Evolution des poussières dans les chocs

Vincent Guillet

▶ **To cite this version:**

Vincent Guillet. Evolution des poussières dans les chocs. Astrophysique [astro-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 2008. Français. NNT : . tel-00332738v2

HAL Id: tel-00332738

https://theses.hal.science/tel-00332738v2

Submitted on 6 Apr 2009

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.

Institut d'Astrophysique Spatiale **Groupe Milieu interstellaire et Cosmologie**

École doctorale d'Astrophysique d'Île de France

Evolution des poussières dans les chocs

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 9 juin 2008

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université de Paris-Sud (XI)

(Spécialité Astrophysique et Instrumentations Associées)

par

Vincent Guillet

Composition du jury

Rapporteurs :	Jonathan Ferreira (LAOG, Grenoble) Peter Schilke (MPI für Radioastronomie, Bonn)
Examinateurs :	Anthony Jones (directeur de thèse, IAS) Guillaume Pineau des Forêts (co-directeur, IAS) Laurent Verstraete (IAS) Tom Hartquist (University of Leeds)

Ce manuscrit est téléchargeable au format PDF sur le site de l'Institut d'Astrophysique Spatiale : http://www.ias.u-psud.fr/

Mise en page adaptée au format A5.

Pour me contacter : vincent.guillet@ias.u-psud.fr ou vincent.guillet@free.fr

Mis en page avec la classe thloria.

Remerciements

Faire une thèse, c'est comme chacun sait beaucoup de travail et de sacrifices. C'est donc bien plus agréable et plus facile quand on est entouré de gens bienveillants, généreux, intéressants et chaleureux ! J'ai eu la chance de tomber dans une équipe de recherche sympathique, où il est facile de discuter de recherche avec tout un chacun car tout le monde travaille de près ou de loin sur les poussières. J'ai eu encore plus de chance d'avoir deux directeurs de thèse, Anthony Jones et Guillaume Pineau des Forêts, avec qui ce fut toujours un plaisir de travailler. Comme j'enseignais à mi-temps au Lycée Dorian (Paris XIe), on se retrouvait régulièrement à Orsay à l'IAS ou à Paris à l'IAP, et les échanges étaient toujours riches et agréables.

Mon travail de modélisation fut donc en grande partie réalisé à mon domicile, et Valérie a beaucoup de mérite de m'avoir fichu une paix royale, comme elle le dit elle-même, pendant ces longues et difficiles années. Juliette a eu parfois plus de mal à le comprendre, mais cela n'a heureusement pas duré trop longtemps... Et je crois que je n'aurai jamais réussi sans l'aide indéfectible de Renée qui nous a gardé la petite Juliette un nombre incalculable de fois.

En travaillant ainsi à domicile, on est inévitablement un peu coupé de la vie quotidienne du laboratoire, et les échanges avec d'autres chercheurs ou thésards en deviennent d'autant plus précieux. Je remercie particulièrement Pierre Guillard pour les nombreuses discussions, fructueuses et stimulantes, que j'ai pu avoir avec lui, et qui ont entre autres significativement enrichi le chapitre d'introduction sur les chocs hydrodynamiques. Je remercie également Sylvie Cabrit, Eli Dwek, Jacques le Bourlot et François Boulanger pour leurs conseils et leurs encouragements.

Merci enfin à tous les amis et aux collègues du lycée Dorian qui sont venus à la soutenance ce beau lundi du mois de juin. Un grand merci à Bruno qui nous a concocté un pot de thèse tout simplement succulent, servi en plein air et sous les arbres, qui restera dans les mémoires.

Table des matières

Introduction **3**

I Les acteurs **7**

1 Evolution des poussières dans le milieu interstellaire **9**

1.1 Découverte des poussières interstellaires 9

1.2 Contraintes observationnelles sur les propriétés des poussières 10

1.2.1 Liste des contraintes observationnelles 10

1.2.2 Signatures spectrales en absorption et en émission 11

1.2.3 Déplétions dans les nuages diffus du disque galactique 13

1.2.4 Nature des grains présolaires 15

1.2.5 Analyse de la composition des poussières par halos X 15

1.2.6 Distribution en tailles moyenne des poussières 16

1.3 Modèles de traitement des poussières 17

1.3.1 Les poussières sont-elles détruites par les rayons cosmiques ? . . . 17

1.3.2 Effets des chocs sur les poussières 17

1.3.3 Formation et croissance des poussières dans la phase froide 21

1.4 Contraintes observationnelles sur le traitement des poussières 23

1.4.1 Variations globales de la courbe d'extinction 23

1.4.2 Variation locale de la courbe d'émission 25

1.4.3 Variation des déplétions entre le halo et le disque 26

1.4.4 Indicateurs de destruction des poussières dans les flots moléculaires et les jets 30

1.5 Cycle de vie des poussières dans la Galaxie 32

1.5.1 Temps caractéristique de formation 32

1.5.2 Temps caractéristique de destruction 33

1.5.3 Nécessité d'une formation dans la phase dense 34
1.6 Ecole des Houches sur les poussières interstellaires 35
1.6.1 Résumé de la présentation 35
1.6.2 **Article 1 - Dust dynamics and processing in interstellar shocks** 39

2 Ondes de choc hydrodynamiques **61**
2.1 Qu'est-ce qu'une onde de choc ? 62
2.2 Ondes sonores et ondes de choc dans une conduite de gaz 63
2.2.1 Perturbation de la pression - ondes sonores 63
2.2.2 Forte variation de la pression - discontinuité du front d'onde . . . 65
2.2.3 Mouvement de compression d'un piston - onde de choc 67
2.2.4 Mouvement de retrait d'un piston - onde de raréfaction 69
2.3 Relations de Rankine-Hugoniot à travers une surface de discontinuité . . 69
2.4 Discontinuité tangentielle ou discontinuité de contact 72
2.4.1 Egalité des pressions 72
2.4.2 Discontinuité de l'entropie 73
2.4.3 Discontinuité des vitesses tangentielles 73
2.5 Chocs hydrodynamiques stationnaires transverses 73
2.5.1 Choc adiabatique 74
2.5.2 Choc radiatif 79
2.5.3 Ne pas confondre choc radiatif et choc à précurseur radiatif . . . 83
2.5.4 Choc isotherme 84
2.6 Propagation d'une onde de choc dans un milieu inhomogène 86
2.6.1 Réflexion et transmission du choc à traver un saut de densité . . 86
2.6.2 Un choc ralentit-il en pénétrant dans un milieu plus dense ? . . . 87
2.7 Modèles de chocs 2D et 3D 88
2.7.1 Ecoulement supersonique autour d'un solide - choc d'étrave . . . 88
2.7.2 Onde de choc de supernova frappant un nuage moléculaire 89
2.7.3 Accélération des nuages interstellaires par les ondes de choc . . . 90
2.7.4 Choc d'étrave généré par un jet frappant un nuage 90
2.7.5 Simulations numériques hydrodynamiques 92

3 Ondes de chocs magnétohydrodynamiques **95**
3.1 Ondes MHD se propageant dans un plasma 96

3.1.1 Ondes d'Alfven . . . 96
3.1.2 Ondes magnétosoniques . . . 96
3.1.3 Différents modes de propagation d'une onde MHD . . . 96
3.2 Chocs MHD stationnaires transverses . . . 97
3.2.1 Relations de Rankine-Hugoniot pour un choc adiabatique . . . 98
3.2.2 Relations de Rankine-Hugoniot pour un choc isotherme . . . 99
3.2.3 Chocs C et J . . . 100
3.2.4 Critères d'existence des chocs C . . . 106
3.3 Chocs MHD non stationnaires - chocs C-J . . . 107
3.4 Chocs MHD obliques . . . 111
3.4.1 Chocs mono-fluides . . . 111
3.4.2 Chocs multi-fluides . . . 112
3.5 Instabilité de Wardle dans les chocs C . . . 113
3.6 Simulations numériques MHD 2D et 3D . . . 115
3.7 Autres types de chocs MHD . . . 116
3.7.1 Chocs non collisionnels . . . 116
3.7.2 Chocs de cisaillement . . . 116

II Charge et dynamique des poussières 117

4 Modèles physique et numérique des poussières 119
4.1 Modèle cœur-manteau . . . 119
4.2 Modélisation de la distribution en taille des cœurs . . . 121
4.2.1 Boîtes de taille en série géométrique . . . 121
4.2.2 Distribution en loi de puissance . . . 121
4.2.3 Distribution log-normale . . . 123
4.3 Calcul de l'épaisseur des manteaux de glaces . . . 125

5 Distribution de charge des poussières 127
5.1 Processus de charge des grains . . . 127
5.1.1 Attachement électronique et recombinaison des ions . . . 128
5.1.2 Réflexion/diffusion d'ions et d'électrons . . . 130
5.1.3 Emission secondaire d'électrons . . . 132
5.1.4 Effet photoélectrique . . . 135

5.1.5 Emission de champ . . . 136
5.1.6 Autres processus de charge . . . 136
5.2 Distributions de charge des poussières dans les nuages au repos . . . 137
5.2.1 Dans les nuages denses . . . 137
5.2.2 Dans les nuages diffus . . . 140
5.3 Charge hors-équilibre des poussières dans les chocs . . . 141
5.3.1 Dans les chocs J . . . 141
5.3.2 Dans les chocs C des milieux denses . . . 148
5.4 Interaction entre les poussières et le plasma - *dusty plasmas* . . . 151
5.4.1 Pénurie d'électrons dans un plasma poussiéreux . . . 151
5.4.2 Longueur de Debye des poussières - écrantage des charges . . . 151
5.4.3 Plasma avec des poussières ou plasma poussiéreux ? . . . 152

6 Couplage des poussières au champ magnétique 155
6.1 Facteurs déterminant la nature et l'intensité du couplage . . . 155
6.1.1 Temps caractéristiques de couplage . . . 156
6.1.2 Facteur de Hall . . . 157
6.1.3 Impact des fluctuations de charge sur le couplage . . . 158
6.2 Impact des poussières sur la vitesse critique des chocs C . . . 158
6.2.1 Domaine d'existence en vitesse des chocs C . . . 159
6.2.2 Ordre de grandeur de la vitesse magnétosonique . . . 160
6.2.3 Masse des poussières couplées au champ magnétique . . . 161
6.2.4 Quel mode de formation pour le précurseur magnétique ? . . . 162

7 Dynamique d'un grain dans un champ magnétique transverse 165
7.1 Dynamique dans un champ magnétique uniforme . . . 166
7.1.1 Champ électrique perpendiculaire à **B** - dérive électrique . . . 167
7.1.2 Force constante perpendiculaire à **B** - composition des dérives . . . 168
7.1.3 Force fluide perpendiculaire à **B** - dérive de friction . . . 170
7.1.4 Force variable perpendiculaire à **B** - dérive inertielle . . . 170
7.2 Dynamique dans un champ magnétique lentement variable . . . 171
7.2.1 Moment magnétique d'un grain chargé . . . 171
7.2.2 Champ électrique nul - dérive diamagnétique . . . 173
7.2.3 Champ électrique perpendiculaire à **B** - effet bétatron . . . 174
7.2.4 Eléments de dynamique d'un grain dans un choc C . . . 176

8 Dynamique des poussières dans les chocs C **179**
8.1 Méthode de calcul pour chaque taille de grain . . . 179
8.1.1 Intégration de la dynamique instantanée . . . 180
8.1.2 Calcul de la dynamique moyenne . . . 181
8.1.3 Calcul du nombre moyen de grains par unité de volume . . . 181
8.2 Dynamique des gros grains ($a \geq 100$ Å) . . . 182
8.2.1 Phase de giration - phase de dérive . . . 182
8.2.2 Freinages collisionnel et non collisionnel de la giration . . . 185
8.3 Dynamique des très petits grains ($a \ll 100$ Å) . . . 185
8.3.1 Mouvement de dérive sans giration appréciable . . . 185
8.3.2 Effet des fluctuations de charge - dynamique stochastique . . . 186
8.4 Effets rétroactifs de la dynamique des poussières sur le choc . . . 186
8.4.1 Effet du découplage des gros grains sur la longueur du choc . . . 188
8.4.2 Apparition d'un champ électrique E_z . . . 189
8.5 **Article 2 - Shocks in dense clouds - I Dust dynamics** . . . 193

III Traitement des poussières dans les chocs **213**

9 Dynamique et traitement des poussières dans les chocs J **215**
9.1 Trajectoires des poussières . . . 215
9.1.1 Profils des chocs J . . . 215
9.1.2 Trajectoires dans un choc de 35 km s^{-1} . . . 217
9.1.3 Trajectoires dans un choc de 50 km s^{-1} . . . 218
9.2 Traitement quand l'émission secondaire d'électrons est négligeable . . . 219
9.2.1 Modèle de traitement gaz-grain . . . 220
9.2.2 Modèle de traitement grain-grain . . . 220
9.2.3 Résultats . . . 224
9.3 Traitement quand l'émission secondaire des électrons domine . . . 229
9.3.1 Traitements subis par les grains individuels . . . 229
9.3.2 Fraction de masse totale détruite dans le front de choc . . . 231
9.4 Conclusions . . . 232
9.4.1 Synthèse des résultats . . . 232
9.4.2 Production de SiO - densité de colonne de SiO . . . 232
9.4.3 Quel modèle pour les grains carbonés ? . . . 232

9.5 **Article 3 - Shocks in dense clouds - II Dust destruction and SiO formation in J shocks** 235

10 Coagulation des poussières dans les chocs C **245**

10.1 Modèle physique de coagulation 245

10.2 Modèle numérique 246

10.2.1 Algorithmes à une et deux boîtes collectrices 246

10.2.2 Equation de coagulation de Smoluchowski 247

10.2.3 Test de l'algorithme de coagulation 248

10.3 Evolution de la distribution en taille des poussières 252

10.3.1 Coagulation seule 252

10.3.2 Compétition entre la coagulation et la fragmentation 254

10.4 Influence du traitement sur la longueur du choc 258

10.5 Conclusion et perspectives 260

11 Traitement des poussières dans les chocs C **261**

11.1 Intensité de la fragmentation et effet rétroactif sur le choc 261

11.1.1 Traitement sans fluctuations de charge 262

11.1.2 Traitement avec prise en compte des fluctuations de charge 264

11.1.3 Les chocs C sont-ils des plasmas hyper-poussiéreux ? 268

11.2 Destruction des poussières par érosion et vaporisation 269

11.3 Paramètres clefs de notre modèle de traitement 271

11.3.1 Rôle mineur de la giration des gros grains 271

11.3.2 Rôle critique des très petits fragments neutres 273

11.4 Conclusions 276

11.4.1 Comparaison avec les résultats de Caselli et al.§ (1997) 276

11.4.2 Importance de la fragmentation dans les chocs C 278

12 Conclusions et perspectives **279**

12.1 Modèle 279

12.2 Résultats 279

12.3 Perspectives 282

Annexes **285**

A Equations différentielles pour la résolution des chocs C **285**
A.1 Variables MHD et équations de conservation . . . 285
A.2 Equations différentielles dans un modèle sans poussières . . . 286
A.3 Introduction des poussières . . . 288
A.4 Liste des termes sources . . . 290

B Démonstrations des expressions du chapitre 7 **294**
B.1 Dérive électrique . . . 294
B.2 Une force constante ne peut pas accélérer un grain chargé . . . 295
B.3 Effet des forces fluides sur la dynamique du grain . . . 296
B.4 Dérive inertielle . . . 298
B.5 Force magnétique moyenne . . . 299
B.6 Conservation du moment magnétique . . . 301

C Respect des lois de conservation lors d'une réaction chimique **304**
C.1 Bilan de quantité de mouvement . . . 304
C.2 Bilan d'énergie . . . 305

D Modèle de charge des grains **307**
D.1 Distribution maxwellienne déplacée . . . 308
D.2 Taux d'attachement des ions sur un grain polarisable en mouvement . . . 314
D.3 Modélisation de l'effet photoélectrique sur les grains . . . 314

E Modélisation de la giration des grains dans les chocs J **321**
E.1 Modèle simplifié de dynamique pour les nuages peu denses . . . 321
E.2 Modèle de dynamique plus élaboré pour les nuages denses . . . 323
E.3 Calcul de la vitesse d'impact grain-grain . . . 324

F Gestion numérique du traitement des grains **326**
F.1 Calcul des grandeurs caractéristiques des grains d'une boîte . . . 326
F.2 Intégration de la distribution de charge du grain moyen . . . 327
F.3 Gestion des collisions en coordonnées cartésiennes et polaires . . . 328
F.4 Gestion numérique de la masse et de la charge des fragments . . . 329
F.5 Algorithme de coagulation à deux boîtes collectrices . . . 333

G Fichiers de chimie **334**

G.1 Liste des espèces chimiques 334

G.2 Réseau de réactions chimiques 336

Bibliographie **357**

Liste des tableaux **366**

Index **367**

Résumé

Les poussières sont un acteur important de l'évolution du milieu interstellaire, et plus généralement des galaxies. De nombreux modèles prédisent une destruction importante de ces poussières dans les chocs impulsés par les explosions de supernovæ, Ce constat impose de reformer les poussières dans la phase dense du milieu interstellaire. Dans cette thèse, nous nous intéressons au traitement des poussières dans les chocs MHD se propageant dans les nuages denses, premier pas vers une étude plus générale de l'évolution des poussières dans la phase froide du milieu interstellaire. Nous calculons l'intensité de la destruction des poussières silicatées et carbonées, par érosion et vaporisation, dans des chocs MHD transverses monofluides (type J) et multi-fluides (type C) de vitesse inférieure à 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Les grains de poussières sont modélisés par des cœurs réfractaires sphériques, homogènes et non poreux, recouverts d'un manteau de glaces. La distribution en taille des poussières résultant de la compétition entre la fragmentation et la coagulation dans ces chocs est également calculée et couplée à la résolution de la dynamique du choc. La distribution de charge hors-équilibre des grains, leur dynamique à travers le choc (compte tenu de leur inertie et des fluctuations de leur charge), et le traitement qu'ils subissent sont intégrés en simultané de la résolution de la chimie, de l'état d'ionisation et de la dynamique du gaz dans le choc. Ce couplage complet, indispensable pour les chocs C, permet d'estimer l'effet rétroactif du traitement des poussières sur la dynamique du choc. Nous présentons la première étude de la destruction des poussières par les chocs J se propageant dans les nuages denses. Quelques résultats préliminaires sur le traitement dans les chocs C soulignent la place particulière qu'occupent les poussières dans ces chocs dont les propriétés rappellent celles des *dusty plasmas*.

Abstract

Dust grains play a major role in the evolution of the interstellar medium and galaxies. From models we know that dust is strongly destroyed in interstellar shocks powered by supernovæexplosions, so dust needs to be (re)formed in the interstellar medium. In this report, we focus on the modelling of dust processing in MHD shock waves propagating through dense clouds. This is a first step toward a more general study of the evolution of dust in the cold phase of the interstellar medium. We determine the rate of destruction of silicate and carbon dust by vaporisation and sputtering in transverse MHD shock waves, wether monofluid (J shocks) or multifluid (C shocks) with velocity below 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Dust grains are modelled by refractory, spherical, homogeneous and non porous cores covered by an icy mantle. The dust size distribution resulting from the competition between shattering and coagulation of grains in the shock is calculated and coupled to the integration of the shock structure. We integrate the out of equilibrium charge distribution of grains, their dynamics through the shock (including their inertia and the effect of charge fluctuations), and their processing simultaneously with the calculation of the chemistry, ionisation state and the gas dynamics. This full coupling of shock structure with dust, necessary for C shocks,

allows us to assess the feedback of dust processing on the dynamics of shocks. We present the first study of dust processing in J shocks in dense clouds. Some preliminary results are presented on the processing of dust in C shocks. We emphasize the particular role dust play in C shocks, very much like in dusty plasmas.

Introduction

Depuis leur découverte dans les années 30, les poussières interstellaires ont pris une importance sans cesse croissante dans les modèles d'évolution des galaxies. Quand Trumpler (1930) démontra leur existence, les poussières n'étaient qu'un voile obscurcissant la lumière stellaire ; leur présence compliquait la mesure des distances stellaires. Cette gêne fut transformée en atout quand on commenca à utiliser les poussières interstellaires comme traceur des conditions physiques régnant dans le milieu interstellaire, traceurs des nuages denses *via* l'extinction stellaire, ou du champ magnétique galactique *via* la polarisation de la lumière (Hall & Mikesell, 1949). Toutefois, leur place dans l'évolution de la Galaxie restait somme toute anecdotique en comparaison du rôle joué par les étoiles, les nuages interstellaires ou les rayons cosmiques (Li & Greenberg, 2003).

Les poussières se révélèrent peu à peu être des acteurs à part entière de la vie du milieu interstellaire, et plus particulièrement de sa phase dense. En écrantant le rayonnement stellaire au sein des nuages denses, les poussières protégeaient les espèces chimiques moléculaires de la dissociation. Ces molécules devaient se retrouver en partie en phase gazeuse et en partie à la surface des grains sous forme de manteaux de glace (Oort & van de Hulst, 1946). Les abondances de certaines molécules et ions moléculaires (*e.g.* CH, CH^+) mesurées dans le milieu interstellaire pouvant difficilement s'expliquer par une synthèse en phase gazeuse, il fut suggéré qu'elles seraient efficacement formées à la surface des grains (*e.g.* Bates & Spitzer, 1951), tout comme le dihydrogène (Gould & Salpeter, 1963), pas encore observé mais qu'on supposait très abondant du fait des faibles températures des nuages interstellaires ($\sim$ 100 K).

On montra par la suite que l'importance des poussières ne se limitait pas à leur rôle de catalyseur de la chimie interstellaire mais qu'elles pouvaient également moduler la formation stellaire. La formation stellaire semblait déjà à l'époque problématique, depuis la découverte de l'intense champ magnétique galactique que traçaient les poussières. Mestel & Spitzer (1956) démontrèrent que les poussières pouvaient, en écrantant le rayonnement stellaire, diminuer de manière drastique la fraction d'ionisation à l'intérieur du nuage et permettre ainsi son effondrement gravitationnel par diffusion ambipolaire jusqu'à la formation d'étoiles. Même si cette question est loin d'être réglée 50 ans plus tard, il est désormais admis que le rôle joué par les poussières dans la formation stellaire ne peut pas être négligé. Plus généralement, les poussières sont reconnues comme un facteur essentiel de couplage entre le champ magnétique et le gaz dans les milieux denses et peu ionisés.

Les observations en infrarouge ont démontré l'ubiquité des poussières, dans notre galaxie et dans les galaxies extérieures. Elles occupent une place centrale dans le bilan énergétique des galaxies. Les poussières absorbent environ la moitié des rayonnements ultraviolet et visible

des étoiles et réémettent cette énergie sous forme d'un rayonnement thermique infrarouge pour lequel le milieu interstellaire est transparent, ce qui fait d'elles un excellent traceur de la formation stellaire. Dans les milieux diffus, les photons ultraviolet émis par les étoiles très chaudes arrachent de la surface des grains des électrons qui sont le principal vecteur de chauffage du gaz.

En quelques décennies, le regard porté par les chercheurs sur les poussières interstellaires a donc bien changé. Les poussières ne sont plus considérées seulement comme un traceur des conditions physiques du milieu interstellaire, mais également comme un agent majeur de l'évolution physico-chimique des galaxies (Li & Greenberg, 2003).

Champ de recherche : l'évolution des poussières interstellaires

Les poussières se forment principalement dans les vents froids des étoiles en fin de vie de type AGB, avec une contribution peut-être significative des supernovæ. Elles subissent différents traitements dans les phases du milieu interstellaire. Elles sont pour partie fragmentées et détruites par les chocs interstellaires qui traversent la phase tiède et ténue du milieu interstellaire. Les grains ayant survécu aux chocs et les fragments produits accompagnent la formation des nuages moléculaires. Ils y croissent, sans doute par coagulation avec d'autres grains et par formation de manteaux de glaces. A terme, ces poussières sont pour partie incorporées dans les planètes telluriques, comètes et autres astéroïdes et pour partie détruites dans les étoiles. L'évolution des poussières interstellaires dans la Galaxie est donc étroitement associée au cycle de vie des étoiles. Comme les poussières se forment à partir des éléments réfractaires produits dans les étoiles, la composition chimique des poussières reflète plus généralement l'histoire des galaxies et l'histoire de l'Univers.

L'étude de la destruction des poussières dans les chocs traversant les phases chaude et tiède du milieu interstellaire a déjà une longue histoire (Routly & Spitzer, 1952; Spitzer, 1968; Shull, 1977; Cowie, 1978; Draine & Salpeter, 1979a,b; Dwek & Scalo, 1980; McKee et al., 1987; Jones et al., 1994; Borkowski & Dwek, 1995; Jones et al., 1996). Tous ces modèles concluent à une destruction très efficace des poussières que la formation des poussières dans les étoiles évoluées ne peut suffire à compenser (*cf.* chapitre 1). Il est donc nécessaire d'envisager que les poussières soient également formées et croissent dans le milieu interstellaire, probablement dans sa phase dense.

Les processus physiques susceptibles de former et d'accroître la taille des grains, l'accrétion et la coagulation, sont relativement bien connus d'un point de vue théorique et expérimental. Mais il n'existe pas, à l'heure actuelle, de modélisation détaillée de la formation et de la croissance des poussières dans les nuages diffus et denses du milieu interstellaire. Le besoin d'une telle modélisation est pressant avec l'arrivée prochaine des données FIR/mm des missions Herschel et Planck qui fourniront quantités d'informations sur les grains froids de cette phase dense. Malheureusement, la croissance des grains étant vraisemblablement le produit d'une compétition entre les processus de coagulation, d'accrétion et de fragmentation, la modélisation s'en trouve sérieusement compliquée. Il semble qu'aucun de ces traitements des poussières ne puisse être négligé, et qu'aucun ne domine comme l'érosion domine la destruction des poussières de la phase tiède. Les nombreux travaux publiés sur la croissance des poussières jusqu'à la taille de planétésimaux dans les disques d'accrétion peuvent donner une idée du degré de complexité et d'incertitude d'une telle modélisation où de nombreux

paramètres sont très mal contraints.

Ma thèse sur le traitement des poussières dans les chocs s'inscrit dans ce domaine de recherche plus vaste qui s'intéresse à l'évolution des poussières dans le milieu interstellaire. C'est une première approche, limitée à l'effet des chocs, qui souligne la variété des mécanismes responsables de l'évolution des poussières dans les nuages denses.

Sujet de thèse : traitement des poussières dans les chocs interstellaires traversant les nuages denses

Les nuages denses sont fréquemment traversés par des ondes de choc générées par les vents stellaires, les flots moléculaires et les jets autour des étoiles en formation, les explosions de supernovae, ou encore par des collisions avec d'autres nuages. Ces chocs accélèrent, compriment et chauffent le nuage traversé, activant ou accélérant des réactions chimiques interdites ou trop lentes à basse température. Les nuages denses sont plongés dans un champ magnétique et par là-même susceptibles de propager deux types de choc : 1) des chocs monofluides (chocs J) marqués par un fort pic de température et une discontinuité des variables physiques à la traversée du front de choc, et 2) des chocs continus et multi-fluides (chocs C) où la température du gaz ne dépasse pas 3000 - 4000 K et qui présentent une diffusion ambipolaire du fluide chargé à travers le fluide neutre. La dynamique des poussières à travers le choc augmente la fréquence et l'intensité des collisions gaz-grain et grain-grain. La vitesse d'impact est le principal facteur déterminant l'évolution des poussières. Les grains peuvent se briser l'un sur l'autre ou au contraire coaguler pour former de plus gros grains ce qui, dans les deux cas, modifie la distribution en taille des poussières et donc leurs propriétés optiques. Ils peuvent également être vaporisés instantanément lors d'une collision grain-grain ou érodés progressivement par le gaz, relâchant ainsi en phase gazeuse une partie des éléments réfractaires qui les composent. La destruction des poussières dans les chocs initie alors la chimie en phase gazeuse de ces éléments, notamment le silicium et le fer, qui sont normalement prisonniers des grains : la molécule SiO, qui n'est observée que dans les milieux choqués, est un traceur des conditions physiques qui président à la destruction partielle des grains dans les chocs.

Cette thèse représente une première étape dans l'étude plus générale du traitement des poussières dans la phase dense du milieu interstellaire. On y retrouve entre autres les processus de traitement des poussières susceptibles d'intervenir dans la modélisation de la croissance des grains dans les nuages denses et diffus. Dans le contexte des chocs, ces processus sont fonctions de la charge et de la dynamique des poussières dans le choc, qui doivent donc être modélisés avant d'aborder le traitement proprement dit. Nous évaluons le niveau de destruction des poussières par érosion et vaporisation, ainsi que la modification de leur distribution en taille par l'action combinée de la fragmentation et de la coagulation, dans des chocs de type C et J de vitesse inférieure à 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Nous examinons si ces traitements sont susceptibles d'affecter de manière significative la structure de ces chocs comparativement aux modèles sans traitement. L'accent est mis sur l'inertie des grains et leur mouvement de giration autour des lignes de champ ainsi que, pour les chocs C, sur le découplage des poussières du champ magnétique et l'effet des fluctuations de charge des petits grains.

Les études antérieures sur le traitement des poussières dans les chocs de la phase dense

(Caselli et al., 1997; Schilke et al., 1997; Flower & Pineau des Forêts, 2003; Jiménez-Serra et al., 2005; Gusdorf et al., 2008a,b) se sont limitées aux chocs C et n'incluent pas la fragmentation des poussières [1]. Pour la première fois, la compétition entre les processus de fragmentation et de coagulation des grains, et leur effet rétroactif sur l'état d'ionisation et la dynamique du choc, sont inclus dans l'étude du traitement des grains dans les chocs C. Nous présentons également la première étude du traitement des poussières dans les chocs J se propageant dans la phase dense.

Ce travail sera poursuivi et étendu dans le cadre de l'ANR "Cold Dust", au cours d'un post-doc de 2 ans au sein de l'équipe Milieu Interstellaire et Cosmologie de l'IAS. Cette collaboration entre l'IAS et le CESR (Toulouse) vise à modéliser la croissance des grains dans les milieux denses, et l'évolution de leurs propriétés optiques, afin de préparer nos équipes à l'interprétation des données FIR/mm des satellites Herschel et Planck.

Avertissement au lecteur

La modélisation numérique du traitement des poussières dans les chocs revêt de nombreux aspects très techniques qui ont été volontairement inclus dans le corps du manuscrit. Les résultats de la modélisation tiennent en effet parfois beaucoup à ces "détails" de la microphysique, qu'il importe donc de modéliser correctement. Cette complexité nous est imposée par la richesse des interactions entre les poussières, le champ magnétique et le gaz dans les chocs peu ionisés où (presque) tout est couplé avec tout.

1. Seuls Caselli et al. (1997) se sont pour l'instant intéressés à l'impact de la vaporisation des poussières dans les chocs C. Les autres études ne modélisent que l'érosion des manteaux et des cœurs.

Première partie

Les acteurs

Ce manuscrit débute par trois chapitres d'introduction qui se veulent à la fois pédagogiques et complets.

Les principales contraintes observationnelles sur les poussières interstellaires, et ce qu'on peut en déduire quant aux traitements qu'elles subissent dans les différentes phases du milieu interstellaire, sont détaillées au chapitre 1. Ce chapitre se conclut par une reproduction de mon premier article sur le traitement général des poussières dans les chocs. C'est le compte-rendu d'un cours d'une heure que j'ai donné à l'Ecole des Houches qui s'est déroulée du 1er au 5 mai 2006, lors des rencontres internationales sur les poussières intitulées "Les Houches Dust Meeting" et organisées par des chercheurs de l'IAS, du CEA (Saclay) et du CESR (Toulouse).

Deux chapitres sont ensuite consacrés à une présentation détaillée de la physique des chocs, des chocs hydrodynamiques d'abord (chapitre 2) puis des chocs magnétohydrodynamiques (chapitre 3).

Chapitre 1

Evolution des poussières dans le milieu interstellaire

On a longtemps considéré que l'espace situé entre les étoiles, le milieu interstellaire, était vide. Le milieu interstellaire est en effet un milieu extrêmement ténu en comparaison de l'atmosphère terrestre. Sa densité moyenne[1] est de l'ordre de 1 particule par cm^3. Il est composé à $\sim$ 90% d'hydrogène et à $\sim$ 10% d'Hélium[2] mais aussi de traces d'éléments plus lourds appelés *métaux* (C, O, N, Ne, Mg, S, Fe, Si etc.) qui se trouvent pour partie en phase solide, dans les *poussières interstellaires*.

1.1 Découverte des poussières interstellaires

William Herschel, s'interrogeant sur l'origine des zébrures sombres qui marquent la Voie Lactée, notait à la fin du XVIII^{e} siècle que ces zones devaient être vides d'étoiles, que c'étaient des "trous dans les cieux"[3]. Au milieu du XIX^{e} siècle, l'extinction stellaire est mise en évidence : le nombre d'étoiles par unité de volume dans le voisinage solaire semble diminuer dans toutes les directions à mesure que l'on s'éloigne du soleil. A moins de considérer que le soleil est au centre d'un groupe stellaire, cette diminution ne peut s'expliquer que par l'absorption de la lumière sur la ligne de visée, que l'on évalue alors à une magnitude par kiloparsec. Ce n'est qu'au début du XX^{e} siècle que les astronomes, dont Barnard, réalisent que les nébuleuses sombres d'Herschel sont en fin de compte des corps opaques au rayonnement stellaire. Mais l'origine de cette absorption de la lumière stellaire fait encore débat : l'éther, les atomes, les molécules présentes sur la ligne de visée, ou encore des particules solides très fines, voire des météorites en sont-ils la cause ?

Trumpler (1930) reconsidère ce problème en distinguant notamment l'*absorption générale* de la lumière, responsable d'une diminution de la luminosité des étoiles en excès de la loi

1. Cette valeur moyenne cache cependant des disparités importantes dans les conditions physiques qui règnent dans le milieu interstellaire, qui est structuré en différentes phases approximativement à l'équilibre de pression à toutes les échelles d'observation (*cf.* la table 2.1 du chapitre 2).
2. En nombre de particules et non en masse.
3. Li & Greenberg (2003) présentent de manière particulièrement vivante cette histoire de la découverte des poussières interstellaires.

en $1/r^2$ de propagation de la lumière, de l'*absorption sélective* [1] qui varie avec la longueur d'onde de la lumière et qui modifie la couleur apparente des étoiles. Trumpler (1930) arrive à la conclusion que ce sont de fines particules cosmiques situées entre les étoiles, de tailles variées (équivalentes à des masses de l'ordre de 10^{-19} g ou plus) qui, avec une abondance de $\sim 10^{-23}$ g par cm^3, produisent par diffusion Rayleigh les excès de couleur des étoiles observés.

A la fin des années 40, la polarisation linéaire de la lumière visuelle associée à l'extinction est découverte. Sauf à considérer que cette polarisation est induite par les propriétés intrinsèques du matériau constituant les poussières [2], les grains responsables de cette polarisation linéaire ne peuvent pas être sphériques. Ces grains alignés doivent avoir une taille proche de la longueur d'onde $\lambda_{\max}$ correspondant au pic de la courbe de polarisation, généralement située dans le visible (de l'ordre de 0,5 μm). Le champ magnétique est sans doute à l'origine de l'alignement de ces gros grains, et de nombreux processus ont été proposés pour l'expliquer (*e.g.* Lazarian, 2000). La polarisation étant faible dans l'ultraviolet, les petits grains ($a \ll 0,1\mu$m) doivent être sphériques ou imparfaitement alignés.

1.2 Contraintes observationnelles sur les propriétés des poussières

1.2.1 Liste des contraintes observationnelles

Depuis la seconde guerre mondiale, la liste des contraintes observationnelles sur les poussières interstellaires s'est considérablement allongée grâce à l'ouverture de fenêtres d'observation dans les domaines IR (IRAS, ISO), UV (HST), X (Chandra, XMM-Newton) et prochainement FIR/mm avec les satellites Herschel et Planck. Dwek (2005) dresse la liste des contraintes observationnelles sur les poussières :

1. l'extinction, l'obscuration et le rougissement de la lumière stellaire,
2. l'émission IR des enveloppes circumstellaires et des différentes phases du milieu interstellaire,
3. les déplétions des éléments chimiques et leurs abondances interstellaires,
4. l'émission rouge étendue en provenance de certaines nébuleuses,
5. les halos X, UV et visible autour de certaines sources variables (binaires X, novæ, supernovæ),
6. la présence de raies de structure fine en absorption dans les spectres des sources X,
7. la diffusion et la polarisation de la lumière stellaire,
8. l'émission radio dite "anormale" attribuée aux poussières en rotation rapide,
9. les poussières interstellaires recueillies dans les météorites et dans les IDPs, et leurs anomalies isotopiques,

1. Différence entre la magnitude visuelle et la magnitude photographique.
2. C'est pour expliquer cette polarisation que le modèle de grain graphitique a été proposé dans les années 60, le graphite étant naturellement anisotrope (Li & Greenberg, 2003).

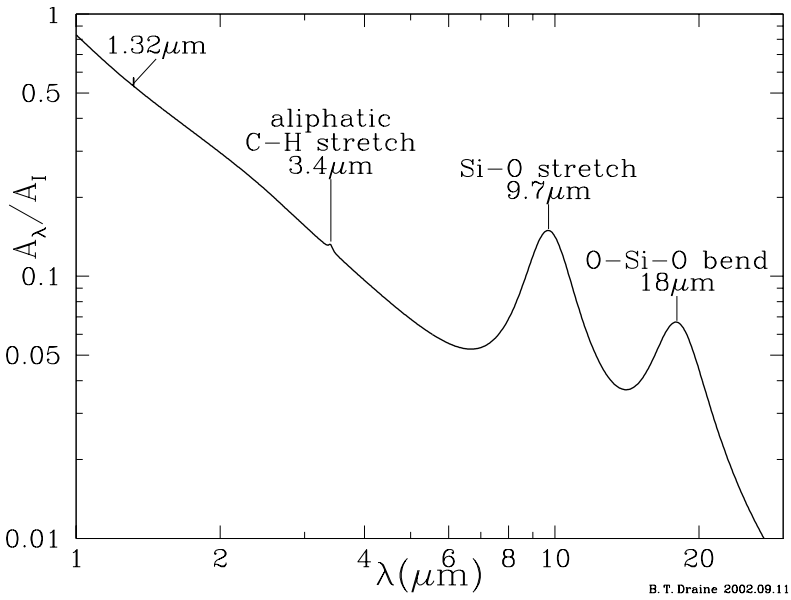


FIGURE 1.1 – Extinction dans l'infrarouge relativement à la bande $I = 9000$ Å, en fonction de la longueur d'onde λ, metttant en évidence les bandes d'absorption caractéristiques des silicates à 9,7 et 18 μm (Joblin et al., 1990, extrait de Draine, 2002).

.

10. le chauffage du gaz par effet photoélectrique sur les grains,
11. l'émission IR des plasmas émettant en X.

Après Draine (2004), nous ajoutons une autre contrainte, indirecte, sur les modèles de poussières : le taux de formation de H_2. Dans la suite de ce chapitre, nous ne considérerons que certaines de ces contraintes, sous un angle qui met en relief l'évolution des poussières dans le milieu interstellaire.

1.2.2 Signatures spectrales en absorption et en émission

Depuis le XIX^{e} siècle et l'invention de la spectroscopie, les espèces chimiques présentes en phase gazeuse sur une ligne de visée peuvent être identifiées et leurs abondances moyennes estimées à partir de l'intensité des raies d'absorption ou d'émission qu'elles impriment sur la lumière stellaire.

Bandes d'absorption des silicates

Ce n'est que dans les années 70 que le développement des observations en infrarouge a permis d'identifier sans ambiguité la présence de grains silicatés sur les lignes de visée à forte extinction du milieu interstellaire par deux fortes bandes d'absorption [1] à 9,7 et 18 μm qui sont attribuées respectivement aux modes d'élongation de la liaison Si-O et de flexion des laisons O-Si-O des silicates (Fig. 1.1). Ces bandes ne présentant pas de structure, les silicates du milieu interstellaire doivent être majoritairement amorphes (la fraction cristalline

1. La bande à 9,7 μm est également observée en émission.

des silicates du milieu interstellaire est inférieure à 1%, Kemper et al., 2004). D'après Draine & Lee (1984), tout le silicium doit être sous forme de silicates pour pouvoir expliquer l'intensité de ces bandes. La polarisation de la bande d'absorption à 9,7 μm est observée sur de nombreuses lignes de visée traversant des nuages denses, ce qui démontre l'existence de gros grains silicatés ($a \simeq \lambda_{\max} \simeq 0{,}5$ μm) non sphériques qui possèdent un moment magnétique et sont alignés.

Bandes d'absorption des glaces

Des raies d'absorption à 3,08, 4,67, 6,0 et 6,85 μm ont été observées sur de nombreuses lignes de visée d'objets situés dans ou derrière des nuages denses ($A_V > 3$) (*e.g.* Hagen et al., 1983; Tielens, 1989). De telles raies, absentes des lignes de visée traversant le milieu diffus, sont caractéristiques des molécules à l'état de glace [1]. Ces glaces doivent vraisemblablement se former à la surface des grains réfractaires, directement par réaction chimique à la surface des grains ou par accrétion de molécules déjà présentes en phase gazeuse. Elles pourraient ensuite évoluer par photolyse ultraviolette [2] vers des manteaux organiques (Greenberg, 1989) [3] ou être photodésorbées dans le milieu diffus (Westley et al., 1995). L'observation de la polarisation des bandes des glaces à 3,08 μm et 4,67 μm (*e.g.* Aitken, 1996) confirme la présence de ces glaces à la surface des gros grains silicatés.

Le *bump* à 2175 Å

La courbe d'extinction de l'infrarouge proche aux ultraviolets présente une bosse proéminente à 2175 Å (ou 4,6 μm^{-1}). Sa position est remarquablement constante sur toutes les lignes de visée (variations en longueur d'onde inférieures à 1%, Mennella et al., 1998), avec une largeur et une intensité qui varient cependant selon les régions. Etant donnée l'intensité de cette bosse, le ou les matériaux qui en sont responsables sont obligatoirement très abondants. Attribuée originellement à des très petits grains graphitiques [4], cette absorption pourrait plus généralement être l'œuvre de liaisons sp^2 dans des matériaux carbonés amorphes (Mennella et al., 1998). La question reste ouverte 40 ans après la découverte de ce *bump*.

Les raies d'émission dans le proche IR

D'intenses raies dans l'infrarouge proche sont observées en *émission* dans une grande variété d'objets astrophysiques : les régions H II, les régions de photodissociation comme la Tête de Cheval (Compiègne et al., 2007) et les nébuleuses par réflexion (Fig. 1.2). Les raies principales d'émission sont situées à 3,3, 6,2, 7,7, 8,6 et 11,3 μm, et sont généralement attribuées aux modes vibrationnels de molécules polycycliques aromatiques composées de

1. La bande forte à 3,08 μm est due à la vibration de la liaison OH de la glace d'eau. Les 3 bandes suivantes sont dues respectivement à CO, H_2O et CH_3OH.
2. Les photons UV produisent des radicaux libres dans les manteaux de glace qui initient de nouvelles réactions chimiques.
3. Hypothèse récemment contredite par les observations de Shenoy et al. (2003).
4. On sait maintenant que la position du pic est, pour les grains graphitiques, sensible à la taille, à la forme et à la présence de manteaux.

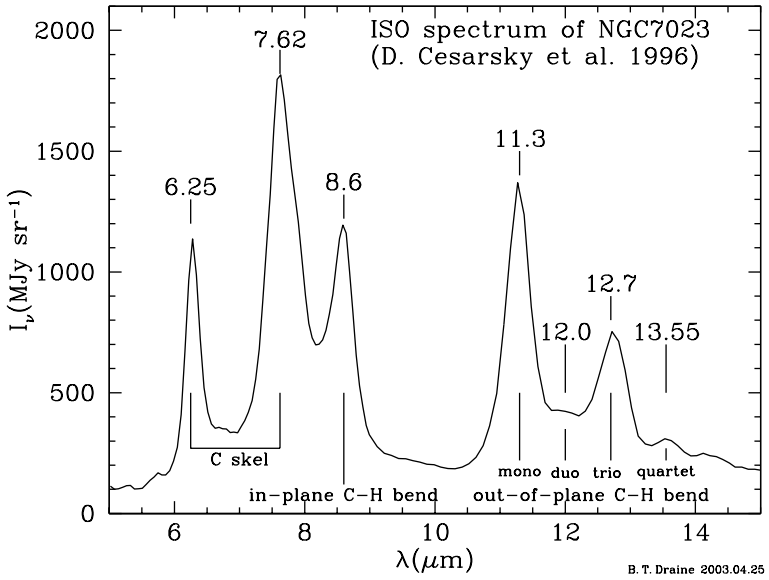


FIGURE 1.2 – Spectre d'émission de la nébuleuse par réflexion NGC 7023, montrant les raies attribuées aux modes de flexion (bend) des liaisons C-H et C-C (skel). Extrait de Draine (2003), d'après Cesarsky et al. (1996).

quelques dizaines d'atomes de carbone : les PAHs ou *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*. La position et l'intensité de ces raies dépendent de la structure, de la composition et de la taille du PAH, mais aussi de sa charge (*e.g.* Compiègne et al., 2007).

Bande d'absorption à 3,4 μm

Une forte bande d'absorption à 3,4 μm est observée un peu partout dans la Galaxie et dans les galaxies extérieures, mais pas dans les nuages moléculaires. Elle est attribuée de façon presque certaine au mode d'élongation de la liaison C-H au sein de structures hydrocarbonées saturées et solides, et donc à une phase de poussières carbonées hydrogénées. Adamson et al. (1999) trouvent une limite supérieure à la polarisation de cette raie en direction du centre galactique qui exclut que des manteaux carbonés riches en C-H puissent recouvrir les gros grains silicatés, comme proposé dans le modèle de Greenberg (1989). Pour Adamson et al. (1999), l'explication la plus simple de la non polarisation de cette raie à 3,4 μm réside dans l'existence d'une population de très petits grains carbonés, et donc non alignés, dont les caractéristiques se rapprochent des très petits grains carbonés vraisemblablement à l'origine du *bump* à 2175 Å. Ce modèle explique aussi pourquoi cette raie n'est pas observée dans les milieux moléculaires, si l'on admet que la coagulation de ces petits grains carbonés sur les gros grains peut être accompagnée d'une évolution chimique qui en supprimerait la signature.

1.2.3 Déplétions dans les nuages diffus du disque galactique

Le spectrographe GHRS à bord du télescope spatial Hubble a permis récemment d'améliorer les mesures dans l'ultraviolet de l'intensité des raies d'absorption caractéristiques des

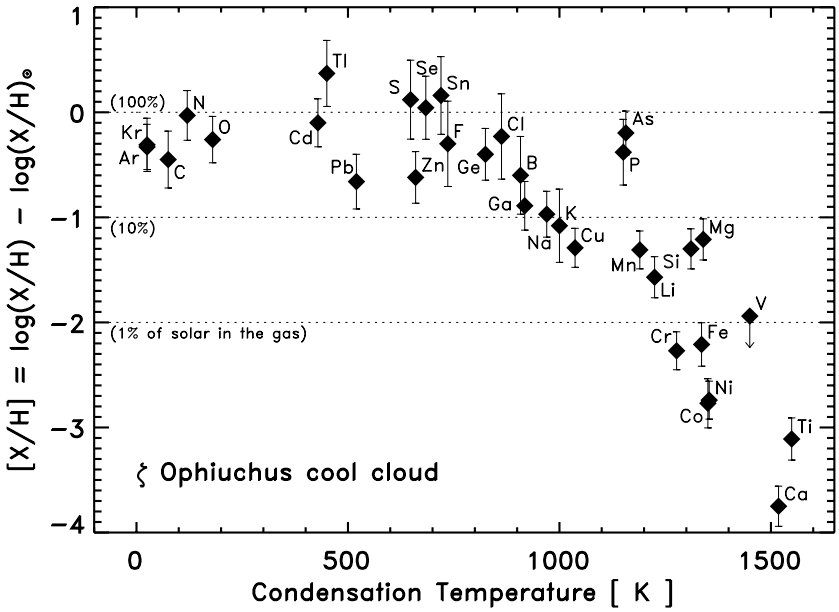


FIGURE 1.3 – Abondance en phase gazeuse des éléments chimiques dans le nuage diffus en direction de ζ Oph, en fonction de leur température de condensation. Extrait de Jones (2005).

principaux atomes, ions et molécules dans différents environnements du milieu interstellaire (Savage & Sembach, 1996). L'abondance fractionnelle d'un élément chimique en phase solide, c'est-à-dire dans les poussières, est pour l'instant déterminée principalement de manière indirecte [1], en soustrayant l'abondance mesurée en phase gazeuse de l'abondance totale (gaz et poussières) de l'élément dans la région étudiée. Comme ces abondances totales ne sont pas connues, les abondances solaires servent souvent d'estimation des abondances chimiques moyennes dans le milieu interstellaire. Les étoiles jeunes de type B du voisinage solaire, sans doute plus représentatives de la composition actuelle du milieu interstellaire que le soleil, sont également utilisées pour définir des abondances de référence (Snow & Witt, 1996).

La figure 1.3 montre que certains éléments chimiques réfractaires sont fortement *déplétés* de la phase gazeuse dans les nuages diffus, relativement à leurs abondances solaires. Leur degré de déplétion est corrélé avec leur température de condensation (Field, 1974). Ces éléments chimiques déplétés sont les constituants des poussières interstellaires. L'azote n'est pas un composant important des poussières, sans doute parce qu'il est présent sous forme de diazote peu réactif à cause de sa triple liaison. Le soufre n'est pas déplété dans le milieu diffus bien qu'il puisse en principe former des sulphides solides, mais il est probablement déplété dans les nuages denses. Le calcium est très fortement déplété ($>$ 99,9 %), même dans les nuages diffus.

Jones (2000) classe les éléments chimiques constitutifs des poussières en 4 groupes d'abondances solaires décroissantes :

1. Les éléments primaires ($\geq$ 300 ppm) : C et 0

1. La mesure *directe* de la composition des poussières, par exemple par analyse des raies d'absorption caractéristique des poussières ou plus récemment par les halos X, est difficile et incertaine.

2. Les éléments secondaires ($\sim$ 30 ppm) : Mg, Si et Fe

3. Les éléments minoritaires ($\sim$ 3 ppm) : Na, Al, Ca et Ni

4. Les éléments à l'état de traces ($\sim 0,1 - 0,3$ ppm) : K, Ti, Cr, Mn et Co

Les rapports d'abondance en phase solide des différents éléments chimiques donnent des indications sur la composition chimique stœchiométrique des poussières (Savage & Sembach, 1996) [1]. Le rapport O/Si dans la direction du nuage diffus de ζ Oph est compris entre 8 pour des abondances solaires de référence et 13 pour les abondances des étoiles B (Figs. 1.3 et 1.12). Si la phase solide contenant le silicium avait la stœchiométrie de l'olivine ($Mg_xFe_{(2-x)}SiO_4$) ou du pyroxène ($Mg_xFe_{(1-x)}SiO_3$), ce rapport serait respectivement de 4 ou 3. Savage & Sembach (1996) en concluent qu'une partie de l'oxygène déplété dans le nuage diffus de ζ Oph se trouve sous forme d'oxydes (MgO, Fe_2O_3 et Fe_3O_4).

1.2.4 Nature des grains présolaires

Des poussières interstellaires ont été extraites des météorites et des IDPs [2], et leur origine extrasolaire identifiée par leurs anomalies isotopiques particulières (Anders & Zinner, 1993). Ces grains présolaires étaient jusqu'à récemment exclusivement des grains carbonés (diamant, SiC, graphite) ou des oxydes comme l'alumine (Al_2O_3) car le traitement chimique à base d'acides employé pour dissoudre la matrice silicatée de la météorite détruisait également les éventuels grains silicatés. Ces grains présolaires carbonés ne sont pas représentatifs des grains interstellaires que l'on sait être dominés par une population silicatée. De nouvelles techniques non destructives ont permis d'isoler les premiers grains silicatés présolaires (Mostefaoui & Hoppe, 2004; Messenger et al., 2005).

1.2.5 Analyse de la composition des poussières par halos X

L'analyse des halos X produits par les poussières autour des sources intenses de rayons X est une nouvelle contrainte sur les poussières interstellaires accessible aux observations depuis le lancement des satellite X Chandra et XMM-*Newton* (Smith & Dwek, 1998). L'angle de diffusion des rayons X par les poussières est très faible ($\theta \propto \lambda/a \ll 1$) d'où la formation d'un halo. L'intensité, la distribution angulaire et spectrale du halo sont fonctions de la composition chimique et de la distribution en taille des poussières sur la ligne de visée. Des signatures caractéristiques des éléments chimiques constitutifs des poussières sont attendues pour une énergie de 0,28 keV (C), 0,54 keV (O), 1,3 keV (Mg), 1,84 keV (Si). Costantini et al. (2005) ont identifié les éléments O, Mg et Si comme constituants des poussières sur la ligne de visée de la binaire X Cyg X-2, avec une contribution majeure des silicates de type olivine et pyroxène riches en magnésium, sans toutefois exclure d'autres composantes.

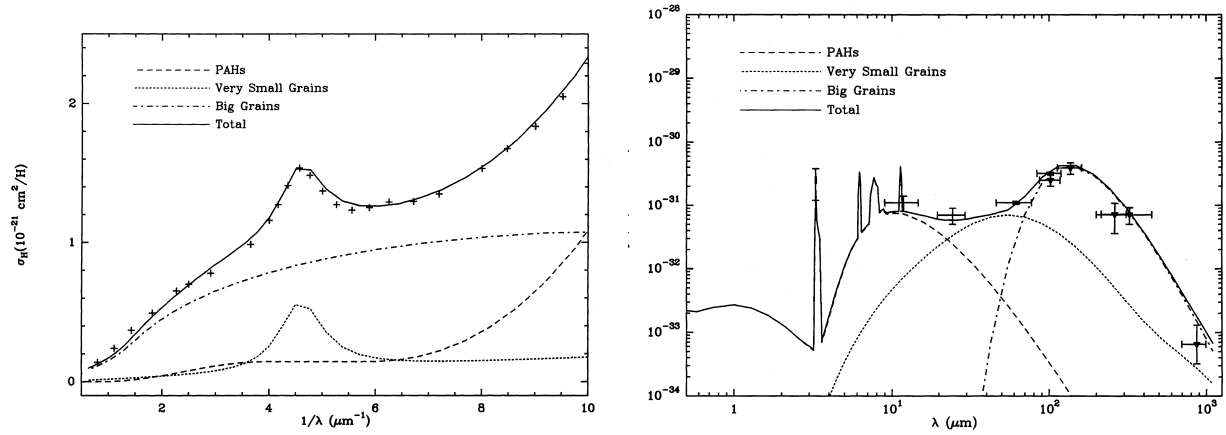


FIGURE 1.4 – Ajustement des courbes d'extinction (**Gauche**) et d'émission (**Droite**) par trois composantes de poussières (PAHs, VSG et BG) dans le modèle de Désert et al. (1990).

1.2.6 Distribution en tailles moyenne des poussières

La courbe d'émission de l'infrarouge proche jusqu'à l'infrarouge lointain contraint la distribution en taille des poussières. Dans le modèle de Désert et al. (1990), trois composantes de tailles de poussières (des PAHs, des très petits grains et des gros grains) sont requises pour reproduire simultanément la courbe d'extinction et la courbe d'émission infrarouge (Fig. 1.4). L'émission dans l'infrarouge moyen ($\sim$ 60 μm) apporte des contraintes sur l'abondances des petits grains chauffés de manière stochastique à chaque absorption d'un photon UV, tandis que l'émission à plus grande longueur d'onde ($\sim$ 100-200 μm) est produite par les gros grains à l'équilibre thermique. L'émission dans l'infrarouge lointain est, elle, due aux grains froids.

Les sondes Ulysse et Galileo ont détecté *in situ* une forte abondance de très gros grains ($a \geq 1$ μm) interstellaires, identifiés comme tels par leur vitesse supérieure à la vitesse d'échappement au point de collecte (Frisch et al., 1999). Une telle abondance de gros grains ne s'accorde pas avec les distributions en taille observées dans le milieu interstellaire. Comment ces gros grains ont-ils pu survivre au passage des chocs interstellaires qui devraient les fragmenter si aisément (Jones et al., 1996) ? Slavin et al. (2004) montrent qu'une étude précise de la trajectoire suivie par les gros grains ($a > 1$ μm) explique dans certains cas comment ces grains peuvent survivre au passage d'un choc (*cf.* article 1 page 39).

L'analyse des Halos X (*cf.* § 1.2.5) apporte également des informations sur la distribution en taille des plus gros grains, les plus efficaces dans la diffusion des rayons X. Les analyses de halos X effectuées à ce jour semblent de ce point de vue confirmer les modèles courants tels ceux de Mathis et al. (1977), Weingartner & Draine (2001) et Zubko et al. (2004).

1. La stœchiométrie est un indicateur de composition chimique et non de structure. Une stœchiométrie qui semble favoriser un modèle de silicates peut tout aussi bien être respectée par un mélange d'oxydes (Tielens, 1998).
2. Interplanetary Dust Particle.

1.3 Modèles de traitement des poussières

Les propriétés moyennes des poussières de la Galaxie présentées dans la section précédente cachent des disparités géographiques importantes. Les contraintes observationnelles sur les poussières varient en effet selon les lignes de visée. Ces variations peuvent traduire une variation des conditions physiques d'excitation (température, champ de rayonnement), ou une évolution propre des poussières, en taille et en abondance, au gré des conditions physiques rencontrées. Dans cette section, nous nous intéressons aux processus suceptibles d'affecter la croissance ou la destruction des poussières dans la Galaxie. Pour une présentation de tous les processus physiques susceptibles de détruire les poussières dans le milieu interstellaire, consulter Jones (2004).

1.3.1 Les poussières sont-elles détruites par les rayons cosmiques ?

L'hypothèse d'une destruction des poussières par les rayons cosmiques a été discutée par Draine & Salpeter (1979b) pour les cœurs réfractaires et par Barlow (1978) pour les glaces. La section efficace d'interaction des rayons cosmiques est une fonction fortement décroissante de la vitesse de la particule cosmique, et donc de son énergie :

$$\sigma_{\rm cr} \propto v_{\rm cr}^{-4} \,. \tag{1.1}$$

Seuls les rayons cosmiques de basse énergie (keV, MeV) sont donc susceptibles d'interagir de manière signifiative avec les grains qu'ils traversent.

Draine & Salpeter (1979b) et Barlow (1978) concluent à une influence négligeable des rayons cosmiques sur les poussières devant les autres processus en jeu dans le milieu interstellaire comme l'érosion dans les chocs. Cette analyse est confirmée par des expériences d'irradiation menées en laboratoire avec des protons à une énergie ~ 2 MeV, soit 6 ordres de grandeur de plus que l'énergie de liaison des silicates (Day, 1977). Les silicates irradiés ne montrent (dans la fenêtre 2-25 μm) aucun changement de structure pour des doses [1] comprises entre 5.10^{15} et 7.10^{17} cm^{-2}. Le flux interstellaire de rayons cosmiques n'est pas connu pour les énergies de l'ordre du MeV car il est localement dominé par le vent solaire à cette énergie, mais Day (1977) estime qu'il est de l'ordre de $5.10^4 - 5.10^5$ cm^{-2} yr^{-1}. Avec cette estimation, la dose au MeV reçue par un grain interstellaire sur une période de 10^9 années est inférieure à 10^{15} cm^{-2}, et donc aux doses utilisées dans l'expérience de Day (1977).

1.3.2 Effets des chocs sur les poussières

Des ondes de choc, générées par les explosions des supernovæ, traversent régulièrement le milieu interstellaire. Ces chocs détruisent de manière significative les poussières de la phase tiède. Cette destruction peut s'opérer suivant deux processus : 1) l'érosion de la surface du grain lors des collisions gaz-grain et 2) la vaporisation partielle ou totale du grain lors de collisions avec d'autres grains.

1. On appelle dose le nombre de particules (ici des protons au MeV) reçues par unité de surface.

Destruction des poussières par érosion

L'érosion est un processus par lequel des particules du réseau d'un matériau solide sont éjectées par un bombardement d'atomes ou d'ions (Barlow, 1978). Le bombardement peut avoir deux origines, l'une thermique, l'autre dynamique.

Erosion thermique Un gaz suffisamment chaud ($T > 10^5$ K) peut éroder la surface des grains : on parle d'érosion thermique (Barlow, 1978; Draine & Salpeter, 1979b). A l'équilibre thermique, toutes les particules du gaz ont la même énergie quelle que soit leur masse. Les atomes et ions projectiles qui dominent l'érosion thermique des poussières sont donc les plus abondants : l'hydrogène et l'hélium. Sur une période de temps donnée, l'érosion thermique enlève la même épaisseur de la surface des grains quels que soient leurs rayons. Un gaz très chaud fait donc disparaître préférentiellement les petits grains et diminue d'autant la taille des gros grains sans que cela affecte beaucoup leur taille [1]. Draine & Salpeter (1979b) proposent l'expression suivante pour la non collisionnel de vie d'un grain de rayon a dans un gaz de température 10^6 K $\leq T \leq 10^9$ K :

$$t_{\rm erosion} \simeq 2.10^4 \,{\rm ans} \times \frac{1\,{\rm cm}^{-3}}{n_{\rm H}} \frac{a}{0,01\,\mu{\rm m}} \,. \tag{1.2}$$

Sur la base d'une simulation Monte-Carlo de la dépendance du rendement d'érosion avec l'angle d'incidence de la particule, Jurac et al. (1998) proposent d'augmenter d'un ordre de grandeur les rendements d'érosion des petits grains définis par Draine & Salpeter (1979b), ce qui diminue d'autant leur durée de vie.

Erosion inertielle L'érosion des poussières peut également être causée par un mouvement rapide (> 30 km s^{-1}, Tielens et al., 1994) des grains par rapport au gaz. Dans les ondes de choc, les poussières suivent une phase de giration autour des lignes de champ magnétique et sont progressivement freinées par le gaz. Chaque grain entre en collision avec une masse de gaz approximativement égale à sa propre masse avant amortissement de sa giration. On en déduit que la fraction de masse détruite par érosion inertielle est la même quelle que soit la taille du grain [2]. Toutes les particules du gaz bombardant le grain à la même vitesse, les particules les plus lourdes sont individuellement les plus efficaces, leur efficacité globale dépendant de leur abondance.

Fragmentation et vaporisation des poussières

Une collision entre deux grains microscopiques réfractaires à une vitesse supérieure à quelques km s^{-1} aboutit à la fragmentation des deux grains (Tielens et al., 1994) [3]. La figure 1.5 présente les différents cas envisagés dans les modèles existants. La distribution en taille

1. L'érosion thermique se traduit donc observationnellement par une baisse de l'extinction dans l'ultraviolet.
2. L'érosion inertielle diffère en cela de l'érosion thermique qu'elle ne détruit pas plus les petits grains que les gros.
3. Ce seuil de vitesse est révisé à la baisse si les grains sont de grande taille ou si ce sont des agrégats peu compacts de petits grains.

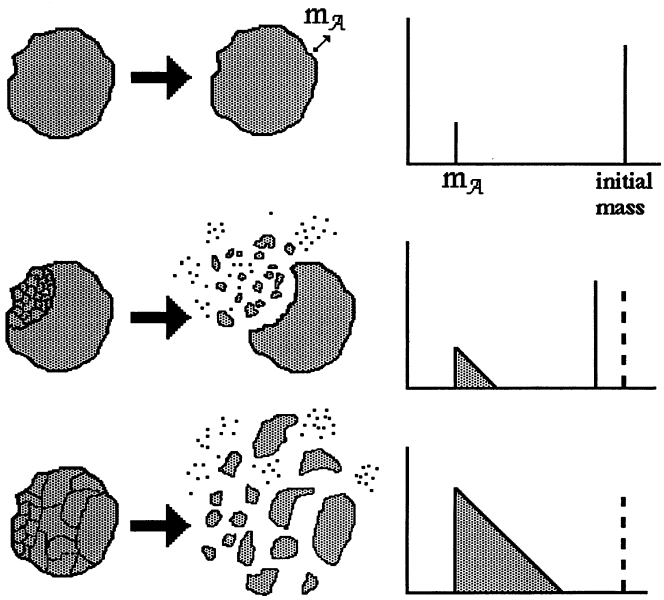


FIGURE 1.5 – Schéma des processus de traitement des grains réfractaires dans les chocs. De haut en bas : 1) érosion du grain, 2) cratérisation du grain et 3) fragmentation catastrophique du grain, accompagnées pour 2) et 3) de sa vaporisation partielle ou totale. La colonne de droite schématise la distribution en masse des fragments produits. Extrait de Borkowski & Dwek (1995).

des fragments produits suit une loi de puissance [1]. Si un des deux grains est beaucoup plus petit que l'autre, le petit grain cratérise le gros grain sans le détruire, quelle que soit la vitesse d'impact. Si les grains sont de même taille et si la vitesse est suffisante, la fragmentation est dite catastrophique pour les deux grains qui sont alors totalement réduits à l'état de fragments par la collision.

La fragmentation n'est pas un processus destructif. La masse de poussières est conservée, tout en étant redistribuée vers les petites tailles de grains, ce qui augmente la section efficace totale de la distribution de poussières et l'extinction dans le visible et l'ultraviolet. La fragmentation des grains s'accompagne, pour des vitesses élevées (> 6 km s^{-1} pour les glaces, > 20 km s^{-1} pour les grains réfractaires, Tielens et al., 1994), d'une destruction partielle ou totale des deux grains par vaporisation.

Processus dominants dans les chocs traversant la phase tiède ?

L'érosion est d'origine thermique dans les chocs très rapides (> 200 km s^{-1}, non-radiatifs) à cause des températures particulièrement élevées qui y règnent et du faible taux de refroidissement (*e.g.* Dwek et al., 1996). Du fait que toutes les particules du gaz percutent les grains avec la même *énergie* d'origine thermique, c'est le plus abondant, l'hydrogène, qui est l'agent déterminant de l'érosion thermique. Pour des vitesses de choc inférieures, l'érosion est d'origine inertielle (McKee et al., 1987; Jones et al., 1994, 1996). Toutes les particules du

1. La fragmentation des poussières dans les chocs est très certainement responsable de leur distribution en taille en loi de puissance observée dans le milieu tiède.

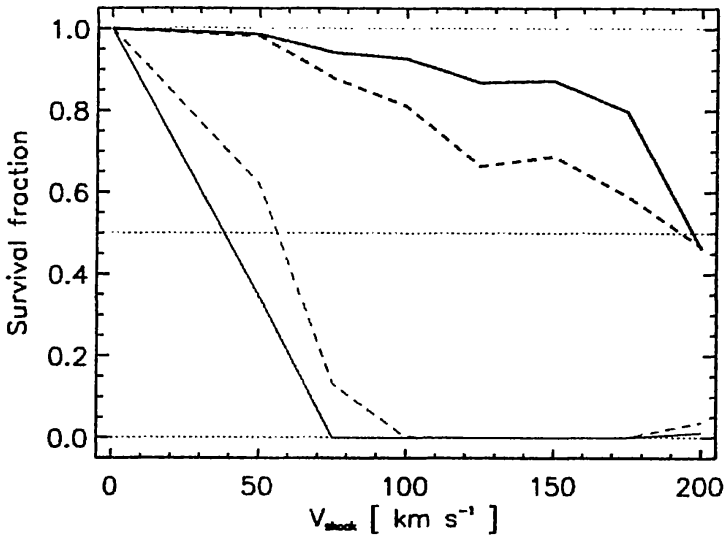


FIGURE 1.6 – Fraction de masse des poussières survivant à un choc dans la phase tiède du milieu interstellaire, en fonction de la vitesse de ce choc, pour des distributions MRN de grains carbonés (traits pleins) et silicatés (pointillés). Les deux courbes inférieures ne concernent que les grains de taille supérieure à 1000 Å de ces mêmes distributions. Extrait de Jones (2005).

gaz ayant la même *vitesse* non thermique par rapport à la particule, l'érosion inertielle est dominée par He. Entre 100 et 200 km s^{-1}, l'oxygène et le carbone, quoique beaucoup moins abondants que He, apportent une contribution non négligeable à l'érosion des grains du fait de leur masse plus élevée.

Spitzer (1976) a montré qu'un champ magnétique transverse à la direction de propagation du choc, même faible, était responsable d'une double augmentation de l'érosion des poussières dans les ondes de choc, en comparaison d'un modèle sans champ magnétique dans lequel les poussières traverseraient le choc à une vitesse proche de celle du choc :

1. Le champ magnétique contraint les grains à suivre en moyenne le mouvement des ions à travers le choc, mouvement beaucoup plus lent que l'onde de choc elle-même, ce qui augmente la durée de leur séjour dans la partie la plus chaude et la plus destructrice du choc et donc l'intensité de l'érosion thermique [1].
2. La phase de refroidissement du gaz choqué conduit à l'accélération de la giration des grains (effet bétatron, *cf.* chapitre 7 § 7.2.3) ce qui augmente l'intensité de l'érosion inertielle.

Shull (1978) ajoute un effet dynamique qui tend à réduire l'érosion inertielle des grains : en sus du freinage collisionnel, les grains chargés subissent dans les milieux fortement ionisés un freinage coulombien efficace à basse vitesse.

1. Notons cependant que cet effet tend à diminuer avec l'augmentation du champ magnétique transverse, du fait de l'augmentation de la pression magnétique (*cf.* chapitre 3).

La figure 1.6 montre (courbes supérieures) le pourcentage en masse des poussières silicatées et carbonées qui survivent au passage d'un choc dans la phase tiède du milieu interstellaire, en fonction de la vitesse de ce choc, dans le modèle de Jones et al. (1996) qui prend en compte la fragmentation des poussières dans le choc. Les courbes inférieures représentent les grains de taille supérieure à 1000 Å. On voit qu'un choc de ~ 75 km s^{-1} suffit, par fragmentation lors des collisions grain-grain, à faire disparaître les gros grains de la distribution en taille.

Effet indirect de la fragmentation sur la destruction des poussières Pour des vitesses de choc supérieures à 200 km s^{-1}, la fragmentation intensifie la destruction des poussières par érosion thermique en augmentant considérablement la surface totale des poussières, carbonées principalement mais aussi silicatées dans une moindre mesure (Jones et al., 1994, 1996). L'effet est inverse pour des vitesses de choc inférieures à 200 km s^{-1}. Dans ces chocs, l'érosion des poussières est d'origine inertielle. La fragmentation des gros grains augmente le rapport surface sur volume des poussières mais ne modifie pas l'intensité de l'érosion inertielle qui détruit la même fraction de masse de toutes les tailles de grains. Par contre, la vaporisation des grains est moins efficace car la fragmentation domine la vaporisation lors des collisions grain-grain, limitant leur destruction. Dans les chocs de vitesse inférieure à ~ 200 km s^{-1}, la fragmentation des poussières a donc un effet modérateur sur la vaporisation des poussières sans avoir d'effet sur l'érosion (Jones et al., 1996) comparativement à un modèle sans fragmentation (Jones et al., 1994). Dès que la fragmentation est prise en compte, la vaporisation se révèle avoir un impact très limité dans les chocs ($\sim 1\%$ de destruction des poussières par érosion dans les chocs quelle que soit leur vitesse, Jones et al., 1996). Elle n'est significative que là où l'érosion est inefficace, c'est-à-dire pour des vitesses de choc faibles ($<$ 50 km s^{-1}).

Le lecteur intéressé pourra se référer à notre premier article (§ 1.6.2) pour une plus ample introduction au traitement des poussières dans les ondes de choc.

1.3.3 Formation et croissance des poussières dans la phase froide

Les grains peuvent croître selon deux processus distincs mais sans doute simultanés : par accrétion de matière de la phase gazeuse et par coagulation entre grains.

Formation des grains par accrétion

La taille des grains peut augmenter par accrétion de molécules et d'atomes présents en phase gazeuse ou par synthèse de ces molécules à la surface des grains. Dans les deux cas nous parlons d'accrétion de matière sur les grains. Cette tendance à l'accrétion dans les milieux denses est indiquée, comme nous le verrons au paragraphe 1.4.3, par le fait que les déplétions des éléments lourds tendent à augmenter avec la densité du gaz.

Appliquant un modèle stationnaire d'évolution des déplétions entre les phases tiède et froide du milieu interstellaire, Tielens (1998) montre que les temps caractéristiques d'accrétion dans les nuages denses sont à peu près les mêmes pour les principaux éléments chimiques

constituant les poussières silicatées (Si, Mg, et Fe) [1]. On peut donc définir un temps caractéristique d'accrétion dans un nuage de densité $n_{\rm H}$:

$$t_{\rm accretion} \sim 10^9 \left(\frac{1\,{\rm cm}^{-3}}{n_{\rm H}}\right) \sqrt{\frac{10\,{\rm K}}{T}}\ {\rm ans}\,. \tag{1.3}$$

A ce temps caractéristique d'accrétion correspond un flux de matière sur les grains qui n'est que de quelques particules par jour (Tielens, 1989).

Croissance des grains par coagulation

La croissance des grains par le seul processus d'accrétion est limitée car l'accrétion ajoute une même épaisseur de matière à la surface de tous les grains. L'accrétion ne peut donc pas expliquer la forte augmentation de la taille des plus gros grains observée entre le milieu diffus et le milieu dense. La coagulation des grains est un processus lent, mais qui seul permet de former de gros grains.

Deux grains entrant en collision à basse vitesse peuvent coller l'un à l'autre. La cohésion de l'ensemble est assurée par les forces de Van der Waals. La vitesse limite à laquelle deux grains peuvent coaguler (et non rebondir l'un sur l'autre ni se fragmenter mutuellement) est faible pour des gros grains réfractaires (de l'ordre du $\rm m\,s^{-1}$ pour des grains micrométriques) et plus élevée pour les petits grains que pour les gros (de quelques centaines de $\rm m\,s^{-1}$ à ~ 1 $\rm km\,s^{-1}$ pour les plus petits). La présence de manteaux à la surface des grains augmente d'un ordre de grandeur cette vitesse critique s'ils sont constitués de glace (Chokshi et al., 1993), et de plus de deux ordres de grandeurs pour des manteaux organiques (Kouchi et al., 2002).

Pour que les grains coagulent, il faut qu'il existe des différences de vitesse entre les grains. Dans les nuages au repos, ce champ de vitesse peut avoir une origine brownienne (due à la température des grains) et, sans doute de manière plus réaliste, turbulente. Dans les disques d'accrétion, la migration des grains vers l'étoile et vers le plan du disque (conséquences de l'action conjointe de la gravité et de la friction du gaz) ajoute encore de nouveaux champs de vitesse.

En coagulant, les grains de poussières forment des agrégats poreux. Lors de collisions à basse vitesse, les agrégats peuvent fusionner. A plus haute vitesse, la collision peut compacter les agrégats et les rendre plus résistants aux chocs. A plus haute vitesse encore (de l'ordre de quelques dizaines de $\rm m\,s^{-1}$), les agrégats peuvent être détruits (Dominik & Tielens, 1997). La coagulation entre donc en compétition avec la fragmentation quand les vitesses relatives entre agrégats dépassent quelques dizaines de $\rm m\,s^{-1}$ comme cela peut se produire dans un milieu turbulent.

Pour un nuage de densité de proton $n_{\rm H}$ où la vitesse relative caractéristique entre grains est ΔV, Draine (2002) propose le temps caractéristique de coagulation suivant :

$$t_{\rm coagulation} = 6.10^9 \left(\frac{1\,{\rm cm}^{-3}}{n_{\rm H}}\right) \left(\frac{100\,{\rm m\,s}^{-1}}{\Delta V}\right) {\rm ans}\,. \tag{1.4}$$

1. Jones (2000) s'interroge sur les mécanismes physico-chimiques qui permettent, dans les milieux denses, de reformer un manteau silicaté *pur* par accrétion si le taux d'accrétion ne dépend pas de la nature chimique de l'élément.

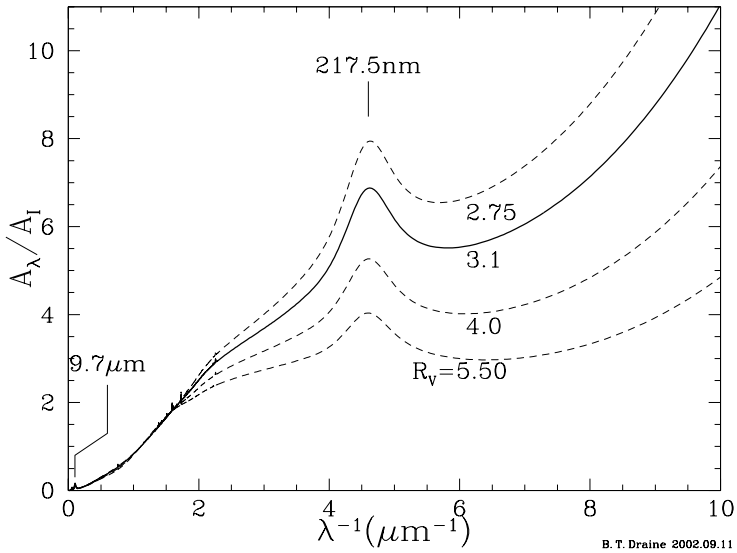


FIGURE 1.7 – Courbes d'extinction en fonction du nombre d'onde $1/\lambda$ relativement à l'extinction dans la bande $I = 9000$ Å, pour des régions de la Voie Lactée caractérisées par différents facteurs d'extinction $R_V = A_V/E(B-V)$. A_B est l'extinction à $B = 4400$ Å et A_V à $V = 5500$ Å. Le rougissement est défini par $E(B-V) = A_B - A_V$. L'absorption des silicates à 9,7 μm est à peine visible sur cette représentation (Draine, 2002).

Ce temps est comparable en ordre de grandeur au temps caractéristique d'accrétion (Eq. (1.3)) ce qui donne à penser que les processus d'accrétion et de coagulation opèrent simultanément et non successivement.

1.4 Contraintes observationnelles sur le traitement des poussières

1.4.1 Variations globales de la courbe d'extinction

L'existence d'une distribution en taille des poussières a été historiquement mise en évidence par le tracé de la courbe d'extinction moyenne du milieu interstellaire (absorption + diffusion) en fonction de la longueur d'onde. Une population de gros grains silicatés est nécessaire pour expliquer l'extinction dans le visible, tandis qu'une population de très petits grains, principalement carbonés, explique l'extinction dans l'ultraviolet (*e.g.* Mathis et al., 1977).

La figure 1.7 montre comment la hauteur du *bump* et la pente de l'extinction dans l'ultraviolet associées aux très petits grains carbonés peut dépendre des lignes de visée. Mennella et al. (1998) montrent que les variations des caractéristiques du *bump* à 2175 Å peuvent s'interpréter comme le produit d'une combinaison linéaire sur la ligne de visée de l'absorption de différentes populations de nano-grains de carbone amorphe hydrogéné, chaque population ayant subi un traitement ultraviolet d'intensité propre à son environnement. La

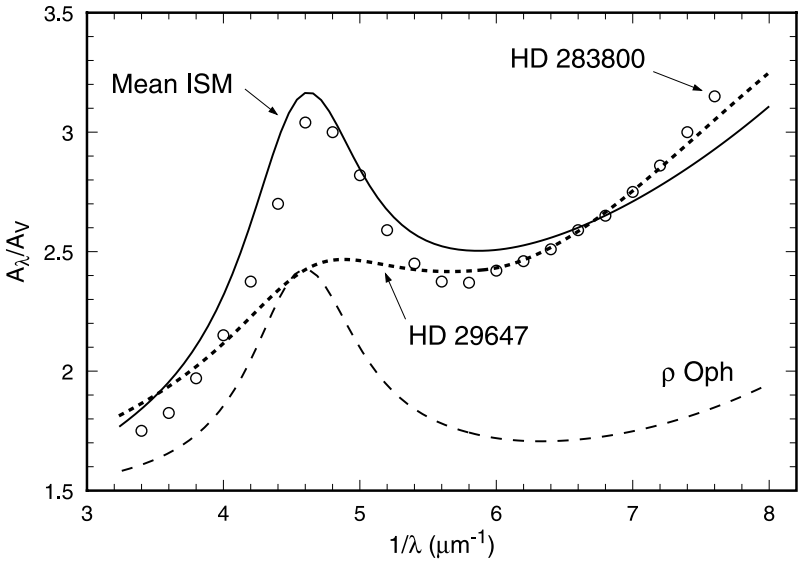


FIGURE 1.8 – Courbes d'extinction dans l'ultraviolet en direction des étoiles HD 29647 ($R_v \simeq 3.6$) et HD 283800 ($R_v \simeq 3.1$) du Taureau, comparées à celle sur la ligne de visée de HD 147933/4 située dans le nuage ρ Oph ($R_v \simeq 4-4.5$). La courbe en trait plein représente l'extinction moyenne dans le milieu interstellaire. Le *bump* très atténué à 2175 Å en direction de HD 29647 suggère une croissance des grains par accrétion. Inversement, la faible pente de l'extinction dans l'ultraviolet vers ρ Oph indique une coagulation des petits grains sur les gros. Extrait de Whittet et al. (2001).

pente de la courbe d'extinction dans l'ultraviolet peut être caractérisée par l'indice $R_V = A_V/E(B-V)$, rapport de l'extinction A_V dans la bande à $V = 5500$ Å à l'excès de couleur $E(B-V) = A_B - A_V$ (Cardelli et al., 1989). Cet indice est élevé dans les milieux denses ($R_V \sim 5$) et plus faible dans les milieux diffus et ténus ($R_V \sim 3$). La variation de l'allure de la courbe d'extinction est interprétée comme la preuve d'une variation (et donc d'une évolution) de la distribution en taille des grains dans les phases denses et diffuses.

Il est maintenant établi par de très nombreuses observations que les grains de poussières des milieux denses sont plus gros en moyenne que ceux des milieux diffus. Cette croissance des grains se traduit, outre la modification de la courbe d'extinction, par une augmentation de la longueur d'onde $\lambda_{\max}$ correspondant au maximum de polarisation (Whittet & van Breda, 1978), et également par une augmentation de l'intensité de la lumière diffusée (Yamashita et al., 1989). L'accrétion et la coagulation n'ont pas les mêmes effets sur la distribution en taille des poussières, et donc sur les propriétés optiques en extinction des poussières. L'extinction *visuelle* par atome d'hydrogène sur la ligne de visée, $A_V/N_{\rm H}$, augmente lors de l'accrétion de matière à la surface des grains car le nombre de grains reste le même alors que leur taille augmente. A l'inverse, l'extinction visuelle par atome d'hydrogène diminue lorsque les grains coagulent pour former de plus gros grains car alors "les grains se cachent les uns derrière les autres" (Jura, 1980). La courbe d'extinction *dans l'ultraviolet* est également affectée de différentes manières par ces deux processus (Fig. 1.8). L'accrétion tend à estomper le *bump* à 2175 Å, tandis la coagulation des petits grains sur les gros grains tend à diminuer

l'extinction dans l'ultraviolet lointain (Kim & Martin, 1996). On conclut par exemple de la figure 1.8 que la croissance des poussières est dominée par l'accrétion dans le nuage du Taureau (Whittet et al., 2001), tandis qu'elle est dominée par la coagulation dans le nuage de ρ Oph (Jura, 1980; Vrba et al., 1993).

1.4.2 Variation locale de la courbe d'émission

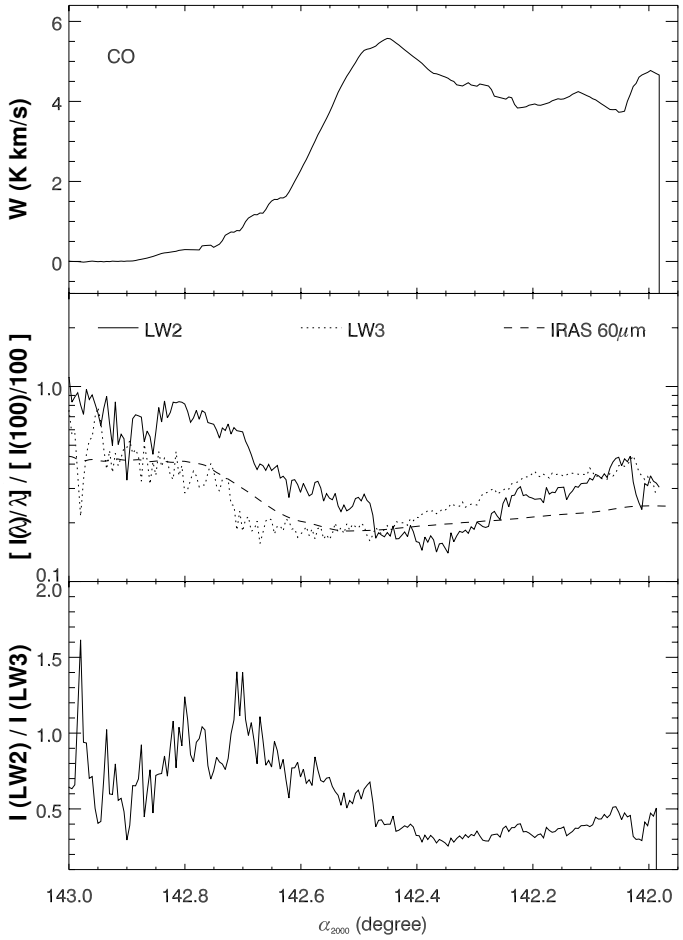


FIGURE 1.9 – Variations spatiales de l'émission à l'interface des phases atomiques ($\alpha_{2000} \leq 142.5^{\circ}$) et moléculaires ($\alpha_{2000} \geq 142.5^{\circ}$) d'un cirrus de haute lattitude galactique : (**Haut**) CO ; (**Milieu**) bandes des aromatiques à 5-8.5 μm (LW2) et 12-18 μm (LW3) et bandes des VSG à 60 μm ; (**Bas**) rapport LW2/LW3. Extrait de Miville-Deschênes et al. (2002).

L'excès d'émission en infrarouge proche est l'indice d'un traitement des grains, dans les supernovæ (Dwek et al., 1996) ou dans les cirrus à haute lattitude galactique (Miville-Deschênes et al., 2002). La figure 1.9 montre la variation des propriétés optiques des poussières à l'interface séparant les phases atomique et moléculaire d'un tel cirrus. Miville-Deschênes et al. (2002) concluent que ces variations reflètent 1) la production dans le milieu atomique turbulent de petites particules de poussières, par fragmentation des plus gros grains, et inversement

2) la disparition de ces petits grains dans le milieu moléculaire par coagulation sur les gros grains.

Il n'est pas toujours aisé de déterminer l'origine de la variation d'émission sur une ligne de visée car plusieurs effets peuvent se conjuguer et agir dans le même sens : 1) une modification de la distribution en taille attribuable à la fragmentation ou à la coagulation des poussières, ou 2) une modification de l'émissivité des poussières en raison d'une transformation de leur structure ou d'une dépendance de l'émissivité avec la température (Miville-Deschênes et al., 2002; Stepnik et al., 2003; Meny et al., 2007).

1.4.3 Variation des déplétions entre le halo et le disque

En fonction de la vitesse du gaz

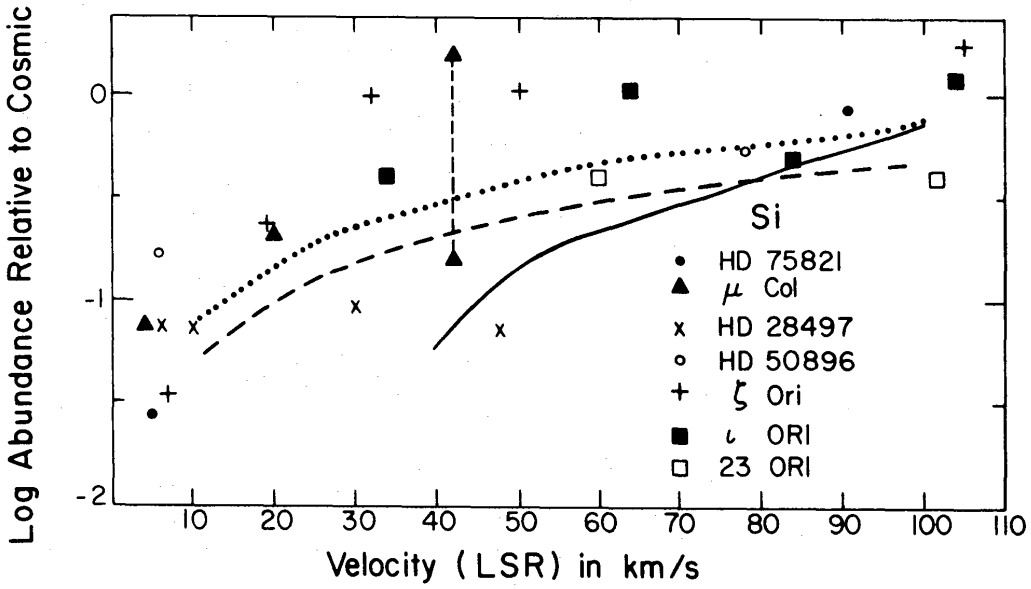


FIGURE 1.10 – Abondance fractionnelle de Si relativement aux abondances solaires dans différents nuages, en fonction de la vitesse de ces nuages mesurée dans le Référentiel Local Standard (Cowie, 1978). Les lignes de visée sont indiquées par des points ; le trait plein présente les résultats du modèle de choc correspondant à la vitesse du nuage avec destruction des grains par érosion et vaporisation ; les pointillés correspondent au même modèle mais pour un choc à plus grande vitesse que celle du nuage, suivi d'une décélération progressive du nuage par friction avec le gaz environnant jusqu'à la vitesse mesurée (*cf.* § 1.3.2).

Les déplétions des éléments chimiques varient fortement en fonction des lignes de visée. Les observations montrent une corrélation entre les abondances en phase gazeuse des éléments réfractaires composant les poussières et la vitesse des nuages sur la ligne de visée mesurée dans le Référentiel Local Standard (Routly & Spitzer, 1952; Cowie, 1978). Certains éléments sont très fortement déplétés dans les nuages à basse vitesse (*cf.* Fig. 1.3), tandis que les abondances sont presque solaires dans les nuages à haute vitesse ($\simeq 100$ km s^{-1}) des restes de la supernova Vela. L'abondance de Si dans les nuages à haute vitesse du groupe d'étoiles

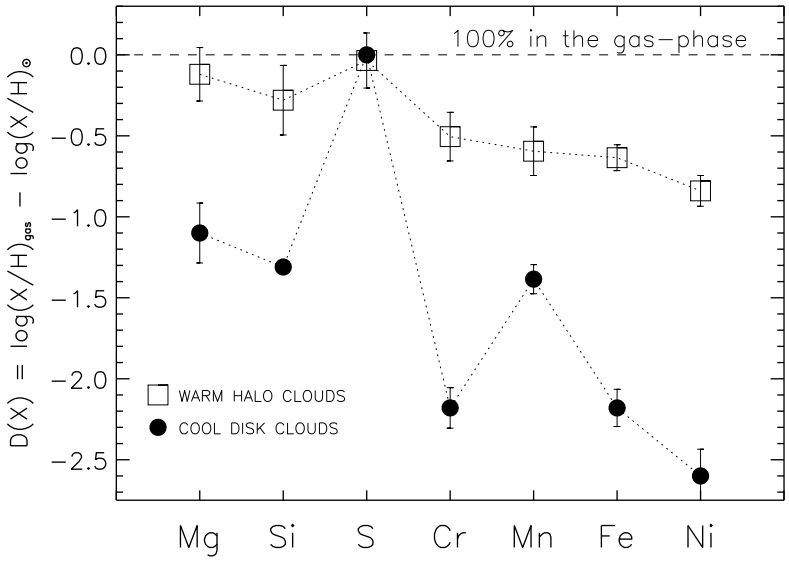


FIGURE 1.11 – Abondances en phase gazeuse des éléments chimiques constituant les poussières le long de lignes de visée traversant des nuages froids du plan galactique (cercles pleins) et les nuages chauds du halo galactique (carrés vides), relativement aux abondances solaires prises pour référence. Extrait de Jones (2000), d'après les données de la figure 1.12 (Savage & Sembach, 1996).

OB d'Orion est même solaire pour des vitesses de 40 - 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, comme montré sur la figure 1.10. Cowie (1978) démontre que cette augmentation du silicium en phase gazeuse peut être interprétée comme le produit de la destruction des grains silicatés dans des chocs interstellaires de vitesse supérieure à $\sim$ 75 $\mathrm{km\,s^{-1}}$.

En fonction de la densité du gaz

Il est également bien établi que la déplétion des éléments chimiques réfractaires est corrélée avec la densité (Spitzer, 1985; Savage & Sembach, 1996). La figure 1.11, qui compare les déplétions moyennes des éléments réfractaires dans les nuages diffus du disque galactique et les nuages ténus du halo, illustre cette dépendance. Les déplétions des éléments réfractaires sont plus faibles dans le milieu inter-nuages tiède que dans les nuages froids. Ces différences s'expliquent également relativement bien par un modèle d'érosion des poussières dans les chocs interstellaires qui traversent régulièrement la phase tiède et ténue du milieu interstellaire (Cowie, 1978; Draine & Salpeter, 1979b,a; McKee et al., 1987; Jones et al., 1994, 1996). La corrélation des déplétions avec la densité est attribuable à la composition statistique des déplétions des phases denses et ténues sur la ligne de visée (Spitzer, 1985).

Composition et structure chimique de la partie la plus réfractaire des poussières

La figure 1.12 (Savage & Sembach, 1996) fournit les mesures d'abondances dans les poussières sur plusieurs lignes de visée, selon deux jeux d'abondances de référence. Sembach

	10^6(X/H)	10^6(X/H)$_d$				10^6(X/H)	10^6(X/H)$_d$			
X	Sun	ζ Oph (core + mantle)[b]	ξ Per (core + mantle)[b]	Halo (core)[c]	(mantle)[d]	B-Star	ζ Oph (core + mantle)[b]	ξ Per (core + mantle)[b]	Halo (core)[c]	(mantle)[d]
O	740	450	440	...	...	470	170	170	...	...
C	360	220	110	...	...	220	89	0.0	...	...
N	93	14	...	...	...	59	0.0	...	...	...
Mg	38	37	36	27	10	24	23	22	12	10
Si	36	34	<34	16	18	23	21	<20	2.9	18
Fe	32	32	32	25	7.0	20	20	20	13	7.0
S	19	0.0	<17	2.0	0.0	12	0.0	<10	0.0	0.0
Ni	1.8	1.8	1.8	1.5	0.3	1.1	1.1	1.1	0.87	0.23
Cr	0.48	0.48	0.48	0.33	0.15	0.30	0.30	0.30	0.15	0.15
Mn	0.34	0.33	0.32	0.26	0.07	0.21	0.20	0.20	0.13	0.07

FIGURE 1.12 – Reproduction de la table 7 de Savage & Sembach (1996). Abondances fractionnelles, exprimées en partie par million relativement à H, mesurées sur les lignes de visée de deux nuages diffus en direction de ζ Oph et ξ Per (b), et moyenne des abondances des nuages du halo (c), pour deux jeux de références, solaire (partie gauche du tableau) et étoile B (partie droite). Dans le modèle de Savage & Sembach (1996), les abondances du halo (c) représentent la composition du cœur des poussières, et la différence entre les abondances moyennes dans les nuages diffus (b) et celles du halo (c) représente la composition du manteau (d) de ces poussières, *indépendante des abondances de référence choisies*.

& Savage (1996) montrent que les abondances fractionnelles de Mg, Si, Fe, Cr, Mn, et Ni sont presque les mêmes dans tous les nuages situés à une distance de 7-10 kpc du centre galactique. Ces poussières contiennent $\sim$ 70 % des abondances solaires de Mg, 45 % de celles de Si et 77 % de celles de Fe (*cf.* Fig. 1.12). Cette uniformité dans un environnement où les poussières sont fortement sujettes à la destruction par les chocs interstellaires suggère selon ces auteurs que les grains du halo révèlent la partie la plus réfractaire des poussières, celle qui résiste le mieux au passage des chocs. Mais selon Fitzpatrick (1996), ces résultats peuvent s'interpréter de deux manières différentes :

1. Soit nous sommes effectivement en présence de cœurs réfractaires très résistants, voire indestructibles vu que presque aucune ligne de visée n'a permis d'observer, même dans des conditions extrêmes, des abondances solaires pour Fe et Mg. Nous serions alors peut-être en présence des authentiques poussières d'étoiles formées dans les géantes rouges riches en oxygène.
2. Soit les abondances de référence solaires surestiment les abondances élémentaires dans les régions observées, et la déplétion mesurée est alors purement artificielle. Sur certaines lignes de visée, tous les grains auraient en fait été détruits.

Dans la première hypothèse, le rapport d'abondance (Mg+Fe)/Si vaut 3,3 pour des abondances solaires de référence ou 8,6 pour des abondances des étoiles B (*cf.* Fig. 1.12). Il vaut 2,0 pour l'olivine et 1,0 pour le pyroxène. Une fraction non négligeable de Mg et Fe se trouverait alors dans une phase non silicatée, sous forme d'oxydes ou de grains métalliques [1].

1. Cette dernière hypothèse est jugée peu probable car les grains de fer métallique sont plus efficacement détruits dans les chocs par érosion inertielle que les poussières moins denses à base de silicates ou d'oxydes

Composition et structure chimique de la partie la moins réfractaire des poussières

Si les poussières des nuages ténus du halo représentent leur partie la plus réfractaire, les poussières des nuages diffus du disque contiennent en supplément une phase moins réfractaire qui est détruite dans les chocs traversant le halo, ou d'un point de vue inverse, formée par accrétion dans les nuages denses du disque. Suivant l'analyse de Jones (2000), il n'est pas indispensable de raisonner en termes de cœur et de manteau car rien dans les observations de déplétion n'indique de manière univoque une telle structure. Les phases plus réfractaires et moins réfractaires peuvent aussi bien former une seule population de grains de type cœur-manteau que deux populations séparées.

Information très importante, la composition chimique de cette phase moins réfractaire des poussières du disque, obtenue en calculant la différence entre les mesures d'abondances dans les nuages du disque et les nuages du halo, est *indépendante des abondances de références choisies* (Savage & Sembach, 1996). Le rapport stœchiométrique (Mg+Fe)/Si de cette phase moins réfractaire vaut 0,94 (*cf.* Fig. 1.12). Cette phase, plus riche en silicium (et également en magnésium, *cf.* Fig. 1.12) que la phase plus réfractaire du halo, a une composition stœchiométrique qui se rapproche du pyroxène, sans que l'on puisse exclure la présence d'oxydes.

Erosion préférentielle du silicium dans les chocs - quel modèle ?

L'évolution des abondances chimiques entre les nuages du halo et les nuages diffus du disque montre que le silicium est plus facilement érodé que le fer, et même que le magnésium (*cf.* Fig. 1.12). Le bilan de destruction des poussières silicatées dans les chocs ne reproduit donc pas la stœchiométrie de leur composition chimique dans les nuages diffus. Si l'érosion est la cause majeure de la destruction des poussières, un modèle mécanique simple prédit que les éléments les plus légers devraient être érodés préférentiellement aux éléments les plus lourds. Ces prédictions sont en accord avec les observations pour tous les éléments déplétés sauf Si qui, plus lourd que Mg, devrait être moins érodé, contrairement à ce qui est observé (Jones, 2000). Un modèle mécanique d'érosion n'est donc pas capable d'expliquer seul les faibles déplétions du silicium observées dans les nuages du halo. L'érosion est-elle également chimiquement sélective (Jones, 2000) ? Une partie du silicium est-t-il présent dans une phase moins réfractaire que les silicates, avec une énergie de liaison de 1-2 eV (au lieu de 5 eV dans les silicates) comme suggéré par Tielens (1998) et confirmé semble-t-il par l'observation de SiO dans une PDR (Walmsley et al., 1999; Schilke et al., 2001) ? Comment alors expliquer l'intensité de la bande d'absorption à 9,7 μm sans la totalité du silicium dans des phases silicatées ?

(Jones et al., 1994, 1996). Cependant, le fer pourrait être protégé s'il est présent sous forme de billes de fer dans les silicates amorphes (Davoisne et al., 2006).

1.4.4 Indicateurs de destruction des poussières dans les flots moléculaires et les jets

SiO, le traceur des chocs

Les ondes de choc modifient la composition chimique du gaz qu'elles traversent en activant des réactions chimiques impossibles ou trop lentes à la température du nuage au repos, et en détruisant les poussières, relargant ainsi en phase gazeuse des éléments chimiques qui en sont normalement très déplétés : Si, Fe, Mg, Ca (C n'est déplété que d'un facteur 2 ou 3 dans les nuages denses). La molécule de SiO est à cet égard exemplaire. Elle est principalement observée dans les flots moléculaires et les jets autour des étoiles en formation, avec une abondance qui vaut $\sim 10^4$ fois son abondance mesurée dans les nuages au repos (Codella et al., 1999). Elle est vraisemblablement formée dans les chocs en phase gazeuse par réaction entre le silicium éjecté par l'érosion des poussières silicatées et les molécules O_2 et OH (Le Picard et al., 2001). Elle peut être observée par ses différentes raies d'émission rotationnelle dans l'infrarouge. Ces réactions de formation entrent en compétition avec une réaction de destruction de SiO par OH pour former SiO_2, molécule symétrique qui ne peut être observée en émission. Dans les chocs autour des flots moléculaires, les abondances de silicium mesurées en phase gazeuse sous forme de SiO représentent quelques pourcents de l'abondance solaire (*e.g.* Martin-Pintado et al., 1992). La mesure de l'émission SiO donne des contraintes sur la vitesse du choc si l'on connait l'effacité de destruction des poussières silicatées dans ces chocs. Une telle étude passe donc nécessairement par la modélisation de l'érosion [1] et de la vaporisation des poussières silicatées dans ces chocs (Schilke et al., 1997; Caselli et al., 1997; Gusdorf et al., 2008a,b).

Evolution des déplétions de Fe, Ca et C dans un jet

Podio et al. (2006) examinent l'évolution des déplétions d'éléments réfractaires dans les jets des objets Herbig-Haro HH34 et HH111 (nébuleuse d'Orion) à mesure que l'on s'éloigne de l'étoile (Fig. 1.13). Ces auteurs observent une érosion sélective des constituants des poussières :

1. une augmentation de l'abondance du calcium en phase gazeuse dans les nœuds du jet jusqu'à une abondance solaire,
2. l'absence de déplétion du carbone (en accord avec d'autres mesures effectuées dans la nébuleuse d'Orion)
3. une déplétion du Fer légèrement inférieure à celle de la nébuleuse d'Orion.

Les vitesses de chocs mesurées dans ces jets sont de l'ordre de 30-40 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Suivant Jones (2000), les auteurs de l'article suggèrent une érosion sélective des grains dans le jet par les ondes de choc (internes) qui s'y propagent.

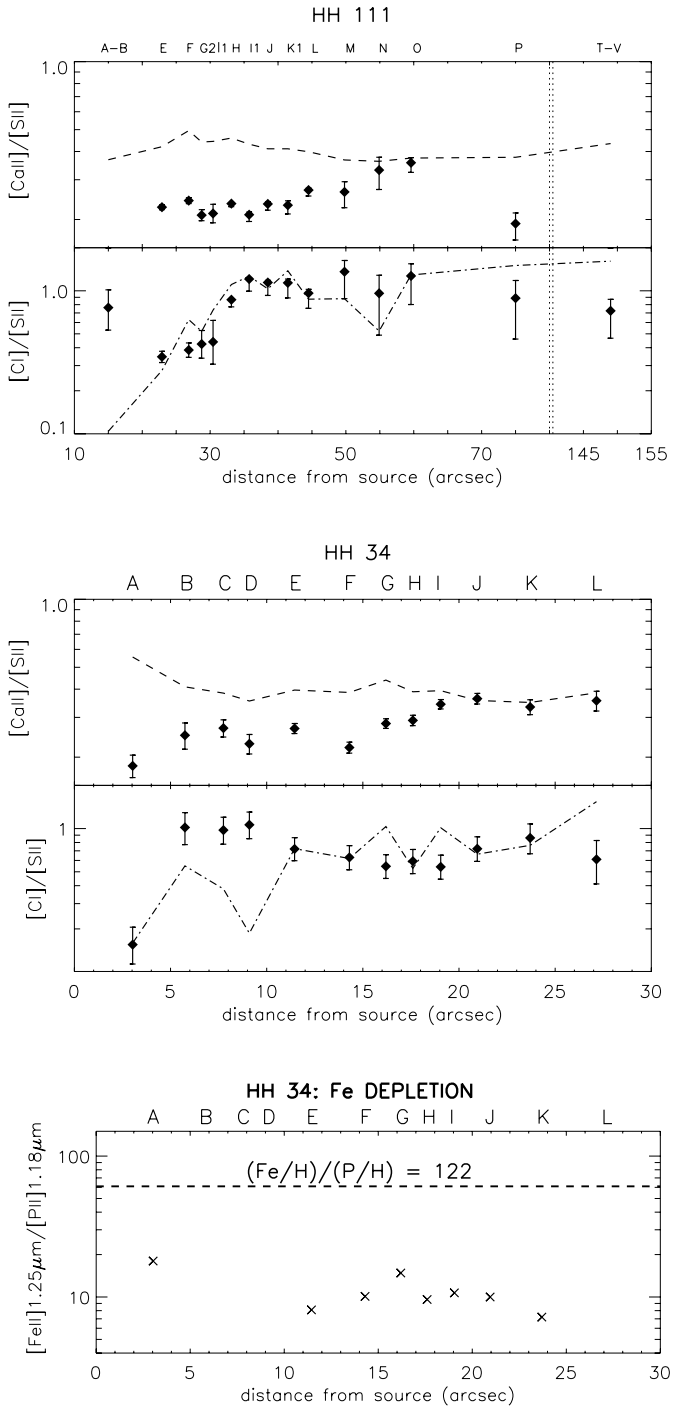


FIGURE 1.13 – Abondances du carbone et du calcium relativement à S II le long des jets de HH 111 (**Haut**) et HH 34 (**Milieu**). (**Bas**) Abondance du fer relativement à P II le long du jet de HH34. Les abondances prédites (lignes) sont comparées aux abondances observées (points). Dans les deux jets, l'abondance de calcium en phase gazeuse augmente progressivement en s'éloignant de l'étoile, jusqu'à devenir approximativement solaire. Le carbone est lui entièrement en phase gazeuse partout dans les jets. La déplétion du fer ne varie pas significativement le long du jet de HH34, mais sa valeur est inférieure à la déplétion dans la nébuleuse d'Orion. Extrait de Podio et al. (2006).

