.30 10 ⁻¹¹	0.0	5530.0
1196	NH ₂	+ CH ₄	\rightarrow CH ₃	2.90 10 ⁻¹³	2.9	5380.0
1197	NH ₂	+ NO	\rightarrow N ₂	1.49 10 ⁻¹²	0.0	0.0
1198	CH ₄	+ OH	\rightarrow H ₂ O	3.77 10 ⁻¹³	2.4	1162.0
1199	CH ₄	+ CN	\rightarrow HCN	3.14 10 ⁻¹²	1.5	504.0
1200	OH	+ C ₂ H ₂	\rightarrow C ₂ H	1.05 10 ⁻¹³	2.7	6060.0
1201	OH	+ HCN	\rightarrow CN	1.87 10 ⁻¹³	1.5	3887.0
1202	OH	+ HCN	\rightarrow CO	1.07 10 ⁻¹³	0.0	5892.0
1203	C ₂	+ O ₂	\rightarrow CO	1.50 10 ⁻¹¹	0.0	4300.0
1204	CN	+ CN	\rightarrow N ₂	2.66 10 ⁻⁰⁹	0.0	21638.0
1205	C ₂ H ₂	+ NO	\rightarrow HCN	8.97 10 ⁻¹²	0.0	18973.0
1206	CO	+ O ₂	\rightarrow CO ₂	5.99 10 ⁻¹²	0.0	24075.0
1207	NO	+ NO	\rightarrow O ₂	2.51 10 ⁻¹¹	0.0	30653.0
1208	NO	+ S	\rightarrow SO	1.75 10 ⁻¹⁰	0.0	20200.0
1209	S	+ SO ₂	\rightarrow SO	9.76 10 ⁻¹²	0.0	4545.0
1210	NH	+ O ₂	\rightarrow NO	2.54 10 ⁻¹⁴	1.2	312.0
1211	CH	+ NO	\rightarrow CO	1.99 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1212	H ⁺	+ H ₂ S	\rightarrow S ⁺	3.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1213	H ₃ ⁺	+ O	\rightarrow H ₂ O ⁺	3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1214	CH	+ HCNH ⁺	\rightarrow HNC	3.15 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1215	N	+ H ₂ O ⁺	\rightarrow NO ⁺	2.80 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1216	N	+ CN ⁺	\rightarrow N ₂ ⁺	6.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1217	N ⁺	+ H ₂ S	\rightarrow S ⁺	2.28 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0

n°	Réaction chimique			γ	α	β
1218	N	+ C ₃ H ₂ ⁺	\rightarrow C ₂ H ₂ ⁺	3.74 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1219	N	+ C ₃ H ₂ ⁺	\rightarrow HCNH ⁺	6.60 10 ⁻¹²	0.0	0.0
1220	CH ₂ ⁺	+ H ₂ S	\rightarrow H ₃ S ⁺	2.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1221	O	+ C ₃ H ₃ ⁺	\rightarrow HCO ⁺	2.00 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1222	O ⁺	+ SO ₂	\rightarrow SO ⁺	3.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1223	CH ₄	+ S ⁺	\rightarrow HCS ⁺	2.00 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1224	CH ₄	+ C ₃ ⁺	\rightarrow C ₃ H ⁺	2.38 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1225	CH ₄	+ C ₃ H ₂ ⁺	\rightarrow C ₃ H ₃ ⁺	5.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1226	NH ₃	+ C ₃ H ₃ ⁺	\rightarrow NH ₄ ⁺	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
1227	CH ₅ ⁺	+ H ₂ S	\rightarrow H ₃ S ⁺	1.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
1228	CH ₅ ⁺	+ CO ₂	\rightarrow HCO ₂ ⁺	3.20 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1229	H ₂ O	+ HOCS ⁺	\rightarrow H ₃ O ⁺	3.40 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
1230	H ₂ O ⁺	+ SO ₂	\rightarrow HSO ₂ ⁺	2.60 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
1231	H ₃ O ⁺	+ C ₂	\rightarrow C ₂ H ⁺	9.20 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1232	CN	+ HNO ⁺	\rightarrow NO	8.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1233	C ₂ H ₂ ⁺	+ HCN	\rightarrow HCNH ⁺	2.30 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1234	C ₂ H ₂	+ O ₂ ⁺	\rightarrow HCO ⁺	6.50 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1235	C ₂ H ₂ ⁺	+ H ₂ S	\rightarrow H ₃ S ⁺	4.60 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1236	HCN	+ C ₃ ⁺	\rightarrow C ₃ H ⁺	2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1237	HCNH ⁺	+ H ₂ S	\rightarrow H ₃ S ⁺	1.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1238	HCNH ⁺	+ H ₂ S	\rightarrow H ₃ S ⁺	1.70 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1239	He ⁺	+ C	\rightarrow C ⁺	6.30 10 ⁻¹⁵	0.8	0.0
1240	O ⁺	+ C ₂ H ₂	\rightarrow C ₂ H ₂ ⁺	3.90 10 ⁻¹¹	0.0	0.0
1241	O ⁺	+ CO	\rightarrow CO ⁺	4.90 10 ⁻¹²	0.5	4580.0
1242	OH	+ C ₂ ⁺	\rightarrow C ₂	6.50 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1243	H ₂ O ⁺	+ C ₂ H ₂	\rightarrow C ₂ H ₂ ⁺	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
1244	C ₂	+ O ₂ ⁺	\rightarrow O ₂	4.10 10 ⁻¹⁰	0.0	0.0
1245	C ₂ H ₂	+ HCN ⁺	\rightarrow C ₂ H ₂ ⁺	1.50 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
1246	C ₂ H ₂	+ O ₂ ⁺	\rightarrow C ₂ H ₂ ⁺	1.11 10 ⁻⁰⁹	0.0	0.0
1247	H	+ H ₂	\rightarrow H	4.67 10 ⁻⁰⁷	-1.0	55000.0
1248	H	+ CH	\rightarrow C	6.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	40200.0
1249	H	+ OH	\rightarrow O	6.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	50900.0
1250	H	+ H ₂ O	\rightarrow OH	5.80 10 ⁻⁰⁹	0.0	52900.0
1251	H	+ O ₂	\rightarrow O	6.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	52300.0
1252	H ₂	+ H ₂	\rightarrow H ₂	1.00 10 ⁻⁰⁸	0.0	84100.0
1253	H ₂	+ CH	\rightarrow C	6.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	40200.0
1254	H ₂	+ OH	\rightarrow O	6.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	50900.0
1255	H ₂	+ H ₂ O	\rightarrow OH	5.80 10 ⁻⁰⁹	0.0	52900.0
1256	H ₂	+ O ₂	\rightarrow O	6.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	52300.0
1257	C	+ H	\rightarrow CH	1.00 10 ⁻¹⁷	0.0	0.0
1258	C ⁺	+ H	\rightarrow CH ⁺	7.00 10 ⁻¹⁷	0.0	0.0
1259	C ⁺	+ H ₂	\rightarrow CH ₂ ⁺	5.00 10 ⁻¹⁶	0.0	0.0