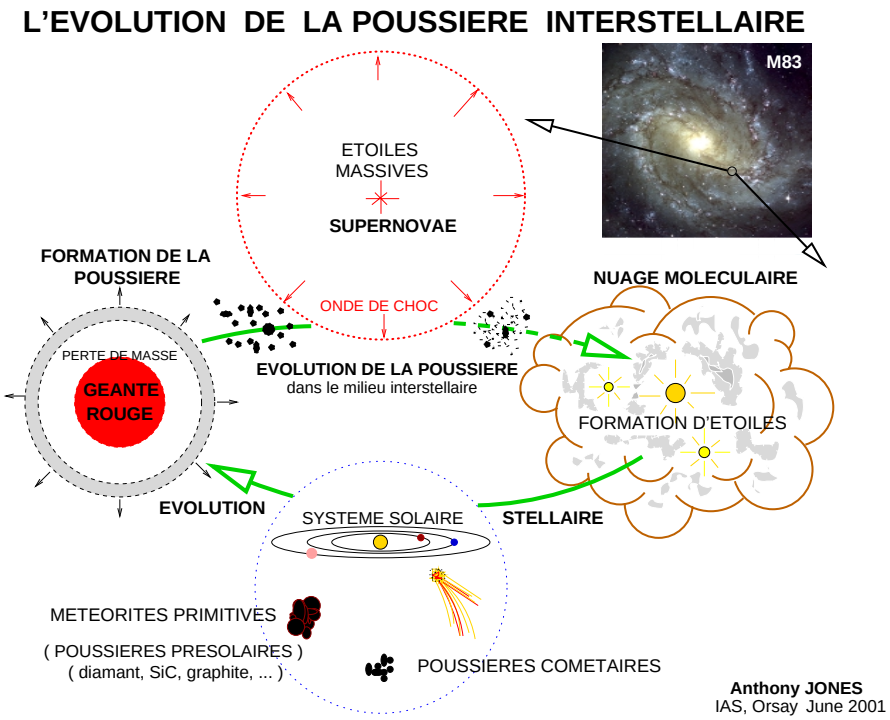


FIGURE 1.14 – Schéma du cycle de vie des poussières (Jones, 2004)

1.5 Cycle de vie des poussières dans la Galaxie

La figure 1.14 présente un schéma du cycle de vie des poussières dans la Galaxie. L'évolution des poussières suit le cycle de vie des étoiles.

1.5.1 Temps caractéristique de formation

La figure 1.15 présente les contributions relatives des différents sites de formation des poussières hors milieu interstellaire. Certaines poussières ont une origine stellaire, produites par la condensation d'une fraction des éléments chimiques les plus réfractaires dans les vents froids des étoiles de type AGB (les poussières d'étoiles proprement dites). Les étoiles riches en carbone produisent principalement des poussières carbonées, celles riches en oxygène des poussières silicatées riches en magnésium, dont 15 % au plus sont sous forme cristalline (*e.g.* Waters, 2004). Des poussières sont également formées dans les supernovæ de type Ia (principales sources de fer dans la Galaxie) et dans les éjecta des supernovæ de type II où elles sont également en partie détruites (Dwek et al., 2008). Le temps caractéristique de formation des poussières est, compte-tenu de ces différentes sources (Jones et al., 1994) :

$$\tau_{\text{formation}} = 3.10^9 \text{ ans}\,. \tag{1.5}$$

1. L'efficacité de l'érosion du silicium dépend du modèle de poussières, plus ou moins réfractaires, choisi pour la phase qui le contient : manteau ou cœur (*cf.* Jiménez-Serra et al., 2005).

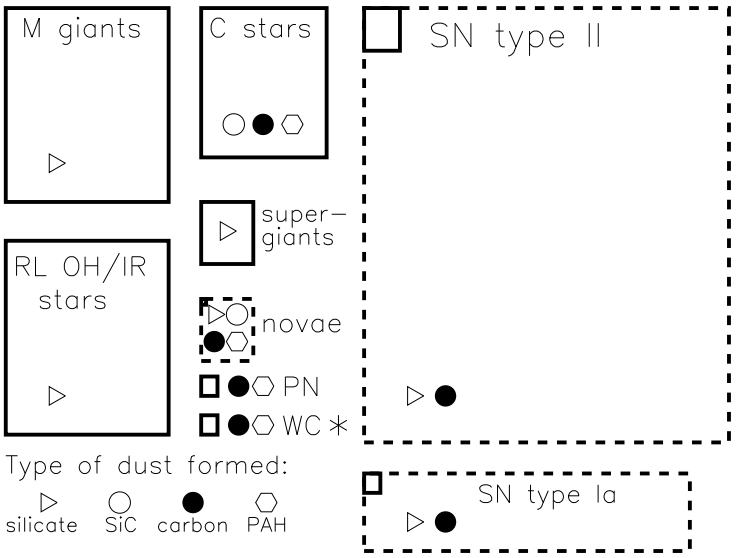


FIGURE 1.15 – Contributions relatives (en surface) des différents sites de formation des poussières, hors formation dans le milieu interstellaire. *C stars* : étoiles à carbone, *PN* : nébuleuse planétaire, *WC* : Wolf-Rayet Carbon rich star, RL OH/IR : étoiles en fin de vie caractérisées par une émission IR et à 18 cm caractéristiques des radicaux hydroxyles OH. Les pointillés indiquent une limite supérieure. Extrait de Jones et al. (1997).

Ces poussières d'étoiles ou de supernovæ se distinguent des poussières formées dans le milieu interstellaire par leurs anomalies isotopiques caractéristiques de leur site de formation. Elles sont injectées dans le milieu interstellaire par les vents stellaires et se mélangent aux poussières formées dans les nuages denses et aux résidus de poussières d'étoiles partiellement détruites ou fragmentées par les chocs interstellaires.

1.5.2 Temps caractéristique de destruction

Le milieu interstellaire est structuré en plusieurs phases à l'équilibre de pression. Dans le modèle de McKee (1989), la phase dense (CNM), qui contient l'essentiel de la masse du milieu interstellaire ($\sim$ 90%) sous forme de nuages diffus et denses, n'occupe qu'une très faible fraction de son volume. La majeure part du milieu interstellaire est occupée par les phases tiède (WIM, $\sim 10^4$ K) ou chaude (HIM, $\sim 5.10^5$ K). Des ondes de choc générées par les explosions de supernovæ traversent régulièrement le milieu inter-nuages en détruisant et fragmentant les poussières. Le temps caractéristique qui s'écoule entre deux chocs consécutifs de vitesse V_s est (Jones et al., 1997)

$$t_{\text{chocs V}_s} = 10^8 \text{ ans} \left(\frac{V_s}{100 \text{ km s}^{-1}} \right)^2 . \tag{1.6}$$

Le temps caractéristique de destruction des poussières, c'est-à-dire le temps qu'il faut pour détruire toutes les poussières de la Galaxie, est de l'ordre de (Jones et al., 1996) :

$$t_{\text{destruction}} = 5.10^8 \text{ ans} , \tag{1.7}$$

dans un modèle où le relargage des éléments chimiques des poussières silicatées suit les proportions stœchiométriques de l'olivine, et où les grains carbonés ont les propriétés du graphite.

Ce temps caractéristique de destruction est en bon accord avec les déplétions du fer et du magnésium dans les nuages du halo, et en moins bon accord avec celles du silicium comme nous l'avons déjà expliqué. Par contre, ce modèle prédit une plus grande destruction des grains silicatés que des grains carbonés (*cf.* Fig. 1.6), ce qui n'est pas observé. Au contraire, de nombreuses observations montrent une abondance solaire du carbone en phase gazeuse avec une forte déplétion du silicium (Welty et al., 2002; Podio et al., 2006; Slavin, 2008). L'intérêt d'un modèle graphitique pour les grains carbonés est vraisemblablement à reconsidérer.

1.5.3 Nécessité d'une formation dans la phase dense

Comment former des poussières dans le milieu interstellaire ?

Le temps caractéristique de destruction des poussières ($\sim 5.10^8$ ans) est inférieur d'un ordre de grandeur au temps caractéristique de formation des poussières ($\sim 3.10^9$ ans). Il est donc indispensable [1] d'invoquer une formation des poussières dans le milieu interstellaire pour expliquer l'abondance observée des poussières dans la Galaxie (Jones et al., 1996; Tielens, 1998; Dwek, 1998; Zhukovska et al., 2008).

Les conditions physiques du milieu interstellaire ne permettent pas de création de nouvelles poussières, c'est-à-dire de nucléation. Cependant, la phase froide du milieu interstellaire est probablement le lieu où les fragments de poussières qui ont survécu à leur passage dans la phase tiède peuvent croître le plus rapidement par coagulation et accrétion sur des cœurs déjà formés. C'est en effet une phase dense, mieux protégée que les autres des rayonnements stellaires (qui photodésorbent les manteaux glacés) et des chocs de supernovæ qui détruisent les manteaux réfractaires ou organiques (McKee, 1989).

Le temps caractéristique de formation des poussières par accrétion (Eq. (1.3)) ne semble pas être un obstacle à la formation des poussières dans cette phase froide. Dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, il est inférieur à la durée de vie du nuage qui est de l'ordre de quelques millions d'années, ce qui autorise une formation des poussières par accrétion à cette densité. Il est également bien inférieur au temps caractéristique de formation des poussières hors milieu interstellaire. La composition des poussières dans les milieux denses doit donc refléter leur histoire récente (destruction dans la phase tiède et ténue et accrétion dans la phase froide et dense), et conserver peu de traces de leur site de formation (Tielens, 1998; Jones, 2000; Zhukovska et al., 2008).

Neanmoins, la composition chimique des poussières ainsi formées reste un point d'interrogation. Comme cette accrétion doit se faire hors-équilibre, on devrait s'attendre à une structure amorphe [2] des poussières, ce qui est effectivement observé, mais également inhomo-

1. Ce problème est encore accentué avec les rendements d'érosion proposés par Jurac et al. (1998), qui ont été déterminés par simulation Monte Carlo TRIM, sans l'hypothèse habituelle *a priori* (Draine & Salpeter, 1979b; Tielens et al., 1994) de dépendance en $1/\cos\theta$ du rendement d'érosion avec l'angle d'incidence de la particule sur la surface du grain.

2. Les silicates du milieu interstellaire étant amorphes, on ne voit pas pourquoi les grains carbonés ne le seraient pas également. Le graphite est-il alors un bon modèle pour les grains carbonés du milieu interstellaire ?

gène, ce qui ne semble pas être le cas (Jones, 2005). A moins de faire appel à des processus chimiquement sélectifs d'accrétion ou d'érosion (Draine, 1990; Jones, 2000), ce schéma général s'avère également incapable d'expliquer qualitativement l'existence de deux populations séparées de grains silicatés et de grains carbonés que semblent privilégier de nombreux modèles. Autre obstacle à la formation des cœurs dans le milieu dense : comment les manteaux de silicate riches en magnésium pourraient-ils se former dans des milieux ou l'on observe des glaces, alors que le tétraèdre SiO_4 exige des températures supérieures à celles qui conditionnent la condensation des glaces (Zhukovska et al., 2008) ?

Comment former efficacement des gros grains ?

La nécessité d'accréter les éléments réfractaires sur les grains existants se double, suivant les résultats de Jones et al. (1996), d'un impératif de reformation des gros grains qui doivent avoir totalement disparu de la phase tiède par fragmentation dans les chocs. Si la coagulation peut expliquer qualitativement la croissance des grains, le temps caractéristique de coagulation des poussières (Eq. (1.4)), basé sur un modèle collisionnel purement géométrique, semble imposer des densités relativement élevées, alors que des gros grains sont déjà observés dans le milieu diffus. Les modèles de coagulation peinent à expliquer le taux de croissance observé, que ce soit entre les phases diffuses et denses du milieu interstellaire ou dans les disques d'accrétion (Brauer et al., 2007). Il semble donc nécessaire de revoir le détail des processus physico-chimiques de coagulation afin d'expliquer l'existence de gros grains, notamment dans le milieu diffus.

1.6 Ecole des Houches sur les poussières interstellaires

Du 1er au 5 Mai 2006 s'est tenue aux Houches une école sur les poussières interstellaires. Les organisateurs de cette semaine m'ont demandé de faire une présentation d'une heure sur la dynamique et le traitement des poussières dans les chocs interstellaires. C'était une occasion formidable de faire connaître mon travail et je leur en suis très reconnaissant.

1.6.1 Résumé de la présentation

Je commençai mon exposé par une courte présentation des différents traitements susceptibles de modifier le rapport de masse entre gaz et poussières (érosion, vaporisation) ou la distribution en taille (fragmentation, coagulation). Je présentai ensuite comment l'étude de la destruction des poussières dans les chocs interstellaires se propageant dans la phase tiède du milieu interstellaire (WIM) conduisait à émettre l'hypothèse d'une reformation des poussières dans le milieu interstellaire à partir des éléments réfractaires en phase gazeuse : le temps caractéristique de destruction des poussières de toute la Galaxie est en effet de 5.10^8 années (Jones et al., 1994, 1996), tandis que le temps caractéristique de formation des poussières est de $2,5.10^9$ années (Jones et al., 1994; Dwek, 1998). Par ailleurs, ces mêmes chocs sont responsables d'après Jones et al. (1996) de la disparition de tous les grains de taille supérieure à 500 Å. Comme ces derniers sont observés partout dans le milieu interstellaire, ils doivent être reformés, vraisemblablement par coagulation de grains plus petits et accrétion de manteaux réfractaires et de glaces dans les nuages denses.

Dans une seconde partie, je présentai en détail l'étude de la dynamique et du traitement des grains dans les chocs transverses à précurseur radiatif se propageant dans la phase tiède du milieu interstellaire (McKee et al., 1987; Jones et al., 1994, 1996). Dans ces chocs, les grains sont injectés relativement au gaz aux 3/4 de la vitesse du choc. Etant chargés, ils tournent autour des lignes de champ. Les gros grains sont notablement accélérés par l'effet bétatron induit par la compression du gaz lors de son refroidissement, ce qui augmente l'intensité de leur traitement. Tous les grains sont progressivement ramenés au repos par la friction du gaz, sur un temps caractéristique qui est approximativement proportionnel à leur rayon. La distribution en taille des grains est très affectée par le choc : tous les grains de plus de 500 Å ont diparu de la distribution pour un choc de 100 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, créant par là-même une grande abondance de très petits grains. Je montrai ensuite comment une étude plus précise de la dynamique individuelle 2-D des gros grains à travers ces mêmes chocs laissait entrevoir une possibilité pour les plus gros grains de survivre à la traversée de certains de ces chocs (Slavin et al., 2004). Cette même étude mettait en évidence la variété des trajectoires des grains et l'extrême sensibilité de ces trajectoires à l'évolution de la charge et du rayon du grain.

La troisième partie de l'exposé était consacrée à mon travail de thèse. Je présentai les profils des deux principaux types de chocs transverses, J et C, susceptibles de se propager dans les nuages denses. Pour exister dans les milieux denses, les chocs C doivent en premier lieu avoir une vitesse inférieure à la vitesse magnétosonique dans le fluide chargé. Cette vitesse critique dépend fortement de l'intensité du champ magnétique transverse que l'on se donne. Le couplage des poussières avec le champ magnétique dans les chocs C est défini par le facteur de Hall, rapport des temps caractéristiques de freinage et de giration du grain. Les petits grains sont très bien couplés au champ magnétique, tandis que les gros grains tendent à se découpler du champ magnétique dans les chocs C à haute densité. Je présentai ensuite des profils caractéristiques de la charge, de la vitesse et de la trajectoire des grains dans un choc C, en insistant sur le découplage des gros grains perpendiculairement à la direction de propagation du choc (*cf.* Fig. 9 de cet article). Ce découplage différentiel est induit par la friction du gaz [1] et perdure jusque dans la queue du choc. Il est potentiellement favorable à la coagulation des grains. Je montrai ensuite qu'un choc de 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ (vitesse critique $\simeq$ 21 $\mathrm{km\,s^{-1}}$) se propageant dans un nuage moléculaire ($n_{\mathrm{H}} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$) a peu d'effet sur la distribution en taille des poussières (*cf.* Fig. 11 de l'article). Il est également trop lent pour détruire les poussières, que ce soit par érosion ou par vaporisation.

Dans la dernière partie de l'exposé, je montrai comment les fluctuations permanentes de la charge des très petits grains ont un effet important sur leur dynamique dans les chocs C. Les très petits grains sont produits par la fragmentation des gros grains dans le choc. Une fraction non négligeable de ces petits grains est neutre, même dans la partie chaude du choc (Fig. 12). La dynamique de ces très petits grains dans un choc C est de nature stochastique (Fig. 13) : ils sont fortement couplés au champ magnétique quand ils sont chargés, et se couplent rapidement au gaz neutre dès qu'ils sont neutralisés, d'autant plus rapidement qu'ils sont petits. Je montrai comment la présence de ces nombreux très petits grains couplés au gaz dans tout le choc C pourrait cratériser les plus gros grains couplés au champ magnétique dans la partie du choc où la diffusion ambipolaire est importante, puis se

1. C'est la *dérive de friction* définie au chapitre 7.

coller sur les grains dans la queue du choc. J'évoquai également la possible irruption d'une pénurie d'électrons libres dans le choc, induite par la grande abondance des petits grains chargés. Cette pénurie tendrait à découpler les gros grains du champ magnétique et donc à relancer la fragmentation bien après la fin de la phase de giration des grains. L'influence de ces effets sur le traitement des grains dans les chocs C a été étudiée par la suite (*cf.* chapitres 10 et 11).

Je concluai sur l'importance d'une étude détaillée de la charge et de la dynamique individuelle des grains dans la modélisation de l'intensité du traitement des poussières dans les chocs, ainsi que sur les possibilités de reformation des gros grains par coagulation dans les chocs C. L'article des Proceedings, à paraître chez EDP Sciences, est reproduit ci-après. J'ai eu l'occasion de présenter deux fois cette conférence, au CfA de Harvard (Cambridge, USA) et à l'Observatoire d'Astrophysique d'Arcetri (Florence).

Interstellar Dust from Astronomical Observations to Fundamental Studies
Editors : will be inserted later
EAS Publications Series, Vol. ?, 2008

DUST DYNAMICS AND PROCESSING IN SHOCKS

Vincent Guillet[1], Anthony Jones[1] and Guillaume Pineau des Forêts[1]

Abstract. The processing of dust in shocks in the interstellar medium can lead to changes in the dust to gas mass ratio and also to a radical evolution of the dust size distribution. Here we focus on the important results of numerical models that simulate the impact of shocks on the interstellar dust size distribution in molecular clouds and in the warm intercloud medium. We emphasize the necessity of detailed modelling of the grain charging processes and the grain inertia in order to unravel the complexities and consequences of the dust dynamics in shock waves.

1 Introduction

As inferred from variations in the extinction curve and elemental depletions observed along various lines of sight through the interstellar medium (ISM) (*e.g.* Savage & Sembach 1996), the dust abundance and size distribution is not homogeneous throughout the Galaxy. The spatial variations, considered as a whole, can be seen as a consequence of the processing that dust undergoes in the different astrophysical environments that it encounters throughout its life cycle (*e.g.* see the contributions of E. Dwek, J. Blum and A. Jones in these proceedings). Interstellar shocks (see, for example, Draine & McKee 1993 for a review of this subject) are one important, and particularly violent, example of the astrophysical environments where dust destruction and disruption can occur (Routly & Spitzer 1952; Cowie 1978). Shocks are expected to form in the ISM when very energetic winds such as supernova explosions or jet emission from young stellar objects encounter and interact with the ambient ISM. The study of dust destruction and processing in shocks has a long history (*e.g.* Oort & van de Hulst 1946; Barlow 1978; Draine & Salpeter 1979a, 1979b; Dwek & Scalo 1980; Jones *et al.* 1994), but the impact of shocks on the dust size distribution has only rather recently been investigated (Borkowski & Dwek 1995; Jones, Tielens & Hollenbach 1996; Slavin, Jones & Tielens 2004). Here we present the results of some numerical models that are able to predict the outcome of the impact of shocks on the interstellar dust size distribution. In this contribution we particularly emphasize the importance of the effects of grain charge and grain inertia in the modelling of the dust dynamics.

[1] Institut d'Astrophysique Spatiale, Université Paris XI, Bâtiment 121/CNRS, 91405 Orsay Cedex, France

© EDP Sciences 2008
DOI: (will be inserted later)

2 An overview of dust processing in the ISM

Throughout their journey through the ISM dust grains are subject to a variety of processes that can affect both the dust to gas mass ratio and the dust size distribution.

2.1 Processes affecting the dust to gas mass ratio

Accretion. The accretion of gas phase species onto grain surfaces leads to a net increase in the dust to gas mass ratio. The adsorption and sticking of atomic, ionic, radical and molecular species (possibly with the exception of the lightest species H, H_2 and He) progressively increases the grains radius. This can occur at dust temperatures as high as 1000 K for the refractory elements (*e.g.* Mg, Si, Fe ...) but only at temperatures below ≈ 100 K for species that lead to icy mantle formation. The process of adsorption is counterbalanced by several desorption processes, such as photodesorption, cosmic ray induced desorption, and photevaporation. To a first approximation, and because the rate of adsorption onto a grain is proportional to the grain cross-section, the thickness of an accreted mantle is independent of the grain radius, leading to a disappearance of the the smallest grains.

Sputtering. In energetic environments the high velocity collisions of ions and atoms with grains can lead to the ejection of species from the grain surfaces, eroding the grain and releasing the elemental components of the dust into the gas phase. These collisions can arise from the thermal motion of the gas (thermal sputtering) and from a relative motion of the grains with respect to the gas (non-thermal or inertial sputtering) (Barlow 1978; Cowie 1978).

Thermal sputtering is only important for gas temperatures greater than 10^5 K and is dominated by collisions with the most abundant elements in the gas phase, H and He (Draine & Salpeter 1979a,b). Being the counterpart to accretion, thermal sputtering removes a layer of equal thickness from all grains, independent of radius. As a consequence, it leads to the preferential destruction of the smaller grains and a less drastic erosion of the larger grains.

Inertial sputtering is effective for hydrogen/proton impact velocities greater than $\simeq$ 30-40 km s^{-1} (*e.g.* Tielens *et al.* 1994). Unlike thermal sputtering, inertial sputtering at lower velocities might be dominated by collisions with the heavy atoms/ions in the gas (Field *et al.* 1997, see Figures 6 and 7 therein). As grains of different sizes do not follow the same dynamics, the effects of inertial sputtering on the grains are size-dependent. A study of the dust dynamics is therefore crucial to the modelling of dust destruction by non-thermal sputtering.

Vaporisation. For impact velocities greater than $\simeq 20$ km s^{-1} (Tielens *et al.* 1994, see Table 1 therein) the partial or complete vaporisation of the colliding grains can occur, releasing the constituent dust atoms into the gas.

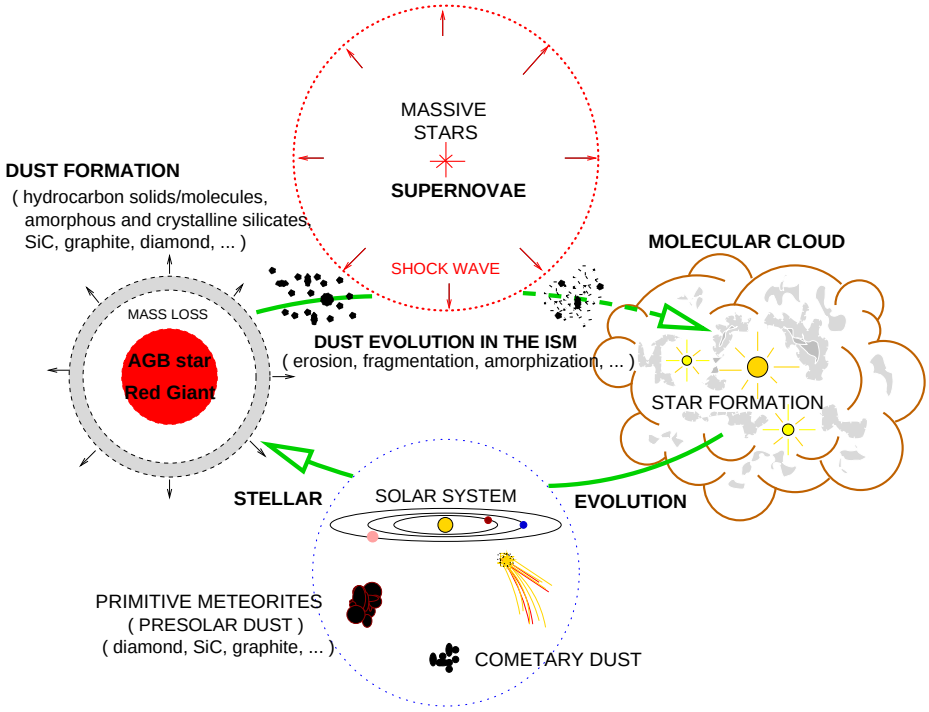


Fig. 1. A schematic view of the dust life cycle. [Reproduced from Jones (2004) with kind permission.]

2.2 Processes conserving the dust to gas mass ratio

Shattering Collisions between grains at velocities higher than a critical velocity of a few km s^{-1} can also fragment grains. This shattering does not affect the overall dust to gas mass ratio but rather redistributes the dust mass towards smaller grain sizes. Depending on the relative velocity between the two grains, their relative sizes and their physical properties, these collisions can pulverize one or both of the grains, fragment part of them or craterize the surface of the bigger of the two (Borkowski & Dwek 1995; Jones *et al.* 1996).

Coagulation Below a relative velocity, which is dependent on the grain composition and radius, grains can stick together (Chokshi, Tielens & Hollenbach 1993; Poppe & Blum 1997). The critical velocity is of the order of 1 m s^{-1} (μm-sized grains) to 1 km s^{-1} ($\simeq$ 100Å-sized grains) and is enhanced by the presence of icy mantles which tend to increase the contact surface and interaction time for the collision. Coagulation conserves the total dust mass but generally redistributes the dust size distribution towards larger grains. See J. Blum's contribution in these proceedings for a detailed discussion of both the theoretical and experimental aspects of dust coagulation.

2.3 Dust formation and destruction in the ISM

In the three-phase model of the ISM (McKee & Ostriker 1977) the ISM is assumed to consist of: a dense, cold and neutral phase (Cold Neutral Medium, CNM) containing most

of the mass within a small volume; a warm tenuous phase (Warm Ionised or Intercloud Medium, WIM) containing a smaller fraction of the mass but probably occupying about one third of the volume; and a very hot and extremely tenuous phase (Hot Intercloud Medium, HIM, also called coronal gas because of its very high temperature) occupying most of the volume but containing very little mass. This ISM structure is assumed to be regulated by supernova explosions in the three-phase model.

The life cycle of dust in and through the different phases of the ISM is closely associated with the life cycle of the stars (see Fig. 1). Dust is mainly produced in the circumstellar shells and cool winds associated with late-type stars such as red giant branch and asymptotic giant branch (RGB and AGB) stars (see the contribution of H.P. Gail in these proceedings). This newly-formed dust (stardust) is injected into the ISM by rather benign stellar winds. Once in the ISM it undergoes strong processing in supernova shock waves. In time, some unprocessed stardust grains, fragments of these grains, and interstellar dust will be incorporated into molecular clouds where some of it will be destroyed by incorporation into new-born stars or will be integrated into planets, meteorites and comets. Besides being responsible for major dust destruction in supernova shocks, supernovæ could significantly contribute new dust via dust formation in supernova ejecta (*e.g.* Dwek 1998). Considering all of the possible sources, the dust formation time-scale, *i.e.* the time-scale necessary to re-form the galactic dust mass, is estimated to be of the order of 2.5×10^9 years (Jones & Tielens 1994; Dwek 1998).

McKee (1989) concludes that dust destruction is probably not important in molecular clouds because their low filling factor means that they are only weakly impacted by high-velocity shocks. In the coronal gas (HIM) supernova shock waves also can not effectively destroy dust because the collision rates between the tenuous gas and the grains are small in this very low-density environment ($\sim 10^{-3}\,\mathrm{cm}^{-3}$). Dust destruction therefore primarily occurs in the WIM and is dominated by sputtering processes. Vaporisation is probably only responsible for the destruction of less than 1% of the dust in a supernova shock wave (Jones *et al.* 1994, 1996). Dust cannot be preserved by hiding it in molecular clouds because they are photo-evaporated and photo-dissociated by supernovæ and the radiation and stellar winds from massive stars on short time-scales (some few $\times 10^7$ years, McKee 1989). The dust destruction time-scale, *i.e.* the time-scale necessary for supernova-generated shocks to destroy the entire galactic dust mass, is of the order of 5×10^8 years (Jones *et al.* 1994, 1996) This time-scale is almost an order of magnitude shorter than the dust formation time-scale (2.5×10^9 years, see above). As a logical consequence of these estimated time-scales, dust must somehow be reformed in the ISM itself. The mechanisms by which dust can actually be re-formed in ISM environments remains, to date at least, rather unclear and will not be discussed further here (*e.g.* see Draine 1990).

2.4 The dust size re-distribution

Regional variations in the extinction curve observed in the Galaxy have been attributed to the evolution of the dust size distribution within the ISM. A high ratio of the visual extinction to the differential extinction, *i.e.* $A_\mathrm{V}/E(\mathrm{B}-\mathrm{V}) = R_\mathrm{V}$, as found in translucent or denser diffuse clouds, is interpreted as evidence for a reduced abundance of very small grains ($a \leq 100\,\text{Å}$) in the dust size distribution along the line of sight, presumably caused

by the coagulation of these small grains onto the larger grains (Cardelli, Clayton & Mathis 1989). Lower R_V values, as observed in some diffuse clouds, point to the presence of abundant very small grains, possibly the product of the shattering of larger grains in interstellar shocks.

Interstellar shocks are among the most likely astrophysical events that could explain this evolution of the dust size distribution. The modelling of dust shattering in grain-grain collisions in interstellar shocks (Jones *et al.* 1996) predicts the complete disruption of large grains in fast shocks propagating through the WIM. The larger grains of the MRN size distribution (Mathis, Rumpl & Nordsieck 1977) with grain radii $1000\,\text{Å} \leq a \leq 2500\,\text{Å}$ should be shatterred into fragments smaller than $\approx 500\,\text{Å}$ by shocks faster than $50\,\text{km s}^{-1}$. These results raise two questions:
Firstly, because such large grains are observed in the ISM (see B.T. Draine's contribution in these proceedings) they must somehow be re-formed in the ISM. This can not be achieved by accretion processes alone because the abundance of the condensible elements in the gas phase is not high enough to form large grains by mantle accretion onto any pre-existing small grains. Rather, larger grains must be re-formed by the coagulation of small grains into large grains. In the astrophysical context, dense molecular clouds are good candidate sites for large grain re-formation by coagulation because grain-grain collisions are favoured by the high densities. We will later present an initial approach to the possibilities of grain-grain coagulation offered by shocks in molecular clouds.
Secondly, very large SiC and graphite grains have been recovered from carbonaceous chondritic meteorites (with 95% of the grain mass being in the $0.3 - 3\,\mu$m radius range). Their composition, structure and isotopic compositions point to a non-solar origin and indicate that they represent a population of grains different in composition from the typically much smaller interstellar grains ($10\,\text{Å} \leq\ a\ \leq 2500\,\text{Å}$). The non-solar isotopic compositions of the large meteoritic grains fits well with the predictions of models for the grains formed around evolved stars (*e.g.* RGB, AGB or Wolf-Rayet stars) and with the various characteristic nuclear processes that occur in these stars. The detailed structural and isotopic analysis of these grains indicates that they were little processed in the ISM before being incorporated into the Solar System. See Anders & Zinner (1993) for a review of the pre-solar grains in meteorites and C. Alexander's contribution in these proceedings for a more up-to-date view. Although the pre-solar grains isolated from meteorites are not representative of the interstellar grain population, they must have traversed the ISM and, in some way, have escaped destruction and re-processing there.

3 Dust dynamics and processing in interstellar shocks in the WIM

Violent events such as supernova explosions, cloud-cloud collisions or jets and bipolar outflows from young stellar objects generate interstellar shocks: the supersonic propagation of pressure perturbations that accelerate, compress and heat the gas that they interact with.

After a time-scale of the order of the time necessary for the gas to travel across the shock, a shock can attain a steady-state structure (Chièze, Pineau des Forêts & Flower 1998). A steady-state shock can perhaps best be described in the reference frame where the shock front remains at rest. In this reference frame it is not the shock front that is

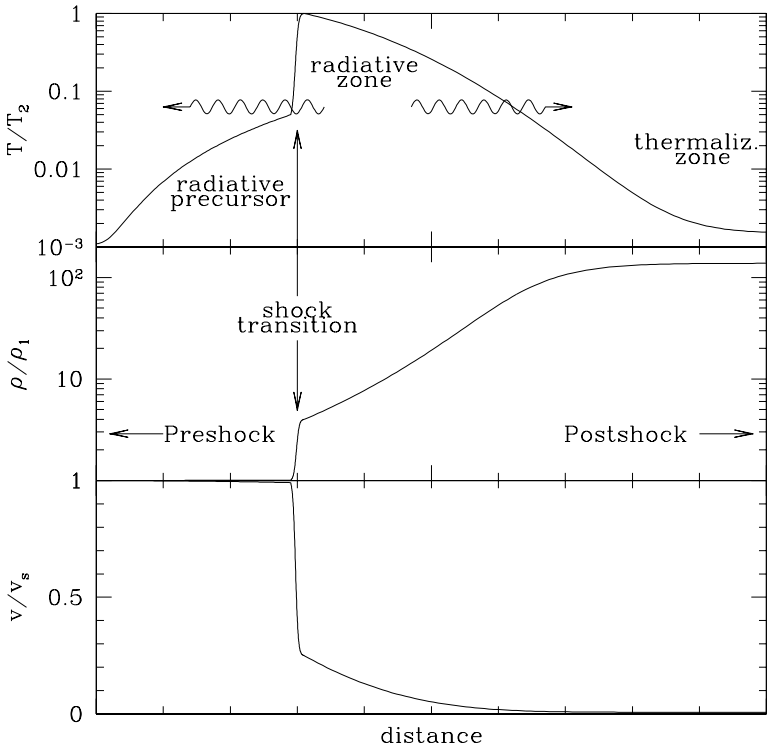


Fig. 2. Schematic profile of a steady-state, radiative J shock in the shock frame of reference. In this reference frame, the gas ahead of the shock front (the "pre-shock" gas) arrives at high velocity from the left, crosses the shock front where it is slowed down (bottom), compressed (middle) and heated (top). The subscripts 1 and 2 indicate the pre-shock and immediate post-shock values, respectively, and v_s is the shock velocity. [Reproduced from Draine & McKee (1993) with kind permission.]

propagating through the gas, accelerating it, but rather the gas that is impinging at high velocity onto the shock front and then being slowed down as it crosses the shock front.

3.1 The structure of J shocks in the WIM

In the case of a strong, purely hydrodynamical shock the variables characterizing the gas (*e.g.* density, temperature and velocity) experience a discontinuity at the shock front, there the gas is compressed by a factor of 4 and its velocity in the frame of reference of the shock is reduced by the same factor. The conservation of energy also implies that the gas temperature behind the shock must increase significantly with respect to the pre-shock gas.

Interstellar shocks differ from purely hydrodynamical shocks in many respects, principally because the effects of radiative emission, magnetic field and chemistry can not be ignored. In the WIM the magnetic field is rather low, of the order of a few micro-Gauss (μG). Fig. 2 (taken from Draine & McKee 1993) presents a schematic view of the structure of a steady-state, radiative shock in the frame of reference of the shock. This kind of shock is called a J shock, where J stands for "jump", because the variables undergo

a discontinuity at the shock front. The post-shock gas, initially raised to high temperature after crossing the shock front, cools down by radiative emission. That radiative energy emitted in the direction of the gas ahead of the shock forms a radiative precursor which heats and ionises the pre-shock gas. As the post-shock gas cools down, it is further compressed leading to an increase in the magnetic field that is proportional to the gas density. The post-shock gas density will be limited by the magnetic pressure (see also the evolution of the gas density in Fig. 3).

3.2 Some elements of grains dynamics

Dust grains, representing about 1% of the mass of the gas, undergo major processing in J shocks in the WIM. The gas temperature profile in the hot, post-shock gas determines dust destruction by thermal sputtering but, as we shall see, grain dynamics is probably the major element in determining the level of dust processing in a shock.

Dust grains have greater inertia than the gas and cross the shock front without being slowed down. They are therefore launched into the post-shock gas with a high velocity with respect to the gas. This velocity difference is 3/4 of the shock velocity for a strong shock. The ubiquitous presence of magnetic fields means that grain charge must be carefully taken into account in order to determine the details of the grain dynamics in shocks. In the post-shock gas grain charge can be modelled by a competition between the different processes: electron and ion attachment, recombination on grain surfaces (charge transfer between grains and ions/atoms/molecules), photo-electric emission by background photons or energetic photons emitted by the shock itself, and secondary electron emission due to collisions with energetic electrons or ions. In the McKee et al. (1987) grain charge model, considered here and which includes all of the above-mentioned processes, grain charge is proportional to the grain radius.

If we limit our study to the case of transverse shocks, where the magnetic field lines remain perpendicular to the shock propagation direction, a dust grain follows a trajectory in a plane perpendicular to the magnetic field. We assume that the gyration radius of the grain is small compared to the shock length and all other typical length-scales characterizing the shock (*e.g.* variations in temperature, density and ionisation). We also assume that the grain guiding centre, *i.e.* the instantaneous gyration centre, is at rest with respect to the gas and follows the dynamics of the ions. With these simplifications the two-dimensional trajectory of a grain is reduced to a one-dimensional calculation of the evolution of the gyration velocity through the post-shock gas. The grain velocity then depends upon the competition between the two main forces that act upon the grain:

Gas drag; progressively damps grain gyration: $F_{drag} \propto \rho_g V_{gyr}^2 a^2$ (where ρ_g is the gas mass density, V_{gyr} the gyration velocity of a grain of radius a). The effect of gas drag, where $(F_{drag}/m) \propto a^{-1}$, is thus more pronounced for smaller grains.

Magnetic force; responsible for the betatron acceleration of the grain gyration in a magnetic field gradient (Spitzer 1976). When there is no drag the gyration velocity follows $V_{gyr} \propto \sqrt{B}$, implying that betatron acceleration can only increase a gyration velocity that already exists.

The plasma drag due to Coulomb scattering (McKee *et al.* 1987, Eq. 3.10) also affects the dust dynamics but is only effective at low gyration velocities and thus does not have

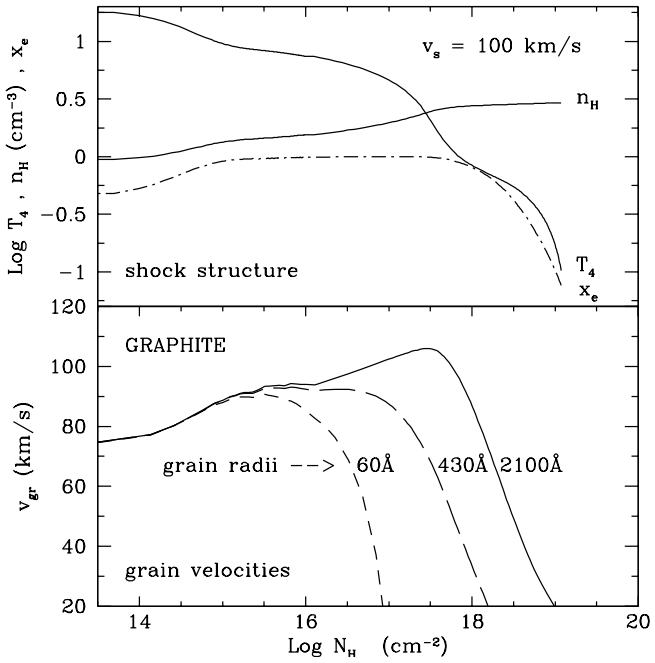


Fig. 3. Top: Shock profile (temperature $\mathrm{T}_4 = \mathrm{T}/(10^4\,\mathrm{K})$, proton density n_H and electron fraction x_e) as a function of the column density, N_H, for a 100 km s^{-1}, radiative, J shock propagating in the WIM ($\mathrm{n_{H,0}} = 0.25\,\mathrm{cm}^{-3}$, $\mathrm{B}_0 = 3\,\mu\mathrm{G}$). To convert column density to time : $\log t(\mathrm{yr}) = log N_\mathrm{H}(\mathrm{cm}^{-2}) - 13.9$. Bottom: Profile of the grain gyration velocity in the reference frame of the post-shock gas rather than in the shock reference frame. [Reproduced from Jones *et al.* (1996) with kind permission.]

much impact on the overall grain dynamics.

3.3 Evolution of the grain gyration velocity through a J shock

Fig. 3 presents the profile of a 100 km s^{-1}, radiative, J shock propagating through a pre-shock gas characterized by a density of 0.25 cm^{-3} and a magnetic field intensity of 3 μG. The corresponding gyration velocity profile for three grains of different sizes is also presented, note that the gyration velocities are here in the rest-frame of the post-shock gas and not the shock reference frame. In the post-shock rest-frame, grains enter the post-shock gas at 3/4 of the shock velocity. In the immediate post-shock the betatron acceleration acts on all grains in the same way. As expected, the smallest grains are the first to be damped by gas drag. Note that the large grains undergo a strong betatron acceleration in the shock tail where the small grains have velocities that are too low to be further accelerated by the betatron effect. It is the gyration of the grains that leads to grain-grain collisions and dust processing via shattering and vaporisation.

3.4 The impact of grain dynamics on grain processing

The grain gyration in the post-shock medium, resulting from the influence of the magnetic field, is clearly responsible for grain-grain collisions at high velocities. The influence of

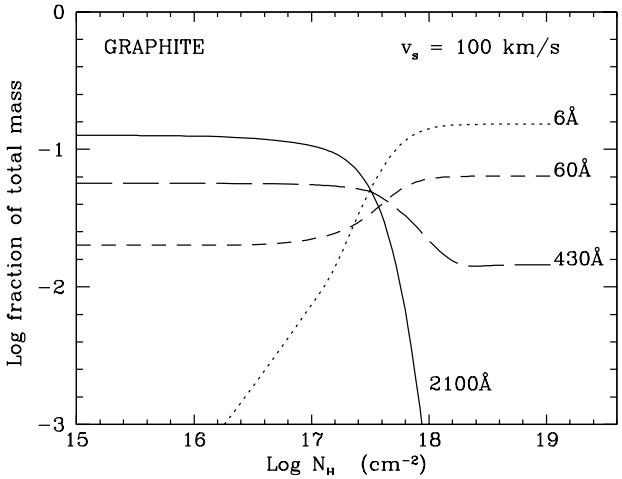


Fig. 4. Evolution of the dust mass in the given size bins (as a fraction of the total dust mass) through the 100 km s^{-1} J shock shown in Fig. 3. The dust size distribution in the pre-shock gas was taken to be an MRN distribution with radii ranging from 50Å to 2500Å. [Taken from Jones *et al.* (1996) with kind permission.]

the magnetic field is indeed critical because an increased pre-shock, and hence post-shock, magnetic field results in the guiding centres of the grains moving at lower velocities. This forces the grains to spend more time in the destructive part of a shock, the residence time increasing with the pre-shock magnetic field, and results in increased dust processing compared to shocks with a weaker or no magnetic field (Spitzer 1976).

Fig. 4 shows the results of a study of the impact of shattering on the dust size distribution in a 100 km s^{-1}, radiative, J shock. A pre-shock MRN dust size distribution was assumed, with the dust mass gathered into bins representing grains with well-defined radii covering the entire dust size spectrum. All the grains in a given bin are assumed to be identical to a reference grain whose properties (radius, cross-section, mass) evolve coherently with the processing of the grains in all the other bins. This approach allows us to follow the evolution of the entire dust distribution in a self-consistent way. From Fig. 4 it can clearly be seen that the large grains are completely shattered (by numerous collisions with smaller grains). Collisions between large grains, though energetic and hence catastrophic, are too rare to have a real impact. Note that the mass in the smaller grains (60 Å) increases and that very small grains (6 Å), that were not present initially, are created in quantity by dust shattering in the shock. These changes result in an increase of the slope of the dust size distribution, with respect to the initial MRN, and to a new cut-off in the grain sizes at about 500 Å (Jones *et al.* 1996).

3.5 The 2-D study of large grain dynamics in J shocks

The Jones *et al.* (1996) dust shock-processing model predicts the almost total disruption of the larger grains in an MRN size distribution by fast shocks. This leads to an important question: how could the μm-sized, presolar grains have survived shocks in the ISM to be integrated into meteorites? The approach used in the Jones *et al.* (1996) model is based on the approximation that the grain guiding centre is at rest with respect to the ionised gas

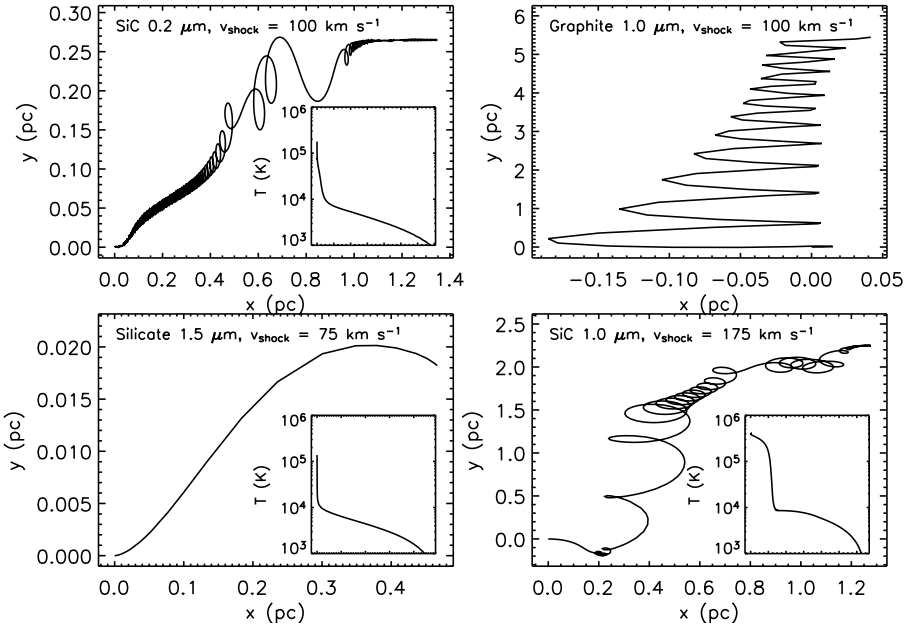


Fig. 5. The 2-D trajectories of μm-sized grains in steady-state radiative J shocks of various velocities (Slavin *et al.* 2004). Top left and bottom right, large grain trajectories with large transverse drift velocities induced by charge variation, note the gyration curvature inversions due to changes in the sign of the grain charge. Top right, the particular case of a "reflected grain" with an extremely large transverse velocity and, bottom left, a grain "escaping" a thin shock. See Slavin *et al.* (2004) for more details. [Figure taken from Slavin *et al.* (2004), reproduced with kind permission.]

and that the grain gyration radius is small compared to the length-scales characterizing the shock profile. This can not be true for very large, μm-sized grains which have a large inertia.

Slavin *et al.* (2004) continued this study of dust processing in J shocks in the WIM by following the 2-D trajectory of μm-sized grains using the exact laws of motion. They predict various trajectories which are highly dependent on the grain material (density), radius and charge (Fig. 5). Dust grains with similar properties could have very different dynamics through the shock and therefore undergo very different processing.

Two particular trajectory cases are of interest to us. "Reflected grains" (see Fig. 5) are so highly accelerated by magnetic reflection (Woitke, Dominik & Sedlmayr 1993) and Fermi I process that they are completely destroyed by inertial sputtering, potentially leaving the high-velocity, eroded ions as the seeds for cosmic-rays (following their further acceleration to cosmic-ray energies). "Escaped grains" (see Fig. 5), which cross a thin shock without even completing a gyration, spend little time in the shock and are little processed. We therefore conclude that there is a possibility that very large grains can survive shocks when the shocks are not too long (see Slavin *et al.* (2004) for a detailed discussion of this possibility).

4 Dust dynamics and processing in shocks in molecular clouds

Supernovæ, cloud-cloud collisions and bipolar molecular outflows around young stellar objects are often observed in and around molecular clouds. Some molecular outflows show bow shock structures indicating that the gas around them is affected by shocks when the jets interact with the ambient medium. These shocks excite the gas and can lead to a processing of the entrained dust.

4.1 The conditions for the existence of J and C shocks in molecular clouds

Molecular clouds have relatively high densities ($n_{\rm H} \geq 10^2\,{\rm cm}^{-3}$) and are threaded by magnetic fields whose strength scales as $B = b\sqrt{n_{\rm H}}$, where $b \simeq 1$, B is expressed in μG and $n_{\rm H}$ is in cm^{-3}. Magnetosonic waves propagate in this gas at a velocity given by $V_{ms} \simeq B/(\sqrt{4\pi\rho_c})$, where ρ_c is the mass density of charged species (ions and grains).

For strong magnetic fields or low shock velocities, magnetosonic waves can propagate faster than the shock front, forming a magnetic precursor to the shock front. The ionisation fraction is very low in molecular clouds ($x_{\rm e} \simeq 10^{-7} - 10^{-9}$) and the ionised and neutral fluids are decoupled by the magnetic precursor. In the pre-shock rest-frame the ionised fluid is accelerated and heated by the magnetic precursor but the neutral fluid is essentially unaffected by it. The resulting drift between the ionised and neutral fluids progressively heats and accelerates the neutral fluid. The variables characterizing the fluids remain continuous throughout the shock for the ionised fluid, but not for the neutral gas which undergoes a J-type shock. At even higher magnetic fields, or yet lower shock velocities, the neutral fluid is sufficiently accelerated in the magnetic precursor, via collisions with the ions, for its associated variables to remain continuous throughout the shock. In this case there is no longer a shock front and a C-type shock results, where C stands for "continuous".

Fig. 6 compares the thermal and velocity structure of one dimensional steady-state J and C shocks of the same energy. These shocks were calculated with an pre-shock transverse magnetic induction $B_0 = 0$ (J-type shock) and $B_0 = 100\ \mu G$ (C-type shock). Note that a non steady-state shock can combine both C and J shock characteristics (Chièze *et al.* 1998) and that a transition from a C-type to a J-type shock occurs at a sonic point (Lesaffre *et al.* 2004). A sonic point is encountered in the shock when the magnetosonic waves are unable to propagate faster than the shock or when the gas temperature is so high that the gas velocity becomes subsonic.

The critical value of the magnetosonic velocity, V_{ms}, separating the domains of of J and C shocks is dependent upon the proportionality coefficient $b = B/\sqrt{n_{\rm H}}$ (see above), and on the fraction of dust grains effectively coupled to the magnetic field in the gas ahead of the shock. See Flower & Pineau des Forêts (2003) and Ciolek, Roberge & Mouschovias (2004) for further discussions of this critical velocity.

4.2 Dust coupling in C shocks

Dependent upon their mass, cross-section and charge, the dust grains in a shock can either be coupled to the neutral fluid, through collisional drag, or to the charged fluid, through magnetic field-induced gyration. The coupling of the grains with the magnetic field is

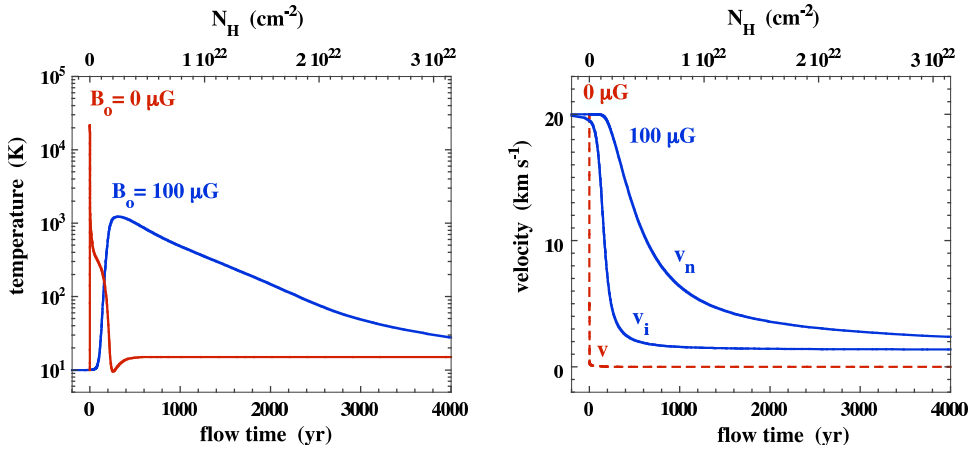


Fig. 6. A comparison of the thermal profiles (left) and velocity profiles (right) of J-type ($B_0 = 0\,\mu$G; sharply peaked temperature profile and the dashed velocity line) and C-type ($B_0 = 100\,\mu$G; smoother temperature profile, neutral (v_n) and ionised (v_i) fluid velocities shown) transverse shocks of velocity 20 km s^{-1} in a molecular cloud of proton density $n_H = 10^4$ cm^{-3}. Note that the velocities are given in the shock frame of reference. In a C shock the gas reaches lower temperatures than in a J shock and the molecules are not dissociated. Given that these shocks have the same energy, we see that cooling length for the C shock is clearly longer by more than an order of magnitude.

highly dependent upon the magnitude of the electric charge carried by the grains. The inner parts of molecular clouds are shielded from the ambient stellar ultraviolet radiation by dust absorption and so photo-electron emission from grains need not be considered. Additionally, the secondary ultraviolet photons arising from cosmic-ray interactions with molecular hydrogen inside molecular clouds have only a minor effect on grain charge (Flower & Pineau des Forêts 2003). Thus, all photon-induced grain charging processes can, to first order, be neglected in shocks in molecular clouds where ion and electron sticking, and charge transfer, are therefore expected to dominate the grain charging process. At the gas temperatures typically encountered in low-velocity C shocks (< 30 km s^{-1}), the secondary emission of electrons, due to energetic ion and electron impacts on the grains, can also be neglected (McKee *et al.* 1987, see Fig. 6 therein). Under such simplified conditions, the grain charge is proportional to the grain radius (Draine & Sutin 1987). The gyration time-scale, defined as the inverse of the Larmor frequency, is given by $\tau_{\rm gyr} = m/(|q|B)$, where m is the grain mass, q is the grain charge and B is the magnetic field strength. Given that the grain charge $q \propto a$ (see above), we then have $\tau_{\rm gyr} = \frac{4}{3}\pi a^3\rho/(|q|eB) \propto a^2$, where ρ is the grain mass density and e is the charge on an electron. The friction time-scale, *i.e.* the time-scale for the viscous drag force $F_{\rm drag}$ to significantly reduce the grain velocity v relative to the gas, is given by $\tau_{\rm drag} = mv/F_{\rm drag}$ (Draine 1980) and, because $F_{\rm drag}$ is proportional to the grain cross-section ($\sigma = \pi a^2$), we then have $\tau_{\rm drag} \propto m/\sigma = \frac{4}{3}\pi a^3\rho/(\pi a^2) \propto a$.

The coupling of a grain to a given fluid (charged or neutral) within the shock is determined by the value of the Hall parameter, β, defined as $\beta = \tau_{\rm drag}/\tau_{\rm gyr}$, *i.e.* it is the

ratio of the gas drag to the grain gyration time-scales. If $\beta \gg 1$, *e.g.* if the drag time-scale is long, a grain is coupled to the magnetic field and if $\beta \ll 1$, *e.g.* if the gyration time-scale is long, it is coupled to the neutral gas. As $\tau_{\rm drag} \propto a$ and $\tau_{\rm gyr} \propto a^2$, we see that $\beta \propto a/a^2 \propto a^{-1}$ and that large grains will therefore tend to be coupled to the neutral fluid and small grains will rather be coupled to the magnetic field. The critical grain radius that separates these two regimes depends upon the local properties of the gas in the C shock. However, only the largest grains in an MRN-type dust size distribution should exhibit $\beta \sim 1$ in dense molecular clouds (Draine 1980).

4.3 The modelling of C shocks

For the basis of our shock model we have adopted and developed the Flower & Pineau des Forêts (2003) shock code. This calculates the equilibrium state of a pre-shock gas, resolves both the physical and chemical evolution of the gas and follows it as a shock develops and propagates through the pre-defined medium. In a self-consistent way the code integrates numerous parameters, including: the velocity, temperature and density of the three magnetohydrodynamic (MHD) fluids (ions, electrons and neutral gas), the H_2 level population and the abundances of a set of chemical species. This is achieved by coupling the differential equations for MHD fluid dynamics, radiative cooling and a network of chemical reactions, including ionisation and recombination, occurring in both the gas phase and on the grain surfaces. Dust, modelled as a population of single-sized grain with properties representative of the entire dust size distribution, are assumed to follow the motion of the ions.

We have now augmented the Flower & Pineau des Forêts (2003) shock code to enable the study of dust dynamics and processing in the shock, including the feedback from dust charging, dynamics and processing on the shock structure. The dust processing in the shock is based on the code developed by Jones *et al.* (1994, 1996) that follows a 'binned' grain size distribution and associates 'standard' reference grains to each of the bins. Presently we have only included the effects of shattering into our code. MHD models of dust dynamics in C shocks usually neglect grain inertia (Wardle 1998; Pilipp, Hartquist & Havnes 1990; Caselli, Hartquist & Havnes 1997; Chapman & Wardle 2006). Grain inertia is indeed only critical when focusing on transient aspects of dust dynamics. The study of the propagation of magnetosonic waves, or the formation and evolution of the magnetic precursor involves grain inertia (Ciolek & Roberge, 2002, Ciolek *et al.* 2004). Dust processing is also highly dependent on grain inertia as the gyration of big grains in the immediate post-shock induces high velocity grain-grain collisions leading to shattering. Therefore, and following the Slavin *et al.* (2004) approach, the 'real' 2-D dynamics are integrated throughout the shock using the appropriate laws of motion for the grains.

4.4 Dust dynamics in C shocks

Here we limit our study of the dust dynamics to the case of a 'reference' model C shock propagating at a velocity of $20\,{\rm km\ s^{-1}}$ in a gas with a proton density of $10^4\,{\rm cm^{-3}}$, a magnetic field of $100\,\mu{\rm G}$ and an ionisation fraction of 2.4×10^{-8} resulting from the calculation of the steady-state conditions at gas temperature of $10\,{\rm K}$. The dust size distribution is

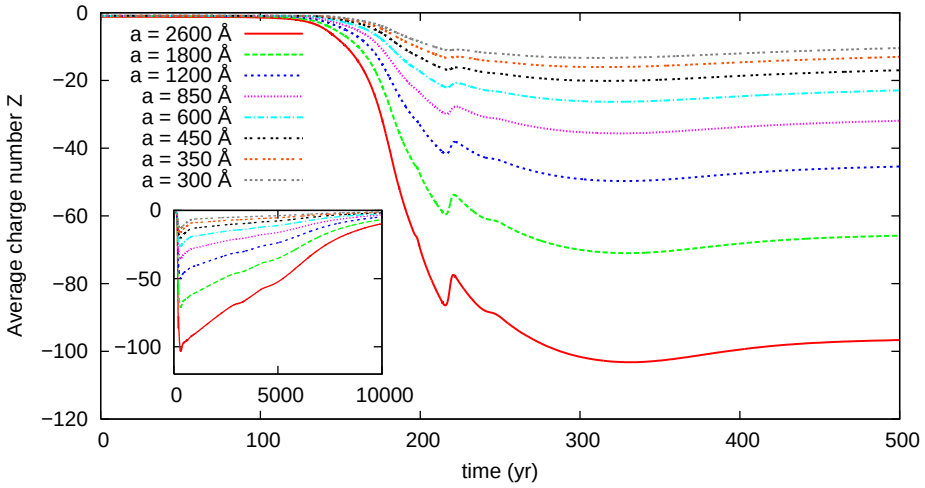


Fig. 7. Number of charges ($Z = q/\mathrm{e}$) per 'Standard' reference grain as a function of the ion flow time for a selection of grains size bins. The inset shows the grain charge throughout almost the entire shock. The indicated grain radii, a, are the pre-shock values, including the accreted ice mantles.

modelled using 8 size bins of silicate grain cores ($\rho = 3.3\ \mathrm{g\,cm^{-3}}$) to simulate an MRN-type distribution. The reference radii for the silicate grain bins follow a geometrical progression from 100Å to 3000Å and all the grains have ice mantles of an identical thickness of 169Å (Walmsley, Flower & Pineau des Forêts 2004, see Appendix B therein), consistent with the typical depletions for a molecular cloud (Flower & Pineau des Forêts 2003, see Table 2 therein).

In the code the charge of the reference grains is integrated, self-consistently, along with the ion and electron density. We consider the grain charging processes due to electron and ion attachment, and charge transfer, as per Draine & Sutin (1987). The resulting charge profiles are presented in Fig. 7. The ion flow time, defined as $t_\mathrm{i} = \int dz/V_\mathrm{i}$, is close to the grain flow time for grains coupled to the magnetic field. Grain charge, which is proportional to grain radius (see above), basically follows the evolution of the electron temperature. The chemical evolution of the gas can also affect the grain charge (for example, the abrupt change in the grain charge at about 200 years in Fig. 7).

The dynamics of the 8 reference grains are shown in Figs. 8 and 9. In C shocks propagating in molecular clouds the gyration phase of the grains is short with respect to the shock length. The high density of molecular clouds results in the gas drag damping the grain gyration much faster than in J shocks in the WIM and betatron acceleration is therefore much less effective in molecular clouds. Once the grain gyration has been damped the grains remain coupled to the ions in the direction of the shock but not perpendicular to this direction where a differential drift velocity remains throughout the shock (Fig. 9). This drift velocity is induced by gas friction in the presence of a magnetic field and is proportional to the grain radius for grains tightly coupled to the magnetic field ($\beta \gg 1$) (see Draine 1980, Eq. 34).

Fig. 10 presents the trajectories of the grains through the shock in the shock rest-frame. As the grains are charged, the perpendicular drift velocities produce an electric current transverse to the shock which contributes to the magnetic field compression through the

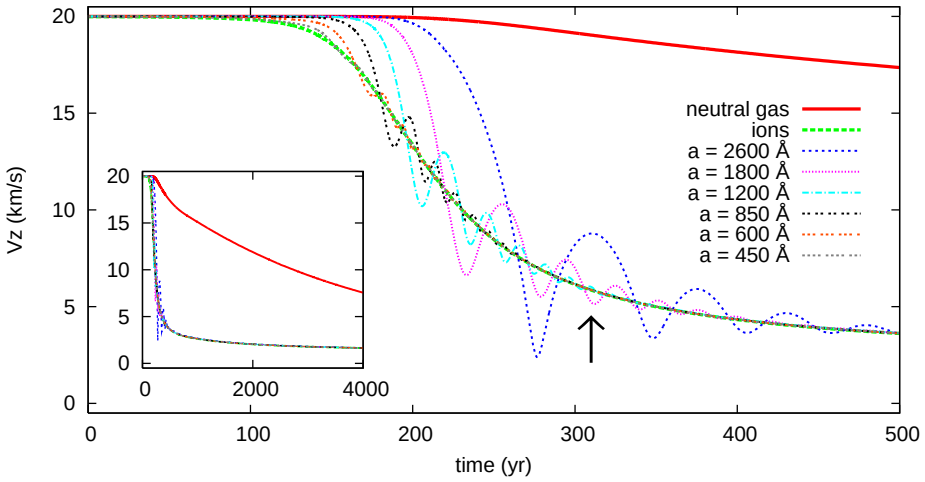


Fig. 8. Grain velocity V_z along the shock direction, in the shock rest-frame, as a function of the ion flow time. The reference grains with radii 300Å and 350Å are not shown but they simply follow the ion motion.

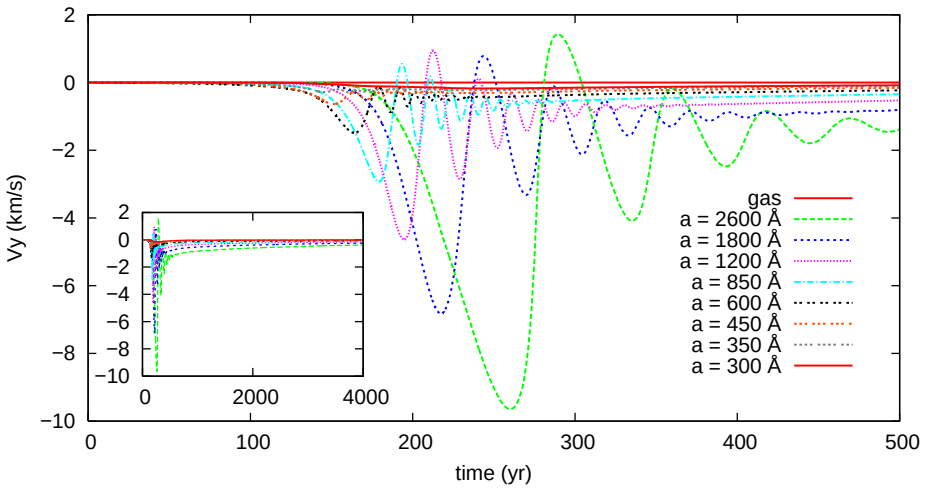


Fig. 9. Grain velocity V_y perpendicular to the shock direction as a function of the ion flow time.

Maxwell-Ampere law $\overrightarrow{J}(z) = \nabla B(z)/(4\pi)\,\overrightarrow{e}_y$, where $\overrightarrow{e}_y$ is the unit vector parallel to the shock front and perpendicular to the magnetic field. We note that the large grains cover such large distances parallel to the shock front that it is questionable whether the shock front could ever be wide enough such that the large grains remain within the shock.

4.5 The dust size re-distribution by shattering in C shocks

As seen in Figs. 8 and 9 the dust dynamics is comprised of two distinct phases in our C shock reference model, namely: a short gyration phase which is then followed by a long, low-velocity drift phase. Only the first phase, with its high grain gyration velocities, can induce any grain shattering. In this model the resultant grain shattering is rather weak (see Fig. 11). This is due to the high density of the gas which damps gyration fast, to the large charge carried by the grains (which tightly couples the grains to the magnetic field)

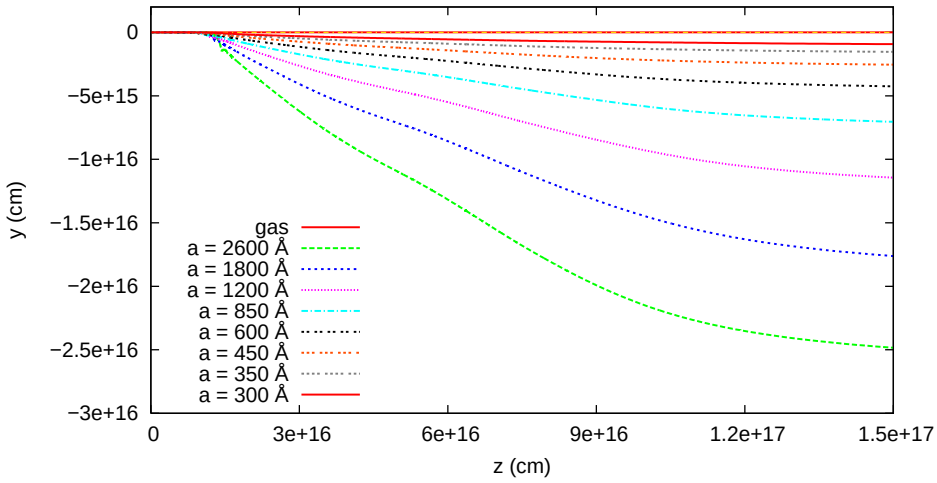


Fig. 10. Grain trajectories in the shock rest-frame.

.

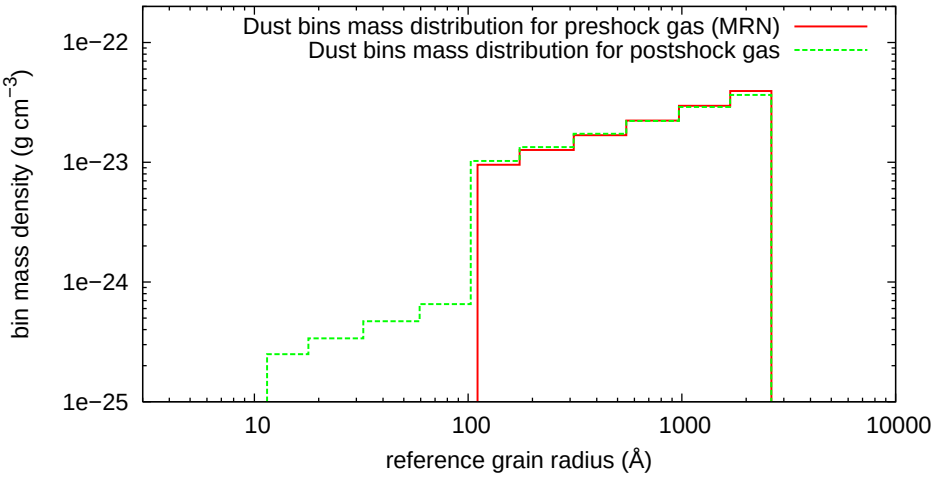


Fig. 11. Dust core mass distributions in the pre- and post-shock gas for the 20 km s^{-1} C shock reference model. The pre-shock grain core size distribution is modelled using 6 grain bins with radii ranging from 100 Å to 3000 Å with an MRN-type power law slope. In the pre-shock gas all the grain cores are covered with an ice mantle of 169 Å which is not included in this plot. Grains cores smaller than 100 Å are modelled using 4 bins to contain the shattered grain fragments, with the minimum fragment radius arbitrarily limited to 10 Å.

and to the low velocity of the shock chosen here (20 km s^{-1}). We have yet to explore a grid of models for shocks in dense and diffuse clouds before we can bring any firm conclusions to bear on the question of dust shattering in C shocks.

4.6 A study of the small, neutral grain dynamics through the shock

Up until now, we have assumed that all grains are coupled to the magnetic field in the shock. This hypothesis, it turns out, is actually not always valid for the smallest grains in C shocks in molecular clouds. Given that the grain charge is in fact not constant but varies

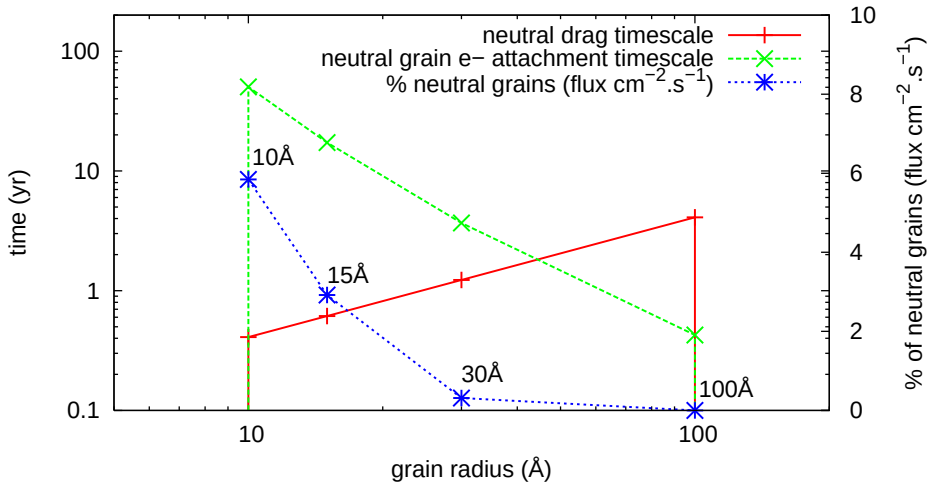


Fig. 12. Time-scales (left axis) for gas drag $\tau_{\rm drag}$ and charge variation $\tau_{\rm charge}$ as a function of grain radius for the C shock reference model near the peak in the ion-neutral velocity difference (indicated by a vertical arrow in Fig. 8). Percentage of grains of a given radius (right axis), in flux, that are neutral at this time as a function of grain radius, this also represents the probability for a grain to be neutral at this time.

about an average value, with a variance that depends on the gas temperature and the grain radius, at any given time there will always exist some neutral grains. Most of these are the very small grains, produced in large numbers by the shattering of the large grains in the immediate post-shock region. Grains can, in some circumstances, be effectively coupled to the magnetic field even when they are neutral, *e.g.* if the time-scale for their charge variation is short enough (Ciolek & Mouschovias 1993). In order to elucidate the conditions for this to occur we define a charge variation time-scale, $\tau_{\rm charge}$, for a neutral grain of radius a as the average time between collisions with ions or electrons. This is then the average time for a grain to stay neutral: $\tau_{\rm charge} \propto (n_e a^2)^{-1}$, where n_e is the electron density. Here, for simplicity, we have not considered the effects of electrostatic attraction but do so in our code. If $\tau_{\rm charge}$ is short compared to the friction time-scale $\tau_{\rm drag}$ the gas drag will not have the time to couple the grain to the gas before the grain becomes charged again. The grain will therefore stay coupled to the magnetic field, even when it is neutral. For a given grain size we can determine if this is the case by comparing the relevant time-scales. This is done in Fig. 12 for grains in the reference shock near the ambipolar diffusion peak (indicated by the arrow in Fig. 8). We see that a 100 Å neutral grain remains coupled to the magnetic field because its charge variation time-scale is much shorter than its friction time-scale. Neutral grains smaller than 30 Å have friction time-scales smaller than their charge variation time-scale, so that they should have enough time to couple to the neutral gas before becoming charged again, principally, by electron attachment. This behaviour only exists in environments where the charge variation time is not negligible, *i.e.* where the ionisation fraction and photo-emission rates are low, as in molecular clouds.

The validity of this approach is confirmed by our study of the dynamics of neutral test grains near the peak of the ambipolar diffusion (Fig. 13). At $t_i \simeq 300\,$yr four negatively

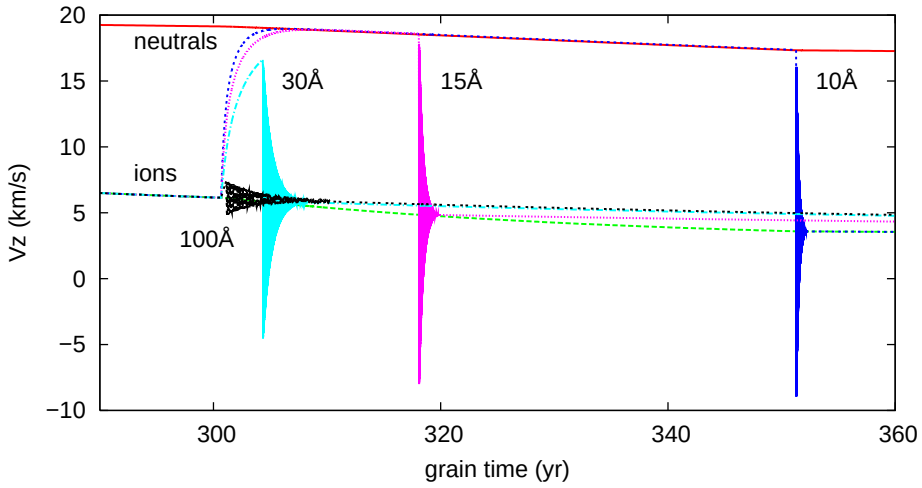


Fig. 13. The grain velocity in the shock direction for four test grains that are assumed to suddenly become neutral at $t \simeq 300$ yr. See the text for details.

charged test grains (with radii of 10, 15, 30 and 100 Å) are assumed to suddenly become neutral by recombination with an ion. As can be seen from Fig. 12, a 10 Å grain is expected to stay neutral for $\simeq$ 50 years before becoming charged again by electron attachment, whereas a 100 Å grain will stay neutral for only $\simeq 1/10$ of a year. Once neutralized, a 10 Å grain quickly couples to the neutral fluid and follows the motion of the neutrals for almost 50 years. At $t_i \simeq 350$ years, it becomes negatively charged by electron attachment and starts to gyrate around magnetic field lines. The gyration is then damped almost immediately by the neutral gas because of the small inertia of the grain. A 10 Å grain will then follow the ions for a long time before being neutralized again (see Fig. 12). A short time after its neutralization, a 100 Å grain becomes charged again. During its neutral phase it acquires a small gyration velocity ($\simeq$ 1 km s^{-1}, see Fig. 13) that is damped within a few years by the neutral gas due to its high inertia (Fig. 13). Such a grain will essentially remain charged throughout the shock with only a very small probability of being neutral at any given time (see Fig. 12).

This dynamical effect could have a major impact on dust processing in C shocks. Very small, neutral grains coupled to the neutral gas have an important drift velocity with respect to the charged grains that remain coupled to the ion fluid. This drift velocity exists throughout the shock, as long as the neutral and ionised fluids are not coupled. Very small neutral grains might thus shatter small grains or craterise larger grains (the latter action being a progressive erosion rather than the catastrophic shattering seen in J shocks in the WIM). This kind of erosional processing will result in grain fragmentation over long time-scales. Such a long term formation of very small grains will lead to an increase in the opacity for electron capture by grains and also to a deficit of electrons in the gas (the electrons being 'mopped up' by electron attachment with the abundant very small grains). A shortage of electrons would lead to an increase in the number of very small, neutral grains coupled to the neutrals and also to some de-coupling of the large grains from the magnetic field by reducing the magnitude of their charge. Both of these effects will tend to 're-launch' grain shattering by increasing the grain-grain collision rates

and the relative grain velocities in regions of the shock outside of the rather limited grain gyration region.

4.7 Is coagulation possible in C shocks?

Grain coagulation has not yet been fully implemented into our shock code. We can, however, already draw some conclusions from our current results on grain dynamics in C shocks. Fig. 9 reveals a marked transverse, differential velocity between the grains that exists even after the grain gyration phase. We find that these transverse velocities are less that $1\,\mathrm{km\ s^{-1}}$ in our reference model but that they remain all through the shock. These low, long-lasting, differential velocities could provide the conditions for driving grain coagulation. On the other hand, as presented in the previous paragraph, there exist within the shock numerous very small grains that are coupled to the neutral fluid. Such grains could coagulate with the charged grains in the tail of the shock, once the ion-neutral drift velocity is low enough for grain-grain sticking to occur. As young shocks appear to have a J-type tail where all the fluids are re-coupled (Chièze *et al.* 1998), it would appear that coagulation in the shock tail could therefore only occur in C shocks that are old enough to have reached steady-state. We are currently extending our studies into the possible role of coagulation in the post-shock regions in molecular clouds.

5 Conclusions and perspectives

We consider the impact of interstellar shocks on the interstellar dust size distribution within the context of J shocks in the WIM and C shocks in molecular clouds. In particular, we have focussed on the important effect of grain shattering in grain-grain collisions and the crucial role that the grain charge plays.

We underline the necessity for a detailed study of the dust dynamics in shocks and show that the 'real' 2-dimensional trajectories of the grains through a shock must be considered in order to correctly take into account the effects of grain-grain collisions. The inclusion of the grain inertia and a detailed modelling of the grain charging processes is essential in order to undertake a detailed study of the dust processing in shocks.

In summary, supernova-generated J shocks propagating in the Warm Intercloud Medium (WIM) are the principal agent in determining the life-time of Galactic dust. These high velocity shocks ($v_s \geq 50\,\mathrm{km\,s^{-1}}$) result in large differential velocities between the shocked gas and the dust that lead to dust destruction that is dominated by inertial sputtering. In addition, the gyration velocities of the grains result in the almost complete disruption of the large grains through collisions with smaller grains. The ubiquitous presence of large grains in the interstellar medium (ISM) therefore implies that there must be efficient large grain re-formation process in the ISM. In contrast, from the results of our modelling of the effects of low-velocity C shocks in molecular clouds, we find that they probably have a rather low impact on the evolution of the dust size distribution in the ISM. We are currently undertaking further studies because, as we have shown, the feedback from even a small degree of shattering in a C shock critically affects the free electron density. A possible shortage of electrons, due to electron attachment onto the very small grain fragments produced by shattering in grain-grain collision, dramatically affects the

dust coupling with the magnetic field, and thus the nature of the dust dynamics and the resultant processing by shattering.

Grains in C shocks remain coupled to the ionised fluid (*i.e.* to the magnetic field) even when they are neutral, as long as the grain charging time-scale is short compared to the gas drag time-scale. Therefore we find, perhaps rather surprisingly, that very small grains in C shocks only become tightly coupled to the neutral fluid when they are neutral if they are small enough or if there is a shortage of electrons in the gas. These very small neutral grains have important drift velocities with respect to the charged grains (coupled to the ionised fluid) throughout the shock. Thus, as long as the two fluids are not coupled, very small, neutral grains can shatter small grains or erode large grain by craterisation over long time-scales.

We are currently extending our work to a study of shocks in diffuse and molecular gas with a broad range of densities and magnetic field strengths, and with an ambient radiation field. In the near future we will include sputtering erosion and coagulation processes into our dust processing code.

Acknowledgments

We are grateful to B. T. Draine for providing an electronic version of Fig. 2, and to J. D. Slavin for many useful discussions that helped to clarify many aspects of the impact of grain charge on the dynamics of dust grains in J shocks of the WIM. VG especially thanks the organizers of this 2006 Les Houches Dust Meeting for the opportunity to present this talk.

References

Anders, E., Zinner, E. 1993, Meteoritics, 28, 490

Barlow, M. J. 1978, MNRAS, 183, 367

Borkowski, K. J., Dwek, E. 1995, ApJ, 454, 254

Cardelli, J. A., Clayton, G. C., & Mathis, J. S. 1989, ApJ, 345, 245

Caselli, P. , Hartquist, T. W., & Havnes, O. 1997, A&A, 322, 296

Chapman, J. F., & Wardle, M. 2006, MNRAS, 371, 513

Chièze, J.-P., Pineau des Forêts, G., Flower, D. 1998, MNRAS, 295, 672

Chokshi, A., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. J. 1993, ApJ, 407, 806

Ciolek, G. E., & Mouschovias, T. Ch. 1993, ApJ, 418, 774

Ciolek, G. E., & Roberge, W. G. 2002, ApJ, 567, 947

Ciolek, G. E., Roberge, W. G., & Mouschovias, T. Ch. 2004, ApJ, 610, 781

Cowie, L. L. 1978, ApJ, 225, 887

Draine, B. T., & McKee, C. F. 1993, ARAA, 31, 373

Draine, B. T., & Salpeter, E. E. 1979a, ApJ, 231, 77

Draine, B. T., & Salpeter, E. E. 1979b, ApJ, 231, 438

Draine, B. T., & Sutin, B. 1987, ApJ, 320, 803

Draine, B. T. 1980, ApJ, 241, 1021

Draine, B. T. 1990, in *"Evolution of the Interstellar Medium"*, ASP Conference Series 12, Ed. L. Blitz (San Francisco: Astronomical Society of the Pacific), 193

Dwek, E., & Scalo, J. M. 1980, ApJ, 239, 193

Dwek, E. 1998, ApJ, 501, 643

Field, G. B., May, P. W., Pineau des Forêts, G., & Flower, D., 1997, MNRAS , 285, 839

Flower, D., & Pineau des Forêts, G. 2003, MNRAS, 343, 390

Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., Hollenbach, D. J., & McKee, C. F. 1994, ApJ, 433, 797

Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M. 1994, in *"The Cold Universe"*, Proceedings of the XXVIIIth rencontre de Moriond, XIIIth, Moriond Astrophysics Meeting, Ed. T. Montmerle, C. J. Lada, I. F. Mirabel and J. Tran Thanh Van (Gif-sur-Yvette: Editions Frontiers), p 35

Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. J. 1996, ApJ, 469, 740

Jones, A. P. 2004, in *"Astrophysics of Dust"*, Astronomical Socity of the Pacific ConferenceSeries, Volume 309, Ed. by A.N. Witt, G.C. Clayton and B.T. Draine, 347

Lesaffre, P, Chièze, J.-P., Cabrit, S., Pineau des Forêts, G. 2004, A&A, 427, 157

Mathis, J. S., Rumpl, W., & Nordsieck, K. H. 1977, ApJ, 217, 425

McKee, C. F., Hollenbach, D. J., Seab, C. G., & Tielens, A. G. G. M. 1987, ApJ, 318, 674

McKee, C. F., & Ostriker, J. P. 1977, ApJ, 218, 148

McKee, C. F. 1989, in *"Interstellar Dust"*, IAU Symposium No. 135, Ed. L. J. Allamandola and A. G. G. M. Tielens, 431

Oort, J. H. & van de Hulst, H.C. 1946, B.A.N., 10, 187

Pilipp, W., Hartquist, T. W., & Havnes, O. 1990, MNRAS, 243, 685

Poppe, T., & Blum, J. 1997, Advance in Space Research, Volume 20, Issue 8, p. 1595-1604

Routly, P. M., & Spitzer, L. Jr 1952, ApJ, 115, 227

Savage, B. D., & Sembach, K. R. 1996, ARA&A, 34, 279

Slavin, J. D., Jones, A. P., & Tielens, A. G. G. M. 2004, ApJ, 614, 796

Spitzer, L. Jr 1976, Comm. Ap., 6, 177

Tielens, A. G. G. M., McKee, C. F., Seab, C. G., & Hollenbach, D. J. 1994, ApJ, 431, 321

Walmsley, C. M., Flower, D. R., Pineau des Forêts, G. 2004, A&A, 418, 1035

Wardle, M. 1998, MNRAS, 298, 507

Woitke, P., Dominik, C., & Sedlmayr, E. 1993, A&A, 274, 451

Chapitre 2

Ondes de choc hydrodynamiques

Les ondes de choc sont le facteur principal de destruction des poussières dans la phase tiède du milieu interstellaire. Dans cette thèse, nous étudions le degré de traitement des poussières dans les chocs se propageant dans les nuages denses, préambule à une étude plus générale du traitement des poussières dans la phase dense du milieu interstellaire. L'intensité du traitement des poussières est déterminée par la dynamique des grains dans le choc, et donc par la structure du choc. Une présentation des chocs hydrodynamiques qui, à proprement parler, n'existent pas dans le milieu interstellaire à cause de l'omniprésence du champ magnétique, permet cependant de fixer les grandes lignes qui caractérisent la structure des ondes de choc mono-fluides, avec ou sans champ magnétique. On montre également comment le caractère inhomogène du milieu interstellaire, structuré en nuages denses entourés d'un milieu inter-nuages ténu, affecte la propagation de ces chocs et donc le traitement des poussières.

Des ondes de choc se forment partout dans la Galaxie et dans le milieu intergalactique où des événements très violents (jets et vents très énergétiques émis par les étoiles ou par les AGN, mort d'une étoile en supernovæ ou en nébuleuse planétaire, collisions entre nuages ou entre galaxies au sein d'un même amas) génèrent une importante surpression qui se propage à vitesse supersonique dans le milieu de plus basse pression environnant. Ces ondes de choc accélèrent, compriment et chauffent le gaz qu'elles traversent. La compression du milieu traversé peut aboutir à la formation d'étoiles, comme on l'observe dans les bras spiraux des galaxies qui sont de gigantesques ondes de choc balayant les disques galactiques. L'énergie injectée par les ondes de choc dans le milieu interstellaire ou le milieu intergalactique est responsable du chauffage de la phase coronale. L'existence des ondes de choc explique également les dispersions de vitesse des nuages à haute lattitude galactique.

Les deux chapitres qui suivent sont consacrés à une présentation pédagogique[1] de la physique des ondes de choc dans le milieu interstellaire. Dans cette perspective, il est utile dans un premier temps d'ignorer l'influence du champ magnétique sur la propagation des ondes de choc[2], pour ne l'introduire que par la suite. Nous commençons donc par l'étude

1. L'auteur de cette thèse, actuellement enseignant de Physique-Chimie au Lycée Polyvalent Dorian (Paris XI^{e} siècle), espère poursuivre une carrière d'enseignant-chercheur à l'université.
2. Pour les ondes de choc collisionnelles qui sont l'objet de ce chapitre.

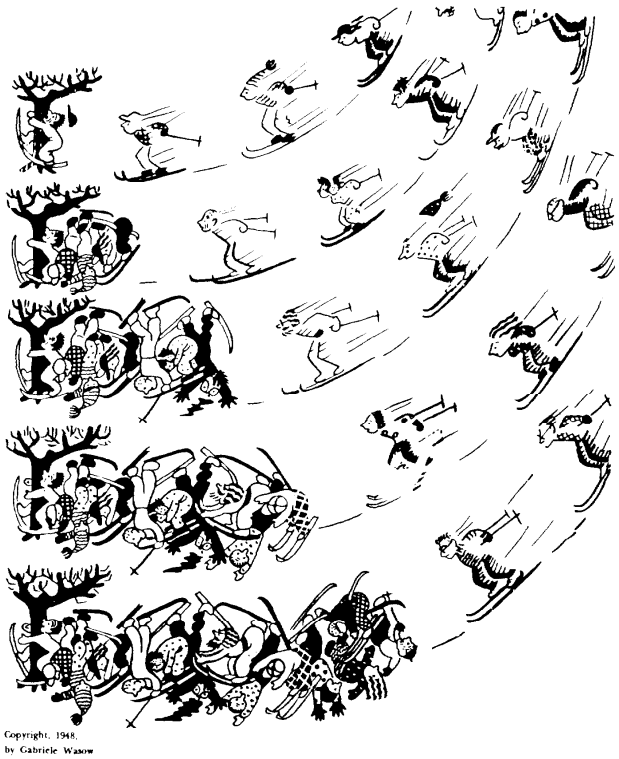


FIGURE 2.1 – Onde de choc remontant une file de skieur (Courant & Friedrichs, 1948).

détaillée des ondes de choc *hydrodynamiques*, c'est-à-dire des ondes de choc qui relèvent de la dynamique des gaz compressibles. Les ondes de choc *magnétohydrodynamiques* (MHD), qui se propagent dans un gaz plongé dans un champ magnétique non négligeable, sont traitées dans le chapitre suivant.

2.1 Qu'est-ce qu'une onde de choc ?

La figure 2.1 présente un dessin humoristique paru en 1948 dans un livre consacré aux ondes de choc (Courant & Friedrichs, 1948). On y voit une file de skieurs dévalant une piste, et en bas de cette pente des skieurs à terre empilés contre un arbre. Le premier skieur n'a pas vu l'arbre à temps pour freiner. Le second skieur n'a pas vu le premier skieur tombé à terre assez tôt pour pouvoir l'éviter. Le tas de skieurs s'étend ainsi progressivement, à la manière d'une onde de choc qui remonterait la file de skieurs.

On peut définir une onde de choc comme suit : une onde de choc est une variation importante de pression qui se propage dans un fluide à vitesse *supersonique*. Le caractère supersonique de cette onde implique que le fluide qui va être traversé par l'onde de choc n'est jamais informé à l'avance de l'arrivée de l'onde de choc [1].

1. Dans un milieu non magnétisé, seules les ondes sonores peuvent exercer une action *mécanique* à l'avance sur le fluide non encore choqué. Le fluide peut certes être informé de l'arrivée du choc par le rayonnement émis par le choc lui-même (*cf.* § 2.5.3), mais ce rayonnement qui devance le choc est incapable de mettre en mouvement le fluide.

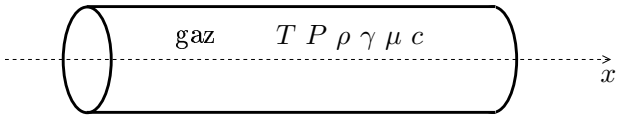


FIGURE 2.2 – Modèle de fluide 1D pour la propagation des ondes de choc hydrodynamiques : une conduite finie de gaz à température T, pression P et de masse par unité de volume ρ. Le rapport des chaleurs à pression et volume constants est $\gamma = c_\mathrm{p}/c_\mathrm{v}$. μ est la masse moyenne des particules, et c la vitesse du son dans le gaz.

Une onde de choc accélére, chauffe et comprime le fluide sur son passage. C'est un processus thermodynamique irréversible, c'est-à-dire dissipatif d'énergie. Comme nous allons le voir, les ondes de choc diffèrent des ondes sonores pour lesquelles le milieu de propagation revient à son état d'équilibre initial une fois l'onde passée.

2.2 Ondes sonores et ondes de choc dans une conduite de gaz

Considérons une conduite de gaz rectiligne de section constante et de longueur finie ouverte à ses deux extrémités (Fig. 2.2). Toutes les vitesses, sauf mention explicite, sont mesurées dans le référentiel de la conduite de gaz qui est munie d'un axe x orienté vers la droite.

Le gaz, considéré comme un fluide parfait (sans viscosité) est à l'équilibre thermodynamique à température T, pression P et masse par unité de volume ρ. L'équation des gaz parfaits s'écrit :

$$\frac{P}{\rho} = \frac{kT}{\mu}\,, \tag{2.1}$$

où k est la constante de Boltzman et μ la masse moyenne des particules du gaz exprimée en g.

2.2.1 Perturbation de la pression - ondes sonores

Gaz au repos dans la conduite

Prenons tout d'abord un gaz au repos dans la conduite. On applique à l'instant $t = 0$ une perturbation de pression au milieu de la conduite (par exemple par une étincelle). Cette perturbation de pression, négligeable devant la pression du gaz, se propage dans les deux sens de la conduite à la vitesse du son c, qui a pour expression :

$$c = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_\mathrm{s}} = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}\,, \tag{2.2}$$

où $\gamma = c_\mathrm{p}/c_\mathrm{v}$ est le rapport des chaleurs [1] à pression constante et à volume constant du gaz (γ vaut 5/3 pour un gaz atomique, 7/5 pour un gaz diatomique). La dérivée partielle à entropie

1. Chaleurs par unité de masse.

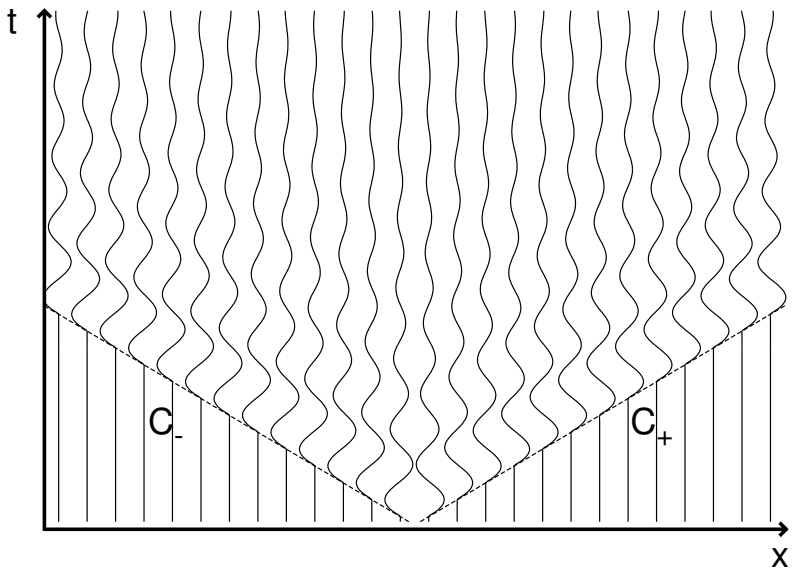


FIGURE 2.3 – Schéma des lignes d'univers (traits pleins) des particules du gaz de la conduite dans laquelle se propage une perturbation de pression générée au mileu de la conduite à $t = 0$, avec ses caractéristiques C_+ et C_- (pointillés).

S constante indique que la propagation des perturbations de pression est isentropique, c'est-à-dire adiabatique et *réversible*. Elle s'effectue donc sans dissipation d'énergie.

On peut visualiser le mécanisme de propagation de cette perturbation en traçant dans le plan (x, t) les lignes d'univers des particules de gaz (Fig. 2.3). Là où les lignes d'univers sont verticales, les particules sont au repos, et plus la ligne d'univers d'une particule de gaz est inclinée vers l'horizontale, plus la particule se déplace vite. La perturbation initiale de pression se propage le long de lignes appelées *caractéristiques*. Dans le modèle 1D qui est celui de notre conduite de gaz, il en existe deux sortes. Les caractéristiques C_+ qui se propagent à vitesse $+c$, et les caractéristiques C_- qui se propagent à vitesse $-c$ dans le référentiel de la conduite. On constate que les zones de *compression* du gaz sont des zones où le gaz est mis *en mouvement dans le sens de propagation de l'onde*. Inversement, dans les zones de dépression ou de raréfaction du gaz, les particules de gaz se déplacent en sens contraire de l'onde. Le mouvement oscillatoire des particules du gaz s'amortit progressivement après passage de la perturbation, mais les deux paquets d'ondes sonores envoyés dans les deux directions de la conduite ne s'amortissent pas car le modèle est 1D et la propagation de l'onde de se fait à entropie constante, c'est-à-dire sans dissipation.

Gaz en mouvement uniforme dans la conduite

Imaginons maintenant que le gaz est en mouvement uniforme, à vitesse v vers la droite de la conduite. La figure 2.4 présente les caractéristiques et les lignes moyennes d'univers des particules du gaz pour un écoulement subsonique ($v < c$) et supersonique ($v > c$) du gaz. Dans le référentiel de la conduite, la vitesse de propagation des ondes sonores est modifiée par le mouvement du gaz : les perturbations de pression se propagent à vitesse $v \pm c$ et les

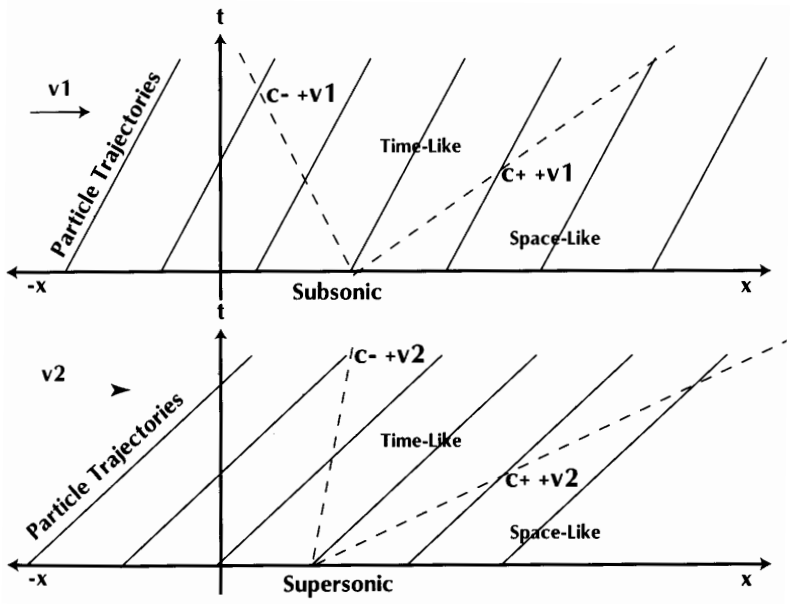


FIGURE 2.4 – Schéma des lignes d'univers (traits pleins) des particules de gaz et des caractéristiques (pointillés) des perturbations de pression pour un gaz en mouvement subsonique (**Haut**) et supersonique (**Bas**) dans une conduite. Les événements situés dans les régions du genre espace (space-like) ne sont pas reliés causalement à la perturbation de pression dont les caractéristiques sont tracées. Extrait de Dopita & Sutherland (2003).

caractéristiques s'inclinent donc vers la droite.

Les événement du genre *temps* [1] sont reliés causalement à la perturbation de pression imposée à $t = 0$, tandis que les événements du genre *espace* [2] sont indépendants de celle-ci. Si l'écoulement est supersonique dans le référentiel de la conduite, les perturbations de pression correspondant aux caractéristiques C_- ne peuvent pas remonter la conduite vers la gauche. Chaque zone de la conduite reste alors insensible à toute perturbation de pression générée à sa droite.

2.2.2 Forte variation de la pression - discontinuité du front d'onde

Considérons maintenant le cas d'une augmentation de pression δP non négligeable devant la pression P_0 du gaz (Fig. 2.5). Cette forte surpression génère un mouvement oscillatoire du gaz à une vitesse δc non négligeable devant la vitesse du son. Dans les régions de compression, les particules de gaz avancent à la vitesse $+\delta c$ dans le sens de propagation de l'onde. La surpression se propage donc à une vitesse $c + \delta c$ par rapport à la conduite. A l'inverse, les particules de gaz reculent à la vitesse $-\delta c$ dans les zones de détente du gaz. Les dépressions du gaz se propagent donc à vitesse $c - \delta c$, c'est-à-dire moins rapidement que les surpressions.

La figure 2.5a montre comment la propagation différentielle des régions de compression et de détente d'une période de l'onde sonore déforme progressivement le profil du front

1. Time-like.
2. Space-like.

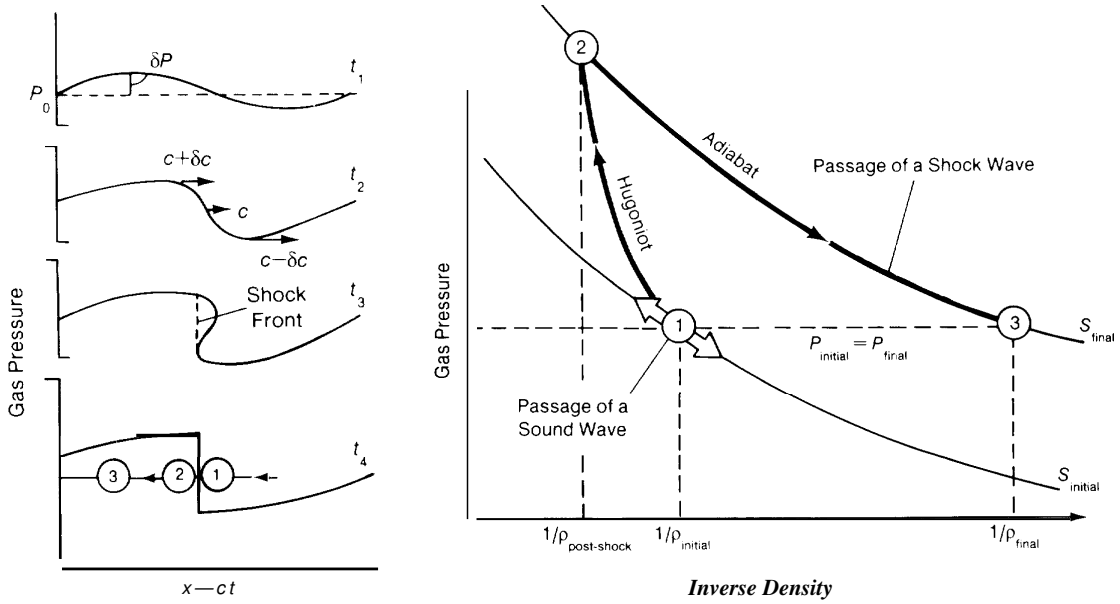


FIGURE 2.5 – (**a**) Propagation et déformation d'une onde sonore de forte intensité, jusqu'à l'apparition d'une surface de discontinuité où la pression, la vitesse et la densité du gaz subissent un saut. La surface de discontinuité dissipe l'énergie de l'onde en écrêtant progressivement le front d'onde, jusqu'à amortissement complet. (**b**) Diagramme décrivant dans le plan $(1/\rho, P)$ les transformations thermodynamiques subies par le gaz lors du passage d'une onde sonore (-1-) et d'une onde de choc (1-2-3). Extrait de Norman & Winkler (1985).

d'onde [1]. Les zones de compression rattrapent les zones de détente, et les dépasseraient si la possibilité pour les variables physiques d'avoir plusieurs valeurs différentes en un même point n'était pas interdite. Cette interdiction est contournée par l'apparition dans le front d'onde d'une discontinuité de la pression, de la densité et de la vitesse du gaz [2]. L'apparition de cette discontinuité s'accompagne d'un écrêtage de l'onde, et donc d'une diminution de son amplitude. Les zones de compression continuant à rattraper les zones de détente dans les parties continues du profil de chaque période de l'onde, l'écrêtage de l'onde se poursuit pendant sa propagation, jusqu'à amortissement complet de l'onde.

La figure 2.5b compare les transformations thermodynamiques relatives à la propagation des ondes sonores de faible et forte intensité. Lors du passage d'une onde sonore de faible intensité, la pression et la densité oscillent le long d'une isentropique (autour du point 1). Cette transformation est adiabatique et réversible. Il n'y a donc pas d'amortissement de l'onde. Dans un front d'onde sonore intense présentant une discontinuité, le gaz subit une compression irréversible en traversant la discontinuité. Il passe d'une faible pression et faible densité (point 1) à une forte pression et forte densité (point 2), au cours d'une transformation appelée *adiabatique dynamique d'Hugoniot*. Après avoir traversé la discontinuité, le gaz se

1. Ce constat vaut pour toutes les périodes de l'onde sonore.
2. De manière générale, une discontinuité doit se former spontanément dans toute partie du gaz où la pression diminue dans le sens de propagation de l'onde sonore.

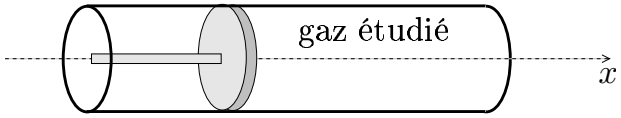


FIGURE 2.6 – Un piston en mouvement continuellement accéléré crée une onde de choc (piston poussé, Fig. 2.7) ou une onde de raréfaction (piston retiré, Fig. 2.8) dans le gaz de la conduite situé devant lui.

détend le long d'une isentropique pour retrouver la pression moyenne du gaz. Sa température est cependant plus élevée et sa densité plus faible qu'avant la traversée de la discontinuité. Il y a eu dissipation d'énergie et augmentation de l'entropie du gaz.

2.2.3 Mouvement de compression d'un piston - onde de choc

Au paragraphe précédent, nous avons montré comment une discontinuité pouvait se former spontanément dans chaque période d'une onde sonore de grande intensité, et amortir l'onde. Cette discontinuité n'est pas encore une onde de choc. Pour produire une onde de choc, nous allons installer un piston au milieu de la conduite et le mettre en mouvement (Fig. 2.6).

Formation d'une onde de choc

Tout d'abord, nous étudions le cas où le piston est déplacé en mouvement uniformément accéléré vers la droite, le gaz étant initialement au repos par rapport à la conduite. La vitesse du piston dans le référentiel de la conduite est $U(t) = at$, où a est l'accélération du piston. Le gaz en contact avec le piston se propageant à la vitesse du piston, les perturbations de pression induites par le mouvement du piston se propagent dans ce gaz à la vitesse $at + c$ par rapport à la conduite, vitesse qui augmente avec le temps. Nous nous retrouvons donc dans une situation favorable à l'apparition de discontinuités, telle qu'elle a été décrite au paragraphe précédent : les ondes sonores émises sur le tard ont tendance à rattraper les ondes sonores émises plus tôt.

Sur la figure 2.7, on représente dans le plan (x, t) les lignes d'univers du piston et des particules du gaz, ainsi que les caractéristiques C_+ générées sur le piston à différents instants. Les perturbations de pression C_+ émises au début du mouvement du piston sont rattrapées par celles (plus rapides) qui ont été émises plus tard, et convergent ensemble pour former une discontinuité, seul mécanisme physique susceptible d'empêcher une multiplicité de valeurs de la pression, de la densité et de la vitesse des particules du gaz en un même point. En traversant le front de choc, les particules de gaz sont accélérées instantanément à la vitesse du gaz situé derrière le front de choc. Aucune perturbation de pression C_+ ne se propage plus rapidement que le front de choc qui est la superposition des fronts d'ondes de toutes les perturbations de pression générées par le milieu choqué dirigées vers la droite.

Remarquons que l'onde de choc se forme au-delà du piston et après la mise en mouvement de celui-ci, puis s'en éloigne progressivement en accélérant, poussée par la pression croissante du gaz situé entre le piston et le front de choc [1].