n°	Réaction chimique	γ	α	β
1260	CH ₃ ⁺ + H ₂ → CH ₅ ⁺ hv	6.00 10 ⁻¹⁵	0.0	0.0
1261	C ₃ H ⁺ + H ₂ → C ₃ H ₃ ⁺ hv	3.00 10 ⁻¹³	-1.0	0.0
1262	SH ⁺ + H ₂ → H ₃ S ⁺ hv	1.00 10 ⁻¹⁵	0.0	0.0
1263	C ⁺ + O → CO ⁺ hv	2.50 10 ⁻¹⁸	0.0	0.0
1264	H ⁺ + H → H ₂ ⁺ hv	2.00 10 ⁻²⁰	1.0	0.0
1265	S ⁺ + H ₂ → H ₂ S ⁺ hv	1.00 10 ⁻¹⁷	-0.2	0.0
1266	C ₃ ⁺ + H → C ₃ H ⁺ hv	7.00 10 ⁻¹⁶	-1.5	0.0
1267	C ₂ H ₂ ⁺ + H → C ₂ H ₃ ⁺ hv	7.00 10 ⁻¹⁵	-1.5	0.0
1268	C ₃ H ⁺ + H → C ₃ H ₂ ⁺ hv	1.00 10 ⁻¹⁴	-1.5	0.0
1269	C ₃ H ₂ ⁺ + H → C ₃ H ₃ ⁺ hv	4.00 10 ⁻¹⁵	-1.5	0.0
1270	C + C → C ₂ hv	1.00 10 ⁻¹⁷	0.0	0.0
1271	C + N → CN hv	1.00 10 ⁻¹⁷	0.0	0.0
1272	C + O → CO hv	2.10 10 ⁻¹⁹	0.0	0.0
1273	C + H ₂ → CH ₂ hv	1.00 10 ⁻¹⁷	0.0	0.0
1274	H + O → OH hv	9.90 10 ⁻¹⁹	-0.4	0.0
1275	O + O → O ₂ hv	4.90 10 ⁻²⁰	1.6	0.0
1276	O + SO → SO ₂ hv	3.20 10 ⁻¹⁶	-1.6	0.0
1277	S + CO → OCS hv	1.60 10 ⁻¹⁷	-1.5	0.0
1278	CH + H ₂ → CH ₃ hv	3.25 10 ⁻¹⁷	-0.6	0.0
1279	C + C ₂ → C ₃ hv	3.30 10 ⁻¹⁶	-1.0	0.0
1280	H + OH → H ₂ O hv	4.00 10 ⁻¹⁸	-2.0	0.0
1281	C ⁺ + C → C ₂ ⁺ hv	4.01 10 ⁻¹⁸	0.2	101.5
1282	C ⁺ + N → CN ⁺ hv	1.08 10 ⁻¹⁸	0.1	57.5
1283	C + S ⁺ → CS ⁺ hv	2.01 10 ⁻¹⁸	0.1	301.0
1284	C + S → CS hv	4.36 10 ⁻¹⁹	0.2	0.0
1285	C ⁺ + S → CS ⁺ hv	3.07 10 ⁻¹⁹	0.1	0.0
1286	N ⁺ + N → N ₂ ⁺ hv	3.71 10 ⁻¹⁸	0.2	26.1
1287	H ₂ ⁺ + e ⁻ → H hv	1.60 10 ⁻⁰⁸	-0.4	0.0
1288	H ₃ ⁺ + e ⁻ → H hv	5.44 10 ⁻⁰⁸	-0.5	0.0
1289	H ₃ ⁺ + e ⁻ → H ₂ hv	1.36 10 ⁻⁰⁸	-0.5	0.0
1290	CH ⁺ + e ⁻ → C hv	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.4	0.0
1291	CH ₂ ⁺ + e ⁻ → C hv	1.25 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1292	CH ₂ ⁺ + e ⁻ → CH hv	1.25 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1293	CH ₃ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ hv	1.66 10 ⁻⁰⁷	-0.7	0.0
1294	CH ₃ ⁺ + e ⁻ → CH hv	5.80 10 ⁻⁰⁸	-0.7	0.0
1295	CH ₃ ⁺ + e ⁻ → CH hv	6.60 10 ⁻⁰⁸	-0.7	0.0
1296	CH ₃ ⁺ + e ⁻ → C hv	1.25 10 ⁻⁰⁷	-0.7	0.0
1297	CH ₄ ⁺ + e ⁻ → CH ₃ hv	3.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1298	CH ₄ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ hv	3.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1299	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ hv	8.75 10 ⁻⁰⁸	-0.3	0.0
1300	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ hv	8.75 10 ⁻⁰⁸	-0.3	0.0
1301	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH ₃ hv	8.75 10 ⁻⁰⁸	-0.3	0.0

n°	Réaction chimique	γ	α	β
1302	CH ₅ ⁺ + e ⁻ → CH ₄ H	8.75 10 ⁻⁰⁸	-0.3	0.0
1303	O ₂ ⁺ + e ⁻ → O O	1.95 10 ⁻⁰⁷	-0.7	0.0
1304	OH ⁺ + e ⁻ → O H	3.75 10 ⁻⁰⁸	-0.5	0.0
1305	H ₂ O ⁺ + e ⁻ → OH H	6.93 10 ⁻⁰⁸	-0.5	0.0
1306	H ₂ O ⁺ + e ⁻ → O H ₂	3.15 10 ⁻⁰⁸	-0.5	0.0
1307	H ₂ O ⁺ + e ⁻ → O H H	2.14 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1308	H ₃ O ⁺ + e ⁻ → H ₂ O H	1.06 10 ⁻⁰⁷	-0.7	0.0
1309	H ₃ O ⁺ + e ⁻ → OH H ₂	5.80 10 ⁻⁰⁸	-0.7	0.0
1310	H ₃ O ⁺ + e ⁻ → OH H H	1.54 10 ⁻⁰⁷	-0.7	0.0
1311	CO ⁺ + e ⁻ → C O	1.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1312	HCO ⁺ + e ⁻ → CO H	2.40 10 ⁻⁰⁷	-0.7	0.0
1313	HCO ₂ ⁺ + e ⁻ → CO ₂ H	2.24 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1314	HCO ₂ ⁺ + e ⁻ → CO OH	1.16 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1315	C ₂ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H H	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1316	C ₂ H ₂ ⁺ + e ⁻ → CH CH	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1317	C ₂ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H H ₂	1.35 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1318	C ₂ H ₃ ⁺ + e ⁻ → CH ₂ CH	1.35 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1319	C ₂ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H ₂ H	3.00 10 ⁻⁰⁸	-0.5	0.0
1320	C ₃ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H H	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1321	C ₃ H ₂ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H CH	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1322	C ₃ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₃ H ₂ H	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1323	C ₃ H ₃ ⁺ + e ⁻ → C ₂ H ₂ CH	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1324	NH ⁺ + e ⁻ → N H	0.43 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1325	NH ₂ ⁺ + e ⁻ → NH H	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1326	NH ₂ ⁺ + e ⁻ → N H H	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1327	NH ₃ ⁺ + e ⁻ → NH ₂ H	3.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1328	NH ₄ ⁺ + e ⁻ → NH ₂ H ₂	7.60 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1329	NH ₄ ⁺ + e ⁻ → NH ₃ H	7.60 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1330	CN ⁺ + e ⁻ → C N	3.40 10 ⁻⁰⁷	-0.6	0.0
1331	C ₂ N ⁺ + e ⁻ → C ₂ N	1.01 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1332	C ₂ N ⁺ + e ⁻ → CN C	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1333	HC ₂ N ⁺ + e ⁻ → HCN C	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0
1334	HCN ⁺ + e ⁻ → CN H	1.95 10 ⁻⁰⁷	-1.0	0.0
1335	HCN ⁺ + e ⁻ → CH N	1.95 10 ⁻⁰⁷	-1.0	0.0
1336	N ₂ ⁺ + e ⁻ → N N	3.60 10 ⁻⁰⁸	-0.4	0.0
1337	N ₂ H ⁺ + e ⁻ → N ₂ H	5.70 10 ⁻⁰⁸	-1.0	0.0
1338	N ₂ H ⁺ + e ⁻ → N NH	1.13 10 ⁻⁰⁷	-1.0	0.0
1339	HCNH ⁺ + e ⁻ → HCN H	9.45 10 ⁻⁰⁷	-0.7	0.0
1340	HCNH ⁺ + e ⁻ → HNC H	9.45 10 ⁻⁰⁷	-0.7	0.0
1341	HCNH ⁺ + e ⁻ → CN H H	9.10 10 ⁻⁰⁸	-0.7	0.0
1342	HCNH ⁺ + e ⁻ → CN H ₂	1.80 10 ⁻⁰⁸	-0.7	0.0
1343	H ₂ NC ⁺ + e ⁻ → HNC H	1.80 10 ⁻⁰⁷	-0.5	0.0