1. L'onde de choc naît supersonique, comme le montre la comparaison à son point d'apparition de la

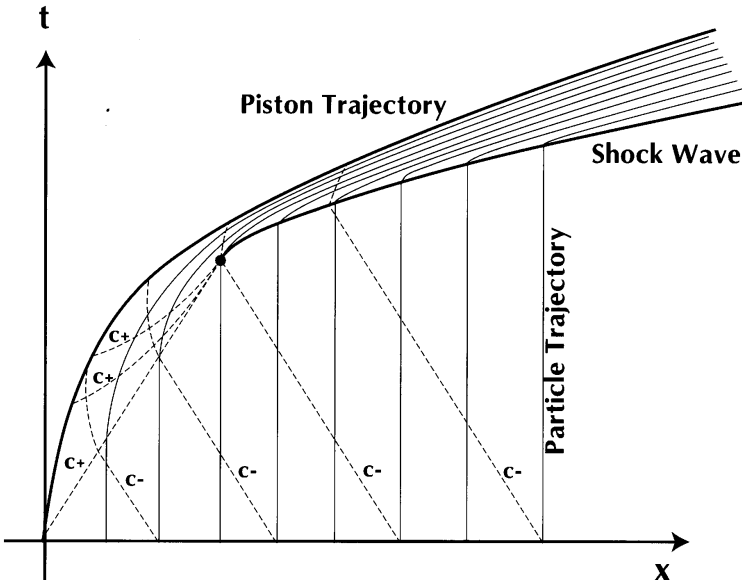


FIGURE 2.7 – Formation d'une onde de choc par un mouvement accéléré de compression du piston. Chaque particule du gaz, initialement immobile (traits pleins verticaux), est mise en mouvement dès qu'elle reçoit la perturbation de pression générée par la mise en mouvement du piston (c'est-à-dire à l'intersection de sa ligne d'univers et de la caractéristique C_+ issue de l'origine). Les caractéristiques C_+ tendent à s'incliner vers la droite à mesure que le gaz est accéléré par le piston. Lorsque toutes les caractéristiques C_+ issues du piston au cours de son mouvement se croisent, l'onde de choc se forme. Extrait de Dopita & Sutherland (2003).

Nature des écoulements pré-choc et post-choc dans le référentiel du front de choc

Intéressons nous à l'onde de choc elle-même et non plus au piston en nous plaçant dans le référentiel appelé *référentiel du front de choc* où la surface de discontinuité est au repos. Le front de choc sépare le milieu *pré-choc* (celui du gaz au repos) du milieu *post-choc* du gaz choqué. Ce référentiel est en mouvement à vitesse V_s (vitesse du choc) par rapport à la conduite de gaz. La figure 2.7 montre que les variations de pression peuvent se propager depuis le piston jusqu'au front de choc (caractéristiques C_+). Le milieu choqué est donc obligatoirement *subsonique* dans le référentiel du front de choc. Par contre, aucune variation de pression C_+ issue du front de choc ne se propage dans le milieu pré-choc pour l'avertir de l'arrivée du choc[1]. L'écoulement du gaz pré-choc est donc *supersonique*. Le gaz pré-choc arrive sur le front de choc sans s'y attendre, et l'adaptation du gaz aux conditions physiques du milieu choqué doit se faire brutalement, de manière discontinue.

Nous avons là les deux caractéristiques essentielles d'un choc :

1. L'écoulement pré-choc est supersonique dans le référentiel du front de choc, sans quoi il n'y aurait plus de surface de discontinuité et donc plus de choc.

pente du front de choc et de la caractéristique C_+ générée à la position initiale du piston.

1. Toutes ces caractéristiques forment en effet le front de choc.

2. L'écoulement post-choc est subsonique dans ce même référentiel, sans quoi la pression du piston ne pourrait pas conduire l'onde de choc.

Plus généralement, un écoulement hydrodynamique supersonique ne peut devenir subsonique qu'en traversant une onde de choc.

Onde de choc auto-similaire

Si au lieu d'un mouvement accéléré, le piston suit un mouvement de compression du gaz, rectiligne et uniforme de vitesse U, l'onde de choc prend naissance sur le piston dès sa mise en mouvement en raison de la discontinuité de la vitesse du piston à cet instant. La surface de discontinuité initialement collée au piston s'en éloigne progressivement. La vitesse de propagation du front de choc créé est constante et vaut (Landau & Lifshitz, 1959) [1] :

$$V_s = \frac{\gamma+1}{4}U + \sqrt{\left(\frac{(\gamma+1)}{4}U\right)^2 + c^2} \quad > c\,. \tag{2.3}$$

L'onde de choc créée par un piston en mouvement uniforme est une onde de choc *auto-similaire*. Sa structure ne dépend pas de la position x du front de choc, ni du temps t écoulé depuis la mise en mouvement du piston, mais seulement de leur rapport x/t.

2.2.4 Mouvement de retrait d'un piston - onde de raréfaction

Si au lieu d'être poussé dans un mouvement de compression du gaz, le piston est retiré, une onde de raréfaction (dite aussi onde de détente) se propage du piston vers le gaz au repos, communiquant de proche en proche [2] la baisse de pression imposée au niveau du piston. La figure 2.8 présente le mouvement de retrait accéléré d'un tel piston, celui des particules du gaz, ainsi que les caractéristiques C_+ et C_-. On constate que les caractéristiques C_+ issues du piston divergent, ce qui implique qu'il ne peut pas se former de surface de discontinuité dans le cas d'un retrait du piston. La pression étant croissante du piston retiré vers le gaz au repos, les ondes émises tardivement ne peuvent en effet pas rattraper les ondes émises plus tôt. Toutes les grandeurs physiques restent donc continues dans ce type d'écoulement. Par contre, les dérivées de ces grandeurs physiques ne le sont pas partout. On parle de discontinuité faible (Landau & Lifshitz, 1959).

2.3 Relations de Rankine-Hugoniot à travers une surface de discontinuité

Nous venons de voir qu'une surface de discontinuité peut se former dans une onde ou dans un écoulement dès que les variations de pression imposées sont non négligeables de-

1. Le piston n'a donc pas besoin d'avoir un mouvement supersonique pour qu'une onde de choc se forme (l'onde de choc est, elle, obligatoirement supersonique). Ceci dit, si le mouvement du piston est trop lent, les effets visqueux négligés ici vont en réalité dissiper les variations de pression et empêcher la formation de l'onde de choc.

2. Si le piston est retiré à une vitesse supérieure à celle du son, le gaz ne peut pas se détendre assez rapidement pour suivre le piston et une région de vide se crée entre le piston et le gaz.

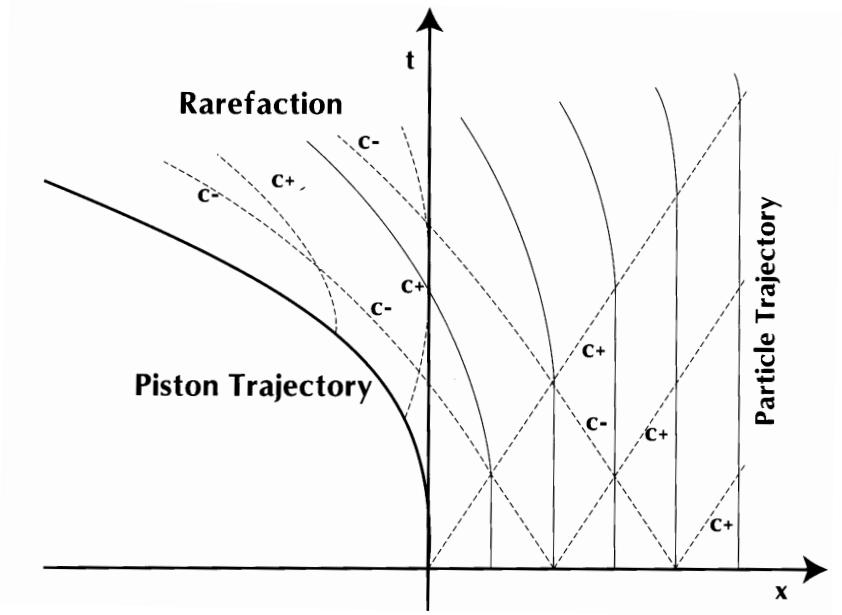


FIGURE 2.8 – Formation d'une onde de raréfaction par un mouvement accéléré de retrait du piston. Les caractéristiques sont en pointillés, les lignes d'univers du gaz en traits pleins. L'onde de raréfaction se propage du piston vers le gaz (c'est-à-dire vers la droite) sans apparition de discontinuité. Extrait de Dopita & Sutherland (2003).

vant la pression du gaz. Nous allons maintenant déterminer les relations entre les grandeurs physiques de part et d'autre d'une surface de discontinuité.

Equations d'état d'un fluide polytropique

On note P la pression du fluide, T sa température, ρ sa densité de masse et μ la masse moyenne de ses particules. La vitesse du son c dans ce fluide a pour expression :

$$c = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}} = \sqrt{\frac{\gamma k T}{\mu}}\,. \tag{2.4}$$

Si le fluide est polytropique[1], son énergie interne[2] u, son enthalpie h et son entropie s par *unité de masse*[3] ont pour expression :

$$u = c_{\rm v} T = \frac{1}{\gamma - 1}\frac{P}{\rho}\,, \tag{2.5}$$

$$h = c_{\rm p} T = u + \frac{P}{\rho} = \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{P}{\rho} = \frac{1}{\gamma - 1}c^2\,, \tag{2.6}$$

$$s = c_{\rm v} \ln \frac{P}{\rho^\gamma}\,. \tag{2.7}$$

1. Un fluide polytropique est un gaz parfait dont la chaleur massique ne dépend pas de la température.
2. Pour l'instant, nous ignorons volontairement l'énergie interne non thermique du gaz (excitation des niveaux des atomes, molécules et ions). Cette énergie est amenée à être rayonnée par le gaz (*cf.* § 2.5.2).
3. Les grandeurs ρu, ρh, et ρs sont respectivement l'énergie interne thermique, l'enthalpie et l'entropie par unité de volume de fluide.

Grandeurs physiques conservées à travers la surface de discontinuité

On munit la surface de discontinuité d'une repère $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$, le vecteur $\mathbf{e}_z$ étant normal à la surface de discontinuité et dirigé dans le sens de l'écoulement du gaz. Dans le référentiel où la surface de discontinuité est au repos, le fluide a une vitesse $\mathbf{v} = v_x\mathbf{e}_x + v_y\mathbf{e}_y + v_z\mathbf{e}_z$ de module v. Le modèle est 1D selon $\mathbf{e}_z$: $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$.

La surface de discontinuité étant supposée infiniment fine, elle ne peut accumuler ni matière, ni impulsion, ni énergie. Ces grandeurs physiques doivent donc être conservées à travers la surface de discontinuité [1] Les lois fondamentales régissant l'écoulement à travers la surface de discontinuité sont :

- la conservation de la matière (*équation de continuité*)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\rho v_z\right) = 0\,, \tag{2.8}$$

- la conservation de l'impulsion (3 équations indépendantes)

$$\frac{\partial(\rho\,\mathbf{v})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\rho v_z\,\mathbf{v} + P\,\mathbf{e}_z\right) = \mathbf{0}\,, \tag{2.9}$$

- la conservation de l'énergie [2] (l'écoulement est supposé adiabatique)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\left(\frac{v^2}{2} + u\right)\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\rho v_z\left(\frac{v^2}{2} + h\right)\right) = 0\,. \tag{2.10}$$

Relations de saut de Rankine-Hugoniot

Si l'écoulement est stationnaire ($\partial/\partial t = 0$), alors ces 5 équations de conservation se simplifient :

$$\rho v_z = \mathrm{C^{te}}\,, \tag{2.11}$$

$$\rho v_z\,\mathbf{v} + P\,\mathbf{e}_z = \mathrm{C^{te}}\,, \tag{2.12}$$

$$\left(\rho\left(\frac{v^2}{2} + u\right) + P\right) v_z = \mathrm{C^{te}}\,. \tag{2.13}$$

Dans la suite de l'exposé, nous nous limitons aux écoulements stationnaires. Deux cas peuvent se présenter :

1. Il n'y a pas d'écoulement à travers la surface de discontinuité ($v_z = 0$). L'écoulement se fait parallèlement à cette surface. On parle de discontinuité tangentielle ou de discontinuité de contact.

1. L'énergie est conservée si les pertes d'énergie par chaleur (rayonnement, conduction et convection) sont négligeables.

2. Précisons qu'en raison du travail des forces de pression exercées sur tout élément fluide dans un écoulement, ce n'est pas le flux de son énergie totale $\rho(u + v^2/2)$ qui est conservé en régime stationnaire, mais le flux de son *enthalpie* totale $\rho(h + v^2/2)$.

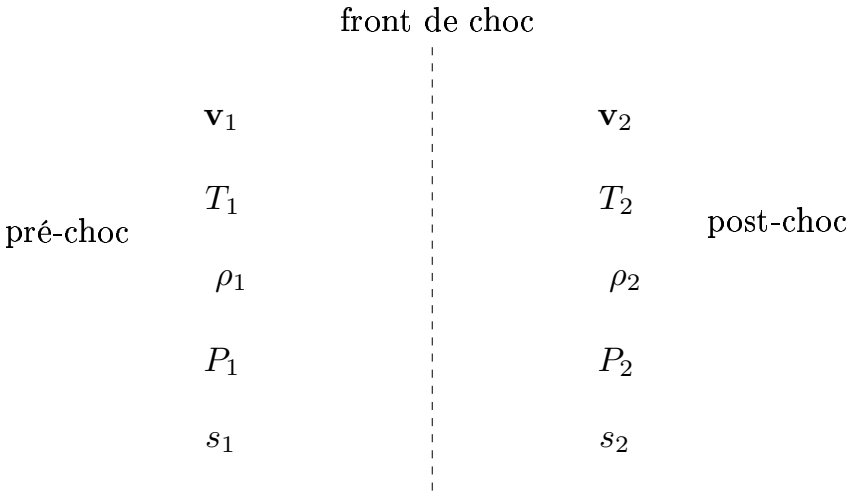


FIGURE 2.9 – Grandeurs physiques des deux milieux situés de part et d'autre d'une surface de discontinuité. De haut en bas, la vitesse v dans le référentiel où la discontinuité est au repos, la température, la masse par unité de volume, la pression et l'entropie par unité de masse.

2. Le gaz s'écoule à travers la surface de discontinuité ($v_z \neq 0$). La conservation de l'impulsion (Eq. (2.12)) impose alors la continuité des composantes tangentielles v_x et v_y de la vitesse à la traversée de la surface de discontinuité. Il est donc possible, sans rien changer à la généralité de notre étude, d'effectuer un changement de référentiel qui annule toutes les vitesses tangentielles du fluide. On se place alors dans le cadre d'un choc où l'écoulement est transverse.

2.4 Discontinuité tangentielle ou discontinuité de contact

2.4.1 Egalité des pressions

Si il n'y a pas d'écoulement à travers la surface de discontinuité ($v_z = 0$), les 5 équations de conservation se réduisent à une seule :

$$P_1 = P_2 \qquad \Leftrightarrow \qquad \rho_1 T_1 = \rho_2 T_2 \,. \tag{2.14}$$

Les indices 1 et 2 désignent les grandeurs physiques de part et d'autre de la discontinuité (Fig. 2.9). Les fluides séparés par une discontinuité de contact sont donc à la même pression [1]. Aucune contrainte n'est imposée sur la densité de masse ρ et sur la température T des deux fluides pris séparement, mais seulement sur leur produit ρT proportionnel à la pression.

Phase	Volume	n (cm^{-3})	T (K)	Masse	Hydrogène
HIM (chaude)	60-70 %	0,0065	$\sim 10^6$	$\sim$ 0,1 %	H^+
WIM (tiède)	30-40 %	0,2 - 0,5	6.10^3 - 10^4	$\sim$ 10 %	H, H^+
CNM (froide)	2 %	50-100	20-50	$\sim$ 90 %	H

TABLE 2.1 – Caractéristiques des 3 phases du modèle de McKee & Ostriker (1977). Les intervalles en température et en densité des phases sont extraites de la table 1 de Ferrière (2001). La phase chaude et très ténue (HIM) occupe la majeure partie du volume du milieu interstellaire, mais ne contient qu'une infime fraction de la masse totale du milieu interstellaire. La phase froide (CNM), qui comprend les nuages diffus et les nuages moléculaires, contient l'essentiel de la masse du milieu interstellaire dans un volume très restreint. Ces phases sont très approximativement en équilibre de pression. Des échanges continuels de matière s'effectuent entre ces 3 phases par développement d'instabilités thermiques, sous l'action des vents et des rayonnements stellaires, ou lors des explosions de supernovæ.

2.4.2 Discontinuité de l'entropie

La variation d'entropie à travers une discontinuité de contact est

$$s_2 - s_1 = c_\mathrm{p} \ln \frac{\rho_1}{\rho_2} \neq 0\,. \tag{2.15}$$

Une discontinuité de contact sépare deux milieux d'entropies différentes. Le milieu à plus forte température (et donc à plus faible densité) est donc également le milieu où l'entropie est la plus élevée. A titre d'illustration, le tableau 2.1 présente les caractéristiques physiques des différentes phases du milieu interstellaire. Ces phases sont approximativement en équilibre de pression tout en étant à des températures et densités différentes. Des discontinuités de contact se forment également, sous certaines conditions, quand un choc se propage dans un milieu inhomogène (*cf.* Section 2.6).

2.4.3 Discontinuité des vitesses tangentielles

Si $v_z = 0$, la conservation de l'impulsion (Eq. (2.12)) n'impose aucune condition sur les vitesses tangentielles v_x et v_y des fluides situés de part et d'autre de la discontinuité. La discontinuité de contact séparant deux phases peut donc être une zone de cisaillement des vitesses, propice au développement d'instabilités et donc au mélange progressif des deux phases (*cf.* § 2.7.5).

2.5 Chocs hydrodynamiques stationnaires transverses

Dans un choc transverse, l'écoulement du fluide est unidimensionnel et perpendiculaire à la surface de discontinuité. On note simplement v la vitesse du fluide selon la direction $\mathbf{e}_z$ dans le référentiel de la discontinuité. L'écoulement supersonique est principalement caractérisé

1. Un tel modèle ignore l'existence d'une pression liée à la turbulence.

par son nombre de Mach M, rapport de la vitesse de l'écoulement à la vitesse du son dans l'écoulement.

$$M = \frac{v}{c} \,. \tag{2.16}$$

2.5.1 Choc adiabatique

Le choc est adiabatique s'il n'échange pas de chaleur avec son environnement. Il reste cependant par nature irréversible. La conservation de la matière, de l'impulsion et de l'énergie au travers de la surface de discontinuité impose les trois relations suivantes dites *relations de saut de Rankine-Hugoniot* [1] (*cf.* § 2.3) :

$$\rho_1 v_1 = \rho_2 v_2 \,, \tag{2.17}$$

$$\rho_1 v_1^2 + P_1 = \rho_2 v_2^2 + P_2 \,, \tag{2.18}$$

$$v_1 \left(\rho_1 \frac{v_1^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma - 1} P_1 \right) = v_2 \left(\rho_2 \frac{v_2^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma - 1} P_2 \right) \,. \tag{2.19}$$

Ces relations sont valables quelles que soient les distances des points 1 et 2 à la surface de discontinuité. Dans la suite, le point 1 désigne les conditions uniformes du milieu pré-choc, et le point 2 les conditions en un certain point du milieu post-choc. On prendra $\gamma = 5/3$ pour un gaz atomique et $\gamma = 7/5$ pour un gaz moléculaire.

La conservation de l'impulsion peut être comprise comme une conservation de la pression totale (*ram pressure* ou flux de quantité de mouvement), somme de la pression cinétique ρv^2 et de la pression thermique P. La conservation du flux d'énergie peut être ramenée à la conservation de l'énergie par unité de masse en utilisant l'équation (2.17) de conservation de la masse :

$$\frac{v_1^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{P_1}{\rho_1} = \frac{v_2^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{P_2}{\rho_2} \,. \tag{2.20}$$

Ce système de 3 équations n'a que deux types de solutions :

1. une solution triviale où les grandeurs physiques ne varient pas à travers la surface de discontinuité,
2. une solution discontinue correspondant à la propagation d'une onde de choc, le milieu 1 état supersonique ($M_1 > 1$) et le milieu 2 subsonique ($M_2 < 1$) dans le référentiel du front de choc.

A partir de ces équations de conservation, on peut exprimer les caractéristiques physiques de l'écoulement pré-choc et de l'écoulement post-choc au point 2 :

1. soit en fonction des pressions pré-choc et post-choc P_1 et P_2 (Landau & Lifshitz, 1959,

1. Ces équations sont applicables aux chocs dont l'âge est inférieur au temps caractéristique de refroidissement du gaz par émission radiative. Le gaz n'ayant pas eu encore le temps de se refroidir de manière significative par rayonnement, on peut considérer son écoulement comme adiabatique en première approximation (*cf.* § 2.5.2).

§ 89) :

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{(\gamma-1)P_1 + (\gamma+1)P_2}{(\gamma+1)P_1 + (\gamma-1)P_2}\,, \tag{2.21}$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{\mu_2}{\mu_1}\frac{P_2}{P_1}\left(\frac{(\gamma+1)P_1 + (\gamma-1)P_2}{(\gamma-1)P_1 + (\gamma+1)P_2}\right)\,, \tag{2.22}$$

$$v_1 = \sqrt{\frac{(\gamma-1)P_1 + (\gamma+1)P_2}{2\rho_1}} = V_\mathrm{s}\,, \tag{2.23}$$

$$v_2 = \frac{(\gamma+1)P_1 + (\gamma-1)P_2}{\sqrt{2\rho_1\left[(\gamma-1)P_1 + (\gamma+1)P_2\right]}}\,, \tag{2.24}$$

$$M_\mathrm{s} = \sqrt{\frac{(\gamma-1)P_1 + (\gamma+1)P_2}{2\gamma P_1}} = M_1\,, \tag{2.25}$$

$$M_2 = \sqrt{\frac{(\gamma+1)P_1 + (\gamma-1)P_2}{2\gamma P_2}}\,. \tag{2.26}$$

Le nombre de Mach d'un choc adiabatique est donc uniquement déterminé par les pressions P_1 et P_2 de part et d'autre de la surface de discontinuité, ce qui, pour un gaz atomique ($\gamma = 5/3$), nous donne :

$$M_\mathrm{s} = \sqrt{\frac{P_1 + 4P_2}{5P_1}}\,. \tag{2.27}$$

2. soit en fonction du nombre de Mach du choc $M_\mathrm{s} = M_1$ (Landau & Lifshitz, 1959, § 89) :

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{2\gamma M_\mathrm{s}^2 - (\gamma-1)}{(\gamma+1)}\,, \tag{2.28}$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{(\gamma+1)M_\mathrm{s}^2}{(\gamma-1)M_\mathrm{s}^2 + 2}\,, \tag{2.29}$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{\mu_2}{\mu_1}\frac{\left[2\gamma M_\mathrm{s}^2 - (\gamma-1)\right]\left[(\gamma-1)\,M_\mathrm{s}^2 + 2\right]}{(\gamma+1)^2\,M_\mathrm{s}^2}\,, \tag{2.30}$$

$$M_2 = \sqrt{\frac{(\gamma-1)M_\mathrm{s}^2 + 2}{2\gamma M_\mathrm{s}^2 - (\gamma-1)}}\,. \tag{2.31}$$

Cas d'un choc adiabatique fort

Les relations de saut de Rankine-Hugoniot se simplifient dans le cas d'un choc fort, c'est-à-dire quand $M_\mathrm{s} \gg 1$ ou de manière équivalente $P_2 \gg P_1$:

$$\rho_2 = \left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1}\right)\rho_1\,, \tag{2.32}$$

$$V_\mathrm{s} = \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}\frac{P_2}{\rho_1}} = v_1\,, \tag{2.33}$$

$$v_2 = \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1}\right)V_\mathrm{s}\,, \tag{2.34}$$

$$= \sqrt{\frac{(\gamma-1)^2}{2(\gamma+1)}\frac{P_2}{\rho_1}}\,, \tag{2.35}$$

$$T_2 = \frac{2(\gamma-1)}{(\gamma+1)^2}\frac{\mu_2 V_\mathrm{s}^2}{k}\,, \tag{2.36}$$

$$= \frac{\gamma-1}{\gamma+1}\frac{P_2}{P_1}\frac{\mu_2}{\mu_1}T_1\,, \tag{2.37}$$

$$P_2 = \frac{2\gamma}{\gamma+1}M_\mathrm{s}^2 P_1\,. \tag{2.38}$$

Pour un gaz atomique ($\gamma = 5/3$) :

$$\rho_2 = 4\rho_1\,, \tag{2.39}$$

$$v_2 = \frac{1}{4}V_\mathrm{s}\,, \tag{2.40}$$

$$T_2 = \frac{3}{16}\frac{\mu_2 V_\mathrm{s}^2}{k}\,, \tag{2.41}$$

$$P_2 = \frac{5}{4}M_\mathrm{s}^2\,P_1 = \frac{3}{4}\rho_1 V_\mathrm{s}^2\,. \tag{2.42}$$

Facteur de compression du gaz La compression adiabatique du gaz est maximale pour un choc fort et ne peut dépasser un facteur 4 pour un gaz atomique.

Accélération du gaz choqué Dans le référentiel du front de choc, le gaz apparaît freiné (vitesse divisée par 4) par le choc, et non accéléré. Ce n'est bien sûr qu'une question de référentiel. Dans le référentiel du gaz pré-choc, le gaz est accéléré à la vitesse :

$$\tilde{v}_2 = V_\mathrm{s} - v_2 = \frac{3}{4}V_\mathrm{s}\,. \tag{2.43}$$

Dissipation de l'énergie cinétique incidente du gaz pré-choc La violence du choc porte le gaz à une très haute température, indépendante de la densité du milieu pré-choc [1].

1. Les hautes températures atteintes dans le choc justifieraient à elles seules de ne pas négliger l'état d'ionisation du gaz. Cependant, l'ionisation du gaz a une influence limitée dans des chocs adiabatiques dénués de champ magnétique et nous la négligeons ici pour des raisons de simplicité. A l'inverse, la connaissance de l'état d'ionisation du gaz se révélera essentielle pour les chocs magnétohydrodynamiques (*cf.* chapitre 3).

L'énergie interne par unité de masse du gaz a donc beaucoup augmenté :

$$u = \frac{1}{\gamma - 1}\frac{P_2}{\rho_2} = \frac{9}{32}V_\mathrm{s}^2 \,. \tag{2.44}$$

Dans le référentiel du front de choc, le gaz a perdu en traversant le front de choc les 15/16 de l'énergie cinétique qu'il avait dans le milieu pré-choc. Les $6/32\,V_\mathrm{s}^2$ qui semblent manquer pour assurer la conservation de l'énergie ont en fait été consommés par le travail des forces de pression du gaz freiné, lors de sa mise à l'équilibre de pression avec le gaz post-choc. Nous retrouvons ici le fait que c'est le flux d'enthalpie et non le flux d'énergie qui est conservé à travers la surface de discontinuité.

Qu'est-ce qui physiquement accélère, comprime et chauffe le gaz ?

Si l'on abandonne le référentiel du front de choc pour se placer dans le référentiel du gaz pré-choc, les processus physiques à l'œuvre dans l'accélération et le chauffage du gaz choqué apparaissent plus clairement car le gaz pré-choc a initialement, dans ce référentiel, une énergie cinétique nulle et une énergie interne négligeable [1]. L'énergie qu'il va acquérir lui est donc entièrement fournie par le choc.

Lors de sa traversée du front de choc, tout élément fluide est :

- comprimé car sa pression interne initiale P_1 est plus faible que la pression P_2 du gaz qui va l'entourer dans le milieu post-choc,
- accéléré car la force de pression P_2 exercée sur sa face avale vis à vis de l'écoulement est supérieure à la pression P_1 exercée sur sa face amont,
- chauffé par le travail de compression des forces de pression exercées par le gaz post-choc.

L'impulsion et l'énergie nécessaires à l'accélération du gaz choqué sont fournies par les forces de pression présentes immédiatement derrière le front de choc, et donc en dernier ressort par le piston.

Entropie de part et d'autre du front de choc

Un choc adiabatique est un mécanisme physique irréversible qui assure une dissipation efficace de l'énergie cinétique du milieu pré-choc. La variation d'entropie à travers la discontinuité par unité de masse du fluide a pour expression (Zeldovich & Raizer, 1966, § 15) :

$$s_2 - s_1 = c_\mathrm{v} \ln\left[\frac{P_2}{P_1}\left(\frac{(\gamma+1)+(\gamma-1)P_2/P_1}{(\gamma-1)+(\gamma+1)P_2/P_1}\right)^\gamma\right]. \tag{2.45}$$

C'est une fonction positive de P_2/P_1 dès que $P_2 > P_1$, c'est-à-dire dès qu'un choc peut se former. Il est remarquable que la variation d'entropie à travers le front de choc et la fraction d'énergie qui y est dissipée ne dépendent pas des mécanismes microscopiques à l'œuvre dans le front de choc, mais uniquement des lois de conservation de la matière, de l'impulsion et de l'énergie.

1. Dans ce référentiel, le gaz choqué augmente à la fois son énergie cinétique et son énergie interne : l'énergie cinétique par unité de masse $\tilde{v}_2^2/2$ acquise par le gaz choqué est égale à son énergie interne par unité de masse $9/32V_\mathrm{s}^2$.

Largeur du front de choc

La largeur du front de choc (c'est-à-dire la distance sur laquelle cette dissipation d'énergie se réalise) dépend, elle, de la viscosité et de la conductibilité thermique du gaz. L'étude de la largeur du front de choc ne relève pas de la dynamique des gaz mais de la cinétique des gaz. On montre que la largeur du front d'un choc hydrodynamique fort est de l'ordre de quelques libres parcours moyens des particules du gaz, et tend à augmenter quand le nombre de Mach du choc diminue. Ce libre parcours moyen peut être très élevé dans des milieux très peu denses. Dans le milieu interplanétaire ($n_{\mathrm{H}} \sim 1\ \mathrm{cm}^{-3}$), il est plus élevé que la distance Terre-Soleil. Un modèle de choc hydrodynamique se révèle donc incapable d'expliquer l'existence d'une onde de choc devant la magnétosphère terrestre face au vent solaire. Seuls les modèles d'ondes de choc magnétohydrodynamiques non-collisionnelles peuvent l'expliquer (*cf.* chapitre 3, § 3.7.1).

Qu'est-ce qui conduit l'onde de choc ?

A regarder les relations de saut de Rankine-Hugoniot d'un choc stationnaire, nous risquons de croire que la pression post-choc $P_2 \gg P_1$ n'est qu'un *effet* parmi d'autres du passage du choc, alors qu'elle est en fait la *cause* unique qui donne naissance et qui conduit l'onde de choc [1]. Cette variation de pression est générée par le mouvement d'un piston dont le milieu post-choc transmet les variations de pression.

La physique galactique et extragalactique offre de multiples exemples de pistons astrophysiques :

- les éjecta d'une supernova, lancés à plusieurs milliers de $\mathrm{km\,s^{-1}}$ en direction du milieu interstellaire (*cf.* § 2.7.2) ;
- les jets collimatés supersoniques (plusieurs centaines de $\mathrm{km\,s^{-1}}$) émis par les étoiles en formations (*cf.* § 2.7.4 et la figure 2.19) ;
- les flots supersoniques (plusieurs dizaines de $\mathrm{km\,s^{-1}}$) émis par ces mêmes étoiles ;
- un nuage interstellaire entrant en collision avec un autre nuage ;
- la forte pression du gaz chaud et ionisé des régions H II, séparé du milieu neutre par un front d'ionisation ;
- la collision entre les gaz chauds de deux amas de galaxies ;
- les puissants jets, émis par les quasars ou les noyaux actifs de galaxies, qui traversent le gaz inter-amas.

Evolution de l'onde de choc : non stationnarité

Le piston fournit un travail de compression et de mise en mouvement du gaz post-choc. Il doit donc ralentir s'il n'est pas lui-même continuellement alimenté en énergie et en quantité de mouvement. Si le piston ralentit, la pression du gaz au niveau du piston (loin du front de choc) diminue. Cette perturbation de pression se propage vers le front de choc sous forme d'une onde de raréfaction qui fait progressivement baisser la pression de tout le gaz post-choc [2]. Quand cette baisse de pression atteint le gaz situé immédiatement en aval du front

1. C'est l'hypothèse de stationnarité du choc qui tend à nous faire inverser cause et effet.
2. Rappelons que le gaz choqué est subsonique dans le référentiel du front de choc et qu'une perturbation de pression issue du piston est donc capable de rattraper le front de choc.

de choc, l'onde de choc n'a plus la pression suffisante pour continuer de se propager à la même vitesse (Eq. (2.27)). L'onde de choc ralentit et ne peut plus être dite stationnaire. Cette question est étudiée en détail dans l'article de McKee et al. (1987) dans le contexte des ondes de choc générées par les explosions de supernovæ (voir également à ce sujet le paragraphe 2.7.2).

2.5.2 Choc radiatif

Nous avons jusqu'à présent modélisé uniquement des chocs adiabatiques. Ce modèle est applicable aux chocs réellement existants dont l'âge est très inférieur à leur temps caractéristique de refroidissement, c'est-à-dire essentiellement aux chocs très rapides ($V_s > 200$ km s^{-1}) qui se propagent dans les milieux ténus (McKee & Hollenbach, 1980). Nous allons maintenant considérer des chocs pour lesquels la vitesse, l'âge, ou la densité de milieu pré-choc sont tels que le gaz choqué a eu le temps de se refroidir de manière significative : on parle alors de chocs radiatifs.

Bilan d'énergie d'un gaz choqué

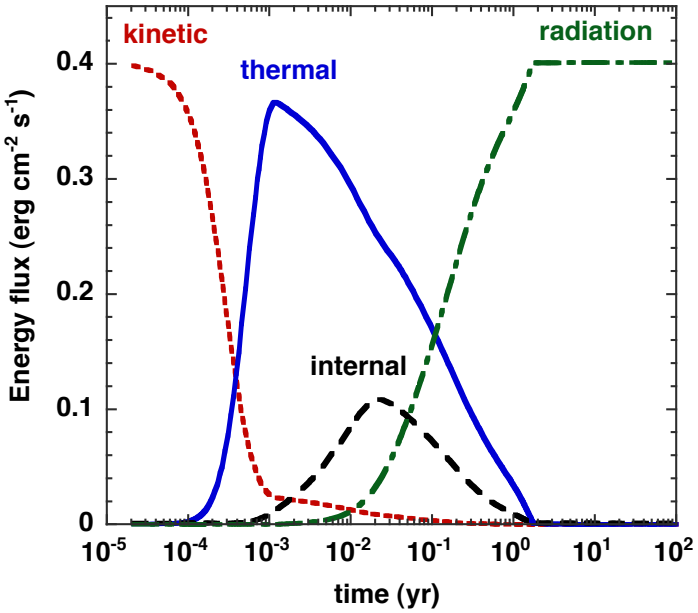


FIGURE 2.10 – Contributions des énergies cinétique, thermique, interne et radiative au flux d'énergie total en fonction du temps d'écoulement dans un choc de 15 km s^{-1} (non dissociatif) se propageant dans un nuage de densité $n_H = 10^5$ cm^{-3} sans champ magnétique. Extrait de Flower et al. (2003).

Dans le référentiel du front de choc, l'énergie du gaz pré-choc se présente sous forme d'énergie cinétique pure. La traversée du front de choc dissipe les 15/16 (Eq. (2.42)) de cette énergie cinétique ordonnée en énergie thermique désordonnée (Fig. 2.10). La phase adiabatique des chocs J s'arrête là, à $t \sim 10^{-3}$ an (Fig. 2.10). Pendant la phase radiative qui suit, les collisions très énergétiques entre les particules du gaz peuplent les états excités

des différentes espèces chimiques du gaz, augmentant son énergie interne non thermique. Le retour de ces espèces à leur état fondamental se fait par transition radiative a une longueur d'onde qui dépend de la transition considérée. Au final, quasiment toute l'énergie cinétique initiale du milieu pré-choc a été transformée en rayonnement [1].

Longueur d'un choc

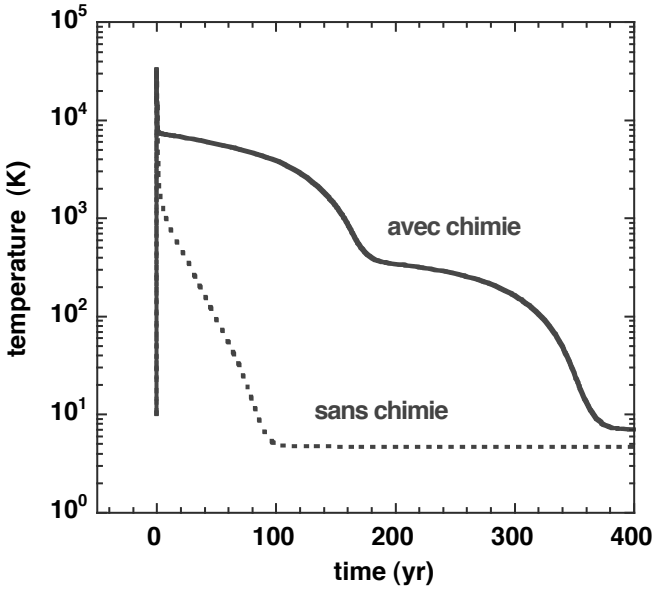


FIGURE 2.11 – Longueur d'un choc se propageant à 25 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ dans un nuage de densité initiale $n_{\mathrm{H}} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$ avec ou sans prise en compte des réactions chimiques en phase gazeuse et à la surface des poussières. Le choc avec chimie est significativement plus long que le choc sans chimie du fait de la dissociation collisionnelle de H_2 qui fait disparaître le principal refroidisseur du gaz.

La longueur d'un choc est déterminée par le taux d'émission radiative du gaz, qui dépend de l'abondance des espèces chimiques refroidisseuses. Le dihydrogène est le principal refroidisseur du gaz aux températures où il n'est pas dissocié. Un choc est dit dissociatif quand la dissociation de ses molécules (essentiellement H_2) est significative au pic du choc. La figure 2.11 montre comment la prise en compte de la dissociation de H_2 augmente significativement le temps de refroidissement d'un choc dissociatif. Plus généralement, la modélisation de la chimie en phase gazeuse ou à la surface des poussières est un élément important de la résolution de la structure des chocs.

1. Dans le cas où un champ magnétique transverse est présent dans le milieu pré-choc (*cf.* chapitre 3), une part de l'énergie cinétique incidente du choc est conservée dans le nuage après refroidissement du gaz, sous forme d'énergie magnétique.

Refroidisseurs principaux dans les chocs

Le panneau supérieur de la figure 2.12 montre le profil de température d'un choc dissociatif, ainsi que l'évolution des abondances de H, H_2 et H^+ dans le choc. On voit que le choc est suffisamment rapide pour dissocier H_2 (énergie de dissociation 4,7 eV), mais pas assez pour ioniser significativement H (énergie d'ionisation 13.6 eV).

Un gaz porté à une température supérieure à 10^6 K se refroidit par l'émission de ses poussières chauffées par le gaz. Cette énergie prélevée au gaz est réémise sous forme de rayonnement infrarouge qui peut s'échapper du nuage. Dès que la température tombe en dessous de 10^6 K, le gaz se refroidit par émission radiative du gaz dans les raies de recombinaison de l'hydrogène H_α et de l'oxygène[1] O II à 3726 et 3729 Å, O III à 4959-5007 Å et de l'azote ionisé une fois N II à 6548-6584 Å (Raymond, 1979). Pour T $\sim$ 8000 K (Fig. 2.12), le refroidissement est dominé par la raie métastable de l'oxygène atomique à 6300 Å puis autour de 1000 K par sa raie de structure fine à 63 μm. Les autres refroidisseurs importants sont C I, N I, C II, N II, S II et Fe II. Une fois que la température a suffisamment baissé pour que le dihydrogène formé sur les grains ne soit plus dissocié par collisions, H_2 devient le principal refroidisseur. La formation de H_2 à la surface des poussières libère une énergie de 4,7 eV par molécule formée, dont une part seulement se retrouve sous forme d'énergie cinétique de la molécule (et donc d'énergie thermique du gaz)[2]. Cette libération d'énergie thermique ralentit le refroidissement du gaz (Fig. 2.12 à $t \simeq 200$ ans), créant un plateau de température (appelé *genou*) à quelques centaines de degrés K. A plus basse température, l'oxygène disparaît pour être transformé en CO, H_2O et OH qui deviennent les refroidisseurs dominants. Le lecteur intéressé pourra consulter avec profit la revue de McKee & Hollenbach (1980) sur les chocs interstellaires, en particulier la section 5 sur les aspects observationnels liés au refroidissement des chocs radiatifs.

Refroidissement isochore et refroidissement isobare d'un gaz choqué

L'émission radiative refroidit le gaz. L'évolution thermodynamique du gaz peut schématiquement suivre deux transformations de natures différentes. Si le temps $t = D/c$ (D le diamètre du nuage) mis par le son pour traverser le nuage est inférieur à son temps caractéristique de refroidissement, alors l'égalité de pression entre le nuage et le milieu qui l'environne est assurée par les forces de pression pendant le refroidissement du gaz qui est donc *isobare*. A l'inverse, si le gaz refroidit tellement vite que les forces de pression extérieures n'ont pas le temps de comprimer le gaz refroidi, alors le refroidissement se fait à volume et densité constante, c'est-à-dire hors-équilibre de pression au niveau du nuage pris dans son ensemble. On parle alors de refroidissement *isochore*.

1. Le potentiel d'ionisation de l'oxygène est $\simeq$ 13.62 eV, légèrement supérieur à celui de l'hydrogène.
2. Dans notre modèle, un tiers de l'énergie libérée se retrouve sous forme d'énergie cinétique de la molécule H_2 et un autre tiers sous forme d'énergie interne de H_2. Le tiers restant contribue à chauffer le grain, mais n'est en fait pas comptabilisé car aucun bilan thermique des poussières n'est, pour l'instant, effectué.

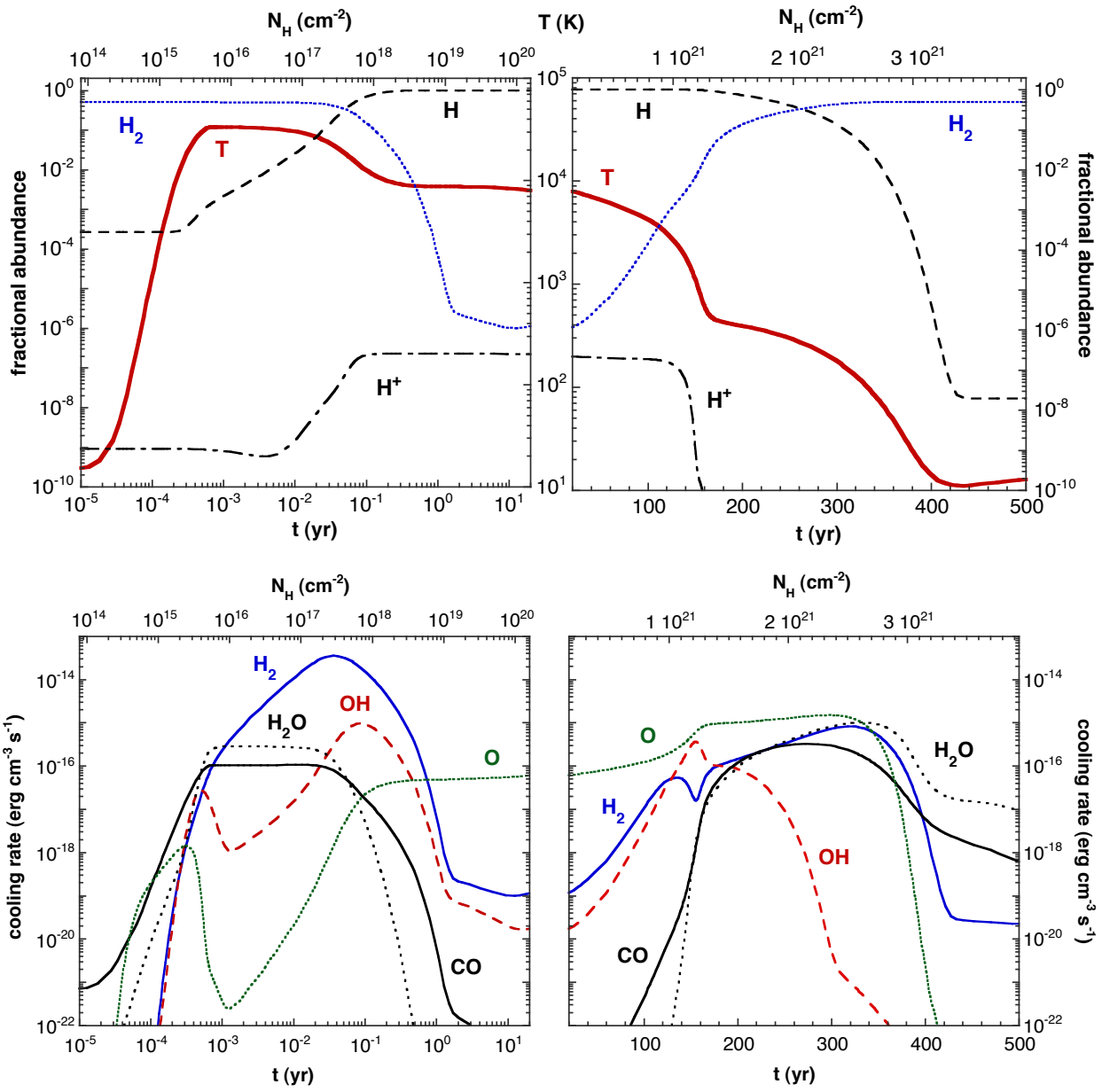


FIGURE 2.12 – (**Haut**) Profils de température et d'abondance de l'hydrogène atomique, moléculaire et ionisé en fonction du temps d'écoulement pour un choc de 25 km s^{-1} se propageant dans un nuage moléculaire de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3} sans champ magnétique. (**Bas**) Profil des taux de refroidissement des principaux refroidisseurs. L'échelle est logarithmique sur les panneaux de gauche et linéaire sur ceux de droite. Le front de choc, dont la largeur est de l'ordre de quelques libres parcours moyens, est résolu ($t \leq 10^{-3}$ an). La compression du gaz est approximativement isobare et s'arrête quand le gaz est revenu à sa température pré-choc. Le taux de compression vaut alors $\sim 10^4$. Extrait de Flower et al. (2003).

2.5.3 Ne pas confondre choc radiatif et choc à précurseur radiatif

Tous les chocs réellement existants, même *adiabatiques*, émettent du rayonnement à différentes longueurs d'ondes [1]. Ils ne sont pas pour autant dits *radiatifs*. Ce n'est que quand la température du gaz choqué a diminué de manière significative qu'on parle de choc radiatif. Un choc est donc d'abord adiabatique, puis il devient radiatif. Les chocs adiabatiques et les chocs radiatifs ne sont pas deux catégories distinctes de choc.

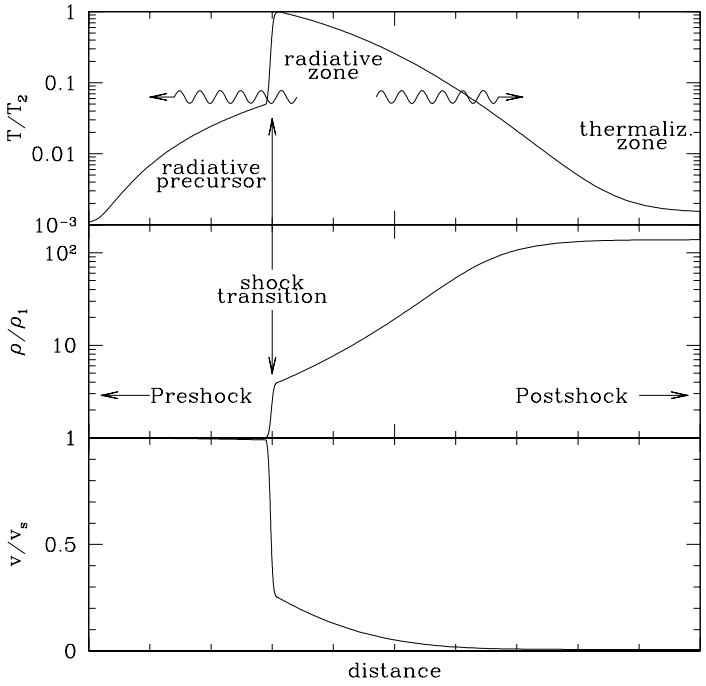


FIGURE 2.13 – Profil stationnaire d'un gaz choqué par un choc radiatif, dans le référentiel du front de choc. Le front de choc est situé à la troisième graduation en partant de la gauche, le gaz pré-choc est à sa gauche et le gaz choqué à sa droite. Dans ce référentiel, le gaz pré-choc arrive à grande vitesse par la gauche, traverse le front de choc où il est freiné (**Bas**), comprimé (**Milieu**) et chauffé (**Haut**). L'émission radiative du gaz post-choc comprime encore le gaz et génère un précurseur radiatif qui précéde le choc en chauffant et ionisant à l'avance le gaz pré-choc. Extrait de Draine & McKee (1993)

Les chocs *à précurseur radiatif* sont par contre une catégorie distincte de choc qu'il ne faut pas confondre avec les chocs radiatifs. Dans les chocs très rapides, le milieu choqué émet des rayonnements ultraviolets. Cette émission ultraviolette se propage dans toutes les directions, y compris en direction du milieu pré-choc. Elle forme dans le milieu pré-choc un précurseur radiatif qui devance le choc (Fig. 2.13). Ce précurseur chauffe, dissocie (pour $V_s \geq 90$ km s^{-1}) et ionise (pour $V_s \geq 120$ km s^{-1}) le gaz pré-choc avant qu'il soit choqué comme montré sur la figure 2.14 (Hollenbach & McKee, 1989). On parle alors de choc à *précurseur radiatif*. Les chocs à précurseur radiatifs et les chocs sans précurseur sont deux catégories distinctes de choc qui se différencient essentiellement par leur vitesse. Du point de

1. C'est par cette émission qu'ils peuvent parfois être observés.

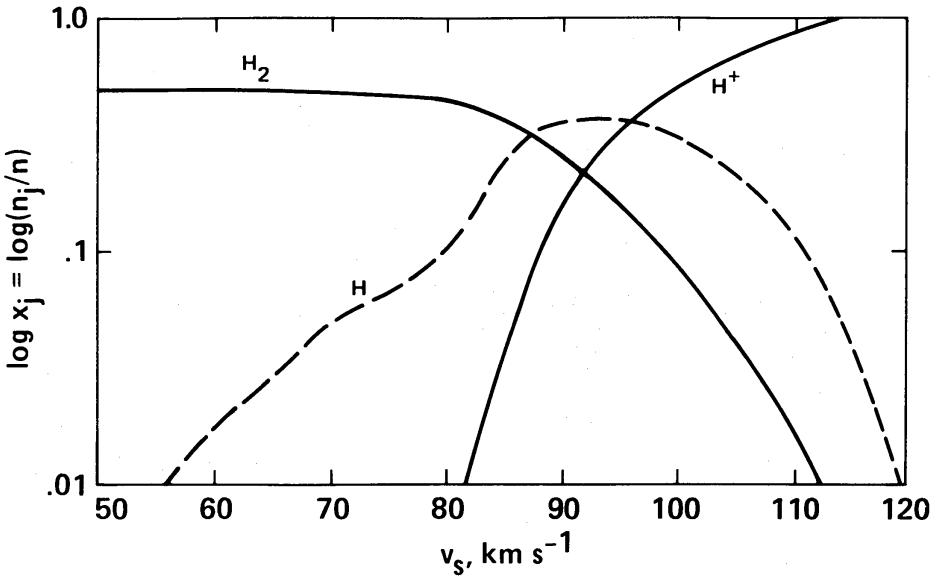


FIGURE 2.14 – Abondances fractionnelles de H, H_2 et H^+ dans le gaz pré-choc situé devant le front de choc, en fonction de la vitesse V_s de propagation du choc. Le champ de radiation émis par le choc dissocie les molécules pour $V_s \geq 90$ km s^{-1}, et ionize les atomes pour $V_s \geq 120$ km s^{-1}. Extrait de Hollenbach & McKee (1989).

vue numérique, les chocs à précurseur radiatif sont difficiles à résoudre pour deux raisons : 1) le rayonnement ultraviolet interne au choc impose d'effectuer des calculs de transfert de rayonnement pour déterminer l'état d'ionisation et d'excitation des espèces chimiques dans le choc, et 2) le choc a un effet en retour sur le milieu pré-choc dans lequel il se propage, ce qui interdit d'utiliser les méthodes classiques d'intégration des chocs qui partent d'un milieu pré-choc donné indépendant du choc.

2.5.4 Choc isotherme

Un choc isotherme est un choc radiatif dont le milieu post-choc s'est suffisamment refroidi pour retrouver sa température initiale, celle du milieu pré-choc [1]. Cela ne se produit que si l'âge du choc est très supérieur à son temps caractéristique de refroidissement par émission radiative. En pratique, cela concerne des chocs traversant un milieu pré-choc déjà chaud ($T \simeq 10\,000$ K).

Nous déplaçons maintenant notre point 2 loin de la discontinuité du front de choc, jus-

1. Le qualificatif isotherme est trompeur car il n'est normalement employé que pour une transformations thermodynamiques au cours de laquelle la température reste constante. Il serait plus juste de parler de choc *monotherme*, transformation dans laquelle seules les températures initiale et finale sont égales.

qu'au point où $T_2 = T_1$. Les équations de saut de Rankine-Hugoniot se réduisent alors à :

$$\rho_1 v_1 = \rho_2 v_2 \,, \tag{2.46}$$

$$\rho_1 v_1^2 + P_1 = \rho_2 v_2^2 + P_2 \,, \tag{2.47}$$

$$\frac{P_1}{\rho_1} = \frac{P_2}{\rho_2} \qquad (T_1 = T_2) \,. \tag{2.48}$$

Facteur de compression du gaz On montre facilement qu'un choc parvenu a son stade isotherme a comprimé très fortement le gaz post-choc :

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{v_1}{v_2} = M_\mathrm{s}^2 \,. \tag{2.49}$$

Cette énorme compression du milieu (d'un facteur 10^4 pour le choc des figures 2.10 et 2.12) est une conséquence partiellement artificielle du modèle hydrodynamique 1D : 1) un modèle unidimensionnel interdit au gaz de se détendre en se mettant à l'équilibre de pression avec le milieu qui l'environne, et 2) la compression du gaz serait également moins élevée si le nuage pré-choc était plongé dans un champ magnétique transverse non négligeable (*cf.* chapitre 3).

Du fait que les températures pré-choc et post-choc sont égales, le rapport des pressions est égal à celui des densités :

$$\frac{P_2}{P_1} = M_\mathrm{s}^2 = \frac{\rho_1 V_\mathrm{s}^2}{P_1} \,. \tag{2.50}$$

La pression du gaz post-choc n'augmente donc que très légèrement [1] pendant son refroidissement, d'un facteur 1/3. Le refroidissement du gaz post-choc peut donc raisonnablement être considéré comme *isobare* [2].

Accélération du gaz choqué Vu du référentiel pré-choc, le gaz a été quasiment accéléré à la vitesse du choc une fois le gaz revenu à sa température pré-choc :

$$\tilde{v}_2 = \left(1 - M_\mathrm{s}^{-2}\right) V_\mathrm{s} \simeq V_\mathrm{s} \,. \tag{2.51}$$

Cette accélération d'un gaz pendant la phase de refroidissement est le produit de l'augmentation concomitante de pression [3]. Une fois le refroidissement du gaz achevée, l'énergie cinétique initiale du gaz pré-choc est au final presque intégralement convertie en luminosité (*cf.* Fig. 2.10).

$$L = \dot{E} = \frac{\rho_1 V_\mathrm{s}^3}{2} - \frac{\rho_2 v_2^3}{2} = \frac{\rho_1 V_\mathrm{s}^3}{2}\left(1 - M_\mathrm{s}^{-4}\right) \simeq \frac{\rho_1 V_\mathrm{s}^3}{2} \,. \tag{2.52}$$

1. La pression du milieu post-choc pour un choc adiabatique fort, c'est-à-dire avant refroidissement du gaz est $P_2 = \frac{5}{4} M_\mathrm{s}^2 P_1 = \frac{3}{4}\rho_1 V_\mathrm{s}^2$ (Eq. (2.27)), qui est inférieure à la pression finale du choc isotherme après refroidissement. Des chocs de même vitesse se propageant dans le même milieu pré-choc sont caractérisés par des nombres de Mach $M_\mathrm{s} = V_\mathrm{s}/c_1$ différents selon qu'ils sont isothermes ($\gamma = 1$) ou adiabatiques ($\gamma = 5/3$) car la vitesse du son dépend de γ (Eq. (2.2)). Cette réserve faite, toutes les formules présentées précédemment pour les chocs adiabatiques sont applicables aux chocs isothermes en posant $\gamma = 1$.

2. Le caractère approximativement isobare du refroidissement du gaz vient du fait que l'écoulement post-choc est très subsonique ($M_2 \ll 1$) et donc que sa pression cinétique est peu importante (Dopita & Sutherland, 2003).

3. Le différentiel positif de pression entre les faces aval et amont de tout élément fluide l'accélère.

Variation d'entropie Le bilan d'entropie du gaz dans un choc isotherme est globalement négatif.

$$s_2 - s_1 = -\frac{4}{3}\, c_{\rm v} \ln M_{\rm s} < 0\,. \tag{2.53}$$

L'entropie du gaz diminue car l'augmentation d'entropie à la traversée du front de choc reste inférieure à la diminution d'entropie induite par son refroidissement ultérieur.

2.6 Propagation d'une onde de choc dans un milieu inhomogène

Le milieu interstellaire n'est pas un milieu homogène. Il a une structure auto-similaire qui peut rappeler les poupées gigognes : un milieu chaud et très tenu, dans lequel baignent des nuages moléculaires contenant des cœurs plus denses. La structuration du milieu semble se poursuivre à très petite échelle. Ces différentes phases, séparées par des discontinuités de contact, sont approximativement en équilibre de pression (*cf.* Table 2.1). Comment une onde de choc générée par l'explosion d'une supernova va-t-elle se propager à travers un milieu formé d'un fond ténu et de grumeaux plus denses ?

2.6.1 Réflexion et transmission du choc à traver un saut de densité

Nous avons vu au paragraphe 2.2.3 que la discontinuité du profil de vitesse d'un piston mis brusquement en mouvement uniforme dans une conduite de gaz était responsable de l'apparition immédiate d'une onde de choc. De manière générale, les discontinuités initiales des grandeurs physiques génèrent une et plus souvent plusieurs surfaces de discontinuités qui se propagent dans le fluide.Si les valeurs des grandeurs physiques de part et d'autre de cette discontinuité initiale satisfont les relations de Rankine-Hugoniot, alors une onde de choc unique se forme. Si elles ne les satisfont pas, la discontinuité initiale se décompose en une combinaison de plusieurs discontinuités (onde de choc, onde de raréfaction et discontinuités de contact) de manière à les satisfaire.

Quand l'onde de choc change de milieu de propagation, il peut se présenter deux cas :

1. L'onde de choc entre dans un milieu plus dense : l'onde de choc se décompose en une onde de choc réfléchie, qui remonte le flot post-choc de l'onde incidente, et une onde de choc transmise, qui se propage dans le milieu dense. La discontinuité initiale entre les deux phases perdure et est mise en mouvement.
2. L'onde de choc entre dans un milieu moins dense, ou dans un milieu en mouvement assez rapide dans la même direction que l'onde de choc : l'onde de choc se décompose en une onde réfléchie de raréfaction et une onde de choc transmise. La discontinuité de contact à l'interface des deux milieux est également mise en mouvement.

Le premier cas est présenté sur la Fig. 2.15. Les gaz des milieux post-choc réfléchi et transmis, séparés par la discontinuité de contact, sont en équilibre de pression et sont immobiles par rapport à la discontinuité de contact. Les fronts de choc réfléchi et transmis s'éloignent à vitesse constante de la discontinuité de contact. La structure globale n'est pas stationnaire mais auto-similaire, comparable en cela à celle analysée au paragraphe 2.2.3.

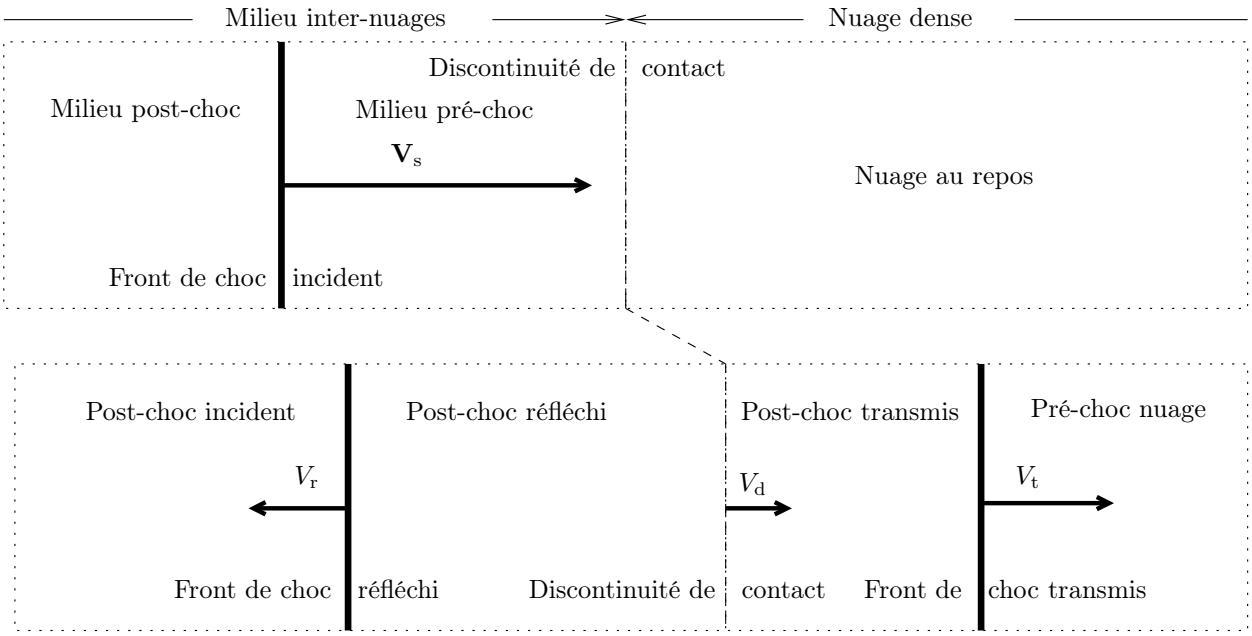


FIGURE 2.15 – Pénétration dans un nuage dense (densité de protons $n_H = n_c$) d'un choc se propageant dans un milieu inter-nuages ténu ($n_H = n_i \ll n_c$). Le choc incident est transmis dans le nuage et réfléchi dans le milieu inter-nuages en raison de l'augmentation brutale de la densité à l'interface des deux milieux. La discontinuité de contact séparant initialement les deux milieux perdure et est mise en mouvement à la vitesse V_d dans le sens de propagation du choc incident. Les milieux post-choc des chocs réfléchi et tranmis sont en équilibre de pression et se propagent à la même vitesse V_d. D'après Miesch & Zweibel (1994).

2.6.2 Un choc ralentit-il en pénétrant dans un milieu plus dense ?

La propagation d'un choc dans un milieu homogène a été étudiée par McKee & Cowie (1975) et Miesch & Zweibel (1994) pour les chocs 1D adiabatiques et isothermes (Fig. 2.15 pour un schéma général de la situation).

Piston adiabatique McKee & Cowie (1975) ont établi qu'une onde de choc *adiabatique* se propageant à vitesse V_s dans un milieu inter-nuages ténu de densité n_i ralentit à la vitesse V_t quand elle pénètre dans un nuage de densité n_c suivant la loi

$$V_t \simeq \frac{V_s}{\sqrt{\chi}}\,, \tag{2.54}$$

où $\chi = n_c/n_i > 1$ est le rapport de densité entre les deux milieux. Cette relation, qui n'est qu'approximative, correspond à une égalité des pressions cinétiques ρV^2 caractérisant les deux chocs incident et transmis.

Piston isotherme La situation est différente si l'onde de choc incidente se propageant dans le milieu inter-nuages est *isotherme*, par exemple si ce milieu est suffisamment dense pour refroidir rapidement. Ce cas est étudié en détail par Miesch & Zweibel (1994) qui

s'intéressent à l'accélération des nuages denses. Si le choc incident est suffisamment rapide (plus précisément, si $M_s \gg \sqrt{\chi}$), il ne ralentit pas en pénétrant dans le nuage plus dense [1] :

$$V_t \simeq V_s \qquad \text{si} \qquad M_s = V_s/c \gg \sqrt{\chi}\,. \tag{2.55}$$

Ce résultat étonnant s'explique comme suit : la vitesse V_t de l'onde de choc transmise dépend de la pression post-choc du choc réfléchi, qui joue ici le rôle du piston car la discontinuité de contact transmet intégralement cette pression au nuage. Le choc incident isotherme ne produit pas de pression post-choc particulièrement élevée comparée à un choc incident adiabatique (*cf.* § 2.5.4), mais il comprime beaucoup plus le gaz : un facteur M_s^2 contre un facteur 4. La pression cinétique du post-choc incident est donc beaucoup plus élevée dans le cas isotherme que dans le cas adiabatique. C'est le rôle du choc réfléchi de convertir une partie de cette importante pression cinétique ρV^2 du choc incident en une pression thermique $\rho kT/\mu$ qui fera office de piston pour le choc transmis.

Conclusion L'onde de choc incidente se propageant dans un milieu ténu ralentit fortement en pénétrant dans un nuage dense (piston adiabatique), mais ne ralentit presque plus ensuite en pénétrant dans des zones de plus en plus denses du nuage (piston isotherme) [2].

2.7 Modèles de chocs 2D et 3D

Tout le monde connait les étraves que l'on peut observer en amont des piliers de pont quand le courant d'eau est suffisamment rapide. Ce sont des ondes de choc stationnaires : elles restent toujours à la même distance du pilier. Nous allons expliquer succintement l'origine physique de ces étraves.

2.7.1 Ecoulement supersonique autour d'un solide - choc d'étrave

Considérons un solide placé dans un écoulement fluide 2D supersonique [3] (Fig. 2.16). L'écoulement étant supersonique, il ne peut être averti de la présence du solide situé en aval. L'écoulement doit cependant avoir une vitesse nulle au point d'arrêt A où la surface du solide est perpendiculaire à l'écoulement. Cette ligne d'écoulement doit donc passer d'un régime supersonique à l'arrêt, ce qui ne peut se faire qu'à travers une surface de discontinuité : c'est le choc d'étrave qui est situé devant le solide [4]. Loin du solide, cette surface de discontinuité coupe l'écoulement sous un angle proche de l'angle de Mach [5].

Ce modèle de choc d'étrave peut être comparé à notre modèle de choc 1D généré par un mouvement uniforme du piston dans la conduite de gaz (*cf.* § 2.2.3). La ligne d'écoulement qui passe par le point A présente grossièrement le même profil qu'en 1D. La zone subsonique située entre le choc d'étrave, la surface transsonique et l'objet correspond simplement au

1. McKee & Cowie (1975) trouvent la relation $V_t = V_s/2$.
2. La vitesse du choc transmis dépend de la nature (adiabatique ou isotherme) du piston (choc incident) mais très peu de celle du choc transmis.
3. Ce paragraphe suit de très près au § 122 du chapitre XIII de Landau & Lifshitz (1959).
4. Si celui-ci a un bord arrondi, *cf.* Landau & Lifshitz (1959).
5. L'angle de Mach α vérifie $\sin\alpha = c/v$ où $v > c$ est la vitesse de l'écoulement.

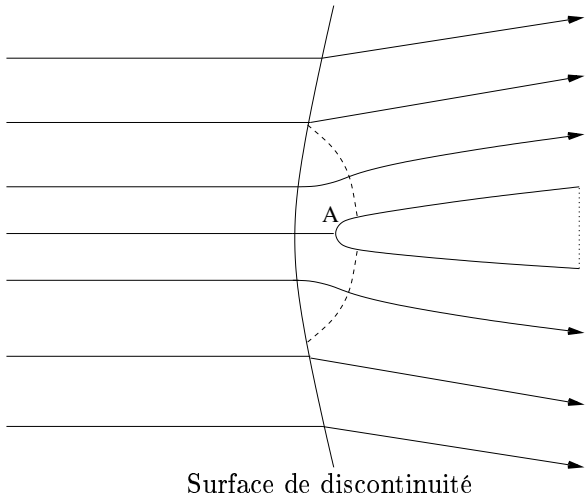


FIGURE 2.16 – Ecoulement supersonique autour d'un solide, générant une surface de discontinuité (ou choc d'étrave) à l'avant du solide. Les flèches en trait plein représentent les lignes d'écoulement. La ligne en pointillé désigne une surface transsonique. Le point A est le point d'arrêt où l'écoulement est à vitesse nulle. L'écoulement est subsonique dans le volume situé entre le choc d'étrave et la surface transsonique, et supersonique partout ailleurs. D'après Landau & Lifshitz (1959).

milieu post-choc. Cependant, le fluide ne s'accumule pas sur l'objet dans le modèle 2D mais le contourne, ce qui donne au front de choc cette forme incurvée et réduit le taux de compression du fluide derrière le choc par rapport à un modèle 1D. Sans accumulation de fluide devant le "piston", la structure du choc n'est pas auto-similaire comme en 1D mais simplement stationnaire [1].

2.7.2 Onde de choc de supernova frappant un nuage moléculaire

McKee & Cowie (1975) ont étudié l'interaction entre l'onde de choc générée par l'explosion d'une supernova et les nuages interstellaires que ce choc traverse [2]. Nous reprenons ici leur analyse. La figure 2.17 schématise cette interaction alors que l'onde de choc a déjà frappé le nuage et l'a même enveloppé et dépassé. Le choc transmis dans le nuage se propage à une vitesse réduite d'un facteur égal à la racine carrée du rapport de densité (*cf.* § 2.6.2). Le choc réfléchi s'éloigne du nuage par la gauche en direction de la supernova. Un écoulement stationnaire s'établit rapidement autour du nuage sur un temps caractéristique égal au temps mis par le son pour faire le tour du nuage par le milieu inter-nuages. Si cet écoulement est supersonique par rapport au nuage frappé, le choc réfléchi se transforme en un choc d'étrave stationnaire similaire à celui du paragraphe précédent (cas présenté sur la figure 2.17). Sinon, le choc réfléchi disparait rapidement et aucun choc d'étrave ne se forme.

1. Le choc d'étrave est simplement le choc réfléchi 1D auto-similaire du paragraphe 2.6.1, transformé en choc stationnaire par la structure 2D du milieu qui permet, en évacuant le fluide par les côtés de l'objet, de maintenir un flot supersonique stationnaire autour du piston.

2. Pour une revue exhaustive de la physique des chocs de supernovæ dans un milieu inhomogène, consulter Ostriker & McKee (1988).

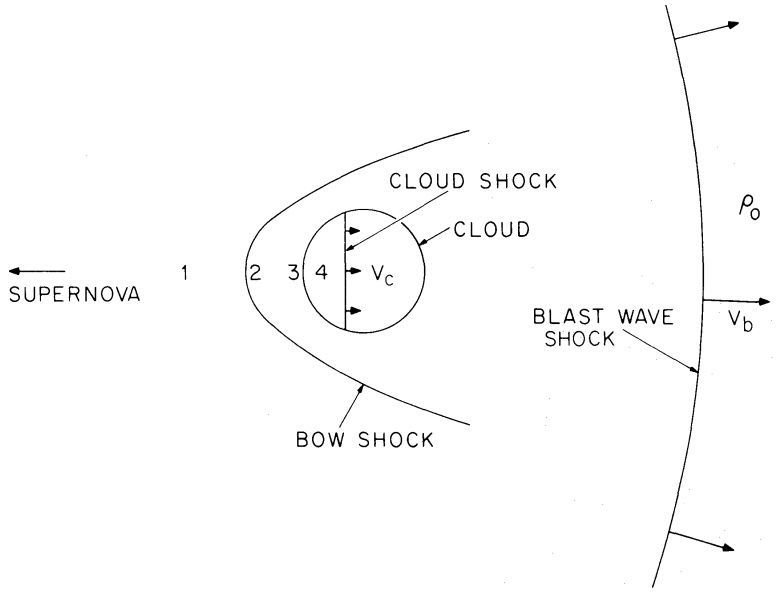


FIGURE 2.17 – Schéma de l'interaction avec un nuage interstellaire sphérique d'une onde de choc générée par l'explosion d'une supernova. L'écoulement post-choc de l'onde de choc incidente est supersonique relativement au nuage frappé, et forme un choc d'étrave à l'avant du nuage. Extrait de (McKee & Cowie, 1975).

2.7.3 Accélération des nuages interstellaires par les ondes de choc

Les ondes de choc qui se propagent dans le milieu inter-nuages sont probablement à l'origine des dispersions de vitesse observées de ces nuages. L'accélération des nuages peut se décomposer en deux phases (McKee et al., 1978).

1. Accélération brutale et rapide par le choc transmis dans le nuage. Le temps caractéristique de cette phase est le temps D/V_t de traversée du nuage par l'onde de choc transmise.
2. Accélération progressive d'entraînement du nuage choqué par le milieu post-choc inter-nuages. Le milieu post-choc inter-nuages s'écoule en effet à vitesse supersonique autour du nuage, écoulement à l'origine du choc d'étrave à l'avant du nuage (*cf.* Fig. 2.17). Plus la densité de colonne du nuage est importante, moins cette phase est efficace. Cette phase d'accélération étant continuelle, l'accélération imprimée au nuage dépend également du temps écoulé depuis l'impact du choc incident sur le nuage.

Dans ce scénario simplifié, nous avons fait abstraction d'une possible fragmentation ou destruction des nuages par les chocs. Cette possibilité est étudiée au paragraphe 2.7.5.

2.7.4 Choc d'étrave généré par un jet frappant un nuage

Les jets émis par les étoiles en formation génèrent des ondes de choc dans les nuages qui entourent l'étoile. L'interaction entre le jet et le milieu environnant est schématisé sur la figure 2.18. On y retrouve le mécanisme présenté au paragraphe 2.6 pour la propagation d'un choc 1D dans un milieu inhomogène. Les deux milieux d'entropie différentes sont ici le

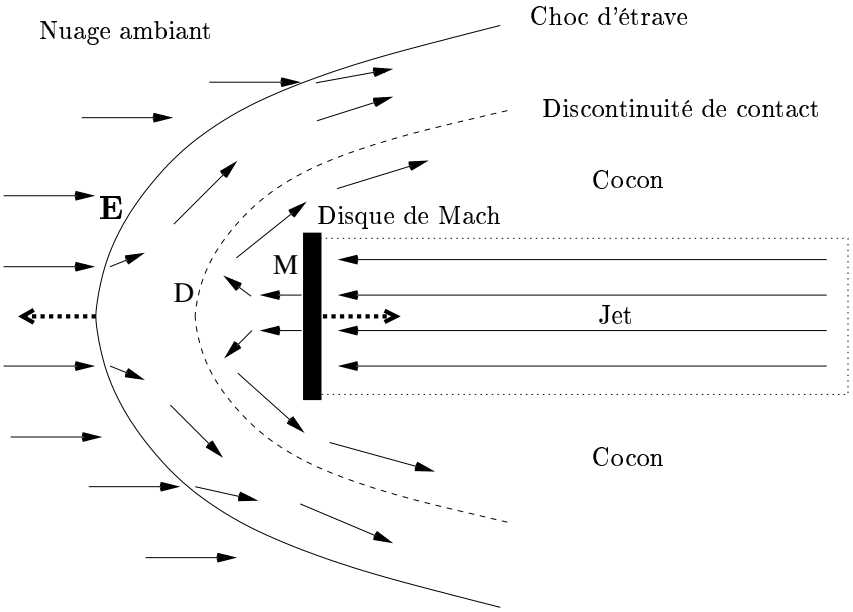


FIGURE 2.18 – Schéma de la structure interne du choc d'étrave généré par un jet supersonique, dans le référentiel où la surface de discontinuité qui sépare le gaz issu du jet du gaz issu du nuage ambiant est immobile. Les flèches pleines font référence à l'écoulement du gaz, les flèches en pointillés au mouvement des différentes surfaces de discontinuité. Le choc d'étrave (E), qui se déplace vers la gauche, est le choc transmis dans le nuage ambiant. Le disque de Mach (M), qui remonte le jet vers la droite, est le choc réfléchi.

jet (diffus) et le nuage (dense). Dans le référentiel où l'étoile est immobile, le nuage ambiant est à la vitesse $V_{\rm N}$, le jet se propage à la vitesse $V_{\rm J}$, la discontinuité de contact qui sépare le gaz issu du jet du gaz des nuages environnants se déplace à la vitesse $V_{\rm D}$, le disque de Mach (choc réfléchi dans le jet) à la vitesse $V_{\rm M}$, et le choc d'étrave (choc transmis dans le milieu dense) à la vitesse $V_{\rm E}$.

Le gaz issu du jet est freiné à la traversée du disque de Mach et renvoyé vers les ailes arrières pour former le cocon qui entoure le jet [1]. Pour les mêmes raisons, le gaz issu du nuage est freiné à sa traversée du choc d'étrave et s'écoule le long de la discontinuité de contact car il ne peut y avoir d'écoulement de matière à travers une discontinuité de contact. Notons que les vitesses tangentielles des fluides de part et d'autre de la discontinuité de contact n'ont aucune raison d'être les mêmes (*cf.* § 2.4).

Le choc d'étrave et le disque de Mach s'éloignent de la discontinuité de contact à des vitesses qui dépendent du taux de compression à la traversée des fronts de choc [2]. La vitesse de déplacement de la discontinuité de contact $V_{\rm D}$ dans le référentiel de l'étoile se calcule, dans un modèle stationnaire, en posant l'égalité des pressions cinétiques de part et d'autre

1. Seule la composante de la vitesse transverse au front de choc est réduite à la traversée du front de choc, la composante tangentielle étant conservée (*cf.* § 2.3). Le gaz du nuage traversant au niveau des ailes du choc d'étrave est donc moins freiné que celui traversant à l'apex.

2. Dans un modèle 2D et à la différence du modèle 1D, la vitesse du choc ne se calcule pas à partir des pressions pré-choc et post-choc (Eq. (2.27)) mais à partir des densités par application de la conservation de la masse.

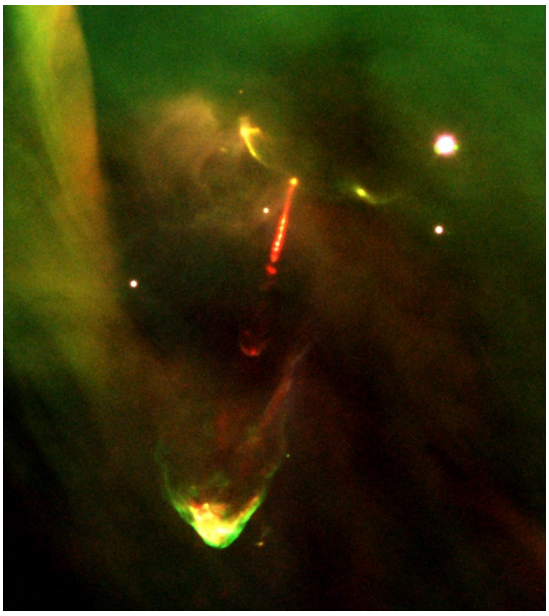


FIGURE 2.19 – Choc d'étrave HH34 avec son jet (Nébuleuse d'Orion, à $\sim$ 500 pc).

de la discontinuité de contact :

$$\rho_{\rm N}(V_{\rm N}-V_{\rm D})^2=\rho_{\rm J}(V_{\rm J}-V_{\rm D})^2\,, \tag{2.56}$$

où $\rho_{\rm N}$ est la densité du nuage ambiant et $\rho_{\rm J}$ celle du jet.

Une photographie composite de l'objet Herbig-Haro HH-34 (Fig. 2.19), situé dans la Nébuleuse d'Orion à $\simeq$ 500 pc de la Terre, met bien en évidence un choc d'étrave avec son jet dont la longueur approche 1 parsec.

2.7.5 Simulations numériques hydrodynamiques

Pour étudier l'évolution du nuage après le passage du choc, il faut procéder à des simulations numériques 2D et 3D qui seules permettent de mettre en évidence l'effet des instabilités de Kelvin-Helmotz [1] ou de Raleigh-Taylor [2]. Les simulations 2D à symétrie axiale de Klein et al. (1994) montrent que, en l'absence de champ magnétique et d'émission radiative, le nuage initial supposé sphérique de diamètre D se fragmente en de multiples nuages sur un temps caractéristique égal à plusieurs fois le temps $\tau = D/(V_{\rm s}/\sqrt{\chi})$ de traversée du nuage par le choc tranmis où $\chi > 1$ est le rapport de densité entre le milieu inter-nuages et le nuage et $V_{\rm s}$ la vitesse du choc dans le milieu inter-nuages [3]. Cette destruction du nuage s'effectue principalement par l'instabilité de cisaillement des vitesses de Kelvin-Helmotz qui génère une vorticité importante à l'interface entre les deux milieux. L'accélération du nuage pendant et après le passage du choc s'accompagne donc, dans un modèle hydrodynamique [4], d'une des-

1. L'instabilité de Kelvin-Helmotz est générée par un cisaillement des vitesses entre deux couches de fluide, quelles que soient leurs densités. Elle conduit à l'apparition d'une couche de mélange des deux fluides.
2. L'interface entre deux fluides dont l'un soutient l'autre contre la gravité est sujette à une instabilité dite de Raleigh-Taylor si le fluide du dessous est moins dense que le fluide du dessus.
3. La vitesse du choc tranmis au nuage est $V_{\rm s}/\sqrt{\chi}$ pour un choc incident non radiatif (*cf.* § 2.6.2).
4. Cette conclusion sera révisée dans un modèle MHD (*cf.* chapitre 3).

truction du nuage par l'apparition de couches de mélange. Xu & Stone (1995) confirment ces résultats dans un modèle 3D et ajoutent que la forme et l'orientation du nuage par rapport au choc incident détermine également l'avenir du nuage. Si le profil de transition en densité entre le milieu inter-nuages et le nuage n'est plus modélisé par une discontinuité mais par une fonction continue plus réaliste, Nakamura et al. (2006) montrent que la destruction du nuage est retardée, quoique totale, et que le passage du choc accélère les nuages et génère aussi une dispersion $\simeq 2\ \mathrm{km\,s^{-1}}$ des fragments de nuages, en accord avec les dispersions observées des nuages dans le milieu froid et neutre. Les résultats de ces modèles hydrodynamiques ont des implications importantes sur les schémas de formation stellaire : en fragmentant les nuages, les ondes de choc de supernovæ ne devraient pas pouvoir déclencher la formation d'étoiles massives. Cette conclusion sera révisée au paragraphe 3.6 dans le cadre des chocs MHD.

Chapitre 3

Ondes de chocs magnétohydrodynamiques

Le champ magnétique peut modifier profondément la structure des ondes de choc. Dans les milieux denses et peu ionisés, l'effet du champ magnétique peut se traduire par l'existence de chocs multi-fluides où les fluides chargé et neutre sont découplés : les chocs C. Ces chocs sont fréquemment invoqués pour expliquer l'importante émission H_2 dans les flots moléculaires autour des étoiles en formation. Des raies d'émission rotationnelle du SiO sont également observées dans ces chocs, ce qui montre que les poussières silicatées y sont en partie détruites. La structure des chocs C multi-fluides étant radicalement différente de celles des chocs mono-fluides décrit au chapitre précédent, le traitement des poussières dans ces chocs sera également très différent.

Les ondes de choc magnétohydrodynamiques (MHD) sont des ondes de choc qui, en plus des lois de la dynamique des gaz, respectent les lois de l'électromagnétisme de Maxwell. Elles sont très étudiées en astrophysique car le gaz est souvent plongé dans un champ magnétique non négligeable. Ces ondes de choc sont observées à la fois dans le milieu interplanétaire, dans le milieu interstellaire et dans les régions de formation d'étoiles. Dans l'étude des ondes de choc MHD, l'état d'ionisation du gaz est un facteur important car le champ magnétique interagit directement avec les particules chargées du gaz mais seulement indirectement avec le gaz neutre *via* les collisions entre particules chargées et particules neutres. Si le gaz est suffisamment ionisé par l'onde de choc, le couplage collisionnel entre les particules chargées et les particules neutres sera suffisamment fort pour que ces particules se comportent comme un seul fluide couplé au champ magnétique. Il s'agira alors d'un choc MHD mono-fluide (choc J) qui comporte de nombreux points communs avec les chocs hydrodynamiques présentés au chapitre précédent. Si à l'inverse le gaz choqué reste très faiblement ionisé, les particules chargées peuvent sous certaines conditions se découpler durablement des particules neutres dans le choc. Ces ondes de choc MHD multi-fluides (chocs C), dont l'existence a été proposée par Mullan (1971), ont des propriétés très différentes des ondes de choc MHD mono-fluides.

3.1 Ondes MHD se propageant dans un plasma

Un gaz ionisé plongé dans un champ magnétique est susceptible de véhiculer différents types d'ondes magnétohydrodynamiques ou ondes MHD. A la différence des ondes sonores qui sont compressives et isotropes, les ondes MHD sont compressives ou non compressives, et leur célérité dépend de l'orientation des lignes de champ magnétique par rapport à leur direction de propagation

3.1.1 Ondes d'Alfven

Les ondes d'Alfven propagent les déformations des lignes de champ magnétique le long de ces lignes de champ, un peu à la manière des ondes élastiques se propageant dans une corde de guitare [1]. Cette propagation s'effectue sans variation de l'intensité du champ magnétique, c'est-à-dire sans rapprochement ni éloignement relatif des lignes de champ magnétique : les ondes d'Alfven sont des ondes non compressives. On parle parfois d'ondes torsionnelles.

La vitesse de propagation des ondes d'Alfven, dite *vitesse d'Alfven*, a pour expression :

$$V_{\rm A} = \frac{B}{\sqrt{4\pi\rho}}\,, \tag{3.1}$$

où ρ est la masse de gaz par unité de volume [2].

3.1.2 Ondes magnétosoniques

Les ondes magnétosoniques sont des ondes compressives qui propagent les variations de pression dans la direction perpendiculaire aux lignes de champ, rapprochant et éloignant alternativement les lignes de champ à la manière d'une onde sonore. La vitesse de propagation des ondes magnétosoniques est :

$$V_{\rm ms} = \sqrt{c^2 + V_{\rm A}^2}\,. \tag{3.2}$$

3.1.3 Différents modes de propagation d'une onde MHD

Plus généralement, les ondes MHD peuvent se propager sous 3 modes (Lent, Intermédiaire, Rapide) dans une direction θ par rapport aux lignes de champ magnétique. A chaque mode correspond une célérité :

$$V_{\rm L} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{c^2 + V_{\rm A}^2 - \sqrt{c^2 + V_{\rm A}^2 - 2cV_{\rm A}\cos 2\theta}}\,, \tag{3.3}$$

$$V_{\rm I} = V_{\rm A}\cos\theta\,, \tag{3.4}$$

$$V_{\rm R} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{c^2 + V_{\rm A}^2 + \sqrt{c^2 + V_{\rm A}^2 - 2cV_{\rm A}\cos 2\theta}}\,. \tag{3.5}$$

1. Cette propriété se décrit à l'aide du tenseur de tension du champ magnétique.
2. Crutcher (1999) fait remarquer que l'équation d'échelle (Eq. (6.1)) revient à considérer que la vitesse d'Alfven est constante partout dans le milieu dense, quelle que soit la densité du nuage.

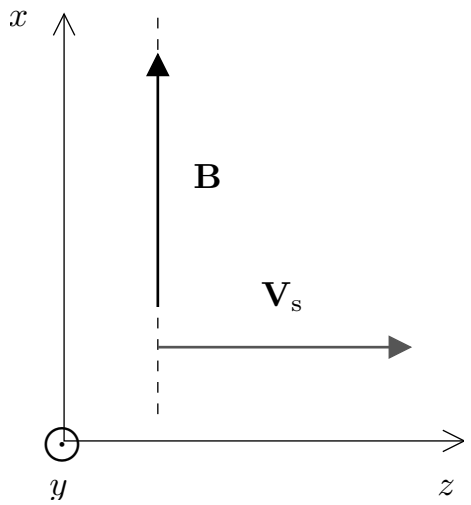


FIGURE 3.1 – Choc MHD transverse. Les lignes de champ magnétique (pointillés) sont perpendiculaires à la direction de propagation du choc indiquée par la flèche V_s.

Les ondes lentes et rapides sont compressives. Elles modifient l'intensité du champ magnétique, mais pas son plan de polarisation. Les ondes rapides peuvent se propager dans toutes les directions alors que les ondes lentes ne peuvent pas se propager perpendiculairement aux lignes de champ ($\theta = \pi/2$). Les ondes intermédiaires [1] ne sont pas compressives, et peuvent donc changer le plan de polarisation du champ magnétique mais pas son intensité.

Les ondes d'Alfven (ondes intermédiaire avec $\theta = 0$) et les ondes magnétosoniques (ondes rapides avec $\theta = \pi/2$) ne sont que des cas particuliers de ces modes de propagation. Dans la suite de l'exposé, nous ne nous intéressons qu'aux ondes rapides. Le lecteur peut se référer à la revue de Draine & McKee (1993) pour des compléments sur les ondes lentes et intermédiaires.

3.2 Chocs MHD stationnaires transverses

L'hypothèse de stationnarité [2] simplifie grandement l'analyse de la structure des chocs, c'est pourquoi nous nous limiterons dans un premier temps aux chocs stationnaires. La non stationnarité et les critères de stationnarité des chocs MHD réellement existants sont discutées au paragraphe 3.3.

Un choc MHD est dit *transverse* si la direction du champ magnétique est perpendiculaire à la direction de propagation du choc (Fig. 3.1). La résistance du champ magnétique à la compression est alors maximale. Avec cette hypothèse simplificatrice, l'écoulement ne peut pas se faire le long des lignes de champ magnétique ce qui permet de s'affranchir de certaines complications inhérentes aux modèles de chocs MHD obliques (*cf.* section 3.4).

1. Les ondes intermédiaires sont appelées plus simplement ondes d'Alfven.
2. On appelle choc stationnaire un choc dont la structure vue dans le référentiel du front de choc n'évolue pas dans le temps.

3.2.1 Relations de Rankine-Hugoniot pour un choc adiabatique

La résistance du champ magnétique à la compression est caractérisée par la pression magnétique $B^2/(8\pi)$ qui s'ajoute à la pression thermique dans la direction perpendiculaire aux lignes de champ.

Pour obtenir les relations de Rankine-Hugoniot pour un choc MHD mono-fluide et adiabatique, il suffit de prendre les relations de Rankine-Hugoniot d'un choc hydrodynamique adiabatique et de remplacer la pression thermique P par la somme de la pression thermique et de la pression magnétique $B^2/(8\pi)$, et l'enthalpie [1] $\gamma P/(\gamma-1)$ par la somme de l'enthalpie et de l'énergie magnétique $B^2/(4\pi)$.

$$\rho_1 v_1 = \rho_2 v_2 \,, \tag{3.6}$$

$$\rho_1 v_1^2 + P_1 + \frac{B_1^2}{8\pi} = \rho_2 v_2^2 + P_2 + \frac{B_2^2}{8\pi} \,, \tag{3.7}$$

$$\left(\rho_1 \frac{v_1^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma-1} P_1 + \frac{B_1^2}{4\pi}\right) v_1 = \left(\rho_2 \frac{v_2^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma-1} P_2 + \frac{B_2^2}{4\pi}\right) v_2 \,. \tag{3.8}$$

Hypothèse du *champ gelé* L'hypothèse suivante est fréquemment faite : le champ magnétique est supposé *gelé* dans le fluide des ions. Cela revient à admettre que le champ électrique est nul dans le référentiel où le fluide des ions est au repos :

$$\nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \mathbf{0} \,. \tag{3.9}$$

Dans ce cas, le fluide chargé ne diffuse pas à travers les lignes de champ. Pour un choc transverse 1D, l'hypothèse du champ gelé conduit aux relations de saut suivantes :

$$B_2 = B_1 \frac{v_1}{v_2} = B_1 \frac{\rho_2}{\rho_1} \,. \tag{3.10}$$

La compression du champ magnétique suit donc celle du fluide chargé.

Facteur de compression Le facteur de compression du gaz a pour expression (Roberge & Draine, 1990) :

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{2(\gamma+1)}{D + \sqrt{D^2 + 4(\gamma+1)(2-\gamma) M_{\rm A}^{-2}}} = \frac{v_1}{v_2} \tag{3.11}$$

$$D = (\gamma - 1) + 2M_{\rm s}^{-2} + \gamma M_{\rm A}^{-2} \,, \tag{3.12}$$

où $M_{\rm s} = V_{\rm s}/c_1$ est le nombre de Mach (sonique) du choc et $M_{\rm A}$ le nombre de Mach alfvénique du choc

$$M_{\rm A} = \frac{V_{\rm s}}{V_{\rm A}} \,. \tag{3.13}$$

1. Enthalpie par unité de volume ρh.

Pression post-choc La température du gaz en tout point d'un choc MHD mono-fluide adiabatique peut être calculée connaissant le rapport de compression $\chi = \rho_2/\rho_1$ en ce point (Roberge & Draine, 1990) :

$$T_2 = \frac{\mu_2 V_s^2}{k} \frac{1}{\chi} \left(1 + \frac{1}{\gamma M_s^2} - \frac{1}{\chi} + \frac{1}{2M_A^2} \left(1 - \chi^2 \right) \right) . \tag{3.14}$$

3.2.2 Relations de Rankine-Hugoniot pour un choc isotherme

Une fois que le gaz post-choc a retrouvé sa température pré-choc, le choc est dit isotherme.

Temps caractéristique de refroidissement du milieu inter-nuages lors du passage d'un choc La phase ténue ($n_H \sim 0,25$ cm^{-3}) et tiède ($T \sim 10^4$) K est traversée régulièrement par les ondes de choc générées par les explosions de supernovæ. Le temps caractéristique de refroidissement isotherme (et donc calculé jusqu'à $T = 10^4$ K) d'un gaz de densité initiale n_H porté à très haute température par un choc de vitesse V_s a pour expression [1] (McKee et al., 1987) :

$$t_{cool} \simeq 10^3 \left(\frac{V_s}{100\,\mathrm{km\,s^{-1}}} \right)^3 \left(\frac{n_H}{1\,\mathrm{cm^{-3}}} \right)^{-1} \mathrm{ans} . \tag{3.15}$$

Un choc de 100 km s^{-1} se propageant dans le milieu ténu ($n_H \sim 1$ cm^{-3}) et ionisé (T = 10^4 K) refroidit donc à 10^4 K en $\sim$ 1000 ans.

Facteur de compression Le facteur de compression d'un choc isotherme s'obtient en posant $\gamma = 1$ dans les équations (3.11) et (3.12) du taux de compression d'un choc adiabatique :

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{4}{2M_s^{-2} + M_A^{-2} + \sqrt{\left(2M_s^{-2} + M_A^{-2}\right)^2 + 8M_A^{-2}}} . \tag{3.16}$$

Pour un choc isotherme fort dominé par le champ magnétique ($1 \ll M_A \ll M_s^2$)

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \sqrt{2}\, M_A \ll M_s^2 . \tag{3.17}$$

Plus le choc est rapide, plus la compression finale est importante. Cependant, et à cause de la pression magnétique, un choc MHD isotherme comprime beaucoup moins le gaz que le choc hydrodynamique isotherme de même vitesse (*cf.* § 2.5.4 Eq. (2.49)). La pression magnétique dans la phase tiède domine de beaucoup la pression thermique ($B \sim 3\mu$G, Jones et al., 1994) et limite donc fortement le taux de compression du gaz choqué dans un modèle 1D.

Pression thermique et magnétique D'après l'équation (3.10), la pression magnétique dans le choc $B^2/(8\pi)$ augmente comme le carré de la densité du gaz. La pression thermique P_2 (proportionnelle à la densité, Eq. (3.11)) est donc négligeable devant la pression magnétique $B_2^2/(8\pi)$ une fois que le gaz a retrouvé sa température pré-choc.

1. Cette expression du temps de refroidissement d'un gaz choqué tient compte de la destruction dans le choc du principal refroidisseur à très hautes températures : les poussières.

Accélération du gaz Dans notre modèle 1D, la vitesse post-choc finale du gaz est indépendante de la vitesse du choc :

$$v_2 = \frac{V_\mathrm{A}}{\sqrt{2}}\,. \tag{3.18}$$

3.2.3 Chocs C et J

Les relations de Rankine-Hugoniot d'un choc MHD ne disent rien sur la structure interne de ce choc entre les points 1 et 2 considérés [1]. Il existe en effet plusieurs variétés de chocs MHD transverses stationnaires qui satisfont aux mêmes expressions générales des relations de Rankine-Hugoniot décrites aux paragraphes précédents.

La structure interne des chocs MHD transverses dépend fortement du degré d'ionisation du gaz et de l'intensité du champ magnétique. Dans les nuages moléculaires ($n_\mathrm{H} = 10^3 - 10^6$ cm^{-3}) la fraction d'ionisation est très faible ($X_\mathrm{e} = 10^{-7} - 10^{-8}$), ce qui induit un faible couplage entre les fluides chargé et neutre qui doivent en conséquence être traités séparément. Chaque fluide peut alors propager ses propres ondes MHD.

Propagation des ondes magnétosoniques dans les nuages denses

Dans le fluide neutre (c'est-à-dire dans l'essentiel de la masse du gaz) se propagent les ondes magnétosoniques dont la vitesse a été définie par l'équation (3.2) que nous rappelons ici :

$$V_\mathrm{nms} = \sqrt{c^2 + \frac{B^2}{4\pi\rho}} \simeq \frac{B}{\sqrt{4\pi\rho}}\,. \tag{3.19}$$

Dans le fluide chargé, des ondes magnétosoniques peuvent se propager à la vitesse :

$$V_\mathrm{cms} = \sqrt{c^2 + \frac{B^2}{4\pi\rho_\mathrm{c}}} \simeq \frac{B}{\sqrt{4\pi\rho_\mathrm{c}}} \qquad \gg V_\mathrm{nms}\,, \tag{3.20}$$

où ρ_c est la masse de fluide chargé par cm^3 comprenant les ions, les électrons et les grains couplés au champ magnétique, soit tout au plus un centième de la masse du gaz dans un nuage moléculaire. La vitesse magnétosonique dans le fluide chargé V_cms est donc au moins ~ 10 fois supérieure à la vitesse magnétosonique dans le gaz neutre V_nms.

Structure interne d'un choc MHD transverse en fonction de l'intensité du champ magnétique pré-choc

La figure 3.2 (Draine, 1980) montre schématiquement, dans le référentiel du front de choc, comment la présence d'un champ magnétique transverse peut affecter la structure d'un choc stationnaire se propageant dans un milieu très peu ionisé. Draine présente la structure du choc stationnaire à des intensités croissantes du champ magnétique pré-choc. Dans ce modèle,

1. Les relations de Rankine-Hugoniot sont des relations de saut entre les valeurs des grandeurs physiques caractérisant l'écoulement aux points 1 et 2, indépendamment de ce qui se passe entre les points 1 et 2. Elles ne font que traduire les lois de conservations fondamentales de la physique d'un point à l'autre du choc.

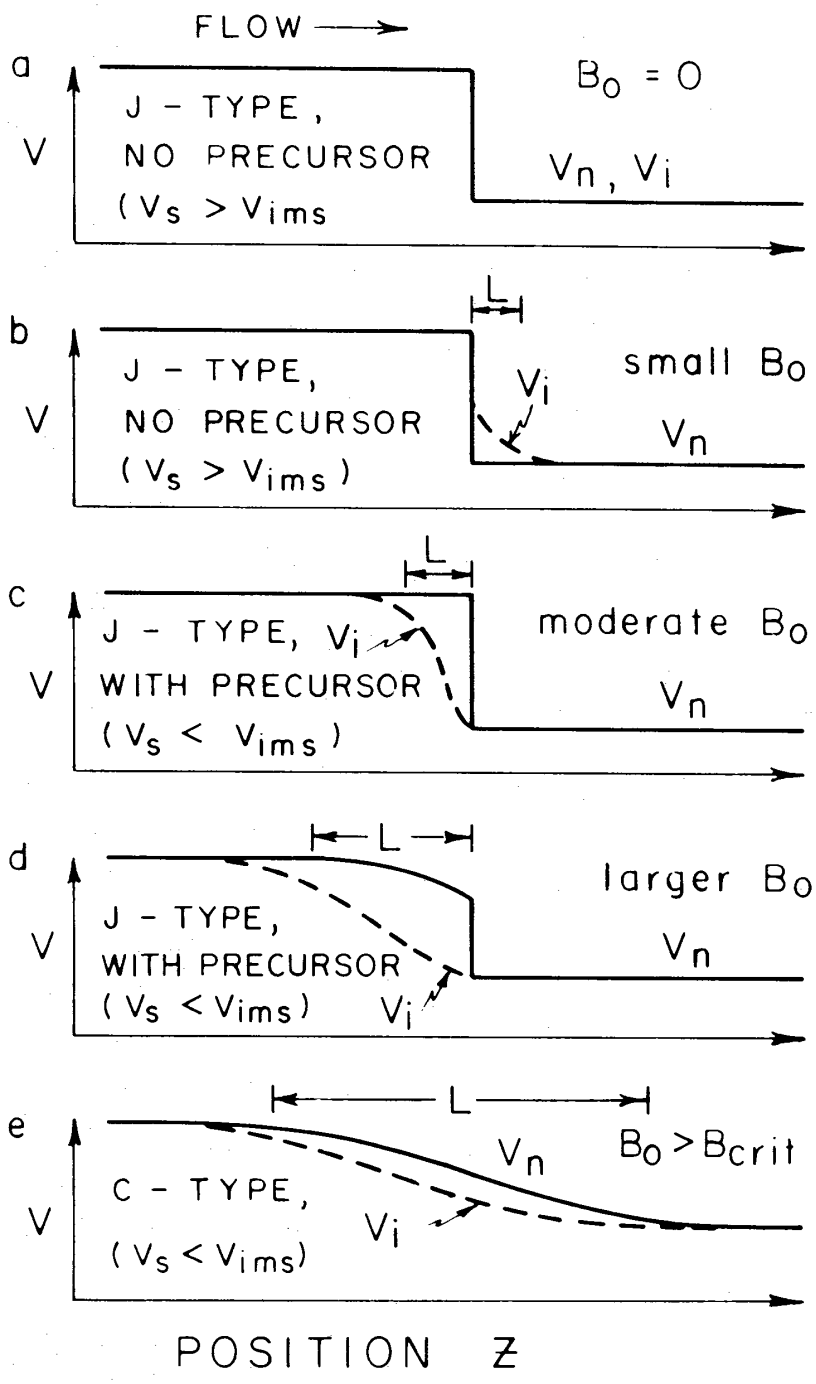


FIGURE 3.2 – Schéma de la structure en vitesse d'un choc stationnaire adiabatique se propageant dans un milieu très peu ionisé, en fonction de l'intensité B_0 du champ magnétique transverse dans ce milieu. Les vitesses sont présentées dans le référentiel où le front de choc est immobile : V_n désigne la vitesse du gaz neutre dans la direction de propagation du choc, et V_i celle des ions et des électrons. Le milieu pré-choc est situé à gauche du front de choc, le milieu post-choc à sa droite. L est la longueur du choc, et V_ims la vitesse magnétosonique dans le fluide des ions donnée par l'équation 3.21 (dans ce modèle, les poussières sont ignorées mais la physique reste la même). Extrait de Draine (1980).

les poussières sont ignorées et la vitesse magnétosonique dans le fluide chargé $V_{\rm cms}$ est donc égale à celle des ions $V_{\rm ims}$:

$$V_{\rm ims} = \frac{B}{\sqrt{4\pi\rho_{\rm i}}}\,, \tag{3.21}$$

où $\rho_{\rm i}$ est la masse d'ions par cm^3 de gaz.

Nous décrivons ci-dessous chaque cas de la figure 3.2 :

- (a) Le choc hydrodynamique ($B_0 = 0$) tel que nous l'avons présenté au chapitre précédent.
- (b) L'introduction d'un faible champ magnétique modifie le taux de compression du fluide chargé derrière le front de choc sans affecter la compression du fluide neutre. Le fluide chargé se recouple ensuite avec le fluide neutre sur une distance L très supérieure au libre parcours moyen.
- (c) Si le champ magnétique transverse est assez élevé pour que $V_{\rm ims} > V_{\rm s}$, alors les ondes magnétosoniques se propagent dans le fluide chargé plus rapidement que l'onde de choc, formant un *précurseur magnétique* qui freine et comprime progressivement le fluide chargé du milieu pré-choc avant l'arrivée du front de choc sans affecter notablement le fluide neutre. Le précurseur magnétique découple les fluides chargé et neutre : c'est la *diffusion ambipolaire*. La friction résultante entre les deux fluides chauffe progressivement le fluide chargé et très peu le fluide neutre. Les variables caractéristiques du fluide chargé sont continues à travers le front de choc tandis que celle du fluide neutre restent discontinues.
- (d) Un champ magnétique plus intense encore augmente la vitesse magnétosonique et donc la longueur L du précurseur magnétique. Les échanges d'impulsion et d'énergie entre les fluides chargé et neutre dans le précurseur magnétique sont donc plus forts et durent plus longtemps. Le fluide neutre commence à être comprimé et freiné indirectement (*via* les collisions élastiques avec le fluide chargé) par le précurseur magnétique, mais aussi chauffé. Le précurseur magnétique n'est cependant pas encore suffisamment long pour que l'écoulement du fluide neutre soit continu à travers le front de choc.
- (e) Lorsque l'intensité du champ magnétique est supérieure à une valeur critique, l'écoulement du fluide neutre devient lui aussi continu dans tout le choc, d'où le nom de choc C, pour continu. Le front de choc a par là-même disparu. Les écoulements des deux fluides chargé et neutre sont découplés dans tout le choc.

Comparaison de deux chocs stationnaires transverses C et J de même énergie

La figure[1] 3.3 compare les profils en température et en vitesse de deux chocs stationnaires transverses C et J de même énergie.