n°	Réaction chimique			γ	α	β
1344	H ₂ NC ⁺	+ e ⁻	→ CN	H ₂	1.80 10 ⁻⁰⁸	-0.5 0.0
1345	NO ⁺	+ e ⁻	→ N	O	4.00 10 ⁻⁰⁷	-0.9 0.0
1346	HNO ⁺	+ e ⁻	→ NO	H	3.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1347	SH ⁺	+ e ⁻	→ S	H	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1348	H ₂ S ⁺	+ e ⁻	→ SH	H	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1349	H ₂ S ⁺	+ e ⁻	→ S	H	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1350	H ₃ S ⁺	+ e ⁻	→ H ₂ S	H	3.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1351	H ₃ S ⁺	+ e ⁻	→ SH	H ₂	1.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1352	CS ⁺	+ e ⁻	→ C	S	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1353	HCS ⁺	+ e ⁻	→ CS	H	7.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1354	SO ⁺	+ e ⁻	→ S	O	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1355	HSO ⁺	+ e ⁻	→ SO	H	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1356	HSO ₂ ⁺	+ e ⁻	→ SO	O	1.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1357	HSO ₂ ⁺	+ e ⁻	→ SO	OH	1.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1358	HOCS ⁺	+ e ⁻	→ OH	CS	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1359	HOCS ⁺	+ e ⁻	→ OCS	H	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1360	C ₂ ⁺	+ e ⁻	→ C	C	8.84 10 ⁻⁰⁸	-0.5 0.0
1361	C ₂ H ⁺	+ e ⁻	→ C ₂	H	1.16 10 ⁻⁰⁷	-0.8 0.0
1362	C ₂ H ⁺	+ e ⁻	→ CH	C	1.05 10 ⁻⁰⁷	-0.8 0.0
1363	C ₂ H ⁺	+ e ⁻	→ C	C	4.80 10 ⁻⁰⁸	-0.8 0.0
1364	C ₃ ⁺	+ e ⁻	→ C ₂	C	3.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1365	CH ₂ ⁺	+ e ⁻	→ C	H	4.00 10 ⁻⁰⁷	-0.6 0.0
1366	HCO ⁺	+ e ⁻	→ OH	C	1.00 10 ⁻⁰⁸	-0.7 0.0
1367	HCO ⁺	+ e ⁻	→ CH	O	1.00 10 ⁻⁰⁸	-0.7 0.0
1368	HCS ⁺	+ e ⁻	→ CH	S	7.86 10 ⁻⁰⁷	-0.6 0.0
1369	HNC ⁺	+ e ⁻	→ CN	H	3.90 10 ⁻⁰⁷	-1.0 0.0
1370	C ₂ H ₂ ⁺	+ e ⁻	→ C ₂	H	1.70 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1371	C ₂ H ₂ ⁺	+ e ⁻	→ CH ₂	C	2.89 10 ⁻⁰⁸	-0.5 0.0
1372	C ₂ H ₂ ⁺	+ e ⁻	→ C ₂	H ₂	1.15 10 ⁻⁰⁸	-0.5 0.0
1373	C ₃ H ⁺	+ e ⁻	→ C ₂ H	C	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1374	C ₃ H ⁺	+ e ⁻	→ C ₃	H	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1375	H ₃ O ⁺	+ e ⁻	→ H ₂	O	5.60 10 ⁻⁰⁹	-0.5 0.0
1376	HCO ₂ ⁺	+ e ⁻	→ CO	H	8.10 10 ⁻⁰⁷	-0.6 0.0
1377	HSO ₂ ⁺	+ e ⁻	→ SO ₂	H	2.00 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1378	NH ₃ ⁺	+ e ⁻	→ NH	H	1.55 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1379	C ₂ H ₃ ⁺	+ e ⁻	→ C ₂ H	H	2.95 10 ⁻⁰⁷	-0.8 0.0
1380	C ₂ H ₃ ⁺	+ e ⁻	→ C ₂	H ₂	1.50 10 ⁻⁰⁸	-0.8 0.0
1381	C ₂ H ₃ ⁺	+ e ⁻	→ CH ₃	C	3.00 10 ⁻⁰⁹	-0.8 0.0
1382	C ₃ H ₂ ⁺	+ e ⁻	→ C ₂	CH ₂	3.00 10 ⁻⁰⁸	-0.5 0.0
1383	C ₃ H ₂ ⁺	+ e ⁻	→ C ₃	H	6.00 10 ⁻⁰⁸	-0.5 0.0
1384	C ₃ H ₂ ⁺	+ e ⁻	→ C ₃	H ₂	1.50 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1385	C ₃ H ₂ ⁺	+ e ⁻	→ C ₂ H ₂	C	3.00 10 ⁻⁰⁸	-0.5 0.0

n°	Réaction chimique			γ	α	β
1386	NH ₄ ⁺	+ e ⁻	→ NH ₂	H	3.20 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1387	C ₃ H ₃ ⁺	+ e ⁻	→ C ₃ H	H ₂	3.15 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1388	CH ₅ ⁺	+ e ⁻	→ CH ₃	H	1.95 10 ⁻⁰⁷	-0.5 0.0
1389	H ₂	+ e ⁻	→ H	H	3.22 10 ⁻⁰⁹	0.3 102000.0
1390	H ⁺	+ e ⁻	→ H	hv	3.61 10 ⁻¹²	-0.8 0.0
1391	He ⁺	+ e ⁻	→ He	hv	4.50 10 ⁻¹²	-0.7 0.0
1392	C ⁺	+ e ⁻	→ C	hv	4.40 10 ⁻¹²	-0.6 0.0
1393	O ⁺	+ e ⁻	→ O	hv	3.40 10 ⁻¹²	-0.6 0.0
1394	Fe ⁺	+ e ⁻	→ Fe	hv	3.70 10 ⁻¹²	-0.7 0.0
1395	N ⁺	+ e ⁻	→ N	hv	3.80 10 ⁻¹²	-0.6 0.0
1396	S ⁺	+ e ⁻	→ S	hv	3.90 10 ⁻¹²	-0.6 0.0
1397	H ₂ S ⁺	+ e ⁻	→ H ₂ S	hv	1.10 10 ⁻¹⁰	-0.7 0.0
1398	H ₂ ⁺	+ e ⁻	→ H ₂	hv	2.25 10 ⁻⁰⁷	-0.4 0.0
1399	CH ₃ ⁺	+ e ⁻	→ CH ₃	hv	1.10 10 ⁻¹⁰	-0.7 0.0
1400	O ₂	+ hv	→ O	O	7.90 10 ⁻¹⁰	0.0 1.8
1401	O ₂	+ hv	→ O ₂ ⁺	e ⁻	7.70 10 ⁻¹¹	0.0 3.7
1402	OH	+ hv	→ O	H	4.20 10 ⁻¹⁰	0.0 1.7
1403	OH	+ hv	→ OH ⁺	e ⁻	1.60 10 ⁻¹²	0.0 3.1
1404	H ₂ O	+ hv	→ OH	H	8.00 10 ⁻¹⁰	0.0 1.7
1405	H ₂ O	+ hv	→ H ₂ O ⁺	e ⁻	3.30 10 ⁻¹¹	0.0 3.9
1406	CH	+ hv	→ C	H	9.50 10 ⁻¹⁰	0.0 1.1
1407	CH	+ hv	→ CH ⁺	e ⁻	7.60 10 ⁻¹⁰	0.0 2.8
1408	CH ₂	+ hv	→ CH	H	7.20 10 ⁻¹⁰	0.0 1.7
1409	CH ₂	+ hv	→ CH ₂ ⁺	e ⁻	3.00 10 ⁻¹⁰	0.0 2.3
1410	CH ₃	+ hv	→ CH ₂	H	5.00 10 ⁻¹⁰	0.0 1.9
1411	CH ₃	+ hv	→ CH ₃ ⁺	e ⁻	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0 2.1
1412	CH ₄	+ hv	→ CH ₂	H ₂	1.20 10 ⁻⁰⁹	0.0 2.1
1413	CH ₄	+ hv	→ CH ₄ ⁺	e ⁻	6.80 10 ⁻¹²	0.0 4.0
1414	C ₂	+ hv	→ C	C	2.30 10 ⁻¹⁰	0.0 2.1
1415	C ₂	+ hv	→ C ₂ ⁺	e ⁻	4.10 10 ⁻¹⁰	0.0 3.5
1416	C ₂ H	+ hv	→ C ₂	H	5.10 10 ⁻¹⁰	0.0 1.9
1417	C ₂ H	+ hv	→ C ₂ H ⁺	e ⁻	1.00 10 ⁻¹¹	0.0 2.0
1418	C ₂ H ₂	+ hv	→ C ₂ H	H	3.20 10 ⁻⁰⁹	0.0 1.8
1419	C ₂ H ₂	+ hv	→ C ₂ H ₂ ⁺	e ⁻	3.30 10 ⁻¹⁰	0.0 3.1
1420	C ₃	+ hv	→ C ₂	C	3.80 10 ⁻⁰⁹	0.0 1.8
1421	C ₃ H	+ hv	→ C ₃	H	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0 1.7
1422	C ₃ H ₂	+ hv	→ C ₃ H	H	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0 1.8
1423	CO ₂	+ hv	→ CO	O	8.70 10 ⁻¹⁰	0.0 2.5
1424	Fe	+ hv	→ Fe ⁺	e ⁻	2.80 10 ⁻¹⁰	0.0 1.9
1425	H ₂ ⁺	+ hv	→ H ⁺	H	5.70 10 ⁻¹⁰	0.0 1.9
1426	H ₃ ⁺	+ hv	→ H ₂ ⁺	H	5.00 10 ⁻¹³	0.0 2.3
1427	H ₃ ⁺	+ hv	→ H ⁺	H ₂	5.00 10 ⁻¹³	0.0 1.8