Profil de vitesse Dans un choc J, le gaz est freiné de manière abrupte à sa traversée du front de choc. L'écoulement du gaz passe d'une vitesse supermagnétosonique ($v > V_{\rm cms}$) à une vitesse submagnétosonique ($v < V_{\rm cms}$). La situation est différente dans un choc C. Les deux fluides restent submagnétosoniques ($v < V_{\rm cms}$) tout au long du choc. Le fluide neutre

1. Les figures 3.3 à 3.10 ont été obtenues en utilisant le choc stationnaire de Flower & Pineau des Forêts (2003).

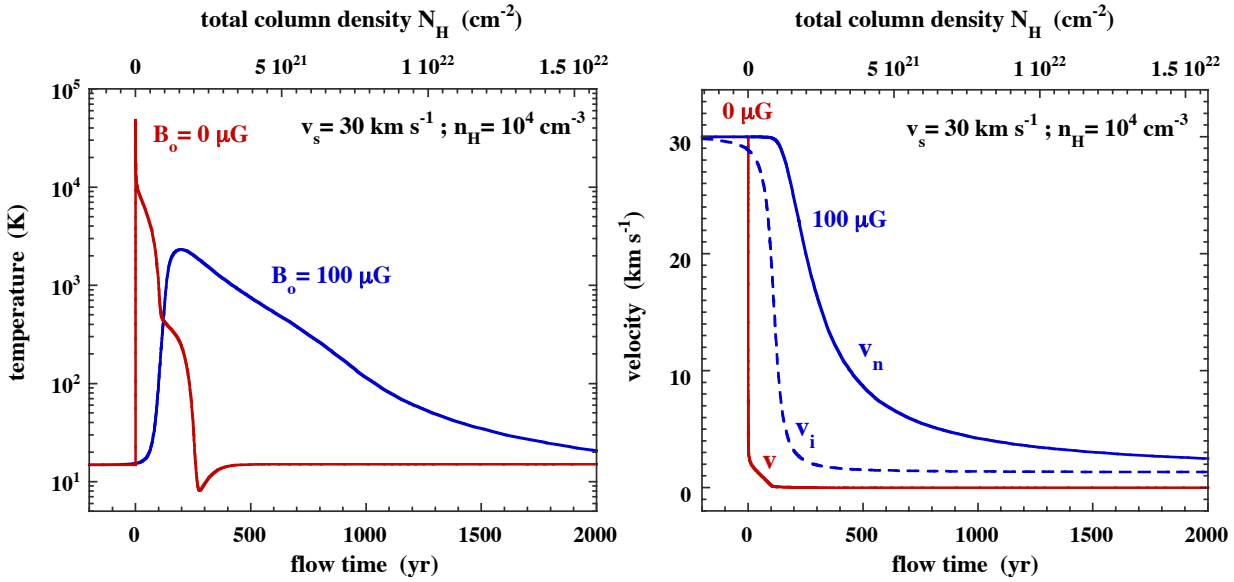


FIGURE 3.3 – Comparaison des profils en température (**a**) et en vitesse (**b**) de chocs transverses J ($B_0 = 0\,\mu$G, traits rouges) et C ($B_0 = 100\ \mu$G, traits bleus) se propageant tous deux à la vitesse de 30 km s^{-1} dans un nuage moléculaire de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. Toutes les vitesses ($V_{\rm i}$ pour les ions et $V_{\rm n}$ pour les neutres) sont mesurées dans le référentiel du front de choc.

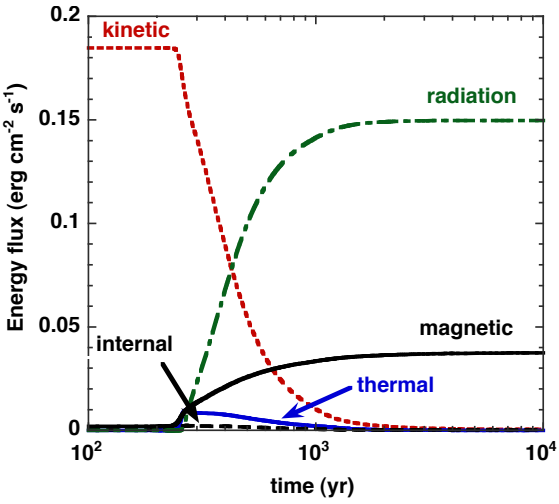


FIGURE 3.4 – Contributions des énergies cinétique, thermique, interne, radiative et magnétique au flux d'énergie total en fonction du temps d'écoulement dans un choc C se propageant à une vitesse de 25 km s^{-1} dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3} plongé dans champ magnétique pré-choc $B_0 = 100\ \mu$G transverse à la direction de propagation du choc. Dans les chocs C, l'énergie thermique reste très faible partout dans le choc. L'énergie interne correspond aux peuplement des états excités de molécules, principalement du dihydrogène. Ce graphe peut être comparé à la figure 2.10 du chapitre précédent pour un choc purement hydrodynamique (sans champ magnétique).

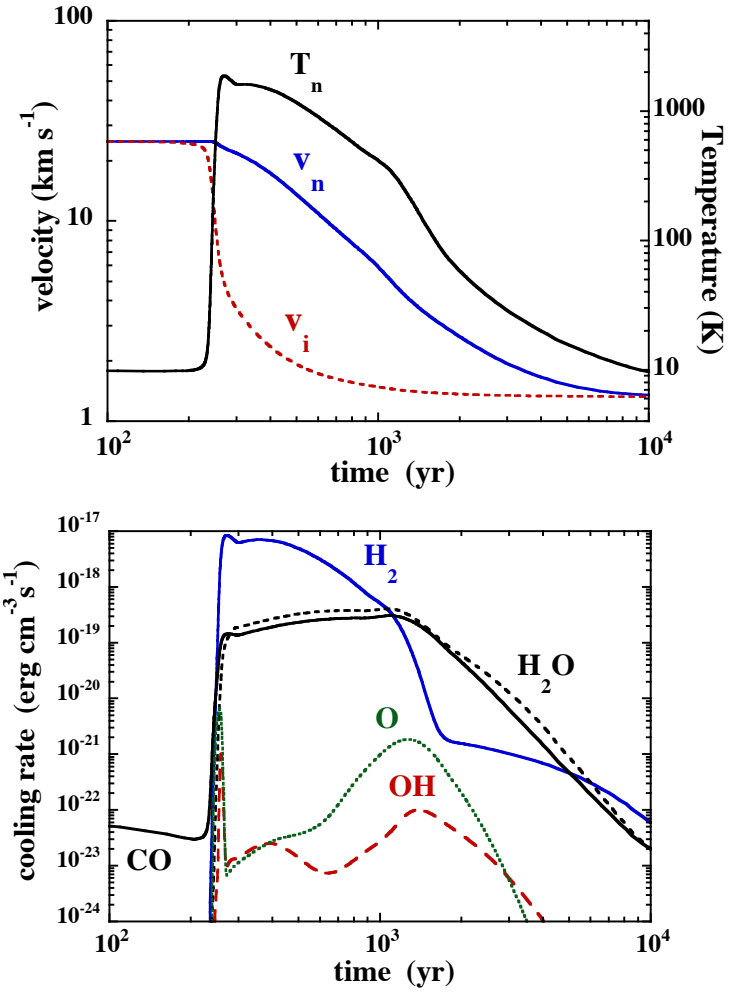


FIGURE 3.5 – (**Haut**) Profils de température du gaz neutre et de vitesse des fluides neutre et chargé dans le choc C de la figure 3.4. (**Bas**) Profil des taux de refroidissement des principaux refroidisseurs du choc, à comparer avec la même figure pour un choc sans champ magnétique (Fig. 2.12).

reste partout supersonique ($v > c_s$, *cf.* § 3.2.4). Le fluide chargé est freiné sans discontinuité par le précurseur magnétique qui précéde le choc. Le gaz est freiné progressivement par la friction que le fluide chargé (ions et poussières) exerce sur lui. Le gaz exerce en retour une poussée vers l'avant sur le fluide chargé, qui a pour effet de freiner le fluide chargé et non de l'accélérer. Cet apparent paradoxe tient au fait que la quantité de mouvement que le gaz cède au fluide chargé est partagée entre la pression magnétique et la pression cinétique du fluide chargé (deux des termes du membre droit de l'équation (3.7)). On montre (*cf.* annexe A) que le fluide chargé doit ralentir pour que sa quantité de mouvment totale augmente. On retrouvera ce type de comportement au chapitre 7, où nous traiterons de l'effet d'une force sur une grain chargé plongé dans un champ magnétique transverse.

Profil de Température Le gaz atteint des températures beaucoup plus élevées dans un choc J que dans un choc C. Dans un choc J, le chauffage est impulsionnel au niveau du

front de choc et le refroidissement n'intervient qu'ensuite, ce qui explique le haut pic de température. Dans un choc C, le chauffage du gaz (causé par la friction entre les deux fluides) et le refroidissement radiatif coopèrent tout au long du choc et limitent l'énergie thermique du gaz (*cf.* Fig. 3.4). Le chauffage du gaz neutre dans un choc C est le produit des collisions élastiques et inélastiques avec les particules chargées et les poussières couplées au champ magnétique. Le refroidissement du gaz se fait par émission radiative des refroidisseurs moléculaires comme H_2 et H_2O qui ne sont pas dissociées dans un choc C (*cf.* Fig. 3.5). La figure 3.4 montre également qu'à la différence des chocs hydrodynamiques (sans champ magnétique, Fig. 2.10), toute l'énergie cinétique initiale du gaz pré-choc (dans le référentiel du front de choc) n'est pas émise *in fine* sous forme radiative. Une partie de cette énergie est conservée dans le gaz post-choc sous forme d'énergie magnétique. Le temps caractéristique de dissipation de l'énergie cinétique incidente est également très différent de celui des chocs J.

Longueur des chocs MHD - rôle des poussières dans les chocs C

On peut définir la longueur d'un choc comme la distance parcourue par un élément fluide du gaz neutre entre le moment où sa température a commencé à augmenter (dans le précurseur magnétique pour les chocs C, à la traversée du front de choc pour les chocs J) et le moment où elle est revenue à sa valeur pré-choc. C'est donc la longueur du choc isotherme. La longueur d'un choc J n'est pas modifiée par l'existence d'un champ magnétique transverse dans le milieu pré-choc. Les figures du paragraphe 2.5.2 s'appliquent donc également aux chocs MHD mono-fluides.

Longueur des chocs MHD - rôle des poussières dans les chocs C

Draine (1980) propose l'expression suivante pour la longueur L d'un choc C (sans poussières)

$$L = \frac{(\mu_{\rm n} + \mu_{\rm i}) B_0^2}{\pi \rho_{\rm i0} \rho_{\rm n0} \langle \sigma v \rangle_{\rm in} V_{\rm s}} \propto \frac{b^2}{n_{\rm i}\, V_{\rm s}}\,, \tag{3.22}$$

où $\mu_{\rm n}$ et $\mu_{\rm i}$ sont les masses moyennes respectives des neutres et des ions, B_0 le champ magnétique transverse pré-choc, $\rho_{\rm i0}$ et $\rho_{\rm n0}$ les densités de masse respectives des neutres et des ions, $\langle \sigma v \rangle_{\rm in}$ le taux volumique de couplage ion-neutre ($\simeq 2,2.10^{-9}$ cm^{-3}) et $V_{\rm s}$ la vitesse du choc. Les dépendances principales de L montrent que la longueur d'un choc C diminue avec la vitesse et la densité et augmente avec l'intensité du champ magnétique. Un choc C est plus long d'un ordre de grandeur qu'un choc J de même énergie, comme nous le voyons sur la figure 3.3, parce que l'émission radiative est moins efficace à basse température (chocs C) qu'à haute température (chocs J).

Comme montré sur la figure 3.6, les poussières jouent dans les chocs C à haute densité un rôle essentiel dans le couplage entre le fluide chargé (composé des ions, des électrons [1] et des grains couplés au champ magnétique) et le fluide neutre, dont l'intensité détermine la longueur du choc. A haute densité, le couplage entre le gaz et le champ magnétique est dominé par les poussières.

1. Les électrons ne contribuent pas de manière significative à ce couplage.

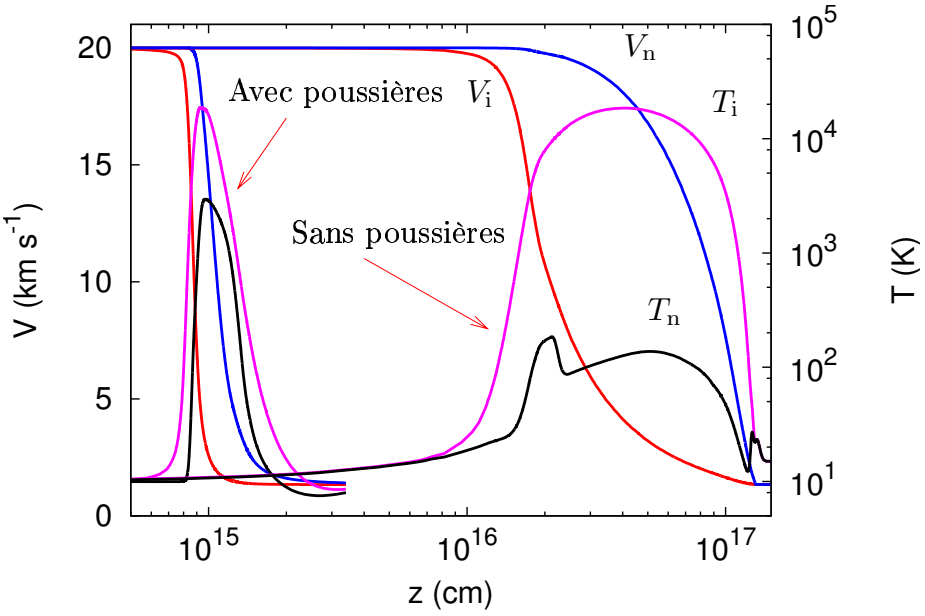


FIGURE 3.6 – Comparaison des profils d'un choc de 20 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité initiale $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}, avec ou sans poussières. A cette densité, la longueur du choc C est réduite de deux ordres de grandeur par la présence des poussières.

3.2.4 Critères d'existence des chocs C

A la différence des chocs hydrodynamiques, les chocs C ne peuvent pas se propager à n'importe quelle vitesse et dans n'importe quel milieu.

Vitesse critique

Pour qu'un choc C puisse se développer, il faut que la vitesse du choc soit :

1. supérieure à la vitesse magnétosonique $V_{\rm nms}$ (Eq. (3.19)) du fluide neutre, sans quoi aucun choc ne pourrait se développer dans le gaz.
2. inférieure à la vitesse magnétosonique $V_{\rm cms}$ (Eq. (3.20)) du fluide chargé, sans quoi le choc serait de type J. La vitesse magnétosonique dans le fluide chargé est appelée *vitesse critique* d'existence des chocs C.

$$V_{\rm nms} < V_{\rm s} < V_{\rm cms}\,. \tag{3.23}$$

La première condition est en pratique toujours vérifiée car $V_{\rm nms}$ est de l'ordre de quelques km s^{-1}. La deuxième condition est nécessaire pour garantir l'existence d'un choc C mais, comme nous allons le voir, non suffisante.

Point sonique

Il faut également, *troisième condition*, que le fluide neutre reste assez froid dans tout le choc pour que son écoulement soit partout *supersonique* dans le référentiel du front de choc (*cf.* Fig 3.7). Quand en un point du choc la vitesse du fluide neutre est égale à la vitesse locale du son, on parle de *point sonique*. Un point sonique apparaît lorsque l'émission radiative du

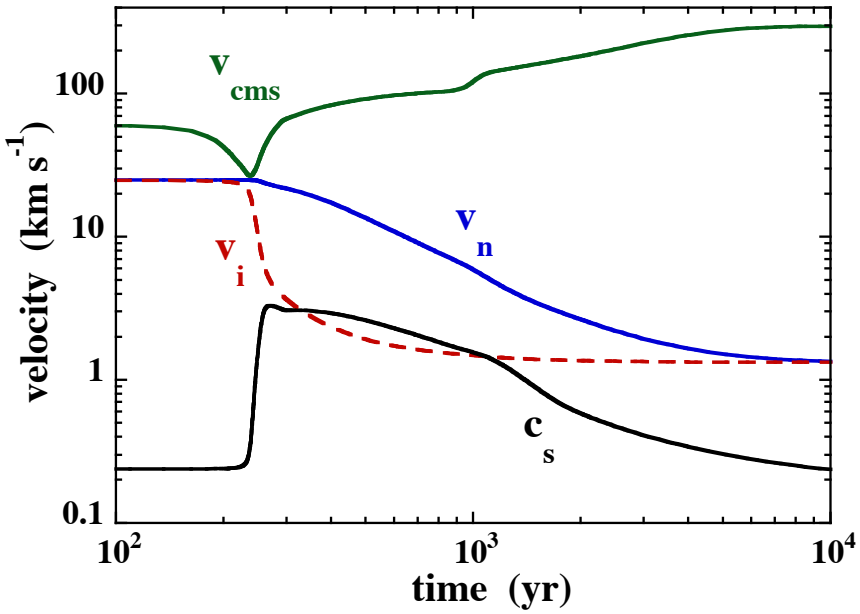


FIGURE 3.7 – Profils des vitesses $V_{\rm n}$ et $V_{\rm i}$ des fluides neutre et chargé, de la vitesse du son $c_{\rm s}$ dans le fluide neutre et de la vitesse magnétosonique $V_{\rm cms}$ dans le fluide chargé, dans le choc C de la figure 3.4. Le fluide neutre reste partout supersonique et le fluide chargé partout submagnétosonique, deux conditions nécessaires à l'existence d'un choc C stationnaire.

gaz n'arrive plus à contenir l'augmentation de température du gaz générée par la friction entre les deux fluides chargé et neutre. Il faut pour cela que H_2, le principal refroidisseur, soit dissocié ce qui réduit le refroidissement du gaz. Une boucle de rétroaction positive se met alors en place : l'élévation de la température conduit à une augmentation de la dissociation de H_2 et à une augmentation de la fraction d'ionisation qui renforce la friction entre les deux fluides et chauffe encore plus le gaz. L'emballement aboutit à la formation d'un discontinuité, comme dans un choc J (Fig. 3.8).

Du point de vue numérique, l'intégration de la structure stationnaire du choc C est interrompue par une singularité (*cf.* annexe A pour plus de détails), ce qui signifie concrètement qu'il n'existe pas de choc stationnaire de type C solution des conditions initiales données. La résolution de la structure d'un choc possédant un point sonique doit se faire à l'aide d'un code non stationnaire (Chièze et al., 1998). Le choc solution de cet écoulement doit normalement être de type J. Chernoff (1987) montre cependant que l'écoulement peut dans certains cas rester continu à travers le point sonique (choc de type C*). Cette affirmation a été remise en question par l'étude de Chièze et al. (1998) qui n'ont pas trouvé ce type de solution à l'aide de leur code de choc non stationnaire.

3.3 Chocs MHD non stationnaires - chocs C-J

Un choc peut être non stationnaire parce que les conditions physiques qui le génèrent évoluent au cours de sa propagation (par exemple si le "piston" ralentit ou accélère) ou si les caractéristiques physiques du nuage moléculaire traversé varient sur des distances caractéris-

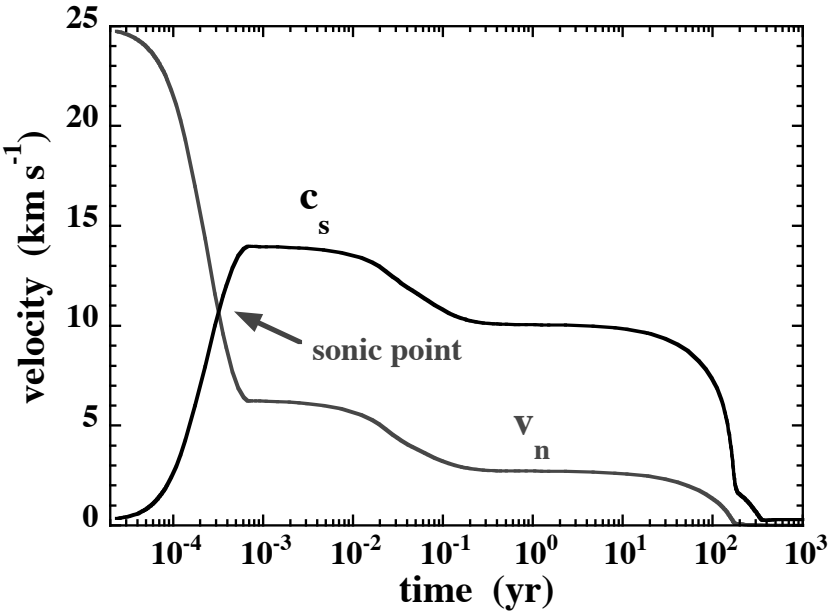


FIGURE 3.8 – Profil de vitesse du gaz dans un choc J de 25 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité initiale $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3} et sans champ magnétique. Le gaz rencontre un point sonique à la traversée du front de choc.

tiques petites devant la longueur du choc. Il peut également évoluer à cause d'une instabilité interne au choc (Instabilité de Wardle, *cf.* § 3.5). Mais même dans le cas où les conditions extérieures au choc sont stationnaires et les instabilités sont ignorées, la structure d'un choc doit d'abord traverser un régime transitoire avant d'atteindre son état stationnaire.

La formation et l'évolution temporelle de la structure 1D d'un choc C ont été étudiées par Smith & Mac Low (1997) dans le cadre restreint où, pour des raisons de simplicité, la chimie dans le choc est ignorée et la fraction d'ionisation est une loi de puissance de la densité du gaz. Ce cadre MHD simplifié leur a permis de s'intéresser non seulement aux chocs transverses mais aussi aux chocs quasi-parallèles et obliques ainsi qu'aux chocs *switch-on* (*cf.* § 3.4) se propageant dans un milieu pré-choc de densité [1] $n_{\rm H} = 10^5$ cm^{-3}. Ils montrent que les chocs C évoluent dans tous les cas vers la solution stationnaire correspondante, au bout d'un temps égal au minimum à plusieurs fois le temps d'écoulement, défini chez ces auteurs comme le temps mis par les ondes d'Alfven pour traverser la longueur du choc C.

Chièze et al. (1998) ont également étudié l'évolution temporelle de la structure de chocs J et C, en se limitant aux chocs transverses mais en résolvant l'état d'ionisation du gaz par un réseau chimique de 32 espèces et 127 réactions, sans poussières toutefois [2]. Cette amélioration a son importance car l'état d'ionisation dans un choc C détermine l'intensité du couplage entre le fluide chargé et le fluide neutre, et donc la longueur du choc. Pour un choc J (champ magnétique transverse nul) se propageant à 10 km s^{-1} dans un milieu pré-choc de densité $n_{\rm H} = 10^3$ cm^{-3}, le temps caractéristique de refroidissement vaut $\simeq$ 1000 ans. Chièze et al.

1. Une densité aussi élevée justifierait de ne pas négliger la contribution des poussières au couplage entre les fluides neutres et le champ magnétique.

2. Les faibles densités choisies $n_{\rm H} = 10^3$ cm^{-3} (ou $n_{\rm H} = 25$ cm^{-3}) peuvent justifier cette approximation car les poussières contribuent peu (ou pas du tout) au couplage entre les deux fluides à ces densités.

(1998) trouvent que la structure du choc J non stationnaire à un âge de 2000 ans est quasi-identique à celle du choc J stationnaire correspondant, et donc que la structure du choc J évolue bien vers la stationnarité en un temps de l'ordre de son temps de refroidissement. Pour un choc de même vitesse avec un champ magnétique transverse B = 10 μG, le temps de passage à la stationnarité est beaucoup plus long, de l'ordre de 100 000 ans [1], et donne naissance un choc C.

On montre sur la figure 3.9 l'évolution du profil de température d'un choc non stationnaire se propageant dans un nuage moléculaire ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, $B = 100$ μG) à la vitesse de 25 km s^{-1}. Tant que t $<$ 1000 ans, le choc est de type J : le précurseur magnétique n'a pas encore eu le temps de découpler les deux fluides. Pour t = 1500 ans, les deux fluides se sont découplés. La présence d'une discontinuité dans le profil de température du fluide neutre trahit encore la présence d'un choc J dans ce fluide. Le fluide chargé, chauffé en amont par le précurseur magnétique, s'écoule lui de manière continue. A mesure que le choc veillit, la discontinuité dans le fluide neutre tend à diminuer et à s'éloigner à la fois du piston (à gauche) et du milieu pré-choc (à droite). Dès que l'âge du choc a approximativement dépassé son temps d'écoulement

$$\tau_{\rm flow} = \int_0^L \frac{{\rm d}z}{V_{\rm n}}\,, \tag{3.24}$$

où L est la longueur du choc, le régime stationnaire est atteint : sa structure est identique à celle que donne un modèle stationnaire. Ce temps est ici de l'ordre de 5000 ans.

Lesaffre et al. (2004) montrent que certains chocs non stationnaires sont en fait en situation de quasi-stationnarité, et qu'il est alors possible de modéliser de manière satisfaisante la structure d'un choc non stationnaire à partir d'un modèle tronqué de choc stationnaire. Pour les chocs J non dissociatifs, il suffit de couper la structure du choc stationnaire à la position dans l'écoulement post-choc correspondant à l'âge du choc non stationnaire [2]. Pour un choc C, on procède de même en complétant la queue du choc avec un choc J qui doit être non dissociatif pour que la méthode soit valide. On parle alors de chocs C-J ou de choc J à précurseur magnétique. Cette modélisation bien utile donne accès aux structures non stationnaires des chocs dans le cadre moins complexe d'une code de choc stationnaire au sein duquel la chimie, l'excitation et l'émission radiative hors-équilibre peuvent être résolues. Remarquons également que, selon Lesaffre et al. (2004), les chocs C-J ne sont pas qu'une structure transitoire d'évolution vers les chocs C stationnaires, mais qu'ils peuvent être eux-mêmes stationnaires.

Dans les milieux denses autour des étoiles en formation, les chocs C ne sont pas tous assez âgés pour avoir atteint leur état stationnaire. Ils peuvent donc se présenter sous la forme de chocs non stationnaires de type C-J. La figure 3.10 montre le diagramme d'excitation ro-vibrationnel de H_2 observé autour du flot moléculaire Cepheus A. Il n'est pas reproduit par un modèle de choc C ayant atteint son état stationnaire car les chocs C ne peuplent pas assez les hauts niveaux d'énergie de H_2. Un modèle de choc J stationnaire n'a pas plus de succès car les chocs J ne peuplent pas assez les bas niveaux d'énergie de H_2. Par contre, le diagramme d'excitation H_2 prédit pour le choc non stationnaire de la figure 3.9 à un âge de 1500 ans reproduit bien celui de Cepheus A. Cette prédiction de l'âge du choc de Cepheus

1. Temps qui dépend très peu de l'intensité du champ magnétique transverse (Chièze et al., 1998).
2. Cette méthode ne semble pas applicable aux chocs J dissociatifs (Lesaffre et al., 2004).

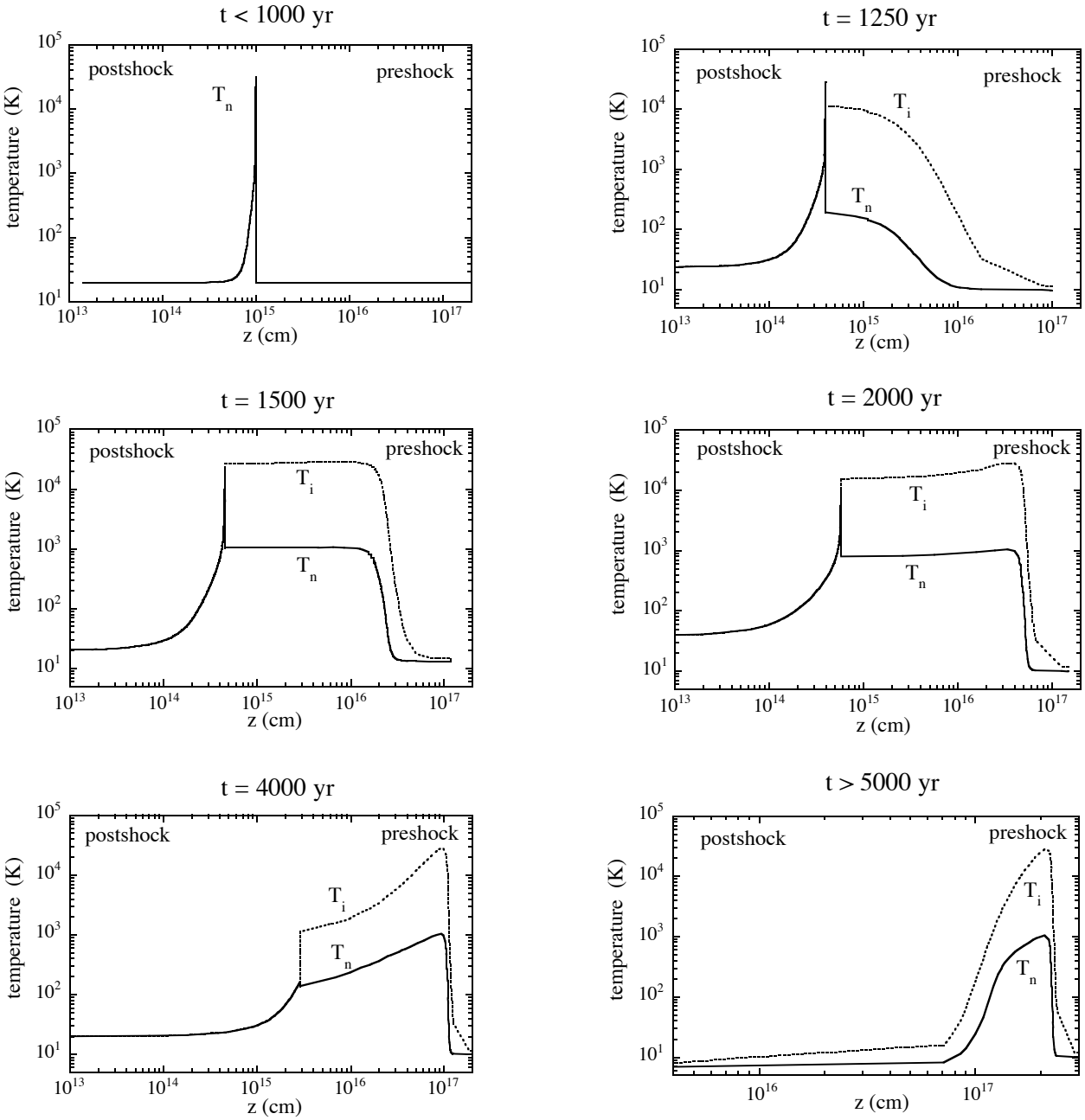


FIGURE 3.9 – Evolution du profil de température au cours du temps, pour un choc non stationnaire se propageant dans un nuage moléculaire ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, $B = 100$ μG) à la vitesse de 25 km s^{-1}. Le milieu pré-choc est situé à droite, le piston à gauche à l'origine des abscisses.

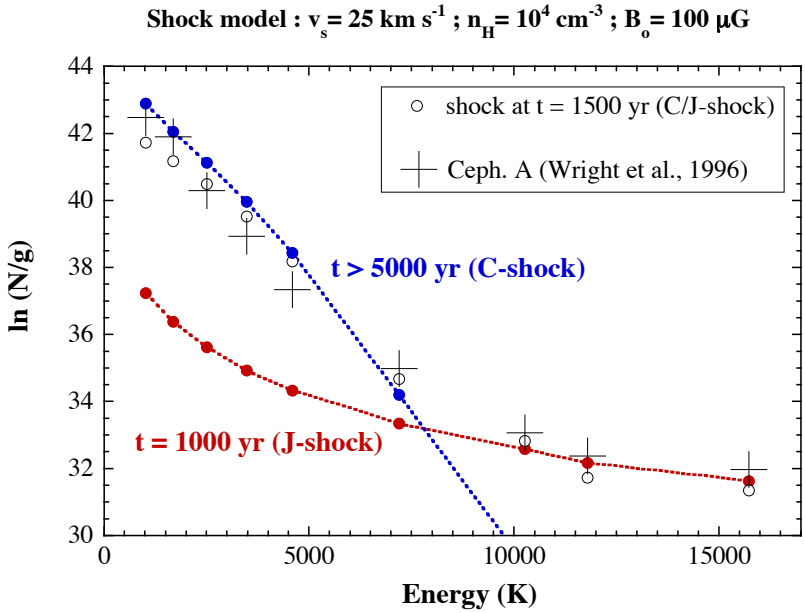


FIGURE 3.10 – Diagramme d'excitation H_2 observé dans le flot moléculaire Cepheus A, comparé aux prédictions basées sur un modèle de choc non stationnaire à 1000, 1500 et 5000 ans (d'après Walmsley et al., 2005). La structure du choc se rapproche à 1000 ans de celle des chocs stationnaires de type J, à 1500 de type C-J et à 5000 ans de type C. L'accord est bon pour un âge du choc de 1500 ans (*cf.* Fig. 3.9).

A s'accorde relativement bien aux temps dynamiques mesurés dans ce flot.

3.4 Chocs MHD obliques

La dynamique des chocs obliques, ceux dont la direction de propagation fait un angle $\theta \neq \pi/2$ par rapport aux lignes de champ magnétique (Fig. 3.11), est plus complexe que celle des chocs transverses. Les chocs obliquent ont un degré de liberté dynamique supplémentaire par rapport aux chocs transverses. Dans un choc oblique, les particules chargées (ions, électrons et poussières) ont une vitesse initiale avec une composante non nulle dans la direction des lignes de champ. Ces particules peuvent donc suivre les lignes de champ.

3.4.1 Chocs mono-fluides

Dans les ondes de choc MHD mono-fluides, les fluides chargé et neutre sont parfaitement couplés. Les trois modes de propagation des ondes MHD (lent, intermédiaire et rapide) permettent l'existence de 6 types de chocs MHD mono-fluides (Draine & McKee, 1993). Tous ces types de chocs sont *coplanaires* : le plan formé par le vecteur champ magnétique et la normale au front de choc (c'est-à-dire le plan des figures 3.1 et 3.11) est conservé de part et d'autre du choc.

L'angle θ entre la direction de propagation de l'onde de choc et celle du champ magnétique détermine le type d'ondes de choc qui peut se propager :

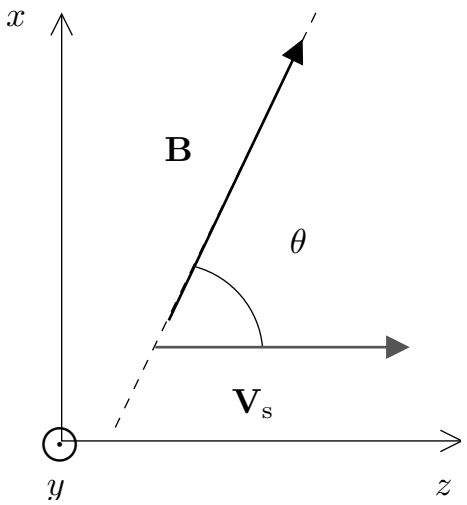


FIGURE 3.11 – Choc MHD oblique. Les lignes de champ magnétique (pointillés) font un angle $\theta < \pi/2$ avec la direction de propagation du choc indiquée par le vecteur $\mathbf{V}_s$.

Si le champ magnétique est perpendiculaire ($\theta = \pi/2$) à la direction de propagation du choc, la seule solution est un choc de type rapide ; ce sont les chocs J que nous avons présentés dans les sections précédentes, et qui se caractérisent notamment par une augmentation du champ magnétique.

Si $\theta = 0$, le gaz s'écoule initialement parallèlement aux lignes de champ magnétique ; Le champ magnétique n'opposant aucune résistance à l'onde de choc, l'onde de choc MHD se réduit à une onde de choc hydrodynamique. Cette solution n'est cependant valable que pour un certain intervalle de la vitesse du choc. Un écoulement parallèle possède également une solution de type rapide appelée choc *switch-on* dans lequel la traversée de la surface de discontinuité fait apparaitre un champ magnétique et un écoulement transverses initialement absents. Se reporter à Draine & McKee (1993) pour une présentation générale de ces chocs et à Smith (1992, 1993) pour une étude détaillée des chocs *switch-on*.

Le cas général ($0 < \theta < \pi/2$) est le plus complexe (*cf.* Draine & McKee, 1993). Retenons simplement :

1. que l'intensité du champ magnétique augmente dans les chocs de type rapide, qu'elle diminue dans les chocs de type lent, et qu'elle peut soit augmenter soit diminuer dans les chocs de type intermédiaire ;
2. que le champ magnétique change de direction dans les chocs intermédiaires (sa composante transverse $B_\perp$ change de signe), mais pas dans les chocs lents et rapides.

3.4.2 Chocs multi-fluides

Les chocs obliques multi-fluides ont donné lieu à de nombreuses études (*e.g.* Pilipp & Hartquist, 1994; Wardle, 1998; Chapman & Wardle, 2006). Certains chocs obliques multi-fluides sont des chocs *intermédiaires* (Pilipp & Hartquist, 1994) et d'autres des chocs *rapides* (Wardle, 1998; Chapman & Wardle, 2006) (*cf.* § 3.1.3 pour la définition de ces modes MHD). Dans les chocs obliques, la diffusion ambipolaire induit un courant électrique qui a une

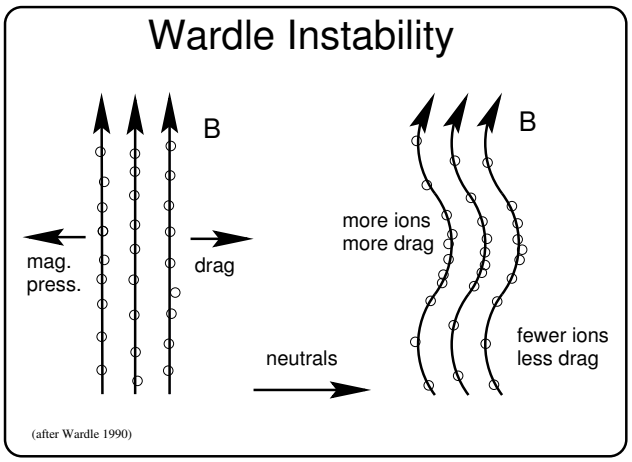


FIGURE 3.12 – Schéma de l'instabilité de Wardle (Mac Low & Smith, 1997).

composante non nulle le long des lignes de champ magnétique, provoquant une rotation du champ magnétique hors du plan de choc (Pilipp & Hartquist, 1994). Plus l'angle θ est faible, plus il y a de mouvement hors-plan et plus la rotation du champ magnétique est importante. Le mouvement hors-plan augmente la dissipation dans le choc et donc diminue sa longueur. En dessous d'un certain angle critique, le pic de température du gaz devient si élevé que l'intégration rencontre un point sonique : les solutions sont alors de type J ou C*. Les chocs obliques obéissant aux même relations de saut de Rankine-Hugoniot que les chocs transverses. Le vecteur champ magnétique dans la queue du choc doit donc être à nouveau situé dans le plan du choc .

3.5 Instabilité de Wardle dans les chocs C

Les chocs C sont potentiellement sujets à une instabilité particulière découverte par Wardle (1990). La figure 3.12 reprend le schéma de cette instabilité proposé par Mac Low & Smith (1997). Dans un référentiel où les lignes de champ sont immobiles, les ions sont immobiles car le champ magnétique est supposé gelé dans le fluide chargé. Les neutres sont par contre en mouvement dans la direction de propagation du choc : c'est la diffusion ambipolaire. Les ions ayant une inertie négligeable, la pression cinétique exercée par la friction des neutres sur les ions est à chaque instant exactement compensée par la pression magnétique.

Imaginons maintenant que les lignes de champ magnétique se courbent de manière infinitésimale. Sous la friction des neutres, les ions glissent le long de la ligne de champ [1] dans la direction de propagation du choc et s'accumulent dans les "creux" des lignes de champ. La surdensité locale d'ions dans les creux rompt l'équilibre entre la pression cinétique du gaz et la pression magnétique : le creux s'accentue. Un raisonnement similaire conduit à conclure que la sous-densité des ions dans les bosses s'accentue également [2]. L'instabilité de Wardle

1. Les ions ne peuvent pas se déplacer perpendiculairement aux lignes de champ en l'absence de champ électrique. Par l'hypothèse du champ gelé, le champ électrique est nul dans le référentiel choisi.
2. Wardle note que cette instabilité est très semblable à celle qui se développe dans un champ magnétique

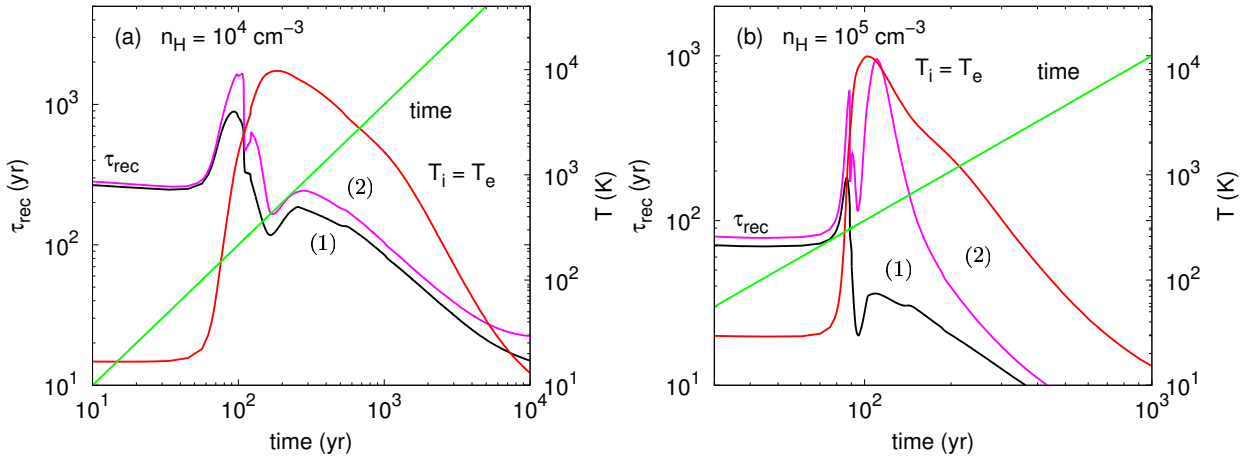


FIGURE 3.13 – Temps caractéristique $\tau_{\rm rec}$ de recombinaison des ions dans un choc C de 20 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité (**a**) 10^4 cm^{-3} et (**b**) 10^5 cm^{-3}, avec (1) ou sans (2) prise en compte de la recombinaison des ions sur les poussières (le couplage gaz-grain est traité dans les 2 cas). Dès que le pic du choc est atteint, le temps de recombinaison est inférieur au temps dynamique, et ce d'autant plus que la densité pré-choc est élevée. Plus la densité est élevée, plus les poussières contribuent à la recombinaison des ions. Cette recombinaison efficace des ions devrait amortir ou supprimer l'effet d'instabilité de Wardle dans les chocs C.

est contrecarrée aux petites échelles par la tension magnétique, et aux grandes échelles par l'augmentation de la pression magnétique résultant du rapprochement des lignes de champ déformées. Mais elle peut se développer aux moyennes échelles. Par une étude numérique des effets de cette instabilité, Wardle (1990) conclut que les chocs C dont le nombre de Mach alfvénique $M_{\rm A}$ est supérieur à 5 sont *instables* (soit $V_{\rm s} > 10$ km s^{-1} pour $b = 1$). Des feuillets d'ions et de gaz se forment dans le front de choc en striant le choc dans la direction de propagation, les plus gros feuillets pouvant atteindre la moitié de la largeur du choc.

Cette étude importante a stimulé plusieurs études numériques 2D et 3D (Toth, 1995; Stone, 1997; Mac Low & Smith, 1997) des chocs C, études qui ont confirmé les résultats de Wardle (1990). Mais selon Neufeld & Stone (1997), les profils d'émission de raies des chocs C 2D incluant l'instabilité de Wardle ne diffèrent pas beaucoup des anciens modèles 1D de Draine et al. (1983). Le gaz émet en effet l'essentiel de ses raies avant d'être fortement sujet à l'instabilité. L'instabilité de Wardle aurait donc des conséquences observationnelles qui seraient, pour l'instant, trop faibles pour être distinguées des prédictions des modèles classiques de choc C sans instabilité.

Effet de la recombinaison des ions sur le développement de l'instabilité de Wardle

L'étude de Mac Low & Smith (1997) démontre que l'instabilité de Wardle se développe si l'on ignore la recombinaison des ions, avec les électrons libres ou sur les poussières. Ce modèle de type "boule de billard" n'est justifié que si le temps caractéristique de recombinaison des ions est négligeable devant le temps d'écoulement du gaz. Dans l'hypothèse inverse d'une

sous l'effet de la gravité (Instabilité de Parker).

densité locale d'ions constante [1], Mac Low & Smith (1997) montrent que l'instabilité de Wardle disparait. Ces auteurs appelaient de leurs voeux une étude plus approfondie de l'effet de la recombinaison des ions sur cette instabilité ; à notre connaissance, il n'y a pas eu d'études consacrées à cette instabilité depuis 1997.

Nous pouvons cependant faire quelques estimations. Le temps caractéristique moyen de recombinaison des ions avec les électrons libres en phase gazeuse [2] ou à la surface des grains (neutres ou chargés) s'exprime sous la forme :

$$\tau_{\rm rec} = \frac{n_{\rm i}}{\sum_\alpha \sum_{\beta=e^-,g} n_\alpha \, n_\beta \, \langle \sigma v \rangle_{\alpha,\beta}} \, , \tag{3.25}$$

où α est un indice qui parcourt l'ensemble des ions, e^- désigne les électrons libres et g les grains de poussières, et $\langle \sigma v \rangle$ est le taux par unité de volume de la réaction de recombinaison considérée. La figure 3.13 montre que, dans le cas d'un choc de 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ se propageant dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$ (Fig. 3.13a), ce temps de recombinaison est plus court que le temps dynamique dès que le pic de température est passé. Ce constat est encore accentué à plus haute densite ($n_{\rm H} = 10^5$ $\mathrm{cm^{-3}}$, Fig. 3.13b). La recombinaison des ions ne me semble donc pas pouvoir être du tout négligée dans l'étude du développement de l'instabilité de Wardle dans les chocs C. Une étude complète reste à faire.

3.6 Simulations numériques MHD 2D et 3D

Mac Low et al. (1994) ont réalisé la première simulation MHD 2D à symétrie axiale de l'interaction d'une onde de choc de type J [3] avec un nuage dense sphérique plongé dans un champ magnétique uniforme, toujours sans émission radiative. Si le champ magnétique est parallèle à la direction de propagation du choc, ces auteurs montrent que, en comparaison des prédictions des modèles sans champ magnétique (*cf.* § 2.7.5), le champ magnétique limite la fragmentation du nuage et empêche sa destruction complète. La présence des lignes de champ amortit l'instabilité de Kelvin-Helmotz et freine la formation de vortex. Le champ magnétique parallèle [4] est également amplifié par l'écoulement inter-nuages autour du nuage choqué. Shin et al. (2008) ont confirmé ces résultats pour les chocs parallèles en 3D, même dans le cas de champs magnétiques faibles. Dans les chocs transverses et obliques, le nuage tend à former des feuillets orientés parallèlement aux lignes de champ. Les nuages moléculaires sont donc susceptibles de survivre dans certains cas au passage d'un choc de supernova, et peut-être de donner lieu à la formation d'étoiles massives.

1. Dans cette hypothèse, la recombinaison des ions serait si rapide que la densité locale des ions serait déterminée par les conditions locales et non pas par l'advection
2. Il s'agit de recombinaison radiative (lente) ou dissociatives (rapides).
3. Il n'existe pas à l'heure actuelle de simulations MHD 2D ou 3D de choc C.
4. Le champ magnétique transverse est automatiquement amplifié car il suit la compression du gaz.

3.7 Autres types de chocs MHD

3.7.1 Chocs non collisionnels

Les chocs présentés jusqu'ici sont des chocs collisionnels : ce sont les collisions entre particules qui dissipent l'énergie cinétique incidente du choc. Or certains plasmas astrophysiques où des chocs sont observés sont trop peu denses pour que les collisions entre particules puissent être responsables de la formation de ces chocs.

La distance que doit parcourir un proton se déplaçant à la vitesse v_7 dans un plasma totalement ionisé de densité n_i avant d'être dévié de 90° est $7,0\,10^{14}\,v_7^4/n_\mathrm{i}$ cm où v_7 est la vitesse exprimée en unité de 10^7 km s^{-1} (Spitzer, 1962). Pour une supernova éjectant de la matière à 3000 km s^{-1}, cette distance est plus grande que l'épaisseur du disque froid de la Galaxie [1]. Pour le vent solaire, qui génère un choc quand les protons et les électrons qui le constituent rencontrent la magnétosphère terrestre, cette distance excède la distance Terre-Soleil (Draine & McKee, 1993). La formation de ces chocs ne peut donc pas être expliquée dans le cadre d'un modèle de choc collisionnel.

Un choc est dit non collisionnel si le temps de traversée du choc par une particule est beaucoup plus long que le temps qui s'écoule entre deux collisions successives avec d'autres particules du gaz. Le mécanisme de formation d'une onde de choc non collisionnelle est totalement différent de celui d'une onde de choc collisionnelle : l'énergie cinétique est dissipée non par les collisions entre particules mais par l'interaction entre les particules chargées constituants l'écoulement et le champ électromagnétique turbulent créé par le mouvement collectif de ces mêmes particules. Pour une introduction détaillée aux ondes de choc non collisionnelles, consulter McKee & Hollenbach (1980).

3.7.2 Chocs de cisaillement

Signalons pour conclure l'existence de chocs de *cisaillement* (*shear shocks*). Syer & Narayan (1993) présentent une modélisation hydrodynamique de ce type de choc où un flot supersonique rencontre un piston qui se déplace perpendiculairement à l'écoulement (comme sur un tapis de convoyage, Syer & Narayan, 1993). Un choc de cisaillement se forme car le milieu pré-choc n'est pas averti à l'avance de la modification à venir de sa vitesse *transverse*. Ce type de choc semble être observé au centre de nombreuses galaxies dont la nôtre, au niveau des barres galactiques. Ces chocs se révèlent à nous par des zones sombres créées par les poussières et appelées *dust lanes* (Liszt, 2006). Beck et al. (2005), observant par polarisation un mauvais alignement des lignes de champ magnétique avec les lignes d'écoulement du gaz dans deux galaxies barrées, émettent l'hypothèse que le champ magnétique joue un rôle important dans ces chocs de cisaillement du fait de la résistance du champ magnétique au cisaillement [2]. Le champ magnétique découplerait dans ces chocs la phase diffuse et ionisée (et donc couplée au champ magnétique) de la phase contenant le gaz dense et neutre. Cette hypothèse est reprise par Marshall et al. (2008) pour expliquer le décalage dans la barre de la Galaxie entre le gaz révélé par l'émission de CO et l'extinction induite par les poussières.

1. Les ondes de choc de supernova se forment, d'après les observations, sur des distances beaucoup plus courtes.
2. Ce que traduit l'existence du tenseur magnétique.

Deuxième partie

Charge et dynamique des poussières

L'étude du traitement des poussières dans les chocs passe par la modélisation préalable de la dynamique de chaque taille de grains dans les chocs, dynamique elle-même en grande partie contrôlée par l'évolution de la charge du grain à travers le choc. Ce couplage entre la charge et la dynamique des poussières est un champ de recherche déjà bien avancé, particulièrement dans les études sur la poussières dans le système solaire (*e.g.* Goertz, 1989; Horanyi, 1996).

Nous présentons d'abord au chapitre 4 le modèle choisi pour les poussières interstellaires silicatées et carbonées : un *cœur réfractaire entouré d'un manteau de glaces*. Nous montrons que la distribution en taille de ces poussières peut être modélisée dans les nuages denses par une loi de puissance ou une loi log-normale. La gestion numérique de la distribution en taille des cœurs se fait au travers de boîtes de tailles indépendantes pour les grains silicatés et carbonés, tandis que l'épaisseur des manteaux est calculée à partir de la distribution en taille des cœurs.

Le chapitre 5 expose notre modèle de calcul de la *distribution de charge hors-équilibre* des poussières dans différents environnements, à partir des principaux processus de charge : l'attachement/recombinaison d'ions et d'électrons, l'émission secondaire d'électrons et l'effet photoélectrique. Les distributions de charge des poussières sont présentées dans les nuages au repos, en présence ou en l'absence du rayonnement interstellaire. L'évolution de la charge des poussières dans les chocs met en évidence l'inertie électrique des très petits grains qui réagissent plus lentement que les gros grains aux variations de température ou d'ionisation du milieu. L'évolution de la densité d'électrons libres dans les chocs C souligne l'impact important de la charge des grains dans un milieu très peu ionisé, qui peut conduire à la quasi-totale disparition des électrons libres du gaz. Ce chapitre se conclut par un rapprochement des résultats obtenus avec quelques propriétés de la charge des poussières dans les *dusty plasmas*.

Le chapitre 6 s'intéresse à l'intensité du *couplage des poussières au champ magnétique* en fonction de leur taille dans les nuages au repos (le milieu pré-choc) et dans les chocs C. L'intensité du couplage des poussières dans les nuages au repos permet de calculer la vitesse critique des chocs C. L'influence des fluctuations de charge sur le couplage des très petits grains au champ magnétique, et donc aussi sur la vitesse critique, est discutée.

Deux chapitres sont finalement consacrés à l'étude de la dynamique des poussières. Le chapitre 7 est un exposé synthétique de la dynamique complexe que peut suivre un grain chargé, *considéré comme une particule test*, lorsqu'il est plongé dans un champ électromagnétique stationnaire et soumis à différents types de forces.

Le chapitre 8 conclut cette partie par une présentation de la dynamique variée des poussières dans les chocs C. Les grains ne sont plus considérés comme des particules de test : *la charge et la dynamique des poussières sont couplées à la résolution de la structure du choc*.

Les gros grains suivent un mouvement de giration amorti auquel succède un mouvement de dérive fluide, comme exposé au chapitre 7. La dynamique des très petits grains est très différente, en raison de leur faible inertie et des fluctuations de leur charge autour de $Z = 0$. Ils tendent à se coupler au gaz chaque fois qu'ils deviennent neutres et au champ magnétique chaque fois qu'ils se chargent, dessinant une dynamique stochastique. Les effets rétroactifs de la charge et de la dynamique des poussières sur le choc sont analysés. L'article correspondant à cette partie, publié fin 2007 chez A&A, est inclus en fin à la fin de ce chapitre.

Chapitre 4

Modèles physique et numérique des poussières

Nous adaptons le modèle numérique de Jones et al. (1996) aux distributions en tailles des poussières dans les nuages denses. Nous montrons que des distributions en loi de puissance ou en loi log-normale peuvent convenir. Le changement de la distribution en taille induit par la présence de manteaux est souligné.

4.1 Modèle cœur-manteau

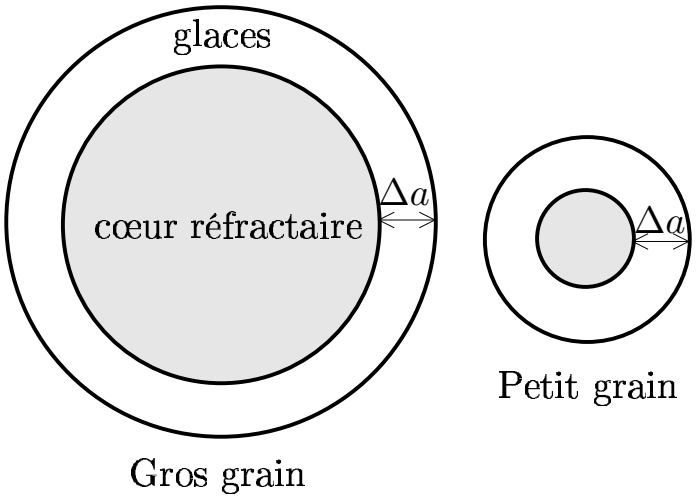


FIGURE 4.1 – Schéma de notre modèle de poussières. Tout grain est composé d'un cœur sphérique, homogène et non poreux, enrobé d'un manteau de glaces non stratifié, dont l'épaisseur dans les nuages au repos est la même quelle que soit la taille du cœur.

Comme nous l'avons vu au chapitre 1, les contraintes observationnelles sur les poussières dans les milieux denses sont compatibles avec un modèle où les grains seraient formés d'un

Elément	Abondance fractionnelle	gaz	manteaux	cœurs
C	3,55(-4)	8,27(-5)	5,53(-5)	2,17(-4)
O	4,42(-4)	1,24(-4)	1,78(-4)	1,40(-4)
Mg	3,70(-5)			3,70(-5)
Si	3,37(-5)			3,37(-5)
Fe	3,23(-5)	1,5(-8)		3,23(-5)

TABLE 4.1 – Abondance fractionnelle des éléments chimiques réfractaires en phase gazeuse, dans les manteaux et dans les cœurs (Flower & Pineau des Forêts, 2003). Le carbone des PAHs de Flower & Pineau des Forêts (2003) a été incorporé dans les cœurs carbonés. Les chiffres entre parenthèses représentent les puissances de 10. La masse totale des cœurs représente 0,60% de celle du gaz, partagée entre grains silicatés (70 % en masse, 57 % en nombre de grains) et grains graphitiques (30 % en masse, 43 % en nombre de grains).

CO	CO_2	CH_4	NH_3	H_2O
8,3(-6)	1,3(-5)	1,6(-6)	1,6(-5)	1,0(-4)
8,3%	13%	1,6%	16%	100%
CH_3OH	H_2CO	$HCOOH$	OCS	H_2S
1,9(-5)	6,2(-6)	7,2(-6)	2,1(-7)	3,7(-6)
19%	6,2%	7,2%	0,21%	3,7%

TABLE 4.2 – Abondances des espèces chimiques présentes dans les manteaux de glace qui recouvrent les cœurs, relativement à l'hydrogène (première ligne) et à la glace d'eau (deuxième ligne). Les chiffres entre parenthèses représentent les puissances de 10. La masse totale des manteaux représente 0,30% de celle du gaz. D'après Flower & Pineau des Forêts (2003).

cœur réfractaire enrobé d'un *manteau* de glaces (Fig. 4.1). Nous limitons notre modélisation à des cœurs sphériques et homogènes, c'est-à-dire non poreux. Notre modèle de cœurs réfractaires comprend deux populations : les cœurs carbonés (graphite) et les cœurs silicatés (olivine, $MgFeSiO_4$). La masse volumique des cœurs est prise égale à $\rho_C = 2,2\ \mathrm{g\,cm^{-3}}$ pour la population carbonée et $\rho_{Sil} = 3,3\ \mathrm{g\,cm^{-3}}$ pour la population silicatée (Jones et al., 1994). Chaque population de cœurs possède une distribution en taille qui s'étend sur un intervalle de rayon compris entre $a_- = 100$ Å et $a_+ = 3000$ Å (Flower & Pineau des Forêts, 2003).

Le tableau 4.1 reprend de Flower & Pineau des Forêts (2003) les abondances fractionnelles en phase gazeuse et en phase solide des éléments réfractaires composant les poussières. La stœchiométrie des éléments chimiques Mg, Fe, et Si dans les poussières est respectée en adoptant l'olivine ($MgFeSiO_4$, amorphe) comme modèle pour nos cœurs silicatés, et en incorporant l'oxygène nécessaire dans les cœurs [1]. Dans notre modèle, les manteaux de glaces ont une distribution homogène, c'est-à-dire non stratifiée [2]. La table 4.2 (Flower & Pineau des Forêts, 2003) donne, pour les nuages denses au repos, les abondances fractionnelles de ces molécules dans les manteaux de glace recouvrant les cœurs.

1. Un modèle basé sur des mélanges d'oxydes pourrait tout aussi bien respecter cette stœchiométrie (*cf.* chapitre 1).

2. Une distribution stratifiée est attendue si l'accrétion des espèces chimiques se fait à une températures propre à chaque espèce.

La structure chimique des poussières carbonées reste un sujet de débat. Un modèle de cœur graphitique permet d'expliquer le *bump* d'extinction à 2175 Å et offre aux modélisateurs une structure et des caractéristiques physiques bien établies. Cependant, il ne permet pas d'expliquer les faibles déplétions du carbone observées dans le milieu tiède (*cf.* chapitre 1). Pour la modélisation de la charge des grains, le modèle graphitique est une hypothèse forte, car à la différence des carbones amorphes ou des silicates, le graphite est conducteur. Ce choix a des répercussions sur les prédictions de destruction des cœurs carbonés dans les chocs J (*cf.* chapitre 9). Les matériaux de type carbone amorphe seraient des candidats pertinents pour les cœurs carbonés, aux propriétés physiques et électriques radicalement différentes.

4.2 Modélisation de la distribution en taille des cœurs

L'étude du traitement des poussières dans les chocs impose de suivre la dynamique et la charge propres à chaque taille de grains, et donc de diviser leur distribution continue en tailles en une suite de boîtes de taille. Une modélisation par des boîtes de taille de largeur logarithmique (Mizuno et al., 1988; Jones et al., 1996) permet de gérer aussi bien les échanges gaz-grain par érosion ou accrétion que l'évolution de la distribution en taille des cœurs par fragmentation et coagulation, tout en classant séparément les différentes tailles de petits cœurs.

4.2.1 Boîtes de taille en série géométrique

Les boîtes de taille contiennent les cœurs des grains, sans leurs manteaux. Ces boîtes sont numérotées de 1 à $k_{\max}$. La boîte k contient tous les cœurs de rayon a tel que $a_{k-} < a < a_{k+}$. Les limites supérieures et inférieures de chaque boîte suivent une progression géométrique :

$$a_{k+} = a_+ \, \eta^{(k-1)/3} , \tag{4.1}$$

$$a_{k-} = a_+ \, \eta^{k/3} , \tag{4.2}$$

$$\eta = \mathrm{e}^{-3 \ln (a_+/a_-)/k_{\max}} < 1 . \tag{4.3}$$

Cette série de boîtes pleines de grains est complétée pour chaque population :

- jusqu'à $a_{\inf} = 5$ Å par des boîtes vides numérotées de $k_{\max} + 1$ à $k_{\inf}$, qui serviront à collecter les très petits cœurs produits par fragmentation,
- jusqu'à $a_{\sup} = 5000$ Å par des boîtes vides numérotées de $k_{\sup} \leq 0$ à 0, dans lesquelles les très gros cœurs produits par coagulation seront collectés.

Ces boîtes vides supplémentaires ont la même largeur géométrique η que les boîtes pleines de la distribution initiale.

4.2.2 Distribution en loi de puissance

La distribution MRN (Mathis et al., 1977) a été historiquement définie pour interpréter l'extinction visuelle dans le milieu diffus. Elle est caractérisée par une forte abondance de très petits grains, responsables de l'extinction dans l'ultraviolet. La simplicité de son expression

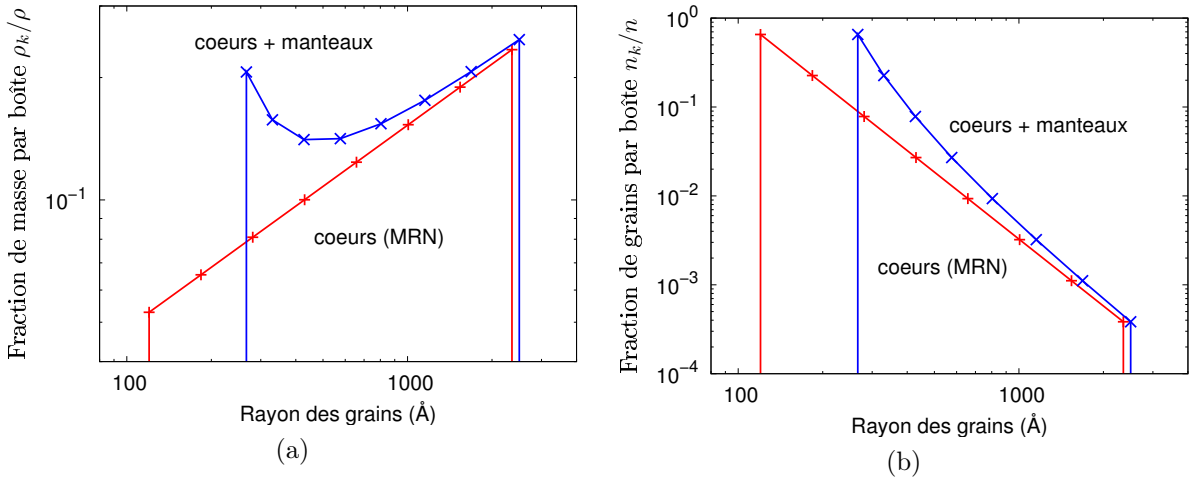


FIGURE 4.2 – Distributions en taille des cœurs (tracé rouge) et des grains (cœur + manteau de glace, tracé bleu) pour une distribution MRN ($\alpha = -3.5$ sur [100 Å : 3000 Å]) de cœurs silicatés. (**a**) Fraction de masse associée à chaque boîte rapportée à la masse totale des cœurs silicatés, en fonction du rayon moyen des grains de chaque boîte. (**b**) Idem pour le nombre de grains silicatés par boîte, rapporté au nombre total de grains silicatés. L'ajout des manteaux de glace ne modifie pas le nombre de grains dans les boîtes.

en loi de puissance la rend très commode à utiliser dans les modèles et explique en partie son succès auprès des modélisateurs.

Grandeurs caractéristiques d'une distribution en taille en loi de puissance

Une distribution en taille en loi de puissance peut s'exprimer de manière équivalente en fonction du rayon a ou de la masse m des cœurs :

$$\frac{\mathrm{d}n(a)}{\mathrm{d}a} = \kappa\, a^{\alpha}\,, \tag{4.4}$$

$$\frac{\mathrm{d}n(m)}{\mathrm{d}m} = \kappa\, \frac{3^{\beta}}{\left(4\pi\rho_{\mathrm{C/Sil}}\right)^{1+\beta}}\, m^{\beta}\,, \tag{4.5}$$

où $\beta = (\alpha - 2)/3$, $\rho_{\mathrm{C/Sil}}$ est la densité des cœurs, et κ est un coefficient de proportionnalité déterminé par normalisation. Pour une distribution MRN, $\alpha = -3.5$ et $\beta = -1.83$.

Si on note ρ la masse de poussières par unité de volume et χ le rapport de cette masse à celle du gaz (de l'ordre de 1 %), alors

$$\rho = \chi\, 1,4\, n_{\mathrm{H}}\, m_{\mathrm{H}} = \frac{4}{3}\pi\, \rho_{\mathrm{C/Sil}} \int_{a_-}^{a_+} a^3\, \frac{\mathrm{d}n(a)}{\mathrm{d}a}\,, \tag{4.6}$$

$$\kappa = \chi \left(\frac{1.4\, n_{\mathrm{H}}\, m_{\mathrm{H}}}{4/3\pi\, \rho_{\mathrm{C/Sil}}}\right) \left(\frac{4-\alpha}{a_+^{4-\alpha} - a_-^{4-\alpha}}\right)\,, \tag{4.7}$$

où m_{H} est la masse du proton, n_{H} la densité de protons du gaz, et a_- et a_+ sont les bornes inférieures et supérieures de la distribution des cœurs.

Le nombre n de cœurs par unité de volume et les moments $\langle a^i \rangle$ de cette distribution en loi de puissance ont pour expression :

$$n = \int_{a_-}^{a_+} \frac{\mathrm{d}n(a)}{\mathrm{d}a}\,\mathrm{d}a = \kappa \left(\frac{a_+^{1-\alpha} - a_-^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right), \tag{4.8}$$

$$\langle a^i \rangle = \frac{1}{n} \int_{a_-}^{a_+} \frac{\mathrm{d}n(a)}{\mathrm{d}a}\, a^i\,\mathrm{d}a = \left(\frac{1-\alpha}{i+1-\alpha} \right) \left(\frac{a_+^{i+1-\alpha} - a_-^{i+1-\alpha}}{a_+^{1-\alpha} - a_-^{1-\alpha}} \right). \tag{4.9}$$

Remplissage des boîtes de taille

Pour répartir selon une distribution MRN la masse ρ de poussières par unité de volume dans les $k_{\max}$ boîtes de taille, chaque boîte k doit recevoir la densité de masse par cm^3 :

$$\rho_k = \rho \left(\frac{\eta^{-(2+\beta)} - 1}{1 - \eta^{(2+\beta)k_{\max}}} \right) \eta^{(2+\beta)k}. \tag{4.10}$$

La distribution en taille des cœurs qui résulte de cette répartition par boîte est montrée sur la figure 4.2.

4.2.3 Distribution log-normale

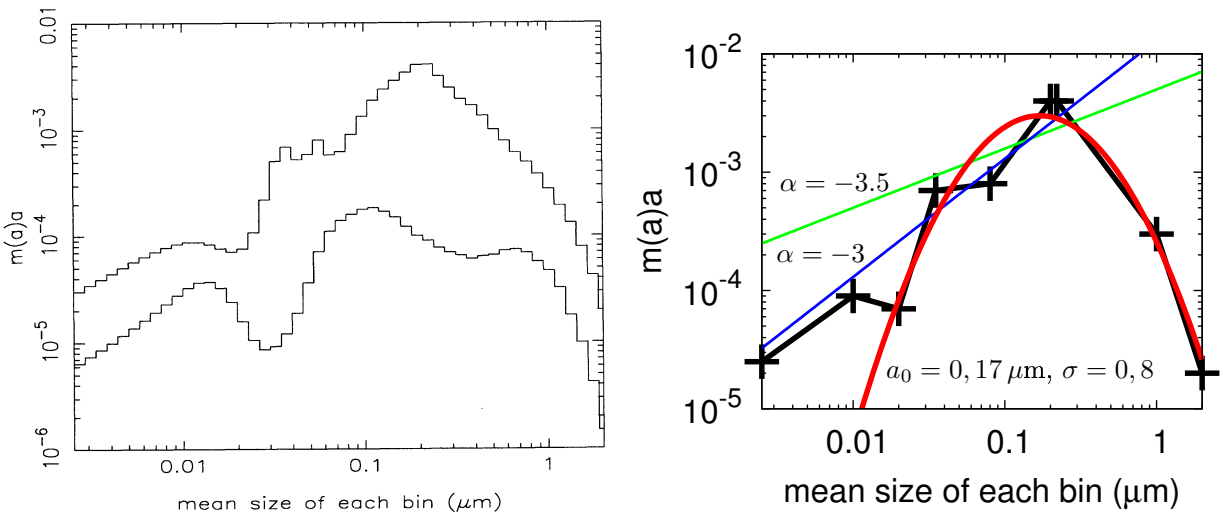
La figure 4.3a présente les distributions en taille des poussières silicatées et carbonées dans un nuage diffus ($R_v = 5,3$), déduites de la courbe d'extinction (Kim et al., 1994). Une distribution MRN ($\alpha = -3.5$, Fig. 4.3b) représente mal ces distributions en taille car elle surestime l'abondance des très petits grains par rapport aux observations (Stepnik et al., 2003). Cet inconvénient peut être contourné en modifiant le facteur α de la loi de puissance. Il est par exemple possible de modéliser la distribution en taille des poussières silicatées de la figure 4.3a par une loi de puissance avec $\alpha = -3$ pour $a \leq 0,2\mu$m. Cela introduit cependant une coupure abrupte de la distribution à 0,2 μm, inexistante dans la distribution en taille déduite des observations.

Les distributions log-normales n'ont pas ces défauts. Elles ont un profil log-gaussien qui se caractérise par une faible teneur en très petits grains et en très gros grains, et sont schématiquement comparables aux distributions en taille qui devraient résulter de la coagulation entre grains dans les milieux plus denses. Sur la figure 4.3b, la distribution en taille des poussières silicatées peut être représentée par une distribution log-normale sur l'intervalle de rayon [0,02 μm : 2 μm]. Ce modèle élimine la queue de la distribution en taille des très petits grains ($a <$ 0,02 μm) qui, à la différence des grosses tailles de grain ($a > 0,2\mu$m), n'est pas bien contrainte par ces observations (Kim et al., 1994).

Loi log-normale

Une distribution log-normale de moyenne μ et d'écart-type σ a une densité de probabilité $f(x)$ et une fonction de répartition $F(x)$:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma x \sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{-(\ln x - \mu)^2/2\sigma^2}, \tag{4.11}$$



(a) (b)

FIGURE 4.3 – (**a**) Distributions en taille de la masse de grains silicatés (courbe du haut) et carbonés (courbe du bas) pour un nuage diffus ($R_v = 5,3$). Extrait de Kim et al. (1994). (**b**) Cette distribution en taille des grains silicatés (croix reliées en noir) peut être, au choix, modélisée par une loi de puissance avec $\alpha = -3$ (droite bleue) pour $a < 0{,}2$ μm, qui ignore la présence des grains plus gros, ou par une loi log-normale (courbe rouge) centrée sur 0,17 μm et de variance $\sigma = 0,8$, qui fait abstraction des plus petits grains ($a < 0{,}02$ μm). La loi MRN ($\alpha = -3.5$, droite verte) ne convient pas pour décrire la distribution en taille dans ce milieu.

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\,\mathrm{erf}\left(\frac{\ln(x) - \mu}{\sigma\sqrt{2}}\right). \tag{4.12}$$

La distribution $f(x)$ atteint son maximum de probabilité pour $x = \mathrm{e}^{\mu+\sigma^2/2}$. Une distribution en taille de poussières suit une loi log-normale si :

$$\frac{\mathrm{d}n(a)}{\mathrm{d}a} = \frac{n}{\sigma a\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-(\ln(a/a_0))^2/2\sigma^2}, \tag{4.13}$$

où n est le nombre total de grains et $a_0 = \mathrm{e}^{\mu}$.

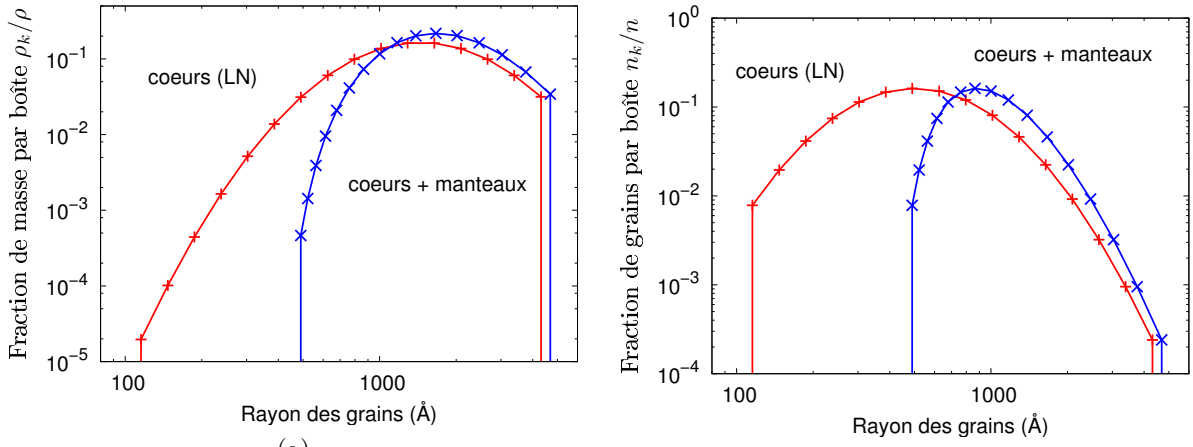
Grandeurs caractéristiques d'une distribution log-normale

Nous donnons, comme pour la distribution en loi de puissance, l'expression du nombre n de cœurs par unité de volume et des moments $\langle a^i \rangle$ du rayon pour une distribution log-normale :

$$n = \chi\left(\frac{1.4\,n_{\mathrm{H}}\,m_{\mathrm{H}}}{4/3\pi\,\rho_{\mathrm{C/Sil}}}\right)\mathrm{e}^{-\left(3\mu+9\sigma^2/2\right)}, \tag{4.14}$$

$$\langle a^i \rangle = \mathrm{e}^{i\mu+i^2\sigma^2/2} = a_0^i\,\mathrm{e}^{i^2\sigma^2/2}, \tag{4.15}$$

où χ est le rapport de la masse totale des poussières à celle du gaz, m_{H} la masse du proton, n_{H} la densité de protons du gaz, et a_- et a_+ les bornes inférieure et supérieure de la distribution.



(a) (b)

FIGURE 4.4 – Même chose que la figure 4.2 mais pour une distribution log-normale des cœurs ($a_0 = 500$ Å, $\sigma = 0,6$). Le nombre total de grains dans la distribution log-normale est ~ 10 fois moins élevé que dans la distribution MRN de la figure 4.2b. L'épaisseur du manteau est de 375 Å.

Remplissage des boîtes de taille

Le nombre de grains par unité de volume n_k que doit recevoir la boîte k est [1]

$$n_k = n\left(F(a_{k+}) - F(a_{k-})\right) = \frac{n}{2}\left[\mathrm{erf}\left(\frac{\ln\left(a_{k+}/a_0\right)}{\sqrt{2\sigma}}\right) - \mathrm{erf}\left(\frac{\ln\left(a_{k-}/a_0\right)}{\sqrt{2\sigma}}\right)\right] . \tag{4.16}$$

La méthode de Mizuno et al. (1988), décrite à l'annexe A de l'article 2, permet de déterminer la masse moyenne $\tilde{m}_k$ des grains de chaque boîte à partir de la donnée des n_k. On en déduit par normalisation la densité de masse ρ_k à distribuer dans chaque boîte k :

$$\rho_k = \rho\left(\frac{\tilde{m}_k\, n_k}{\sum_j \tilde{m}_j\, n_j}\right) . \tag{4.17}$$

Une distribution en taille log-normale est présentée sur la figure 4.4 pour $a_0 = 500$ Å et $\sigma = 0,6$. Le pic de la distribution de masse ρ_k/ρ est décalé [2] de celui de la distribution en densité.

4.3 Calcul de l'épaisseur des manteaux de glaces

Dans un nuage au repos, les taux d'accrétion et d'érosion des manteaux sont proportionnels à la section efficace géométrique des grains. L'épaisseur Δa de glace déposée à la surface

1. Cette répartition des grains se faisant sur une série géométrique de boîtes dont la taille augmente proportionnellement à a, le pic de la distribution en densité ρ_k/ρ correspond à $\mathrm{d}\left(x\, f(x)\right)/\mathrm{d}x = 0$ c'est-à-dire à $a = a_0$.

2. La distribution de masse n'est pas une distribution log-normale. Avec une distribution géométrique en boîtes de taille, cette distribution atteint son maximum quand $\mathrm{d}\left(x\, x^3\, f(x)\right)/\mathrm{d}x = 0$. On montre facilement que cela correspond à $a = a_0\, \mathrm{e}^{3\sigma^2} \simeq 1470$ Å comme on peut le voir sur la figure 4.4a.

de chaque grain est donc indépendante de la taille du grain et vérifie l'équation du troisième degré suivante (article 2, annexe B) :

$$n\Delta a^3 + 3\langle na\rangle\,\Delta a^2 + 3\langle na^{\,2}\rangle\Delta a = \frac{3\rho_m}{4\pi\rho_{\rm Man}}\,, \tag{4.18}$$

où ρ_m est la densité de masse totale des espèces chimiques présentes dans les manteaux (*cf.* table 4.2), $\rho_{\rm Man}$ est la densité spécifique des manteaux (prise égale à 1 $\mathrm{g\,cm^{-3}}$), et $\langle na^i\rangle$ sont les moments de la distribution en taille des cœurs (définis à l'annexe B de l'article 2). Avec les abondances des espèces chimiques dans les cœurs et dans les manteaux données dans les tables 4.1 et 4.2, le manteau a une épaisseur de ~ 150 Å pour nos deux distributions MRN de cœurs silicatés et carbonés sur [100 Å : 3000 Å].

La présence des manteaux modifie la répartition de la masse des poussières par taille de grains. Pour une distribution MRN des cœurs, la distribution en taille des grains n'est plus une MRN une fois prise en compte l'épaisseur des manteaux (Fig. 4.2). Le nombre de grains n'est pas modifié par l'ajout de manteaux mais la section efficace totale des grains recouverts de manteaux vaut alors environ 3 fois celle des cœurs. Les petits grains sont particulièrement affectés par la présence des manteaux. Ils portent ensemble la majeure partie de la masse des glaces, qui vaut environ la moitié de celle des cœurs (*cf.* tables 4.1 et 4.2).

Une distribution log-normale des cœurs caractérisée par $a_0 = 500$ Å et $\sigma = 0,6$ contient beaucoup moins de petits grains que notre distribution MRN (Fig. 4.4b). Les manteaux de glace ont en conséquence une plus grande épaisseur (~ 375 Å). Leur présence n'augmente la section efficace totale des grains que d'un facteur ~ 2, moins que pour une MRN.

Chapitre 5

Distribution de charge des poussières

*La charge portée par les poussières dans les ondes de choc est un paramètre clef de leur dynamique et donc des traitements qu'ils vont y subir. Dans les nuages au repos, la charge des poussières détermine également leur degré de couplage au champ magnétique, et donc la vitesse critique des chocs C (*cf. *chapitre 6). La charge des poussières n'étant pas une grandeur physique accessible aux observations comme peut l'être leur distribution en taille, la modélisation de la charge des poussières se base exclusivement sur des modèles théoriques appuyés sur des expériences de laboratoire (Spitzer, 1941; Draine & Salpeter, 1979b; Draine & Sutin, 1987; Weingartner & Draine, 2001).*

5.1 Processus de charge des grains

La distribution de charge des grains dans un plasma est le produit de la compétition entre plusieurs processus de charge. Dans le contexte astrophysique, la charge des grains semble resortir de trois processus majeurs : l'attachement, la recombinaison et la réflexion des électrons et des ions incidents sur la surface du grain, l'émission secondaire d'électrons, et l'éjection d'électrons par effet photoélectrique.

Les deux premiers processus sont à la base du microscope électronique à balayage (MEB). Le microscope électronique à balayage permet d'obtenir des images à très haute résolution (de l'ordre du nm) d'échantillons conducteurs (ou rendus conducteurs par dépôt d'une couche mince de métal). Un faisceau très fin d'électrons, monocinétique, balaie la surface d'un échantillon. Les interactions de ce faisceau avec l'échantillon sont détectées par un capteur qui contrôle la brillance d'un oscilloscope cathodique dont le balayage est synchronisé avec celui du faisceau d'électrons (*cf.* Cours de André Perrin sur la microscopie à balayage, Université Rennes I). L'échantillon conducteur est relié à la masse par un fil conducteur de manière à évacuer les charges qui sinon perturberaient le fonctionnement du microscope en portant l'échantillon à un potentiel négatif susceptible de dévier le faisceau électronique incident. Le capteur détecte les électrons *rétrodiffusés* par l'échantillon, dont l'énergie est comparable à celle des électrons incidents car leur collision avec l'échantillon est quasi-élastique, et les électrons *secondaires*, d'énergie beaucoup plus faible, arrachés à la matière par les électrons incidents ou rétrodiffusés (Fig. 5.1).

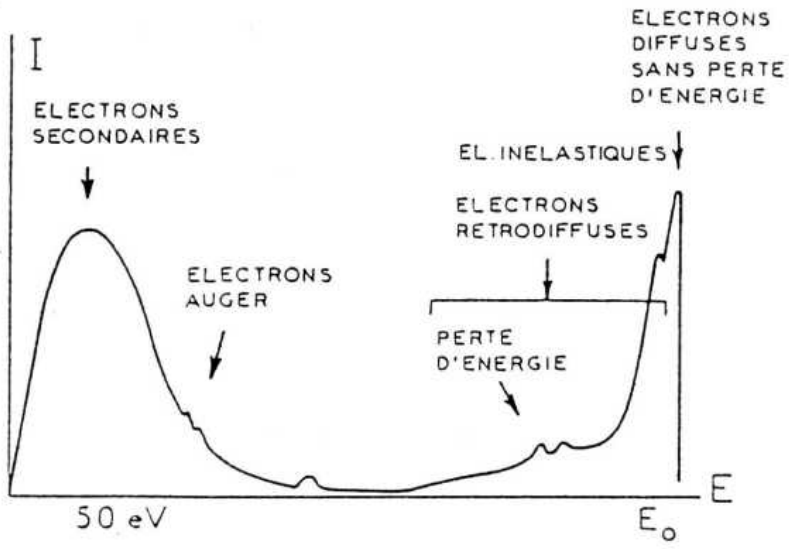


FIGURE 5.1 – Schéma de principe de la distribution en énergie des électrons issus d'un échantillon analysé par microscopie électronique à balayage. Le faisceau incident d'électrons a une énergie E_0. Extrait du cours en ligne de André Perrin sur la microscopie à balayage (Université Rennes I).

5.1.1 Attachement électronique et recombinaison des ions

Dans le milieu interstellaire, les poussières sont plongées dans un gaz ionisé ou partiellement ionisé, un plasma. Comme tout échantillon analysé au MEB, un grain de poussière reçoit un courant électrique composé des électrons et des ions du gaz qui entrent en collision avec lui. Nous retrouvons donc les mêmes processus de charge, avec cette différence que les grains acquièrent une charge qui n'est pas évacuée par un fil de masse comme dans le cas de l'échantillon du MEB. Le courant électrique apporte globalement des charges négatives à la surface du grain car la vitesse thermique des électrons est bien plus élevée [1] que celle des ions. Le grain se chargeant négativement, son potentiel électrique augmente dans les négatifs, ce qui affaiblit le courant des électrons et intensifie celui des ions, jusqu'à ce que le courant électrique total des ions et des électrons devienne nul. La charge du grain est alors à l'équilibre.

Le terme d'attachement est justifié pour les électrons qui se "collent" effectivement à la surface du grain, mais pas pour les ions. Les ions qui percutent le grain ne s'attachent pas au grain mais se recombinent avec des électrons du grain (et quelle que soit la charge du grain) pour produire des atomes ou des molécules. Ces produits de la recombinaison sont éjectés de la surface du grain si bien que le courant électrique de charge ne conduit à aucune accumulation de matière à la surface du grain.

1. D'un facteur $\sim 40\sqrt{\mu}$ où μ est la masse moyenne des ions exprimée en unité de masse atomique.

Charge moyenne à l'équilibre Si on se limite aux processus de charge par attachement électronique et recombinaison d'ions [1], la charge à l'équilibre d'un grain dans un plasma est négative et, pour des grains sphériques [2], proportionnelle à son rayon a et à la température T supposée commune des électrons et des ions (Spitzer, 1941).

$$\langle Z \rangle = \psi\tau\,, \tag{5.1}$$

$$1-\psi = \sqrt{\frac{m_\mathrm{i}}{m_\mathrm{e}}}\,\mathrm{e}^{\psi}\,, \tag{5.2}$$

$$\tau = \frac{akT}{e^2}\,, \tag{5.3}$$

où m_i est la masse moyenne des ions, m_e celle de l'électron, k la constante de Boltzman. Le facteur τ est appelé température réduite du grain, et ψ est un paramètre indépendant de la taille et de la nature du grain, qui ne dépend que de la composition du plasma [3]. Remarquons que la charge moyenne des grains ne dépend *pas* de la densité d'électrons libres n_e et d'ions libres n_i tant que $n_\mathrm{e} \simeq n_\mathrm{i}$ si les processus d'attachement collisionnels sont les seuls pris en compte.

Potentiel de surface à l'équilibre Un grain de charge moyenne à l'équilibre Ze est porté à un potentiel électrique de surface ϕ_s défini par :

$$Ze = C\phi_\mathrm{s} = a\,\phi_\mathrm{s}\,, \tag{5.4}$$

$$\psi = \frac{e\,\phi_\mathrm{s}}{kT}\,. \tag{5.5}$$

La constante ψ est donc simplement le rapport de l'énergie potentielle électrique du grain à l'énergie thermique des ions et des électrons incidents. Le facteur $C = a$ est la *capacité* d'un grain sphérique, au sens où celui-ci se comporte comme un condensateur.

Temps de charge Le temps de mise à l'équilibre de la charge d'un grain est inversement proportionnel au rayon du grain et à la densité électronique (Shukla & Mamun, 2002) [4] :

$$\tau_Z \propto \frac{1}{a\,n_\mathrm{e}}\,. \tag{5.6}$$

Les gros grains sont les plus rapides à réagir à toute variation de température ou de l'état d'ionisation du plasma. A l'inverse, les petits grains ont une *inertie électrique* importante qui les fait s'adapter avec retard à ces variations (*cf.* § 5.3.2). En conséquence le paramètre ψ, qui est indépendant de la taille du grain lorsque l'équilibre des charges est réalisé, en dépend dans des situations hors-équilibre.

1. Avec un rendement de 100 %, *cf.* § 5.1.2 pour la prise en compte de la réflexion/diffusion des ions et électrons incidents.

2. Le nombre de charges portées par un grain est plus élevé pour un grain non sphérique que pour un grain sphérique de même masse et de même densité, du fait d'un rapport surface sur volume plus important (Grün & Svestka, 1996).

3. ψ est négatif et vaut -2.504 pour un plasma composé uniquement de protons et d'électrons (Spitzer, 1941).

4. Cette dépendance se comprend assez simplement : le taux de collection d'électrons est proportionnel à $n_\mathrm{e}\,a^2$, et la charge à l'équilibre est proportionnelle à a.

Distributions de charge L'attachement des électrons et des ions est un phénomène stochastique. La charge à l'équilibre d'un grain n'est que le pic d'une distribution de charge dont la forme est celle d'une gaussienne centrée sur la charge moyenne, d'écart-type σ_Z proportionnel à la racine carrée de la température réduite τ du grain (Draine & Sutin, 1987) :

$$\sigma_Z = \sqrt{\frac{1-\psi}{2-\psi}}\,\sqrt{\tau} \propto \sqrt{aT}\,. \tag{5.7}$$

Nous avons développé un modèle numérique qui permet de suivre l'évolution temporelle de la distribution de charge de toute taille de grain plongé dans un plasma dont les caractéristiques peuvent évoluer. Si nous notons $f(Z)$ la probabilité au temps t pour que le grain ait la charge Z, alors l'évolution temporelle de cette probabilité suit l'équation différentielle :

$$\frac{\mathrm{d}f(Z)}{\mathrm{d}t} = f(Z+1)\,J_\mathrm{e}(Z+1) + f(Z-1)\,J_\mathrm{i}(Z-1) - f(Z)\,(J_\mathrm{e}(Z) + J_\mathrm{i}(Z))\;, \tag{5.8}$$

où J_e et J_i sont les taux d'attachements respectifs des électrons et des ions incidents à la surface du grain, dont nous donnerons l'expression au paragraphe 5.2.1. Partant d'un grain neutre (c'est-à-dire d'une distribution de charge initiale réduite à $f(0) = 1$), notre code intègre l'évolution des $f(Z)$ pour tout Z compris entre les bornes mobiles inférieure Z_inf et supérieure Z_sup. Chaque fois que nécessaire, ces bornes de l'intervalle de charge sont automatiquement déplacées de manière à embrasser toute l'étendue de la distribution de charge à la précision requise. Si les conditions physiques du plasma sont statiques, la distribution de charge integrée converge alors vers la distribution de charge du grain à l'équilibre, comme présenté sur la figure 5.2. Cette figure reproduit parfaitement les figures 5 à 10 de Draine & Sutin (1987) représentant la distribution de charge d'un grain en fonction de sa température réduite $\tau = akT/e^2$. Nous validons ainsi notre modèle numérique de calcul de la charge des poussières par attachement des ions et des électrons.

5.1.2 Réflexion/diffusion d'ions et d'électrons

L'effacité de l'attachement des ions et des électrons à la surface du grain est modélisée, indépendamment de la charge du grain [1], par un facteur noté s_i pour les ions et s_e pour les électrons appelé *coefficient de collage*. Ce facteur se révèle souvent critique pour la charge du grain.

Les ions ne semblent pas être notablement diffusés : une valeur $s_\mathrm{i} = 1$ est systématiquement prise dans la littérature (Umebayashi & Nakano, 1980). La situation est différente pour les électrons ($0.3 \leq s_\mathrm{e} \leq 1$, Umebayashi & Nakano, 1980). Les électrons ont en effet une probabilité non négligeable d'être diffusés, phénomène à la base du fonctionnement des microscopes électroniques à balayage. La figure 5.3 (Jurac et al., 1995) montre comment la fraction d'électrons diffusés sur des glaces dépend de l'énergie du faisceau incident d'électrons. Cette fraction est nulle à très basse énergie (ce qui correspond par exemple aux conditions physiques régnant dans les nuages moléculaires) : tous les électrons incidents restent attachés au grain ($s_\mathrm{e} = 1$). Elle atteint son maximum ($\sim 70\%$, soit $s_\mathrm{e} = 0,3$) pour

1. L'effet de la charge du grain sur la section efficace de collection des ions et des électrons est modélisé par les facteurs $\tilde{J}_\mathrm{e}$ et $\tilde{J}_\mathrm{i}$ (*cf.* § 5.2.1).

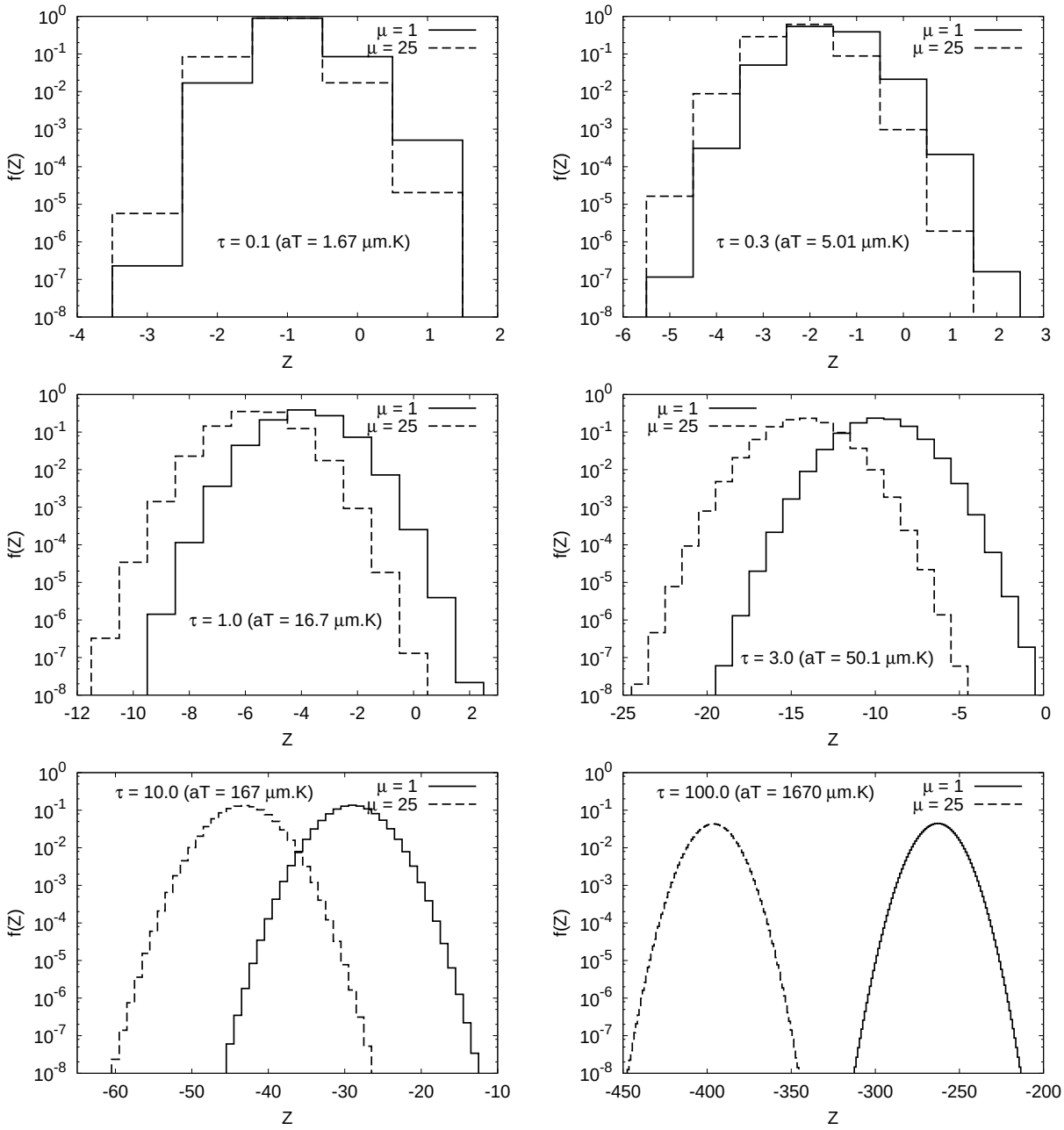


FIGURE 5.2 – Distributions de charge à l'équilibre d'un grain de rayon a plongé dans un plasma de température T pour deux valeurs de la masse moyenne des ions μ exprimée en unité de masse atomique et de la température réduite du grain $\tau = akT/e^2$. La figure en haut à gauche présente par exemple la distribution de charge d'un grain de 0,1 μm plongé dans un plasma à 16,7 K ou celle d'un grain de 0,01 μm dans un plasma à 167 K. Les seuls processus de charge pris en compte sont l'attachement des ions et des électrons, avec une efficacité de 100%. Ces figures reproduisent parfaitement les figures 5 à 10 de Draine & Sutin (1987)

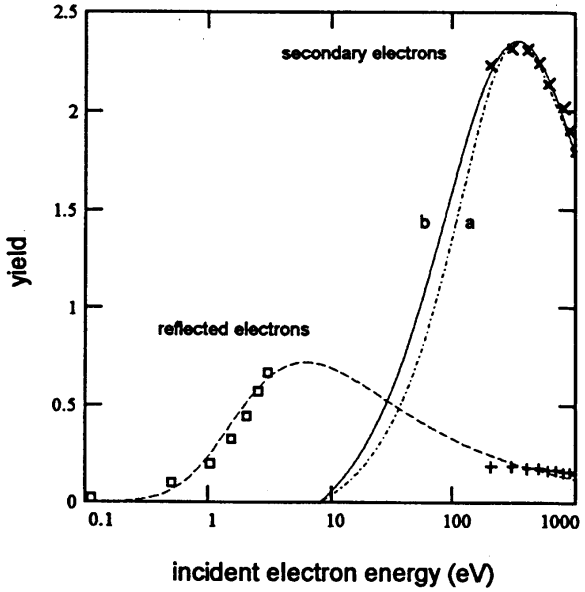


FIGURE 5.3 – Rendements expérimentaux de diffusion/réflexion des électrons incidents (carrés) et d'émission secondaire d'électrons (croix) pour des glaces et pour une incidence normale, en fonction de l'énergie des électrons incidents. Extrait de Jurac et al. (1995).

des énergies de l'ordre de 10 eV ou pour une température [1] de l'ordre de 50,000 K. Cette gamme d'énergie correspond en ordre de grandeur à celle des électrons dans les chocs de notre étude. Même à très haute énergie, une fraction non négligeable des électrons incidents est réfléchie ($s_e \simeq 0,8$). Il n'est donc pas justifié de négliger la réflexion des électrons, sauf à très basse énergie ($\ll 1$ eV). En présence d'électrons réfléchis, la valeur de la charge moyenne à l'équilibre des grains peut toujours se calculer à l'aide de l'équation (5.1) si on y remplace la masse des ions m_i par une masse effective $s_e^2 m_i$ dans l'équation (5.2) (Draine & Sutin, 1987).

Il nous semble prématuré d'inclure dans notre modèle de charge des grains la dépendance de s_e avec l'énergie des électrons présentée ci-dessus, dépendance propre à chaque matériau. Toutefois, et afin de ne pas sous-estimer la réflexion des électrons, nous choisissons une valeur moyenne $s_e = 0,5$, indépendante de l'énergie incidente des électrons et du matériau constituant la surface du grain (Weingartner & Draine, 2001).

5.1.3 Emission secondaire d'électrons

Pour des énergies supérieures à quelques dizaines d'électron-volts, les électrons incidents (et dans une moindre mesure les ions) peuvent éjecter un ou plusieurs électrons de la surface ou de l'intérieur du grain. L'émission secondaire d'électrons est un processus négligeable à basse énergie ($T \ll 10^5$ K) mais dominant à haute énergie où les grains acquièrent une charge positive.

Le rendement d'émission secondaire d'électrons dépend fortement des propriétés élec-

1. L'énergie thermique d'un électron est $2kT$ (Draine & Salpeter, 1979b).

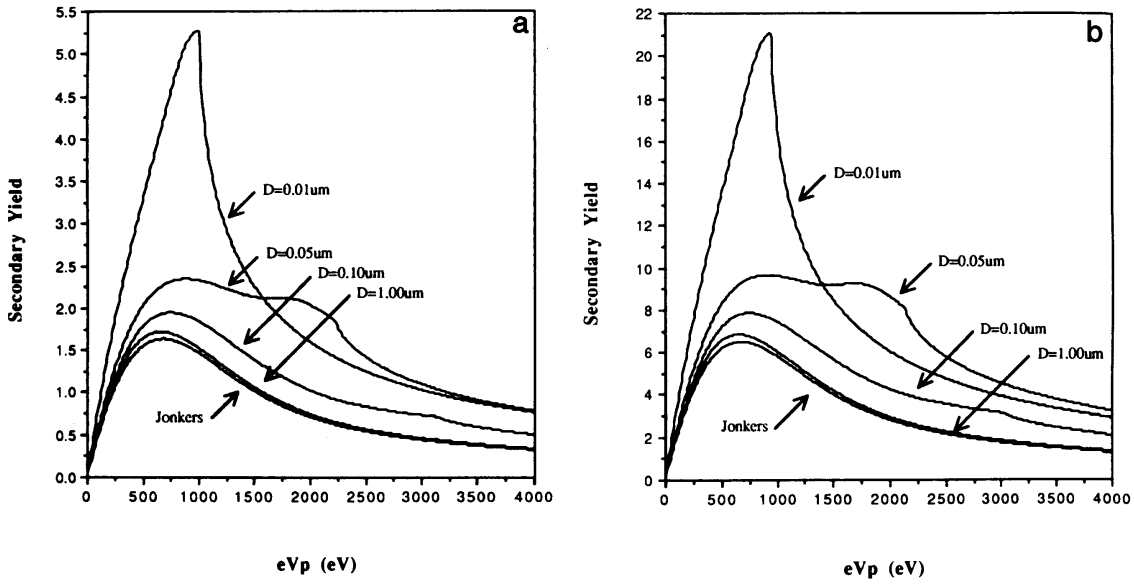


FIGURE 5.4 – Rendements d'émission secondaire à haute énergie pour différentes tailles de grains pour (**a**) un matériau conducteur et (**b**) un matériau isolant. La courbe intitulée *Jonkers* correspond au modèle d'émission secondaire pour le *bulk* du matériau, proche de notre Eq. (5.10). Ces deux graphes montrent l'augmentation du rendement d'émission secondaire pour les très petits grains ainsi que la différence importante de rendement entre les grains conducteurs et les grains isolants de même taille. Le domaine d'énergie ($E < 20 - 30$ eV) auquel nous nous intéressons dans cette thèse est à peine représenté sur ces courbes. Extrait de Chow et al. (1993).

Matériau	$\delta_{\rm m}$	$E_{\rm m}$ (eV)	$E_{\rm th}$ (eV)
silicate	2,9	420	5
carbone (graphite)	1,0	250	0
glace (H_2O)	3,2	410	8

TABLE 5.1 – Paramètres caractérisant l'émission secondaire d'électrons de différents matériaux composant les poussières. Les valeurs de $\delta_{\rm m}$ et $E_{\rm m}$ des cœurs carbonés et silicatés sont extraites de Draine & Salpeter (1979b) et celles des manteaux de glace de Suszcynsky et al. (1993). Le seuil d'activation de l'émission secondaire d'électrons est pris égal au *band gap* du matériau correspondant (Jurac et al., 1995)

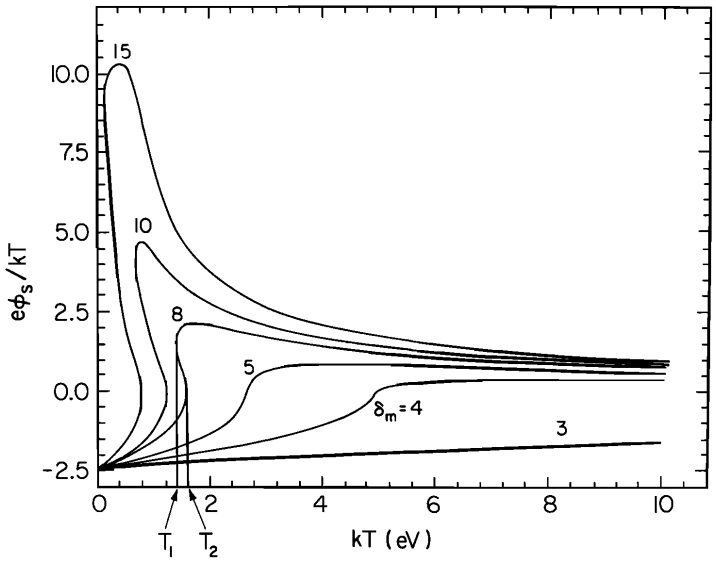


FIGURE 5.5 – Rapport $\psi = e\Phi_s/(kT)$ de l'énergie potentielle électrique à l'énergie thermique du plasma en fonction de la température T du plasma pour différentes valeurs du rendement d'émission secondaire δ_m. Pour des matériaux caractérisés par un rendement d'émission secondaire élevé ($\delta_m \geq 8$), le paramètre ψ d'un grain peut, pour des températures faibles ($T < 2$ eV), être positif ou négatif selon la taille ou l'histoire du grain. Extrait de Goertz (1989).

triques du grain. Il est faible pour les matériaux conducteurs, et élevé pour les semi-conducteurs et isolants. L'efficacité de ce processus augmente quand la taille du grain diminue car des électrons peuvent alors être éjectés par les faces latérales ou arrière du grain (Draine & Salpeter, 1979b; Chow et al., 1993; Jurac et al., 1998). Cet effet est mis en évidence sur la figure 5.4. L'émission secondaire d'électrons a également un seuil d'activation (de l'ordre de 10 eV, Fig. 5.3) que Jurac et al. (1995) proposent de fixer au *band-gap* du matériau, soit une énergie comprise entre 0 eV (pour les conducteurs) et 10 eV (pour les isolants).

Suivant le modèle de Draine & Salpeter (1979b), le rendement $\delta_{\rm bulk}$ d'émission secondaire d'électrons sur les gros grains pour un faisceau d'électrons d'énergie E_0 en incidence normale a pour expression :

$$\delta_{\rm bulk} = \delta_{\rm m} \frac{4\,(E_0/E_{\rm m})}{(1+E_0/E_m)^2} \tag{5.9}$$

$$E_0 = \max(0, 2kT - E_{\rm th})\,, \tag{5.10}$$

où le seuil d'activation $E_{\rm th}$ est déduit de l'énergie incidente du faisceau E_0, et $\delta_{\rm m}$ est le rendement maximal obtenu pour une énergie $E_{\rm m}$ du faisceau incident (*cf.* Table 5.1 pour les valeurs de ces paramètres en fonction de la nature du matériau composant le grain). L'allure générale de la dépendance du rendement $\delta_{\rm bulk}$ en fonction de l'énergie E_0 est montrée sur la figure 5.3 pour les basses énergies, et 5.4 pour les hautes énergies. Le rendement d'émission secondaire d'un matériau conducteur diffère fortement de celui d'un isolant. Choisir le graphite (conducteur) plutôt qu'un carbone amorphe (isolant) pour modèle de la population

de grains carbonés, c'est donc également faire un choix sur le modèle de charge. La présence d'un manteau de glace affecte également le rendement d'émission secondaire, et donc la charge du grain [1].

Flip-Flop du potentiel électrique

Meyer-Vernet (1982) a démontré que l'équation définissant la charge à l'équilibre des grains en présence d'émission secondaire peut avoir deux racines stables, positives et négatives. Cela peut se produire pour des valeurs élevées du rendement $\delta_{\rm m}$ d'émission secondaire d'électrons (Fig. 5.5) mais également si la distribution en vitesse des électrons est composée d'une maxwellienne chaude ($\gg 10$ eV) et de quelques pourcents d'électrons très chauds. Il peut donc y avoir coexistence de grains positifs et négatifs dans un même milieu si l'émission secondaire est efficace ; la charge portée par un grain dépend alors de son histoire et de l'histoire des fluctuations de la température du plasma. Nous verrons aux chapitres 10 et 11 que, même en l'absence d'émission secondaire, des gros grains chargés positivement peuvent exister en présence de très petits grains chargés négativement suite à l'apparition d'une pénurie d'électrons libres.

5.1.4 Effet photoélectrique

L'émission d'électrons par effet photoélectrique est le processus dominant de charge des poussières dans les milieux où le champ de rayonnement stellaire n'est pas écranté (régions H II, nuages diffus, régions de photodissociation, etc.). Dans ces environnements, l'effet photoélectrique arrache très efficacement les électrons de la surface des grains et leur confère une charge positive [2]. Le rendement photoélectrique dépend de la distribution en énergie des photons UV, et des propriétés physiques du matériau constituant le grain. La figure 5.6 décrit la distribution en énergie des photons du champ de rayonnement interstellaire de Mezger et al. (1982) en fonction de l'énergie des photons. Pour cette modélisation de l'effet photoélectrique, nous avons repris le modèle de calcul du rendement et du seuil de photoémission de Weingartner & Draine (2001). Ce modèle décrit à l'annexe D.3, finalement peut-être trop compliqué pour nos besoins, est utilisé pour calculer la charge des grains dans les nuages diffus (§ 5.2.2) et dans les chocs du milieu ténu (§ 5.3.1).

L'effet photoélectrique est également un processus mineur de charge des poussières à l'intérieur des nuages denses protégés du rayonnement interstellaire. Ce sont les photons UV secondaires produits par l'interaction des rayons cosmiques avec le dihydrogène du nuage qui en sont responsables. Le taux ζ d'ionisation par les rayons cosmiques, pris égal à $10^{-17}\,{\rm s}^{-1}$ dans notre modèle de référence, dicte l'abondance des photons UV secondaires à l'intérieur du nuage. L'effet des photons secondaires sur la charge des grains dans les nuages denses s'avère en fin de compte négligeable (*cf.* article 2 et § 5.2.1).

1. Notre modèle de traitement démontre que les manteaux de glace ne disparaissent pas forcément de la surface des grains dans les chocs J des vitesses inférieures à 50 $\rm km\,s^{-1}$ (*cf.* chapitre 9).

2. L'effet photoélectrique sur les grains est responsable de l'injection en phase gazeuse d'électrons très énergétiques qui sont le principal vecteur de chauffage du gaz.

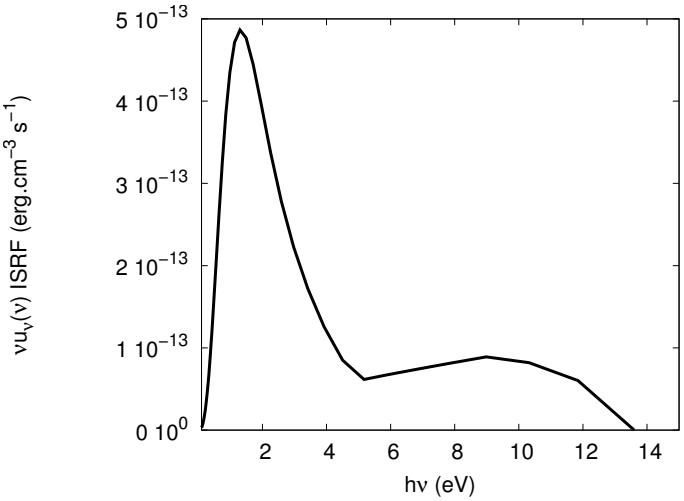


FIGURE 5.6 – Distribution en densité d'énergie des photons de l'ISRF de Mezger et al. (1982) telle que définie par l'équation (25) de Weingartner & Draine (2001). Seuls les photons d'énergie supérieure à $\sim$ 6 eV sont susceptibles d'arracher des électrons de la surface des grains (*cf.* annexe D.3 pour le profil du rendement de photoémission en fonction de l'énergie des photons.)

5.1.5 Emission de champ

Des grains trop chargés positivement (resp. négativement) émettent spontanément des ions (resp. des électrons). Cette émission spontanée appelé *émission de champ* est due à l'intense champ électrique généré à la surface du grain par une trop grande charge. Elle impose des bornes à la charge pouvant être portée par un grain. La charge positive maximale d'un grain est très élévée et donc peu limitative. Par contre, la charge maximale négative que peut porter un grain est assez basse (Draine & Sutin, 1987; Weingartner & Draine, 2001), et peut par exemple faire saturer la charge des très petits grains dans les chocs J.

5.1.6 Autres processus de charge

Shukla & Mamun (2002) citent d'autres processus de charge qui, dans des contextes autres que les nuages denses, pourraient devenir importants.

Emission thermo-ionique Un grain chauffé à haute température émet spontanément des ions et des électrons de sa surface, et tend à se charger positivement.

Radioactivité Les grains formés dans les novæ et supernovæ pourraient être très radioactifs. L'émission β de la désintégration radioactive pourrait les charger positivement.

Ionisation d'impact L'impact de particules (atomes, ions) est, selon Shukla & Mamun (2002), susceptible de ioniser la surface, et donc de charger le grain. Cet effet, peu documenté à notre connaissance, pourrait être dominant dans les chocs C se propageant dans les milieux

peu ionisés s'il est efficace à basse énergie (< 20 eV) car les atomes et les molécules y sont des *millions* de fois plus abondants que les ions et les électrons.

5.2 Distributions de charge des poussières dans les nuages au repos

La distribution de charge des poussières dans les nuages au repos est un passage obligé pour déterminer la fraction d'ionisation dans les nuages denses (Elmegreen, 1979; Umebayashi & Nakano, 1980; Draine & Sutin, 1987). Nous présentons dans cette section nos résultats numériques pour les nuages denses et diffus.

5.2.1 Dans les nuages denses

Dans les nuages denses, la distribution de charge des grains est dictée par la compétition entre l'attachement des électrons, la recombinaison des ions, et la photoémission d'électrons induite par les photons secondaires ultraviolets. La fraction d'ionisation y est très faible. Hartquist et al. (1992) proposent l'expression approximative suivante :

$$X_{\rm i} = \frac{n_{\rm i}}{n_{\rm H}} \simeq 3.10^{-8} \left(\frac{n_{\rm H}}{10^5\,{\rm cm}^{-3}}\right)^{-1/2} . \tag{5.11}$$

Notre modélisation de l'attachement des ions et des électrons s'appuie sur l'étude de Draine & Sutin (1987) qui prend en compte la polarisibilité des grains [1]. Les taux d'attachements des électrons $J_{\rm e}$ et des ions $J_{\rm i}$ ont pour expression (Draine & Sutin, 1987) :

$$J_{\rm e}(Z) = s_{\rm e}\, n_{\rm e}\, \sigma \sqrt{\frac{8kT_{\rm e}}{\pi m_{\rm e}}}\, \tilde{J}(\tau = \frac{akT_{\rm e}}{e^2}, \nu = -Z)\,, \tag{5.12}$$

$$J_{\rm i}(Z) = s_{\rm i}\, n_{\rm i}\, \sigma \sqrt{\frac{8kT_{\rm i}}{\pi m_{\rm i}}}\, \tilde{J}(\tau = \frac{akT_{\rm i}}{e^2}, \nu = Z)\,, \tag{5.13}$$

$$\tilde{J}(\tau, \nu < 0) \simeq \left(1 - \frac{\nu}{\tau}\right)\left(1 + \sqrt{\frac{2}{\tau - 2\nu}}\right) , \tag{5.14}$$

$$\tilde{J}(\tau, \nu = 0) = 1 + \sqrt{\frac{\pi}{2\tau}}\,, \tag{5.15}$$

$$\tilde{J}(\tau, \nu > 0) \simeq \left(1 + \frac{1}{\sqrt{4\tau + 3\nu}}\right)^2 e^{-\left(\frac{\nu}{\tau\,(1+1/\sqrt{\nu})}\right)}\,, \tag{5.16}$$

où le coefficient de collage des électrons $s_{\rm e}$ est pris égal 0,5 et celui des ions $s_{\rm i}$ à 1 (Weingartner & Draine, 2001). Le taux d'attachement réduit $\tilde{J}$ quantifie l'interaction coulombienne entre le grain et la particule incidente chargée en y intégrant la polarisation du grain induite à l'approche de la particule chargée. $\tilde{J}$ est fonction du rapport ν de la charge du grain à celle de la particule. Il dépend du rayon du grain a et de la température T des électrons et des ions au travers de la température réduite $\tau = akT/e^2$ (Draine & Sutin, 1987).

1. La polarisation d'un grain survient à l'approche de la particule chargée. Cette polarisation augmente le potentiel électrique d'interaction entre la particule chargée et le grain d'un facteur $\alpha = (\epsilon - 1)/(\epsilon + 2)$ où

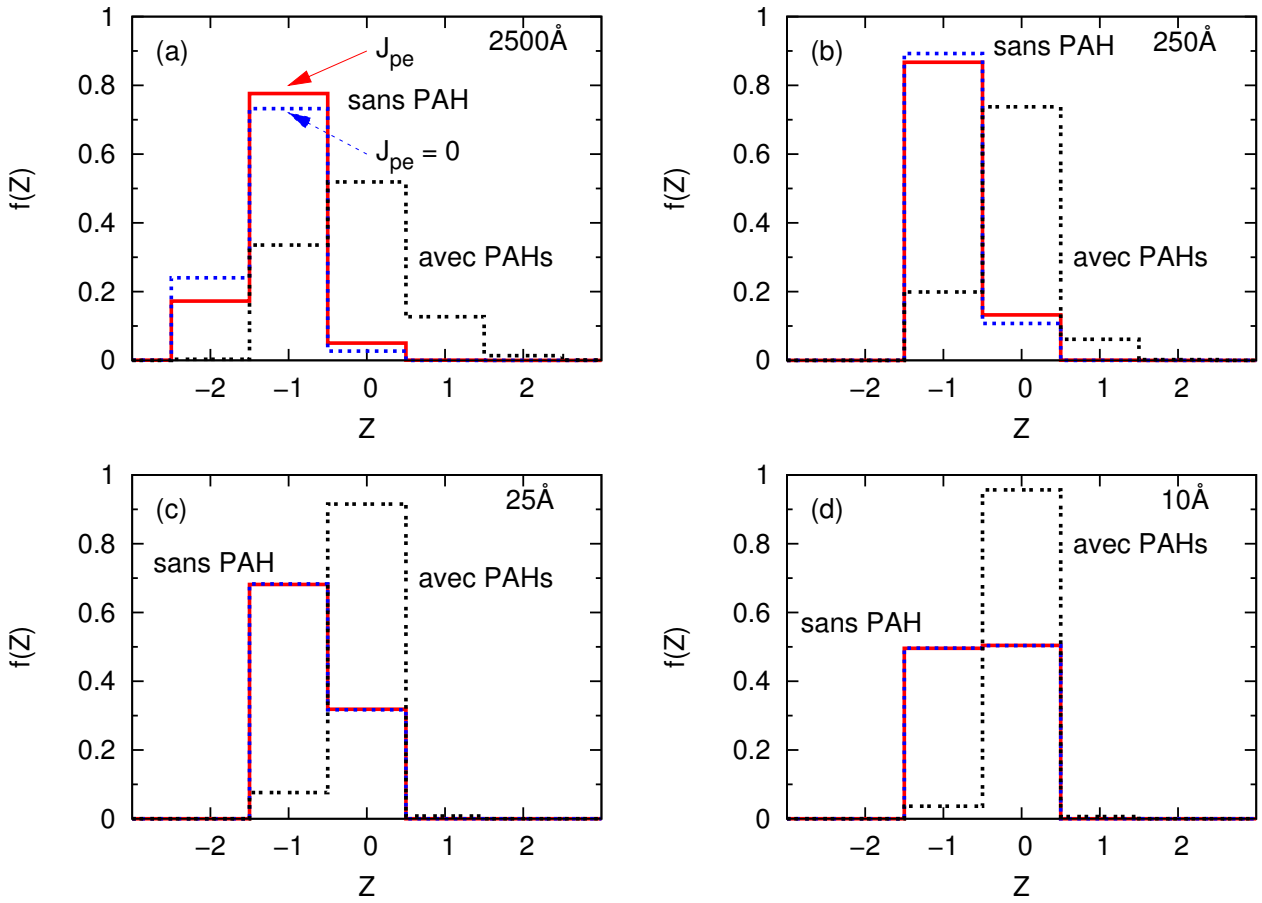


FIGURE 5.7 – Distributions de charge de grains silicatés dans un nuage moléculaire caractérisé par $T = 10\,\mathrm{K}$, $n_\mathrm{H} = 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$ et $\zeta = 10^{-17}\,\mathrm{s}^{-1}$. (**a**) Grain de 2500 Å (rouge), sans photoémission des électrons par les photons secondaires (vert), avec une densité fractionnelle de PAHs $X(\mathrm{PAH})=10^{-6}$ (bleu) ; (**b**) (**c**) et (**d**) Comme pour (**a**) pour des grains silicatés de 250 Å, 25 Å et 10 Å. Une abondance fractionnelle $X(\mathrm{PAH})=10^{-6}$ de PAHs crée une pénurie d'électrons ($n_\mathrm{e} = 2,5.10^{-9}$ cm^{-3} $\ll n_\mathrm{i} = 5,5.10^{-8}$ cm^{-3}). La distribution de charge des grains carbonés est presque identique à celle des grains silicatés.

Notre modèle d'émission photoélectrique sur les poussières due aux photons secondaires se fonde sur les travaux de Flower & Pineau des Forêts (2003) et de Weingartner & Draine (2001). Les photons secondaires présentent une distribution en énergie (Fig. 5.8, Gredel et al., 1989), qui est prise en compte dans le traitement de l'effet des photons secondaires sur le gaz, mais pas sur les poussières. Pour les poussières, nous considérons que tous les photons secondaires ont une même énergie égale à 10 eV. Le taux d'émission photoélectrique des électrons sur un grain de rayon a, de section efficace σ a pour expression :

$$J_\mathrm{pe}(Z) = 0,15\,\zeta\,n_\mathrm{H}\,Y(a,Z)\frac{Q_\mathrm{abs}(a)\,\sigma}{\langle Q_\mathrm{abs}\sigma n\rangle}\,, \tag{5.17}$$

où $\langle Q_\mathrm{abs}\sigma n\rangle$ est la section efficace d'absorption des photons secondaires de toute la distri-

ϵ est la constante diélectrique du matériau (Draine & Sutin, 1987).

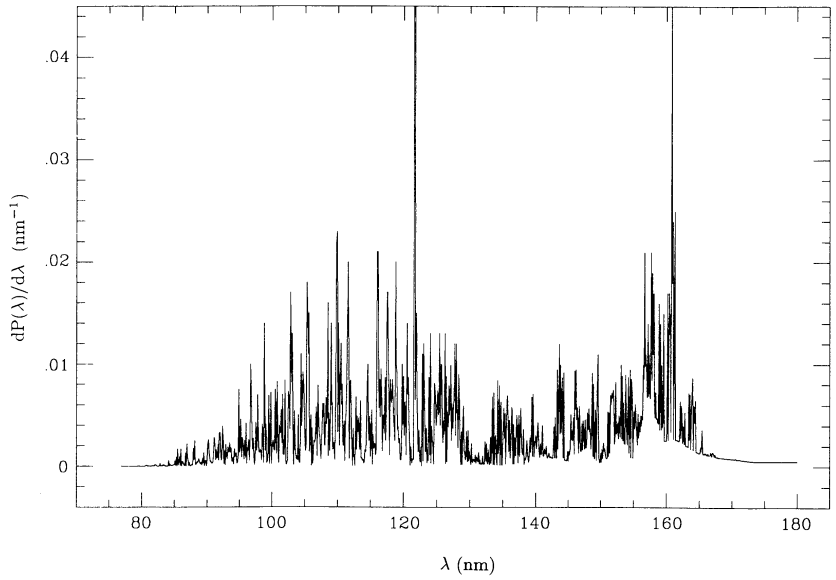


FIGURE 5.8 – Spectre d'émission de H_2 entre 75 et 175 nm, présenté en nombre de photons émis par nm. Extrait de Gredel et al. (1989).

bution des poussières (incluant les éventuels PAHs), ζ est le taux d'ionisation par les rayons cosmiques, $n_{\rm H}$ la densité de protons, et $Y(a, Z)$ le rendement photoélectrique dont le calcul, basé sur le modèle de Weingartner & Draine (2001), est présenté à l'annexe D.3. L'émission photoélectrique incluse, l'équation différentielle régissant l'évolution de la distribution en charge d'un grain devient :

$$\frac{{\rm d}f(Z)}{{\rm d}t} = f(Z+1)\,J_{\rm e}(Z+1) + f(Z-1)\,\left(J_{\rm i}+J_{\rm pe}\right)(Z-1) - f(Z)\,\left(J_{\rm e}+J_{\rm i}+J_{\rm pe}\right)(Z)\,. \quad (5.18)$$

La figure 5.7 montre les distributions de charge des grains obtenues pour l'intérieur d'un nuage moléculaire au repos ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, $T = 10$ K, $\zeta = 10^{-17}\,{\rm s}^{-1}$). On constate que les photons secondaires ont une influence quasi-négligeable sur la distribution en charge des grains. Les distributions de charge des grains carbonés (non présentées ici) sont quasi-identiques à celles des grains silicatés de même taille parce que ces deux types de grains ne diffèrent dans notre modèle de charge que par leur rendement photoélectrique qui a ici peu d'influence. Les manteaux de glace modifient la charge des petits grains en augmentant significativement (d'un facteur $\sim 2{,}5$ pour grain de 100 Å) le rayon du grain qui détermine leur charge moyenne (Eq. (5.1)). La présence d'une forte abondance fractionnelle de PAHs ($X({\rm PAH}) = 10^{-6}$) modifie profondément la distribution en charge des grains. En effet, les PAHs sont de gros consommateurs d'électrons [1] et créent, dans un milieu déjà peu ionisé, une

1. De manière générale, à masse totale égale, une population de petits grains capte plus d'électrons qu'une population de gros grains. Cela tient au fait que la charge à l'équilibre d'un grain sphérique est proportionnelle à son rayon.

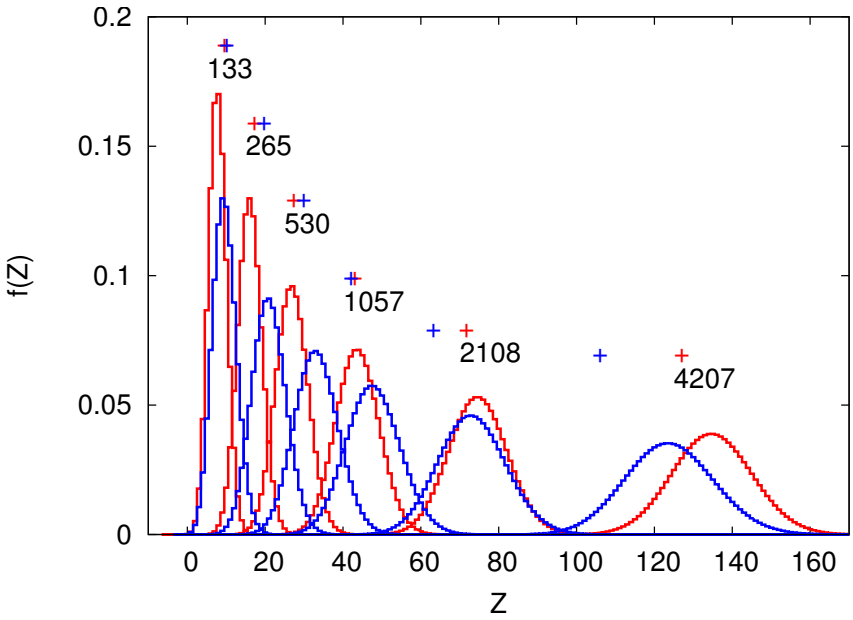


FIGURE 5.9 – Distributions de charge à l'équilibre de grains silicatés (rouge) et carbonés (bleu) dont les rayons sont indiqués en Å, comparées aux charges moyennes données par le programme CLOUDY (croix), dans un nuage caractérisé par : $n_{\rm H} = 30$ cm^{-3}, $T = 100$ K, $n_{\rm e} = 1,49.10^{-2}$ cm^{-3}, et un champ de rayonnement $1 \times$ ISRF.

pénurie d'électrons libres dans le gaz [1]. Cette pénurie d'électrons limite le courant de charge des électrons sur les grains, sans changer celui des ions, ce qui pousse la charge des grains vers zéro, voire vers les charges positives. Draine & Sutin (1987) donnent l'expression permettant de calculer la charge moyenne des grains en cas de pénurie d'électrons. Il suffit de remplacer la masse moyenne des ions $m_{\rm i}$ dans l'équation (5.2) par la masse effective $(n_{\rm e}/n_{\rm i})^2 m_{\rm i}$.

5.2.2 Dans les nuages diffus

Dans les nuages diffus, l'effet photoélectrique induit par le champ de rayonnement interstellaire tend à dominer l'attachement des ions et des électrons. Notre modélisation de l'émission photoélectrique dans le milieu diffus reprend le modèle de Weingartner & Draine (2001) déjà utilisé pour l'émission photoélectrique par les photons secondaires dans les nuages denses, mais en intégrant cette fois-ci l'équation différentielle (5.18) avec le taux de photoémission $J_{\rm pe}$ calculé sur la distribution en énergie des photons de l'ISRF (Fig. 5.6) :

$$J_{\rm pe} = \pi a^2 \int_{\nu_{\rm pet}}^{\nu_{\rm max}} Y(a, h\nu, Z)\, Q_{\rm abs}(a, h\nu, Z)\, \frac{c u_\nu}{h\nu}\, {\rm d}\nu\,, \tag{5.19}$$

où $\nu_{\rm pet}$ est la fréquence seuil de photoémission, $h\nu_{\rm max} = 13.6$ eV, et $Y(a, h\nu, Z)$ est le rendement de photoémission d'un photon d'énergie $h\nu$ sur un grain sphérique de rayon a et de charge Ze. Se référer à l'annexe D.3 pour les détails de cette modélisation.

1. Il y a pénurie d'électrons libres dans un gaz quand $n_{\rm e} \ll n_{\rm i}$. C'est une propriété caractéristique des plasmas poussiéreux (*cf.* § 5.4).

Le programme CLOUDY peut calculer la charge des grains dans ce type d'environnement. La figure 5.9 montre l'allure des distributions de charges, obtenues avec notre modèle pour quelques tailles de grains silicatés et carbonés dans un nuage diffus caractérisé par $n_{\rm H} = 30$ cm^{-3}, $T = 100$ K, $n_{\rm e} = 1,49.10^{-2}$ cm^{-3} et un champ de radiation égal au champ de rayonnement interstellaire de Mezger et al. (1982). Ces distributions de charges sont comparées aux charges moyennes portées par les grains telles que les calcule CLOUDY dans les mêmes conditions. L'accord est raisonnable mais est loin d'être parfait, alors que notre code et le programme CLOUDY sont tous deux basés sur le modèle de Weingartner & Draine (2001).

Nous comparons également les distributions de charge calculées par ce modèle pour des grains silicatés et carbonés (Fig. 5.10 et 5.12) avec celles obtenues par (Draine, 2002, Fig. 5.11 et Fig. 5.13) dans un nuage diffus pour deux valeurs du champ de rayonnement interstellaire. Les différences entre les distributions de charge des grains carbonés et silicatés sont dues aux paramètres physiques de chaque matériau qui diffèrent pour la photoémission. L'accord avec les résultats de Draine (2002) est qualitativement correct, mais notre modèle tend à surestimer la charge portée par les grains d'un facteur < 2.

Cette modélisation de la charge des grains dans les milieux baignés par un champ de rayonnement servira dans un proche avenir à étudier la coagulation des grains à l'interface de la phase diffuse et de la phase dense (*cf.* mon projet de recherche au chapitre 12), et peut-être aussi le traitement des grains dans les régions de photodissociation.

5.3 Charge hors-équilibre des poussières dans les chocs

Dans les chocs de supernovæ se propageant dans les milieux ténus, les grains sont tellement chargés par les hautes températures du plasma que leur distribution de charge peut être négligée au profit du calcul de leur seule charge moyenne. La charge moyenne des grains de toutes tailles est en outre proche de la charge à l'équilibre en raison du haut degré d'ionisation du gaz (*cf.* Eq. (5.6)). Ces conditions physiques justifient de ne prendre en considération que la charge moyenne à l'équilibre des grains (McKee et al., 1987; Jones et al., 1994, 1996).

Cette approximation n'est pas justifiée pour l'étude de la charge des grains dans les chocs des milieux denses. Le gaz dans ces chocs reste en effet très peu ionisé, ce qui favorise un comportement hors-équilibre de la charge des très petits grains ($a \ll 100$ Å). Un modèle numérique a donc été développé qui, selon la situation, intègre la charge moyenne hors-équilibre ou la distribution de charge hors-équilibre des grains dans un choc. La charge des grains dans les chocs dépendant de la trajectoire du grain et de la vitesse de giration du grain[1], l'intégration de la charge est couplée à la dynamique du grain.

5.3.1 Dans les chocs J

Dans les chocs J, nous intégrons la charge moyenne hors-équilibre de chaque taille de grain. Les processus de charge à l'œuvre sont l'attachement (et la réflexion) d'ions et d'électrons, l'émission secondaire des électrons et l'émission photoélectrique pour les chocs à pré-

1. La vitesse thermique des électrons étant toujours très supérieure à la vitesse relative des grains, le taux de collection des électrons ne dépend pas de la dynamique des grains. Seul le taux de recombinaison des ions sur les grains dépend de leur dynamique.

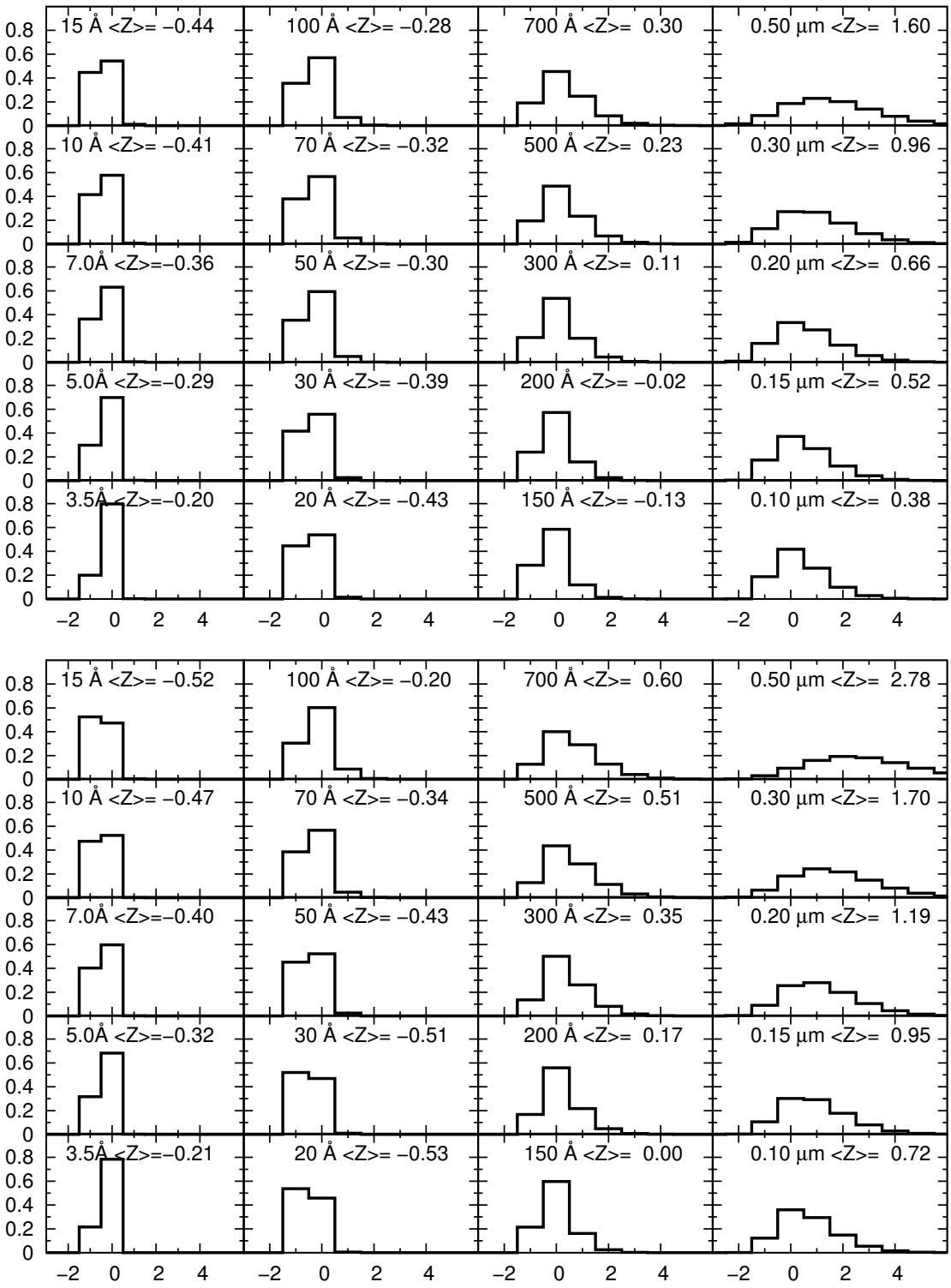


FIGURE 5.10 – Distributions de charge de grains (**Haut**) carbonés et (**Bas**) silicatés de différentes tailles plongés dans les conditions physiques suivantes : champ de rayonnement 0,1 × ISRF, $T = 25$ K, $n_{\rm H} = 300$ cm^{-3}, $X_{\rm e} = 10^{-4}$ ($n_{\rm e} = 0{,}03$ cm^{-3}). Cette figure reproduit de manière satisfaisante la figure (29) de Draine (2002), reproduite ci-contre (Fig. 5.11).

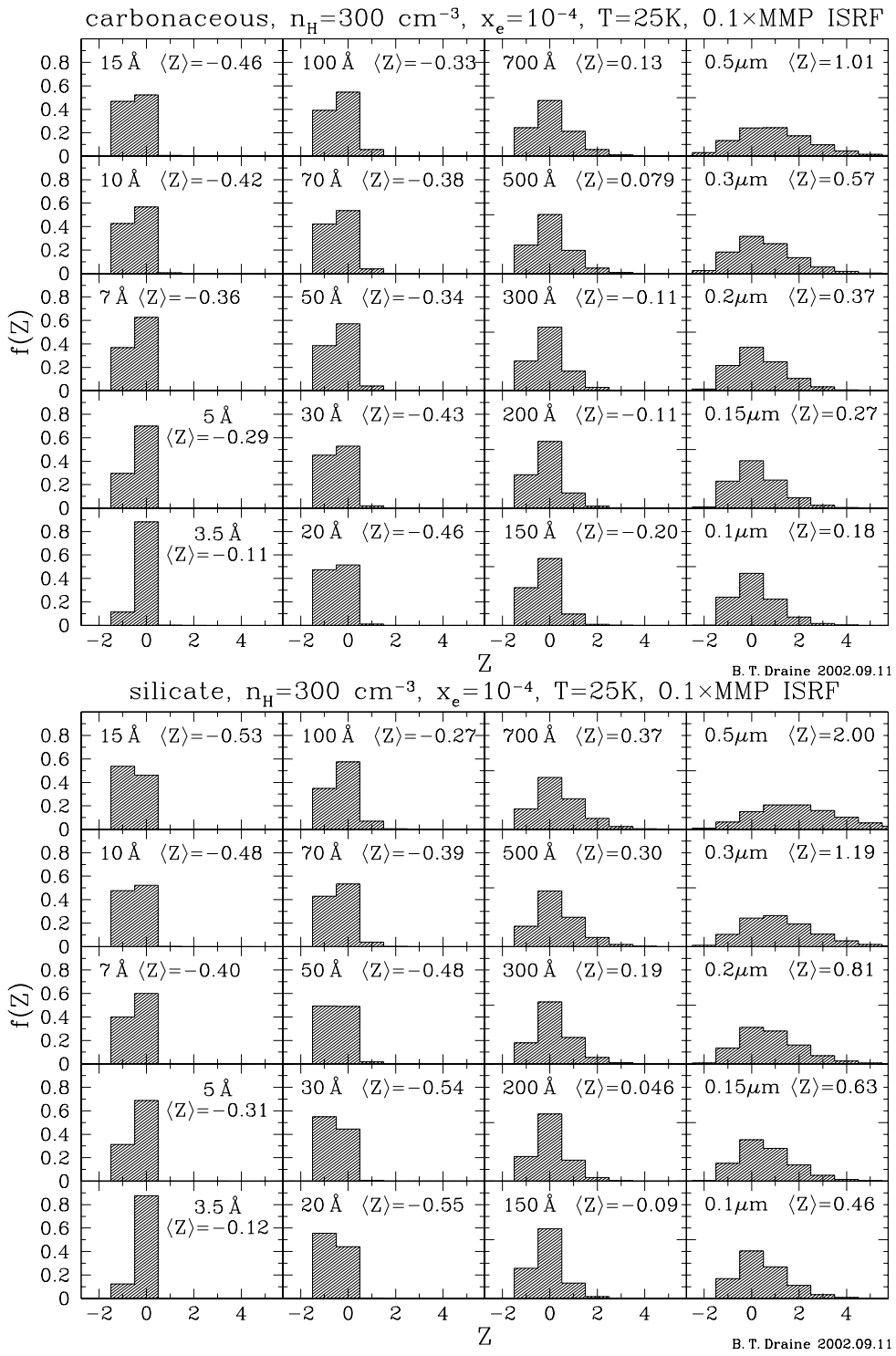


FIGURE 5.11 – *Charge distribution functions for carbonaceous grains and silicate grains in cold molecular gas.* Reproduction de la figure (29) de Draine (2002) pour comparaison avec la figure 5.10.

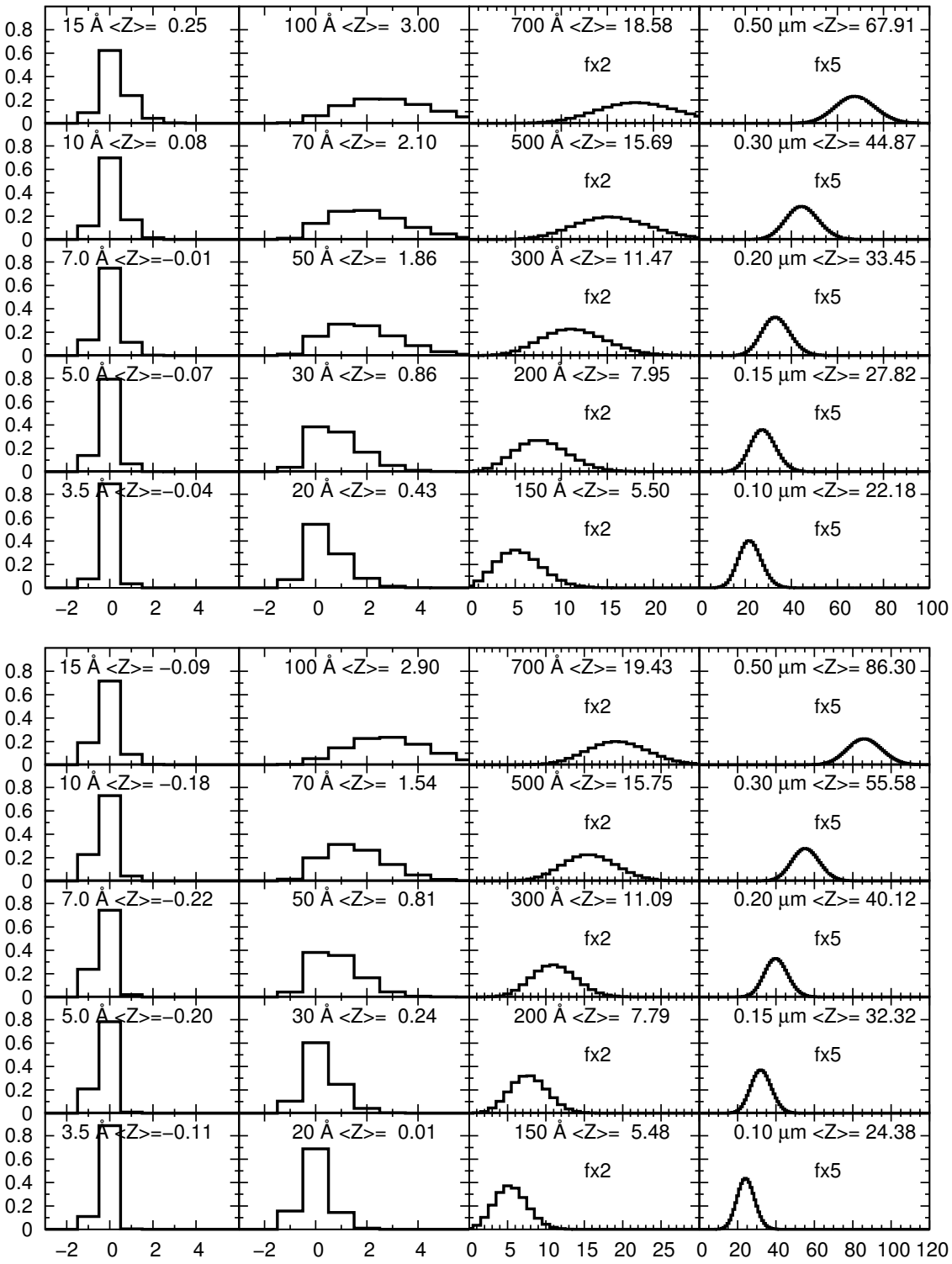


FIGURE 5.12 – Distributions de charge de grains (**Haut**) carbonés et (**Bas**) silicatés de différentes tailles plongés dans les conditions physiques suivantes : champ de rayonnement 1 × ISRF, $T = 100$ K, $n_{\mathrm{H}} = 30$ cm^{-3}, $X_{\mathrm{e}} = 10^{-3}$ ($n_{\mathrm{e}} = 0{,}03$ cm^{-3}). Cette figure reproduit de manière satisfaisante la figure (30) de Draine (2002), reproduite ci-contre (Fig. 5.13).

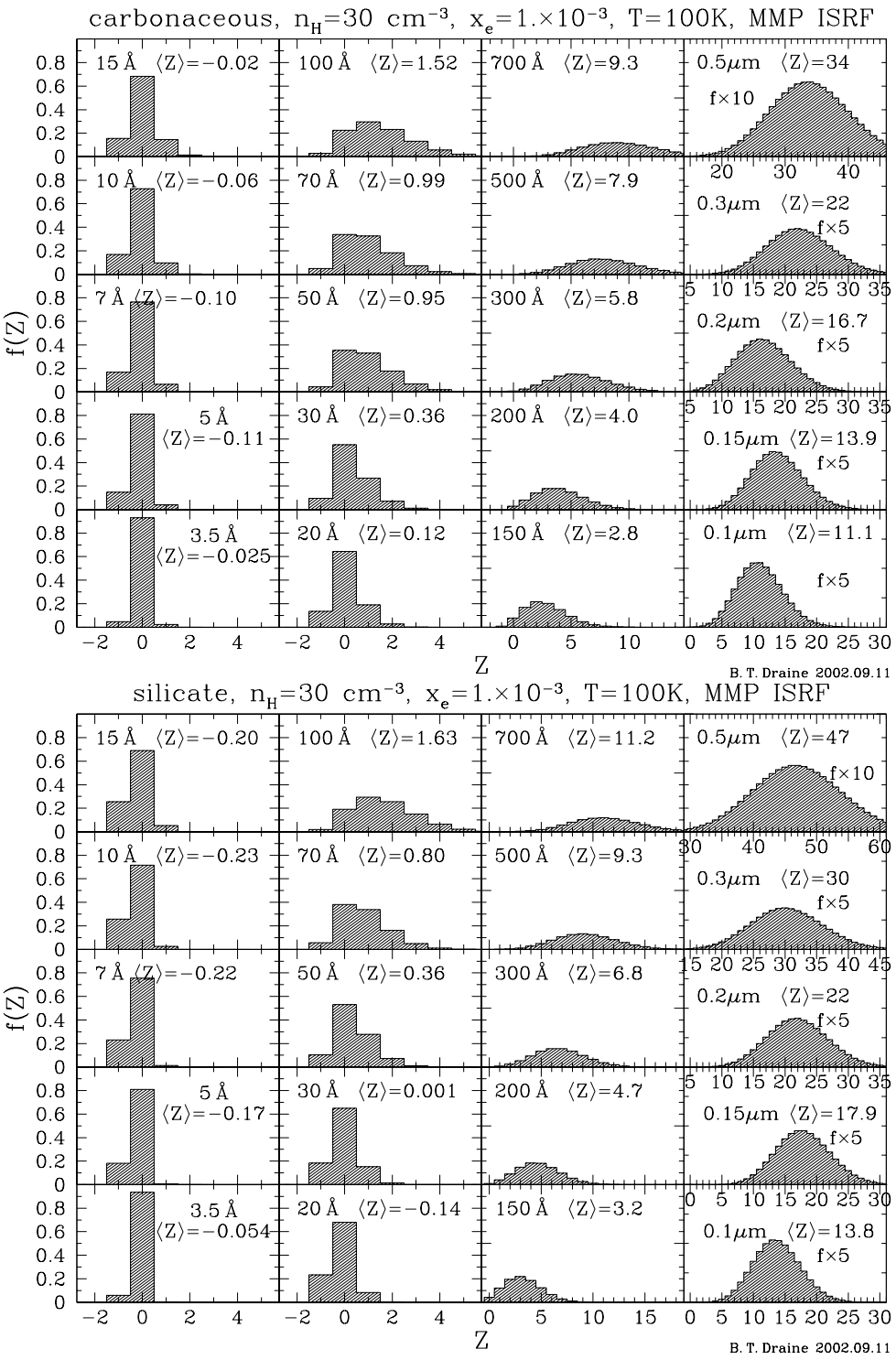


FIGURE 5.13 – *Charge distribution functions for carbonaceous grains and silicate grains in "cold neutral medium" diffuse H I.* Reproduction de la figure (30) de Draine (2002) pour comparaison avec la figure 5.12.

curseur radiatifs comme ceux étudiés par McKee et al. (1987) et Jones et al. (1994, 1996). Les grains ont un mouvement relatif par rapport au gaz de par leur giration autour des lignes de champ magnétique. Si la vitesse de giration est de l'ordre ou plus grande que la vitesse thermique des ions, l'expression du taux d'attachement des ions sur un grain au repos (Eq. (5.13)) doit être abandonnée au profit d'un modèle tenant compte de la vitesse des grains par rapport aux ions. Shull (1978) donne l'expression exacte du taux d'attachement d'une distribution maxwellienne de particules (électrons ou ions) de masse m, température T et charge q sur un grain de rayon a et charge Ze en mouvement à la vitesse V par rapport au gaz. A la différence du modèle de Draine & Sutin (1987), le modèle de Shull (1978) ignore la polarisabilité des grains. Nous définissons le rapport ψ de l'énergie coulombienne grain-particule à l'énergie thermique de la particule (dont la charge est notée q), ainsi que le rapport M^2 de l'énergie cinétique de la particule dans le référentiel du grain à son énergie thermique :

$$\psi = \frac{qZe}{akT}\,, \tag{5.20}$$

$$M^2 = \frac{mV^2}{2kT}\,. \tag{5.21}$$

Pour une particule et un grain dont les charges sont de signes contraires (c'est-à-dire pour $\psi \leq 0$), le taux d'attachement réduit $\tilde{J}$ a pour expression (Shull, 1978) :

$$\tilde{J} = \frac{1}{4}\left[2\mathrm{e}^{-M^2} + \sqrt{\pi}\left(1 + 2M^2 - 2\psi\right)\frac{\mathrm{erf}M}{M}\right]. \tag{5.22}$$

Si le grain et la particule portent des charges de même signe (Shull, 1978),

$$\tilde{J} = \frac{1}{4}\Bigg[\left(1 + \frac{\sqrt{\psi}}{M}\right)\mathrm{e}^{-(M-\sqrt{\psi})^2} + \left(1 - \frac{\sqrt{\psi}}{M}\right)\mathrm{e}^{-(M+\sqrt{\psi})^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2M}\left(1 + 2M^2 - 2\psi\right)\left(\mathrm{erf}(M + \sqrt{\psi}) + \mathrm{erf}(M - \sqrt{\psi})\right)\Bigg]\,, \tag{5.23}$$

où erf est la fonction d'erreur. Les équations (5.22) et (5.23) ne sont pas définies pour un grain au repos par rapport au gaz ($M = 0$) mais admettent les solutions limites suivantes (Spitzer, 1941) :

$$\tilde{J}(M = 0,\, \psi \leq 0) = 1 - \psi\,, \tag{5.24}$$

$$\tilde{J}(M = 0,\, \psi > 0) = \mathrm{e}^{-\psi}\,. \tag{5.25}$$

Le taux d'émission secondaire des électrons par des électrons (des ions) incidents se présente comme un correctif δ_e (δ_i) au coefficient de collage des électrons (des ions). Le calcul des rendements d'émission secondaire δ_e and δ_i en fonction du rendement δ_bulk de l'équation (5.10), de la charge et du rayon du grain est décrit dans Draine & Salpeter (1979b). Le taux d'émission photoélectrique J_pe pour un champ de rayonnement égal à l'ISRF est défini par l'équation (5.19). Il vaut $\chi \times J_\mathrm{pe}$ pour un rayonnement égal à χ fois celui de l'ISRF.

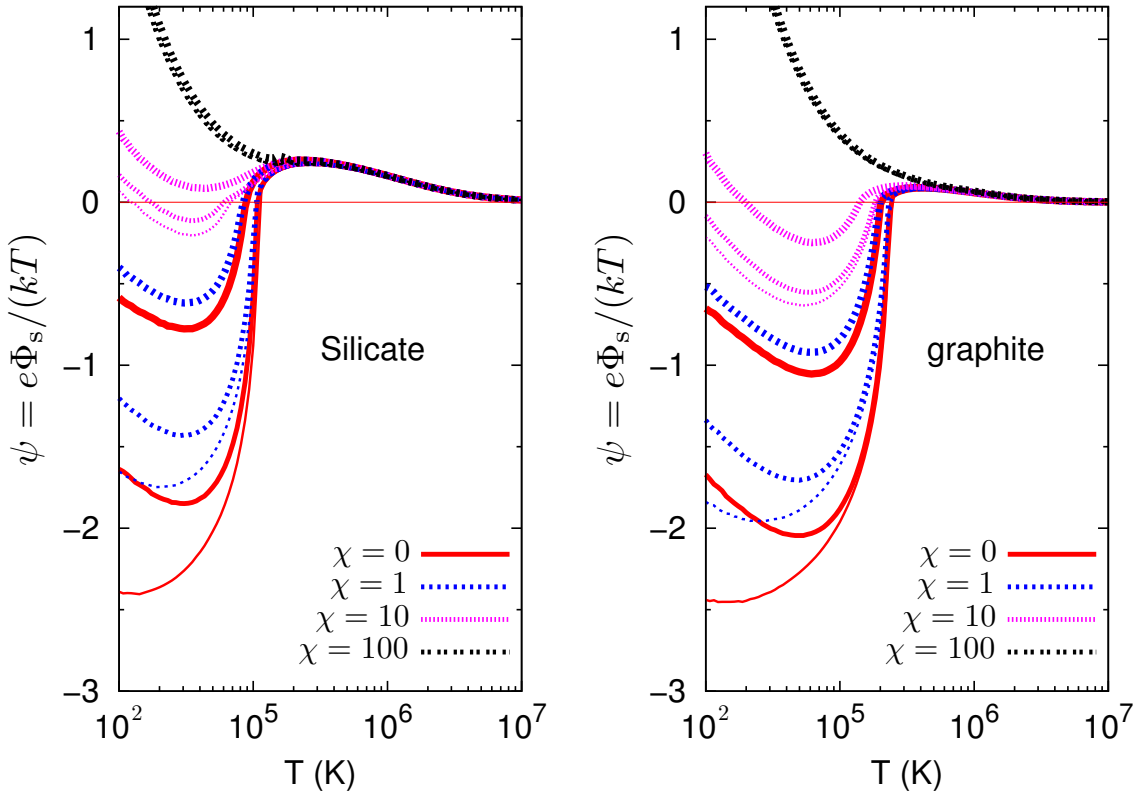


FIGURE 5.14 – Le rapport ψ de l'énergie potentielle électrique $e\Phi_s$ du grain à l'énergie thermique kT du plasma pour des grains silicatés et carbonés, en fonction de la température d'un plasma totalement ionisé et pour différentes valeurs de l'intensité χ du champ de rayonnement (relativement au champ ISRF de Mezger et al. (1982)) et de la vitesse ΔV du grain relativement au plasma (fin : 31.6 km/s, épais : 100 km/s, très épais : 316 km/s). Le décalage entre les courbes des grains carbonés et celles des grains silicatés provient du modèle d'émission secondaire des électrons, propre à chaque matériau (*cf.* Table 5.1). Ces graphes reproduisent de manière très satisfaisante la figure 6 de McKee et al. (1987).

En sommant ces taux, nous obtenons l'équation différentielle régissant l'évolution temporelle de la charge moyenne d'un grain [1] :

$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}t} = \chi \times J_{\mathrm{pe}}(Z) + (s_{\mathrm{i}} + \delta_{\mathrm{i}})\; n_{\mathrm{i}}\,\sigma\sqrt{\frac{8kT}{\pi m_{\mathrm{i}}}}\,\tilde{J}_{\mathrm{i}}(\psi = \frac{Ze^2}{akT}, M^2 = \frac{mV^2}{2kT}) \\ - (s_{\mathrm{e}} - \delta_{\mathrm{e}})\; n_{\mathrm{e}}\,\sigma\sqrt{\frac{8kT}{\pi m_{\mathrm{e}}}}\,\tilde{J}_{\mathrm{e}}(\psi = \frac{-Ze^2}{akT}, M^2 = \frac{mV^2}{2kT})\,. \quad (5.26)$$

Avec ce modèle, nous arrivons à reproduire (Fig. 5.14) l'allure de la figure 6 de McKee et al. (1987) qui présente le profil à l'équilibre du facteur $\psi = e\Phi_s/kT$ en fonction de la température du plasma et pour différentes valeurs de la vitesse de giration des grains et de l'intensité χ du champ de rayonnement. Pour réaliser cette figure, nous avons calculé la

1. Dans un choc J, $T_{\mathrm{i}} = T_{\mathrm{e}} = T$.

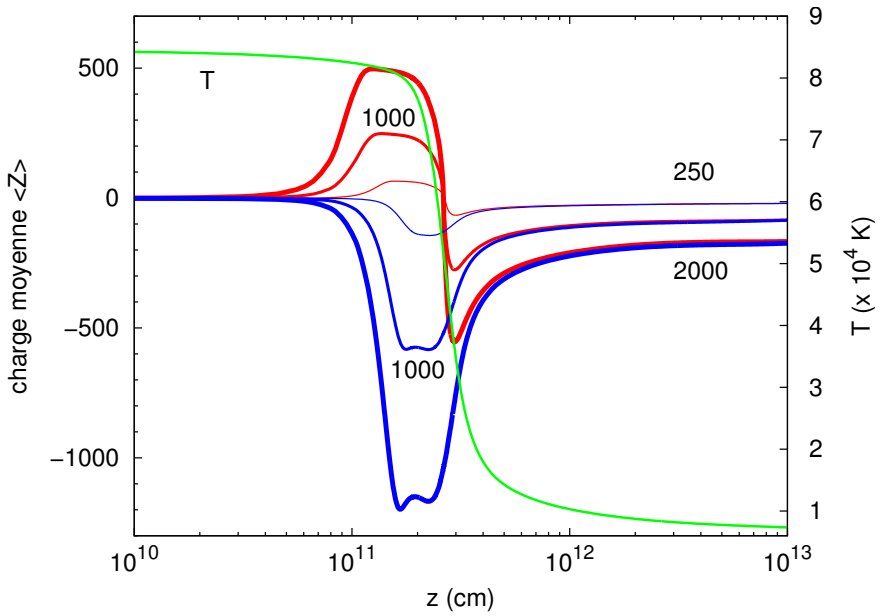


FIGURE 5.15 – Profil de la charge moyenne de grains silicatés (rouge) et carbonés (bleus) dans la partie la plus chaude d'un choc J de 40 km s^{-1} traversant un nuage moléculaire de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, accompagné du profil de température en unités de 10^4 K. Les rayons des grains sont exprimés en Å.

charge $Z_{\rm eq}$ à l'équilibre [1] de gros grains ($a = 1000$ Å) pour des températures échelonnées entre 10^4 et 10^7 K, et pour $\chi = 0$, 1, 10, et 100. Une fois $Z_{\rm eq}$ déterminé, le facteur ψ correspondant est calculé à partir de l'équation (5.2). Cette vérification valide notre modèle de charge à haute énergie.

Dans un choc de 40 km s^{-1} traversant un nuage moléculaire ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, Fig. 5.15), les grains silicatés et carbonés ont des charges très différentes immédiatement derrière le front de choc. C'est la zone du choc où l'émission secondaire domine le processus de charge des silicates (semi-conducteurs, donc à grand rendement d'émission secondaire, *cf.* Fig. 5.4) mais pas celui des grains graphitiques (conducteurs, faible rendement d'émission secondaire). Passée cette zone chaude, il n'y a plus de différence entre les charges de ces deux types de grains car elles sont alors déterminées par l'attachement des ions et des électrons, processus indépendants de la nature du grain dans notre modèle.

5.3.2 Dans les chocs C des milieux denses

Les chocs C sont des chocs multi-fluides caractérisés par une continuité des grandeurs physiques dans tout le choc, et des températures du gaz, des électrons et des ions beaucoup plus faibles que dans les chocs J. Les charges des grains sont en conséquence également bien

1. Deux possibilités s'offrent à nous : 1) intégrer l'équation différentielle (5.26) jusqu'à convergence, ou 2) déterminer la valeur $Z_{\rm eq}$ qui annule la valeur du second membre de cette équation. C'est cette deuxième possibilité, plus rapide, que nous avons utilisée.

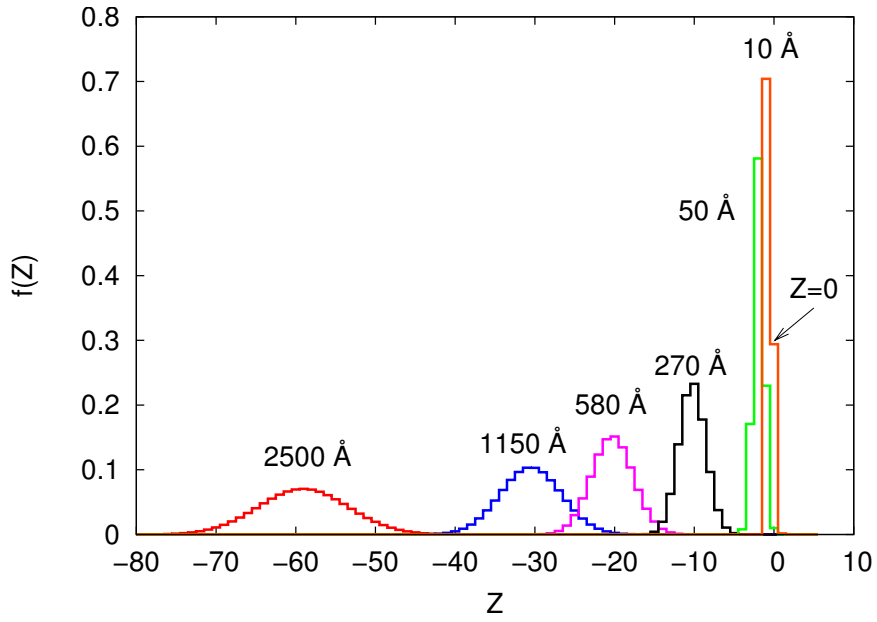


FIGURE 5.16 – Distributions de charges hors-équilibre des grains au pic de diffusion ambipolaire d'un choc C se propageant à 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ dans un nuage dense ($n_\mathrm{H} = 10^6$ $\mathrm{cm^{-3}}$). Une fraction non négligeable des très petits grains (10 Å) est neutre en ce point pourtant le plus chaud du choc ($T_\mathrm{i} \sim 10^4$ K, $T_\mathrm{e} \sim 2.10^3$ K).

moins élevées et restent partout négatives [1]. La vitesse de giration des grains est également, à vitesse de choc égale, moins élevée que dans les chocs J. Nous pouvons donc utiliser le modèle de Draine & Sutin (1987) qui inclut la polarisation des grains. Dans les chocs C, la vitesse relative $|\mathbf{V} - \mathbf{V}_\mathrm{i}|$ entre les grains et le fluide des ions et des électrons reste de l'ordre ou inférieure à la vitesse thermique des ions. Suivant l'approche de Pineau des Forêts et al. (1986), nous remplaçons la température réelle T_i des ions dans l'expression du taux d'attachement J_i (Eq. (5.13)) des ions sur les grains par une température effective $T_\mathrm{eff,i}$:

$$T_\mathrm{eff,i} = T_\mathrm{i} + \frac{\pi}{8k} m_\mathrm{i} \left(\mathbf{V} - \mathbf{V}_\mathrm{i}\right)^2 , \tag{5.27}$$

où m_i est la masse moyenne des ions [2].

La figure 5.16 montre pour l'exemple la distribution de charge de quelques tailles de grains au pic de diffusion ambipolaire d'un choc C de 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ se propageant dans un nuage très dense ($n_\mathrm{H} = 10^6$ $\mathrm{cm^{-3}}$).

Dans ce choc, la charge totale portée par les grains augmente plus rapidement dans le choc que la fraction d'ionisation (Fig. 5.17). Une pénurie d'électrons apparaît rapidement dans le choc (à $z = 3,7.10^{13}$ cm). Cette pénurie temporaire d'électrons est ressentie immédiatement par les gros grains silicatés (2500 et 1150 Å) mais pas du tout par le grain de 270 Å dont le temps de mise à l'équilibre de la charge est 10 fois plus long que celui du grain de 2500 Å (Eq. (5.6)). Un peu plus loin, la légère remontée de la densité d'électrons libres se solde très

1. La température des électrons n'est jamais assez élevée dans les chocs C pour activer l'émission secondaire d'électrons.
2. *cf.* premier article (section 1.6.2) pour la justification de cette approximation.

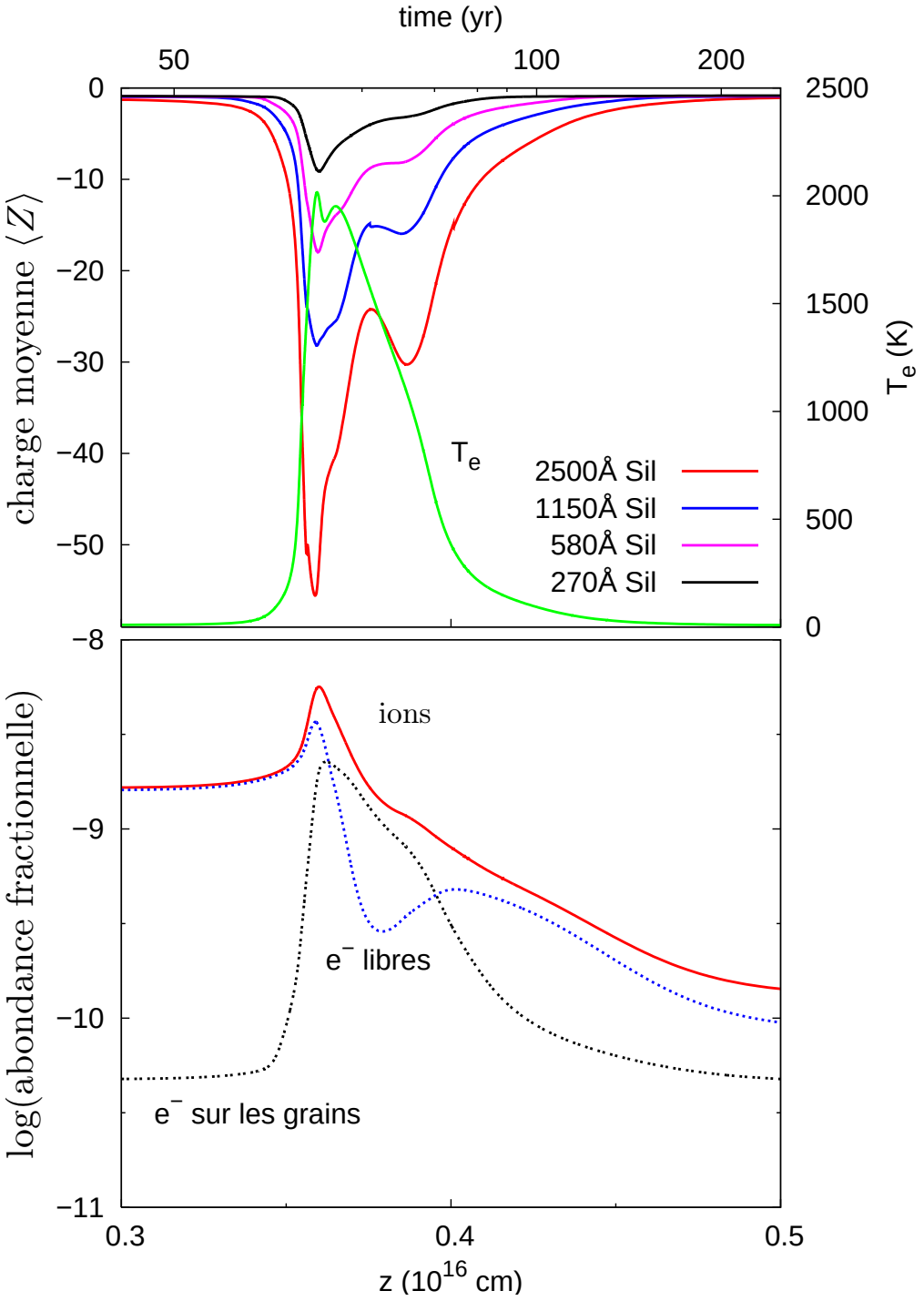


FIGURE 5.17 – (**Haut**) Profil de la charge de 4 tailles de grains silicatés dans le choc C de la figure 5.16. (**Bas**) Abondance fractionnelle des ions, des électrons libres et des électrons portés par les grains, dans le même choc. La charge des grains augmentant plus rapidement que l'ionisation du gaz à l'entrée du choc, une pénurie d'électrons apparaît, qui affecte en retour la charge des plus gros grains. Les petits grains, qui ont une inertie électrique importante, ne réagissent pas à cette variation trop rapide de la densité d'électrons libres.

rapidement par une hausse de la charge absolue des gros grains, sans influence notable sur celle des plus petits. Dans la queue du choc, les charges de tous les grains diminuent à cause de la baisse de la température des électrons.

L'étude de la charge des poussières dans les chocs C met donc en évidence la lenteur et le retard avec lequel les petits grains s'adaptent aux variations de la densité d'électrons libres et de la température du milieu [1].

5.4 Interaction entre les poussières et le plasma - *dusty plasmas*

Les études sur les plasmas poussiéreux (*dusty plasmas*) ont fleuri depuis une quinzaine d'années [2], apportant de nouveaux résultats expérimentaux et théoriques sur les interactions entre les poussières et les plasmas faiblement ionisés. La charge des grains et ses fluctuations sont à l'origine de la propagation de nouveaux types d'ondes dans le plasma, et même d'ondes de choc (Shukla & Mamun, 2002; Popel & Gisko, 2006). Nous présentons succintement quelques caractéristiques des plasmas poussiéreux en lien avec notre étude. Le lecteur intéressé pourra consulter avec profit le livre de Shukla & Mamun (2002) pour une introduction complète aux plasmas poussiéreux ainsi que les revues consacrées à la charge et à la dynamique des poussières dans le système solaire (Goertz, 1989; Horanyi, 1996).

5.4.1 Pénurie d'électrons dans un plasma poussiéreux

Des expériences de laboratoire ont mis en évidence l'apparition d'une pénurie d'électrons induite par la présence d'une grande abondance de grains dans des plasmas denses, peu ionisés et riches en poussières appelés plasmas poussiéreux. La figure 5.18 montre comment une sonde de Langmuir placée dans un tel plasma pour y mesurer le courant électrique chargeant les grains reçoit un courant plus faible en présence de poussières qu'en leur absence. Cette diminution est causée par la capture par les poussières d'une fraction importante des électrons libres qui ne peuvent alors plus participer au courant de charge.

5.4.2 Longueur de Debye des poussières - écrantage des charges

Les électrons et les ions du gaz ne forment pas un fluide parfaitement homogène. Dans un plasma composé uniquement d'ions et d'électrons, une gaine d'électrons entoure chaque ion et écrante à grande distance la charge de cet ion. Cette gaine a un rayon λ_{De} appelé

1. Les petits grains ne voient pas certaines fréquences trop rapides de variations des conditions d'ionisation.
2. Recherches impulsées par l'industrie du Silicium notamment, et qui ont abouti à la mise au point de procédés de dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma.

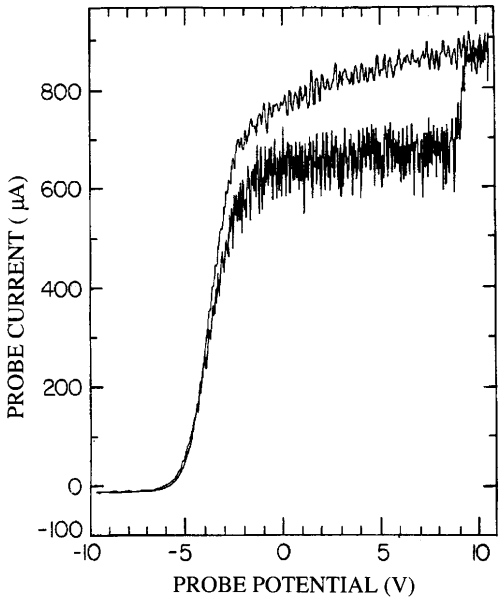


FIGURE 5.18 – Courant électrique collecté par une sonde de Langmuir dans deux plasmas qui ne diffèrent que par l'absence (courbe du haut) ou la présence (courbe du bas) de poussières de kaolin. Une forte densité de poussières diminue la densité d'électrons libres dans le plasma, réduisant le courant de charge collecté par les grains et par la sonde par rapport à un modèle sans poussières. Extrait de Shukla & Mamun (2002).

longueur de Debye. De même, une gaine d'ions de longueur $\lambda_{\rm Di}$ entoure chaque électron.

$$\lambda_{\rm De} = \sqrt{\frac{k\,T_{\rm e}}{4\pi n_{\rm e}\,e^2}}\,, \tag{5.28}$$

$$\lambda_{\rm Di} = \sqrt{\frac{k\,T_{\rm i}}{4\pi n_{\rm i}\,e^2}}\,. \tag{5.29}$$

Si des poussières sont présentes dans le gaz, des électrons forment une gaine d'écrantage autour de chaque grain chargé positivement, et des ions font de même autour de chaque grain négatif. Pour les particules situées à l'extérieur de la sphère de Debye, la charge du grain est écrantée. La longueur de Debye des poussières est (Shukla & Mamun, 2002) :

$$\lambda_{\rm D} = \frac{\lambda_{\rm De}\,\lambda_{\rm Di}}{\sqrt{\lambda_{\rm De}^2 + \lambda_{\rm Di}^2}}\,. \tag{5.30}$$

5.4.3 Plasma avec des poussières ou plasma poussiéreux ?

Quand la charge totale portée par les grains est négligeable devant celle des électrons libres, on parle de plasma avec poussières (*dust in plasma*) au sens où les grains sont comme des particules test dans un plasma dont le comportement ne dépend pas fondamentalement de leur présence. C'est le cas de la charge des grains dans les milieux très ionisés comme les régions H II, le milieu inter-nuages ou les nuages diffus, ou dans les chocs J traversant les nuages denses.

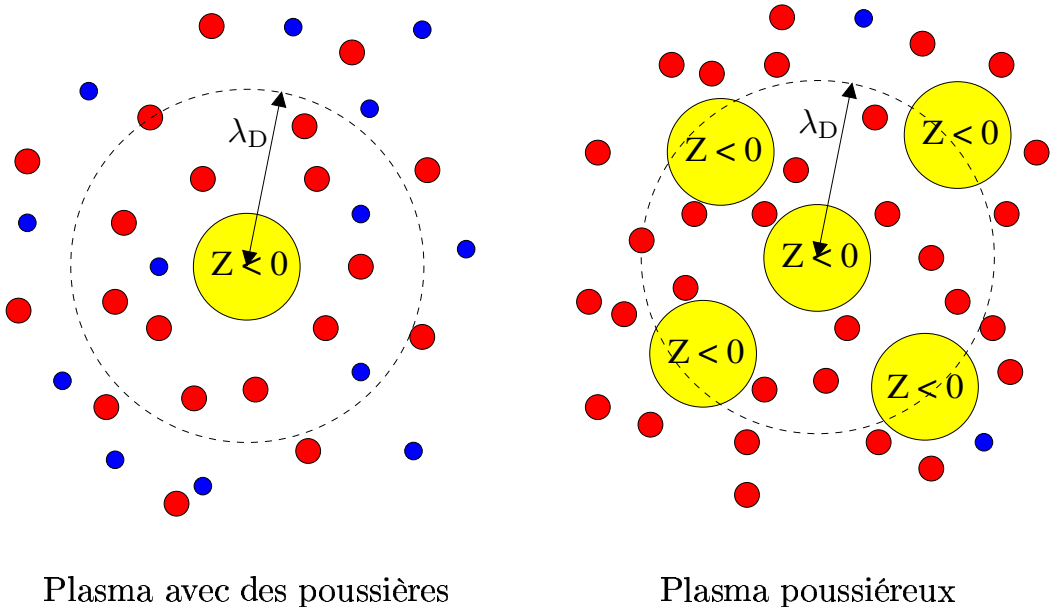


FIGURE 5.19 – Schéma de la sphère de Debye autour d'un grain chargé négativement, plongé dans deux sortes de plasmas. Les ions sont représentés en rouge et les électrons en bleu. Dans un plasma avec peu de poussières (**Gauche**), il n'y a pas de grains à l'intérieur de la sphère de Debye de chaque grain. La charge totale portée par les poussières est négligeable devant celle des électrons libres ($n_e \simeq n_i$), et les ions et les électrons participent à l'écrantage de la charge des grains. Dans un plasma poussiéreux (**Droite**), $n_e \ll n_i$ et il y a une grande quantité de poussières à l'intérieur de la sphère de Debye de chaque grain. Ce sont les ions et les poussières chargées qui participent alors à l'écrantage de la charge des grains. Les électrons y apportent une contribution négligeable.

Quand à l'inverse la charge totale portée par les grains est de l'ordre ou plus grande que celle des électrons libres, on parle de plasma poussiéreux (*dusty plasma*) : la poussière est alors un élément à part entière du plasma, comme le sont les électrons et les ions. Cette situation est rencontrée dans de nombreux plasmas denses de laboratoire, mais aussi dans les nuages denses ($n_H \geq 10^4$ cm^{-3}) et les cœurs préstellaires, ou dans les chocs C à travers les nuages denses.

La distinction entre plama poussiéreux et plasma avec poussières peut être quantifiée à l'aide de trois longueurs caractéristiques des poussières dans le milieu (Mendis & Rosenberg, 1994) :

- le rayon a du grain,
- la distance moyenne d entre grains. Si les grains ont tous le même rayon a, alors $d \simeq n_p^{-1/3}$ où n_p est le nombre de poussières par unité de volume ;
- la longueur de Debye λ_D des poussières.

Deux cas se présentent (Fig. 5.19) :

1. Plasma avec des poussières : $a \ll \lambda_D < d$
2. Plasma poussiéreux : $a \ll d < \lambda_D$

Dans le premier cas, aucun grain ne se situe à l'intérieur de la sphère de Debye d'un autre

	$n_i(\mathrm{cm}^{-3})$	$T(^\circ\mathrm{K})$	$n_d(\mathrm{cm}^{-3})$	d/λ_D	$a(\mu\mathrm{m})$
Interstellar clouds[a]	10^{-3}	10	10^{-7}	0.3	0.01–10
Noctilucent clouds[a]	10^3	150	10	0.2	~1
Saturn's E-ring[b]	10	10^5–10^6	10^{-7}–10^{-8}	$\lesssim$1	~1
Halley's Comet					
1. inside ionopause[c]	10^3–10^4	$< 10^3$	10^{-3}	$\gtrsim$1	.1~10
2. outside ionopause[d]	10^2–10^3	$\sim 10^4$	5×10^{-9}–10^{-7}	$\gtrsim$10	.01~10
Saturn's spokes[b]	0.1–10^2	2×10^4	1	$\lesssim$0.01	$\lesssim$1
Saturn's F-ring[b]	10–10^2	10^5–10^6	<30	$\lesssim 10^{-3}$	$\lesssim$1

[a]Tsytovich et al (1990), [b]Goertz (1989), [c]Mendis et al (1985), [d]De Angelis et al (1988).

FIGURE 5.20 – Rapport d/λ_D dans différents environnements astrophysiques, où d est la distance moyenne entre deux grains de poussières et λ_D la longueur de Debye des poussières (Eq. (5.30)). Extrait de Mendis & Rosenberg (1994).

grain. Les charges des grains sont donc écrantées les unes des autres par les ions et les électrons seuls. Le plasma est un simple ensemble de grains isolés. Dans le deuxième cas, un ou plusieurs grains se trouvent dans la sphère de Debye de chaque grain. Les poussières participent donc elles-mêmes à l'écrantage de Debye des poussières, au même titre que les électrons et les ions. Le plasma est donc un plasma ions + électrons + poussières et non seulement ions + électrons comme dans le premier cas. L'inertie des grains, considérablement plus élevée que celle des ions, modifie le comportement collectif du plasma.

Mendis & Rosenberg (1994) donnent les valeurs caractéristiques de ces trois longueurs dans différents environnements astrophysiques (Fig. 5.20). On peut constater que les nuages moléculaires (première ligne) sont rangés dans la catégorie des plasmas poussiéreux. Dans un nuage de densité $n_H = 10^4$ cm^{-3}, la fraction d'ionisation vaut $X_i \simeq 3.10^{-8}$ et nous trouvons donc un rapport $d/\lambda_D \sim 0{,}1$, plus faible encore que celle indiquée par Mendis & Rosenberg (1994). Le rapport $d/\lambda_D \sim$ vaut respectivement [1] 0,05 et 0,02 pour des densités de 10^5 et 10^6 cm^{-3}. Il y a donc des milliers de grains à l'intérieur de la sphère de Debye de chaque grain dans les nuages denses ($n_H \geq 10^4$ cm^{-3}) qui peuvent donc bel et bien être qualifiés de plasmas poussiéreux.

Des comportements propres aux plasmas poussiéreux, tels ceux exposés dans le livre de Shukla & Mamun (2002) pourraient-ils être déterminants pour l'évolution des poussières dans la phase dense du milieu interstellaire ? Les chapitres 10 et 11 consacrés au traitement des poussières dans les chocs C fourniront quelques éléments de réponse.

1. Cet effet s'accentue à haute densité car la fraction d'ionisation diminue avec la densité.

Chapitre 6

Couplage des poussières au champ magnétique

Dans les nuages au repos, le degré de couplage des poussières au champ magnétique détermine la vitesse maximale des chocs C. Dans les chocs C, il détermine la dynamique moyenne (ou dynamique dans l'approximation fluide) des poussières. Dans ce chapitre, nous révisons le modèle de Flower & Pineau des Forêts (2003) de couplage des poussières au champ magnétique et définissons un nouveau mode de calcul de la vitesse critique des chocs C basé sur une recommandation de Ciolek et al. (2004).

6.1 Facteurs déterminant la nature et l'intensité du couplage

Les poussières tendent à se coupler au gaz neutre par les collisions incessantes des particules du gaz contre leur surface, et au champ magnétique (c'est-à-dire aux ions et aux électrons) par leur giration autour des lignes de champ quand elles sont chargées. La nature du couplage des poussières chargées est donc le fruit d'une compétition entre la force de friction du gaz (proportionnelle à sa densité de protons $n_{\rm H}$) et la force magnétique (proportionnelle à l'intensité B du champ magnétique). Dans les nuages denses, on observe la relation d'échelle suivante entre la densité du gaz et l'intensité du champ magnétique (Crutcher, 1999) :

$$B = b \sqrt{\frac{n_{\rm H}}{1\,{\rm cm}^3}}\ \mu G\,, \tag{6.1}$$

où b est un facteur de proportionalité dont la valeur dépend des milieux considérés, mais qui reste en ordre de grandeur proche de 1.

L'intensité du couplage des poussières au champ magnétique dépend également fortement de leur charge. Dans les nuages moléculaires au repos (T $\sim$ 10 K), les poussières sont très faiblement chargées. Leur charge moyenne est $Z \sim -1$ avec une distribution de charge qui s'étend principalement entre $Z = -2$ et $Z = +1$ (*cf.* § 5.2.1 et Fig. 5.7) comprenant à tout instant une population de grains neutres. Dans les chocs C, la plupart des grains sont

chargés, d'autant plus qu'elles sont grosses. Cependant, la température des électrons restant modérée dans ces chocs, une fraction non négligeable des très petits grains ($a \sim 10$ Å) issus de la fragmentation des gros grains est neutre (*cf.* article 1 page 39). La question se pose alors de savoir à quel fluide (aux ions c'est-à-dire au champ magnétique, ou au gaz neutre) sont couplés ces grains neutres, que ce soit dans le gaz pré-choc ou dans le choc C.

6.1.1 Temps caractéristiques de couplage

Dans le modèle de Flower & Pineau des Forêts (2003), la nature du couplage des grains est une simple fonction de leur charge, indépendamment de leur taille : les grains neutres sont couplés au gaz et les grains chargés au champ magnétique.

Dans le nouveau modèle défini dans l'article 2 (page 193), le couplage des poussières au champ magnétique, qu'elles soient chargées ou neutres, est déterminé par la comparaison de trois temps caractéristiques [1] :

- Le temps caractéristique de giration $\tau_{\rm gyr}$ autour des lignes de champ :

$$\tau_{\rm gir} = \frac{mc}{|Z|eB} \simeq 0,25 \left(\frac{a}{0.01\,\mu{\rm m}}\right)^{3} \left(\frac{n_{\rm H}}{10^4\,{\rm cm}^{-3}}\right)^{-1/2} {\rm an}\,. \tag{6.2}$$

- Le temps caractéristique de freinage $\tau_{\rm drag}$ par le gaz :

$$\tau_{\rm drag} = \frac{m}{\rho_{\rm n}\sigma\sqrt{(\mathbf{V}_{\rm n}-\mathbf{V})^2+\kappa T_{\rm n}}} \simeq 125 \left(\frac{a}{0.01\,\mu{\rm m}}\right) \left(\frac{n_{\rm H}}{10^4\,{\rm cm}^{-3}}\right)^{-1} \left(\frac{T}{10\,{\rm K}}\right)^{-1/2} {\rm ans}\,. \tag{6.3}$$

- La durée de vie τ_0 d'un grain neutre [2] :

$$\tau_0 = \left(J_{\rm e}(0)+J_{\rm i}(0)+J_{\rm pe}(0)\right)^{-1} \simeq J_{\rm e}(0)^{-1} \simeq 50 \left(\frac{a}{0.01\,\mu{\rm m}}\right)^{-2} \left(\frac{n_{\rm e}}{10^{-4}\,{\rm cm}^{-3}}\right)^{-1} \left(\frac{T}{10\,{\rm K}}\right)^{-1/2} {\rm ans}\,, \tag{6.4}$$

où m est la masse du grain, σ sa section efficace géométrique, a son rayon, Z sa charge moyennée sur le temps (ou de manière équivalente sur la distribution de charge), B l'intensité locale du champ magnétique, c la célérité de la lumière dans le vide, $\rho_{\rm n}$ la densité de masse du gaz et $T_{\rm n}$ sa température, $\kappa = 128k/(9\pi m_{\rm n})$ où $m_{\rm n}$ est la masse moyenne des particules du gaz neutre, $\mathbf{V}$ la vitesse du grain et $\mathbf{V}_{\rm n}$ celle du gaz. Les facteurs $J_{\rm e}$, $J_{\rm i}$ et $J_{\rm pe}$ sont respectivement les taux d'attachement des électrons, de recombinaison des ions et de photoémission électrique (*cf.* chapitre 5 et article 2).

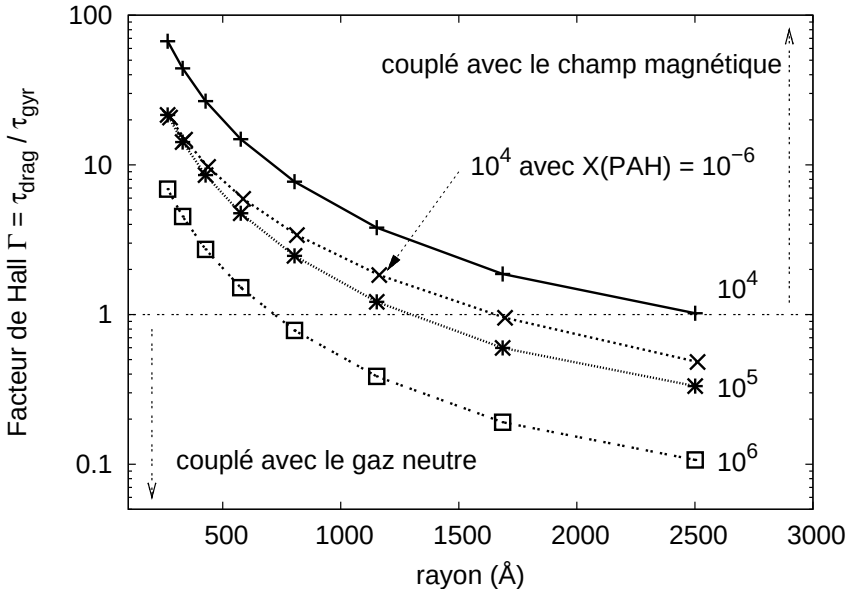


FIGURE 6.1 – Facteur de Hall $\Gamma = \tau_{\rm drag}/\tau_{\rm gir}$ en fonction de la taille du grain pour différentes densités du gaz pré-choc ($T = 10\,\mathrm{K}$, $\zeta = 10^{-17}\,\mathrm{s}^{-1}$, avec ou sans PAHs). Les grains tendent à se découpler du champ magnétique à haute densité (dépendance $\Gamma \propto n_{\rm H}^{-1/2}$) pour les environnements sans PAHs. La présence de PAHs décale les distributions de charge vers Z = 0 (*cf.* Fig. 5.7), diminuant le facteur de Hall.

6.1.2 Facteur de Hall

L'intensité relative du couplage des poussières au champ magnétique et au gaz est caractérisée par le facteur de Hall, rapport des temps $\tau_{\rm gyr}$ de couplage au champ magnétique et $\tau_{\rm drag}$ de couplage au gaz :

$$\Gamma = \frac{\tau_{\rm drag}}{\tau_{\rm gir}}\,. \tag{6.5}$$

Le grain est fortement couplé au champ magnétique si $\Gamma \gg 1$, et fortement couplé au gaz si $\Gamma \ll 1$. Si $\Gamma \simeq 1$, le grain est partiellement découplé des deux fluides. Comme la charge est proportionnelle au rayon du grain quand les processus d'attachement d'ions et d'électrons dominent (*cf.* Eq. (5.1)), nous obtenons la dépendance générale suivante pour Γ dans un nuage au repos :

$$\Gamma \simeq 500 \left(\frac{a}{0.01\,\mu\mathrm{m}}\right)^{-2} \left(\frac{n_{\rm H}}{10^4\,\mathrm{cm}^{-3}}\right)^{-1/2} \left(\frac{T}{10\,\mathrm{K}}\right)^{-1/2}\,. \tag{6.6}$$

Les très petits grains sont tous fortement couplés au champ magnétique (Fig. 6.1) tandis que les très gros grains y sont plus faiblement couplés et tendent à se découpler du champ magnétique à haute densité.

1. Les expressions numériques sont données pour le milieu pré-choc avec $Z = -1$, $b = 1$ (*cf.* Eq. (6.1)) et une masse volumique des poussières de $3\,\mathrm{g\,cm}^{-3}$.

2. Estimation avec une section efficace purement géométrique (sans prise en compte de la polarisabilité du grain) et donc par excès.

6.1.3 Impact des fluctuations de charge sur le couplage

Cette analyse du couplage des poussières basée sur le facteur de Hall ignore les fluctuations de charge des grains qui peuvent modifier la nature de ce couplage. Que ce soit dans le nuage au repos ou à l'intérieur du choc C, les grains sont sujets en permanence à des fluctuations discrètes de leur charge instantanée qui, de temps en temps, peuvent les ramener à l'état neutre. Cela signifie que les grains chargés et les grains neutres sont couplés par la fluctuation de charge et ne peuvent pas être considérés *a priori* comme des catégories distinctes de grains (Elmegreen, 1979; Ciolek & Mouschovias, 1993).

Si les fluctuations de charge maintiennent le grain constamment chargé, par exemple pour des grains suffisamment gros et une température électronique suffisamment élevée, le couplage du grain au champ magnétique n'est pas affecté par les fluctuations de charge. Le couplage peut alors être caractérisé par le facteur de Hall calculé pour la charge *moyenne* du grain, indépendamment de sa distribution de charge.

Par contre, si les fluctuations de charge ramènent de temps en temps le grain à la neutralité, la nature du couplage au gaz et au champ magnétique doit être examinée en comparant la durée de vie τ_0 de ce grain neutre aux temps caractéristiques de couplage $\tau_{\rm gyr}$ et $\tau_{\rm drag}$. Deux cas se présentent :

- si $\tau_0 \ll \tau_{\rm drag}$, alors le grain neutre ne vit pas assez longtemps pour que son couplage puisse différer du couplage qui le caractérisait quand il était chargé. Grains chargés et grains neutres de même taille sont alors fortement couplés par les fluctuations de charge et forment une seule population.
- si $\tau_0 \geq \tau_{\rm drag}$, alors il s'écoule suffisamment de temps pendant la vie du grain neutre pour que la force de freinage exercée par le gaz, libérée de l'action contraire de la force magnétique, puisse faire son effet. Grains neutres et grains chargés de même taille forment deux populations découplées ou faiblement couplées.

Le rapport de ces deux temps caractéristiques a les dépendances approximatives suivantes :

$$\frac{\tau_{\rm drag}}{\tau_0} = 2,5 \left(\frac{a}{0.01\,\mu{\rm m}}\right)^3 \left(\frac{X_{\rm e}}{10^{-8}}\right) . \tag{6.7}$$

Pour la distribution en taille que nous nous sommes donnés, les grains les plus petits ont un rayon ~ 250 Å (cœur + manteau). La durée de vie de ces grains neutres dans le milieu pré-choc est donc plus courte que le temps de couplage au gaz. Nous pouvons dès lors ignorer les fluctuations de charge des grains dans le milieu pré-choc, et ceci jusqu'à des densités [1] de l'ordre de 10^6 cm^{-3}. La figure 6.1 est donc également valable pour caractériser le couplage des grains neutres selon la densité du milieu pré-choc.

6.2 Impact des poussières sur la vitesse critique des chocs C

Les chocs C transverses ne peuvent exister que dans un certain domaine de vitesse (*cf.* chapitre 3). Comme nous allons le voir, le degré de couplage des poussières au champ ma-

1. Pour $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}, la fraction d'ionisation $X_{\rm e} \sim 10^{-9}$ nous donne un rapport $\tau_0/\tau_{\rm drag} \sim 0,25$ pour le plus petit des grains (250 Å).

gnétique dans le gaz pré-choc est un des paramètres clef définissant la vitesse critique des chocs C.

6.2.1 Domaine d'existence en vitesse des chocs C

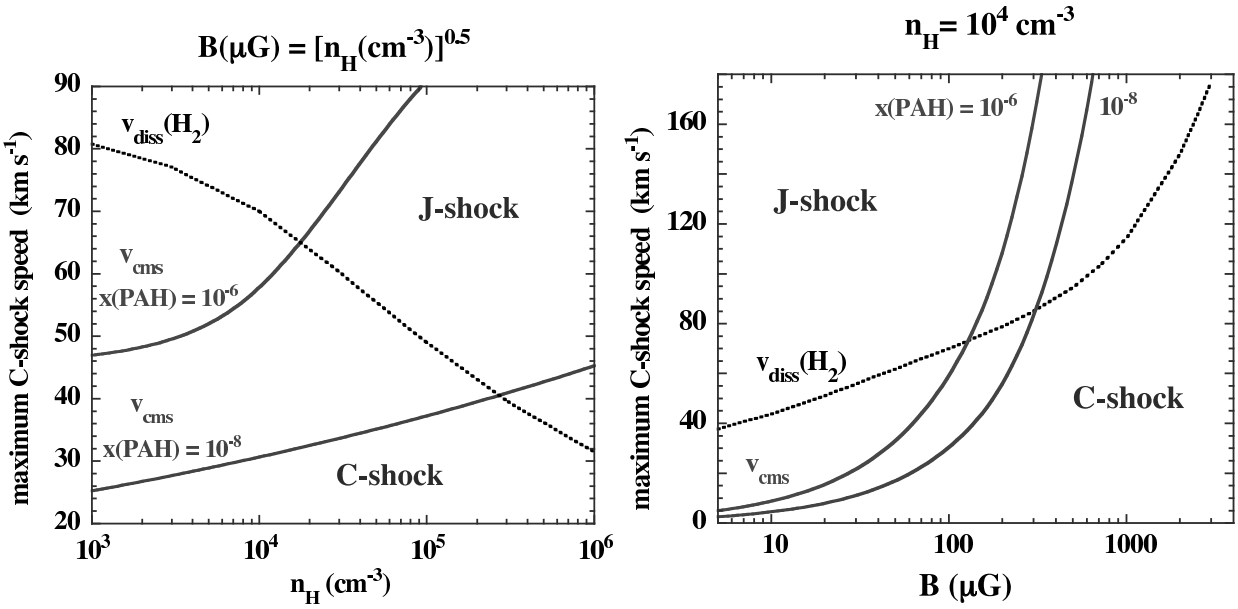


FIGURE 6.2 – Domaine d'existence des chocs C et J dans le modèle de Flower & Pineau des Forêts (2003), en fonction (**Gauche**) de la densité pré-choc avec $b = 1$ et (**Droite**) de l'intensité du champ magnétique transverse (c'est-à-dire de b) pour $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, pour deux valeurs de l'abondance fractionnelle des PAHs ($X({\rm PAH}) = 10^{-6}$ et 10^{-8}) et pour un taux d'ionisation cosmique $\zeta = 10^{-17}\,{\rm s}^{-1}$. La vitesse magnétosonique dans le fluide chargé est noté $V_{\rm cms}$. La courbe $V_{\rm diss}({\rm H_2})$ indique la vitesse limite au-delà de laquelle H_2 est dissocié. A basse densité ou pour un champ magnétique transverse faible, la vitesse des chocs C est limitée par la vitesse magnétosonique dans le fluide chargé. A haute densité ou pour un champ magnétique transverse fort, la vitesse des chocs C est limitée par la dissociation de H_2.

L'existence des chocs C est bornée par des vitesses limites. La limite inférieure, égale approximativement à la vitesse d'Alfven dans le gaz (de l'ordre du km s^{-1}), n'est pas très restrictive. La limite supérieure de vitesse des chocs C transverses est fixée conjointement par deux vitesses critiques (§ 3.2.4) :

1. la vitesse $V_{\rm cms}$ de propagation des ondes magnétosoniques dans le fluide chargé (Eq. (3.20)), vitesse au-delà de laquelle un choc J et non un choc C se forme :

$$V_{\rm cms} = \sqrt{c^2 + \frac{B_\perp^2}{4\pi\,(\rho_{\rm e} + \rho_{\rm i} + \rho_{\rm c})}} \simeq \frac{B}{\sqrt{4\pi\rho_{\rm c}}}\,. \tag{6.8}$$

Le fluide chargé comprend les électrons, les ions et les poussières couplées au champ magnétique. La densité de masse de ce fluide est très nettement dominée par celle $\rho_{\rm c}$ des

poussières. Sans la présence des poussières, la vitesse magnétosonique serait de l'ordre de 1000 km s^{-1} (vitesse magnétosonique $V_{\rm ims}$ dans le fluide des ions, *cf.* Eq. (3.21)), et ne serait donc en aucun cas critique pour l'existence des chocs C.

2. la vitesse seuil des choc C qui dissocient H_2. Selon Le Bourlot et al. (2002), cette vitesse est de l'ordre de 60-70 km s^{-1} pour une densité pré-choc de 10^4 cm^{-3} (Fig. 6.2). Cette deuxième condition ne semble pas très restrictive. Notons cependant que Draine et al. (1983) donnent une valeur plus faible de cette vitesse limite (entre 40 et 50 km s^{-1}) avec un modèle chimique moins développé. Comme nous nous intéressons aux chocs C de vitesse inférieure à 50 km s^{-1}, nous ne reparlerons pas de cette vitesse seuil de dissociation de H_2.

6.2.2 Ordre de grandeur de la vitesse magnétosonique

La vitesse de propagation des ondes magnétosoniques (Eq. (3.20)) dépend de l'intensité du couplage des poussières au champ magnétique et de l'intensité du champ magnétique dans la direction de propagation de l'onde.

Vitesse magnétosonique minimale (poussières fortement couplées) Plus la fraction de poussières couplées au champ magnétique est importante, plus la vitesse magnétosonique est faible. En supposant que toutes les poussières sont couplées au champ magnétique dans le nuage au repos, nous obtenons la valeur minimale de la vitesse magnétosonique, toutes choses égales par ailleurs. Les poussières représentant une masse par unité de volume égale à $\sim 1\%$ de celle du gaz, la vitesse magnétosonique minimale est environ égale à 10 fois la vitesse magnétosonique dans le gaz, soit environ 20 km s^{-1} (pour $b = 1$).

Vitesse magnétosonique et intensité du champ magnétique La vitesse magnétosonique est directement proportionnelle au facteur b que l'on se donne pour la relation entre l'intensité du champ magnétique B et la densité de protons $n_{\rm H}$ du gaz dans le nuage pré-choc (Eq. (6.1)). Le facteur b peut être fixé par la mesure ou l'estimation de l'intensité du champ magnétique dans l'environnement considéré. Mais il peut aussi être contraint par des arguments théoriques. Si l'on admet l'équipartition entre la pression thermique et la pression magnétique dans un nuage à 10 K, le facteur b vaut alors $\sim 0{,}3$. Le choix d'une telle valeur abaisse la vitesse magnétosonique minimale à 4 km s^{-1} et exclurait toute possibilité de destruction des grains les plus réfractaires dans les chocs C [1] . Dans notre modèle de référence, nous avons choisi $b = 1$ ce qui correspond à une vitesse magnétosonique minimale de ~ 20 km s^{-1}.

Vitesse magnétosonique et direction de propagation du choc Dans un modèle de choc transverse, le champ magnétique est choisi perpendiculaire à la direction de propagation du choc. Ce n'est pas forcément le cas dans les chocs réellement existants qui sont donc

1. Des vitesses d'impact supérieures à 20 km s^{-1} sont exigées pour éroder ou vaporiser des grains réfractaires. Les manteaux moins réfractaires peuvent peut-être être détruits à des vitesses moindres (*cf.* chapitre 1).

obliques. Néanmoins, nous les traitons comme des chocs transverses avec un champ magnétique transverse réduit du fait de l'obliquité du choc. L'intensité du champ magnétique à utiliser dans le calcul de la vitesse magnétosonique est donc l'intensité B estimée pour le nuage corrigée du facteur $\sin\theta$ où θ est l'angle entre les lignes de champ magnétiques et la direction de propagation du choc.

6.2.3 Masse des poussières couplées au champ magnétique

Modèle de Flower & Pineau des Forêts (2003) Dans le modèle de Flower & Pineau des Forêts (2003), les grains neutres sont couplés au gaz (neutre) et les grains chargés au champ magnétique. La vitesse magnétosonique ne dépend donc que de la masse des grains chargés, et est donc légèrement supérieure à la vitesse magnétosonique minimale. Plus les grains neutres représentent une fraction importante de la masse totale des poussières et plus la vitesse magnétosonique est élevée. La présence d'une forte abondance fractionnelle de PAHs ($X(\mathrm{PAH}) = 10^{-6}$) dans le nuage tend à créer une pénurie d'électrons libres dans le gaz, ce qui diminue en retour le courant électrique sur les grains et augmente donc l'abondance fractionnelle de grains neutres aux dépens des grains chargés (*cf.* § 5.2.1). Dans ce modèle, plus il y a de PAHs, plus la vitesse magnétosonique est élevée (*cf.* Fig. 6.2). Quand l'abondance fractionnelle des PAHs est négligable (par exemple pour $X(\mathrm{PAH}) = 10^{-8}$), la distribution de charge des grains est indépendante de la densité du nuage [1]. La vitesse magnétosonique ne varie donc pas beaucoup avec la densité tant qu'il n'y a que très peu de PAHs. Par contre, elle augmente avec la densité en présence d'une grande quantité de PAHs car en raison de la plus faible ionisation du gaz la pénurie d'électrons libres générée par les PAHs est d'autant plus importante que la densité est élevée.

Modèle de Guillet et al. (2007) Ciolek et al. (2007) ont étudié les conditions physiques régissant la formation et la propagation d'une précurseur magnétique. Ils suggèrent de considérer que seuls les grains dont le facteur de Hall Γ est supérieur à 1 participent à la propagation des ondes magnétosoniques dans le fluide chargé. Cette approche est justifiée car les fluctuations de charge peuvent être ignorées pour les grains de toutes tailles dans les nuages au repos de densité inférieure à 10^6 cm^{-3} (*cf.* § 6.1.3. Nous avons adapté ce critère au calcul de la densité de masse totale ρ_c des grains couplés au champ magnétique en effectuant la somme sur toutes les boîtes d'indice k :

$$\rho_\mathrm{c} = \sum_k \frac{\Gamma_k^2}{1+\Gamma_k^2}\,\rho_k\,. \tag{6.9}$$

La fonction de pondération $\Gamma_k^2/\left(1+\Gamma_k^2\right)$ a les propriétés qui conviennent au problème : elle ne dépend pas du signe de la charge, et vaut $1/2$ quand $\Gamma = 1$, c'est-à-dire quand le grain est à moitié couplé au champ magnétique, à moitié couplé au gaz [2].

1. Au moins tant que les grains n'induisent pas eux-mêmes une pénurie d'électrons libres dans le nuage au repos, soit au moins jusqu'à une densité de 10^6 cm^{-3}.

2. Dans cette fonction de pondération, toute puissance paire de Γ, en remplacement de Γ^2, conviendrait aussi.

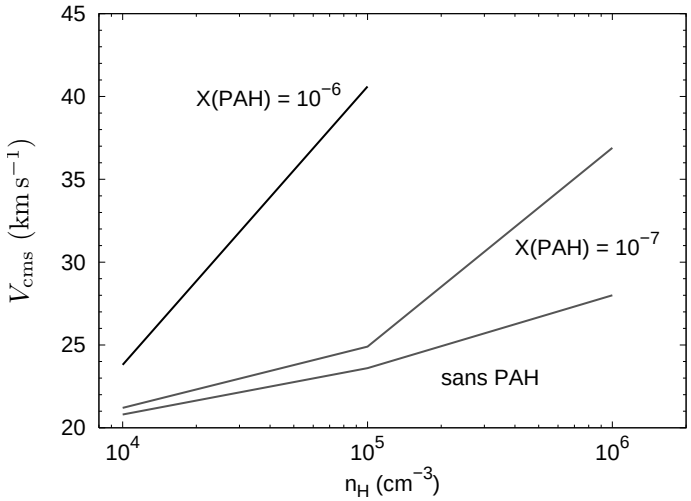


FIGURE 6.3 – Vitesse magnétosonique dans le fluide chargé en fonction de la densité pré-choc dans le nouveau modèle de Guillet et al. (2007), pour trois valeurs de l'abondance fractionnelle des PAHs ($X(\mathrm{PAH}) = 0^{-6}$, 10^{-7} et 10^{-8}). Les manteaux participent au couplage des poussières au champ magnétique.

Dans ce nouveau modèle (Fig. 6.3), la vitesse magnétosonique est globalement moins élevée que dans l'ancien modèle. Elle dépend assez peu de la présence de PAHs à basse densité, tant qu'aucune pénurie d'électrons libres n'apparaît dans le gaz pré-choc. Pour un nuage moléculaire ($n_\mathrm{H} = 10^4$ cm^{-3}), aucun choc C ne peut aller plus vite que ~ 20 km s^{-1} (pour $b = 1$), quelle que soit l'abondance des PAHs. On observe également une augmentation de la vitesse magnétosonique avec la densité du milieu pré-choc car $\Gamma \propto 1/\sqrt{n_\mathrm{H}}$, tendance qui était absente de l'ancien modèle. Cet effet est accentué par la présence de PAHs pour les mêmes raisons que dans l'ancien modèle, mais il n'est sans doute pas raisonnable de supposer une abondance fractionnelle de PAHs aussi élevée que $X(\mathrm{PAH}) = 10^{-6}$ dans les nuages très denses où la coagulation peut être efficace.

6.2.4 Quel mode de formation pour le précurseur magnétique ?

L'effet des poussières sur la propagation du précurseur magnétique met bien en évidence le rôle particulier joué par les poussières dans les plasmas denses et très peu ionisés (les plasmas poussiéreux ou *dusty plasmas*, *cf.* § 5.4) relativement aux plasmas plus ionisés du milieu diffus. Ciolek et al. (2004), après Pilipp et al. (1987), se sont intéressés à l'influence particulière des grains chargés sur la propagation et l'amortissement des ondes d'Alfven dans les plasmas poussiéreux. Ils intègrent numériquement l'évolution temporelle des ondes MHD qui président dans les milieux denses à la formation d'un précurseur magnétique en amont des chocs, et ce pour deux cas de couplage :

1. les poussières sont fortement couplés au champ magnétique ($\Gamma \gg 1$) ,
2. les poussières sont faiblement couplés ($\Gamma \ll 1$) .

Ces deux cas peuvent correspondre à des modèles de charge distincts des poussières, à des densités différentes pour le gaz pré-choc (*cf.* Fig. 6.1) ou à l'effet des PAHs. Pour permettre

une comparaison directe des résultats numériques avec les solutions analytiques connues (Chernoff, 1987), la distribution en taille des grains, le refroidissement radiatif du gaz et les réactions chimiques sont ignorés.

Ces auteurs montrent que, dans le premier cas (couplage fort des poussières), les ondes magnétosoniques auxquelles participent les poussières sont bien à l'origine de la formation du précurseur magnétique, comme nous l'avons présenté jusqu'ici. La position du front de choc séparant les ions au repos des ions accélérés par le précurseur magnétique avance, comme attendu, proportionnellement au temps ($z_{\rm front} = V_{\rm cms}\, t$).

Dans le deuxième cas (couplage faible des poussières), la position du front de choc suit un mouvement ($z_{\rm front} = \sqrt{D\, t}$) caractéristique d'un processus de *diffusion* : les ondes magnétosoniques véhiculées par les ions seuls [1] étant amorties très rapidement par le couplage avec le gaz neutre, la propagation de la perturbation de pression initiée par le piston se fait par diffusion dans le fluide des ions, et non par propagation des ondes magnétosoniques dans le fluide des ions comme on le croit habituellement.

1. Dans le modèle de couplage faible, les poussières ne participent pas à la propagation de ces ondes car elles sont par hypothèse découplées du champ magnétique.

Chapitre 7

Dynamique d'un grain dans un champ magnétique transverse

La dynamique des poussières dans les chocs MHD de type C ou J présente, en raison de l'action de la force magnétique, quelques caractéristiques a priori *déroutantes pour le novice. Ces effets magnétiques (dérive électrique, dérive de gradient, effet bétatron etc.) bien connus des physiciens des plasmas qui étudient la magnétosphère terrestre, se retrouvent dans la dynamique des grains dans les chocs MHD. La friction du gaz exercée sur les poussières dans les chocs joue par exemple un rôle analogue à la force gravitationnelle dans la magnétosphère. Pourquoi alors leur consacrer un chapitre ? Dans la littérature sur les plasmas, ces effets sont systématiquement présentés pour des ions et des électrons (et non des grains) en mouvement* le long des lignes de champ*. Dans les chocs MHD transverses qui nous intéressent, la dynamique des poussières est* perpendiculaire *aux lignes de champ. L'interprétation des effets observés s'en trouve parfois changée. Ce chapitre dresse donc le catalogue de ces effets magnétiques sur les poussières chargées* considérées comme des particules de test*, et pour un champ magnétique transverse. L'inertie des grains étant bien plus importante que celle des ions et des électrons, l'existence d'une dérive* inertielle *est mise en évidence qui n'a, à notre connaissance, jamais été présentée dans la littérature.*

Afin de mettre en relief les caractéristiques essentielles de la dynamique des poussières dans les chocs MHD, nous nous plaçons dans ce chapitre dans un cadre très simplifié, où *le grain est considéré comme une particule test* de masse et de charge constantes [1]. Ce n'est qu'aux chapitres 8 et 9 que nous présenterons la dynamique proprement dite des poussières dans les chocs C et J, avec ses effets rétroactifs sur la structure de ces chocs.

Nous considérons donc un grain de masse m et de charge q constantes, en mouvement à vitesse $\mathbf{v}$ dans un milieu où règne un champ électromagnétique stationnaire $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$. Dans ce milieu, il est soumis aux forces suivantes :

- la force de Lorentz $\mathbf{F}_{\mathrm{L}} = q\,(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$;
- une force $\mathbf{F}$ d'origine non électromagnétique (par exemple une force de friction exercée par un gaz, ou encore la force gravitationnelle).

1. Comme nous venons de la voir au chapitre 5, l'hypothèse d'une charge constante n'est pas réaliste pour un grain en mouvement dans un choc. Les effets des variations de charge sur la dynamique des grains sont donc ignorés dans le présent chapitre.

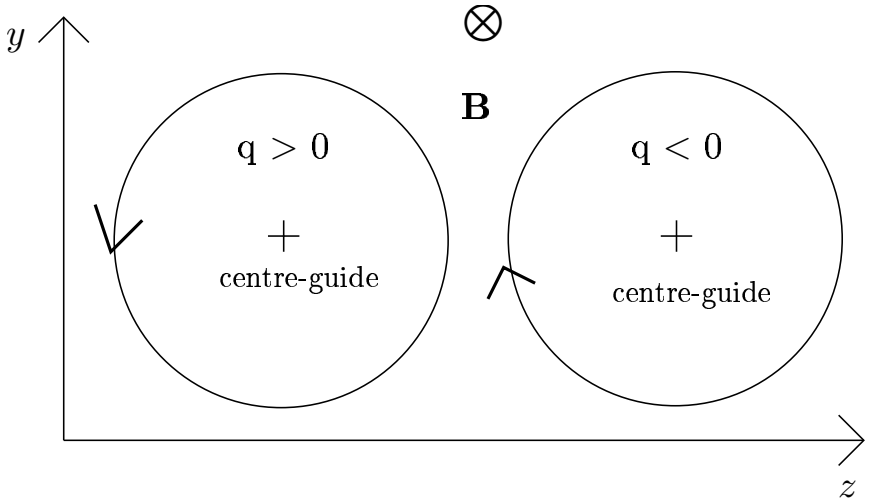


FIGURE 7.1 – Trajectoires de grains de même masse et de charges opposées dans un champ magnétique uniforme perpendiculaire à la figure.