n°	Réaction chimique	γ	α	β
1428	CH ⁺ + hv → H ⁺	3.20 10 ⁻¹⁰	0.0	2.5
1429	CH ⁺ + hv → C ⁺	2.00 10 ⁻¹²	0.0	3.0
1430	CH ₂ ⁺ + hv → CH ⁺	1.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1431	CH ₃ ⁺ + hv → CH ₂ ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1432	CH ₃ ⁺ + hv → CH ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1433	CH ₄ ⁺ + hv → CH ₃ ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1434	CH ₄ ⁺ + hv → CH ₂ ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1435	CH ₅ ⁺ + hv → CH ₄ ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1436	CH ₅ ⁺ + hv → CH ₃ ⁺	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1437	C ₂ ⁺ + hv → C	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	1.7
1438	O ₂ ⁺ + hv → O	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	1.7
1439	OH ⁺ + hv → O ⁺	1.10 10 ⁻¹¹	0.0	2.8
1440	H ₂ O ⁺ + hv → OH ⁺	3.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1441	H ₂ O ⁺ + hv → H ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1442	H ₂ O ⁺ + hv → H ₂ ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1443	H ₃ O ⁺ + hv → H ₂ O ⁺	1.50 10 ⁻¹¹	0.0	2.0
1444	H ₃ O ⁺ + hv → H ₂ ⁺	5.00 10 ⁻¹¹	0.0	2.0
1445	H ₃ O ⁺ + hv → H ₂ O	5.00 10 ⁻¹¹	0.0	2.0
1446	CO ⁺ + hv → C ⁺	3.00 10 ⁻¹¹	0.0	3.0
1447	HCO ⁺ + hv → CO ⁺	7.80 10 ⁻¹²	0.0	3.0
1448	HCO ₂ ⁺ + hv → H ⁺	3.00 10 ⁻¹⁰	0.0	3.0
1449	C ₂ H ⁺ + hv → C ₂ ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1450	C ₂ H ₂ ⁺ + hv → C ₂ ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1451	C ₂ H ₃ ⁺ + hv → C ₂ H ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	3.0
1452	C ₃ ⁺ + hv → C ₂ ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	3.0
1453	C ₃ H ⁺ + hv → C ₃ ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	3.0
1454	C ₃ H ₂ ⁺ + hv → C ₃ ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	3.0
1455	C ₃ H ₃ ⁺ + hv → C ₃ H ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	3.0
1456	N ₂ + hv → N	2.30 10 ⁻¹⁰	0.0	3.8
1457	NH + hv → N	5.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1458	NH + hv → NH ⁺	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	2.0
1459	NH ₂ + hv → NH	7.40 10 ⁻¹⁰	0.0	1.6
1460	NH ₂ + hv → NH ₂ ⁺	1.73 10 ⁻¹⁰	0.0	2.6
1461	NH ₃ + hv → NH ₂	1.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.8
1462	NH ₃ + hv → NH ₃ ⁺	2.80 10 ⁻¹⁰	0.0	2.7
1463	CN + hv → C	4.64 10 ⁻¹⁰	0.0	3.6
1464	HCN + hv → CN	5.70 10 ⁻¹⁰	0.0	2.6
1465	HNC + hv → CN	5.70 10 ⁻¹⁰	0.0	2.6
1466	HNC + hv → HNC ⁺	1.00 10 ⁻¹¹	0.0	2.0
1467	NO + hv → N	4.70 10 ⁻¹⁰	0.0	1.7
1468	NO + hv → NO ⁺	2.60 10 ⁻¹⁰	0.0	2.3
1469	NH ⁺ + hv → N ⁺	5.40 10 ⁻¹¹	0.0	1.4

n°	Réaction chimique	γ	α	β
1470	NH ₂ ⁺ + hv → N ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1471	NH ₃ ⁺ + hv → NH ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1472	NH ₄ ⁺ + hv → NH ₃ ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1473	CN ⁺ + hv → C ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1474	C ₂ N ⁺ + hv → C ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1475	HCN ⁺ + hv → CN ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1476	HNC ⁺ + hv → CN ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1477	HCNH ⁺ + hv → HCN ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1478	HCNH ⁺ + hv → HNC ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1479	H ₂ NC ⁺ + hv → HNC ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1480	N ₂ ⁺ + hv → N ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1481	N ₂ H ⁺ + hv → H ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1482	NO ⁺ + hv → N ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1483	HNO ⁺ + hv → NO ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1484	SH + hv → S	9.70 10 ⁻¹⁰	0.0	1.4
1485	H ₂ S + hv → H ₂ S ⁺	7.10 10 ⁻¹⁰	0.0	2.7
1486	H ₂ S + hv → SH	3.10 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.9
1487	CS + hv → C	9.70 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1488	SO + hv → S	3.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.9
1489	SO ₂ + hv → SO	1.90 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.9
1490	OCS + hv → S	3.70 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1491	SH ⁺ + hv → S ⁺	2.50 10 ⁻¹⁰	0.0	1.8
1492	CS ⁺ + hv → C ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1493	HCS ⁺ + hv → CS ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1494	H ₂ S ⁺ + hv → SH ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1495	H ₃ S ⁺ + hv → H ₂ S ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1496	SO ⁺ + hv → S ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1497	HSO ⁺ + hv → SO ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1498	HSO ₂ ⁺ + hv → HSO ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1499	HOCS ⁺ + hv → CS ⁺	1.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1500	CH ₃ + hv → CH	3.00 10 ⁻¹¹	0.0	1.7
1501	NH ₃ + hv → NH	1.30 10 ⁻¹⁰	0.0	1.9
1502	C ₃ H ₂ + hv → C ₃	1.00 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.7
1503	CH ₄ + hv → CH	1.60 10 ⁻¹⁰	0.0	2.2
1504	CH ₄ + hv → CH ₃	1.60 10 ⁻¹⁰	0.0	2.2
1505	OH ⁺ + hv → H ⁺	7.20 10 ⁻¹²	0.0	1.8
1506	CH ₂ ⁺ + hv → CH	4.60 10 ⁻¹¹	0.0	1.8
1507	CH ₂ ⁺ + hv → C ⁺	4.60 10 ⁻¹¹	0.0	1.8
1508	H ₂ S + hv → S	1.45 10 ⁻⁰⁹	0.0	1.9
1509	CS ⁺ + hv → S ⁺	2.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.0
1510	CS + hv → CS ⁺	2.00 10 ⁻¹⁰	0.0	3.0
1511	SO + hv → SO ⁺	6.00 10 ⁻¹⁰	0.0	2.5

n°	Réaction chimique	γ	α	β
1512	$\text{H}_2 + h\nu \rightarrow \text{H} + \text{H}$	$1.46 \cdot 10^{-15}$	0.0	5.4
1513	$\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{C} + \text{O}$	$7.08 \cdot 10^{-11}$	0.0	4.0
1514	$\text{C} + h\nu \rightarrow \text{C}^+ + \text{e}^-$	$2.20 \cdot 10^{-10}$	0.0	3.0
1515	$\text{S} + h\nu \rightarrow \text{S}^+ + \text{e}^-$	$5.90 \cdot 10^{-10}$	0.0	2.6