L'étude du mouvement se fait dans un référentiel inertiel $\Re$ muni d'un repère cartésien $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$. Nous limiterons l'étude aux conditions suivantes imposées dans $\Re$:

- le champ électromagnétique est stationnaire : $\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}$ et $\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mathbf{0}$;
- le champ magnétique $\mathbf{B}$ est dirigé selon $\mathbf{e}_x$: $\mathbf{B} = B\,\mathbf{e}_x$;
- le gradient de champ magnétique $\nabla\mathbf{B}$, s'il n'est pas nul, est uniforme et *perpendiculaire* à B selon $\mathbf{e}_z$: $\nabla\mathbf{B} = \nabla B\,\mathbf{e}_z$;
- le champ électrique $\mathbf{E}$, s'il existe, est uniforme et perpendiculaire à $\mathbf{B}$ selon $\mathbf{e}_y$: $\mathbf{E} = E_0\,\mathbf{e}_y$ avec $E_0 < 0$;
- la force $\mathbf{F}$ d'origine non électromagnétique, toujours perpendiculaire à $\mathbf{B}$;
- le grain a une vitesse initiale $\mathbf{v}_0$ perpendiculaire à $\mathbf{B}$.

Ces conditions imposées, le mouvement du grain chargé est plan, dans le plan $(\mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ perpendiculaire à $\mathbf{B}$, qui est aussi le plan des figures de ce chapitre. Celles-ci ne sont pas de simples schémas, mais reproduisent les trajectoires du grain obtenues par intégration des lois du mouvement. Sur certaines, la représentation de la trajectoire du grain a imposé des échelles différentes selon $\mathbf{e}_y$ et selon $\mathbf{e}_z$. Cela a alors été précisé dans la légende.

7.1 Dynamique dans un champ magnétique uniforme

Le mouvement d'un grain chargé dans un champ magnétique uniforme (Fig. 7.1) est un mouvement circulaire uniforme caractérisé par :

- sa *pulsation cyclotron* $\omega = \frac{|q|B}{m}$, indépendante de la vitesse du grain ;
- son rayon constant de giration $R = \frac{mv}{|q|B}$, aussi appelé *rayon de Larmor* ;
- son sens de parcours, fonction du signe de la charge q.

On appelle *centre-guide* du grain chargé le centre de giration instantané du grain. Le centre-guide suit approximativement la trajectoire que le grain suivrait si sa giration était amortie. Dans ce premier cas simple où le grain n'est soumis qu'à la force magnétique (Fig. 7.1), le centre-guide du grain est immobile au centre du cercle décrit par la grain

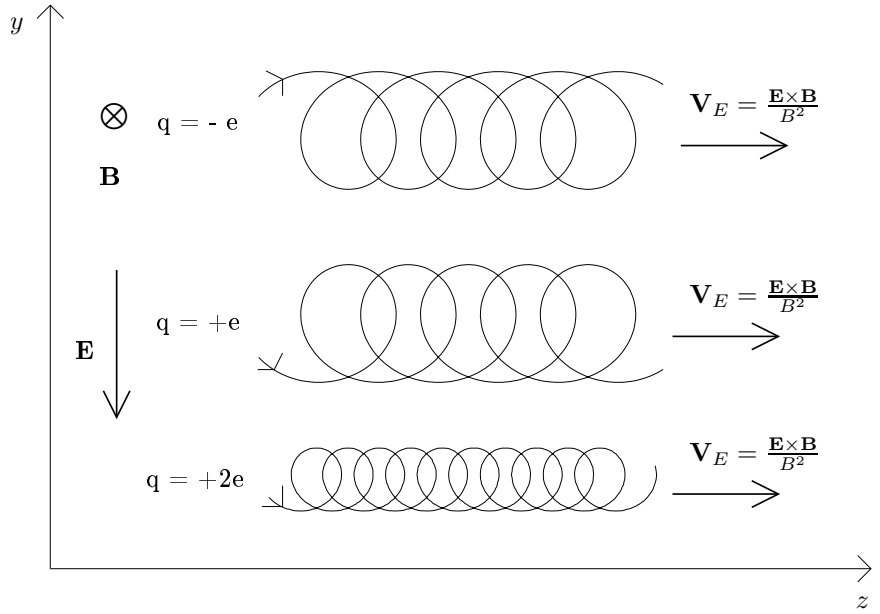


FIGURE 7.2 – Trajectoires de grains chargés dans un champ électromagnétique $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ uniforme mettant en évidence la dérive électrique des grains chargés.

et le mouvement du grain est une simple giration à rayon constant autour de ce point.

7.1.1 Champ électrique perpendiculaire à B - dérive électrique

En présence d'un champ électrique $\mathbf{E}$ perpendiculaire à $\mathbf{B}$, le grain est animé d'un mouvement de giration à rayon constant autour de son centre-guide, qui est en mouvement à la vitesse [1] :

$$\mathbf{V}_E = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2}\,, \tag{7.1}$$

appelée vitesse de *dérive électrique*. La figure 7.2 présente des exemples de trajectoires pour des grains de différentes charges.

La vitesse de dérive électrique est :

- perpendiculaire aux vecteurs champ électrique $\mathbf{E}$ et champ magnétique $\mathbf{B}$;
- constante si les champs électrique et magnétique sont uniformes ;
- *indépendante de la masse et de la charge du grain* (*cf.* Fig. 7.2).

La vitesse instantanée $\mathbf{v}$ du grain peut être décomposée de manière *exacte* en la somme de deux vitesses :

$$\mathbf{v} = \mathbf{V}_E + \mathbf{v}_{\text{gir}}\,, \tag{7.2}$$

où le vecteur vitesse $\mathbf{v}_{\text{gir}}$ traduit la giration à vitesse constante que le grain effectue dans le référentiel de son centre-guide. Comme dans tout mouvement cycloïdal, le module v de la vitesse instantanée $\mathbf{v}$ du grain n'est pas constant au cours du mouvement [2].

1. Une démonstration de l'expression de la vitesse de dérive électrique est donnée à l'annexe B § B.1.
2. Les variations du module de $\mathbf{v}$ sont imputables au travail de force électrique sur le grain au cours de son mouvement (*cf.* Fig. 7.2). Le travail de la force électrique *sur une giration complète* est nul (démonstration à l'annexe B § B.2).

7.1.2 Force constante perpendiculaire à B - composition des dérives

La formule (7.1) de la dérive électrique est généralisable[1] à l'action de toute force **F** constante en intensité et en direction :

$$\mathbf{V}_F = \frac{\mathbf{F} \times \mathbf{B}}{qB^2} \,. \tag{7.3}$$

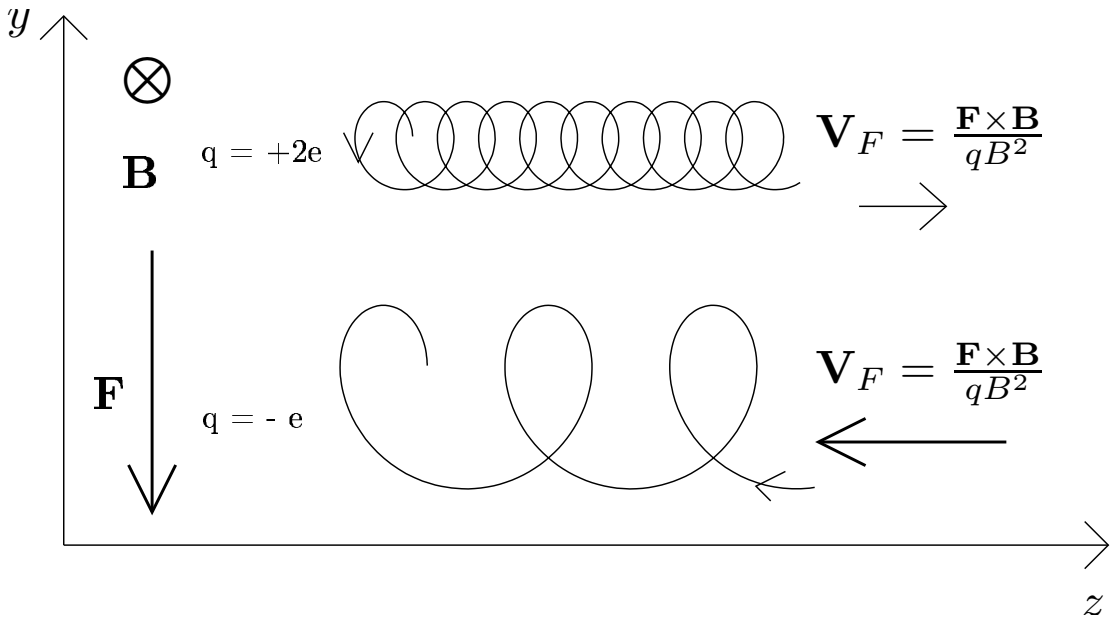


FIGURE 7.3 – Trajectoires de grains de même masse mais de charges différentes dans un champ magnétique **B** uniforme et soumis à une force constante **F** perpendiculaire à **B**.

Du point de vue de la dynamique, l'effet d'une force **F** constante perpendiculaire au vecteur champ magnétique **B** n'est pas d'accélérer le grain dans la direction d'exercice de la force, mais d'induire une dérive du centre-guide du grain à vitesse constante dans la direction perpendiculaire à la force **F** et au vecteur champ magnétique **B** (Fig. 7.3).

Si la force n'est pas d'origine électrique, la vitesse de dérive $\mathbf{V}_F$ a les propriétés suivantes :

- elle est inversement proportionnelle à la charge du grain, les grains de charge faible dérivant plus vite que les grains de charge élevée ;
- elle se fait en sens opposés pour des grains de charges de signes contraires : elle est donc susceptible de créer un courant électrique qui, selon les lois de Maxwell, induira un gradient de champ magnétique.

Décomposition de la vitesse instantanée La vitesse **v** du grain dans la référentiel $\Re$ peut être décomposée de manière *exacte* sous la forme :

$$\mathbf{v} = \mathbf{V}_F + \mathbf{v}_{\text{gir}} \,, \tag{7.4}$$

où $\mathbf{v}_{\text{gir}}$ est la vitesse de giration, constante en module.

1. Si **F** est la force électrique $q\mathbf{E}$, on retrouve bien la formule de la vitesse de dérive électrique (Eq. (7.1)) à partir de l'équation (7.3).

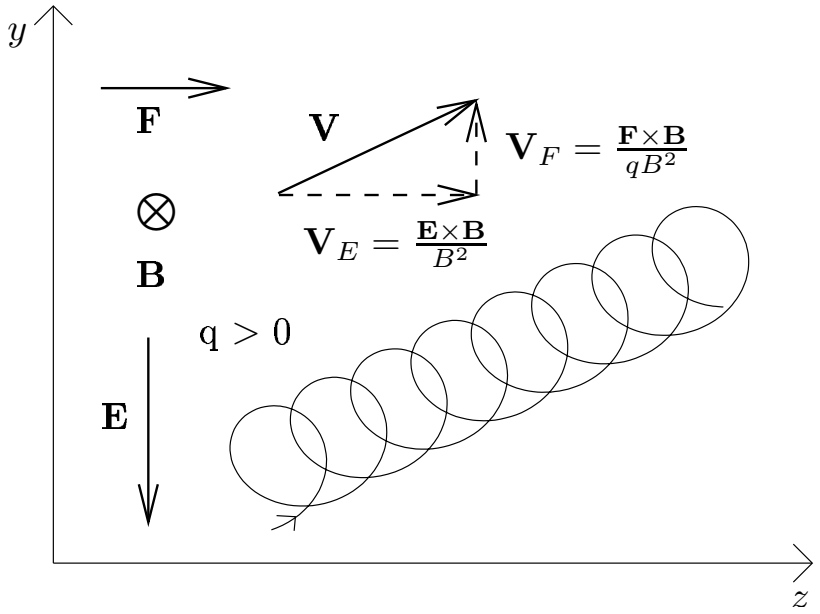


FIGURE 7.4 – Trajectoire d'un grain chargé positivement plongé dans un champ électromagnétique $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ uniforme et soumis à une force constante $\mathbf{F}$ perpendiculaire à $\mathbf{B}$ et à $\mathbf{E}$.

Composition des dérives Dans le cas où plusieurs forces constantes s'appliquent au grain chargé, la linéarité de l'équation (7.3) montre que la vitesse de dérive du grain est la somme des vitesses de dérive calculées pour chaque force. Le grain dérivant dans les directions d'exercice des deux forces (Fig. 7.4, celles-ci fournissent un travail moyen non nul sur une giration complète. On démontre (annexe B § B.2) que les travaux moyens des deux forces se compensent exactement sur une giration, si bien que le grain n'accélère pas en moyenne. On montre également que sa vitesse de dérive est constante et que le module de sa vitesse de giration v_{gir} est conservé au cours du mouvement (*cf.* la constance du rayon de giration sur les figures 7.2 à 7.4).

Conclusion

Retenons qu'*une force constante ne peut pas accélérer la giration d'un grain chargé évoluant dans un champ électromagnétique uniforme*, mais seulement faire dériver son centre-guide à vitesse constante dans la direction perpendiculaire au champ magnétique et à la direction d'action de la force.

Le centre-guide étant le centre de giration, la vitesse de dérive du centre-guide représente la *vitesse moyenne du grain*, abstraction faite de sa giration. Elle n'est par définition observable que sur des échelles de temps bien supérieures au temps de giration. Dans les cas où la giration du grain est négligeable, il est possible d'assimiler à tout instant la dynamique du grain à celle de son centre-guide, ce qui en simplifie grandement le calcul.

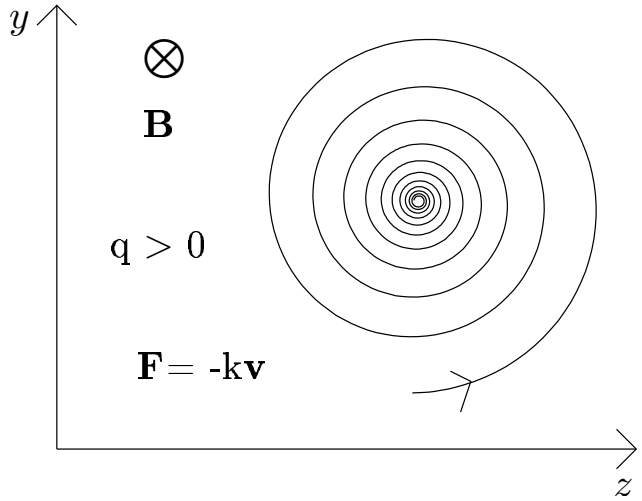


FIGURE 7.5 – Trajectoire d'un grain chargé positivement dans un champ magnétique $\mathbf{B}$ uniforme et soumis à une force de frottement fluide de type $-k\mathbf{V}$.

7.1.3 Force fluide perpendiculaire à B - dérive de friction

Si le grain plongé dans un champ magnétique uniforme est soumis à une force fluide d'expression $\mathbf{F} = -k\mathbf{v}$, exercée par un fluide au repos dans le référentiel $\Re$, son mouvement est une giration amortie autour de son centre-guide immobile [1] (Fig. 7.5 et démonstration à l'annexe B).

Si le gaz responsable de la friction est en mouvement à la vitesse $\mathbf{V}_n = V_\mathrm{n}\,\mathbf{e}_z$ dans le référentiel $\Re$, comme par exemple dans un choc C, le mouvement d'amortissement de la giration du grain se combine à une dérive de son centre-guide (Fig. 7.6 et démonstration à l'annexe B § B.3) que nous nommons *dérive de friction* [2].

7.1.4 Force variable perpendiculaire à B - dérive inertielle

Si la force $\mathbf{F}$ qui s'exerce sur le grain est constante en direction mais augmente en intensité dans la direction de déplacement du grain, on observe (Fig. 7.7) les comportements suivants :

- La vitesse de dérive $\mathbf{V}_F$ augmente puisque $\mathbf{F}$ augmente.
- Le rayon de giration varie. Comme le champ magnétique est uniforme et la charge du grain constante, cela signifie que la vitesse de giration varie effectivement.
- Le grain dérive de manière inattendue selon $\mathbf{e}_y$: l'inertie du grain en est responsable. Il y a *dérive inertielle* quand la vitesse de dérive du centre-guide du grain varie. La vitesse de dérive inertielle a pour expression (démonstration partielle à l'annexe B § B.4) :

$$\mathbf{V}_\mathrm{inertie} = -m\frac{\mathrm{d}\mathbf{V}_F}{\mathrm{d}t} \times \frac{\mathbf{B}}{qB^2}\,. \tag{7.5}$$

1. Le centre-guide ne dérive pas car la valeur moyenne sur une giration de la force de friction $\mathbf{F} = -k\mathbf{v}$ est nulle.

2. La valeur moyenne de la force de friction $\mathbf{F} = -k(\mathbf{V} - \mathbf{V}_n)$ sur une giration n'étant pas nulle, elle peut en effet générer une dérive moyenne du centre-guide, à l'instar de la force constante du paragraphe 7.1.2.

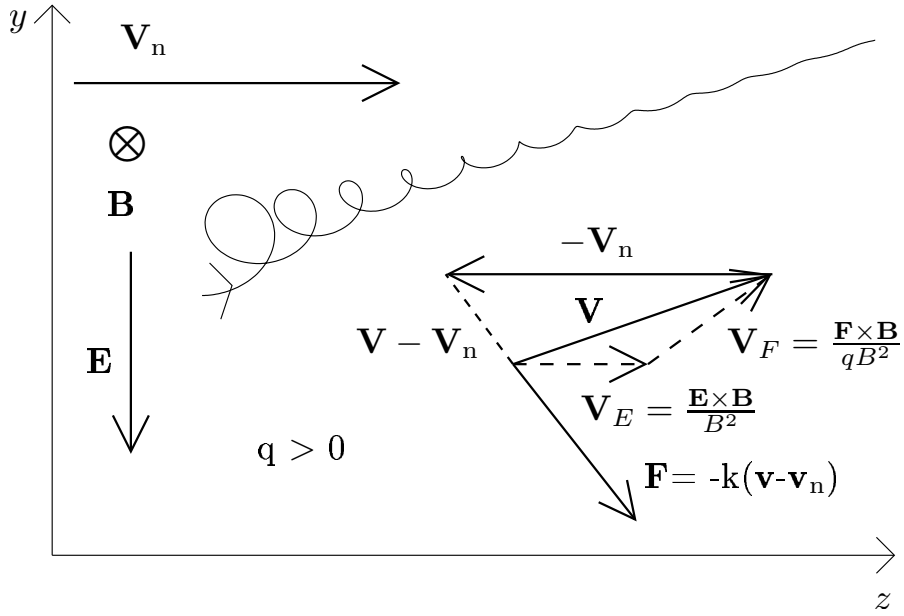


FIGURE 7.6 – Dérive de friction et amortissement de la giration d'un grain chargé plongé dans un champ électromagnétique uniforme et soumis à une force fluide de type $-k(\mathbf{V}-\mathbf{V}_n)$ exercée par un gaz en mouvement uniforme dans le référentiel $\Re$.

Si la force $\mathbf{F}$ au lieu de croître avait diminué, la vitesse de dérive observée aurait eu même valeur et même direction, mais un sens opposé.

Conclusion Une force constante en direction mais variable en intensité modifie la vitesse de giration du grain et induit une dérive inertielle du centre-guide dont la direction et le sens dépendent de la direction et du sens de variation de la force. Cette dérive inertielle, négligeable pour les ions et électrons, ne l'est pas forcément pour les poussières.

7.2 Dynamique dans un champ magnétique lentement variable

Nous nous limitons au cas où, la direction du champ magnétique restant constante, l'intensité du champ magnétique augmente lentement et uniformément selon $\mathbf{e}_z$: $\nabla\mathbf{B} = \nabla B\,\mathbf{e}_z$. On parle alors de champ lentement variable.

7.2.1 Moment magnétique d'un grain chargé

Nous définissons le moment magnétique μ du grain en mouvement dans le champ magnétique $\mathbf{B}$

$$\mu = \frac{mv_{\mathrm{gir}}^2}{2B} = \frac{Ec_{\mathrm{gir}}}{B} \neq \frac{mv^2}{2B}\,. \tag{7.6}$$

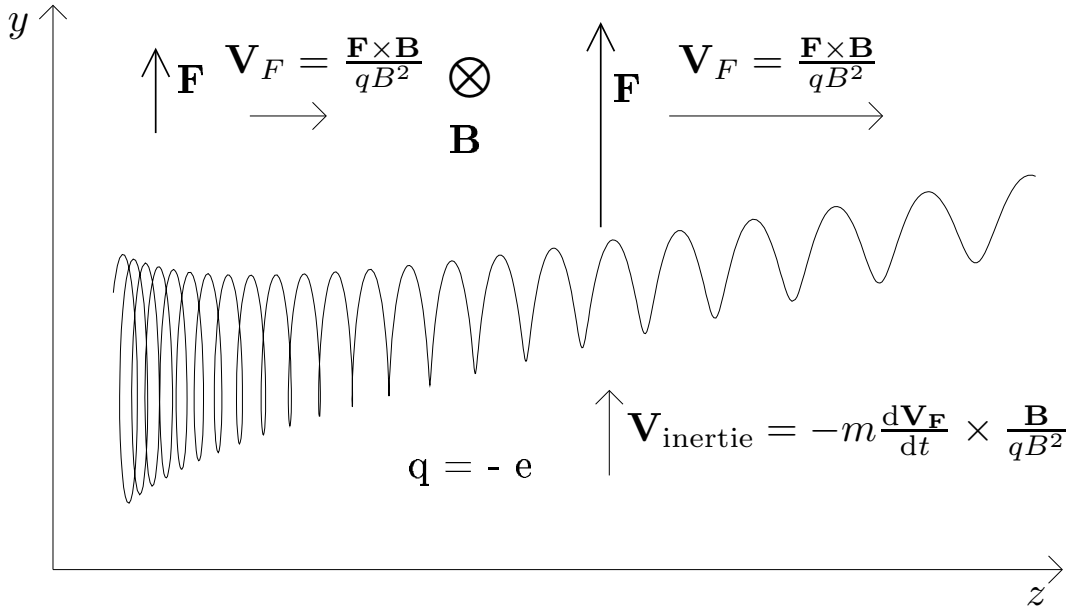


FIGURE 7.7 – Trajectoire d'un grain chargé négativement dans un champ électromagnétique uniforme et soumis à une force $\mathbf{F}$ dirigée selon $\mathbf{e}_y$ et dont l'intensité augmente selon $\mathbf{e}_z$. Pour des raisons de présentation, les échelles selon $\mathbf{e}_y$ et $\mathbf{e}_z$ ne peuvent être les mêmes et les girations quasi circulaires apparaissent donc très aplaties selon $\mathbf{e}_z$.

Dans l'expression de μ, la vitesse considérée est la vitesse de giration v_{gir} du grain autour de son centre-guide, et non pas la vitesse instantanée v du grain dans le référentiel d'étude $\Re$, vitesse v qui peut être très différente de v_{gir} lorsque le centre-guide dérive.

Force magnétique moyennée sur une giration Dans un champ magnétique uniforme, la force magnétique moyennée sur une giration est nulle par symétrie. Dans un champ magnétique lentement variable, la force magnétique, moyennée sur une giration, n'est plus nulle car les régions que traverse le grain au cours de sa giration ne sont pas plongées dans un champ magnétique de même intensité.

On démontre à l'annexe B que la force magnétique moyennée sur une giration a pour expression :

$$< \mathbf{F}_B >= -\mu \nabla \mathbf{B}\,, \tag{7.7}$$

où μ est le moment magnétique défini à l'équation (7.6). Le sens de cette force est opposé à celui du gradient du champ magnétique $\nabla\mathbf{B}$. Cette force magnétique, non nulle en moyenne sur une giration, induit une dérive du centre-guide du grain appelée *dérive diamagnétique* (*cf.* § 7.2.2 et Fig. 7.8).

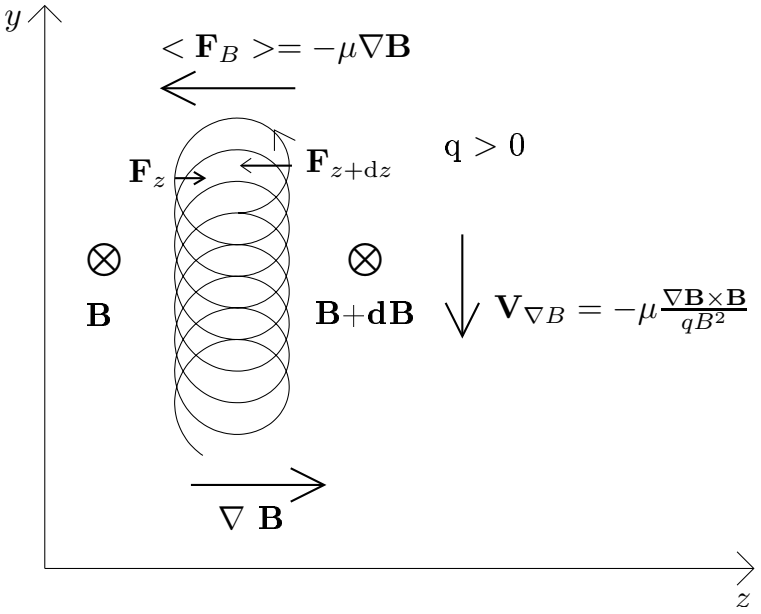


FIGURE 7.8 – Trajectoire d'un grain chargé positivement dans un gradient de champ magnétique $\nabla\mathbf{B}$ uniforme et perpendiculaire au vecteur champ magnétique $\mathbf{B}$.

7.2.2 Champ électrique nul - dérive diamagnétique

La présence d'un gradient de champ magnétique provoque une dérive du centre-guide du grain chargé (Fig. 7.8) à la vitesse constante (démonstration à l'annexe B) :

$$\mathbf{V}_{\nabla B} = -\mu \frac{\nabla\mathbf{B} \times \mathbf{B}}{qB^2} \,. \tag{7.8}$$

Cette vitesse de *dérive diamagnétique* est :

- perpendiculaire au gradient de champ magnétique ;
- proportionnelle au moment magnétique du grain, et donc à son énergie cinétique de giration [1] ;
- de sens opposé pour des grains de charges contraires.

La force magnétique ne fournissant jamais de travail, la vitesse du grain reste constante au cours de son mouvement et égale à sa vitesse de giration [2]. A la différence du mouvement cycloïdal des paragraphes 7.1.1 et 7.1.2, la décomposition de la vitesse instantanée du grain $\mathbf{v}$ en la somme d'une vitesse de dérive et d'une vitesse de giration ne peut donc avoir qu'un caractère *approximatif* et descriptif :

$$\mathbf{v} \simeq \mathbf{V}_{\nabla B} + \mathbf{v}_{\text{gir}} \,. \tag{7.9}$$

1. Et non pas à son énergie cinétique totale (Eq. (7.6)).
2. Les variations de la courbure de la trajectoire sur la figure 7.8 sont causées par les variations de B et non par les variations de la vitesse comme sur les figures 7.2 à 7.4.

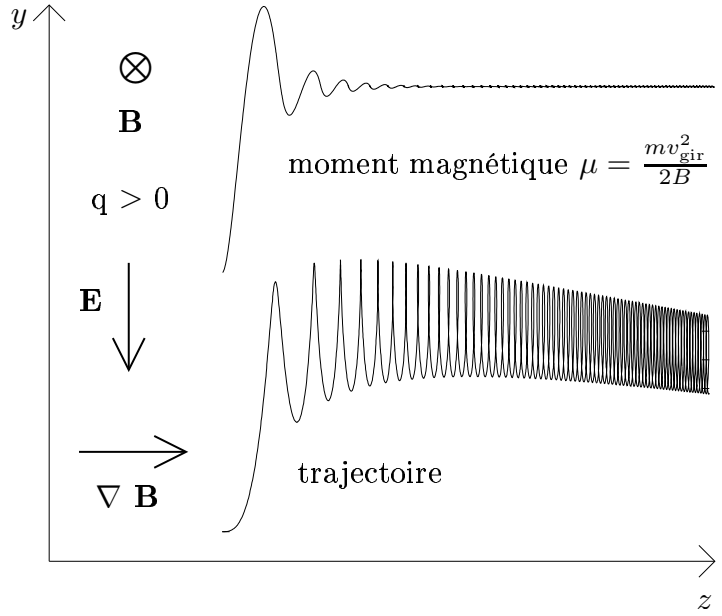


FIGURE 7.9 – (Courbe du bas) Trajectoire d'un grain chargé pénétrant dans un gradient de champ magnétique et un champ électrique uniformes perpendiculaires à **B**. (Courbe du haut) Evolution du moment magnétique $\mu = mv_{\rm gir}^2/(2B)$ au cours de ce mouvement.

7.2.3 Champ électrique perpendiculaire à B - effet bétatron

L'introduction d'un champ électrique uniforme selon $\mathbf{e}_y$ génère une dérive électrique $\mathbf{V}_E = E/B\,\mathbf{e}_z$ qui emmène le grain vers les régions de champ magnétique intense.

Premier invariant adiabatique

Le moment magnétique μ (Eq. (7.6)) du grain chargé est appelé *premier invariant adiabatique* car il se conserve *en moyenne* au cours du mouvement dans le cas d'un champ magnétique lentement variable :

$$\mu = \mathrm{C^{te}}\,. \tag{7.10}$$

Effet bétatron

La figure 7.9 présente une trajectoire possible pour un grain chargé pénétrant dans un gradient uniforme de champ magnétique avec une vitesse de giration initialement nulle, ainsi que l'évolution correspondante de son moment magnétique, initialement nul également. Nous pouvons faire les observations suivantes :

- Le passage rapide de μ, en début de trajectoire, d'une valeur nulle à une valeur proche de sa valeur finale constitue la phase de *magnétisation* du grain. Cette non-conservation initiale de μ est un phénomène non-linéaire qui ne correspond pas à l'objet de notre étude.
- Sur le reste de la trajectoire, μ n'est conservé qu'*en moyenne* au cours du temps : sa valeur varie au cours d'une giration.

La conservation du moment magnétique μ impose les relations suivantes :

$$v_{\text{gir}} \propto \sqrt{B}\,, \tag{7.11}$$

$$R_{\text{gir}} \propto \frac{1}{\sqrt{B}}\,, \tag{7.12}$$

$$E_{c_{\text{gir}}} \propto B\,. \tag{7.13}$$

La dérive du grain chargé vers les champs magnétiques intenses s'accompagne d'une diminution du rayon de giration et d'une augmentation de la vitesse de giration et donc de l'énergie cinétique de giration. C'est l'effet *bétatron*. Notons bien que *c'est la vitesse de giration, et non la vitesse instantanée de la particule, qui augmente proportionnellement à* $\sqrt{B}$, et qu'en conséquence l'effet bétatron est incapable à lui seul d'accélérer un grain dont la vitesse de giration serait initialement nulle.

Dans le référentiel d'étude $\Re$, *cette augmentation de l'énergie cinétique de giration est attribuable au travail de la force électrique* [1]. La force électrique fournit en effet une puissance positive au grain du fait de sa dérive diamagnétique parallèle au champ électrique (*cf.* annexe B.6 pour des précisions sur ce point). C'est donc le champ électromagnétique qui fournit l'énergie nécessaire à l'effet bétatron des grains chargés dans les chocs C. L'effet bétatron dans les chocs transverses diffère en nature de l'effet bétatron dans les bouteilles magnétiques de la magnétosphère terrestre, où l'accélération (et le freinage) de la giration du grain provient du transfert d'énergie entre la composante de la vitesse parallèle aux lignes de champ et sa composante perpendiculaire (vitesse de giration)).

Vitesse inertielle induite par le gradient de champ magnétique

Comme $\mathbf{E}$ est uniforme et B augmente selon $\mathbf{e}_z$, la vitesse de dérive électrique V_E diminue au fur et à mesure que les grains pénètrent dans les régions de champ magnétique intense, ce qui génère une dérive inertielle dans la direction perpendiculaire à $\mathbf{V}_E$ (selon $\mathbf{e}_y$) de sens opposé à la dérive diamagnétique (Fig. 7.10).

La vitesse de dérive inertielle induite par le gradient de champ magnétique a pour expression [2] :

$$\mathbf{V}_{\text{inertie}\,\nabla\text{B}} = \frac{mV_E^2}{B}\frac{\nabla\mathbf{B}\times\mathbf{B}}{qB^2}\,. \tag{7.14}$$

De par le travail de la force électrique, dérive diamagnétique et dérive inertielles rentrent en compétition : la dérive diamagnétique tend à accélérer la giration du grain tandis que la dérive inertielle tend à la freiner. A mesure que B augmente, la vitesse de dérive inertielle diminue en $1/B^3$ tandis que la vitesse de dérive diamagnétique diminue en $1/B$, comme la vitesse de dérive électrique $V_E = E/B$. La dérive inertielle disparaît donc assez rapidement, le centre-guide du grain finissant par suivre un mouvement rectiligne ralenti (*cf.* Fig. 7.10).

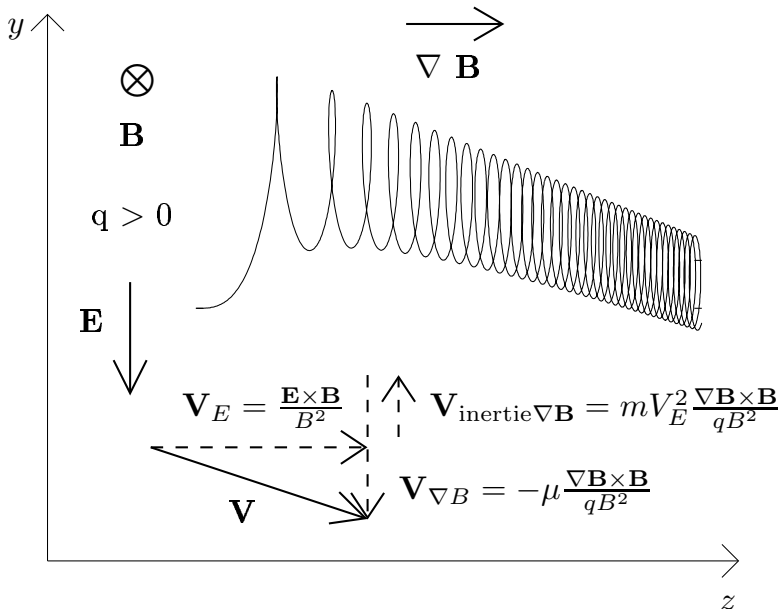


FIGURE 7.10 – Même situation que sur la figure 7.8 mais avec un champ électrique $\mathbf{E}$ uniforme perpendiculaire au vecteur champ magnétique $\mathbf{B}$. Les échelles selon $\mathbf{e}_y$ et $\mathbf{e}_z$ ne sont pas les mêmes et les girations quasi-circulaires apparaissent donc très aplaties selon $\mathbf{e}_z$. La dérive du grain chargé comprend trois termes : électrique, diamagnétique et inertielle. La vitesse de dérive inertielle induite par la diminution de la dérive électrique selon $\mathbf{e}_z$ tend à diminuer à mesure que le grain avance selon $\mathbf{e}_z$.

7.2.4 Eléments de dynamique d'un grain dans un choc C

Nous terminons ce chapitre en incluant tous les ingrédients que nous retrouverons au chapitre 8 dans l'étude de la dynamique des poussières dans les chocs C :

- un champ magnétique croissant ;
- un champ électrique perpendiculaire au champ magnétique ;
- une force de friction fluide exercée par un gaz en mouvement.

La figure 7.11 présente le type de trajectoire que l'on peut obtenir dans ces conditions. Le grain est initialement privé de giration ($\mu = 0$), avançant vers l'avant selon $\mathbf{e}_z$ du fait de sa seule dérive électrique $\mathbf{V}_E = E/B\,\mathbf{e}_z$. Son entrée dans le gradient de champ magnétique induit une diminution de sa vitesse de dérive électrique ce qui, par inertie, lui confère une vitesse de giration autour des lignes de champ (μ augmente) ainsi qu'une vitesse de dérive inertielle. Cette dernière, dirigée vers le haut selon $\mathbf{e}_y$, disparaît très rapidement. Une fois la giration amorcée ($\mu > 0$) apparaissent une dérive diamagnétique (dirigée selon $\mathbf{e}_y$ vers le bas) et l'effet bétatron qui lui est associé (diminution du rayon de giration impliquée par $\mu = \text{C}^{\text{te}}$). L'accélération magnétique ($\mu = \text{C}^{\text{te}}$) et le freinage frictionnel (μ diminue) rentrent ensuite en compétition, tous deux tendant à diminuer la rayon de giration. La force de friction finit

1. L'effet bétatron peut aussi être interprété comme une conséquence de la conservation du flux magnétique à travers la boucle de courant que constitue le grain chargé en giration, et donc comme une conséquence des lois de l'induction électromagnétique.
2. La démonstration est simple à partir de l'équation (7.5) et sachant que $\mathrm{d}B/\mathrm{d}t = V_E \nabla B$.

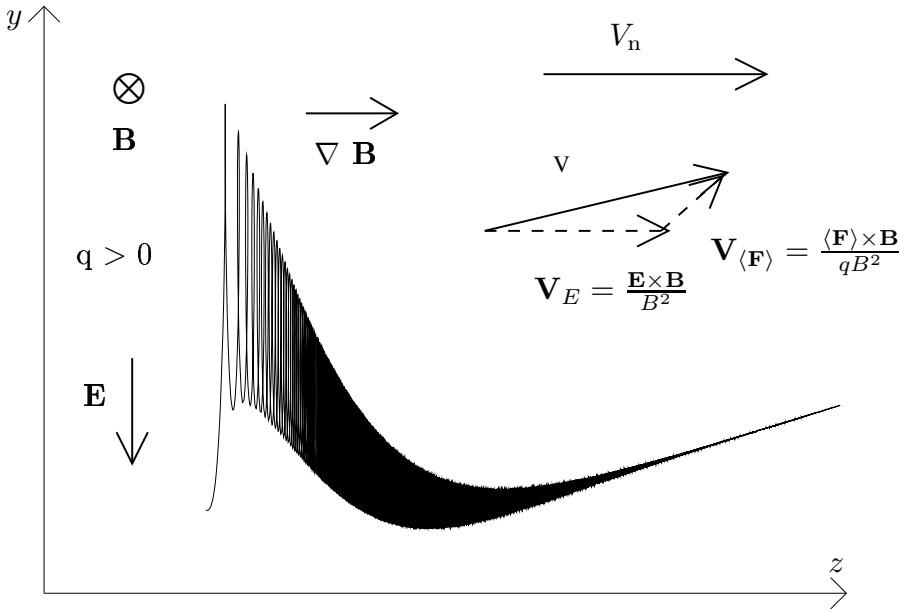


FIGURE 7.11 – Même situation que sur la figure 7.10, mais en ajoutant une force de friction fluide exercée par un gaz en mouvement à vitesse $\mathbf{V}_\mathrm{n}$ dirigée selon $\mathbf{e}_z$. La force $\langle \mathbf{F} \rangle$, moyenne de la force de friction sur une giration, génère une dérive du centre-guide selon $\mathbf{e}_y$ et $\mathbf{e}_z$.

par supprimer la giration du grain ($\mu = 0$) et imposer sa vitesse de dérive dirigée selon $\mathbf{e}_y$ vers le haut et selon $\mathbf{e}_z$ vers l'avant, dérive qui s'ajoute à la dérive électrique [1].

Plus la densité du milieu est élevée, plus courte est la phase où l'effet bétatron l'emporte sur la friction. L'effet bétatron s'avère ainsi incapable d'accélérer les grains de manière significative dans les nuages denses (dès que $n_\mathrm{H} \geq 10^4$ cm^{-3}, *cf.* Draine et al., 1983). Il ne jouera donc pas de rôle significatif dans notre étude, tout comme la vitesse de dérive inertielle. La dynamique des poussières dans les chocs C sera une simple combinaison de giration progressivement amortie, de dérive électrique et de dérive de friction, telle que le présentait la figure 7.6.

1. La dérive diamagnétique, et l'effet bétatron qui en découle, disparaissent avec l'amortissement de la giration, et ce quelle que soit l'évolution ultérieure du champ magnétique.

Chapitre 8

Dynamique des poussières dans les chocs C

La dynamique des poussières dans les chocs détermine leur traitement. La modélisation de cette dynamique est donc avec celle de la charge un élément essentiel de l'étude du traitement des poussières. La dynamique des grains dans les chocs C est déterminée par l'intensité relative de leur couplage au champ magnétique et au gaz (Draine, 1980), par leur inertie (Jones et al., 1996) et par les fluctuations de leur charge (Ciolek & Mouschovias, 1993). Les caractéristiques principales de la dynamique d'un grain chargé dans les chocs C ont été présentées au chapitre 7. L'étude numérique de la dynamique des poussières, détaillée dans l'article 2 (page 193) pour les chocs C, est résumée ici.

8.1 Méthode de calcul pour chaque taille de grain

Nous nous sommes posés comme objectif de calculer la charge, la dynamique et le traitement des grains de toutes tailles dans le choc, ainsi que leurs effets rétroactifs sur la structure du choc. Cela nous impose de coupler la résolution du choc avec l'évolution des poussières.

La *dynamique instantanée* de chaque taille de grains peut être déterminée en considérant chaque grain comme une particule de test en mouvement dans le choc. Mais pour calculer l'effet rétroactif des poussières sur le choc ainsi que l'intensité du traitement lors des collisions grain-grain, nous avons besoin de connaitre en chaque point du choc le *nombre moyen* de grains de chaque taille par unité de volume du gaz. Cette densité de poussières nous est accessible si nous connaissons la *dynamique moyenne*, qui est celle du *centre-guide* de chaque taille de grain comme nous venons de le présenter au chapitre 7.

Notre approche numérique combine donc deux techniques. Pour chaque taille de grain :

1. Nous intégrons la dynamique instantanée du grain tout au long du choc *en simultané de la résolution de la structure du choc*, en tenant compte de sa giration autour des lignes de champ, c'est-à-dire de son inertie. Cette vitesse instantanée sert à calculer les vitesses de collision gaz-grain et grain-grain pour l'étude du traitement des grains dans les chocs (partie III).

2. Nous calculons la dynamique moyenne en chaque point du choc (c'est-à-dire la dynamique du centre-guide, dite aussi dynamique fluide ou encore dynamique à inertie nulle), pour en déduire le nombre moyen de grains par unité de volume de gaz par application de la conservation du flux de masse.

8.1.1 Intégration de la dynamique instantanée

Forces exercées sur les poussières

Dans le référentiel du front de choc, le gaz et les poussières sont plongés dans un champ magnétique croissant (*cf.* § 3.2.1) et dans un champ électrique uniforme[1]. Les vecteurs champs magnétique et électrique sont tous deux perpendiculaires à la direction de propagation $\mathbf{e}_z$ du choc et perpendiculaires entre eux :

$$\mathbf{E} = -V_\mathrm{s}\, B_0\, \mathbf{e}_y\,, \tag{8.1}$$

$$\mathbf{B} = B\,\mathbf{e}_x = B_0\,\frac{V_\mathrm{s}}{V_\mathrm{i}}\,\mathbf{e}_x\,. \tag{8.2}$$

Les poussières traversant le choc sont soumises aux deux forces suivantes :

- la force de friction exercée par le gaz,

$$\mathbf{F}_\mathrm{drag} = \rho_\mathrm{n}\,\sigma\left(\sqrt{(\mathbf{V}_\mathrm{n}-\mathbf{V})^2 + \frac{128k}{9\pi m_\mathrm{n}}T_\mathrm{n}}\right)(\mathbf{V}_\mathrm{n}-\mathbf{V})\,, \tag{8.3}$$

- la force électromagnétique de Lorentz :

$$\mathbf{F}_\mathrm{L} = q\,(\mathbf{v}\times\mathbf{B}+\mathbf{E})\,. \tag{8.4}$$

Le nuage choqué reste très faiblement ionisé (même dans les chocs J) pour les vitesses de chocs considérées dans cette thèse ($V_\mathrm{s} \leq 50$ km s^{-1}). Le freinage coulombien exercé par les ions et les électrons, important dans les milieux diffus (McKee et al., 1987), est donc négligeable dans les nuages denses.

L'effet bétatron (*cf.* chapitre 7) est une simple conséquence de l'action de la force électromagnétique en présence d'une compression lente du champ magnétique . Ce n'est pas l'effet d'une force supplémentaire. Pour que l'effet bétatron permette effectivement d'accélérer la giration des grains, il faut que le temps caractéristique de compression du fluide chargé $\tau_B = 1/(\mathrm{d}V_\mathrm{i}/\mathrm{d}z)$ soit plus court que le temps τ_drag de freinage des grains par le gaz et plus long que le temps caractéristique de giration des grains τ_gyr (Spitzer, 1976) :

$$\tau_\mathrm{gyr} < 1/\left(\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right) < \tau_\mathrm{drag} \propto \frac{1}{n_\mathrm{H}}\,. \tag{8.5}$$

Dans les nuages denses ($n_\mathrm{H} \geq 10^4$ cm^{-3}), l'effet bétatron est négligeable car l'énergie apportée continuellement par le champ électromagnétique à la giration du grain est absorbée presque immédiatement par la forte friction exercée par le gaz (Draine et al., 1983).

1. L'existence d'un champ électrique dans le référentiel du front de choc est une simple conséquence relativiste du mouvement, dans ce référentiel, du fluide des ions dans lequel le champ magnétique est supposé gelé (*cf.* § 3.2.1)

Méthode numérique d'intégration

La dynamique instantanée de chaque taille de grain est intégrée à partir des lois du mouvement, en coordonnées cartésiennes :

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{V}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}\left(\mathbf{F}_{\mathrm{drag}} + \mathbf{F}_{\mathrm{L}}\right) , \tag{8.6}$$

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{V}}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_z}\frac{\mathrm{d}\mathbf{V}}{\mathrm{d}t} . \tag{8.7}$$

La résolution simultanée de la structure du choc nous impose la position z dans le choc comme variable d'intégration. L'équation 8.7 présente une singularité lors que $V_z < 0$, c'est-à-dire lorsque le grain fait demi-tour dans le référentiel du front de choc. Neanmoins, l'expérience numérique montre que, pour les chocs C de notre étude, la giration des grains est si rapidement amortie que les grains vont toujours vers l'avant ($V_z > 0$), assurant le bon déroulement de l'intégration.

8.1.2 Calcul de la dynamique moyenne

La dynamique moyenne de chaque taille de grain est assimilée à la dynamique de leur centre-guide, qui est une vitesse de dérive fluide. Celle-ci n'a pas besoin d'être intégrée car elle ne dépend pas de l'histoire du grain. Elle peut être simplement calculée à partir des conditions locales dans le choc et des caractéristiques physiques du grain. Il suffit pour cela de résoudre de poser les forces appliquées au grain se compensent à tout instant, comme si le grain ne possédait pas d'inertie.

L'équation (6) de Wardle (1998) définit l'expression générale de cette vitesse fluide de dérive dans les chocs obliques. Nous la simplifions pour l'adapter à nos chocs transverses sans composante du champ électrique parallèle au champ magnétique :

$$\mathbf{V}_{\mathrm{fluid}} = \mathbf{V}_{\mathrm{i}} + \frac{1}{1+\Gamma^2}\left(\mathbf{V}_{\mathrm{n}} - \mathbf{V}_{\mathrm{i}}\right) + \frac{\Gamma}{1+\Gamma^2}\left(\mathbf{V}_{\mathrm{n}} - \mathbf{V}_{\mathrm{i}}\right) \times \mathbf{e}_{\mathbf{x}} , \tag{8.8}$$

où $\mathbf{V}_{\mathrm{i}}$ et $\mathbf{V}_{\mathrm{n}}$ sont les vecteurs vitesse respectifs des ions et des neutres.

Le facteur de Hall Γ du grain est solution de l'équation (70) de Chapman & Wardle (2006) qui se réduit à une équation du second degré en Γ^2 une fois adaptée à notre contexte :

$$\Gamma^4\left(\left(\mathbf{V}_{\mathrm{n}} - \mathbf{V}_{\mathrm{i}}\right)^2 + \kappa T_{\mathrm{n}}\right) + \Gamma^2\left(\kappa T_{\mathrm{n}} - \Delta V_{\Gamma=1}^2\right) - \Delta V_{\Gamma=1}^2 = 0 , \tag{8.9}$$

où $\kappa = 128k/(9\pi m_{\mathrm{n}})$, m_{n} est la masse moyenne des particules du gaz neutre et T_{n} leur température, et $\Delta V_{\Gamma=1}$ est la vitesse relative effective gaz-grain qui assure un facteur de Hall Γ égal à 1 :

$$\Delta V_{\Gamma=1} = \frac{ZeB/c}{\rho_{\mathrm{n}}\sigma} . \tag{8.10}$$

8.1.3 Calcul du nombre moyen de grains par unité de volume

Si nous faisons momentanément abstraction du traitement des grains, le flux de masse f de chaque taille de grain, c'est-à-dire le produit masse × densité × vitesse, est conservé à

travers le choc. Connaissant pour chaque taille de grain leur masse moyenne $\tilde{m}$ (*cf.* annexe A de l'article 2) et leur vitesse moyenne $V_{\text{fluid},z}$ dans la direction de propagation du choc (Eq. (8.8)), nous pouvons calculer pour chaque taille de grain la densité n de grain par unité de volume :

$$n = \frac{f}{\tilde{m} \times V_{\text{fluid},z}} \,. \tag{8.11}$$

Pour plus de détails sur cette gestion numérique des boîtes de taille, le lecteur pourra se reporter à l'annexe B de l'article 2 (page 193) ainsi qu'à l'annexe F.

8.2 Dynamique des gros grains ($a \geq 100$ Å)

Les gros grains suivent une dynamique dictée par leur inertie élevée, leur grande section efficace et leur faible rapport surface/volume. Les fluctuations de leur charge étant très rapides (Eq. (5.6)), elles n'ont aucune influence sur leur mouvement.

8.2.1 Phase de giration - phase de dérive

La dynamique des gros grains ($a \geq 100$ Å) dans les chocs C est composée de deux phases (Fig. 8.1) :

1. une phase transitoire de giration qui s'amortit progressivement. Plus le grain est petit, plus la phase de giration est courte ;
2. une phase de dérive sans giration, induite par la présence dans le référentiel du front de choc d'un champ électrique selon $\mathbf{e}_y$ (dérive électrique) et par la friction du gaz (dérive de friction, *cf.* chapitre 7). La vitesse de dérive est indépendante de l'histoire du grain. Elle ne dépend que de ses propriétés physiques, et des forces qui agissent sur lui localement [1].

A basse densité ($n_{\text{H}} = 10^4$ cm^{-3}, Fig. 8.1), la phase de giration n'est pas négligeable et est responsable de la fragmentation des grains (*cf.* chapitre 11). Une fois la giration amortie, les grains sont fortement couplés au champ magnétique selon $\mathbf{e}_z$ (dans la direction du choc) mais pas selon $\mathbf{e}_y$ (parallèlement au front de choc).

A haute densité ($n_{\text{H}} = 10^6$ cm^{-3}, Fig. 8.2), la phase de giration tend à disparaître à cause de la forte friction du gaz. La friction découple également les plus gros grains du champ magnétique. Cette dynamique est globalement en accord avec celle publiée par Chapman & Wardle (2006) pour les chocs C obliques sous un angle proche de la perpendiculaire. Une pénurie d'électrons apparait dans ce choc (*cf.* chapitre 5, Fig. 5.17) trop peu ionisé pour charger les grains à hauteur de leur charge à l'équilibre. Cette pénurie d'électrons diminue temporairement (en valeur absolue) la charge des gros grains (Fig. 5.17), ce qui accentue encore leur découplage du champ magnétique. Nous retrouvons un effet déjà mis en évidence par Pilipp et al. (1990) dans un modèle à plus haute densité ($n_{\text{H}} = 10^7$ cm^{-3}) et avec une seule taille de grain.

1. D'un point de vue numérique, l'existence de cette phase de dérive permet d'arrêter l'intégration de la dynamique instantanée de chaque taille de grain une fois leur giration amortie, et d'accélérer ainsi la résolution numérique du choc.

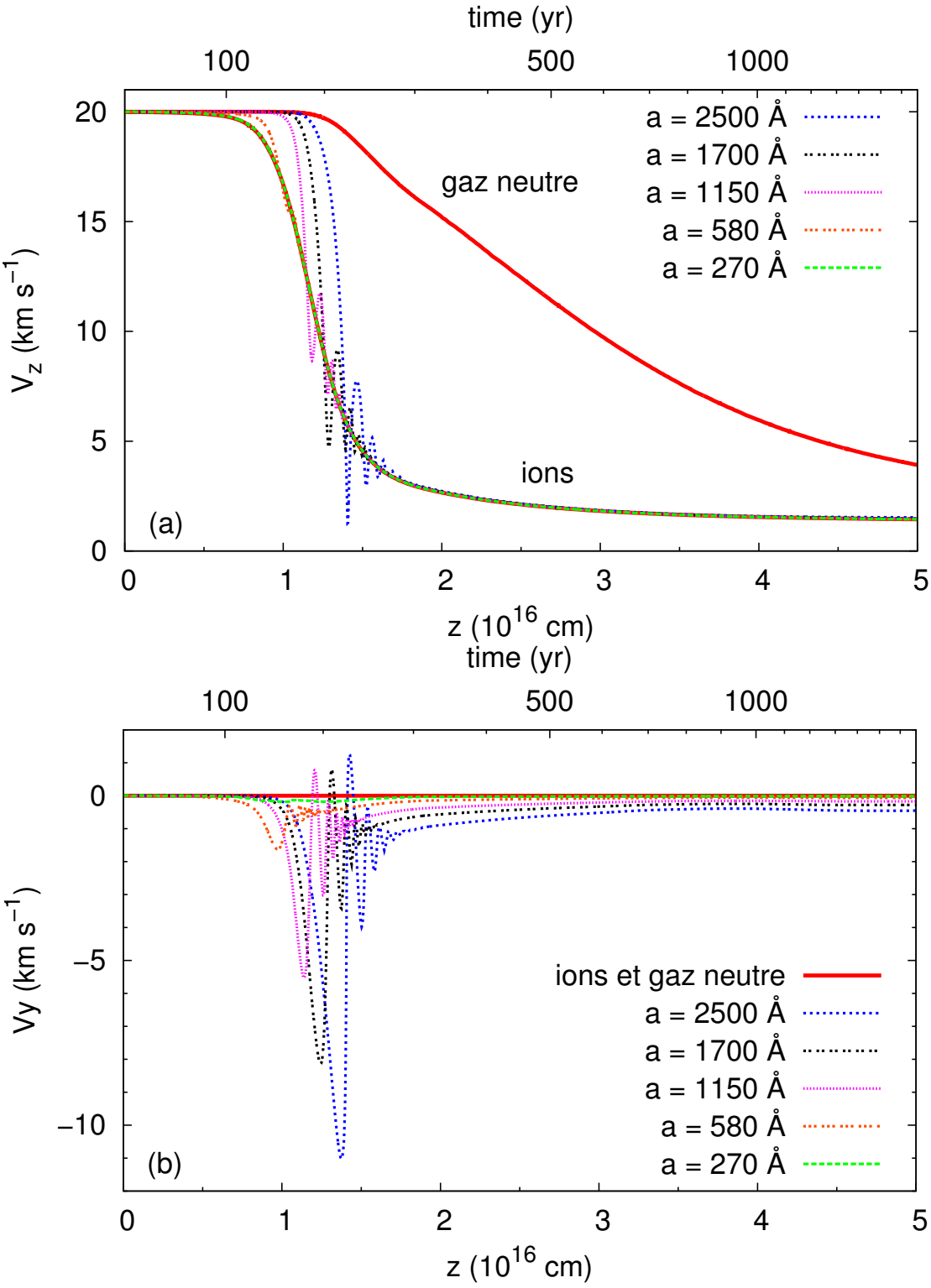


FIGURE 8.1 – Profil des composantes de la vitesse de quelques tailles de grains silicatés, (**a**) dans la direction de propagation du choc et (**b**) parallèlement au front de choc, dans un choc C se propageant à 20 km s^{-1} dans un nuage moléculaire ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}) avec un champ magnétique transverse d'intensité $B = 100$ μG ($b = 1$).

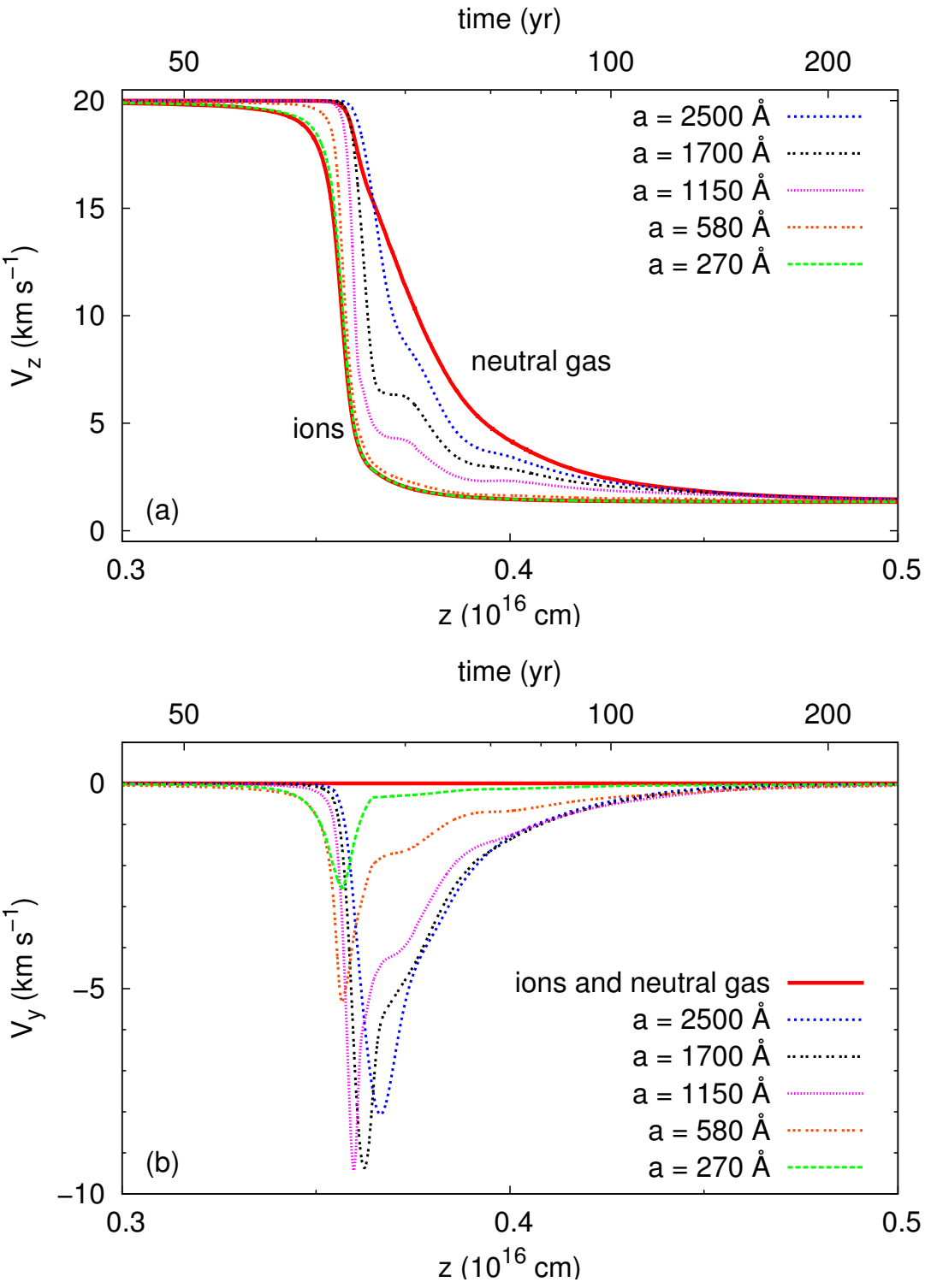


FIGURE 8.2 – (**a**) & (**b**) Comme pour la figure 8.1 mais pour une densité pré-choc $n_{\rm H} = 10^6\,{\rm cm}^{-3}$ et un champ magnétique transverse $B = 1000$ μG ($b = 1$). A cette densité, la giration des grains est très rapidement amortie par la très forte friction du gaz. Pour la même raison, les plus gros grains restent découplés du champ magnétique une fois leur giration amortie.

8.2.2 Freinages collisionnel et non collisionnel de la giration

L'évolution de la giration des grains est le produit de deux effets contradictoires :

1. l'augmentation de la vitesse de giration du grain à l'entrée du choc. Cet effet est d'autant plus important que le choc est raide et que l'inertie du grain est importante. Cette accélération d'origine inertielle est efficace dans des conditions contraires à celles qui favorisent l'effet bétatron (Eq. (8.5)) :

$$1/\left(\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right) < \tau_\mathrm{gyr}\,, \tag{8.12}$$

2. le freinage de la giration par la friction du gaz dans le choc.

L'effet de la force de friction sur la giration du grain a été décrit au chapitre 7. L'accélération inertielle de la giration des grains peut quant à elle être observée sur la figure 8.1. Les petits grains ne bénéficient pas d'une accélération importante à l'entrée du choc car leur temps caractéristique de giration est trop court par rapport au temps caractéristique de ralentissement des ions. Ils ont déjà commencé à tourner avant que les ions aient ralenti de manière significative. Les plus gros grains acquièrent une vitesse de giration plus importante ($\sim V_\mathrm{s} - V_\mathrm{i}$) parce que 1) ils ne commencent à tourner autour des ions qu'une fois le choc déjà bien avancé dans le fluide des ions et 2) le freinage collisionnel par friction du gaz est moins efficace que pour les petits grains.

L'inefficacité de l'accélération de la giration des petits grains à l'entrée des chocs C relativement aux gros grains pourrait être considérée d'un autre point de vue, comme le produit d'une compétition entre une accélération qui aurait la même efficacité sur toutes les tailles de grains, et qui serait contrecarrée par un *freinage non collisionnel* plus efficace sur les petits grains que sur les gros. Ce freinage non collisionnel intervient quand la compression du champ magnétique est lente relativement à la période de giration du grain. Un tel freinage n'existe pas vraiment dans les chocs J car la compression d'un facteur 4 du gaz à la traversée du front de choc assure d'office une vitesse de giration minimale $\sim 3/4 V_\mathrm{s}$ à toutes les tailles de grains. Le freinage non collisionnel pourrait être *critique* pour le traitement des poussières dans les chocs C car il limite très efficacement [1] les vitesses relatives et la durée de découplage entre les différentes tailles de grains (*cf.* chapitre 11).

8.3 Dynamique des très petits grains ($a \ll 100$ Å)

8.3.1 Mouvement de dérive sans giration appréciable

La dynamique des très petits grains ($a \ll 100$ Å) diffère en nature de celle des gros grains. La phase de giration en est quasiment absente. Dès l'entrée du choc, les très petits grains sont freinés très rapidement par la friction du gaz et par le freinage non collisionnel exercé par le champ magnétique (*cf.* § 8.2.2). Ils suivent alors un mouvement de dérive décrit par l'équation (8.8), sont couplés aux ions dans la direction $\mathbf{e}_z$ de propagation du choc mais légèrement découplés des ions par la friction du gaz dans la direction perpendiculaire $\mathbf{e}_y$ (Fig. 8.1).

1. L'efficacité de ce freinage augmente avec l'intensité du champ magnétique transverse, et donc avec b.

8.3.2 Effet des fluctuations de charge - dynamique stochastique

Les très petits grains ($a \ll 100$ Å) n'acquièrent pas de charges très élevées dans les chocs C (*cf.* Fig. 5.16). La fluctuation permanente de leur charge permet donc l'existence partout dans le choc d'une fraction non négligeable de très petits grains neutres. Plus le grain est petit, plus la fraction neutre des grains de cette taille est importante dans le choc.

Les temps caractéristiques de fluctuation de charge des plus petits grains dans les chocs C sont tellement longs que ceux-ci ont le temps de se coupler au gaz quand ils deviennent neutres, et de se coupler au champ magnétique quand ils deviennent chargés. Les fluctuations de charge sont donc à l'origine d'une *dynamique stochastique* des très petits grains (Fig. 8.3). Ceux-ci sont fortement couplés au champ magnétique quand ils sont chargés, et suivent alors le mouvement de dérive électrique des ions. Dès qu'ils sont neutralisés [1], ils tendent à se coupler rapidement au gaz, d'autant plus rapidement qu'ils sont petits. Les plus petits grains ont le temps de se coupler au gaz avant de se recharger. Ils suivent le mouvement du gaz pendant un temps d'autant plus long qu'ils sont petits (*cf.* Eq. (6.4)). Une fois chargés à nouveau, ils se recouplent très rapidement au fluide des ions. Les plus gros grains parmi les petits ($a = 40$ et 80 Å sur la figure 8.3) n'ont, eux, pas le temps de se coupler au gaz avant de se charger à nouveau. Ils se mettent alors à tourner autour des lignes de champ avec une vitesse de giration initialement égale à la différence de vitesse entre le gaz et les ions au moment où ils se sont rechargés. Cette giration est freinée d'autant plus rapidement que le grain est petit. Cette dynamique stochastique se reproduit dans le choc chaque fois que le grain est neutralisé.

Le profil stochastique de vitesse des très petits grains peut-être modélisé par deux composantes de grains en suivant l'approche de Ciolek & Mouschovias (1993) :

1. une composante chargée, de vitesse $\mathbf{V}_\mathrm{c}$:

$$\mathbf{V}_\mathrm{c} = \frac{\tau_0}{\tau_0 + \tau_\mathrm{drag}} \mathbf{V}_\mathrm{i} + \frac{\tau_\mathrm{drag}}{\tau_0 + \tau_\mathrm{drag}} \mathbf{V}_\mathrm{fluid} \,, \tag{8.13}$$

2. une composante de grains neutres de vitesse $\mathbf{V}_0$:

$$\mathbf{V}_0 = \frac{\tau_0}{\tau_0 + \tau_\mathrm{drag}} \mathbf{V}_\mathrm{n} + \frac{\tau_\mathrm{drag}}{\tau_0 + \tau_\mathrm{drag}} \mathbf{V}_\mathrm{c} \,. \tag{8.14}$$

L'équation (8.14) permet de modéliser la valeur moyenne de la vitesse des grains neutres pendant leur durée de vie. L'accord entre cette modélisation (présentée sur la figure 8.4) et la vitesse instantanée intégrée (Fig. 8.3) est tout à fait correct.

8.4 Effets rétroactifs de la dynamique des poussières sur le choc

Au chapitre 3, nous avons montré que la présence des poussières pouvait diminuer de manière très significative la longueur des chocs C dans les milieux à haute densité (*cf.* Fig. 3.6).

1. Les grains sont neutralisés par attachement d'un ion pour les grains de charge $Z = -1$ et d'un électron pour les grains de charge $Z = +1$.

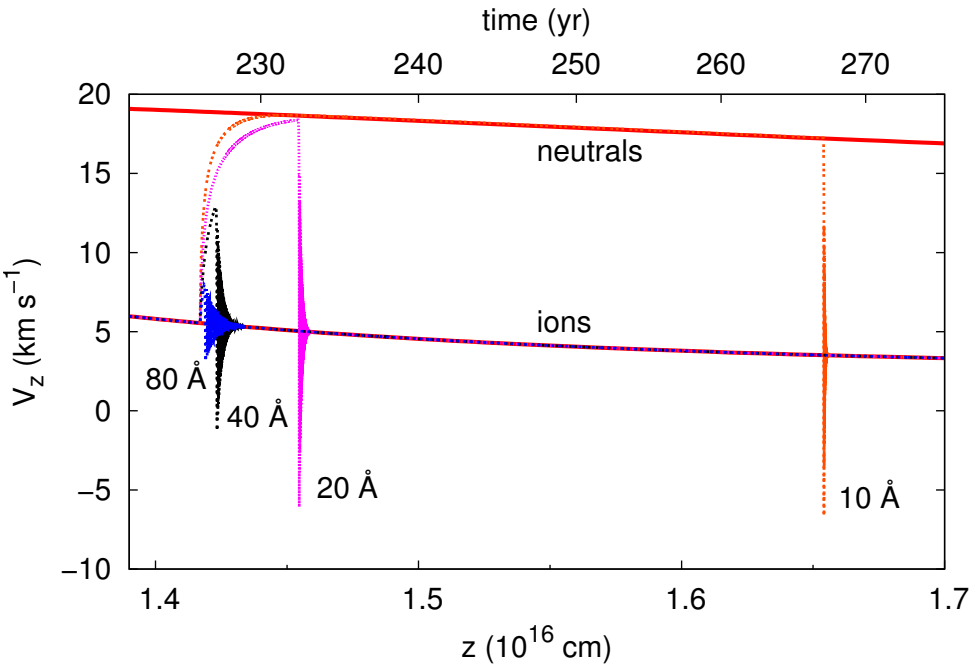


FIGURE 8.3 – Vitesse V_z dans la direction de propagation du choc de 4 grains tests de rayons 10, 20, 40 et 80 Å dans le choc de la figure 8.1. On impose arbitrairement aux grains de devenir soudainement neutres au pic de diffusion ambipolaire du choc ($z = 1,42.10^{16}$ cm). Une fois neutralisés, les grains tendent à se coupler au gaz. Cette phase se termine par un recouplage rapide au champ magnétique dès que les grains se rechargent. Se reporter au texte pour le détail des dynamiques de chaque grain.

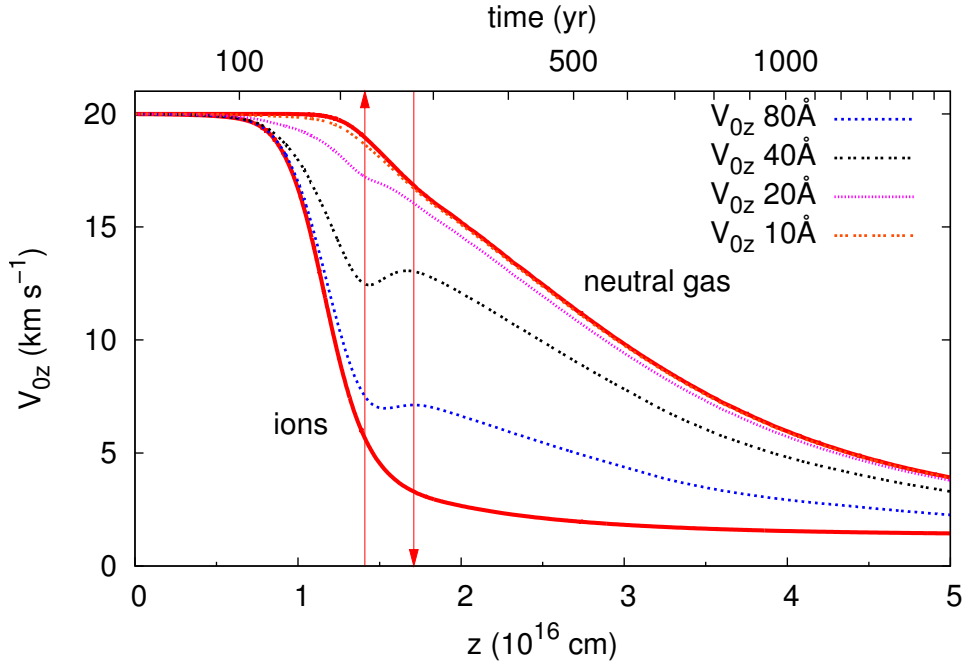


FIGURE 8.4 – Composante selon $\mathbf{e}_z$ de la vitesse moyenne $\mathbf{V_0}$ des grains neutres dans le choc de la figure 8.1, calculée à partir de l'équation (8.14). Les deux flèches verticales délimitent le domaine du choc présenté sur figure 8.3. La vitesse moyenne $\mathbf{V_0}$ est en bon accord avec la valeur moyenne de la vitesse instantanée telle que tracée sur la figure 8.3.

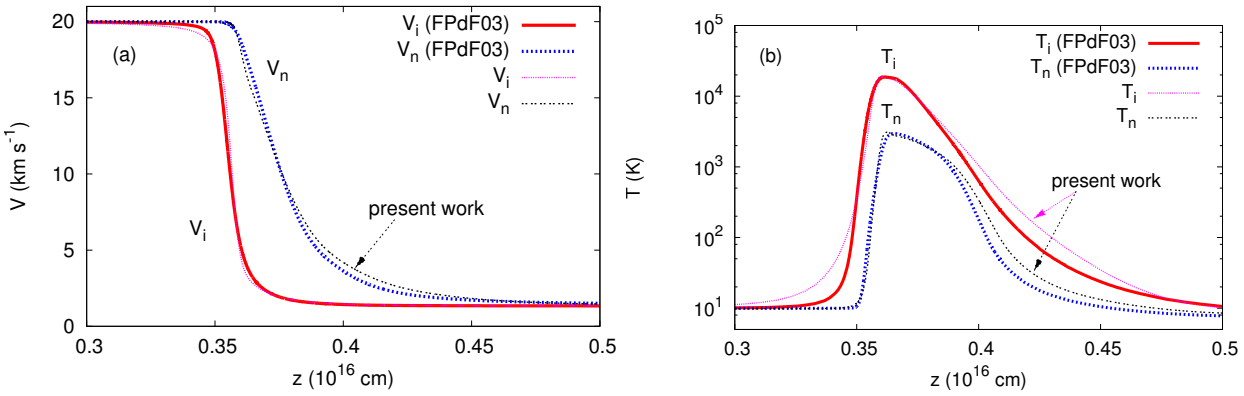


FIGURE 8.5 – Profils de vitesse (**a**) et de température (**b**) pour un choc C de 20 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité de protons $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}, obtenus avec le code de choc de Flower & Pineau des Forêts (2003) qui suppose les grains chargés couplés aux ions, et avec le code actuel qui calcule la dynamique propre des poussières (*cf.* Fig. 8.2).

L'étude de la charge des poussières dans les chocs C (chapitre 5) a également démontré que les poussières pouvaient générer, du fait de leur charge élevée à haute température, une pénurie d'électrons libres dans le gaz, là encore plus significative à haute densité (*cf.* Fig. 5.17). Dans cette section, nous nous intéressons aux effets rétroactifs sur le choc de la dynamique des poussières, considérées comme autant de fluides distincts de celui des ions et des neutres.

La figure 8.2 montre que, dans les chocs à haute densité ($n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}), les gros grains sont découplés des ions, c'est-à-dire du champ magnétique. Ce découplage a deux conséquences majeures :

1. Le couplage entre les fluides chargé et neutre est réduit en comparaison d'un modèle où les grains chargés suivent les ions (modèle de Flower & Pineau des Forêts, 2003). Cette baisse des échanges de quantité de mouvement et d'énergie entre les deux fluides doit tendre à augmenter la longueur du choc (*cf.* § 3.2.3).
2. Si le flux de charge est conservé à travers le choc (c'est-à-dire si le courant électrique J_z dans la direction du choc est nul), la charge électrique locale n'est pas nulle dans le choc, ce qui génère l'apparition d'un champ électrique dans la direction du choc qui influence en retour la dynamique des poussières.

Ces deux points sont détaillés ci-dessous.

8.4.1 Effet du découplage des gros grains sur la longueur du choc

Notre modèle de choc transverse n'est, en toute rigueur, pas adapté à une telle étude : cette situation doit être traitée dans le cadre d'une modèle de choc oblique (*e.g.* Chapman & Wardle, 2006) qui seul intègre l'effet rétroactif du découplage des grains sur le champ magnétique (en particulier sa rotation). Cependant, tout en restant dans le cadre d'un modèle de choc transverse, nous pouvons estimer si nos résultats diffèrent avec ou sans prise en compte de ce découplage.

Sur la figure 8.5, nous comparons les profils en vitesse et en température du choc C de la figure 8.2 (20 km s^{-1}, $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}). Dans le modèle de Flower & Pineau des Forêts

(2003) où les poussières chargées sont totalement couplées au champ magnétique (c'est-à-dire aux ions), le choc est, comme attendu, légèrement plus court que dans notre étude où nous suivons la dynamique propre de chaque taille de grain (*cf.* Fig. 8.2). Cette différence n'est cependant pas très importante, bien que les gros grains soient fortement découplés du champ magnétique. Cela signifie que les gros grains contribuent, dans cet exemple, assez faiblement au couplage avec le gaz. Ce résultat tient au fait que nous avons choisi une distribution en taille de type MRN, où l'essentiel de la section efficace des poussières est portée par les petits grains ($a \ll 1000$ Å) qui restent, eux, fortement couplés au champ magnétique, même à ces hautes densités (*cf.* chapitre 6). Nos conclusions différeraient peut-être avec une distribution en taille plus adaptée aux milieux denses (distribution log-normale, *cf.* chapitre 4).

Si nous conservons une distribution initiale de type MRN, la figure 8.5 montre que le modèle de Flower & Pineau des Forêts (2003), bien qu'il ignore la dynamique propre des poussières, fournit une approximation tout à fait correcte à la structure du choc, pour des densités allant jusqu'à $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}. Le lecteur intéressé trouvera dans l'annexe D de l'article 2 (page 193) des compléments sur ce sujet, ainsi que quelques reférences aux travaux antérieurs liés à cette question de l'effet du découplage des gros grains sur le choc.

8.4.2 Apparition d'un champ électrique E_z

La densité d'électrons libres dans le choc peut être calculée suivant deux hypothèses :

1. Hypothèse de neutralité électrique en tout point du choc (modèle de Flower & Pineau des Forêts, 2003).
2. Hypothèse de conservation du flux de charge (notre modèle, suivant en cela l'approche de Pilipp et al., 1990).

Dans le premier cas, la structure du champ électrique est celle présentée jusqu'à présent : un champ uniforme $\mathbf{E} = -B_0 V_{\rm s}\,\mathbf{e}_y$ parallèle au front de choc. Dans le second cas, une composante E_z du champ électrique dans la direction de propagation du choc apparaît. C'est ce second cas qui nous intéresse ici.

La conservation du flux de charge à travers le choc implique que le courant électrique dans la direction du choc est nul :

$$(n_{\rm i} + n_{\rm PAH^+} - n_{\rm e} - n_{\rm PAH^-})\, V_{\rm i} + \sum_k Z_k n_k \langle V_{kz}\rangle = 0\,. \tag{8.15}$$

Il existe donc en tout point du choc une densité électrique de charge :

$$\rho_{\rm elec} = e\left(n_{\rm i} + n_{\rm PAH+} - n_{\rm PAH-} - n_{\rm e} + \sum_k Z_k n_k\right)\,, \tag{8.16}$$

$$= e\sum_k Z_k n_k \left(1 - \frac{\langle V_{kz}\rangle}{V_{\rm i}}\right)\,. \tag{8.17}$$

Si les grains de toutes tailles sont fortement couplés au champ magnétique (c'est-à-dire si $\langle V_{kz}\rangle = V_{\rm i}$), alors cette densité électronique est nulle. Si certaines tailles de grains sont découplées du champ magnétique, l'écart à la neutralité électrique est, suivant la loi de

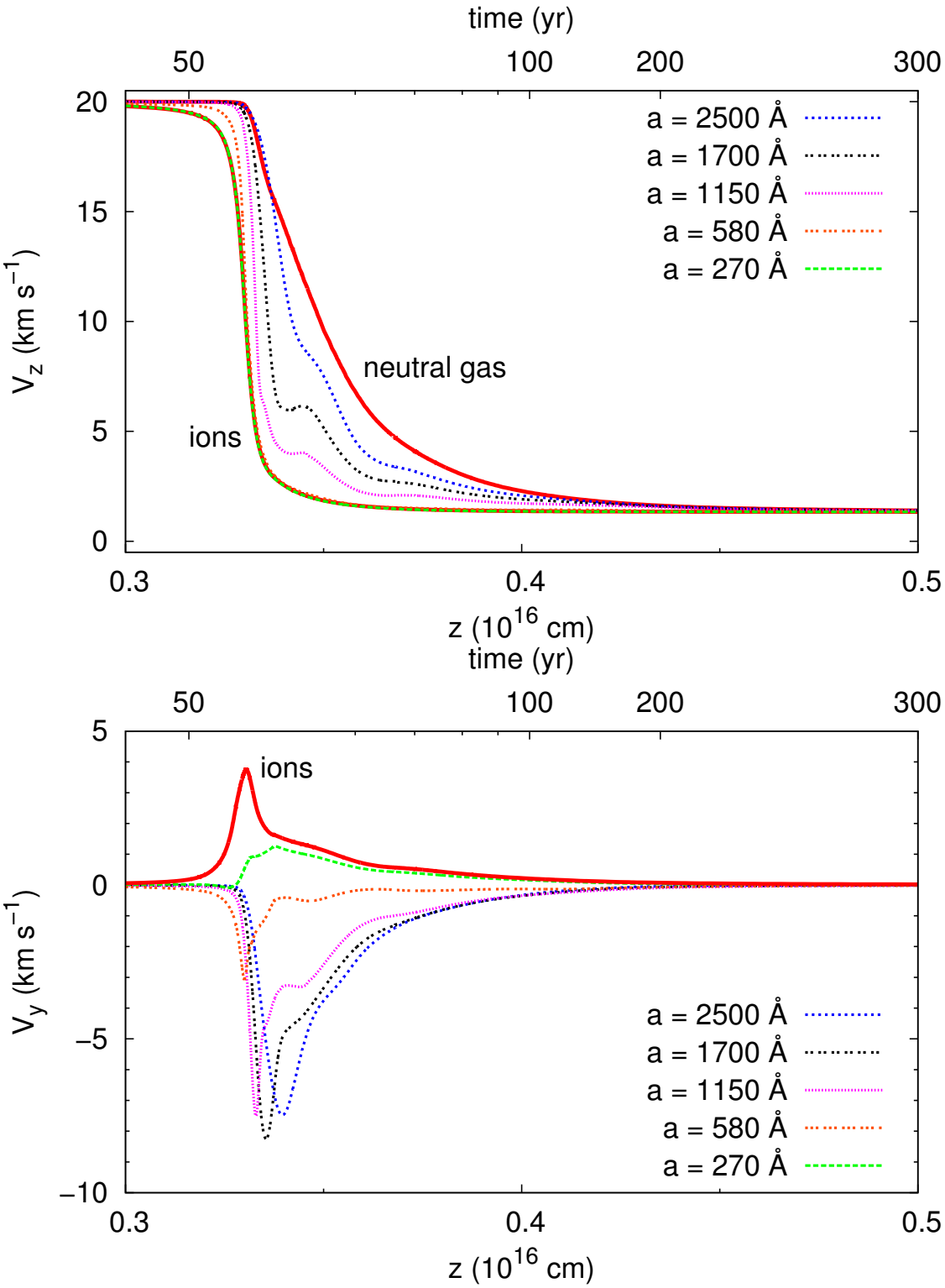


FIGURE 8.6 – Profil de vitesse pour le choc de la figure 8.2 tenant compte de l'apparition d'un champ électrique E_z dans la direction de propagation du choc. Les ions sont maintenant découplés du gaz parallèlement au front de choc. La composante de vitesse des grains selon $\mathbf{e}_y$ (**Bas**) est décalée en comparaison de celle de la figure 8.2, mais les vitesses relatives entre grains de différentes tailles ne sont pas modifiées de manière significative.

Maxwell-Gauss, responsable de l'apparition d'un champ électrique E_z dans la direction de propagation du choc :

$$\frac{\mathrm{d}E_z}{\mathrm{d}z} = 4\pi\rho_{\mathrm{elec}}\,, \tag{8.18}$$

ce qui, par intégration, nous donne un champ électrique [1] :

$$\mathbf{E}(z) = -\frac{B_0 V_{\mathrm{s}}}{c}\,\mathbf{e_y} + \int 4\pi\rho_{\mathrm{elec}}\,dz\,\mathbf{e_z}\,. \tag{8.19}$$

L'effet de cette composante E_z du champ électrique est d'induire une dérive électrique (*cf.* chapitre 7) *parallèle au front de choc* (c'est-à-dire selon $\mathbf{e}_y$) de toutes les particules chargées (ions, électrons, et grains chargés), dérive supplémentaire qui induit elle-même une modification de la dérive de friction des poussières dans la direction de propagation du choc (c'est-à-dire selon $\mathbf{e}_z$). La nouvelle vitesse des ions (et des électrons) a alors pour expression générale :

$$\mathbf{V}_{\mathrm{i}} = c\frac{\mathbf{E}\times\mathbf{B}}{B^2}\,. \tag{8.20}$$

On peut voir sur la figure 8.6 l'effet de ce champ électrique sur la dynamique des poussières, à comparer avec la figure 8.2 où la composante E_z du champ électrique était ignorée. La dynamique de toutes les tailles de poussières est modifiée de manière à restaurer la neutralité électrique : le champ E_z tend, par ses effets, à s'opposer à la cause qui l'a produit. Les différences de vitesse dans la direction de propagation du choc sont insensibles, alors que l'effet est prononcé pour les composantes des vitesses parallèles au front de choc. Dans une distribution MRN, l'essentiel de la charge est portée par les très petits grains. Il n'est donc pas besoin de recoupler les gros grains pour restaurer la neutralité électrique. Une diminution, même très faible, de la vitesse selon $\mathbf{e}_z$ des très petits grains suffit à compenser l'écart à la neutralité créé par le découplage des gros grains. Le lecteur intéressé par cette question pourra se reporter à la section 5.1 de l'article 2 (page 193).

Du point du vue du traitement des grains qui nous intéressera dans les chapitres suivants, on peut remarquer que, si les vitesses absolues sont modifiées, les vitesses *relatives* entre grains sont, elles, assez peu affectées par la présence de la composante E_z du champ électrique. Le traitement grain-grain ne devrait donc pas être modifié significativement par cet ajout à notre modélisation. Nous avons donc choisi d'ignorer par la suite l'existence de ce champ E_z, déduite de notre hypothèse de conservation du flux de la charge.

Nous conservons cependant notre hypothèse de conservation du flux de charge, hypothèse discutable qui aura des conséquences sur l'effet de la fragmentation dans les chocs C (*cf.* notre discussion au § 11.3).

1. Le traitement rigoureux de l'effet du découplage des gros grains sur le champ E_z, dans le cadre de notre hypothèse d'une conservation du flux de charge, amène à des complications. Si notre modèle parvient bien à traiter cette question en assimilant la vitesse moyenne des grains à leur vitesse fluide, il échoue cependant à prendre en compte le fait que, lors de leur entrée dans le choc, les grains ne sont pas immédiatement couplés au champ magnétique, mais conservent pendant environ le temps d'un quart de giration la vitesse du choc qui était la leur. Ce découplage concerne toutes les tailles de grains et conduit, selon l'équation (8.19), à l'apparition d'un champ électrique E_z énorme que notre intégrateur ne peut pas gérer. N'ayant pas de raisons fermes de considérer la composante E_z du champ électrique comme fondamentale pour l'étude du traitement des grains, nous laissons pour l'instant cette question en suspens.

A&A 476, 263–277 (2007)
DOI: 10.1051/0004-6361:20078094
© ESO 2007

Astronomy & Astrophysics

Shocks in dense clouds

I. Dust dynamics⋆

V. Guillet, G. Pineau des Forêts, and A. P. Jones

Institut d'Astrophysique Spatiale, Université Paris Sud and CNRS (UMR 8617), 91405 Orsay, France
e-mail: vincent.guillet@free.fr

Received 15 June 2007 / Accepted 31 August 2007

ABSTRACT

Aims. A new multi-fluid approach to the dust dynamics in transverse shocks in dense clouds is presented with the aim of modelling the dust processing in C- and J-type shocks.
Methods. We have augmented an existing steady-state shock code to include the effects of an MRN size distribution of grain cores with icy mantles. The dust charge distribution and its evolution is considered in detail and included in the ionization balance. The 2-D grain dynamics are determined, including the effects of grain inertia and charge fluctuations, paying particular attention to the gyration of the charged grains around the magnetic field lines and the feedback of the ionization state on grain dynamics.
Results. We find that the critical velocity for C shocks increases with the gas density but that it is only weakly dependent on a high abundance of PAHs and on the photodetachment of electrons by secondary photons induced by cosmic-rays. The detailed dust dynamics in C shocks is shown to comprise two distinct phases: 1) a short gyration phase followed by 2) a long term drift phase. In J shocks only the first gyration phase is present. In C shocks propagating through molecular clouds ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}), large grains ($\gg$100 Å) remain coupled to the magnetic field during the second phase. However, a high abundance of PAHs can lead to a shortage of electrons in the gas and the decoupling of large grains in the shock tail. Large grains are decoupled from the magnetic field all through the C shock in high density clouds ($n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}). In all C shocks small grains ($\simeq$100 Å) remain strongly coupled to the magnetic field, whereas very small grains ($\ll$100 Å) are subject to stochastic dynamics. As long as they are charged very small grains remain strongly coupled to the magnetic field but tend to couple to the neutral gas everytime they become neutral. We have investigated the effects of an electric field along the shock direction in C shocks and find that it does not significantly modify the relative velocities between grains. The derived grain dynamics can be used to study dust processing in C and J shocks in dense clouds through the effects of gas-grain and grain-grain collisions.

Key words. shock waves – magnetohydrodynamics (MHD) – dust, extinction – ISM: clouds – ISM: jets and outflows – ISM: kinematics and dynamics

1. Introduction

Interstellar shocks (see, for example, Draine & McKee 1993, for a review of this subject) are expected to form in the ISM in cloud-cloud collisions and when very energetic winds such as supernova explosions or jet emission from young stellar objects encounter and interact with the ambient ISM. Shocks propagate as supersonic pressure increases that accelerate, compress and heat the gas that they interact with. The magnetic fields present in clouds allow the propagation of magnetosonic waves in the gas upstream of a shock. The nature of the shock is determined by comparing the shock speed with the velocity of propagation of the magnetosonic waves in the medium. The magnetosonic wave velocity depends on the intensity of the magnetic field transverse to the direction of propagation of the shock. On the one hand, if the pressure increase propagates faster than magnetosonic waves, as is the case for high shock velocities or weak transverse magnetic fields, the gas undergoes a J shock (J for "jump") where all variables characterizing the flow are discontinuous at the shock front. On the other hand, for strong transverse magnetic fields or low shock velocities, magnetosonic waves can propagate faster than the shock front forming a *magnetic precursor* to the shock that informs the gas upstream of the arrival of the shock (Mullan 1971; Draine 1980). As the ionization fraction is very low in molecular clouds ($X_{\rm e} \simeq 10^{-7}$–10^{-9}) the ionized and neutral fluids are decoupled by the magnetic precursor. The ionized fluid is accelerated and heated by the magnetic precursor whereas the neutral fluid is essentially unaffected by it. The resulting drift between the ionized and neutral fluids progressively heats and accelerates the neutral fluid, while at the same time radiative emission by H_2 and other coolants cools the gas. If the molecular coolants are not dissociated by the shock, the temperature of the gas can be low enough for the neutral gas to remain supersonic everywhere within the shock frame, i.e. the frame of reference where the shock is stationary. In this case there is no longer a shock front and a C-type shock results (C for "continuous"). If a sonic point is encountered where the supersonic gas becomes subsonic in the shock frame the transition should be discontinuous (J shock) but some authors also discuss the possibility of a continuous transition (C* shock, Chernoff 1987; Roberge & Draine 1990). Recently, the validity of this concept, where the magnetosonic velocity plays the role of a critical velocity for C shocks, has been put into question when dust

⋆ Appendices A–D are only available in electronic form at http://www.aanda.org

Article published by EDP Sciences and available at http://www.aanda.org or http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20078094

grains are decoupled from the magnetic field (Ciolek et al. 2004, hereafter CRM04). This hypothesis awaits confirmation with the inclusion of radiative cooling and a full size distribution for the dust grains.

In interstellar shocks the grains are subject to processes that can affect both the dust-to-gas mass ratio and the dust size distribution. Grain surfaces can be eroded by high velocity collisions with ions and atoms (Barlow 1978; Cowie 1978). Grains can be partially or completely vaporized by collision with another grain at velocities greater than $\simeq$20 km s^{-1} (Tielens et al. 1994). The sputtering and vaporization of grains release the constituent atoms into the gas. Collisions between grains at velocities greater than a critical velocity of a few km s^{-1} can also shatter grains into fragments or craterize them (Borkowski & Dwek 1995; Jones et al. 1996, hereafter JTH96). Below some relative grain-grain velocity, which is dependent on the grain composition and size, and which is of the order 1 km s^{-1}, the grains can stick together (Chokshi et al. 1993; Poppe & Blum 1997). The coagulation (shattering) process conserves the total dust mass but generally redistributes the dust size distribution towards larger (smaller) grains. The degree of shattering, coagulation, vaporization and sputtering in shocks is dependent on the relative velocities between the grains and a study of dust processing in shocks therefore necessitates a multi-fluid approach to the dust dynamics that takes account of the entire dust size spectrum.

Previous studies of dust dynamics in C shocks in dense clouds focused on the impact of dust dynamics on the structure of C shocks. Earlier works modelled the dust size distribution by single-sized grains, whether for shocks with magnetic fields transverse to the direction of propagation of the shock (Draine 1980; Draine et al. 1983; Pilipp et al. 1990) or for oblique shocks with a rotating magnetic field (Pilipp & Hartquist 1994; Wardle 1998). Recently, Chapman & Wardle (2006) introduced a multi-fluid approach to the dust dynamics in their oblique shock code. Their conclusions, after Pilipp & Hartquist (1994), suggest that single-sized grain models tend to overestimate the impact of dust dynamics on the shock structure, compared to two-fluid or multi-fluid models including small grains. In all these studies grain inertia and the impact of charge fluctuations on the dust dynamics were ignored. Ciolek & Roberge (2002) developed a time-dependent code for transverse shocks where the dust grains are modelled as two fluids, one for large grains and one for small grains or PAHs, where they included grain inertia and grain charge fluctuations. This code was applied to the formation of the magnetic precursor in C shocks (CRM04).

The shock model that we use is that of Flower & Pineau des Forêts 2003 (hereafter FPdF03) which was designed to study steady-state transverse C and J shocks. The code has been augmented to allow for a study of the dust dynamics and processing while, in parallel, solving for the shock structure. The dust size distribution is modelled by size bins as per Jones et al. (1994, 1996). In this paper, we restrict our presentation to the modelling of dust charging and dynamics in shocks. The impact of dust processing on the dust size distribution and on the shock structure will be presented in a following paper. Here, we give particular attention to those aspects of the dust dynamics, already addressed in different contexts by other authors, that have or could have an impact on the processing of dust grains in shocks, i.e., the gyration of dust grains around magnetic field lines (Jones et al. 1994, 1996; Slavin et al. 2004), dust charging and the calculation of the ionization balance (Pilipp et al. 1990), charge fluctuations (Ciolek & Mouschovias 1993), the existence of electric field and electric forces (Pilipp et al. 1990; Ciolek & Mouschovias 1993; Wardle 1998).

Our paper is structured as follows. Section 2 presents the modelling of the dust size distribution as size bins and the charging processes as applied to the grains and PAHs. In Sect. 3 we compare our results for the dust charge distribution and ionization balance in molecular clouds with the results of previous modelling (FPdF03). Section 4 presents our new calculation of the critical velocity for C shocks, based on the work by CRM04, and developes our modelling of the grain dynamics for a variety of shock conditions. Within the perspective of modelling the dust processing in shocks, we show in Sect. 5 that the presence of an electric field in the direction of propagation of the shock, generated by non local electrical neutrality, has only a minor impact on the relative velocities between the different-sized dust grains, and can therefore be ignored in modelling the dust dynamics of relevance to dust processing. We also examine the dynamics of very small grains ($\ll$100 Å), absent in the present model, but that we expect to be produced in great numbers by the shattering of large grains in grain-grain collisions.

2. The dust model

2.1. The dust size distribution

We represent the dust size distribution in dense clouds by two independent, power-law size distributions of spherical silicate ($\rho_{\rm Sil}$ = 3.3 g cm^{-3}) and carbon ($\rho_{\rm C}$ = 2.2 g cm^{-3}) grain cores: $\mathrm{d}n(a)/\mathrm{d}a \propto a^{\alpha}$ for $a_- < a < a_+$, where a is a grain radius. For simplicity, we take identical values of α, a_- and a_+ for both the carbon and silicate distributions, though the code can be run with any values. The dust size distributions are numerically modelled as discretised size bins as per Jones et al. (1994, 1996), in our work we use 8 size bins. Here we focus on the silicate distribution (similar expressions exist for the carbon grains). In molecular clouds the grain cores are probably larger than in the diffuse ISM because of the coagulation and accretion processes acting in denser environments (Cardelli et al. 1989). Adopting a dust size distribution based on Mathis et al. (1977, MRN) and characterized by a slope $\alpha = -3.5$, we adapt the usual grain size limits to values more appropriate for dense clouds by choosing a_- = 100 Å and a_+ = 3000 Å as per FPdF03. See Appendix A for a description of our modelling of the grain core size distribution.

The low gas and dust temperatures in molecular clouds lead to the formation of icy mantles on the grain cores by the adsorption of gas phase species onto grain surfaces. The accreted species include H_2O, CO and CO_2 (see Table 2 of FPdF03 for a full list of the chemical species in the mantles in our model). The process of adsorption is counterbalanced by the desorption processes of sputtering, photodesorption, cosmic ray induced desorption and photoevaporation. At high gas temperatures, the sputtering of icy mantles by collisions with gas particles is the dominant erosion process. Mantle erosion can be accelerated by the presence of a high relative velocity between the grains and the gas. If this velocity is independent of grain radius, as it is when the dust grains are strongly coupled to the magnetic field, then the thickness of the icy mantles is *independent of the grain core radius* because the rates of accretion and erosion are proportional to the grain surface. We therefore consider that mantles of identical thickness cover all grains, independent of the grain size, in the pre-shock gas and elsewhere in the shock. Appendix B presents the method used to calculate the mantle thickness for a given size distribution of grain cores. Figure 1 presents the impact of the presence of icy mantles on the dust size distribution and we note that this is no longer a power-law when icy mantles

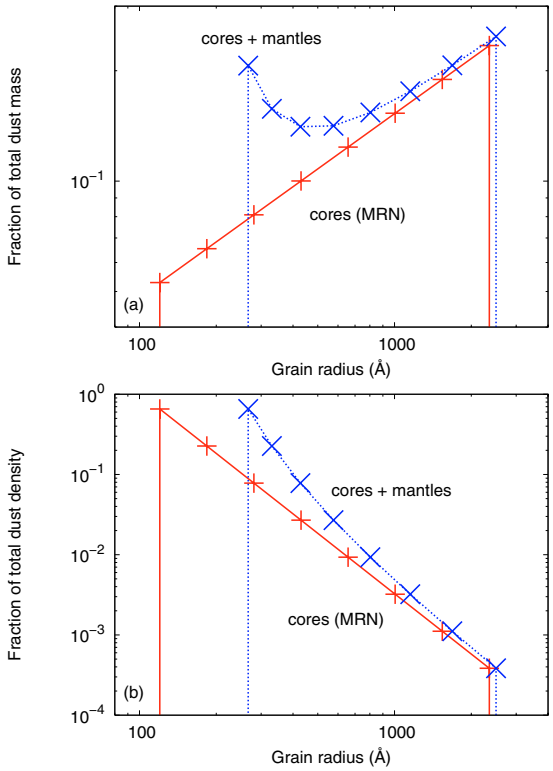


Fig. 1. a) Fraction of the silicate dust mass in each bin as a function of the average radius for that bin, with and without mantles. **b)** Same as **a)** for the fraction of the silicate grain number density in each bin. The mantle thickness is 147 Å for a pre-shock gas with no PAHs. The number density of the grains per unit volume is not modified by the accretion of mantles onto the grain cores.

cover the grain cores. When mantles are present, the smallest grains carry a significant fraction of the total dust mass, unlike an MRN size distribution. As expected, mantle accretion shifts the small grains to larger sizes proportionately more than it shifts the sizes of the larger grains. With a mantle 147 Å thick covering the grain cores (see Appendix B for a description of the numerical method for the calculation of mantle thickness in the pre-shock environment and in the shock), the total grain cross-section $\langle n\sigma \rangle$ is 2.7 times larger than without mantles. This factor is increased to 3.1 for a 50−2500 Å core distribution.

The presence of PAHs in molecular clouds is still a matter of debate because they could be accreted onto the grains or could be created by previous shocks. Their influence on the dust charge distribution being so important (FPdF03, Chapman & Wardle 2006) we include their presence in our modelling. We treat PAHs as per FPdF03, modelling them as a single type of molecule (circum-coronene, $C_{54}H_{18}$) with a corresponding radius of 6.6 Å.

2.2. Dust charging

In molecular clouds the grains are primarly charged by the collisional attachment of free electrons and ions. The competition between the attachment of electrons and ions makes the grain charge fluctuate around an average value, resulting in a charge distribution.

Grain charging is critical for the study of dust processing in C shocks because it affects the coupling of the grains to the magnetic field and, thus, the relative velocity between grains. Our model for grain charging is designed around our need to study dust processing in shocks where very small grain fragments ($\ll$100 Å) are expected to be produced in great numbers by the shattering of large grains in grain-grain collisions (JTH96). A significant fraction of these very small grains is neutral in C shocks, even in the hottest parts of the shock. Very small neutral grains tend to be coupled to the neutral gas (see Sect. 5) and may play an important role in the processing of charged grains which are coupled to the magnetic field. In order to determine the fraction of neutral grains, we therefore need to integrate the grain charge distribution (Ciolek & Roberge 2002, FPdF03). The impact of the charge carried by the numerous small grain fragments on the density of free electrons in the gas is potentially important because C shocks remain very weakly ionized. A modification in the ionization state of the gas will in turn affect the charging, dynamics and processing of larger grains. Dust charging must therefore be determined as part of the calculation of the ionization balance (Pilipp et al. 1990; Ciolek & Roberge 2002, FPdF03).

Our method for charge integration has two modes. Weakly charged grains ($|Z| \simeq 1$) have their charge distribution integrated to determine the fraction of neutral grains. For highly charged grains ($|Z| \gg 1$) the probability for grains of this size to be neutral is close to zero. The integration of the whole charge distribution is then replaced by the integration of the average number of charges, which corresponds to the peak of the charge distribution. Switching between these two modes is managed automatically for each grain size without any noticeable effect on the charge and ionization state profiles (see Figs. 8 and 9, for example, and Appendix C for the details of charge integration).

We consider a grain of radius a, cross-section σ and charge $q = Ze$ (where e is the proton charge) embedded in a weakly ionized plasma composed of electrons with mass m_e, density n_e and temperature T_e and positive ions with charge $+e$ and temperature T_i but with differing densities, n_i, and masses, m_i. We adopt the electron and ion attachment rates J_e and J_i defined by Eqs. (3.1), (3.3), (3.4) and (3.5) of Draine & Sutin (1987).

$$J_e(Z) = s_e\, n_e\, \sigma \sqrt{\frac{8kT_e}{\pi m_e}}\, \tilde{J}\left(\tau = \frac{akT_e}{e^2}, \nu = \frac{q}{-e} = -Z\right), \quad (1)$$

$$J_i(Z) = s_i\, n_i\, \sigma \sqrt{\frac{8kT_{\mathrm{eff,i}}}{\pi m_i}}\, \tilde{J}\left(\tau = \frac{akT_{\mathrm{eff,i}}}{e^2}, \nu = \frac{q}{+e} = Z\right). \quad (2)$$

Ions and electrons impinging on the grain stick to the surface with a probability taken to be $s_e = 0.5$ for electrons and $s_i = 1$ for ions as per Weingartner & Draine (2001), for comparison FPdF03 assumed $s_e = s_i = 0.5$. The reduced rate coefficient, $\tilde{J}$, quantifies the Coulomb attraction or repulsion between the grain and the incident electron or ion and includes the polarization of grains by the approaching particle. $\tilde{J}$ only depends on the reduced temperature τ and on the ratio of grain charge to particle charge, ν (Draine & Sutin 1987). The effective ion-grain temperature $T_{\mathrm{eff,i}}$ is described below.

In shocks the grains stream through the fluid formed by the ions and electrons, whether by their gyration around magnetic field lines or because of their weak coupling to the magnetic field (see Sect. 4). In the reference frame of the dust grains, the velocity distribution of the electrons (ions) is not a maxwellian of temperature T_e (T_i) as per Draine & Sutin (1987) but a velocity-shifted maxwellian of the same temperature (Shull 1978; Pilipp et al. 1990). The thermal velocity of

Table 1. Steady-state charge distribution model results for dense clouds: Col. (1) is our standard model and Col. (5) is taken from FPdF03 for comparaison with our results. n_{g^-} (n_{g^0}, n_{g^+}) is the number density of negative (neutral, positive) grains per unit volume, summed over all grain size bins. Idem for PAHs. The critical velocity V_{crit} can be computed either by assuming that only the charged grains are strongly coupled to the magnetic field, as in FPdF03, or by following Eq. (12) based on the work of CRM04.

n_H (cm^{-3})	10^4	10^4	10^4	10^4	10^4	10^5	10^6
n_{PAH}/n_H	no PAH	no PAH	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	no PAH	no PAH
Secondary photons ?	no	yes	no	yes	yes	no	no
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5) (as per FPdF03)	(6)	(7)
n_{g^-}/n_g	0.89	0.87	0.32	0.28	0.07	0.90	0.91
n_{g^0}/n_g	0.11	0.11	0.67	0.68	0.90	0.10	0.09
n_{g^+}/n_g	1 (–4)	4 (–4)	0.01	0.04	0.03	8 (–5)	7 (–5)
n_{PAH^-}/n_{PAH}			0.05	0.05	0.06		
n_{PAH^0}/n_{PAH}			0.95	0.95	0.94		
n_{PAH^+}/n_{PAH}			1 (–3)	1 (–3)	1 (–3)		
n_i/n_H	3.38 (–8)	3.41 (–8)	5.50 (–8)	5.51 (–8)	6.50 (–8)	8.26 (–9)	1.75 (–9)
n_e/n_H	3.38 (–8)	3.40 (–8)	2.53 (–9)	2.55 (–9)	2.68 (–9)	8.21 (–9)	1.70 (–9)
V_{crit} (FPdF03)	20.2	20.4	29.6	30.8	63	20.0	20.0
V_{crit} (CRM04)	20.7	20.8	22.9	23.7		23.6	28.1

the electrons in shocks is always much higher than the relative grain-electron velocity. However, the thermal velocity of ions is of the same order, or even lower, than the relative ion-grain velocity. The shift in the velocity distribution can therefore be neglected for electrons but not for ions. We define $\boldsymbol{V}$ as the velocity of the grain and $\boldsymbol{V}_i$ as the velocity of the ions in the shock frame. Following Pineau des Forêts et al. (1986) we associate the velocity-shifted maxwellian of the ions in the reference frame of the grain with a maxwellian of effective ion-grain temperature $T_{eff,i}$. The expression for the "pseudo" thermal velocity of the ions $\sqrt{8kT_{eff,i}/(\pi m_i)}$ for the effective ion-grain temperature $T_{eff,i}$ must correspond to the "real" thermal velocity $\sqrt{8kT_i/(\pi m_i)}$ of the ions when the grain follows the motion of the ions (i.e. when $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}_i$) and tends towards the relative velocity $|\boldsymbol{V} - \boldsymbol{V}_i|$ of kinetic origin when the thermal velocity is negligible. The following expression for the effective ion-grain temperature $T_{eff,i}$ satisfies both criteria

$$T_{eff,i} = T_i + \frac{\pi}{8k} m_i \, (\boldsymbol{V} - \boldsymbol{V}_i)^2 \, . \tag{3}$$

When a high fractional abundance of PAHs is present in a C shock (see Sect. 4) the negatively charged PAHs can be more abundant than the free electrons in the gas. Even if the thermal velocity of PAHs is negligible, due to their large mass, the relative velocity between the grains and the charged PAHs can lead to a higher collision rate for PAH^- with grains than for electrons with grains. In such a situation, and where a shortage of electrons in the gas occurs, the charge exchange between negatively charged PAHs and grains can contribute to the coupling of the dust grains to the magnetic field. The recombination rate J_{PAH^-} for PAH^- with grains is similar to Eq. (2), adapted to particles of mass $m \simeq 54 \times 12 m_H$, charge $-e$ and temperature T_e; for simplicity the sticking coefficient is assumed to be unity.

Although the interstellar radiation field is attenuated by dust in the external layers of molecular clouds, there are ultraviolet photons in dark clouds due to cosmic-ray interactions. Most of the electrons produced by the cosmic-ray ionization of hydrogen are energetic enough to excite the Rydberg states of H_2 which then fluoresce in the ultraviolet. For a cosmic ray ionization rate, ζ, the rate per unit volume for fluorescence photons indirectly generated by cosmic-rays is $0.15\,\zeta\, n_H$ (cm^{-3} s^{-1}) if only 15% of secondary electrons can excite the Rydberg states of H_2 (FPdF03), here $n_H = n(H) + 2n(H_2)$ is the proton density. Fluorescent photons are emitted with energies $7.1 < h\nu < 14.6$ eV (Gredel et al. 1989, Fig. 1 therein). For simplicity, we here assume that all of the secondary photons have the same energy $h\nu = 10$ eV. The secondary photons are absorbed by all grains, and PAHs if present (the absorption by molecules is negligible). The absorption is proportional to the dust cross-section $Q_{abs}(a)\,\sigma$ where a is the grain radius, σ is the geometrical cross-section of the grain and $Q_{abs}(a)$ is the absorption efficiency factor for a photon of energy 10 eV. We consider the photoemission of valence band electrons from grains of charge Z and adopt the model of Weingartner & Draine (2001) for the dust material properties and for the photoemission yield $Y(a, Z)$ as given by their Eq. (8). In the FPdF03 model a grain has the following photoemission rate

$$J_{pe}(Z) = 0.15\,\zeta\, n_H\, Y(a, Z) \frac{Q_{abs}(a)\,\sigma}{\langle Q_{abs}\sigma n\rangle}, \tag{4}$$

where $\langle Q_{abs}\sigma n\rangle$ is the total cross-section for the dust size distribution, including any PAHs, for the absorption of secondary photons. The rate per unit volume for fluorescence photons is proportional to the gas density, as is the total cross-section for dust grains and PAH $\langle Q_{abs}\sigma n\rangle$. For a given dust-to-mass ratio and PAH fractional abundance, the photodetachment rate J_{pe} by fluorescence photons is therefore independent of gas density. On the contrary, the electron and ion density, n_e and n_i, scale roughly as $\sqrt{n_H}$, as do the attachment rates J_e and J_i of electrons and ions on grains. At high densities the effect of secondary photons on grain charge are therefore expected to be negligible compared to the effects of collisional attachement by electrons and ions.

Our numerical method for the calculation of the charge of dust grains is presented in Appendix C. The same charging processes, as for grains, are applied to PAHs but with constant rates and limited charge numbers -1, 0 or $+1$ (see FPdF03 Sect. 2.1 for further details on PAH charging).

3. Steady-state

3.1. Numerical approach and initial conditions

In our models we adopt typical molecular cloud densities ($n_H = 10^3$–10^6 cm^{-3}), gas temperatures and cosmic-ray ionization rate ($\zeta = 10^{-17}$ s^{-1}). For our standard model we take $n_H = 10^4$ cm^{-3}, $T = 10$ K and no PAHs. The fractional abundances of the elements in the grain cores are taken from Table 1 of FPdF03,

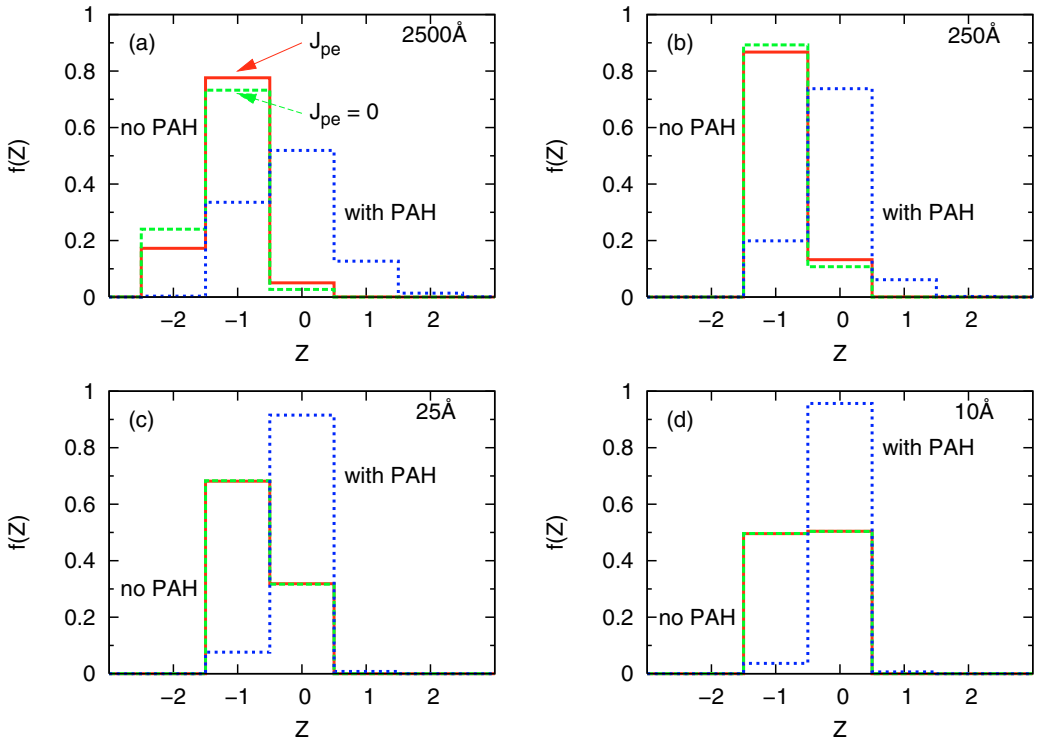


Fig. 2. The grain charge probability, $f(Z)$, as a function of the number of charges, Z, for silicate grains in a molecular cloud characterized by $T = 10$ K, $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3} and $\zeta = 10^{-17}$ s^{-1} (our standard pre-shock conditions). **a)** Charge distribution of a 2500 Å grain (solid line, red), with photodetachment of electrons on grains by secondary photons de-activated (dashed line, green), with a fractional abundance of PAH X(PAH) = 10^{-6} (dotted line, blue); **b)**–**d)** Same as **a)** for 250 Å, 25 Å and 10 Å silicate grains. The charge distribution for carbon grains is almost identical to that for silicate grains.

equivalent to grain cores having 0.60% of gas mass. The abundances of the chemical species in the grain mantles are taken from Table 2 of FPdF03. Icy mantles represent 0.30% of gas mass, so that the dust totals 0.90% of gas mass. The resulting dust size distributions are presented in Fig. 1.

The FPdF03 shock code uses the integrator VODE to solve for the ionization state and chemical composition of the gas at a given temperature and density, with a chemical network including more than 130 chemical species and 900 chemical reactions occurring both in the gas phase and on the grain surfaces[1]. Mantle accretion is de-activated when solving for the steady-state conditions so as to prevent all gas species from accreting onto grains, we thus keep the mantle thickness constant during these integrations. The dust charge distribution for all dust bins is obtained self-consistently and requires integrating some 300 variables. The negative, neutral and positive PAHs ($Z = -1, 0, +1$, respectively) are treated as chemical species. The electron density $n_{\rm e}$ is determined from the local charge neutrality condition

$$n_{\rm e} = n_{\rm i} + n_{\rm PAH^+} - n_{\rm PAH^-} + \sum_k Z_k n_k, \qquad (5)$$

where n_k and Z_k are the density and average charge number of grains in bin k. Appendices A–C present the calculation of n_k and Z_k.

[1] An abbreviated version of the chemical network can be found at `http://massey.dur.ac.uk/drf/protostellar/species_chemistry`

3.2. Results

The grain charge distribution in our standard molecular cloud model is presented in Fig. 2 for four grain sizes. The grain charge, Z, primarly varies between 0 and −1, with the exception of large grains where $Z = -2$ is not negligible. Clearly, limiting grain charges to −1, 0 +1 in quiescent molecular clouds is justified for most of the grains (FPdF03, CRM04). The influence of photodetachment by fluorescent, secondary UV photons is rather weak, unlike previous modelling by FPdF03. Our model, based on the Weingartner & Draine (2001) photoemission yields, gives low and nearly identical yields for neutral grains and grains with $Z = -1$. FPdF03 assumed higher yields, and a yield for the $Z = -1$ grains higher than that for neutral grains (see Sect. 2.2.2 of FPdF03). This shift resulted in a higher proportion of neutral grains in the earlier work.

When a high fractional abundance of PAHs is present in the gas (X(PAH) = 10^{-6}, equivalently 15% of the total carbon) a shortage of electrons ($n_{\rm e} \ll n_{\rm i}$) appears in the gas because the PAHs capture most of the free electrons. The decrease in the number of free electrons affects the balance between ion and electron attachment on grains. The resulting charge carried by the grains is reduced and the average grain charge is not centered around $Z = -1$ but around $Z = 0$.

Table 1 presents the steady-state charge distribution for the assumed pre-shock conditions at densities of 10^4, 10^5 and 10^6 cm^{-3}. In our pre-shock dust size distribution there are no grains with radii <100 Å and so most grains are charged. The neutral grain fraction $n_{\rm g^0}/n_{\rm g}$ is essentially independent of the

cloud density when no PAHs are present (Cols. (1), (6) and (7), $n_{g^0}/n_g \simeq 10\%$) because the grain charge is a function of the ratio n_e/n_i (Draine & Sutin 1987) which remains close to unity in all environments as long as the grains and the PAHs do not carry a significant fraction of the electrons. The presence of a high abundance of PAHs (Col. (4)) leads to a shortage of electrons in the gas ($n_e \ll n_i$), thereby reducing the abundance of negatively charged grains. When the photoemission of electrons by secondary photons is included (Cols. (2) and (4)), the number of negatively charged grains naturally tends to diminish but this effect is far less important than in earlier models (Col. (5) as per FPdF03).

4. Shock waves in dense clouds

4.1. The critical velocity for C shocks, V_{crit}

The value of the magnetosonic speed separating the J and C shock domains, V_{crit}, depends on the intensity of the magnetic field, B, transverse to the direction of propagation of the shock and on the mass density of the particles strongly coupled to the magnetic field:

$$V_{crit} = \frac{B}{\sqrt{4\pi\rho_c}}, \tag{6}$$

where ρ_c is the total mass of the particles (ions, PAHs and dust grains) per cm^3 that are coupled to the magnetic field, i.e.,

$$\rho_c = \rho_i + \rho_{PAH^-} + \rho_{PAH^+} + \rho_d. \tag{7}$$

All the ions and charged PAHs are strongly coupled to the magnetic field but this is not true for all of the dust grains. The method that we use to calculate the mass density of the dust grains, ρ_d, coupled to the magnetic field is given below.

In molecular clouds, the magnetic field intensity scales as

$$B = b\sqrt{n_H}, \tag{8}$$

where B is expressed in μG and n_H in cm^{-3}. The magnetosonic speed is dependent upon the proportionality coefficient b in Eq. (8), which is taken to be 1 in this work. V_{crit} also depends on the mass density of the grains effectively coupled to the magnetic field in the gas ahead of the shock. A high fraction of the dust mass coupled to the magnetic field strongly reduces the value of this critical speed, compared to a model without dust.

Whether a particular size of grain is coupled to the magnetic field or to the neutral gas is determined by the Hall factor, the ratio of the grain drag to grain gyration time-scales, i.e.,

$$\Gamma = \frac{\tau_{drag}}{\tau_{gyr}}. \tag{9}$$

Grains with $\Gamma \gg 1$ are strongly coupled to the ions and grains with $\Gamma \ll 1$ are strongly coupled to the neutrals. Grains with $\Gamma \simeq 1$ are partially coupled to both fluids. The grain gyration time-scale τ_{gyr} is defined as the inverse of the gyrofrequency

$$\tau_{gyr} = \frac{mc}{|q|B}, \tag{10}$$

where m is the grain mass and q is the grain charge. In quiescent molecular clouds where $Z \simeq -1$ (see Fig. 2), $\tau_{gyr} \simeq mc/(eB) \propto a^3$.

The friction or drag time-scale is defined as the time necessary for the grain to collide with a mass of gas equal to its own mass.

$$\tau_{drag} = \frac{m}{\rho_n \sigma \sqrt{(\boldsymbol{V}_n - \boldsymbol{V})^2 + \kappa T_n}}, \qquad \kappa = \frac{128k}{9\pi m_n}. \tag{11}$$

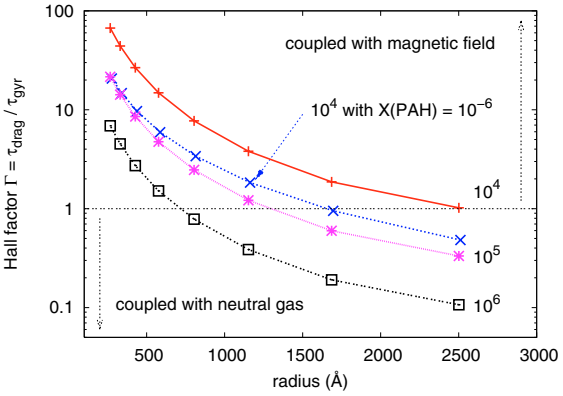


Fig. 3. The Hall factor, $\Gamma = \tau_{drag}/\tau_{gyr}$, as a function of the grain radius for a range of pre-shock densities, with $T = 10$ K and $\zeta = 10^{-17}$ s^{-1}, and with or without PAHs. The grains tend to be less coupled to the magnetic field at high density: the dependency $\Gamma \propto n_H^{-1/2}$ is clear for environments with no PAHs. The presence of PAHs shifts the grain charge toward zero, thus reducing their Hall factor.

where $\boldsymbol{V}_n$ is the velocity of the neutrals and $\boldsymbol{V}$ the velocity of the grains in the shock frame, T_n is the temperature of the neutral gas, ρ_n is the mass density of neutrals, m_n the average mass of neutral chemical species, σ the grain cross-section and κ is taken from Eq. (3.9) of Mc Kee et al. (1987). In the pre-shock gas friction is exerted by the thermal pressure of the gas, we then have $\tau_{drag} \propto a$ and $\Gamma \propto a^{-2}$. Figure 3 shows how the Hall factor depends on the grain radius and the pre-shock conditions. The smaller grains are, as expected, better coupled to the magnetic field than large grains in all environments. Two factors affect the coupling of large grains to the magnetic field. Firstly, the Hall factor depends on the gas density. Large grains are decoupled from the magnetic field at high densities because $\tau_{drag} \propto 1/n_H$ and $\tau_{gyr} \propto 1/B \propto 1/\sqrt{n_H}$ so that $\Gamma \propto 1/\sqrt{n_H}$. Secondly, a high abundance of PAHs (or very small grains) can induce a shortage of free electrons in the gas. The grain charge is diminished by a lack of free electrons leading to a decoupling of the larger grains (see also Fig. 2 and Sect. 3.2).

CRM04 undertook an extensive study of the conditions necessary for the propagation of a shock magnetic precursor. To calculate the magnetosonic speed they suggested adopting the criteria that only grains with $\Gamma \geq 1$ participate in the propagation of magnetosonic waves. We adapt this criteria to our model by choosing a weight function in Γ:

$$\rho_d = \sum_k \frac{\Gamma_k^2}{1+\Gamma_k^2}\rho_k \tag{12}$$

where the sum is over all size bins of mass density ρ_k. This weight function takes the value 0.5 for $\Gamma = 1$, which seems reasonable because grains with $\Gamma = 1$ will be half coupled to the magnetic field and half coupled to the neutral gas.

Table 1 compares the values for the magnetosonic speed, obtained using this method, for the pre-shock environments shown in Fig. 3. We also show the results for FPdF03, where ρ_d was assumed to be the total mass of the charged grains. In FPdF03 the critical speed did not depend on the gas density but was sensitive to the presence of PAHs and secondary photons induced by cosmic-rays. The CRM04 criterium leads to the opposite effect. In this case the critical velocity increases with the gas density, as expected from Fig. 3 where we see an increase in the decoupled grains ($\Gamma < 1$) with increasing density, and is affected to

a lesser extent by the presence of PAHs and secondary photons because of the smooth weight function we use (Eq. (12)). From here on we adopt the CRM04 method for the calculation of magnetosonic speed. The effect of secondary photons on the charge of dust grains only slightly increases the magnetosonic speed and will therefore be neglected in our shock modelling.

4.2. Shock modelling

The model of Flower & Pineau des Forêts (2003) is specifically designed to study steady-state, transverse C and J shocks in dense or diffuse media. In a self-consistent way this code integrates numerous parameters, including: the velocity, temperature and density of the three magnetohydrodynamic (MHD) fluids (ions, electrons and neutral gas), the H_2 level population and the abundances of a set of chemical species. This approach includes the presence of grains modelled by an MRN distribution and PAHs. Their charge state (limited to -1, 0, 1) is calculated. The charged grains are assumed to be coupled to the ions and the neutral grains to the neutral gas. The transfer of momentum and energy between gas and grains are taken into account in this approach. The form of the conservation equations can be found in Draine (1980).

In this work we have focused our attention on the detailed dust physics: grain charging and 2-D grain dynamics (size-dependent velocity profiles) for an MRN distribution modelled by size bins. The source terms in the conservation equations (e.g. momentum and energy equations) have now been updated to allow for the inclusion of grain charge, size and velocity calculated for each grain size bin. See Appendix D for a comparaison of our work with the earlier approach (FPdF03).

We assume steady-state, plane-parallel shocks ($\partial/\partial t = \partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$) with velocity V_s. As per FPdF03 the shock profiles are calculated in 1-D along z for the fluids. We assume that the electrons and ions have distinct temperatures but the same velocity. Figure 4 shows the velocity and temperature profile for a 20 km s^{-1} C shock (pre-shock conditions: $T = 10$ K, $n_H = 10^4$ cm^{-3}, $B = 100$ μG and $\zeta = 10^{-17}$ s^{-1}). The neutral velocity, V_n, and the ion velocity, V_i are presented in the shock frame. The shock length is approximately 0.06 pc at a flow time of 3×10^4 yr.

The magnetic field lines remain transverse (i.e., along the x axis) to the shock propagation direction (z axis). Making the usual assumption that the magnetic field lines are frozen into the ion fluid, we find that the magnetic field intensity, $\boldsymbol{B}(z)$, follows the ion compression

$$\boldsymbol{B}(z) = B_0 \frac{V_s}{V_i(z)} \boldsymbol{e}_x, \tag{13}$$

and that the electric field has a uniform component E_y parallel to the shock front along the y axis and a variable component E_z in the shock direction:

$$\boldsymbol{E} = -\frac{B_0 V_s}{c} \boldsymbol{e}_y + E_z \boldsymbol{e}_z. \tag{14}$$

The existence of a local electric charge and the subsequent electric field E_z in the shock direction is neglected in our results but is discussed in Sect. 5.1 in the context of high density clouds.

The electric current in the z direction is zero everywhere in the shock because of the conservation of charge, i.e.,

$$(n_i + n_{PAH^+} - n_e - n_{PAH^-})\, V_i + \sum_k Z_k \frac{f_k}{\tilde{m}_k} = 0, \tag{15}$$

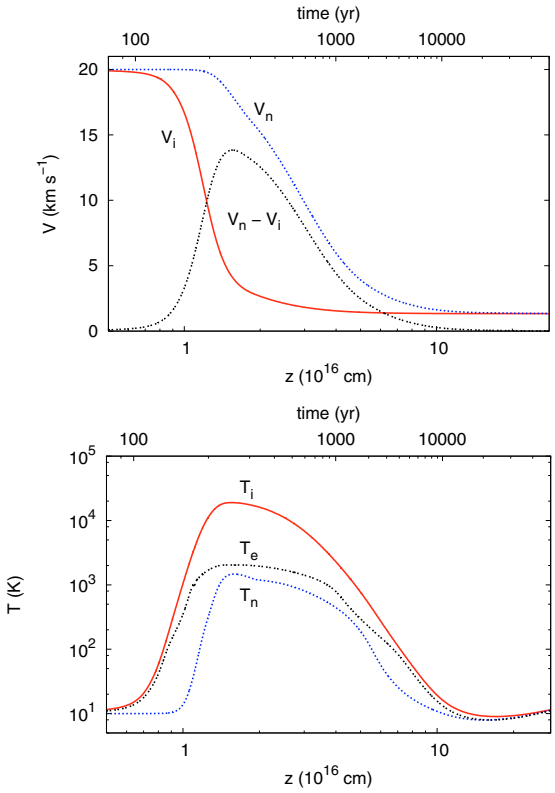


Fig. 4. Velocity and temperature profiles for a 20 km s^{-1} C shock propagating through our standard pre-shock conditions ($T = 10$ K, $n_H = 10^4$ cm^{-3}, $B = 100$ μG and $\zeta = 10^{-17}$ s^{-1}). The shock ends approximately at 3×10^4 yrs which corresponds to a shock length of $\simeq$0.06 pc. The upper axis indicates the neutral gas flow time $t_n = \int dz/V_n$.

where Z_k is the average grain charge number, $\tilde{m}_k$ the average grain core mass and f_k the total grain core mass flux (Eq. (25)), in the k^{th} bin. Appendices A and C present our general method for the calculation of these terms, adapted to our future work involving dust processing. In the present work, where dust processing is ignored, f_k and $\tilde{m}_k$ are constant througout the shock.

From Eq. (15), we calculate the electron density

$$n_e = n_i + n_{PAH^+} - n_{PAH^-} + \frac{1}{V_i} \sum_k Z_k \frac{f_k}{\tilde{m}_k}. \tag{16}$$

4.3. Dust dynamics in C shocks

We propose a new multi-fluid approach to the dynamics of grains in steady-state shocks which allows us to study dust processing in shocks. Dust grains are not treated like MHD fluids but as test particles in the framework of a 3-fluid shock code (FPdF03). We integrate the dust charge distribution and include it in the calculation of the ionization balance. We adopt the Slavin et al. (2004) approach to dust dynamics to study the 2-D dynamics of grains as a function of size, giving particular attention to the gyration of grains around magnetic field lines and to grain decoupling from the magnetic field as induced by a shortage of electrons. The feedback from grain dynamics into the shock structure is included through the friction between the gas and grains.

Grain dynamical processes are primarly driven by a competition between the Lorentz force and the friction force exerted by

the neutral gas but are also affected by grain charge fluctuations (Ciolek & Mouschovias 1993) and grain inertia.

4.3.1. Impact of charge fluctuations on the dust dynamics

Neutral grains can exist anywhere in a shock because of charge fluctuations. The lifetime of neutral grains of a given size, τ_0, is defined as the average time a grain remains neutral before an electron, ion or negative PAH attaches to it.

$$\tau_0 = \left(J_\mathrm{e}\left(Z=0\right) + J_\mathrm{i}\left(Z=0\right) + J_{\mathrm{PAH}^-}\left(Z=0\right)\right)^{-1}. \tag{17}$$

If, for the simplicity of the analysis, we neglect the Coulomb effect on the attachment cross-section, we have $\tau_0 \propto a^{-2}$, i.e., smaller neutral grains tend to have longer lifetimes. When compared to the friction time-scale, τ_drag, the lifetime of neutral grains is an indication of the impact of charge fluctuations on the dynamics for a given size of grain. If $\tau_0 \ll \tau_\mathrm{drag}$ charge fluctuations do not lead to a decoupling of neutral and charged grains of the same size. In this case, we can ignore charge fluctuations and consider that all grains carry an average charge. If $\tau_0 \gtrsim \tau_\mathrm{drag}$, as is the case for very small grains in shocks, neutral and charged grains of the same size must be considered as separate fluids (Ciolek & Mouschovias 1993). See Sect. 5.2 for a detailed discussion of this case and the modelling of very small grain dynamics based on the work by Ciolek & Mouschovias (1993). For grains with $a > 100$ Å the charge fluctuations are too fast to have any important effect on the dust dynamics and can therefore be ignored.

4.3.2. Transient gyration of grains around magnetic field lines

In transverse shocks dust grains follow trajectories in the yz plane perpendicular to the magnetic field. Due to their large inertia, large grains dot not follow the motion of the ions in the precursor. Rather, they are launched with a velocity equal to that of the shock in the shock frame, and begin gyrating around the magnetic field lines (e.g. Slavin et al. 2004). This gyration phase, though short, can not be neglected in the study of dust processing as it results in high relative velocities between the grains which favour dust shattering. The grain gyration damping time-scale, τ_damp, defined as the average duration of the grain gyration phase, represents the time-scale for the transient grain dynamics before the grains behave as a fluid. It is equal to a few times the friction time-scale: $\tau_\mathrm{damp} \propto a$. Small grains tend to undergo negligible gyration in dense clouds, while the gyration phase of larger grains can not be ignored in the study of dynamics for processing.

Although the integration of the neutral and ion velocities in our code is 1-D, we integrate the trajectories of the grains throughout the shock, considering that the shock is infinite in the direction parallel to the shock front (Slavin et al. 2004). In the shock the grains undergo the Lorentz force and the friction force exerted by the neutrals. Applying the law of motion for a grain in a given bin k, the differential equation for the grain velocity in the shock frame is

$$m_k \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{V}_k}{\mathrm{d}t} = Z_k e \left(\boldsymbol{E} + \frac{\boldsymbol{V}_k \times \boldsymbol{B}}{c}\right) + h\left(\boldsymbol{V}_k\right)\left(\boldsymbol{V}_\mathrm{n} - \boldsymbol{V}_k\right), \tag{18}$$

$$h\left(\boldsymbol{V}_k\right) = \rho_\mathrm{n}\,\sigma_k \sqrt{\left(\boldsymbol{V}_\mathrm{n} - \boldsymbol{V}_k\right)^2 + \kappa T_\mathrm{n}}, \tag{19}$$

where $\boldsymbol{V}_\mathrm{n}$ is the velocity of neutrals and $\boldsymbol{V}_k$ the velocity of grains in the k^th bin in the shock frame, ρ_n is the mass density of the neutrals, σ_k the grain cross-section and κ is defined in Eq. (11). The integration of the dust dynamics, like all the other variables characterizing the shock structure, is performed as a function of the position z within the shock and not as a function of the time t:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{V}_k}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_{kz}} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{V}_k}{\mathrm{d}t}. \tag{20}$$

Equation (20) is not defined when V_{kz} pass through zero, i.e. when grains sometimes move back towards the preshock gas because of their high gyration velocity. In all the figures for C shocks presented in this article this does not happen because the shock velocity is low enough or the gas friction high enough. If many grains do have negative V_{kz} velocities during a significant time one must integrate the gyration velocity in polar coordinates (see Appendix C). If only a few grains have $V_{kz} < 0$ in a limited part of the precursor region then forcing V_{kz} in Eq. (20) to remain positive makes the integration possible in cartesian coordinates without significantly affecting the real dynamics.

4.3.3. Fluid velocity of dust grains

Once gyration has disappeared the grains reach a velocity that is independent of the history of their dynamics and that depends only on the grain physical properties and the local shock conditions. Equation (6) of Wardle (1998) defines the general expression for this fluid velocity of the grains in C shocks. In our model the magnetic field is $\boldsymbol{B} = B_x \boldsymbol{e}_x$ while the electric field $\boldsymbol{E}$ has no component E_x along $\boldsymbol{e}_x$. Adapting this equation to our context we find:

$$\boldsymbol{V}_{k,\mathrm{fluid}} = \boldsymbol{V}_\mathrm{i} + \frac{1}{1+\Gamma_k^2}\left(\boldsymbol{V}_\mathrm{n} - \boldsymbol{V}_\mathrm{i}\right) + \frac{\Gamma_k}{1+\Gamma_k^2}\left(\boldsymbol{V}_\mathrm{n} - \boldsymbol{V}_\mathrm{i}\right) \times \boldsymbol{e}_x. \tag{21}$$

The grain Hall factor Γ_k is the solution to Eq. (70) from Chapman & Wardle (2006) that we adapt to our context to obtain the following quadatric equation in Γ_k^2 (the sign of Γ_k is the sign of the grain charge number Z_k):

$$\Gamma_k^4 \left(\left(\boldsymbol{V}_\mathrm{n} - \boldsymbol{V}_\mathrm{i}\right)^2 + \kappa T_\mathrm{n}\right) + \Gamma_k^2 \left(\kappa T_\mathrm{n} - \Delta V_{\Gamma_k=1}^2\right) - \Delta V_{\Gamma_k=1}^2 = 0, \tag{22}$$

where κ is defined in Eq. (11) and $\Delta V_{\Gamma_\mathrm{k}=1}$ is the effective gas-grain relative velocity for $\Gamma_k = 1$:

$$\Delta V_{\Gamma_\mathrm{k}=1} = \frac{Z_k e B / c}{\rho_\mathrm{n} \sigma_k}. \tag{23}$$

Note that the instantaneous grain velocity $\boldsymbol{V}_k$ is not the same as the velocity of the guiding centre for grain gyration, $\langle \boldsymbol{V}_k \rangle$, which is approximately equal to the grain fluid velocity $\boldsymbol{V}_{k,\mathrm{fluid}}$.

$$\langle \boldsymbol{V}_k \rangle \simeq \boldsymbol{V}_{k,\mathrm{fluid}}. \tag{24}$$

The velocity of the guiding centre, $\langle \boldsymbol{V}_k \rangle$, is used to calculate the grain core mass density ρ_k from the total grain core mass flux, f_k:

$$f_k = \rho_k \langle V_{kz} \rangle. \tag{25}$$

From ρ_k we are then able to calculate the corresponding number density n_k of grains (Eq. (A.13)).

4.3.4. Results

Figure 5 shows the resulting profiles for the grain velocities in a C shock propagating through our standard pre-shock conditions ($T = 10$ K, $n_\mathrm{H} = 10^4$ cm^{-3}, $B = 100\,\mu$G, $\zeta = 10^{-17}$ s^{-1} and no

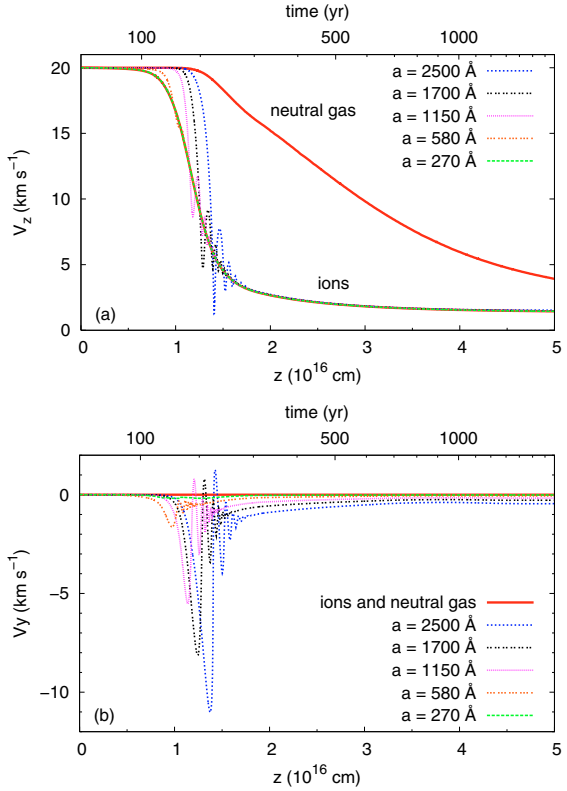


Fig. 5. a) Velocity profile, in the shock propagation direction, for various size grains for our standard shock model (see the Fig. 4 caption for details). **b)** Same as for **a)** but for the grain velocity component parallel to the shock front.

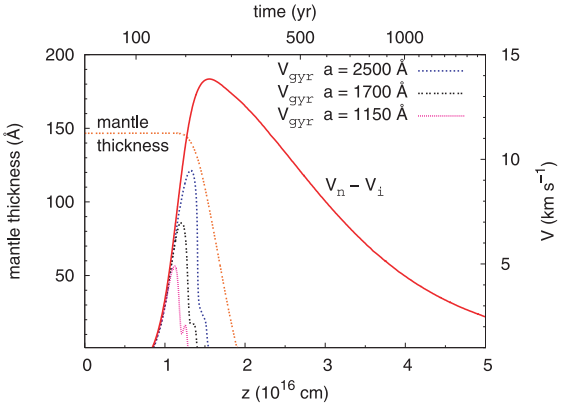


Fig. 6. Evolution of the ice mantle thickness (left axis, Å) for our standard C shock compared with the evolution of grain gyration velocity and the ambipolar diffusion velocity (right axis, km s^{-1}). Note that the gyration phase is over before ice mantles have been completely eroded. This is even more stringent for small grains which are the most affected by the presence of mantles (see Fig. 1).

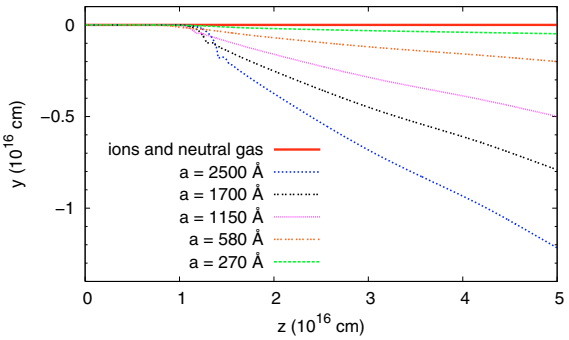


Fig. 7. The grain trajectories in the shock reference frame for our standard pre-shock conditions. The grain drift in the direction parallel to the shock propagation direction due to gas drag means that large grains cover a distance which is significant compared to the shock length.

PAHs). The shock length is approximately 0.06 pc, corresponding to a flow time of 3×10^4 yr. In shocked molecular clouds the grain gyration phase is short with respect to the shock length because of the strong drag. During their gyration grains collide with each other at high relative velocities (of the order of the shock velocity). This phase will favour shattering in grain-grain collisions. This process modifies the dust size distribution, by increasing the number of small grains, and could be an important feedback mechanism onto the shock structure, this feedback will be examined in detail in a following paper. Once the grain gyration has been damped, which happens in the early part of the precursor for the smallest grains of our dust size distribution, the grains remain coupled to the ions in the propagation direction of the shock (Fig. 5a) but not perpendicular to this direction (Fig. 5b) where a differential drift velocity remains throughout the shock. This differential drift velocity is induced by the gas drag in the presence of a magnetic field and is proportional to the grain radius for grains tightly coupled to the magnetic field (i.e. for $\Gamma \gg 1$). For our standard shock the differential velocity is less than 1 km s^{-1} in the shock tail. Such conditions should favour the coagulation of grains at these low relative grain-grain velocities (e.g. Chokshi et al. 1993; Poppe & Blum 1997). This would only occur if the shock is old enough to have reached steady-state, for ages greater than the flow time of the steady-state C shock model (Chièze et al. 1998).

Figure 6 compares the time-scales for mantle erosion and for the damping of the grain gyration for our standard C shock model. The icy mantle is significantly eroded only after $t = 400$ yrs, i.e. after the end of the grain gyration phase. The gyration damping time-scale and that for mantle erosion both scale as $1/n_{\rm H}$ and this should also be valid even at higher densities. This therefore justifies our inclusion of grain mantles in the study of the gyration phase in C shocks.

The trajectory followed by dust grains (Fig. 7) in the shock reference frame is highly dependent on the grain radius. The drift velocity induced by gas drag is responsible for the motion of the grains parallel to the shock front, on length-scales comparable to the shock length. Our hypothesis of a homogenous shock front over such large scales may therefore be questionable. Grain gyration hardly appears in the trajectory because it does not last long and because it is dominated by the drift motion in the y and z direction.

Figure 8 presents the grain charge profile for our standard shock. The grain charge is basically proportional to the electron temperature and to the grain radius. The small variations are due to the grain gyration around the magnetic field lines which changes the ratio of the ion to electron attachment rates. Once the gyration has been damped the charge profile becomes smooth. The chemical evolution of the gas can also affect the grain charge (e.g. the abrupt changes in the grain charge at $z \simeq 1.2 \times 10^{16}$ cm in Fig. 8). Figure 9 shows that grain charging, for our standard

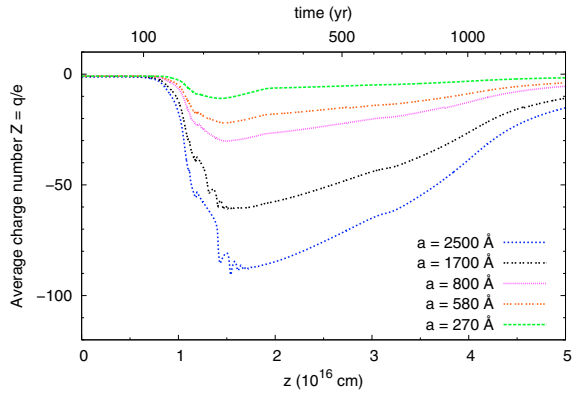


Fig. 8. The evolution of the number of charges per grain, Z, through our standard shock. The grain charge is approximately proportional to the electron temperature and the grain radius. The small variations are due to the grain gyration or abrupt changes in the chemical composition of the ions.

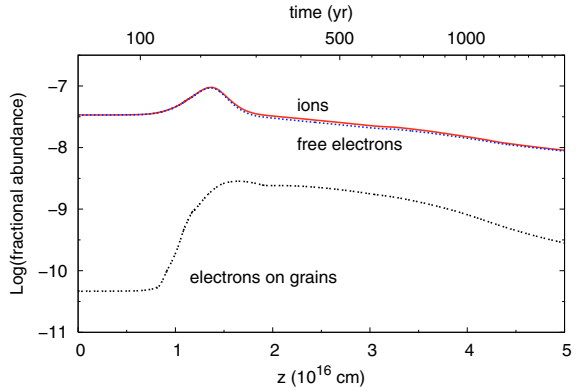


Fig. 9. The fractional abundance of free electrons, ions and electrons on grains in our standard shock. At this density ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}) the grains carry a negligible fraction of the free electrons.

shock model, does not have much impact on the density of the free electrons.

Figures 10a,b show how the grain dynamics is significantly modified at high density ($n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}). Here the gas drag is much higher, than for the lower density case, and this affects both the damping of the grain gyration ($\tau_{\rm damp} \propto 1/n_{\rm H}$) and the degree of grain coupling to the magnetic field ($\Gamma \propto 1/\sqrt{n_{\rm H}}$). Large grains do not even have the time to complete a single gyration before they follow a fluid. The grains remain decoupled from the magnetic field throughout the shock in both the y and the z directions.This is the kind of dynamic obtained by Chapman & Wardle (2006) in the first multi-fluid study of dust dynamics in shocks in dense clouds. MHD models of dust dynamics ignoring grain inertia (e.g. Pilipp et al. 1990; Wardle 1998) are suitable for shocks in high density clouds where the grains can be considered as inertia-free. As shown in Fig. 10c, the ionization balance in the shock is significantly affected by the dust charging (e.g. Pilipp et al. 1990). A shortage of electrons appears in the precursor and the grains can not be charged to the expected level, thus increasing the decoupling of the grains from the magnetic field. Our assumption of local electro-neutrality is no longer valid at these high densities where the negatively charged grains are moving much faster than the ions and create

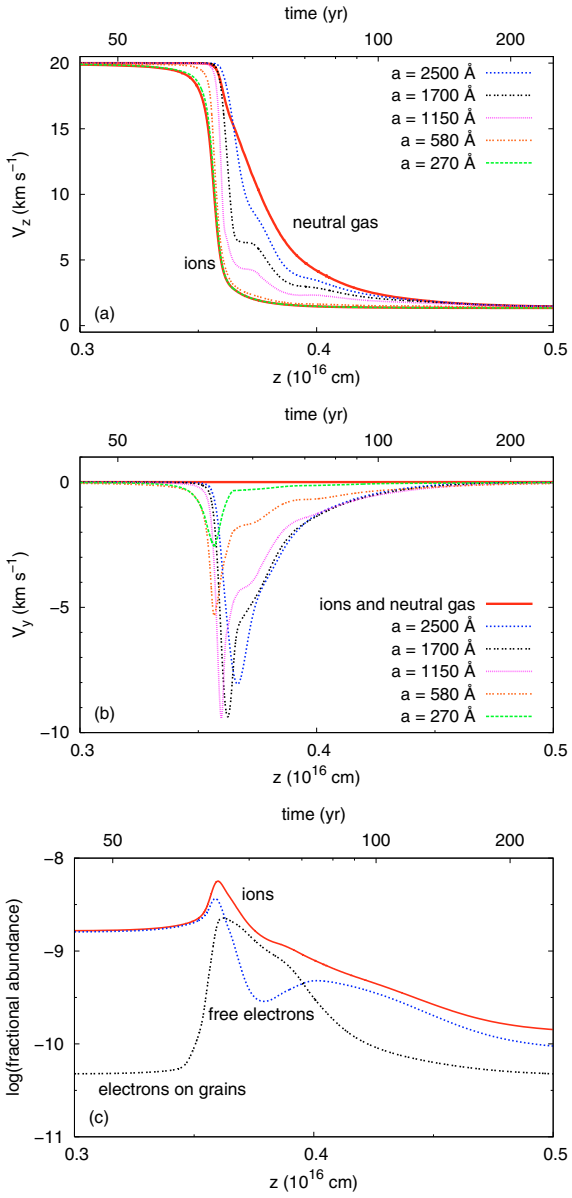


Fig. 10. a) and **b)** as for Fig. 5 but with a preshock proton density $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}. The grain gyration is damped by the gas drag almost immediately because of the high gas density. The large grains remain decoupled from magnetic field throughout the shock because of the large gas drag. **c)** Evolution of the fractional abundance of electrons and ions in the gas, and electrons on grains. This is similar to the result obtained by Pilipp et al. (1990). The drop in the free electron abundance in the shock further increases the decoupling of large grains.

a local positive charge. This issue is discussed in Sect. 5.1 where we present, following Pilipp et al. (1990), how we introduce into the dust dynamics the effect of an electric field E_z in the direction of propagation of the shock that is generated by the local electric charge.

When we add PAHs to our standard model their presence can affect the ionization state in the shock as it does in the preshock gas (see Table 1). In our model the neutral PAHs are coupled to the neutral gas, the PAH cations to the ion fluid and the

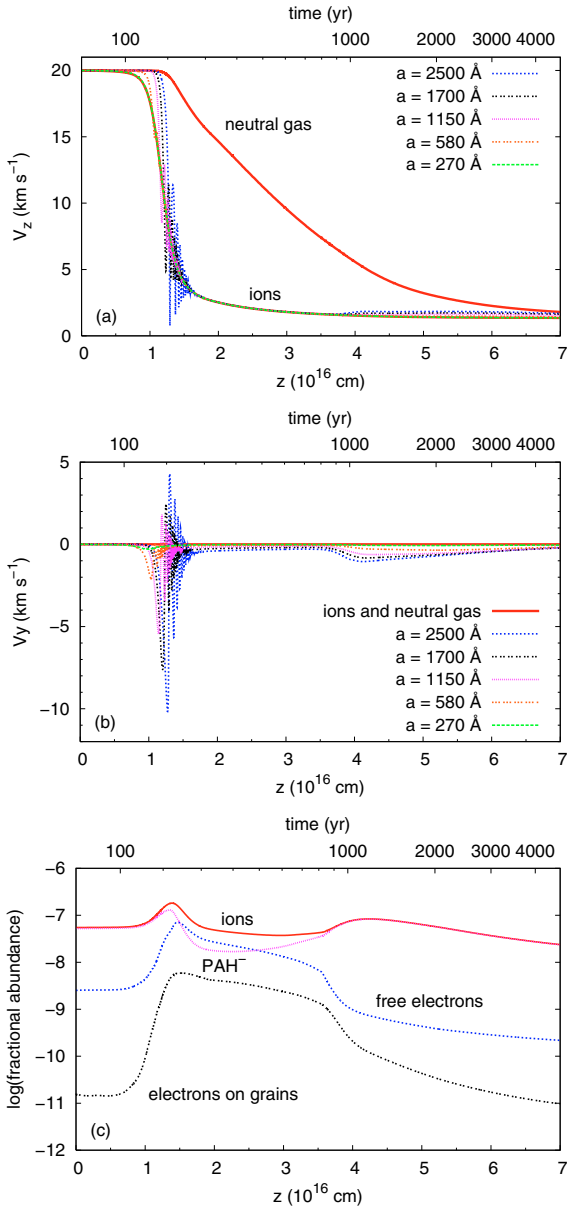


Fig. 11. As for Fig. 5 but with a PAH fractional abundance of $X(\mathrm{PAH}) = 10^{-6}$ in the preshock gas. At $t \simeq 900$ yrs the electron abundance suddenly drops because of electron attachment onto PAHs. The shortage of free electrons then reduces the absolute charge carried by the grains and leads to the decoupling of the large grains from the magnetic field.

PAH anions to the electron fluid. Figures 11a,b presents the resulting grain velocity profile with a PAH fractional abundance of 10^{-6} added to our standard model. When comparing this figure with Fig. 5 we see that, at $t \simeq 900$ yrs, the grains become decoupled from the magnetic field because of the loss of electrons from the gas, which is induced by the charging of PAHs in the shock tail (see Fig. 11c). In that part of the shock where the ambipolar diffusion is important, the negatively charged PAHs that follow the ion motion disappear because of electron detachment by energetic neutral species. In the shock tail, once the effect of ambipolar diffusion is small enough, the charged PAHs can no longer yield their attached electrons by collisions with the neutrals. This generates a shortage of free electrons in the gas and forces the grain charge towards zero. This loss of charge allows the frictional drag to decouple grains from the magnetic field. This effect is, however, small because negatively charged PAHs can also recombine with the grains. As the grains decouple their relative velocity with PAH^- increases and so the rate of attachment of PAH^- onto grains increases. This tends to compensate for the shortage of electrons so that the grains do not completely decouple from the magnetic field. Under these conditions, of weak grains coupling to the magnetic field, the coagulation of grains is favoured because the relative velocities between grains is of the order of 1 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Without the recombination of negatively charged PAHs on grains, large grains would decouple from the magnetic field and acquire large velocities. In this case grain shattering, and not grain coagulation, would be favoured.

4.4. Dust dynamics in J shocks

The J shock structure is calculated according to Flower et al. (2003). In J shocks the velocity of the guiding centre for grain gyration is at any time equal to $\boldsymbol{V}_{k,\mathrm{fluid}} = \boldsymbol{V}_\mathrm{i} = \boldsymbol{V}_\mathrm{n}$. As per JTH96 we integrate the gyration velocity V_gyr of the grains around the magnetic field lines.

When the magnetic field gradient is small enough, i.e. once the shock front is passed, the betatron effect accelerates the gyration of grains (Spitzer 1976). However, this effect is weak in dense clouds because of the large gas drag encountered (Draine et al. 1983): all the energy given by the magnetic field to the grains is taken almost immediatly by the gas through friction. We can therefore neglect betatron acceleration.

We use polar coordinates (θ, V_gyr) to integrate the gyration velocity of a grain of a given size through the shock (see Appendix C).

$$\boldsymbol{V} = V_\mathrm{gyr}\sin\theta\,\boldsymbol{e}_y + \left(V_\mathrm{i} + V_\mathrm{gyr}\cos\theta\right)\boldsymbol{e}_z, \tag{26}$$

$$\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{gyr}}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_\mathrm{i}}\left(-\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}t}\cos\theta - \frac{\rho_\mathrm{n}\sigma}{m}V_\mathrm{gyr}\sqrt{V_\mathrm{gyr}^2 + \kappa T_\mathrm{n}}\right), \tag{27}$$

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_\mathrm{i}}\left(\frac{ZeB}{mc} + \frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}t}\frac{\sin\theta}{V_\mathrm{gyr}}\right), \tag{28}$$

where $\mathrm{d}V_\mathrm{i}/\mathrm{d}t$ is the grain inertia when integrating in polar coordinates, the right hand term in Eq. (27) expresses the effect of the gas drag and $ZeB/(mc)$ is the gyrofrequency. We note that $\theta < 0$ as grains are negatively charged in these environments.

Figure 12a presents the gas velocity and temperature profiles for a J shock propagating at a velocity of 30 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ through our standard pre-shock conditions ($T = 10$ K, $n_\mathrm{H} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$, $B = 100$ μG and $\zeta = 10^{-17}$ $\mathrm{s^{-1}}$). The shock velocity, which is higher than the critical velocity for these pre-shock conditions (see Table 1), leads to the formation of a J shock. The evolution of the grain velocity in the shock direction (Fig. 12b) shows that grains only complete a few gyrations before being brought to rest with respect to the gas. The profile for the gyration velocity through the shock is very similar to that obtained by JTH96 for J shocks in the Warm Intercloud Medium, though its duration is much shorter due to the higher densities considered here.

5. Discussion of some specifics

Here we study in more detail two effects that are known to affect dust dynamics and that could have important consequences

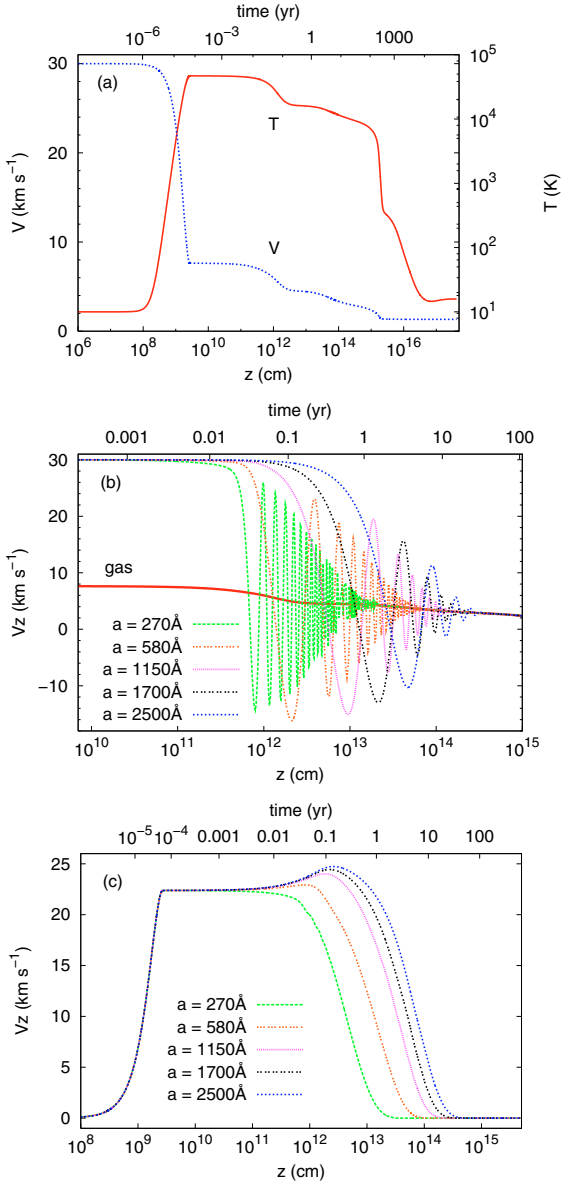


Fig. 12. a) The gas velocity and temperature profile for a J shock passing through our standard pre-shock conditions with a velocity of 30 km s^{-1}. **b)** The grain velocity profile in the shock propagation direction. The shock front is not shown in this figure. **c)** The evolution of the grain gyration velocity (the absolute velocity of the grains relative to the ions). The damping of the grain gyration is caused by gas drag. The smaller grain gyrations are the first to be damped.

for our future study of dust processing in C shocks. Firstly, electric forces can modify the grain dynamics by forcing charged grains to remain coupled to the magnetic field. This was studied either by introducing an electric field in the shock propagation direction (Pilipp et al. 1990; Pilipp & Hartquist 1994; Wardle 1998; Chapman & Wardle 2006) or by modelling the electrostatic forces exerted between negatively charged grains and ions (Ciolek & Mouschovias 1993). Secondly, since the early studies of dust coupling in the context of ambipolar diffusion in pre-stellar cores (Elmegreen 1979; Nakano & Umebayashi 1980), grain charge fluctuations are known in some cases to decouple the neutral grains from the charged grains. This effect is not important for large grains in molecular clouds but is important for the very small grains. Within this perspective we verify and adapt the study of Ciolek & Mouschovias (1993) to our purposes.

5.1. An electric field in the shock direction and grain coupling

In the framework of ambipolar diffusion in pre-stellar cores, Elmegreen (1979) suggested that grains with a Hall factor $\Gamma \ll 1$ could still remain coupled to the magnetic field because of the electric forces exerted by ions on the negatively charged grains. Ciolek & Mouschovias (1993) further developped this idea. Pilipp et al. (1990), inspired by earlier studies on ambipolar diffusion (Nakano & Umebayashi 1980), studied the role of an electric field E_z in the direction of propagation of the shock in the modelling of C shocks at high densities.

The role of electrical forces in the coupling of grains to the magnetic field is potentially important in the study of dust processing if it can affect the dynamics of large grains that contain the major part of dust mass. If the large grains can decouple from the magnetic field they will undergo strong shattering by collisions with the grains that remain coupled to the ions. However, if the large grains remain coupled to the magnetic field, because of electric forces, then the shattering and/or vaporization will be severely limited and coagulation will tend to be favoured.

As per Pilipp et al. (1990), we model the action of the electric forces through the existence of an electric field E_z in the shock propagation direction. In the shock grains move, on the average, somewhat faster than the ions, electrons and charged PAHs because of gas drag and they create a local electric charge $\rho_{\rm elec}$

$$\rho_{\rm elec} = e\left(n_{\rm i} + n_{\rm PAH+} - n_{\rm PAH-} - n_{\rm e} + \sum_k Z_k n_k\right), \tag{29}$$

where Z_k and n_k are the average number of charges carried per grain and the density of grain density in bin k, respectively.

Using the conservation of the charge flux through the shock (Eq. (15)), and Eqs. (25) and (A.13), we find an expression for the local charge density as a function of the dust properties alone:

$$\rho_{\rm elec} = e\sum_k Z_k n_k \left(1 - \frac{\langle V_{kz}\rangle}{V_{\rm i}}\right). \tag{30}$$

If the grains are strongly coupled to the magnetic field, as in our standard shock model, the velocity in the shock direction of the guiding centre for grain gyration, $\langle V_{kz}\rangle$, is approximately equal to the ion velocity, $V_{\rm i}$. In this case it is reasonable to assume $\rho_{\rm elec} = 0$, as we have. However, this approximation is not valid for shocks propagating through a high density medium (see Fig. 10) because the large grains are decoupled from the magnetic field and thus create an important local electric charge. The local charge $\rho_{\rm elec}$ is responsible for an electric field E_z in the direction of propagation of the shock, which can be directly integrated through the Maxwell-Gauss law:

$$\frac{{\rm d}E_z}{{\rm d}z} = 4\pi\rho_{\rm elec}. \tag{31}$$

In the shock reference frame, the electric field therefore has two components. One uniform component E_y and one variable component E_z induced by the local electric charge density $\rho_{\rm elec}$. The following equation must therefore replace Eq. (14):

$$\boldsymbol{E}(z) = -\frac{B_0 V_{\rm s}}{c}\,\boldsymbol{e}_y + \int 4\pi\rho_{\rm elec}\,{\rm d}z\,\boldsymbol{e}_z. \tag{32}$$

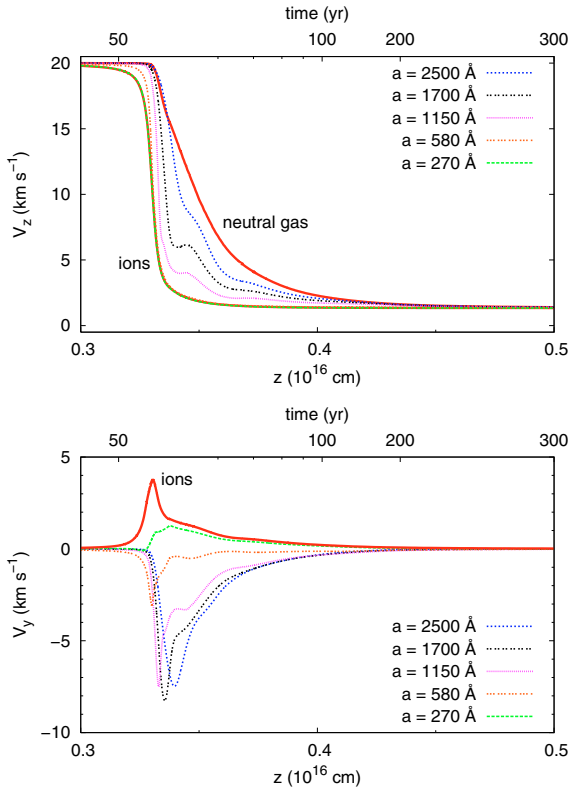


Fig. 13. The velocity profiles for the same shock as in Fig. 10 but with the existence of an electric field E_z in the shock direction taken into account. The ions are now decoupled from the gas in the direction parallel to the shock front. The grain velocities along $\boldsymbol{e}_y$ are shifted with respect to Fig. 10 but the relative velocities between the grains are not significantly affected.

Equation (21) for the fluid velocity of the grains remains valid if we generalise the expression for the electric drift velocity $\boldsymbol{V}_\mathrm{i}$ common to ions, electrons and charged PAHs:

$$\boldsymbol{V}_\mathrm{i} = c\frac{\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}}{B^2}\cdot \tag{33}$$

Figure 13 shows how the presence of an electric field E_z can affect the dust dynamics, as compared with Fig. 10 where local charge neutrality was assumed for the same shock and pre-shock conditions. The velocity profile along the z axis is little changed. The ions are decoupled from the gas, in the direction parallel to the shock, and move with an electric drift velocity cE_z/B. Note that the shock length is not modified. The grain velocity profile in the direction parallel to the shock front has been shifted by $\sim cE_z/B$ in the same manner. We can see that the electric field E_z is not able to recouple the larger grains to the magnetic field. This is a consequence of our modelling with an MRN distribution which includes numerous small grains which carry the major part of the electric charge of the grains. A small change in their velocity V_z, induced by a small electric field E_z, is enough to recover the local charge neutrality without affecting the dynamics of the large grains very much. This question remains open for other dust size distributions that do not present an overabundance of very small grains.

The electric field E_z sensitively affects the grain velocities in the shock frame but has little effect on the relative velocities between the grains. With our multi-fluid approach there is little difference in the relative velocities between the grains when we compare our models with and without E_z. Our results for dust processing in C shocks should therefore not be very sensitive to the inclusion of an electric field E_z, unless it can affect the structure of the shock itself, which is not the case within the framework of our 3-fluid model for transverse shocks. See Appendix D for a discussion of the influence of dust dynamics on shock structure in our model. We can therefore neglect the electric field E_z in our modelling of the dust processing in transverse C shocks.

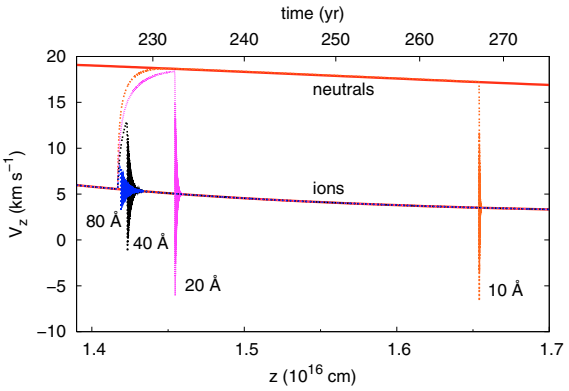


Fig. 14. The dynamics of four small charged test grains (10, 20, 40 and 80 Å) in our standard shock (see Fig. 5 for the characteristics of this shock). The grains are assumed to suddenly become neutral at a flow time ≃226 yrs. The grain velocity V_z in the shock direction is shown as a function of the position z in shock and is calculated by integrating the law of motion (18).

5.2. A study of the small grain dynamics through the shock

Grains smaller than 100 Å do not exist in our MRN pre-shock grain core distribution but will be produced in great numbers by the shattering of the large grains during their gyration phase. The fragments can in turn shatter or craterize other grains. They also increase the total dust cross-section but their contribution to the gas-grain friction is dependent on their degree of coupling to the magnetic field. Their dynamics must therefore be investigated because it is expected that small grain dynamics will be different from the dynamics of large grains due to their low inertia and their small cross-section. Whereas charge fluctuations do not have a major impact on the dynamics of the large grains, the influence of charge fluctuations on the dynamics of small grains can not be ignored (Ciolek & Mouschovias 1993).

As an example, we study the dynamics of small test grains in our standard shock (see Fig. 4 for the characteristics of the shock and the pre-shock gas). As presented in Fig. 14, four small test grains (with radii of 10, 20, 40 and 80 Å) of charge $Z = -1$ are assumed to suddenly become neutral at the same position in the shock (corresponding to a flow time $t \simeq 226$ yrs) by recombination with an ion. Up until that point they are assumed to be strongly coupled to the magnetic field and to follow the ion motion. Once neutralized, we force these grains to stay neutral for a time that we take to be their neutral phase lifetime τ_0 at this point, as calculated by Eq. (17). Figure 14 presents the evolution of the instantaneous velocity, V_z, of grains in the shock direction, as calculated by the integration of the law of motion given by Eq. (18). Once neutralized, at $t \simeq 226$ yrs, a 10 Å grain

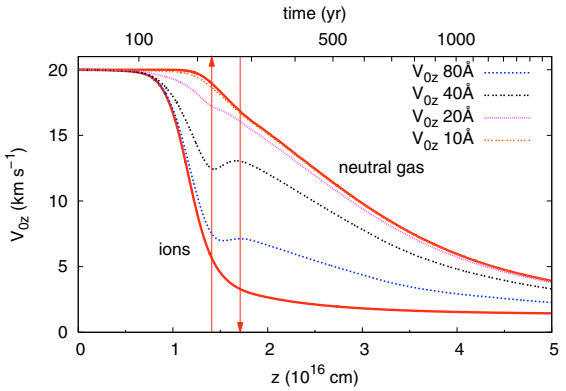


Fig. 15. The average velocity V_{0z} of neutral grains in the shock propagation direction, as given by Eq. (15) and adapted from Eq. (44) of Ciolek & Mouschovias (1993). The two vertical arrows delimit the domain of the shock presented in Fig. 14. The average velocity V_{0z} is in good agreement with the integrated velocity of the grains V_z during their neutral phase presented in Fig. 14.

decouples from the magnetic field and quickly couples to the neutral fluid and then follows the motion of the neutrals for almost 40 years. At $t \simeq 267$ years it becomes negatively charged by electron or ion attachment and starts to gyrate around magnetic field lines. The gyration is damped almost immediately by gas drag because of the small grain inertia. The situation is very different for a larger grain. A very short time ($\simeq$1 yr) after its neutralization, at $t \simeq 226$ yrs, a 80 Å grain becomes charged again. During its neutral phase this large grain does not have enough time to couple to the neutral fluid. Nevertheless, it has acquired via gas drag a small velocity that is now turned into a gyration velocity. It takes a few years for the gas to damp this gyration because of the greater inertia of this large grain. The dynamics of very small neutral grains are therefore decoupled from the dynamics of very small charged grains which follow the ions.

If we neglect the damping of the gyration at the end of the neutral phase of each grain, which is truly negligible only for very small grains, the dynamics of each size of small grain can be modelled using two fluids, one for charged grains and one for neutral grains. Adopting Ciolek & Mouschovias Eq. (44) for the fluid velocity of the neutral grains, we combine the accelerated motion of the small neutral grains, as shown in Fig. 14, into a uniform motion of grains with an average velocity

$$\boldsymbol{V}_0 = \frac{\tau_0}{\tau_0 + \tau_{\rm drag}} \boldsymbol{V}_{\rm n} + \frac{\tau_{\rm drag}}{\tau_0 + \tau_{\rm drag}} \boldsymbol{V}_{\rm c}, \tag{34}$$

where $\boldsymbol{V}_{\rm c}$ is the fluid velocity for the charged grains described below. The factor $\tau_0/\left(\tau_0 + \tau_{\rm drag}\right)$ characterizes the decoupling of charged grains from neutral grains: its value is 0 when both fluids are strongly coupled and 1 when the neutral fluid is totally coupled to the gas. This factor can also be used to express the fluid velocity of charged grains $\boldsymbol{V}_{\rm c}$: $\boldsymbol{V}_{\rm c}$ is equal to $\boldsymbol{V}_{\rm fluid}$ (Eq. (21)) when charged grains and neutral grains are strongly coupled, and equal to $\boldsymbol{V}_{\rm i}$ when they are decoupled. This dependency is given by an expression similar to Eq. (34):

$$\boldsymbol{V}_{\rm c} = \frac{\tau_0}{\tau_0 + \tau_{\rm drag}} \boldsymbol{V}_{\rm i} + \frac{\tau_{\rm drag}}{\tau_0 + \tau_{\rm drag}} \boldsymbol{V}_{\rm fluid}. \tag{35}$$

The fluid velocity for neutral grains V_{0z} in the shock propagation direction is plotted in Fig. 15. We find that the integrated velocity V_z during the neutral phase (Fig. 14) is, on the average, in reasonable agreement with the average velocity V_{0z} during this period as given by Eq. (34) and Fig. 15. With this expression we are able to model the dynamics of small neutral grains as fluids and to ignore their transient dynamics. We note that this is not fully valid for the larger grains where the effects of the neutralization can be felt well beyond the end of their neutral phase because of the slow damping of their gyration.

The fact that the small neutral grains are not coupled to the ions can have a major impact on the dust processing in C shocks because they have an important velocity relative to the charged grains that remain coupled to the ion fluid. The small neutral grains might thus shatter small grains or craterize larger grains (the latter action being a progressive erosion rather than catastrophic shattering). This kind of erosional processing will result in grain fragmentation over long time-scales because the decoupling of the neutral grains from the charged grains is not limited to the precursor but is present throughout the shock, as long as the neutral and charged fluids are not recoupled.

Charge fluctuations also induce small relative velocities between ions and larger grains (here 80 Å) during their neutral and gyration damping phases. These small relative velocities should favour coagulation between large grains and the small charged grains that are strongly coupled to the magnetic field.

6. Conclusions

We present a new multi-fluid approach for dust dynamics in transverse C and J shocks in dense clouds, adapted to the perspective of our future study of dust processing. We model the dust size distribution by size bins containing grain cores covered by icy mantles. While calculating the shock structure, we determine the out-of-equilibrium charge distribution for each size of grain and incorporate its contribution into the ionization balance. The 2-D dust dynamics is properly integrated using the laws of motion, taking into account the grain inertia and the evolution of the grain cross-section due to the erosion/accretion of mantles.

In the pre-shock gas we find that grains with icy mantles have a cross-section a factor of three higher than the cross-section of the grain cores alone. Adopting a weighting function to the Hall factor, Γ, used to compute the fraction of dust mass in each bin that is coupled to the magnetic field, the critical velocity for C shocks is found to increase with the gas density and to be only weakly dependent on the presence of a high abundance of PAHs in the gas and on the photodetachement of electrons by secondary photons induced by cosmic-rays, unlike in the previous study (FPdF03).

In C shocks propagating through dense clouds ($n_{\rm H} \geq 10^4$ cm^{-3}) we find that the dust dynamics comprises two distinct phases: a very short transient phase where grains gyrate around magnetic field lines (resulting in high relative velocities between grains) followed by a long-term, inertia-free dynamics characterized by smaller relative velocities. In earlier studies of dust dynamics in C shocks in dense clouds the grain gyration phase was not taken into account. All grains have completed their gyration phase before a significant part of their mantles has been eroded. This justifies our inclusion of mantles onto grains in the determination of their dynamics.

In molecular clouds ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}), the gyration phase is significant. Once the gyration is damped, grains remain strongly coupled to the magnetic field. With a high abundance of PAHs the grains can become decoupled from the magnetic field in the shock tail where the attachment of electrons onto PAHs creates a shortage of free electrons in the gas. Negatively charged PAHs then become an important charge carrier and charge exchange

between grains and negatively charged PAHs must be taken into account. This is important in calculating the charge carried by the grains in order to avoid ovestimating the decoupling of large grains.

In high density clouds ($n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}) and with no PAHs, the gyration phase is almost negligible due to higher gas drag. An electron shortage appears early in the precursor induced by the charging of the grains which carry a significant fraction of the free electrons. The high gas drag leads to a long-term decoupling of large grains from the magnetic field. However, small grains remain strongly coupled throughout the shock.

Very small grains ($a < 100$ Å), such as would be expected for the fragments of shattering in grain-grain collisions, may not be strongly coupled to the magnetic field in all environments because of charge fluctuations. When the lifetime of neutral grains is not negligible compared with the friction time-scale, very small grains follow stochastic dynamics where they tend to couple to the neutral fluid each time they become neutralized, otherwise following the motion of the ions. With our detailed grain dynamical modelling we confirm that the averaging approach to the dynamics of grains undergoing charge fluctuations adopted by Ciolek & Mouschovias (1993) is indeed valid. We model the impact of charge fluctuations on the dynamics of small grains by defining the average velocity of neutral grains and charged grains taken separately for each size of grain.

The resulting shock structures integrating dust dynamics do not significantly differ from those obtained with our previous model where the charged dust grains were assumed to follow the ion motion. This conclusion remains valid even when large grains are strongly decoupled from the magnetic field, as for high densities. This is because the small grains ($\simeq$100 Å) are mainly responsible for the gas-grain coupling and remain coupled to the magnetic field throughout the shock as in our previous model.

The presence of an electric field E_z in the shock propagation direction, resulting from a local loss of charge neutrality induced by the decoupling of large grains from the magnetic field, affects the dynamics of grains very little when a full grain size distribution is used. The velocity of the grains in the shock direction is little modified because a very small change in the dynamics of smaller grains is enough to re-establish the local charge neutrality. The component of the grain velocity parallel to the shock is affected in the same way for all grains, thereby leaving the relative velocities approximately as before. Therefore, dust processing should not depend very much on the inclusion of the electric field E_z in the model, which we can therefore ignore.

Dust dynamics in J shocks only comprise a short gyration phase before the grains are brought to rest with respect to the gas. The high gyration velocity of the dust grains in the post-shock gas can lead to the efficient sputtering, vaporization and shattering of dust grains.

Our presented formalism will be applied, in a following paper, to the study of dust processing via gas-grain and grain-grain collisions in J and C shocks in dense clouds and to the feedback of dust processing on the shock structure.

Acknowledgements. We wish to thank the referee, Wayne Roberge, for his encouraging remarks and for his insightful comments that helped to improve the manuscript.

References

Barlow, M. J. 1978, MNRAS, 183, 367
Borkowski, K. J., & Dwek, E. 1995, ApJ, 454, 254
Cardelli, J. A., Clayton, G. C., & Mathis, J. S. 1989, ApJ, 345, 245
Chapman, J. F., & Wardle, M. 2006, MNRAS, 371, 513
Chernoff, D. F. 1987, ApJ, 312, 143
Chièze, J.-P., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R. 1998, MNRAS, 295, 672
Chokshi, A., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. J. 1993, ApJ, 407, 806
Ciolek, G. E., & Mouschovias, T. Ch. 1993, ApJ, 418, 774
Ciolek, G. E., & Roberge, W. G. 2002, ApJ, 567, 947
Ciolek, G. E., Roberge, W. G., & Mouschovias, T. Ch. 2004, ApJ, 610, 781 (CRM04)
Cowie, L. L. 1978, ApJ, 225, 887
Draine, B. T. 1980, ApJ, 241, 1021
Draine, B. T., & Sutin, B. 1987, ApJ, 320, 803
Draine, B. T., & McKee, C. F. 1993, ARA&A, 31, 373
Draine, B. T., Roberge, W. G., & Dalgarno, A. 1983, ApJ, 264, 485
Elmegreen, B. G. 1979, ApJ, 232, 729
Gredel, R., Lepp, S., Dalgarno, A., & Herbst, E. 1989, ApJ, 347, 289
Flower, D. R., & Pineau des Forêts, G. 2003, MNRAS, 343, 390 (FPdF03)
Flower, D. R., Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., & Cabrit, S. 2003, MNRAS, 341, 70
Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., Hollenbach, D. J., & McKee, C. F. 1994, ApJ, 433, 797
Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. J. 1996, ApJ, 469, 740 (JTH96)
Mathis, J. S., Rumpl, W., & Nordsieck, K. H. 1977, ApJ, 217, 425 (MRN)
McKee, C. F., Hollenbach, D. J., Seab, C. G., & Tielens, A. G. G. M. 1987, ApJ, 318, 674
Mizuno, H., Markiewicz, W. J., & Voelk, H. J. 1988, A&A, 195, 183
Mullan, D. J. 1971, MNRAS, 153, 145
Nakano, T., & Umebayashi, T. 1980, PASJ, 32, 613
Pilipp, W., & Hartquist, T. W. 1994, MNRAS, 267, 801
Pilipp, W., Hartquist, T. W., & Havnes, O. 1990, MNRAS, 243, 685
Pineau des Forêts, G., Flower, D. R., Hartquist, T. W., & Dalgarno, A. 1986, MNRAS, 220, 801
Poppe, T., & Blum, J. 1997, Adv. Space Res., 20, 1595
Roberge, W. G., & Draine, B. T. 1990, ApJ, 350, 700
Shull, J. M. 1978, ApJ, 226, 858
Slavin, J. D., Jones, A. P., & Tielens, A. G. G. M. 2004, ApJ, 614, 796
Spitzer, L. Jr 1976, Comm. Ap., 6, 177
Tielens, A. G. G. M., McKee, C. F., Seab, C. G., & Hollenbach, D. J. 1994, ApJ, 431, 321
Umebayashi, T., & Nakano, T. 1980, PASJ, 32, 405
Walmsley, C. M., Flower, D. R., & Pineau des Forêts, G. 2004, A&A, 418, 1035
Wardle, M. 1998, MNRAS, 298, 507
Weingartner, J. C., & Draine, B. T. 2001, ApJS, 134, 263

Appendix A: Modelling the size distribution of grain cores

Our silicate and carbon dust size distributions are modelled using a range of size bins as per Jones et al. (1996). The bins are numbered with indice k running from 1 to $k_{\max}$. The bin k contains all the grain cores with radius $a_{k-} < a < a_{k+}$ (or in mass $m_{k-} < m < m_{k+}$). In order to be given sufficient resolution for the smallest grain cores the bin limits follow a geometrical distribution in k

$$a_{k+} = a_+ \eta^{(k-1)/3}, \qquad m_{k+} = m_+ \eta^{k-1}, \tag{A.1}$$

$$a_{k-} = a_+ \eta^{k/3}, \qquad m_{k-} = m_+ \eta^{k}, \tag{A.2}$$

with

$$\eta = \exp\left(-3\frac{\ln(a_+/a_-)}{k_{\max}}\right) \quad < 1. \tag{A.3}$$

Each bin is associated with an "average" grain core with radius, cross-section and mass calculated using the method of Mizuno et al. (1988). This method can handle any kind of "smooth" dust size distribution and is adapted to the treatment of the complex dust size distribution resulting from the shattering or coagulation of grains.

Within each bin we assume a power law size distribution of index β_k in mass and α_k in radius, defined by

$$\frac{\mathrm{d}n(a)}{\mathrm{d}a} \propto a^{\alpha_k} \qquad \text{for } a_{k-} < a < a_{k+}, \tag{A.4}$$

$$\frac{\mathrm{d}n(m)}{\mathrm{d}m} \propto m^{\beta_k} \qquad \text{for } m_{k-} < m < m_{k+}, \tag{A.5}$$

and a little algebra then yields

$$\beta_k = \frac{\alpha_k - 2}{3}. \tag{A.6}$$

From the mass indices, β_k, we can calculate the properties of the "average" grain cores. For any bin k we define the moments of order i ($i = 1, 2, 3$) of the core size distribution in bin k

$$\langle a^i \rangle_k = \frac{\int_{a_{k-}}^{a_{k+}} a^i \mathrm{d}n(a)}{\int_{a_{k-}}^{a_{k+}} \mathrm{d}n(a)}. \qquad i = 1, 2, 3. \tag{A.7}$$

From Eqs. (A.4)–(A.6) we can demonstrate how to calculate the quantities $\langle a^i \rangle_k$ as a function of β_k and i:

$$\langle a^i \rangle_k = a_{k+}^i \frac{1+\beta_k}{1-\eta^{1+\beta_k}} \frac{1-\eta^{1+i/3+\beta_k}}{1+i/3+\beta_k}, \qquad i = 1, 2, 3. \tag{A.8}$$

The density n_k and mass density ρ_k of the grain cores in bin k are defined by:

$$n_k = \int_{a_{k-}}^{a_{k+}} \mathrm{d}n(a), \tag{A.9}$$

$$\rho_k = \frac{4}{3}\pi\rho_{\mathrm{C/Sil}} \int_{a_{k-}}^{a_{k+}} a^3 \mathrm{d}n(a). \tag{A.10}$$

From Eq. (A.7) we get

$$\rho_k = \frac{4}{3}\pi\rho_{\mathrm{C/Sil}} n_k \langle a^3 \rangle_k, \tag{A.11}$$

and we consider that all the grain cores in bin k are identical to a grain core of mass

$$\tilde{m}_k = \frac{4}{3}\pi\rho_{\mathrm{C/Sil}}\langle a^3 \rangle_k. \tag{A.12}$$

The density of grain cores in bin k is therefore

$$n_k = \frac{\rho_k}{\tilde{m}_k}. \tag{A.13}$$

In the pre-shock gas the total mass density of grain cores, ρ, must be distributed without loss among the $k_{\max}$ bins. For $\beta = -2$, corresponding to $\alpha = -4$, we simply have the same mass density in all bins: $\rho_k = \rho/k_{\max}$. For our pre-shock MRN distribution ($\alpha = -3.5$ corresponding to $\beta = -11/6$), bin k receives a mass density

$$\rho_k = \rho \frac{\eta^{-(2+\beta)} - 1}{1 - \eta^{(2+\beta)k_{\max}}} \eta^{(2+\beta)k}, \tag{A.14}$$

and the corresponding flux of mass (which is the variable being integrated)

$$f_k = \rho_k V_{\mathrm{s}}. \tag{A.15}$$

At the position of integration in the shock we calculate the mass density indices of each bin, β_k, using the method of Mizuno et al. (1988). We define the bin width

$$w_k = m_{k+} - m_{k-} = m_{k+}(1-\eta), \tag{A.16}$$

and the following parameters characterizing the slope of the distribution at the upper (δ_{k+}) and lower (δ_{k-}) border of each bin

$$\delta_{k+} = \log\frac{\rho_{k-1}}{w_{k-1}} - \log\frac{\rho_k}{w_k}, \qquad 1 < k \leq k_{\max}, \tag{A.17}$$

$$\delta_{k-} = \log\frac{\rho_k}{w_k} - \log\frac{\rho_{k+1}}{w_{k+1}}, \qquad 1 \leq k < k_{\max}. \tag{A.18}$$

For the first and the last bin where only one of the two parameters δ_{k+} and δ_{k-} are defined, the mass index is

$$\beta_1 = -\left(1 + \frac{\delta_{1-}}{\log\eta}\right), \qquad \beta_{k_{\max}} = -\left(1 + \frac{\delta_{k_{\max}+}}{\log\eta}\right). \tag{A.19}$$

For other bins, if $\delta_{k-}\,\delta_{k+} > 0$, the dust mass distribution $\mathrm{d}n(m)/\mathrm{d}m$ is monotonous between the bins $k-1$, k and $k+1$ so that we can define β_k from the harmonic mean of upper and lower slopes

$$\beta_{1<k<k_{\max}}(\delta_{k-}\,\delta_{k+} > 0) = -\left(1 + \frac{2\,\delta_{k+}\delta_{k-}}{\delta_{k+} + \delta_{k-}} \frac{1}{\log\eta}\right). \tag{A.20}$$

This expression differs from Eq. (7) of Mizuno et al. (1988) because these authors use an index for $n(m)$, and not for $\mathrm{d}n(m)/\mathrm{d}m$ as we do, and also because $\log\eta < 0$ in our model.

However, if $\delta_-\,\delta_+ \leq 0$ then the slope of the distribution changes sign around bin k. In this case we arbitrarily define the mass density index in bin k from the upper slope δ_{k+}:

$$\beta_{1<k<k_{\max}}(\delta_{k-}\,\delta_{k+} \leq 0) = -\left(1 + \frac{\delta_{k+}}{\log\eta}\right). \tag{A.21}$$

For the MRN distribution choosen here, and modelled as size bins with a mass partition given by Eq. (A.14), these calculations give the expected $\beta_k = -11/6$ and $\alpha_k = -3.5$ for all bins.

Appendix B: Calculating the mantle thickness and the "average" grain properties

In Sect. 2.1 we showed that all the grain cores are covered, at any position in the shock, by an icy mantle of identical thickness Δa. To calculate the mantle thickness, we follow an approach similar to Walmsley et al. (2004). The total volume of mantle material shared by all grains is obtained by subtracting the volume of the cores from the total grain volume and we then obtain the expression for the total mass density of the mantles:

$$\int_{a_-}^{a_+} \frac{4}{3}\pi\rho_{\rm Man}\left((a+\Delta a)^3 - a^3\right)\mathrm{d}n(a) = \rho_m, \tag{B.1}$$

where $\rho_{\rm Man}$ is the specific density of the icy mantles, taken to be 1 g cm^{-3} in our case, and ρ_m is the total mass density of the molecules depleted into the icy mantles.

We now define new moments of order i ($i = 0, 1, 2, 3$) for the entire dust size distribution of grain cores

$$\langle n a^i\rangle = \int_{a_-}^{a_+} a^i\,\mathrm{d}n(a). \tag{B.2}$$

When modelling dust size distribution of grain cores by bins, we find:

$$\langle n a^0\rangle = n = \int_{a_-}^{a_+}\mathrm{d}n(a) = \sum_k \int_{a_{k-}}^{a_{k+}}\mathrm{d}n(a) = \sum_k n_k, \tag{B.3}$$

and, using Eq. (A.7),

$$\langle n a^i\rangle = \sum_k \int_{a_{k-}}^{a_{k+}} a^i\,\mathrm{d}n(a) = \sum_k n_k\langle a^i\rangle_k, \quad i = 1, 2, 3, \tag{B.4}$$

so that these quantities can be calculated from Eqs. (A.8) and (A.13). With this notation we can develop Eq. (B.1) to demonstrate that the mantle thickness Δa is the solution of the following polynomial:

$$n\Delta a^3 + 3\langle n a\rangle\,\Delta a^2 + 3\langle n a^2\rangle\Delta a = \frac{3\rho_m}{4\pi\rho_{\rm Man}}. \tag{B.5}$$

We apply this method to our pre-shock dust size distribution composed of carbon (7.12×10^{-27} g H^{-1}) and silicate (1.40×10^{-26} g H^{-1}) grains. Both dust size distributions are MRN ($\alpha = -3.5$) over a 100 Å–3000 Å size range. Icy mantles, with mass density 1 g cm^{-3}, represent a mass of 7.01×10^{-27} g H^{-1} covering grain cores. We find the following cubic equation when summing the moments per H over both carbon and silicate distributions

$$5.26\times10^{-11}\Delta a^3 + 2.61\times10^{-16}\Delta a^2 + 6.45\times10^{-22}\Delta a = 1.67\times10^{-27} \tag{B.6}$$

with $\Delta a = 147$ Å as unique real solution.

Covering the "average" grain cores by mantles of thickness Δa the "average" grain (core + mantle) for a given bin k has a radius, cross-section and mass given by:

$$a_k = \langle a\rangle_k + \Delta a, \tag{B.7}$$

$$\sigma_k = \langle a^2\rangle_k + 2\langle a\rangle_k\Delta a + \Delta a^2, \tag{B.8}$$

$$m_k = \tilde{m}_k + \frac{4}{3}\pi\rho_{\rm Man}\left(3\Delta a\langle a^2\rangle_k + 3\Delta a^2\langle a\rangle_k + \Delta a^3\right). \tag{B.9}$$

The resulting grain radius, a_k (for core+mantle), may be out of the radius interval for the given $k^{\rm th}$ bin $[a_{k-} : a_{k+}]$ for the grain cores because of the presence of the mantle but this has no effect on any of the calculations. The addition of mantles onto the grain cores does not change the number density of the grains which is determined by the distribution of grain cores.

Appendix C: Numerical methods

C.1. Integrating the dust charge distribution

Integrating the grain charge (Pilipp et al. 1990; Ciolek & Roberge 2002, FPdF03) allows the calculation of the ionization balance and the determination of the "out of equilibrium" grain charge. It also allows us to calculate the grain charge when a shortage of electrons in the gas makes the use of fit formulas for grain charge impossible, a situation already encountered by Chapman & Wardle (2006) when PAHs were introduced into their model. Integrating the charge distribution is, furthermore, needed to determine the number density per unit volume of the neutral grains, which is necessary to model the impact of charge fluctuations on the dynamics of the grains and their processing (see Sect. 5.2).

Each bin k is associated with a dedicated charge grid $[Z_{k-}{:}Z_{k+}]$ and associated with $Z_{k+} - Z_{k-} + 1$ "charged bins" (k, Z), each with a core mass density $\rho_k(Z)$, number density $n_k(Z) = \rho_k(Z)/\tilde{m}_k$, and flux of mass $f_k(Z) = \rho_k(Z)\langle V_{kz}(Z)\rangle$. When calculating the steady-state in the pre-shock gas at rest, $\langle V_{kz}(Z)\rangle$ is set to 1 for all grains. For shocks integrated in cartesian coordinates, $\langle \boldsymbol{V}_k(0)\rangle = \boldsymbol{V}_0$ (Eq. (34)) and $\langle \boldsymbol{V}_k(Z\neq 0)\rangle = \boldsymbol{V}_{\rm c}$ (Eq. (35)), whereas $\langle \boldsymbol{V}_k(Z)\rangle = V_{\rm i}$ for all grains when integrating in polar coordinates.

The processes determining the charge distribution of the grains in bin k are modelled by a transfer of flux of grains between consecutive charge bins for the same bin k with the following rates:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}f_k(Z)}{\mathrm{d}z} = \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}z}\times\Big(&f_k(Z+1)\,(J_{\rm e}+J_{\rm PAH-})\,(Z+1)\\ &+f_k(Z-1)(J_{\rm i}+J_{\rm pe})(Z-1)\\ &-f_k(Z)\left(J_{\rm e}+J_{\rm PAH-}+J_{\rm i}+J_{\rm pe}\right)(Z)\Big),\end{aligned} \tag{C.1}$$

with $\mathrm{d}t/\mathrm{d}z = 1/V_{kz}$ (Eq. (18)) in cartesian coordinates and $\mathrm{d}t/\mathrm{d}z = 1/V_{\rm i}$ in polar coordinates. The term in $Z-1$ is omitted for $Z = Z_{k-}$ and the term in $Z+1$ for $Z = Z_{k+}$, thus ensuring the conservation of the total flux of dust mass $f_k = \sum_Z f_k(Z)$ in bin k. The lower and upper bounds of the charge grid Z_{k-} and Z_{k+} are adaptively-varied as needed in order to suit the evolution of the charge distribution. In this case the integrator is automatically re-started with the new charge grid values. Using this method we are able to reproduce Figs. 5 to 10 of Draine & Sutin (1987) showing the grain charge distribution for various reduced temperatures.

From the charge distribution we can calculate the average charge Z_k of grains in bin k

$$Z_k = \frac{1}{n_k}\sum_{Z_{k-}}^{Z_{k+}} Z\,n_k(Z). \tag{C.2}$$

In shocks the high electron and ion temperatures result in large grain charges. The integration of the average grain charge Z_k in bin k is thus a good approximation for the larger grains and allows us to limit the number of variables used by the integrator. When calculating the shock structure the charge distribution integration is stopped for any bin with $|Z_k| > 20$ and is replaced by the integration of the average charge Z_k. In this mode, the differential equation for charge integration becomes:

$$\frac{\mathrm{d}Z_k}{\mathrm{d}z} = \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}z}\times\left(J_{\rm i}(Z_k) + J_{\rm pe}(Z_k) - J_{\rm e}(Z_k) - J_{\rm PAH^-}(Z_k)\right). \tag{C.3}$$

Conversely, the charge distribution integration replaces the average charge integration as soon as $|Z_k| < 15$. The limit is set

lower than the limit for the reverse transition in order to avoid repeated back and forth transitions between the two integration modes whenever the charge oscillates around these values. The transition between the two charge integration modes does not lead to any noticeable differences in the results (see Fig. 8 for a profile of the average grain charge in a shocked molecular cloud obtained by the combination of these two methods).

C.2. Integrating the dust gyration velocity in polar coordinates

The integration of the grain velocity vector $\boldsymbol{V}$ in the shock frame in cartesian coordinates (V_y, V_z) is not always possible. Indeed, our integration variable is the position z in the shock, not the time t, so that the differential equation Eq. (20) is not defined whenever V_z crosses zero. If this happens for very short time-scales one can artificially impose $V_z > 0$ in that equation to allow the integration to continue, with only a minor change in the dynamics of grain. But if $V_z < 0$ over long time-scales, e.g. for all grains in J shocks or for large grains in some C shocks, one can use polar coordinates to integrate the gyration velocity vector

$$\boldsymbol{V}_{\rm gyr} = \boldsymbol{V} - \boldsymbol{V}_{\rm i} \tag{C.4}$$

as per JTH96 because this method does not suffer the same limitations. We note that the velocity profiles obtained by these two methods look different but represent the same physics. Whereas the integration in cartesian coordinates of the grain velocity in the shock frame determines the instant velocity of the grain at position z of integration, the integration of the gyration velocity in polar coordinates gives the *average* gyration velocity of the grain when its *guiding centre* is at position z of integration. Differences are primarly observed for large grains because their gyration radii are not negligible compared to their gyration damping length-scale.

We now present the expressions for the $\boldsymbol{V}_{\rm gyr}$ differential equation in polar coordinates valid for the integration of dust dynamics in C and J shocks. We define the gyration velocity vector $\boldsymbol{V}_{\rm gyr}$ in polar coordinates ($V_{\rm gir}$, θ) as

$$\boldsymbol{V}_{\rm gyr} = V_{\rm gyr}\sin\theta\,\boldsymbol{e}_y + V_{\rm gyr}\cos\theta\,\boldsymbol{e}_z. \tag{C.5}$$

With this notation, Eq. (18) becomes

$$m\frac{{\rm d}\boldsymbol{V}_{\rm gyr}}{{\rm d}t} = -m\frac{{\rm d}\boldsymbol{V}_{\rm i}}{{\rm d}t} + Ze\frac{\boldsymbol{V}_{\rm gyr}\times\boldsymbol{B}}{c} + h\left(\boldsymbol{V}\right)\left(\boldsymbol{V}_{\rm n} - \boldsymbol{V}\right). \tag{C.6}$$

Scaling the product by $\boldsymbol{V}_{\rm gyr}/V_{\rm gyr}$ yields

$$\frac{{\rm d}V_{\rm gyr}}{{\rm d}t} = -\frac{{\rm d}\boldsymbol{V}_{\rm i}}{{\rm d}t}\cdot\frac{\boldsymbol{V}_{\rm gyr}}{V_{\rm gyr}} + \frac{h(\boldsymbol{V})}{m}\left(\boldsymbol{V}_{\rm n} - \boldsymbol{V}\right)\cdot\frac{\boldsymbol{V}_{\rm gyr}}{V_{\rm gyr}}, \tag{C.7}$$

which, in polar coordinates, leads to

$$\frac{{\rm d}V_{\rm gyr}}{{\rm d}t} = -\frac{{\rm d}V_{\rm i}}{{\rm d}t}\cos\theta + \frac{h(\boldsymbol{V}_{\rm gyr})}{m}\left(\Delta V\cos\theta - V_{\rm gyr}\right), \tag{C.8}$$

with

$$\Delta V = V_{\rm n} - V_{\rm i} \geq 0 \tag{C.9}$$

and

$$h(\boldsymbol{V}_{\rm gyr}) = \rho_{\rm n}\sigma\sqrt{V_{\rm gyr}^2 + \Delta V^2 - 2V_{\rm gyr}\Delta V\cos\theta + \kappa T_{\rm n}}. \tag{C.10}$$

Taking the projection of Eq. (C.6) on the y axis, we find

$$\frac{{\rm d}V_{\rm gyr}}{{\rm d}t}\sin\theta + \frac{{\rm d}\theta}{{\rm d}t}V_{\rm gyr}\cos\theta = \frac{ZeB}{mc}V_{\rm gyr}\cos\theta - \frac{h(\boldsymbol{V}_{\rm gyr})}{m}V_{\rm gyr}\sin\theta, \tag{C.11}$$

leading to

$$\frac{{\rm d}\theta}{{\rm d}t} = \frac{ZeB}{mc} - \left(\frac{1}{V_{\rm gyr}}\frac{{\rm d}V_{\rm gyr}}{{\rm d}t} + \frac{h(\boldsymbol{V}_{\rm gyr})}{m}\right)\tan\theta. \tag{C.12}$$

Using Eq. (C.8), we get

$$\frac{{\rm d}\theta}{{\rm d}t} = \frac{ZeB}{mc} + \left(\frac{{\rm d}V_{\rm i}}{{\rm d}t} - \frac{h(\boldsymbol{V}_{\rm gyr})}{m}\Delta V\right)\frac{\sin\theta}{V_{\rm gyr}}. \tag{C.13}$$

Note that θ is negative because of the negative charge Ze carried by grains in molecular clouds. For J shocks Eqs. (C.8) and (C.13) can be simplified because $\Delta V = V_{\rm n} - V_{\rm i} = 0$.

Integration as a function of position z is obtained by dividing Eqs. (C.8) and (C.13) by ${\rm d}z/{\rm d}t = V_{\rm i}$. The integration of the dust dynamics in polar coordinates is applicable for both J ($\Delta V = 0$) and C ($\Delta V > 0$) shocks, with the restriction for C shocks that the grains must be strongly coupled to the magnetic field ($\Gamma \gg 1$). This condition is often satisfied in the circumstances where we must integrate in polar coordinates: i.e. shocks in molecular or diffuse clouds.

Appendix D: Influence of grain dynamics on transverse C shocks

Draine (1980) demonstrated that dust grains are more important than ions in coupling the momentum from the magnetic field to the neutrals in the hottest parts of transverse C shocks in clouds with low fractional ionization ($n_{\rm i}/n_{\rm H} \lesssim 10^{-8}$), assuming that dust grains are strongly coupled to the magnetic field ($\Gamma \gg 1$). Here we estimate the extent to which gas-grain coupling (and thus shock structure) is affected by the inclusion of a dust size distribution characterized by different Hall factors Γ_k (some of them larger than 1 as for high density clouds, see Fig. 10). We compare our results with our previous 3-fluid study (FPdF03) where the charged grains were all coupled to the magnetic field and followed the ion motion.

Previous studies of dust dynamics in C shocks have concentrated on the impact of dust dynamics on the shock structure, especially the decoupling of large grains from the magnetic field lines, and found it important for *oblique* shocks (Pilipp & Hartquist 1994; Wardle 1998; Chapman & Wardle 2006): the out-of-plane drift of large grains following the magnetic field lines tends to increase the dissipation rate and therefore increase the peak temperature and reduce the shock thickness. This effect does not exist in the *transverse* shocks studied in the present paper where the dynamics of the grains is restricted to the plane transverse to the magnetic field direction. Chapman & Wardle (2006) presented the first multi-fluid study of dust dynamics in oblique shocks in order to determine how much the inclusion of a full dust size distribution (replacing the usual single-sized grain approximation) affects the rotation of the magnetic field throughout the shock. Within this framework they ignore the grain inertia as well as the grain contribution to the ionization balance but they do include the presence of an electric field E_z in the shock direction. They find that, once a full dust size distribution is introduced, the rotation of the magnetic field throughout the shock is far less important than in their previous model with single-sized grains, even in presence of a high PAH abundance favouring the decoupling of large grains. From the limited point of view of dust dynamics their results, when comparable, are in general agreement with ours.

Our study of transverse shocks reveals a small impact of the decoupling of large grains on the shock structure. At low densities ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}) the velocity and temperature profiles do not

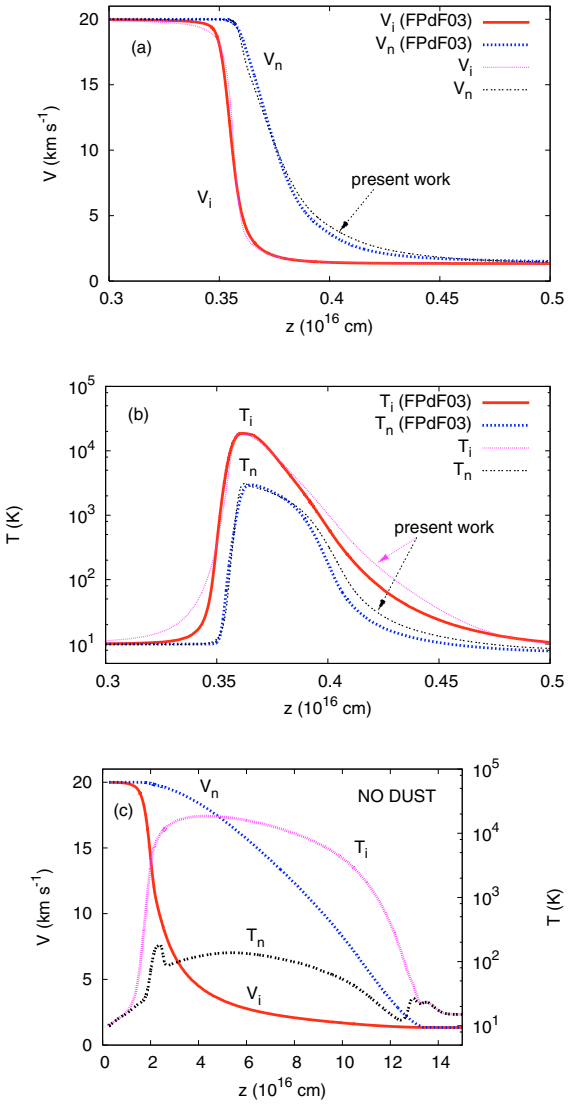


Fig. D.1. The velocity **a)** and temperature **b)** profiles for a C shock propagating in a cloud with proton density $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}, as obtained with the FPdF03 shock code assuming that the charged dust grains follow the ion motion, compared with the present work. **c)** Velocity and temperature profiles for the same C shock but with no dust. At such high density, dust grains fully dominate the coupling in momentum between magnetic field and neutral gas. Neglecting dust, the shock length is increased by more than an order of magnitude.

show any significant difference. The situation is little different at higher density. Figure D.1a,b compares the shock velocity and temperature profile for our model with those obtained with the FPdF03 shock model where charged dust grains are assumed to follow the ion motion. This comparison is for a C shock propagating at a velocity of 20 km s^{-1} in a cloud of density 10^6 cm^{-3}: note that the shock is a little longer in our model (where the dust dynamics is integrated) than when the grains are assumed to follow ions. To emphasize the effect of dust, we show in Fig. D.1c the result for the same shock model with no dust.

From Eq. (21) we can evaluate the coupling term between gas and grains $(V_{\rm n} - V_z) \times |\boldsymbol{V}_{\rm n} - \boldsymbol{V}|$ in the shock direction which affects the shock length. Once the gyration is damped and when no electric field E_z is present, we get:

$$(V_{\rm n} - V_{{\rm fluid},z}) \times |\boldsymbol{V}_{\rm n} - \boldsymbol{V}_{\rm fluid}| = \left(\frac{\Gamma}{\sqrt{1+\Gamma^2}}\right)^3 \times (V_{\rm n} - V_{\rm i})^2 \,. \quad \text{(D.1)}$$

This expression shows that the gas-grain coupling is the largest in transverse shocks when the grains are strongly coupled to the ions ($\Gamma \gg 1$). The FPdF03 model, where the grains follow the ions, therefore tends to overestimate the gas-grain coupling. Our new model with dust dynamics yields longer shock lengths at high densities because of the decoupling of large grains (see Fig. 10) and small neutral grains (see Sect. 5.2) from the magnetic field. This effect is rather small because, in an MRN dust size distribution, the total dust cross-section is dominated by the small grains. The inclusion of an electric field E_z in the shock direction (not presented here in Fig. D.1, but see also Fig. 10) does not significantly modify the shock dynamics.

The decoupling of large grains from the magnetic field therefore has little impact on the dynamics of transverse shocks. Our previous approach (FPdF03), with no electric field E_z and with the charged grains assumed to be strongly coupled the ions, is therefore satisfactory even at high densities where the large grains are in fact decoupled from the magnetic field. The situation will be different as soon as we consider dust processing, which will modify the dust size distribution and therefore the dust-gas coupling. This situation will be explored in a following paper.

Troisième partie

Traitement des poussières dans les chocs

L'observation de traceurs de choc comme SiO dans les flots moléculaires et les jets autour des étoiles en formation semble montrer que les poussières y sont en partie détruites (*cf.* chapitre 1). Les vitesses des chocs mesurées dans les jets sont généralement de l'ordre de 30-40 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ (*e.g.* Nisini et al., 2002; Podio et al., 2006). L'observation des raies optiques du [S II] et du [Fe II] à l'apex du choc d'étrave est compatible avec l'existence de chocs J dissociatifs, tandis que l'émission H_2 dans les ailes du choc d'étrave indique préférentiellement la présence de chocs C (*e.g.* Hartigan et al., 1996). Cette analyse est cohérente avec le fait que les chocs les plus rapides sont à l'apex, là où le mouvement du gaz est perpendiculaire au front de choc, tandis que la vitesse transverse est plus faible dans les ailes et permet peut-être effectivement la formation de chocs C.

Si plusieurs études ont été publiées sur la destruction des poussières silicatées et la formation de SiO dans les chocs C, par érosion (Caselli et al., 1997; Schilke et al., 1997; Flower & Pineau des Forêts, 2003; Jiménez-Serra et al., 2005; Gusdorf et al., 2008a,b) et par vaporisation (Caselli et al., 1997), aucune n'a a ce jour été publiée sur la destruction des poussières dans les chocs J qui pourraient se propager dans ces milieux. Certes, une érosion significative des grains dans les chocs J n'est attendue que pour des vitesses supérieures à 100 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Mais il est bien connu que la vaporisation des poussières lors des collisions grain-grain doit être le processus dominant de destruction des poussières dans les chocs J plus lents ($\ll 100$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$).

Nous commençons cette partie par une étude détaillée de la dynamique et du traitement des poussières dans les chocs J traversant les nuages denses à des vitesses inférieures à 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ (chapitre 9). L'article correspondant, inclus en fin de chapitre, vient d'être soumis à A&A.

Les deux chapitres suivants sont consacrés au traitement des poussières dans les chocs C. Au chapitre 10, nous évaluons si la coagulation des poussières est significative dans les chocs lents ($V_\mathrm{s} \leq 10$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$) dans des milieux suffisamment denses ($n_\mathrm{H} = 10^6$ $\mathrm{cm^{-3}}$). Puis, nous nous intéressons (chapitre 11) à l'effet de la fragmentation, de la vaporisation et de l'érosion dans des chocs plus rapides ($20 \leq V_\mathrm{s} \leq 40$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$) se propageant dans un nuage moins dense ($n_\mathrm{H} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$). Ces résultats sont préliminaires et attendent confirmation. Nous comparons nos résultats avec les prédictions des études antérieures. Un rapprochement est fait avec les propriétés des plasmas poussiéreux (*dusty plasma*), qui ont des points communs avec nos chocs C. Ce chapitre se conclut par une discussion des paramètres critiques de notre modélisation.

Chapitre 9

Dynamique et traitement des poussières dans les chocs J

Ceci est la première étude sur le traitement des poussières dans les chocs J se propageant dans les nuages denses. Nous présentons d'abord les trajectoires variées des grains dans les chocs J selon la vitesse du choc et la densité pré-choc. La dynamique des poussières dans les chocs J étant fonction de l'efficacité de l'émission secondaire d'électrons, nous distinguons deux cas. Le premier où l'émission secondaire des électrons est suffisamment faible pour ne pas affecter la dynamique des grains, le deuxième où elle est dominante. En conclusion, nous donnons quelques estimations des pourcentages de destruction des poussières silicatées pour différentes vitesses de choc et densités pré-choc. L'article correspondant, qui sera soumis à A&A dans les toutes prochaines semaines, est présenté en fin de chapitre.

9.1 Trajectoires des poussières

Si nous voulons déterminer la trajectoire des poussières dans un choc J sans faire aucune hypothèse *a priori* sur leur degré de couplage au champ magnétique, nous devons intégrer pour chaque grain les lois du mouvement en coordonnées cartésiennes et sur le temps t (Eq. (8.7)). Il faut donc déjà disposer d'un profil de choc, obtenu par la méthode numérique présentée dans l'article 2 (page 193), c'est-à-dire sans prise en compte du traitement des grains.

9.1.1 Profils des chocs J

Les chocs J que nous étudions se propagent dans un gaz pré-choc qui baigne dans un champ magnétique non négligeable, relié à la densité pré-choc par la relation :

$$B_0 = b\sqrt{n_{\rm H}}\,. \tag{9.1}$$

Suivant Flower & Pineau des Forêts (2003), nous choisissons $b = 1$, ce qui conduit à un champ magnétique d'intensité 100 μG pour un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, et de 1 mG

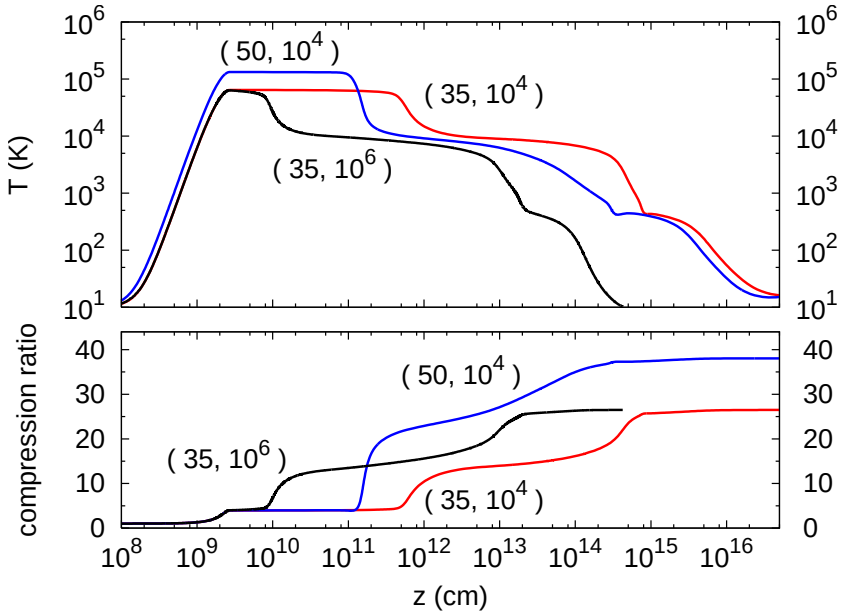


FIGURE 9.1 – Profils de température (**Haut**) et de densité (**Bas**) de trois chocs J caractérisés par le couple (V_s, n_H) où V_s est la vitesse du choc exprimée en km s^{-1}, et n_H la densité pré-choc exprimée en cm^{-3}. Le champ magnétique pré-choc a pour intensité $B_0(\mu G) = \sqrt{n_H(\mathrm{cm}^{-3})}$ soit 100 μG pour $n_H = 10^4$ cm^{-3}. Le pic de température ne dépend pas de la densité pré-choc (*cf.* chapitre 2). Le taux de compression final du gaz ne dépend pas de la densité pré-choc mais uniquement de la vitesse du choc (*cf.* chapitre 3). La longueur du choc est grossièrement inversement proportionnelle à la densité pré-choc.

pour une densité $n_H = 10^6$ cm^{-3}. Ce champ serait réduit respectivement à ~ 30 μG et ~ 300 μG si nous faisions l'hypothèse d'une équipartition entre l'énergie thermique et l'énergie magnétique dans le nuage ($b \simeq 0.3$, *e.g.* Ciolek et al., 2004). Pour des chocs transverses, la vitesse magnétosonique dans le fluide chargé vaut, avec $b = 1$, entre 20 et 28 km s^{-1} selon la densité (*cf.* Fig. 6.3), ce qui autorise l'existence de chocs J pour toute vitesse de choc supérieure à 30 km s^{-1}.