Bibliographie

- [1] Adams N.G., Smith D., Alge E. 1982, J. Chem. Phys. 81, 4
- [2] Adams N.G., Smith D., 1988, Chem. Phys. Lett. 144, 11
- [3] Alexakis A., Mininni P.D., Pouquet A., 2005, Phys. Rev. E, 72, 4
- [4] Alexakis A., Mininni P.D., Pouquet A., 2007, NJPh., 9, 8, 298
- [5] Amano T. 1990, J. Chem. Phys. 92, 11
- [6] Amitay Z., Baer A., Dahan M., *et al.* , 1999, Phys. Rev. A., 60, 3769
- [7] Anders E., Grevesse N., 1989, Geochim. Cosmochim. Acta, 53, 197
- [8] Angelova G., Novotny O., Mitchell J.B.A, *et al.* , 2004, Int. J. Mass. Spec., 232, 195
- [9] Anselmet F., Antonia R.A., Danaila L. 2001 Planet. Space. Sci. 49, 1177
- [10] Armstrong J.W., Rickett B.J., Spangler S.R., 1995, ApJ, 443, 209A
- [11] Audit E., Hennebelle P. 2005, A&A 433, 1
- [12] Bechtel H.A., Steeves A.H., Field R.W., 2006, ApJ 649, 53
- [13] Begelman M.C., 1990, The interstellar Medium in Galaxies, eds. H.A. Thronson, Jr. and J. Michael Shull, Kluwer Academic Publishers
- [14] Belin F., Maurer J., Tabelaing P., Willaime H. 1996, Journal de Physique 6, 573
- [15] Bensch F., Stutzki J., Ossenkopf V., 2001, A&A, 366, 636
- [16] Benteboula S., 2006, Résolution des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach : application à l'étude de l'anneau de vorticit   à masse volumique variable, *Th  se de doctorat*
- [17] Black J., 1987, Heating and cooling of the interstellar gas, *interstellar processes*, Hollenbach D.J., Harley A.T., editors, Reidel
- [18] Black J., 1996, First Symposium on the IR Cirrus and Diffuse Interstellar Gaz, ed. R.M. Cutri et W.B. Latter, San Francisco ASP
- [19] Black J.H., Dalgarno A. 1977, ApJS 34, 405
- [20] Black, J.H., Dalgarno A., Oppenheimer M. 1975, ApJ 199, 633
- [21] Boger G.I., Sternberg A. 2005, ApJ 632, 302
- [22] Bonazzola S., Heyvaerts J., Falgarone   ., P  rault M., Puget J.L., 1987, A&A 172, 293
- [23] Bonazzola S., P  rault M., Puget J.-L., Heyvaerts J., Falgarone   ., Panis J.-F., 1992, J. Fluid Mech. 245, 1

- [24] Boulanger F., 2000, ISO Beyond Point Sources : Studies of Extended IR Emission, ed. R.J. Laureijs, K. Leech, et M.F. Kessler
- [25] Boulanger F., Pérault M., 1988, ApJ, 330, 964B
- [26] Brandenburg A., Jennings R.L., Nordlund A., Rieutord M., Stein R.F., Tuominen I. 1996, Journal of Fluid Mechanics 306, 325
- [27] Bronfman L., Cohen R.S., Alvarez H., May J., Thaddeus P., 1988, ApJ, 248, 266
- [28] Brown P.N., Byrne G.D., Hindmarsh A.C. 1989, J. Sci. Stat. Comput. 10, 1038
- [29] Brownsword R.A., Gatenby S.D., Herbert L.B., Smith I.W.M., Stewart D.W.A., Symonds A.C., 1996, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 92, 723
- [30] Burke J.R., Hollenbach D.J., 1983, ApJ, 265, 223
- [31] Burton W.B., Gordon M.A., Bania T.M., Lockman F.J., 1975, ApJ 202, 30
- [32] Bushby P.J., Houghton S.M., Proctor M.R.E, Weiss N.O., 2008, MNRAS, 387, 698B
- [33] Carral P., Welch W.J., 1992, ApJ 385, 244
- [34] Casadei D., Bindi V., 2004, ApJ 612, 262
- [35] Charbonneau P., 2007, Notes de cours, Hydrodynamique, Université de Montréal
- [36] Clemens D.P., Sanders D.B., Scoville N.Z., 1988, ApJ, 327, 139
- [37] Clegg A.W., Cordes J.M., Simonetti J.M., Kulkarni S.R., 1992, ApJ, 386, 143
- [38] Cohen M., 1995, ApJ, 444, 874
- [39] Cox D. P., 2005, ARA&A, 43, 337
- [40] Cox P., Güsten R., Henkel C., 1988, A&A 206, 108
- [41] Crane P., Lambert D.L., Sheffer Y. 1995, ApJS 99, 107
- [42] Crawford I.A., 1995, MNRAS 277, 458
- [43] Crawford I.A., Williams D.A., 1997, MNRAS 291, 53
- [44] Crovisier J. 1981, A&A 94, 162
- [45] Crovisier J., Dickey J.M., 1983, A&A 122, 282
- [46] Crutcher R., Heiles C., Troland T., 2003, Turbulence and Magnetic Fields in Astrophysics, Lecture Notes in Physics, ed. Springer Berlin, Heidelberg
- [47] Crutcher R., Wandelt, Heiles C., Falgarone E., Troland T., 2009, submitted
- [48] Dalgarno A. 2006, PNAS 103, 33
- [49] Dalgarno A., McCray R.A. 1973, ApJ 181, 95
- [50] Dame T.M., Hartmann D., Thaddeus P. 2001, ApJ 547, 792
- [51] Desert F.-X., Boulanger F., Puget J.L., 1990, A&A, 237, 215D
- [52] Deshpande A.A., Dwarakanath K.S., Goss W.M., 2000, ApJ, 543, 227
- [53] Dickey J.M., 2006, *Proceedings IAU Symposium*, 237
- [54] Dickey J.M., Lockman F.J., 1990, ARA&A, 28, 215
- [55] Dickey J.M., Salpeter E.E., Terzian Y. 1978, ApJS 36, 77
- [56] Ding X., *Physically-based Simulation of Tornadoes*, 2004, PhD Thesis

- [57] Diplas A., Savage B.D., 1991, ApJ, 377, 126
- [58] Dobbs C., Glover S., Clark P., Klessen R. 2008, arXiv 0806.4312
- [59] Douady S., Couder Y., Brachet M.E. 1991, Phys. Rev. Lett. 67, 8
- [60] Draine B. 1978, ApJS 36, 59
- [61] Draine B.T., Katz N. 1986, ApJ 310, 392
- [62] Draine B.T., Li A., 2001, ApJ 551, 807
- [63] Du Puy D., Schmitt J., McClure R., van den Bergh S., Racine R. 1969, ApJ 156, L135
- [64] Elitzur M., Watson W.D., 1978, A&A, 70, 443
- [65] Elmegreen B.G., Kim S., Staveley-Smith L. 2001, ApJ 58, 749
- [66] Elmegreen B.G., Scalo J., 2004, ARA&A, 42, 211
- [67] Falgarone E. 1998, in “Starbursts : Trigger, Nature and Evolution”, eds. B. Guiderdoni & A. Kembhavi, EPS Sciences
- [68] Falgarone E. 1999, in “Interstellar Turbulence”, eds. J. Franco & A. Carramiñana, Cambridge University Presse
- [69] Falgarone E., Hily-Blant P., Levrier F., 2003, *Magnetic fields and star formation : theory versus observation*, ed. AI Gomez de Castro
- [70] Falgarone E., Lis D.C., Phillips T.G., Pouquet A., Porter D.H., Woodward P.R. 1994, ApJ 436, 728
- [71] Falgarone E., Philipps T.G., Walker C.K. 1991, ApJ, 378, 186
- [72] Falgarone E., Pineau des Forêts G., Hily-Blant P., Schilke P. 2006, A&A 452, 511
- [73] Falgarone E., Pineau des Forêts G., Roueff E. 1995, A&A 300, 870
- [74] Falgarone E., Verstraete L., Pineau des Forêts G., Hily-Blant P. 2005, A&A 433, 997
- [75] Federman S.R., Strom C.J., Lambert D.L., Cardelli J.A., Smith V.V., Joseph C.L., 1994, ApJ 424, 772
- [76] Fehsenfeld F.C., 1976, ApJ 209, 638
- [77] Fehsenfeld F.C., Ferguson E.E., Schmeltekopf A.L., 1966, J. Chem. Phys., 44, 3022
- [78] Ferrière K.M., 2001, Review of Modern Physics, Vol. 73
- [79] Fish V.L., Reid M.J., Wilner D.J., 2003, ApJ 587, 701
- [80] Fitzpatrick E.L., Spitzer L. 1997, ApJ 475, 623
- [81] Flower D.R., Pineau des Forêts G., Hartquist T.W., 1986, MNRAS, 218, 729
- [82] Flower D.R., Pineau des Forêts G. 1995, MNRAS 275, 1049
- [83] Flower D.R., Pineau des Forêts G. 1998, MNRAS 297, 1182
- [84] Flower D.R., Roueff E., 1998a, J. Phys. B, 31, 2935
- [85] Flower D.R., Roueff E., 1998b, J. Phys. B, 31, L955
- [86] Flower D.R., Roueff E., Zeippen C.J., 1998, J. Phys. B, 31, 1105

- [87] Flower D.R., Pineau des Forêts G. 2003, MNRAS 343, 390
- [88] Flower D.R., Pineau des Forêts G., Walmsley C.M., 1995, A&A 294, 815
- [89] Fosalba P., Lazarian A., Prunet S., Tauber J.A., 2002, ApJ, 564, 762
- [90] Frisch P.C. 1980, ApJ 241, 697
- [91] Frisch P.C., Jura M. 1980, ApJ 242, 560
- [92] Frisch U., 1995, *Turbulence*, Cambridge University Press
- [93] Frisch U., Sulem P.-L. Nelkin M., 1978, J. Fluid. Mech., 87, 719
- [94] Fromang S., Papaloizou J., Lesur G., Heinemann T., 2007, A&A, 476, 1123F
- [95] Fromang S., Stone J.M., 2009, A&A, 507, 19F
- [96] Galtier S., Nazarenko S.V., Newell A.C., Pouquet A., 2000, J. Plasma Phys., 63, 447
- [97] Ganguli B., Biondi M.A., Johnsen R., Dulaney J.L. 1988, Phys. Rev. 37, 7
- [98] Gautier T.N., Boulanger F., Pérouault M., Puget J.-L., 1992, ApJ, 103, 1313
- [99] Giard M., Lamarre J.M., Pajot F., Serra G., 1994, A&A, 286
- [100] Gibb E.L. *et al.* , 2000, ApJ, 536, 347
- [101] Girardi L., Bertelli G., Bressan A., *et al.* , 2002, A&A 391, 195
- [102] Glover S.C.O., Federrath C., Mac Low M.-M., Klessen R.S., 2009, submitted to MNRAS
- [103] Godard B., Falgarone E., Pineau des Forêts G., 2009a, A&A , 495, 847
- [104] Godard B., Falgarone E., Gerin M., Hily-Blant P., De Luca M., 2009b, submitted to A&A
- [105] Goldreich P., Sridhar S., 1997, ApJ, 438, 763
- [106] Greaves J.S., Williams P.G., 1994, A&A 290, 259
- [107] Gredel R. 1997, A&A 320, 929
- [108] Gredel R., van Dishoeck E.F., Black J.H., 1993, A&A 269, 477
- [109] Gry C., Boulanger F., Nehmé C., Pineau des Forêts G., Habart E., Falgarone E. 2002, A&A 391, 675
- [110] Guillet V., 2008, *Évolution des poussières dans les chocs*, Tèse de doctorat, Université Paris 11
- [111] Guillet V., Pineau des Forêts G., Jones A.P., 2007, 476, 263
- [112] Guyon E., Hulin J.-P., Petit L., 2001, *Hydrodynamique physique*, *EDP Sciences, CNRS Éditions*
- [113] Habing H., 1968, Bull. Astr. Inst. Neth., 19, 421
- [114] Hartmann L., Burton W.B. 1997, *Atlas of Galactic Neutral Hydrogen* (Cambridge University press)
- [115] Haud U., Kalberla P.M.W. 2007, A&A 466, 555
- [116] Hayes M.A., Nussbaumer H., 1984, A&A, 134, 193
- [117] Heiles C., Troland T.H. 2003, ApJ 586, 1067

- [118] Heiles C., Troland T.H. 2005, ApJ 624, 773
- [119] Hennebelle P., Formation et évolution des structures dans le milieu interstellaire : une approche théorique, numérique et observationnelle, Thèse de doctorat, Université Paris 7
- [120] Hennebelle P., Passot T., 2007, Small Ionized and Neutral Structures in the Diffuse Interstellar Medium, *ASP Conference Series*
- [121] Heyer M.H., Brunt C., Snell R.L., *et al.* , 1998, ApJS, 115, 241
- [122] Heyer M.H., Carpenter J.M., Snell R.L., 2001, ApJ, 551, 852
- [123] Higdon J.C., 1986, ApJ, 309, 342
- [124] Hily-Blant P., Falgarone E., Pety J. 2008, A&A 481, 367
- [125] Hily-Blant P., Pety J., Guilloteau S., 2005, CLASS evolution : I. Improved OTF support, Tech rep., IRAM
- [126] Hollenbach D.J., 1989, The heating of interstellar dust, *Interstellar dust. Symposium IAU*, Allamandola L.J., Tielens A.G.G.M., eds., Dordrecht, Pays-Bas
- [127] Hollenbach D.J., Salpeter E.E., 1971, ApJ, 163, 155
- [128] Hollenbach D.J., Werner M.W., Salpeter E.E., 1971, ApJ, 163, 165
- [129] Huntress W.T., 1977, ApJS 33, 495
- [130] Indriolo N, Geballe T.R., Oka T., McCall B.J., 2007, ApJ, 671, 17361
- [131] Jenkins E.B., Meloy D.A., 1974, ApJ, 193L, 121J
- [132] Jenkins E.B., Savage B.D., 1974, ApJ, 187, 243
- [133] Jimenez J. 1997, Euromech Colloquium 384
- [134] Joncas G., Boulanger F., Dewdney P.E. 1992, ApJ 397, 165
- [135] Joulain K, 1998, Structures dissipatives du milieu interstellaire : modélisation et signatures chimiques, Thèse de doctorat, Université Paris 6
- [136] Joulain K., Falgarone E., Pineau des Forêts G., Flower D. 1998, A&A 340, 241
- [137] Jura M., 1975, ApJ, 197, 575
- [138] Kalberla P.M.W., Burton W.B., Hartmann D. *et al.* , 2005, A&A, 440, 775
- [139] Kay G.W.C., Laby T.H. 1966, Tables of physical and chemical constants, Longmans, Londres
- [140] Kolmogorov A.N., 1941, Proc. R. Soc. London Ser. A, 434, 9
- [141] Koo B.-C., 1997, ApJS 108, 489
- [142] Kopp M., 1996, Physico-chimie des nuages moléculaires translucides, Thèse de doctorat, Université Paris 11
- [143] Kraichnan R.H., 1965, Phys. Fluids, 8, 1385
- [144] Kritsuk A.G., Norman M.L., Padoan P., Wagner R. 2007, ApJ 665, 416
- [145] Kulkarni S.R., Heiles C., 1987, *The interstellar processes*, édition Hollenbach & Thronson, Jr. (Reidel, Dordrecht), p87
- [146] Kurien S., Taylor M.A., Matsumoto T., 2003, (ADS arxiv.org nlin.CD/0312034)
- [147] Lacour S., Ziskin V., Hébrard G. *et al.* 2005, A&A 627, 251

- [148] Lambert D.L., Danks A.C. 1986, ApJ 303, 401
- [149] Lambert D.L., Sheffer Y., Crane P. 1990, ApJL 359, L19
- [150] Larson R.B., 1981, MNRAS, 194, 809
- [151] Larsson M., McCall B.J., Orel A.E., 2008, Chem. Phys. Lett., 462, 145
- [152] Launay J.M. Roueff E., 1977a, J. Phys. B, 10, 879
- [153] Launay J.M. Roueff E., 1977b, A&A, 56, 289
- [154] Lazareff B. 1975, A&A 42, 25
- [155] Le Bourlot J., Pineau des Forêts G., Flower D.R., 1999, MNRAS, 305, 802
- [156] Le Padellec A., Sheehan C., Talbi D., Mitchell J.B.A. 1997, J. Phys. B 30, 319
- [157] Le Petit F., Nehmé C., Le Bourlot J., Roueff E. 2006, ApJS 160, 506
- [158] Lee L.C., Guest J.A., 1981, J. Phys. B., 14, 3415
- [159] Lequeux J., 2002, Le milieu interstellaire, *EDP Sciences, CNRS Éditions*
- [160] Lesaffre P., Gerin M., Hennebelle P. 2007, A&A 469, 949
- [161] Levrier F., 2004, Désordre et cohérence dans les structures du milieu interstellaire : analyse statistique, filtrage interférométrique et transfert radiatif, Thèse de doctorat, Université Paris 7
- [162] Li A., Draine B.T., 2001, ApJ 554, 778
- [163] Lipshtat A., Biham O., 2003, A&A, 400, 585
- [164] Liszt H.S., Lucas R. 1998, A&A 339, 561
- [165] Liszt H., Lucas R. 2001, A&A 370, 576
- [166] Liszt H., Lucas R. 2002, A&A 391, 693
- [167] Liszt H., Lucas R., Pety J. 2006, A&A 448, 253
- [168] Liszt H.S., Pety J., Lucas R., 2008, A&A 486, 493
- [169] Low F.J., Young E., Beintema D.A., *et al.* , 1984, ApJ, 278, L19
- [170] Lucas R., Liszt H. 1996, A&A 307, 237
- [171] Lucas R., Liszt H. 2000, A&A 358, 1069
- [172] Lucas R., Liszt H. 2002, A&A 384, 1054
- [173] Lundgren T.S., 1982, Phys. Fluids, 25, 2193
- [174] Mac Low M.-M., Klessen R.S., 2004, Reviews of Modern Physics, 76, 125
- [175] Marshall D.J., Robin A.C., Reylé C., Schulteis M., Picaud S., 2006, A&A 453, 635
- [176] Martin-Zaïdi C., Deleuil M., le Bourlot J. *et al.* 2005, A&A 484, 225
- [177] Mathis J., Mezger P., Panagia N., 1983, A&A, 128, 212
- [178] Mathis J.S., Rimpl W., Nordsieck K.H., 1977, ApJ 217, 425
- [179] McCall B.J., Geballe T.R., Hinke K.H., Oka T., 1998, Science, 279, 1910
- [180] McCall B.J., Huneycutt A.J., Saykally R.J., *et al.* , 2003, Nature, 422, 500
- [181] McKee C.F, 1989, ApJ, 345, 782

- [182] McKee C.F., 1995, *ASP Conference Series*, 80
- [183] McKee C.F., Ostriker J.P., 1977, *ApJ*, 218, 148
- [184] Meneveau C.M., Sreenivasan K.R., 1991, *J. Fluid. Mech.*, 224, 429
- [185] Mininni P.D., Alexakis A., Pouquet A., 2005, *Phys. Rev. E*, 72, 4
- [186] Mininni P.D., Alexakis A., Pouquet A. 2006a, *Physical Review* 74, 1
- [187] Mininni P.D., Pouquet A.G., Montgomery D.C. 2006b, *Physical Review Letters* 97, 24
- [188] Mitchell A.I., Mitchell J.B.A. 2006, *Physics Reports* 430, 277
- [189] Miville-Deschênes M.A., Joncas G., Falgarone E., 1999, *Interstellar Turbulence, Proceedings of the 2nd Guillermo Haro Conference. Ed. by Jose Franco & Alberto Carraminana*, Cambridge University Press.
- [190] Miville-Deschênes M.A., Joncas G., Falgarone E., Boulanger F. 2003, *A&A* 411, 109
- [191] Moffatt H.K., Kida S., Ohkitani K. 1994, *J. Fluid Mech.* 259, 241
- [192] Mohan R., Dwarakanath K.S., Srinivasan G., 2004, *JApA*, 25, 143
- [193] Moisy F., Jimenez J. 2004, *J. Fluid Mech.* 513, 111
- [194] Monchick L., Schaefer J. 1980, *J. Chem. Phys.* 73, 61, 53
- [195] Mookerjee B., Casper E., Mundy L.G., Looney L.W., 2007, *ApJ* 659, 447
- [196] Mouri H., Hori A., Kawashima Y, 2007, *Phys. Fluids*, 19, 055101
- [197] Mouri H., Hori A., 2009, *Fluid Dyn. Res.*, 41, Issue 2
- [198] Moskalenko I.V., Porter T.A., Strong A.W., 2006, *ApJ* 640, L155
- [199] Moskalenko I.V., Strong A.W., Ormes J.F., Potgieter M.S., 2002, *ApJ* 565, 280
- [200] Myers P.C., Goodman A.A., Güsten R., Heiles C., 1995, *ApJ*, 442, 177
- [201] Myers P.C., Lazarian A., 1998, *ApJ Lett.* 507(2), L157
- [202] Nagaoka K., Okamoto A., Yoshimura S., Kono M., Tanaka M.Y. 2002, *Physical Review Letters* 89, 7
- [203] Nehmé C., Gry C., Boulanger F., Le Bourlot J., Pineau des Forêts G., Falgarone E. 2008, *A&A* 483, 471
- [204] Nehmé C., Le Bourlot J., Boulanger F., Pineau des Forêts G., Gry C. 2008, *A&A* 483, 485
- [205] Neu J.C, 1984, *J. Fluid Mech.*, 143, 253
- [206] Neufeld D.A., Kaufman M.J., Goldsmith P.F., Hollenbach D.J., Plume R. 2002, *ApJ* 580, 278
- [207] Nolan D.S., Farrell B.F. 1999, *J. Atmos. Sci.* 56, 2908
- [208] Norman C.A., Ferrara A., *ApJ*, 467, 280
- [209] Nyman L.-Å., 1983, *A&A* 120, 307
- [210] Nyman L.-Å., Millar T.J., 1989, *A&A* 222, 231
- [211] Olofsson G., Hjalmarson Å., Black J.H., *et al.* , 2009, in preparation
- [212] Padovani M., Galli D., Glassgold A.E., 2009, 501, 619

- [213] Pan K., Federman SR, Cunha K. *et al.* 2004 ApJS 151 313
- [214] Pan K., Federman SR, Sheffer Y. & Andersson B.G. 2005 ApJ 633 936
- [215] Pan L., Padoan P. 2008, ApJ, in press
- [216] Panis J.-F., Pérault M., 1998, Phys. Fluids 10(12), 3111
- [217] Pavlovski G., Smith M.D., Mac Low M.-M 2006, MNRAS 368, 943
- [218] Pety J., 1999, Structures dissipatives de la turbulence interstellaire : signatures cinématiques, Thèse de doctorat, Université Paris 6
- [219] Pety J., Falgarone E. 2000, A&A 356, 279
- [220] Pineau des Forêts G., Flower D.R., Hartquist T.W., Dalgarno A. 1986, MNRAS 220, 801
- [221] Pineau des Forêts G., Roueff E., Flower D.R. 1990, MNRAS 244, 668
- [222] Plume R., Bensch F., Howe J.E., *et al.* , 2000, ApJ 539, L133
- [223] Plume R., Kaufman M.J., Neufeld D.A. *et al.* , 2004, ApJ 605, 247
- [224] Porter D.H., Pouquet A., Woodward P.R. 1992, Physical Review Letters 68, 21
- [225] Porter D.H., Pouquet A., Woodward P.R. 1994, Phys. Fluids 6, 2133
- [226] Porter D.H., Pouquet A., Woodward P.R. 2002, Phys. Review E, 66
- [227] Porter T.A., Strong A.W., 2005, Proc. 29th Int. Cosmic Ray Conf (Pune), 4, 77
- [228] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., 2007, Numerical recipes third edition, *Cambridge University Press*
- [229] Proctor M.R.E, Weiss N.O., 1982, RPPH, 45, 1317P
- [230] Pullin D.I., Saffman P.G., 1993, Phys. Fluids A, 5, 1
- [231] Pullin D.I., Saffman P.G., 1998, Annu. Rev. Fluid Mech., 30, 31
- [232] Radhakrishnan V., Murray J.D., Lockhart P., Whittle P.J. 1972, ApJS 24, 15
- [233] Ritchey, A.M., Martinez M., Pan K. *et al.* 2006 ApJ 649 788
- [234] Roberge W.G., Jones D., Lepp S., Dalgarno A., 1991, ApJS 77, 287
- [235] Röllig M., Abel N.P., Bell T., *et al.* , 2007, A&A, 467, 187
- [236] Rydbeck O.E.H., Kollberg E., Hjalmarsen A., Sume A., Ellder J., Irvine W.M., 1976, ApJS 31, 333
- [237] Savage B.D., Bohlin R.C., Drake, J.F., Budich W. & Bohlin R.C. 1977 ApJ 216 291
- [238] Savage B.D., Sembach K.R., 1996, ARA&A, 34, 279
- [239] Scalo J., Elmegreen B.G., 2004, ARA&A, 42, 275
- [240] Schofield K., 1967, Planet. Space Sci., 15, 643
- [241] Sellwood J.A., Balbus S.A., 1999, ApJ, 511, 660
- [242] Semaniak J., Minaev B.F., Derkatch A.M., Hellberg F., Neau A., Rosén S., Thomas R., Larsson M., Danared H., Paál A., af Ugglass M., 2001, ApJS 135, 275
- [243] She Z.-S., Levêque E., 1994, Phys. Rev. Lett, 72, 336
- [244] Sheehan C., Le Padellec A., Lennard W.N., Talbi D., Mitchell J.B.A., 1999, J. Phys. B 32, 3347

- [245] Sheffer Y., Rogers M, Federman SR *et al.* 2008 ApJ in press (arXiv :0807.0940v1)
- [246] Shull J.M. & Beckwith W. 1982 AARA 20, 163
- [247] Simon R., Bensch F., 2002, Meeting of the Center for Star Formation Studies, Santa Cruz
- [248] Smith I.W.M., Herbst E., Chang Q., 2004, MNRAS 350, 323
- [249] Snow T.P. 1976, ApJ 204, 759
- [250] Snow T.P. 1977, ApJ 216, 724
- [251] Snow T.P., McCall B.J. 2006, ARAA 44, 367
- [252] Sofia U.J., Meyer D.M., 2001, ApJ, 554, L221
- [253] Sonnentrucker P., Friedman SD, Welty DE *et al.* 2003, ApJ 596, 350
- [254] Sokolov A.A., Ternov J.M., 1969, Synchrotron radiation, Pergamon press, London
- [255] Spaans M., Neufeld D., Lepp S., Melnick G.J., Stauffer J. 1998, ApJ 503, 780
- [256] Spitzer L. 1978, Physical processes in the interstellar medium, J. Wiley & Sons, New York
- [257] Spitzer L., Cochran W.D., Hirshfeld A. 1974, ApJS 28, 373
- [258] Spitzer L., Drake J.F., Morton DC *et al.* 1973, ApJ 181, L116
- [259] Spitzer L., Scott E.H., 1969, ApJ, 158, 161
- [260] Stanimirovic S., Lazarian A., 2001, ApJ 551, L53
- [261] Sternberg A., Dalgarno A. 1975, ApJS 99, 565
- [262] Stone J.M., Hawley J.F., Gammie C.F., Balbus S.A., 1996, ApJ, 463, 656S
- [263] Stutzki J., Bensch F., Heithausen A. *et al.* 1998, A&A 336, 697
- [264] Talbi D., Le Padellec A., Mitchell J.B.A., 2000, J. Phys. B 33, 3631
- [265] Tanahashi M., Kang S.-J., Miyamoto T., *et al.* , Int. J. Heat Fluid Flow, 25, 331
- [266] Thornton K., Gaudlitz M., Janka H.-T., Steinmetz M., 1998, ApJ, 504, 900
- [267] Tielens A.G.G.M., 2005, The Physics and Chemistry of Interstellar Medium, Cambridge University Press
- [268] Tryggeson H., 2007, Analytical Vortex Solutions to the Navier-Stokes Equations, Växjö University Press
- [269] van Dishoeck E.F., Black J.H., 1986, ApJS, 62, 109
- [270] van Dishoeck E.F., Black J.H., 1988, in Millar T.J., Williams D.A., eds, Rate Coefficients in Astrochemistry. Kluwer, Dordrecht, p. 209
- [271] Vastel C., Caux, E., Ceccarelli C., Castets A., Gry C., Baluteau J.P., 2000, 357, 994
- [272] Vásquez-Semadeni E., Passot T., Pouquet A., 1998, ApJ, 473, 881
- [273] Vestuto J.G., Ostriker E.C., Stone J.M.
- [274] Viala Y.P., Roueff E., Abgrall H., 1988, A&A, 190, 215

- [275] Viggiano A.A, Howarka F., Albritton D.L., Fehsenfeld F.C., Adams N.G., Smith D., 1980, ApJ 236, 492
- [276] Vishniac E.T., Lazarian A., 1999, ApJ, 511, 193
- [277] Waincoat R.J., Cohen M., Volk K., Walker H.J., Schwartz D.E., 1992, ApJS 83, 111
- [278] Webber W.R., 1998, ApJ, 506, 329
- [279] Weingartner J.C., Draine B.T., 2001, ApJ 548, 296
- [280] Weselak T., Galazutdinov G., Musaev F., Krelowski J. 2008a, A&A 484, 381
- [281] Weselak T., Galazutdinov G., Musaev F., Krelowski J. 2008b, A&A 479, 149
- [282] White R.E. 1984, ApJ 284, 695
- [283] White R.E. 2003, ApJS 148, 487
- [284] Williamson F.O., Sanders W.T., Kraushaar W.L., McCammon D., Borken R., Bunner A.N., 1974, ApJ, 193, L133
- [285] Wolfire M.G., Hollenbach D., McKee C., Tielens A.G.G.M., Bakes E.L.O., 1995, ApJ, 443, 152
- [286] Woodall J., Agúndez M., Markwick-Kemper A.J., Millar T.J., 2007, A&A, 466, 1197
- [287] Xie T., Allen M., Langer W.D., 1995, ApJ, 440, 674
- [288] Yahalom A., Lynden-Bell D., 2007, J. Fluid. Mech., 607, 235
- [289] Zweibel E.G., 2002, ApJ, 567, 962