Trois profils de choc en température et en densité sont présentés sur la figure 9.1, pour différentes densités pré-choc et vitesses de choc. Le gaz, porté à haute température à la traversée du front de choc, se comprime en refroidissant par émission radiative. Les lignes de champ magnétique étant gelées dans le fluide chargé (*cf.* chapitre 3, § 3.2.1), l'intensité du champ magnétique transverse suit la compression du gaz. La pression magnétique $B^2/(8\pi)$ augmente donc comme le carré de la densité, alors que la pression thermique n'augmente que d'un tiers pendant la phase de refroidissement (*cf.* chapitre 3, § 3.2.2). La pression magnétique limite le taux de compression final du gaz qui vaut ~ 27 pour un choc de 35 km s^{-1} et ~ 38 pour un choc de 50 km s^{-1} (*cf.* Fig. 9.1). En l'absence de champ magnétique, ce taux vaudrait respectivement $\sim 3.10^4$ et 6.10^4 (*cf.* chapitre 2), valeurs excessives qui montrent les limites d'un modèle 1D de choc hydrodynamique.

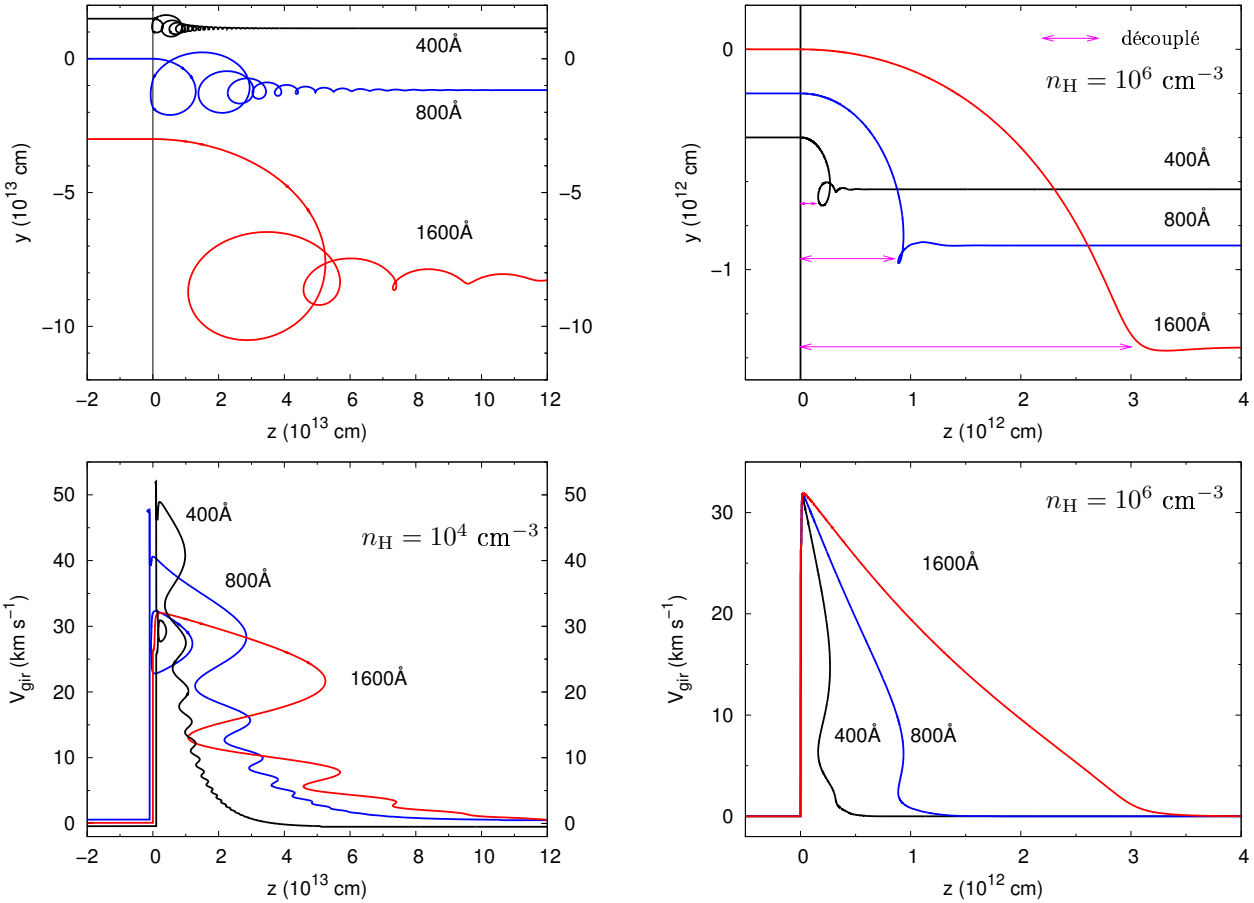


FIGURE 9.2 – (**Colonne de gauche**) Trajectoire (**Haut**) et profil de la vitesse de giration (**Bas**) de trois tailles de grains silicatés dans un choc J se propageant à 35 km s^{-1} dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. (**Colonne de droite**) Même chose avec une densité pré-choc $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}. Les flèches "découplé" indiquent pour chaque taille de grain la zone du choc où les grains ne sont pas encore couplés au champ magnétique.

9.1.2 Trajectoires dans un choc de 35 km s^{-1}

Dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}

La colonne de gauche de la figure 9.2 présente la trajectoire et le profil de la vitesse de giration $V_{\rm gyr}$ de trois tailles de grains silicatés à travers un choc J de vitesse $V_{\rm s} = 35$ km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3} ($B_0 = 100$ μG). Le grain de 1600 Å pénètre dans le choc en tournant autour des lignes de champ. Sa giration est progressivement amortie. Les grains de 800 et 400 Å sont réfléchis par le gradient de champ magnétique présent immédiatement derrière le front de choc (Woitke et al., 1993). Ils retournent dans le gaz pré-choc et réussissent à pénètrer dans le choc à leur deuxième tentative. Chaque fois qu'ils traversent le front de choc, ils sont accélérés si bien qu'ils finissent par rentrer dans le choc avec une vitesse supérieure à celle du grain de 1600 Å.

La durée de la phase de giration est courte pour tous les grains, relativement à la longueur du choc (la température du choc est encore supérieure à 10^4 K à la fin des phases de giration

des grains, *cf.* Fig. 9.1). Aussi négligeable qu'elle puisse paraître, la phase de giration des poussières est la seule période du mouvement des poussières à travers le choc où l'on prédit un découplage entre le grain et le gaz et entre les différentes tailles de grain, et donc un possible traitement des grains par érosion, fragmentation et vaporisation. Une étude du traitement des grains dans les chocs J ne peut donc se passer de l'étude de la giration des grains autour des lignes de champ magnétique.

Dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}

La situation est différente pour un choc de même vitesse (35 km s^{-1}) dans un nuage plus dense ($n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}, $B_0 = 1$ mG), comme présenté sur la colonne de droite de la figure 9.2. Le grain de 1600 Å est tellement freiné par l'intense friction du gaz qu'il n'a pas même le temps d'effectuer son premier quart de giration avant d'être immobilisé par le gaz. Ce constat vaut aussi pour le grain de 800 Å. Le grain de 400 Å n'accomplit lui-même qu'une giration. L'intense friction du gaz empêche également la réflexion magnétique des grains à l'entrée du choc.

9.1.3 Trajectoires dans un choc de 50 km s^{-1}

La trajectoire des poussières dans les chocs J plus rapides (40 - 50 km s^{-1}) se distingue par le piégeage des petits grains[1] ($a \leq 500$ Å) dans le front de choc (Fig. 9.3a). C'est l'émission secondaire d'électrons dans le gaz très chaud du front de choc qui en est la cause, couplée à la giration des grains. La charge des grains de négative devient positive quand ils pénètrent dans le choc. Elle redevient négative quand ils s'éloignent des hautes températures du front de choc qui activaient l'émission secondaire des électrons. Ramenés vers le front de choc par leur giration autour des lignes de champ magnétique, leur charge redevient positive. Leur trajectoire est alors déviée vers le milieu pré-choc. Leur charge redevient négative quand ils repassent dans le gaz pré-choc. La boucle est bouclée[2]. Les grains piégés sont accélérés à chaque traversée du front de choc et atteignent rapidement une vitesse de ~ 200 km s^{-1}. Comme nous le verrons dans la section 9.3, ils ne pénètrent finalement dans le choc qu'après avoir été presque complètement érodés.

Nous retrouvons ce comportement à plus haute densité (10^5 et 10^6 cm^{-3}, non présenté ici), pour des grains de plus petite taille. La taille caractéristique des grains piégés semble être reliée par une loi d'échelle à la densité pré-choc. En faisant l'hypothèse que le rapport du rayon de giration des grains $R = mv/(qB) \propto a^2/(b\sqrt{nH})$ à la longueur caractéristique de refroidissement du choc $L \propto 1/n_{\rm H}$ est invariant pour les grains réfléchis, nous trouvons la dépendance suivante :

$$a \propto \frac{\sqrt{b}}{n_{\rm H}^{1/4}}\,. \tag{9.2}$$

Les grains piégés dans le choc de la figure 9.3a ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, $b = 1$) ont un rayon inférieur à 500 Å. Cette relation d'échelle est cohérente avec les résultats de Slavin et al. (2004)

1. Les plus gros grains ($a \geq 500$ Å) suivent quant à eux une dynamique analogue à celle du grain de 1600 Å de la figure 9.2.

2. Le piégeage des grains ne peut exister que s'il y a une oscillation du signe de la charge du grain de part et d'autre du front de choc. Cette condition n'est cependant pas suffisante.

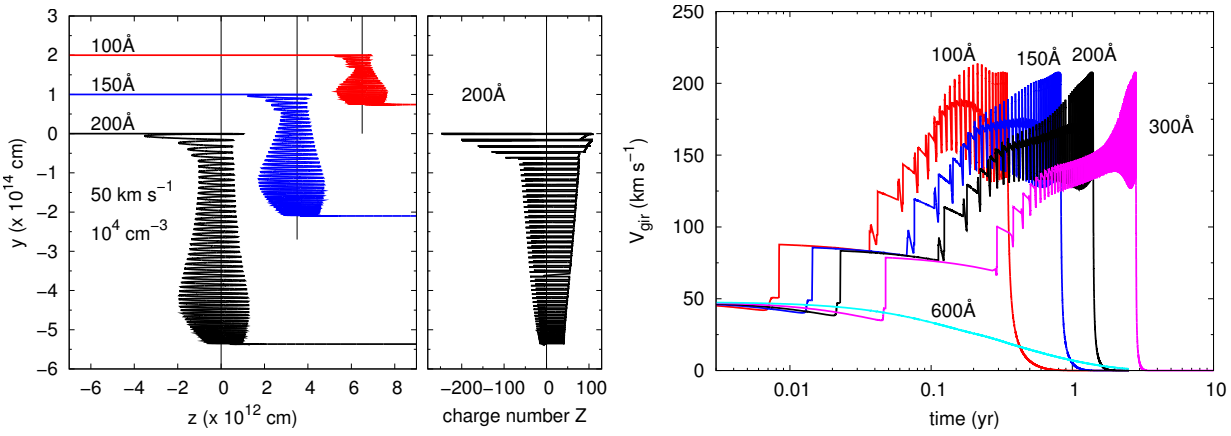


FIGURE 9.3 – (**a**) Trajectoires de 3 tailles (100, 150 et 200 Å) de grains silicatés, et profils de la charge du grain de 200 Å, dans un choc J de 50 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. Le front de choc, indiqué par un trait vertical noir, a été décalé pour chaque taille de grain de manière à éviter toute superposition. (**b**) Profil de la vitesse de giration de plusieurs tailles de grains dans ce même choc. A la différence de la figure 9.2, l'évolution du profil de la vitesse de giration est tracé en fonction du temps et non de la position dans le choc. Les grains de taille inférieure à $\sim$ 500 Å sont piégés dans le front de choc et accélérés par un processus de Fermi I à chaque traversée du front de choc.

qui montrent l'existence de grains de taille ~ 1 μm piégés dans des chocs de 100 km s^{-1} se propageant dans la phase tiède ($n_{\rm H} = 0{,}25$ cm^{-3}, b = 6). Dans l'étude de Slavin et al. (2004), l'oscillation du signe de la charge des grains (condition nécessaire pour obtenir un piégeage de certaines tailles de grains) fonctionne en sens inverse : les grains sont chargés positivement dans le milieu pré-choc et au tout début du front de choc par émission photoélectrique [1]. Leur charge devient négative dans le choc dès que la température est suffisamment élevée pour que le taux d'attachement des électrons soit supérieur au taux d'éjection d'électrons par effet photoélectrique [2].

Les trajectoires de la figure 9.3a nous ont montré que l'émission secondaire d'électrons peut bouleverser la dynamique des poussières dans le choc et donc leur traitement. Nous allons dans un premier temps étudier le traitement des poussières en désactivant le processus d'émission secondaire d'électrons.

9.2 Traitement quand l'émission secondaire d'électrons est négligeable

L'émission secondaire d'électrons est effectivement négligeable si la charge des grains reste partout négative dans le choc. Cela se produit si le choc est trop lent ($V_{\rm s} \leq 30$ km s^{-1})

1. Ces chocs sont à précurseur radiatif : ils émettent des photons UV (*cf.* chapitre 2).
2. L'émission secondaire d'électrons n'est efficace qu'à l'entrée du choc.

ou si les paramètres du modèle de charge (coefficient s_e de collage de l'électron et rendement δ_m d'émission secondaire d'électrons) sont tels que l'attachement électronique l'emporte sur l'émission secondaire au pic de température du choc.

Si nous voulons résoudre simultanément la structure du choc, la charge, la dynamique, et le traitement des poussières avec leurs rétroactions sur la chimie et l'état d'ionisation du gaz, nous devons intégrer les lois du mouvement sur la position z dans le choc et non sur le temps t. Dans les chocs J, il est impossible d'intégrer les lois du mouvement (Eq. (8.7)) en coordonnées cartésiennes sur la position z comme dans les chocs C. Une partie de la giration des grains se traduit en effet systématiquement par certaines phases de recul ($V_z < 0$) dans le référentiel du front de choc. Comme le mouvement du centre-guide des grains suit approximativement celui des ions, nous pouvons contourner cette difficulté en ramenant l'étude de la dynamique des grains à travers le choc à l'étude de l'évolution de leur *vitesse de giration moyenne* (Jones et al., 1994, 1996). Nous nous affranchissons ainsi des allers et retours du grain autour de sa position moyenne.

L'annexe E présente deux modélisations de la vitesse de giration moyenne des grains à travers le choc : un modèle *simplifié* qui a l'avantage pédagogique d'être indépendant du modèle de charge et de la densité pré-choc, et un modèle *élaboré* qui prend en compte l'absence de giration des grains à haute densité.

9.2.1 Modèle de traitement gaz-grain

Le traitement gaz-grain comprend l'érosion des cœurs et des manteaux et l'adsorption des molécules en phase gazeuse qui fait croître les manteaux de glaces. La figure 9.4 présente la dépendance en vitesse des rendements d'érosion inertielle des cœurs et des manteaux pour les deux modèles que nous utilisons. Pour les cœurs, le modèle de May et al. (2000) fournit directement le rendement d'érosion de Si, moyenné sur tous les angles d'incidence, pour un grain de silicate ($MgFeSiO_4$) (calculs effectués avec le logiciel TRIM). Tielens et al. (1994) fournissent quant à eux le rendement d'érosion à incidence normale pour une collision avec un atome de silicium (modèle analytique calibré sur des données de laboratoire). Les valeurs tirées du modèle de Tielens et al. (1994) ont donc été multipliées par 2 pour moyenner sur tous les angles d'incidence possibles (*cf.* Tielens et al. (1994)) et divisées par 7 pour tenir compte du fait que Si ne représente qu'un atome sur 7 dans $MgFeSiO_4$. Les modèles de May et al. (2000) et Barlow (1978) fournissent globalement des rendements plus faibles que celui de Tielens et al. (1994). Ces deux modèles jouent le rôle d'estimations par défaut et par excès des rendements d'érosion.

Les cœurs de la distribution MRN initiale sont recouverts d'un manteau de glaces dont l'épaisseur est commune à tous les grains : $\Delta a_k = \Delta a \simeq 150$ Å. L'érosion des manteaux est suivie individuellement pour chaque taille de grain. L'érosion des cœurs ne début qu'à partir du moment où les manteaux ont disparu de la surface des cœurs.

9.2.2 Modèle de traitement grain-grain

Notre modèle de traitement de la fragmentation et de la vaporisation dans les collisions grain-grain reprend celui défini par Tielens et al. (1994) et déjà appliqué par Jones et al. (1994, 1996) aux chocs dans la phase tiède du milieu interstellaire. Le schéma de la figure

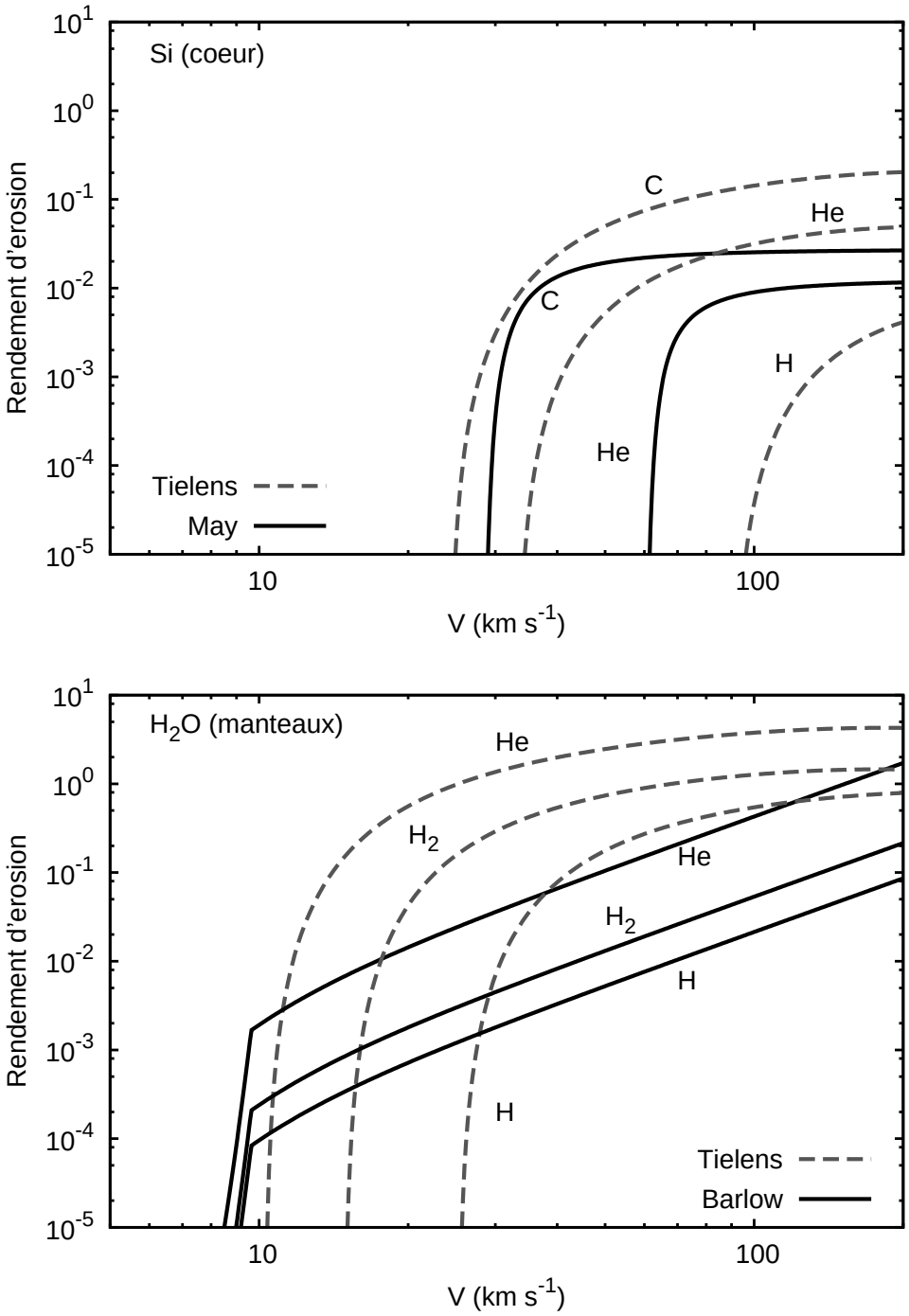
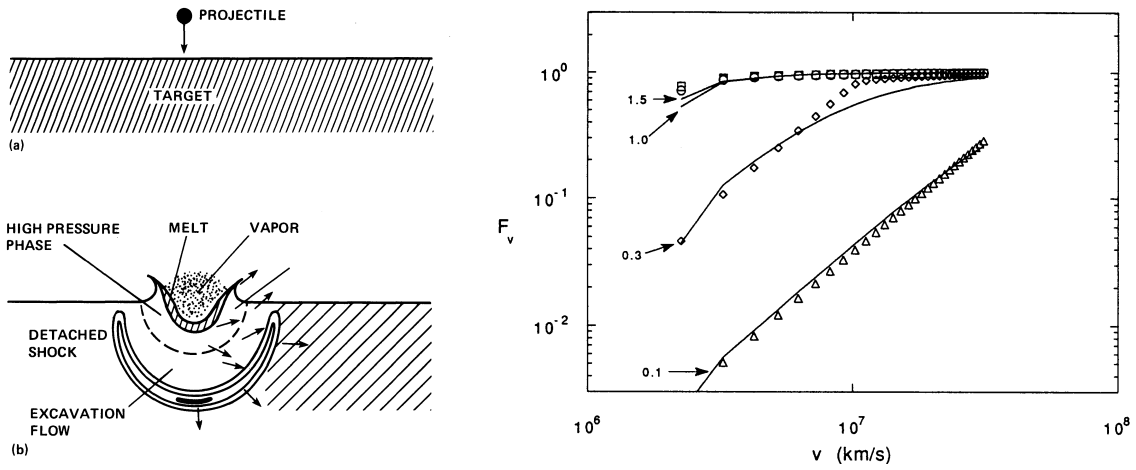


FIGURE 9.4 – (**Haut**) Rendements d'érosion de grains silicatés en fonction de la vitesse d'impact pour trois atomes projectiles : H, He et C. Les traits fins correspondent au modèle de Tielens et al. (1994), les traits épais à celui de May et al. (2000). Le modèle de May et al. (2000) fournit des rendements plus faibles que celui de Tielens et al. (1994). Le rendement pour l'hydrogène, absent du modèle de May et al. (2000), a été ajusté sur celui de Tielens et al. (1994). Le rendement d'érosion par H_2 est choisi égal à deux fois celui de H. (**Bas**) Même figure pour la glace de H_2O, avec H, He et H_2 comme projectiles, avec les rendements de Barlow (1978).



(a) (b)

FIGURE 9.5 – (**a**) Schéma illustrant la vaporisation et la fragmentation des grains lors de la collision entre un grain cible et un grain projectile beaucoup plus petit. (**b**) Fraction de masse du grain cible vaporisée, en fonction de la vitesse d'impact et pour différentes valeurs du rapport a_T/a_P du rayon de la cible (T pour Target) à celui du projectile. Le seuil de vaporisation se situe à ~ 20 km s^{-1}. Extraits de Tielens et al. (1994).

Vitesses seuils (km s^{-1})	Fragmentation	Vaporisation
Silicate	2.7	19
Graphite	1.2	23
Glaces	1.8	6.5

TABLE 9.1 – Vitesse seuil de fragmentation (Jones et al., 1996) et de vaporisation (Tielens et al., 1994) pour des grains de silicate, de carbone et de glace. La fragmentation et la vaporisation des glaces recouvrant les cœurs n'est pas considérée dans notre modèle en raison de la difficulté du traitement numérique.

9.5a modélise l'effet des collisions grain-grain à grande vitesse (> 20 km s^{-1}) dans le modèle de Tielens et al. (1994). Quand un grain projectile entre en collision avec un grain cible beaucoup plus grand que lui, la collision génère une onde de choc dans les deux grains, qui vaporise totalement le grain projectile et partiellement le grain cible. Le cisaillement des vitesses dans le flot d'excavation est responsable de la fragmentation partielle ou totale du grain cible. Le tableau 9.1 donne les vitesses seuils des processus de fragmentation et de vaporisation pour les cœurs silicatés et graphitiques de notre modèle. L'annexe E présente notre méthode numérique de calcul de la vitesse d'impact lors des collisions grain-grain, pour les modèles simplifié et élaboré de la dynamique moyenne des grains.

Rendement de vaporisation

Le modèle de Tielens et al. (1994) permet de calculer la fraction de masse des grains projectile et cible a être vaporisée pour une vitesse d'impact donnée (Fig. 9.5b). Dans ce

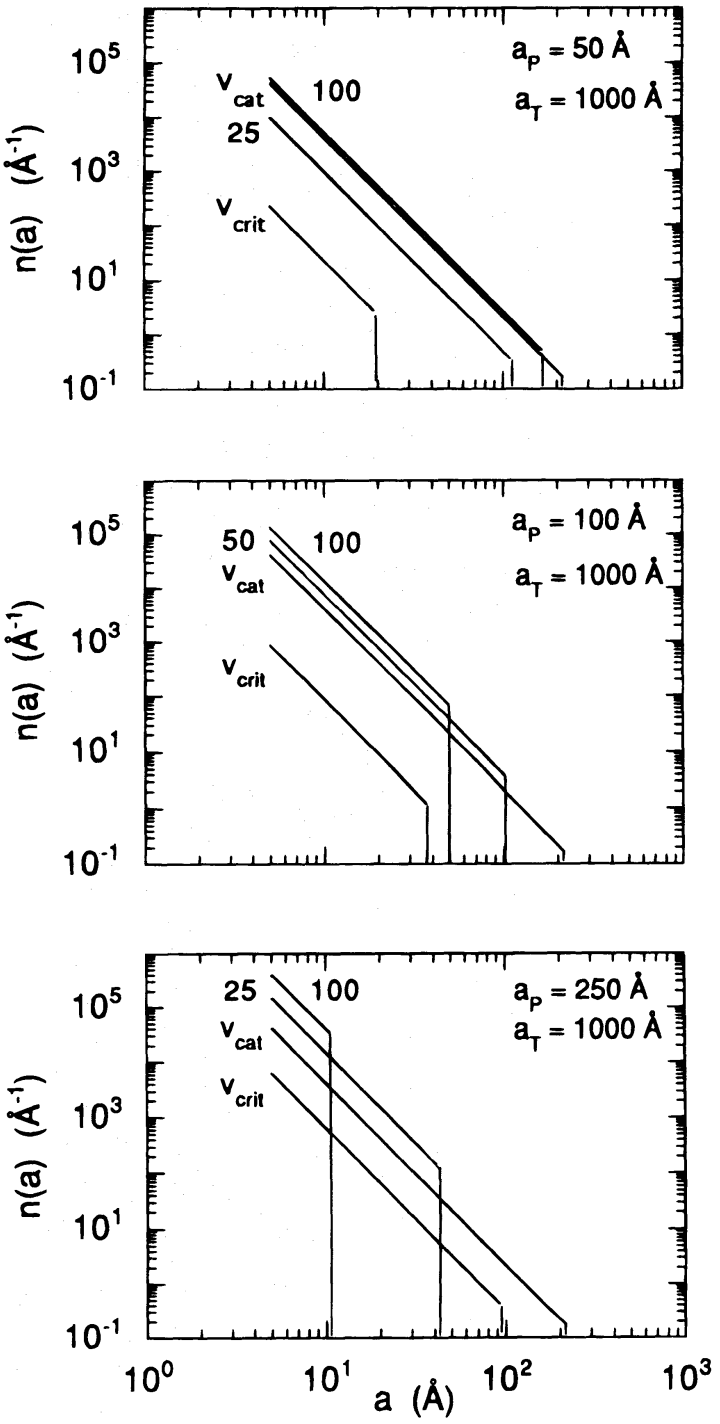


FIGURE 9.6 – Distribution en taille des fragments pour une collision entre un grain cible de 1000 Å et différentes tailles de grains projectiles (50, 100 et 250 Å), à différentes vitesses d'impact. Les grains cible et projectile sont en graphite. $V_{\rm crit}$ est la vitesse seuil de fragmentation, égale à 1,2 km s^{-1} pour les grains graphitiques. $V_{\rm cat}$, la vitesse de fragmentation catastrophique du grain cible, correspond à une collision qui le fragmente intégralement. Elle vaut respectivement 75, 23 et 5 km s^{-1} pour des grains projectiles de taille 50, 100 et 250 Å. Extrait de Jones et al. (1996).

modèle, la fraction vaporisée ne dépend pas de la valeur absolue des rayons des grains projectile et cible, mais seulement de leur rapport. Le grain projectile est totalement vaporisé dès qu'il rentre en collision à plus de 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ avec un grain beaucoup plus gros que lui ($a_\mathrm{T}/a_\mathrm{P} \geq 10$).

Distribution en taille des fragments

Dans le modèle de Jones et al. (1996), les fragments ont une distribution en taille légèrement moins pentue qu'une MRN ($\alpha = $ - 3,3), comme montré sur la figure 9.6. La taille du plus petit fragment est choisie égale à 5 Å (Jones et al., 1996), taille séparant approximativement les particules solides des molécules. Comme pour la vaporisation, la masse totale des fragments dépend des propriétés mécaniques et thermodynamiques des matériaux constituants les grains, de la vitesse d'impact de la collision et du rapport des tailles des deux grains. Le plus gros fragment contient $\sim 1\%$ de la masse totale des fragments (la partie non fragmentée du grain cible n'est pas considérée comme un fragment).

Inconsistance du traitement des manteaux

Notre gestion numérique des manteaux n'est pas consistante dans la mesure où notre modèle ignore la destruction des manteaux lors des collisions grain-grain : l'épaisseur des manteaux n'évolue que par accrétion ou érosion. Les fragments déposés dans les boîtes initialement vides ($k_\mathrm{max} < k \leq k_\mathrm{inf}$) ne possèdent pas de manteaux, mais ceux déposés dans les boîtes initialement pleines ($1 \leq k \leq k_\mathrm{max}$) se voient automatiquement attribués un manteau de glace qu'ils n'ont jamais eu, et qui est celui automatiquement attribué à tous les grains de la boîte. A moins d'ignorer l'existence des manteaux, cette limite ne semble pas surmontable dans l'immédiat car il faudrait alors tenir compte, sans doute de manière statistique, de l'histoire particulière de chaque grain et donc de leurs manteaux. Cette imperfection ne nous semble cependant pas critique car seule une faible fraction (quelques dizaines de pourcent tout au plus) des grains vont subir une collision avec un autre grain dans le choc, tandis que tous les grains subissent un freinage supplémentaire du fait de la présence d'un manteau.

9.2.3 Résultats

Fragmentation des grains

La figure 9.7 montre la distribution en taille finale des poussières silicatées après le passage d'un choc J dans un nuage de densité $n_\mathrm{H} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$, la distribution en taille initiale étant de type MRN. Plus le choc est rapide, plus les gros grains sont fragmentés et plus il y a de petits grains produits. La fragmentation augmente l'opacité totale de la distribution des cœurs par atome d'hydrogène d'un facteur ~ 4 pour un choc de 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ [1]. Les poussières carbonées sont moins sujettes à la fragmentation que les grains silicatés car, étant moins denses, elles sont plus rapidement freinées (Jones et al., 1996). Notre modèle étant basé sur celui de Jones et al. (1996), il n'est pas étonnant que nous retrouvions les mêmes tendances.

1. Cette valeur dépend significativement du choix de la taille minimale des grains, ici de 5 Å.

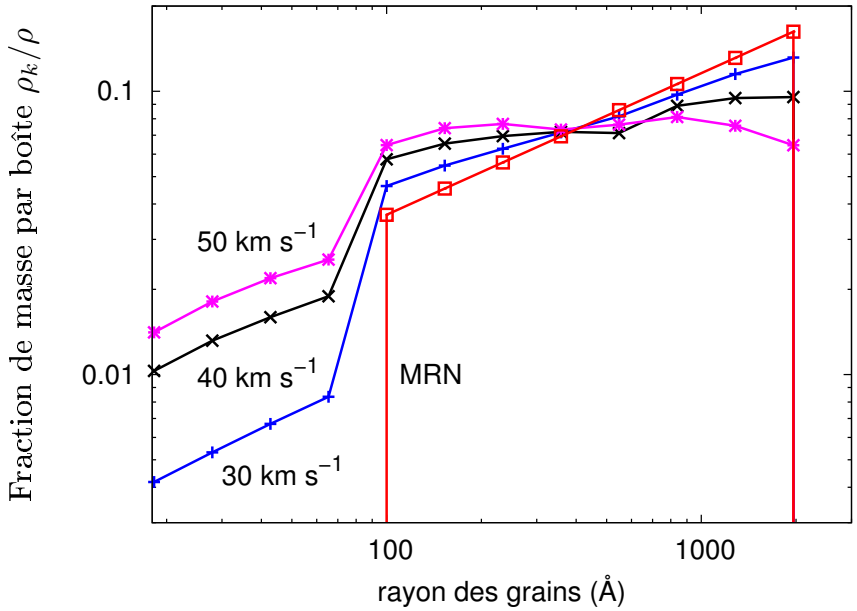


FIGURE 9.7 – Distribution en taille finale des grains silicatés pour différentes vitesses de choc J se propageant dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. La distribution pré-choc est une distribution MRN. La densité de masse ρ_k par boîte a été normalisée à la densité de masse totale ρ des poussières silicatées dans le milieu pré-choc. La fragmentation a multiplié la section efficace totale des cœurs par atome d'hydrogène par 1,8, 2,9 et 3,6 respectivement dans les chocs de 30, 40 et 50 km s^{-1}.

Destruction des grains silicatés par vaporisation et érosion

La figure 9.8 montre le niveau de destruction des poussières silicatées en fonction de la vitesse du choc et de la densité pré-choc. Les poussières sont détruites uniquement par vaporisation, sauf pour des vitesses de choc supérieures à 35 km s^{-1} où l'érosion apporte une contribution non négligeable si les rendements d'érosion sont suffisamment élevés (ceux de Tielens et al., 1994). L'augmentation de l'efficacité de l'érosion dans les chocs rapides ($V_{\rm s} \geq 35$ km s^{-1}, $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, *cf.* Fig. 9.2) tient à l'apparition des grains réfléchis (pour $V_{\rm s} \geq 35$ km s^{-1}) qui seuls ont une vitesse de giration suffisante pour être érodés de manière significative avec les rendements d'érosion de Tielens et al. (1994). [1].

A plus basse vitesse, le choix du modèle d'érosion (rendements de May et al. (2000) ou de Tielens et al. (1994)) a une influence indirecte sur l'intensité de la vaporisation des grains. Une érosion efficace des manteaux fait baisser la friction du gaz sur les grains et allonge donc la durée de sa phase de giration pendant laquelle il peut être vaporisé. Cet effet reste mineur comme on peut le voir en comparant entre 25 et 35 km s^{-1} les courbes de la figure 9.8 notées T94 ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3} et rendements de Tielens et al. (1994)) et celle notée 10^4 ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3} et rendements de May et al. (2000)).

La destruction par vaporisation est principalement l'œuvre des collisions entre gros grains

1. Le nombre limité de boîtes utilisé pour la distribution MRN de chaque population de grains introduit peut-être également des artifices numériques quand la dynamique d'une taille de grain change de comportement, comme ici avec les grains réfléchis.

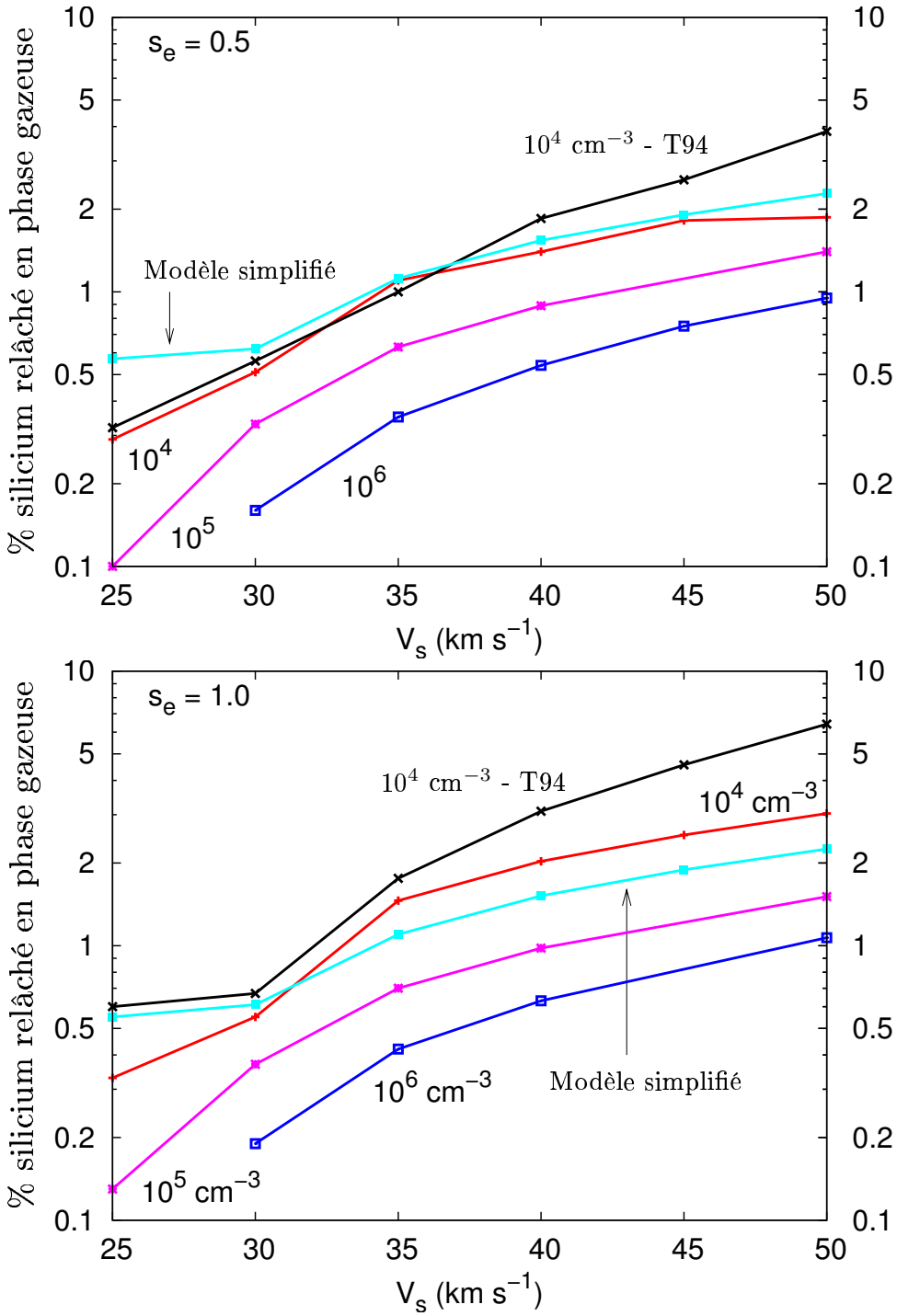


FIGURE 9.8 – Pourcentage de silicium relâché en phase gazeuse en fonction de la vitesse du choc, pour deux valeurs du coefficient de collage des électrons : (**Haut**) $s_e = 0,5$, (**Bas**) $s_e = 1$. On constate une baisse de la destruction des silicates avec la densité. Les rendements d'érosion utilisés sont ceux de May et al. (2000) (cœurs) et Barlow (1978) (manteaux), sauf pour la courbe notée T94 pour laquelle les rendements de Tielens et al. (1994) ont été utilisés. Les résultats du modèle simplifié (*cf.* § E.1) sont indépendants de la densité pré-choc et ne s'accordent bien à notre modélisation plus élaborée (*cf.* § E.2) que pour les nuages peu denses.

(Jones et al., 1994, 1996). L'intensité de la vaporisation des poussières tend à diminuer avec la densité. Cet effet tient à la suppression progressive de la giration des grains quand la densité augmente (*cf.* Fig. 9.2 et annexe E). Une modélisation rigoureuse de la première giration, comme nous l'avons faite dans le modèle élaboré de dynamique, est donc indispensable pour ne pas surestimer l'intensité du traitement grain-grain à haute densité comme le fait notre modèle simplifié de dynamique et de collisions grain-grain (*cf.* Fig. 9.8).

La comparaison des deux graphes de la figure 9.8 montre que le modèle de charge des grains a une certaine influence sur les prédictions de destruction des poussières. Une valeur plus faible du coefficient de collage s_e des électrons conduit à des grains plus faiblement chargés. Au moins deux effets se combinent :

- Moins les grains sont chargés et plus ils tardent à entrer en giration. Leur traitement s'en trouve amoindri ;
- La charge des grains dans le front de choc détermine le degré d'accélération des grains réfléchis. Nous trouvons que le grain est plus accéléré avec $s_e = 1$, qu'avec $s_e = 0,5$. Ce résultat est en accord avec les études publiées sur l'accélération des particules dans les chocs (*e.g.* Woitke et al., 1993; Ellison et al., 1997) : un grain avec une rigidité magnétique (rapport masse sur charge) plus élevée est accéléré plus efficacement par le choc. Quand $s_e = 1$, la charge (positive) du grain est plus faible, c'est-à-dire plus proche de zéro, quand l'émission secondaire domine car l'attachement des électrons est plus efficace qu'avec $s_e = 0,5$. La rigidité magnétique des grains est donc plus élevée avec $s_e = 1$ et le grain est accéléré à plus haute vitesse.

Production de SiO

La destruction des poussières silicatées conduit à la formation de SiO suivant deux modes :

- Formation *retardée* de SiO par réaction chimique en phase gazeuse suite à l'*érosion* de Si de la surface des grains.
- Formation *immédiate* de SiO lors de la collisions entre deux grains aboutissant à la vaporisation d'une fraction des grains (Nagahara & Ozawa, 1996; Wang, 1999).

La figure 9.9 compare l'abondance de SiO dans deux chocs J, l'un de 25 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et l'autre de 35 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Dans le choc de 25 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, non dissociatif, le SiO produit par la vaporisation demeure en phase gazeuse et finit par s'adsorber à la surface des grains dès que la température du gaz a suffisamment baissé et la densité suffisamment augmenté. Dans le choc dissociatif, la vaporisation a formé du SiO, mais celui-ci est rapidement détruit par collisions. Il est reformé par réaction chimique entre Si et O_2, mais ne peut augmenter en phase gazeuse tant que sa dissociation reste significative. C'est donc tardivement qu'il est formé, et en moins grande quantité que ce qu'il en avait été formé initialement par la vaporisation. Au total, le choc J de 25 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ a produit un peu plus de SiO que le choc dissociatif de 35 $\mathrm{km\,s^{-1}}$.

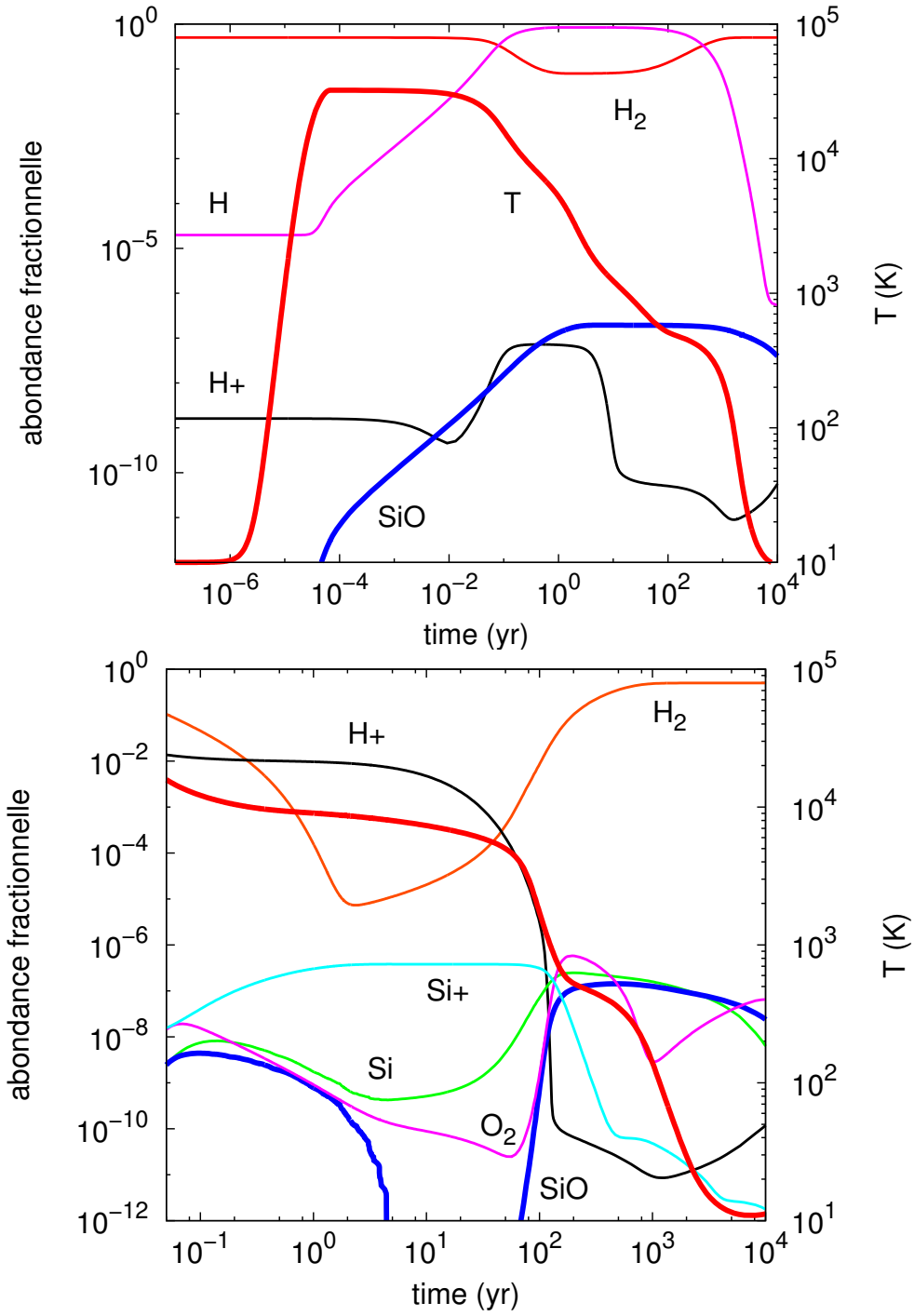


FIGURE 9.9 – Profil de l'abondance de SiO dans deux chocs de 25 km s^{-1} (**Haut**) et 35 km s^{-1} (**Bas**) Dans le choc de 25 km s^{-1}, l'érosion est négligeable et le SiO produit par vaporisation n'est pas dissocié alors que H_2 l'est (l'énergie de liaison de SiO $\sim$ 8 eV est supérieure à celle du dihydrogène $\sim$ 4 eV). Dans le choc de 35 km s^{-1}, le SiO produit par vaporisation est rapidement dissocié, puis reformé par réaction en phase gazeuse entre Si et O_2. L'abondance de SiO en phase gazeuse diminue dans le post-choc car il est adsorbé à la surface des grains.

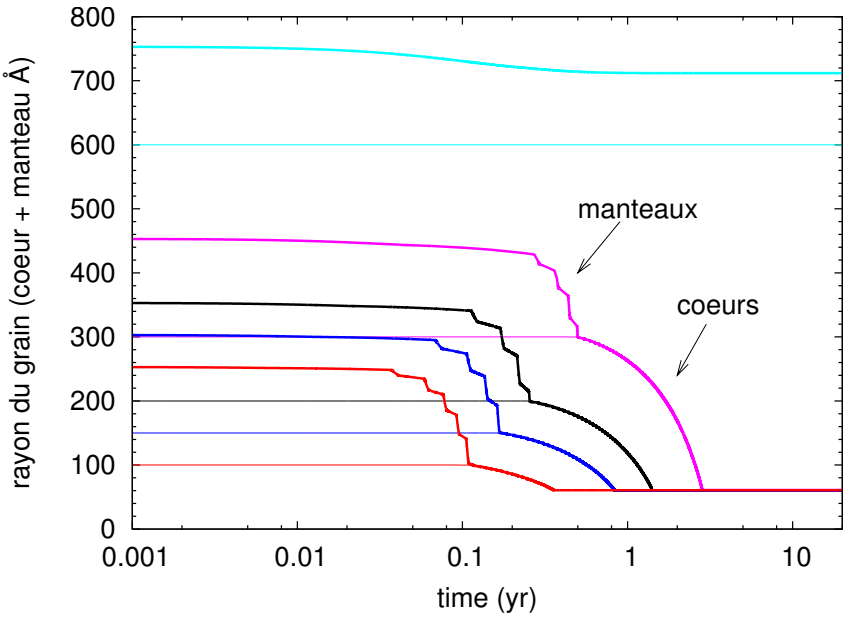


FIGURE 9.10 – Evolution de la taille des grains (cœur + manteau, traits épais) et des cœurs (traits fins) en fonction du temps, pour les grains réfléchis ou piégés dans le front de choc, dans le choc de 50 km s^{-1} de la figure 9.3. L'érosion des manteaux se fait en un temps court en raison des hautes vitesses atteintes par les grains (*cf.* Fig. 9.3b). L'érosion des cœurs ne s'achève qu'une fois leur taille réduite à $\sim$ 60 Å. Cette taille finale, commune à tous les grains qui ont été piégés, leur permet de pénétrer dans le choc.

9.3 Traitement quand l'émission secondaire des électrons domine

9.3.1 Traitements subis par les grains individuels

Pour certaines valeurs des paramètres du modèle de charge des poussières, et pour des chocs suffisamment rapides, certaines tailles de poussières sont piégées dans le front de choc et fortement accélérées par un processus de Fermi I (*cf.* Fig. 9.3b). Pour suivre la dynamique de ces poussières, nous avons dû intégrer les lois du mouvement en coordonnées cartésiennes sur la variable temporelle t. Ce mode d'intégration, où nous suivons chaque particule test individuellement, nous empêche de résoudre la structure du choc et de calculer l'intensité des processus de traitement grain-grain de la distribution entière [1].

Nous limitons donc notre calcul à l'érosion des manteaux et des cœurs. L'épaisseur des manteaux, puis des cœurs de chaque taille de grain est suivie tout au long de sa trajectoire de va-et-vient de part et d'autre du front de choc. Le résultat est montré sur la figure 9.10 pour le modèle d'érosion de May et al. (2000). Tous les grains dont la taille des cœurs est comprise entre 100 et $\sim$ 500 Å sont piégés dans le front de choc. Leur manteau disparaît rapidement tandis qu'ils sont accélérés jusqu'à $\sim$ 200 km s^{-1} (*cf.* Fig. 9.3b). L'érosion des cœurs peut

1. Slavin et al. (2004) ont mis au point une méthode qui permet d'évaluer l'intensité des processus grain-grain avec ce mode d'intégration. Nous avons d'abord voulu évaluer la crédibilité de ces résultats avant de nous lancer dans une modélisation plus rigoureuse.

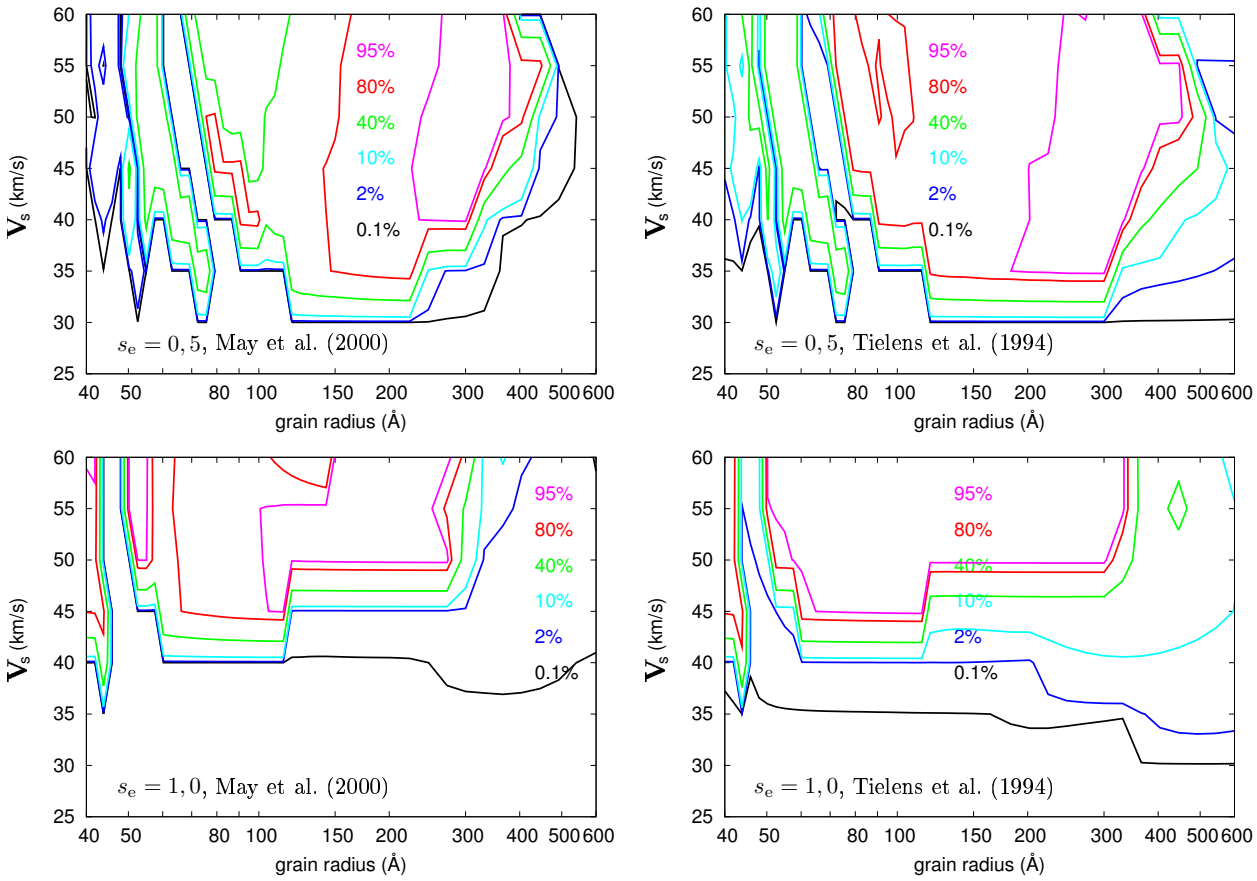


FIGURE 9.11 – Intensité de l'érosion de poussières silicatées piégées dans le front de choc, en fonction de leur rayon initial a_0 et de la vitesse du choc V_s pour deux valeurs du coefficient de collage des électrons : (**Haut**) $s_e = 0{,}5$, et (**Bas**) $s_e = 1$, et pour deux modèles d'érosion : (**Gauche**) May et al. (2000) et Barlow (1978), et (**Droite**) Tielens et al. (1994). Ces résultats, qui ont été obtenus pour des grains silicatés privés de manteaux, dépendent peu du modèle d'érosion mais fortement du modèle de charge. Les vallées que l'on peut observer (autour de 60-80 Å pour $s_e = 0{,}5$ et 40 - 50 Å pour $s_e = 1$) correspondent aux tailles des grains qui, n'étant pas réfléchis par le champ magnétique, sont autorisés à pénétrer dans le choc, et sont donc très peu érodés.

alors commencer. Elle ne se termine que quand la taille du cœur est suffisamment petite pour que le grain ne subisse plus de réflexion magnétique. Cette taille critique qui autorise le grain à pénétrer dans le choc, ici de l'ordre de quelques dizaines d'angström, dépend fortement du modèle de charge mais est toujours inférieure à 100 Å à cette densité.

Par cette méthode, nous accédons à la fraction de masse érodée pour chaque taille de grain. Ces résultats sont indépendants de la distribution en taille pré-choc des poussières, car nous ignorons dans cette section l'effet des collisions grain-grain. La figure 9.11 donne, sous forme de contours de niveaux, la valeur de cette fraction pour des grains silicatés initialements privés de leur manteaux (ceci afin de mieux mettre en évidence la dépendance du piégeage avec la taille du grain). On peut constater que les résultats ne dépendent pas beaucoup du modèle d'érosion. Cela s'explique par le fait que ce n'est pas le modèle d'érosion qui fixe la fraction détruite, mais la taille critique des grains autorisés à pénétrer dans le choc. Avec un rendement d'érosion élevé (Tielens et al., 1994), le front de choc détruit plus rapidement les poussières qu'avec un rendement d'érosion plus faible (May et al., 2000), mais la fraction érodée reste à peu près la même :

$$f \simeq 1 - \left(\frac{a_\infty}{a_0}\right)^3 , \tag{9.3}$$

où a_0 est le rayon initial du cœur et a_∞ son rayon quand il pénétre dans le choc (sa taille n'évolue plus car il est ensuite très rapidement freiné par le gaz).

9.3.2 Fraction de masse totale détruite dans le front de choc

Connaissant la fraction de masse détruite pour chaque taille de grain, nous pouvons calculer la fraction de masse totale de poussières silicatées détruites. Celle-ci dépend entièrement de la distribution pré-choc et dans une moindre mesure du modèle de charge. Si nous restons dans le cadre d'une distribution initiale MRN, nous trouvons une fraction des poussières détruites qui s'étend de $\sim$ 10 % à 20 % pour des vitesse de choc comprises entre 35 et 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ pour un nuage pré-choc de densité $n_\mathrm{H} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$ plongé dans un champ magnétique transverse d'intensité $B_0 = 100$ μG, avec un coefficient de collage des électrons $s_\mathrm{e} = 0.5$ sur les grains. Ces taux de destruction par érosion tombent à 5 - 10 % si l'on considère, comme au chapitre 4, une distribution en loi de puissance de coefficient $\alpha = -3$, plus représentative de la distribution en taille des milieux denses. Avec une distribution log-normale caractérisée par $a_0 = 1700$ Å et $\sigma = 0.8$ (*cf.* chapitre 4 également), le taux de destruction est compris entre 0.5 % et 5 %. Ces résultats sont trop sensibles au modèle de charge et à la distribution en taille pré-choc pour que nous puissons faire des prédictions quantitatives. Nous notons seulement qu'une analyse rigoureuse de la charge et de la dynamique des poussières dans les chocs J rapides montre qu'il est possible de détruire significativement les poussières par *érosion* dans des chocs J de vitesse inférieure à 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$.

V_s ($km\,s^{-1}$)	25	30	35	40	45	50
10^4 cm^{-3}	0,3%	0,5%	1,0 [+3.5]%	1 - 2 [+7]%	1,5 - 2,5 [+10]%	2 - 4 [+11]%
10^5 cm^{-3}	0,1%	0,4%	0,7 [+6]%	1,0 [+10]%	1,2 [+10]%	1,5 [+10]%
10^6 cm^{-3}		0,2%	0,4%	0,6%	0,8%	1,0%

TABLE 9.2 – Pourcentage total de destruction des poussières silicatées dans les chocs J, en fonction de la vitesse du choc et de la densité pré-choc. Les intervalles donnés reflètent les variations des résultats en fonction des modèles de charge et d'érosion choisis. Les pourcentages entre crochets indiquent la fraction détruite à ajouter si l'on tient compte d'une éventuelle destruction des poussières dans le front de choc, dans l'hypothèse où la distribution pré-choc est une loi de puissance sur [100 Å : 3000 Å] de coefficient $\alpha = -3$ caractéristique des nuages denses (*cf.* chapitre 4).

9.4 Conclusions

9.4.1 Synthèse des résultats

Le tableau 9.2 indique les pourcentages de destruction attendus pour les poussières silicatées dans les chocs J, pour différentes valeurs de la vitesse du choc et de la densité pré-choc. Si certaines tailles de poussières sont effectivement piégées dans le front de choc, le taux de destruction (indiqué entre crochets dans ce tableau), qui dépend fortement de la distribution initiale des poussières, peut devenir important. Ces résultats sont globalement assez proches de ceux obtenus par Gusdorf et al. (2008a) pour le traitement des poussières silicatées dans les chocs C. Il semble donc, et contrairement à ce que l'on croit généralement, que les chocs J lents ($V_s \leq 50$ $km\,s^{-1}$) sont au moins aussi capable de détruire les poussières des milileux denses que les chocs C, par vaporisation et peut-être dans certains cas par érosion.

9.4.2 Production de SiO - densité de colonne de SiO

La figure 9.12 présente les densités de colonne de SiO en fonction de la température du gaz ou de la position dans le choc, pour une distribution pré-choc MRN. Elle sont dépendantes des modèles de charge et d'érosion des poussières.

9.4.3 Quel modèle pour les grains carbonés ?

Les grains carbonés sont globalement moins détruits que les grains silicatés dans notre modèle. Cela vient de la faible densité du graphite, qui limite leur temps de découplage du gaz, mais aussi des paramètres de charge pour l'émission secondaire d'électrons. Avec $\delta_m = 1$, les grains graphitiques conservent une charge négative pour tous les chocs de vitesse inférieure à 50 $km\,s^{-1}$ si $s_e = 1$ et inférieure à 40 $km\,s^{-1}$ si $s_e = 0,5$. Les résultats du traitement dans le front de choc ressembleraient plus à ceux des silicates si le modèle choisi avait été de type carbone amorphe (semi-conducteur voire isolant, à haut rendement d'émission secondaire δ_m). Cependant, cela ne modifierait pas l'intensité de la vaporisation loin du front de choc.

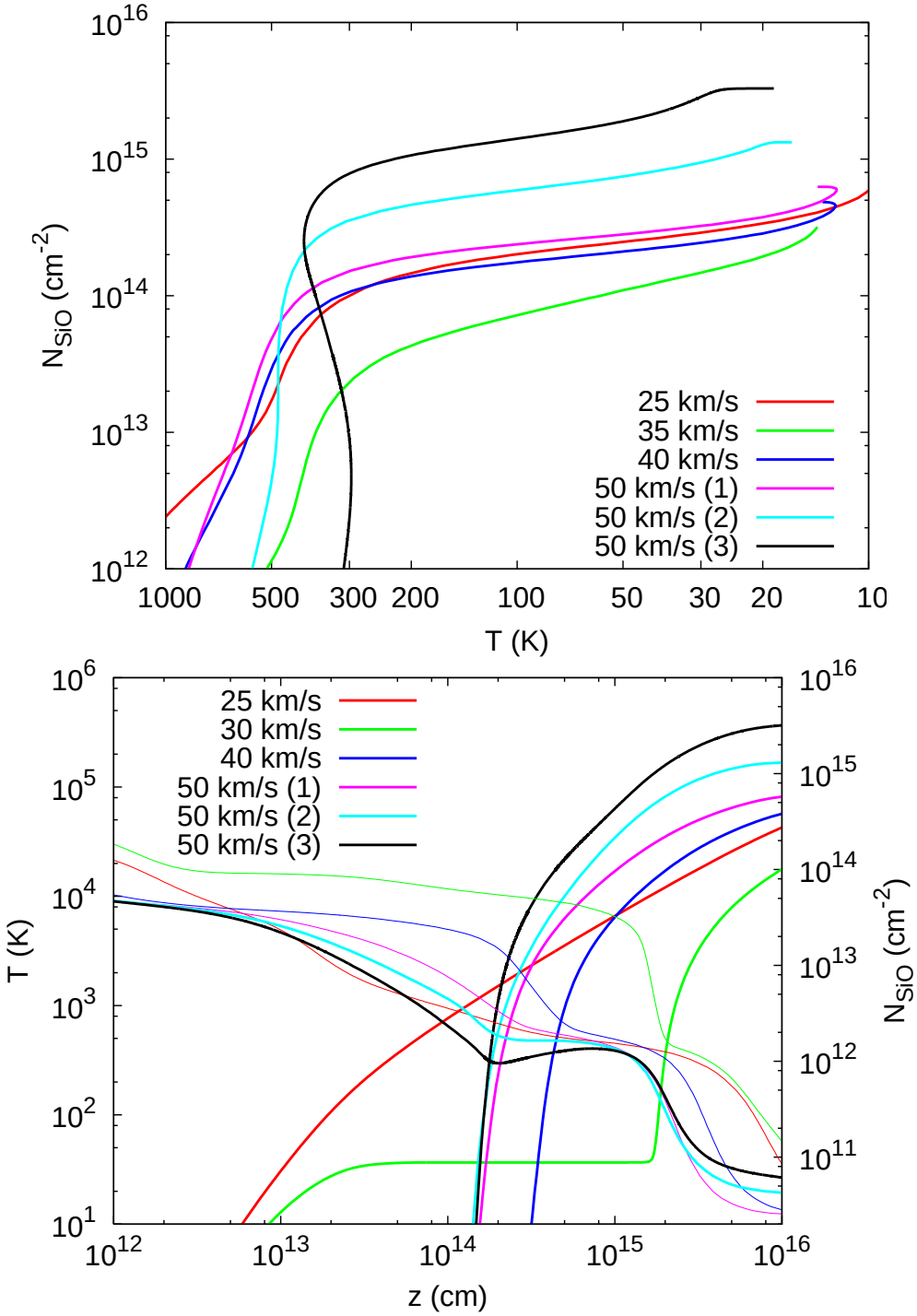


FIGURE 9.12 – Densité de colonne de SiO produite dans le choc, en fonction (**Haut**) de la température du gaz ou (**Bas**) de la position dans le choc avec le profil de température correspondant. Les codes de couleur sont identiques sur les deux figures. Pour le choc de 50 $km\,s^{-1}$, 3 modèles sont présentés : (1) Modèle d'érosion de May et al. (2000) et Barlow (1978) sans piégeage dans le front de choc, (2) idem avec le modèle d'érosion de Tielens et al. (1994), et (3) Destruction des poussières dans le front de choc (érosion des petits grains piégés) suivi d'une destruction dans le choc (vaporisation des gros grains).

Astronomy & Astrophysics manuscript no. art72
October 9, 2008
© ESO 2008

Shocks in dense clouds : II - dust destruction and SiO formation in J shocks

V. Guillet, A. P. Jones and G. Pineau des Forêts

Institut d'Astrophysique Spatiale (IAS), Bâtiment 121, Université Paris-Sud 11 and CNRS, F- 91405 Orsay, France

ABSTRACT

Context. Observations of SiO line emission in stellar jets in star forming regions indicate that silicate dust destruction must be occurring in these dense regions. Current models rely on predictions for dust destruction by sputtering in C-type shock waves. However, J-type shocks may also be relevant to the interpretation of the widely-observed optical line emission from species such as O I and Fe II.

Aims. In this work we explore, for the first time, dust destruction in J-type shocks slower than 50 km s^{-1}.

Methods. We follow the dust trajectories throughout the shock using a model for the dust dynamics that allows us to solve the shock structure and at the same time calculate the degree of dust processing. We include the effects of sputtering in gas-grain collisions, and vaporisation and shattering in grain-grain collisions.

Results. We find that the amount of silicon released into the gas phase is of the order of a few percent. The degree of dust destruction increases with the shock velocity but decreases as the pre-shock density increases. The dominant destructive process is vaporisation, not sputtering, unless some grains are reflected at the shock front, due to the increased magnetic field, and are then further accelerated through a Fermi I process.

Conclusions. Our results compare well with that of C-type shock models. J-type shocks are therefore reasonable candidates for the interpretation of SiO line emission in molecular outlows and jets.

Key words. Shock waves - Magnetohydrodynamics (MHD) - dust, extinction - ISM: clouds - ISM: jets and outflows - ISM: evolution

1. Introduction

Dust constituents such as Fe, Mg and Si are known to be heavily depleted in diffuse and dense clouds. However, observations of supersonic jets and molecular outflows around YSOs attest to the presence of these refractory species in the gas phase, *e.g.* in the form of SiO or Fe II (Giannini et al. 2004, 2006; Nisini et al. 2007). This can be explained by models in which dust is destroyed in the shock waves initiated by jets and outflows.

Previous studies have only considered the destruction of dust in multi-fluid MHD shocks, namely C-type shocks, where the neutral gas is decoupled from the charged fluid composed of ions, electrons and charged grains (*e.g.* see the review by Draine & McKee 1993). It has been shown that such shocks can form SiO through the sputtering of Si from silicate grains, followed by gas-phase reactions between the released Si and gas phase O_2 or OH (Schilke et al. 1997; Gusdorf et al. 2008a,b).

In this study we focus on the processing of dust grains in J-type shocks, *i.e.* mono-fluid shocks characterized by discontinuities (shock fronts) and high post-shock temperatures. Such shocks can exist even in the presence of a transverse magnetic field, provided that the shock velocity is higher than a critical velocity. They are indeed expected to exist at the apex of bow shocks around YSOs where the observed strong lines of Fe II can not be explained within the framework of a C shock model (McCoey et al. 2004). For the first time, we show that dust destruction occurs in J-type shocks at levels comparable to that of C-type shocks of the same velocity, and that this destruction is dominated by vaporisation in grain-grain collisions.

Our paper in organized as follows: Section 2 describes the ingredients needed to calculate the dynamics of dust grains through J shocks, as presented in Guillet et al. (2007) (hereafter Paper I). Section 3 details our model for the processing of dust in gas-grain and grain-grain collisions. Our main results, focused on silicate dust, are presented in Section 4. In Section 5, we compare our predictions for silicate dust destruction with that for C-type shocks.

2. Dust dynamics in J shocks

A molecular cloud is a partially ionised medium embedded in a magnetic field that allows the propagation of various sorts of MHD waves. Among them, magnetosonic waves can propagate, in the charged component of the gas, transversely to the magnetic field lines at a velocity:

$$V_{\rm crit} = \sqrt{c_{\rm s}^2 + \frac{B^2}{4\pi\rho_{\rm c}}} \tag{1}$$

where $c_{\rm s}$ is the sound speed, B is the intensity of the transverse magnetic field and $\rho_{\rm c}$ is the mass of particles per unit volume coupled to the magnetic field. J shocks form when an increase in pressure propagates faster in the gas than the magnetosonic waves can propagate in the charged component of the gas. Therefore the critical velocity, $V_{\rm crit}$, plays the role of a threshold velocity for J shocks, slower shocks being C-type shocks (see Paper I). Owing to the large uncertainty in the intensity of the magnetic field, this critical velocity can vary from 0.2 km s^{-1} ($B = 0$ and $T = 10$ K) to a few tens of km s^{-1}, depending on the pre-shock density and the scaling relation between B and the total proton density $n_{\rm H} = {\rm n(H)} + 2\,{\rm n(H_2)}$. Following Paper I, we take:

$$B\,(\mu{\rm G}) = b\,\sqrt{n_{\rm H}\,({\rm cm^{-3}})}\,, \tag{2}$$

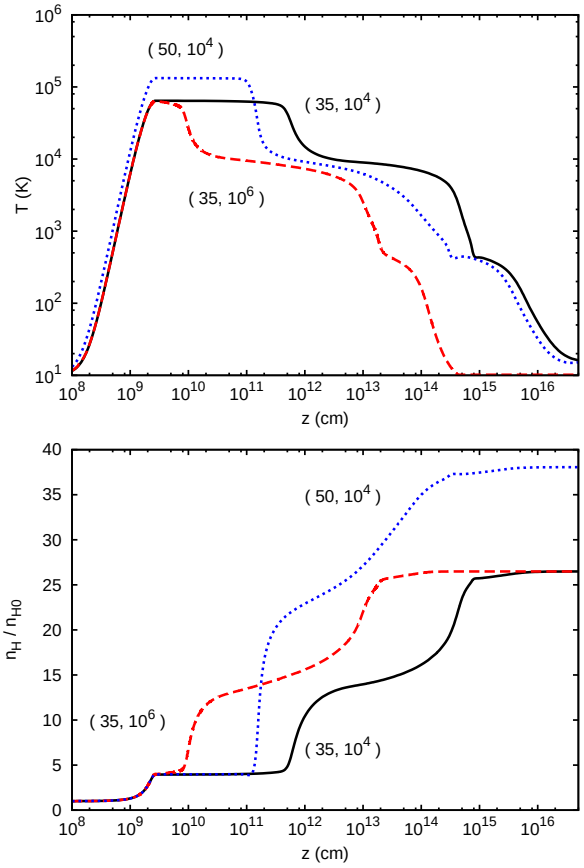


Fig. 1. *(top)* The temperature profiles for J shocks propagating at 35 and 50 km s^{-1} through a molecular cloud ($n_{\rm H}$ = 10^4 cm^{-3}) and at 35 km s^{-1} through a denser cloud ($n_{\rm H}$ = 10^6 cm^{-3}), with a transverse magnetic field given by Eq. 2. *(bottom)* Gas compression profiles for the same shocks. The temperature reached at the shock front and the final compression ratio do not depend on the pre-shock density.

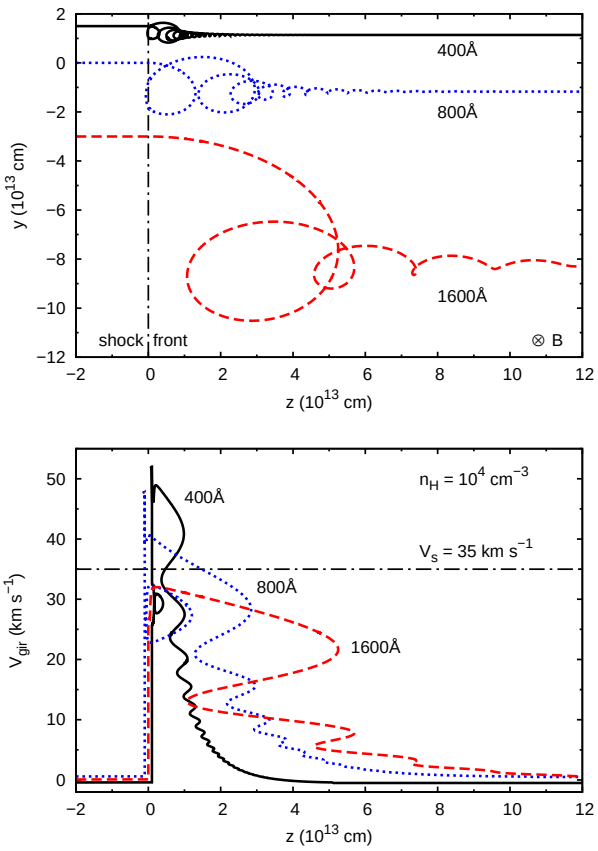


Fig. 2. *(top)* The trajectories of three silicate test grains of radii 400, 800 and 1600 Å through a 35 km s^{-1} J shock propagating in a molecular cloud ($n_{\rm H}$ =10^4 cm^{-3}). The grains gyrate around the magnetic field lines transverse to the shock plane. *(bottom)* The gyration velocity profiles for the same three test grains, *i.e.* the velocity of the grains relative to the gas. The curves have been a little shifted from z = 0 for clarity.

with b = 1 which, at densities of 10^4 and 10^6 cm^{-3}, yields a magnetic field intensity of 100 μG and 1000 μG, and a critical velocity of $\sim$ 20 and 28 km s^{-1}, respectively (see Paper I).

Fig. 1 presents the temperature and density profiles for transverse J shocks with velocities of 35 and 50 km s^{-1}, as obtained with our updated version of the (Flower et al. 2003) shock code. When the gas crosses the shock front it is compressed and heated on a lengthscale of the order of the mean free path, which is resolved here (for $z < 10^9$ cm) by using an artificial viscosity (see Flower et al. 2003, Section 2 therein). Radiative emission in the shock cools and further compresses the gas and the magnetic field lines. The increasing magnetic pressure eventually limits the final compression ratio that can be achieved in the post-shock.

2.1. Grain charge model

The trajectories of dust grains through a shock strongly depend on the evolution of their charge because of the presence of the magnetic field. In Paper I we presented a model for the grain charge calculation, based on the work by Draine & Sutin (1987). Grains are charged by the collection of free electrons and the recombination of ions on their surfaces. This stochastic process of ion and electron collection results in an average charge which is negative and proportional to both the temperature and the grain radius. The sticking coefficient for electrons, $s_{\rm e}$, is taken to be 0.5 so as to take account of the scattering of electrons at low energies, while the recombination of ions is taken to be 100% efficient when ions hit a grain ($s_{\rm i}$ = 1). An effective ion temperature has been defined to enable us to approximately model the effect of grain gyration on the ion collection rate (see Paper I for further details).

Our grain charge model is valid for shocks where secondary electron emission, *i.e.* the ejection of electrons from the grains by primary electrons impacting at energies higher than $\sim$ 20-30 eV, is negligible. In this study we assume that secondary electron emission can be neglected for the shock velocities considered ($\leq$ 50 km s^{-1}).

2.2. The dynamics of test grains

The dynamics of grains was extensively analysed in Paper I, where we focused on C-type shocks. Here we present the detailed trajectories of grains, which are considered as test particles, in J-type shocks. The trajectories of three representative silicate grains in a 35 km s^{-1} J shock propagating through a

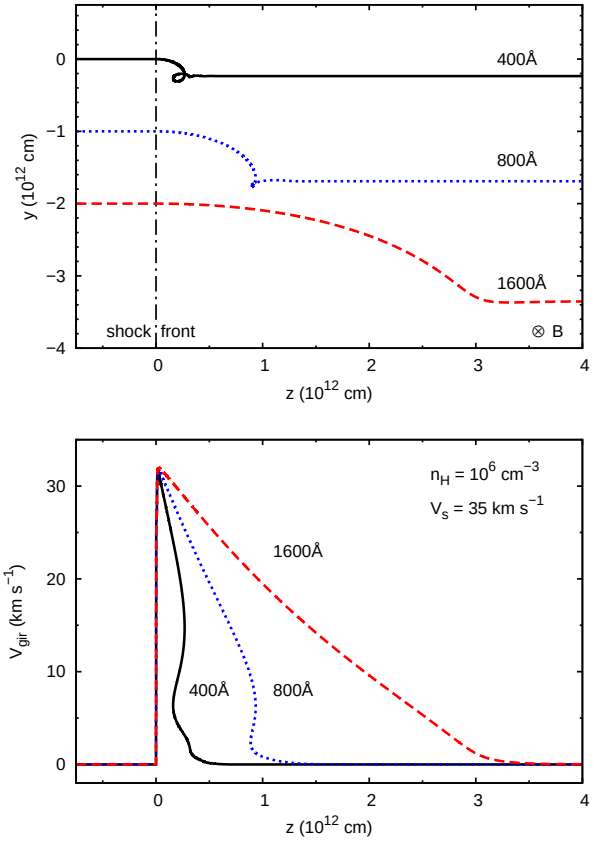


Fig. 3. Same as Fig. 2 but for a denser cloud ($n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}). Due to the strong damping the large grains hardly gyrate at all.

cloud of density 10^4 cm^{-3} are plotted in Fig. 2. These trajectories and velocity profiles are obtained by simultaneously integrating the the laws of motion for the grains and the evolution of their (average) charge through the shock profile given in Fig. 1. The grains enter the shock at a velocity equal to the shock velocity as measured in the shock frame and start gyrating around the magnetic field lines perpendicular to the plane of the figure. The 400 and 800 Å grains are first reflected back into the pre-shock gas by the magnetic field gradient arising from the gas compression (*e.g.* Woitke et al. 1993). The reflected grains then undergo a Fermi I acceleration of their gyration velocity and eventually penetrate into the shock with a velocity higher than the shock velocity (Slavin et al. 2004). The grains are then progressively brought to rest with respect to the gas on a timescale that is roughly proportional to the grain radius and the grain material density. The Fermi I acceleration of grains depends on their size, the grain charge model (*e.g.* the electron sticking coefficient $s_{\rm e}$), the pre-shock density and the shock velocity. At higher densities (*e.g.* 10^6 cm^{-3}, Fig. 3), but for the same shock velocity, the test grains do not experience any magnetic reflection because of the stronger gas drag. The larger grains do not even complete their first gyration before being fully coupled to the gas.

3. Dust processing model

In slow J shocks ($\ll$ 100 km s^{-1}) it is the gyration of grains around magnetic field lines, not the shock temperature, which is responsible for their destruction. Thermal sputtering, *i.e.* the ejection of atoms from the surface of grain cores due to impacts by hot ions, is negligible in the slow shocks studied here. During the damping of their gyration, dust grains can experience a progressive erosion of their surface by the supersonic impacts of gas particles, a process called inertial sputtering. Grain gyration also favours high-velocity (head-on) collisions between grains and, therefore, grain destruction by vaporisation, *i.e.* a partial atomisation of the colliding grains. Vaporisation is always accompagnied by the shattering of both grains, which creates a high abundance of very small grains. Shattering is the dominant process in grain-grain collisions and acts as a limiter to grain vaporisation (Jones et al. 1996).

3.1. The pre-shock dust size distribution

The efficiency of dust destruction in shocks depends on the composition and size distribution of grains in the pre-shock cloud. Following Paper I we consider two distinct populations of non-porous, spherical grain cores of silicate ($MgFeSiO_4$) and carbon (graphite), covered by icy mantles. The mantles are predominantly composed of H_2O, CO_2, NH_3 and CH_3OH, with an average specific density taken to be 1 g cm^{-3}. For an easy comparaison with other works we represent each grain core size distribution as an MRN-type distribution (Mathis et al. 1977): $dn(a)/da \propto a^{\alpha}$ for 100 Å $< a <$ 3000 Å, where $\alpha = -3.5$. Although, our code can be run with any power law or log-normal size distribution. With the MRN-type core size distribution that we adopt all the grains are assumed to be covered, in the pre-shock medium, with an icy mantle of thickness $\sim$ 150 Å independent of their radius (Paper I). To compute the evolution of the dust size distribution, as well as the degree of dust destruction, we must calculate the charge, dynamics and processing of a range of grain sizes. In this study each silicate and carbon dust size distribution is modelled with 8 size bins, with radii running from 3000 Å to 100 Å. Five empty bins are added to each distribution to collect fragments smaller than 100 Å produced by the shattering of dust grains. The smallest fragment allowed has a radius of $\sim$ 5 Å, a value which is not critical for the intensity of dust destruction in our slow shocks. See Paper I for further details on the management of size bins.

3.2. Grain mantle and core erosion

Icy species such as H_2O, which constitute the mantles covering the grain cores, are the first to be removed by sputtering in the shock. If the mantles are completely eroded, and the gyration velocity is larger than $\sim$ 30 km s^{-1} (Tielens et al. 1994), inertial sputtering of the grain cores can result in the release of atoms (*e.g.* C, Fe, Mg and Si) from the dust and into the gas phase.

The sputtering efficiency is determined by the sputtering yield, *i.e.* the probability for an atom to be ejected from the grain surface by an impinging atom or ion. Sputtering yields depend on the atom or ion impact velocity and on the nature of the incident particle as well as the stœchiometric composition of the grain material. For the erosion of the icy mantles we adopt the sputtering yield of Flower & Pineau des Forêts (1994), which is based on the work of Barlow (1978). We also compare our results with those obtained using the sputtering yields for ices derived by Tielens et al. (1994). For the grain core erosion we consider the May et al. (2000) and Tielens et al. (1994) sputtering yields as lower and upper limits, respectively. In calculating the sputtering of the grain cores we take account of the inci-

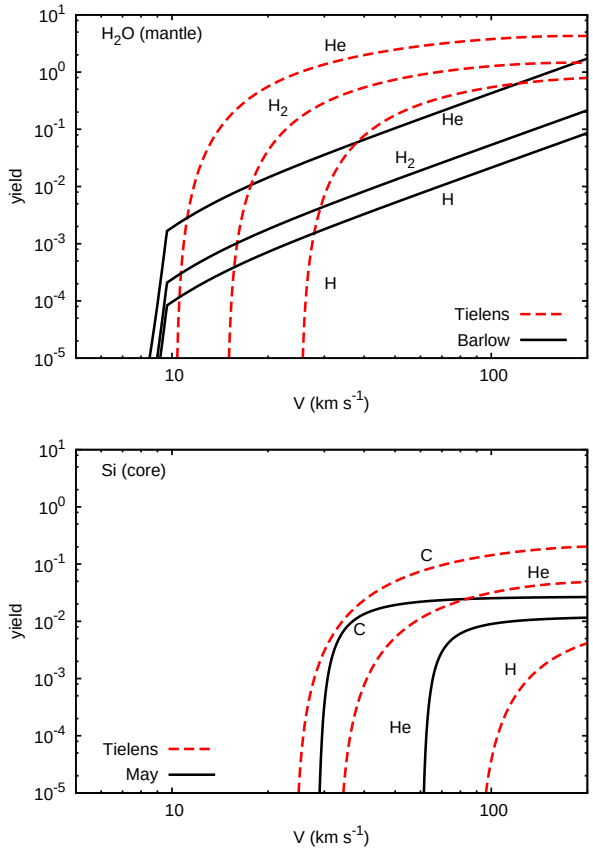


Fig. 4. *(top)* The H_2O ice sputtering yield for incident H, H_2 and He as a function of impact velocity, for the models of Tielens et al. (1994) and Barlow (1978). *(bottom)* The sputtering yield for Si atoms from silicate ($MgFeSiO_4$, olivine-type) grain cores by impinging H, He and C for the models of Tielens et al. (1994) and May et al. (2000). The sputtering by H is taken from Tielens et al. (1994) in both cases. The sputtering yield by H_2 is assumed to be twice that by H. As Si represents only one atom out of 7 in $MgFeSiO_4$, yields from Tielens et al. (1994) averaged over all inicident angles (twice the value for normal incidence) are divided by 7.

dent atoms, principally He, C, O and N, and the most important molecules (CO, H_2O, O_2...). CO turns out to be the dominant sputtering species. For the mantles only the main contributors, H, H_2 and He, are considered. The sputtering yields for mantles and cores used in this paper are presented in Fig. 4.

The relative gas-grain velocity in the shock, which determines the sputtering rate, varies with grain size (see Figs. 2 and 3). The evolution of the mantle thickness is therefore integrated separately for each grain size, starting with a thickness of ~ 150 Å for all grains (see Section 3.1). Once the mantles have been eroded the evolution of the size of grain cores is not followed individually but is calculated from the overall size distribution using the method of Mizuno et al. (1988) presented in Paper I. This approximation is valid as long as sputtering is too weak to significatively modify the grain radii. Our results in Section 4 will justify this hypothesis.

3.3. Shattering and vaporisation of grain cores

Tielens et al. (1994) and Jones et al. (1996) present an extensive theoretical study of the shattering and vaporisation of spherical grains, based on an analysis of the propagation of shock waves in solid materials. They compare their results with laboratory experiments and study the effect of this dust processing in J shocks propagating in the Warm Intercloud Medium. They find that the *nature* of the outcome of a grain-grain collision depends on the relative velocity of the colliding partners, not on the energy involved. Below a threshold velocity of $\sim 2-3$ km s^{-1} the colliding grains will bounce and above this velocity the grains will be shattered. If the impact velocity exceeds ~ 20 km s^{-1}, part or all of the colliding grains can be vaporised. The *mass fraction* of the grains vaporised and/or shattered in the collision is a function of the relevant threshold pressure, energy density, impact velocity, grain specific density and the grain radius-ratio (Tielens et al. 1994; Jones et al. 1996). We adopt this model for grain-grain collisional processing in our study, reminding the reader that the slope of the shattered fragment size distribution, -3.3, is slightly less than the input MRN slope. Based on the results of laboratory experiments (Nagahara & Ozawa 1996; Wang 1999), we further assume that the vaporisation of silicate grains leads to the direct formation of SiO, unlike sputtering which releases Si (Hugues Leroux, private communication).

To calculate the collision rate between grains we use a statistical approach similar to that of Jones et al. (1996). We model the gyration velocity and calculate the average number of grains per unit volume at any point in the shock using two approaches (details can be found in Appendix A):

1. A *simplified model*, which ignores the possibility of grain reflection at the shock front and further assumes that, as soon as they cross the shock front, the grain velocities are isotropic in the gas frame.
2. A more elaborate model where we take into account the fact that dust grains can be reflected back into the pre-shock gas at the shock front (Fig. 2), or may not have the time to complete their first gyration in the shock before being stoppped by the gas (Fig. 3).

Our treatment of grain-grain collisions ignores some aspects of dust processing in the shock. Firstly, and unlike Jones et al. (1996), we do not follow the processing of fragments from the time they are formed in the collision until they are brought to rest with respect to the gas. This approximation is justified because we do not expect the processing of small fragments, during their gyration phase, to be significant for shocks with velocities less than 50 km s^{-1}, either by sputtering (Jones et al. 1996, Fig. 11 therein) or shattering and vaporisation (Borkowski & Dwek 1995; Jones et al. 1996). Secondly, we ignore the destruction of the mantles by vaporisation in grain-grain collisions. Our numerical model is currently unable to handle this because it would require us to track the history of each colliding grain. Thus, we consider that all grains of a given size carry a mantle of the same thickness, whatever their history. Fragments smaller than 100 Å, which are absent from the initial distribution and are only created by the shattering of grains, are assumed to carry no mantles. Finally, we are forced to ignore the processing of the reflected grains during their first giration, *i.e.* before they enter the shock for their second attempt. This is a numerical limitation due to the fact that we need to consider an average grain velocity through the shock (see Appendix A for more details).

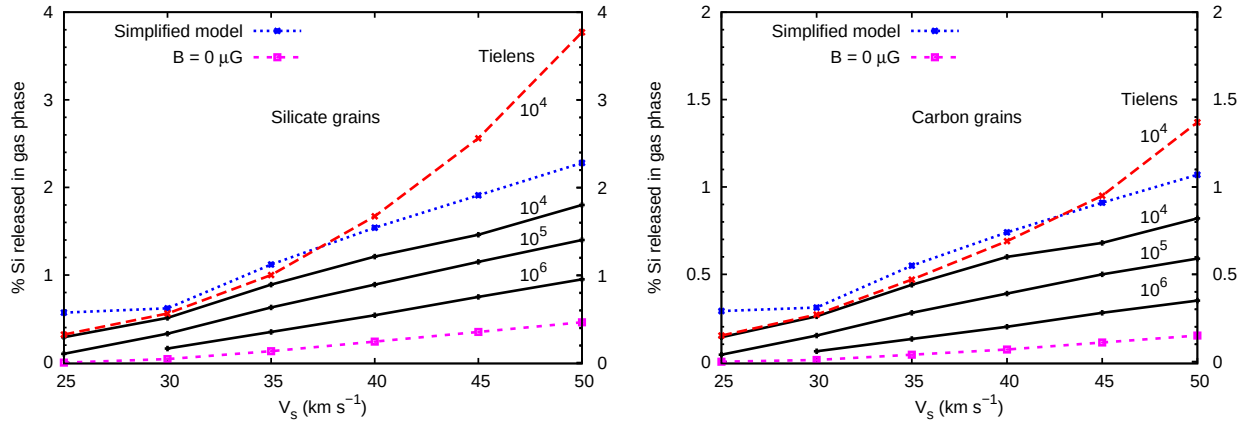


Fig. 5. *(left)* The percentage of silicon released into the gas phase from dust (in the form of atomic Si by sputtering and SiO by vaporisation) as a function of the shock velocity for 3 pre-shock densities ($10^4, 10^5, 10^6$ cm^{-3}). The May et al. (2000) sputtering yields are used, except for the curve labelled "Tielens" where the Tielens et al. (1994) are used. Also shown are the results for our simplified model and a model for a purely hydrodynamical shocks (*i.e.* with $B = 0$). The results for the latter cases are independent of the pre-shock density and the grain charge model used. *(right)* Same results for carbon (graphite) grains.

4. Results

The quantity of silicon and carbon released into the gas phase, as a result of dust destruction in J shocks with velocities ≤ 50 km s^{-1}, is shown in Fig. 5. The degree of destruction is of the order of a few percent and increases with the shock velocity but decreases with increasing pre-shock density. Vaporisation is the dominant destruction process, not sputtering, and is effective at destroying grains at velocities < 30 km s^{-1} where sputtering is insignificant. Sputtering turns out to be negligible ($< 0.01\%$), unless grains are reflected at the shock front (*i.e.* for $n_{\rm H} \geq 10^4$ cm^{-3} and $V_{\rm s} \geq 35$ km s^{-1}) and we use the sputtering yields of Tielens et al. (1994) at the same time, rather than those of May et al. (2000). The fact that the presence of reflected grains only affects the sputtering balance, and not the vaporisation balance, is not strictly physical because we ignore reflected grain processing during the first giration (see § 3.3 and Appendix A)

The decrease in dust vaporisation with increasing pre-shock density is due to the fact that high-velocity (head-on) collisions between large grains, which mostly contribute to the vaporisation, tend to disappear at high densities where the large grains hardly gyrate at all (Fig. 3). Our simplified model, which ignores this effect, therefore tends to slightly overestimate destruction by vaporisation but is good to within a factor of $\sim 2-3$ (see Fig. 5). A lower limit for dust destruction in J shocks can be obtained by assuming that the grains do not gyrate, *e.g.* when no transverse magnetic field is present ($B = 0$). This may also be considered as a limit for dust destruction at very high gas densities where giration disappears (see Fig. 5).

Our simplified model, as well as our hydrodynamical (*i.e.* $B = 0$) model, yield results that are found to be independent of the pre-shock density. This is readily explained in these models by the fact that the average number of collisions experienced by one grain during its coupling to the gas is independent of the pre-shock density: the collision rate scales with $n_{\rm H}$ whereas the damping time scales inversely with $n_{\rm H}$. The linear increase in dust vaporisation with shock velocity, observed in Fig. 5, can be explained in a similar way because the damping timescale, *i.e.* the time during which grain-grain processing occurs, increases linearly with the shock velocity.

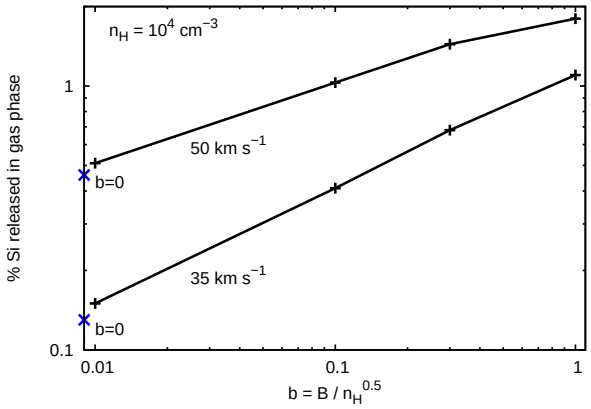


Fig. 6. The percentage of silicon released into gas phase, for 35 and 50 km s^{-1} J shocks propagating into a cloud of pre-shock density 10^4 cm^{-3}, as a function of the factor $b = B/\sqrt{n_{\rm H}}$. The values for pure hydrodynamical shock ($b = 0$, *i.e.* $B = 0$) are shown on the left axis.

The degree of dust destruction strongly depends on the pre-shock magnetic field strength. Fig. 6 shows the fraction of silicate dust destroyed as a function of the transverse magnetic field intensity (through the parameter b, Eq. 2). The factor b can not be much higher than 1 for the propagation of J shocks ($V_{\rm s} > V_{\rm crit}$) in the velocity range considered here. Dust is less readily destroyed in J shocks propagating through weaker transverse magnetic fields. As the magnetic field intensity decreases the grain dynamics more closely resemble that of Fig. 3 rather than Fig. 2: large grains hardly girate, thereby limiting the head-on collisions responsible for grain vaporisation.

Table 1 summarises the destruction of silicate and carbon dust for our two models, for the sputtering yields of (Tielens et al. 1994; May et al. 2000). Apart from the dependance on the sputtering yields, we emphasize that globally dust destruction depends on the charge model, which determines the efficiency of the Fermi I acceleration for the reflected grains.

			V_s (km s^{-1})					
		V_{crit} (km s^{-1})	25	30	35	40	45	50
silicate	$n_H = 10^4$ cm^{-3}	20.7	0.3 %	0.5 %	1.0 %	1 - 2 %	1.5 - 2.5 %	2 - 4 %
	$n_H = 10^5$ cm^{-3}	23.6	0.1 %	0.4 %	0.7 %	1.0 %	1.2 %	1.5 %
	$n_H = 10^6$ cm^{-3}	28.1		0.2 %	0.4 %	0.6 %	0.8 %	1.0 %
	$b = 0$	0.2	0 %	0.05 %	0.15 %	0.25 %	0.35 %	0.5 %
carbon	$n_H = 10^4$ cm^{-3}	20.7	0.15 %	0.3 %	0.4 %	0.6 %	0.7 - 1.0 %	0.8 - 1.4 %
	$n_H = 10^5$ cm^{-3}	23.6	0.05 %	0.15 %	0.3 %	0.4 %	0.5 %	0.6 %
	$n_H = 10^6$ cm^{-3}	28.1		0.05 %	0.1 %	0.2 %	0.3 %	0.4 %
	$b = 0$	0.2	0 %	0.01 %	0.04 %	0.07 %	0.11 %	0.15 %

Table 1. The percentage of silicate dust destruction in J shocks (and thus of Si released into the gas phase) as a function of the shock velocity and pre-shock density, for MRN pre-shock dust size distributions. V_{crit} is the critical velocity for C shocks below which no J shock can exist (Eq. (1)), as calculated in Paper I. Vaporisation is the dominant silicate dust destruction process. No sputtering is found for pre-shock densities greater than 10^5 cm^{-3}. The ranges given in the $n_H = 10^4$ cm^{-3} case give the upper and lower values resulting from the use of the Tielens et al. (1994) and May et al. (2000) sputtering yields, respectively. The results for the case with no magnetic field ($b = 0$) can be considered as the minimum silicate grain destruction, independent of density.

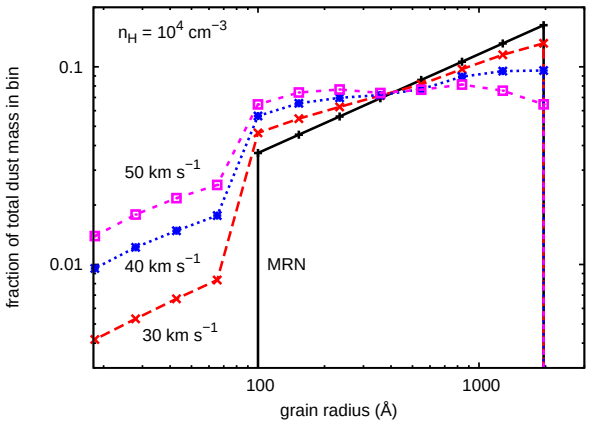


Fig. 7. The silicate dust mass distribution before and after the passage of J shocks propagating through a cloud of density $n_H = 10^4$ cm^{-3}. The results are almost identical for denser clouds with $n_H = 10^5$ and 10^6 cm^{-3} and are similar for carbon grains. However, for carbon the change in the slope of the mass distribution is less pronounced.

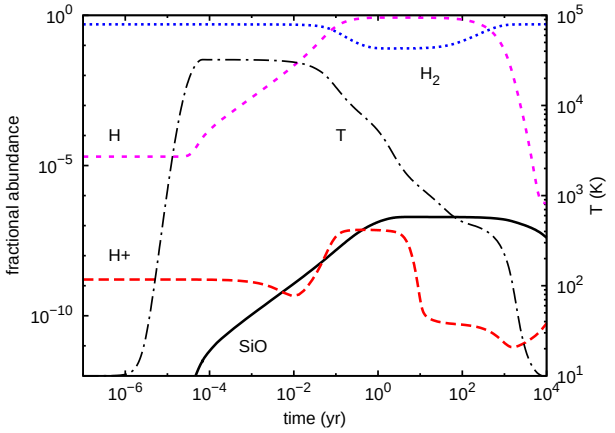


Fig. 8. Chemical evolution in a 25 km s^{-1} J shock propagating through a molecular cloud ($n_H = 10^4$ cm^{-3}). SiO is not produced through gas-phase reactions but directly from the vaporisation of silicate grains. The SiO is progressively removed from the gas phase by accretion onto grain mantles.

The silicate size distribution is clearly affected by the shock, Fig. 7 shows the results of our model. From this it can be seen that numerous small grains are produced by grain shattering and that the slope of the distribution is slightly modified, reaching a flatter mass distribution ($\alpha \simeq 4$ for silicate dust) between 100 and 3000 Å for a 50 km s^{-1} shock.

In a shock SiO can be produced directly in vaporising grain-grain collisions and may subsequently be dissociated in the hot ($T \gg 10^4$ K) post-shock gas. In Figs. 8 and 9 we compare the production of SiO in a 25 km s^{-1} shock, which dissociates H_2 (binding energy ~ 4.5 eV) but not SiO (binding energy ~ 8 eV), with that in a 35 km s^{-1} shock where both molecules are dissociated. In the 25 km s^{-1} shock (Fig. 8) the SiO is produced directly by the vaporisation of the silicate grains and remains in the gas phase. Gas phase chemistry does not intervene in this case in the production of SiO. However, in the 35 km s^{-1} shock (Fig. 9) the SiO produced by vaporisation is soon destroyed by H^+ ions. Only when the recombination of H^+ on grain surfaces becomes important can the SiO, produced by Si + O_2 reactions (Le Picard et al. 2001), survive (the reactant O_2 is itself produced by the reaction between O with OH). In both cases, the gas phase abundance of SiO diminishes when SiO starts to deplete into mantles on the surfaces of grains in the high density post-shock gas.

Fig. 10 gives estimates for the total colum density of SiO, formed in the shock, as a function of gas temperature. The SiO column density is higher in the 25 km s^{-1} shock than in the 30 km s^{-1} shock because the 25 km s^{-1} shock does not dissociate SiO (SiO from vaporising collisions), whereas the 30 km s^{-1} shock does and can not reform as much SiO from pure gas-phase reactions.

5. Concluding remarks

Our main conclusion is that dust destruction in slow J shocks ($\leq$ 50 km s^{-1}) is significant (at the level of a few percent) and is caused by vaporisation in grain-grain collisions. It slowly increases with shock velocity but decreases with increasing cloud density. Dust sputtering is negligible (< 0.01%) unless we use the yields of Tielens et al. (1994) and grains are efficiently accelerated by a Fermi I process at the shock front, a process which is size and model dependent. Whether by vaporisation or sputtering, it is the dynamics of grains which controls the amount of dust destruction. The shock model also takes into account the evolution of the dust size distribution as a result of the production of abundant small grains through the shattering of large grains in grain-grain collisions.

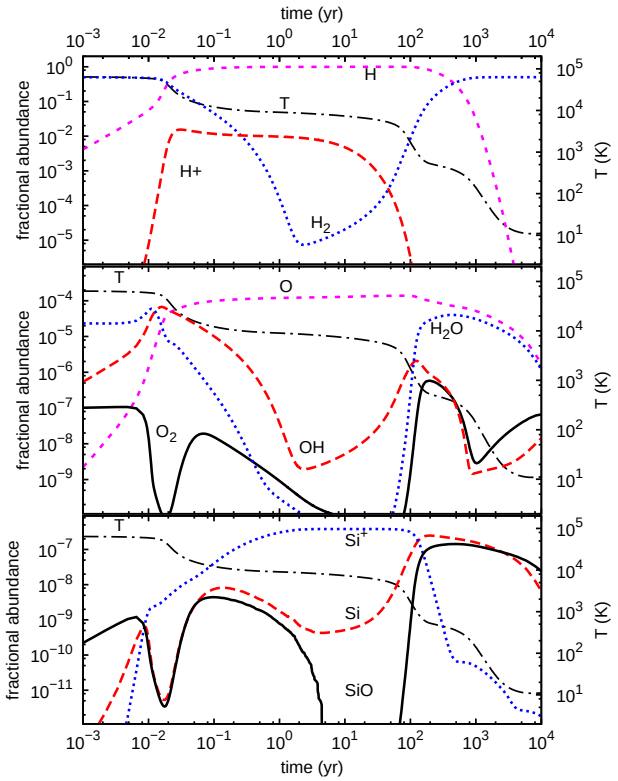


Fig. 9. Same as Fig. 8 but for a dissociative 35 km s^{-1} J shock. The SiO produced by grain vaporisation is dissociated by H^+ and reformed later by the gas-phase reaction of Si with O_2 and OH as soon as the ionisation fraction is low enough. Finally, SiO accretes onto the surfaces of grains in the form of icy mantles. In our work we have adopted an initial gas-phase fractional abundance for O_2 of $X(O_2) = 10^{-7}$, in accordance with the recent SWAS results (Larsson et al. 2007).

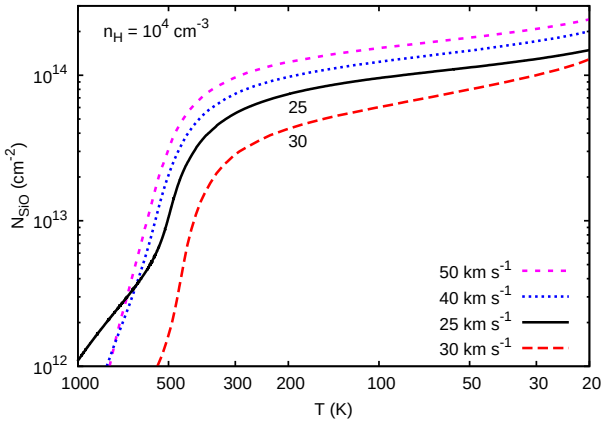


Fig. 10. SiO column density for J shocks with velocities 25, 35, 40 and 50 km s^{-1} propagating into a cloud of total proton density 10^4 cm^{-3} for the May *et al.* sputtering yields as a function of the gas temperature.

The efficiency of dust destruction in C shocks was one of the strong arguments in favour of these models in the interpretation of the SiO observed in molecular outflows around newborn stars. As shown in Fig. 11 our results for silicate destruction in J shocks are of the same order of magnitude as those of Gusdorf et al. (2008a) for C shocks, though somewhat lower but still within a factor of 2-3 (Fig. 11). This is a surprising result because, even if both models use the same May et al. (2000) sputtering yields, Gusdorf et al. (2008a) only include the destruction of dust grains by sputtering, not vaporisation. Unlike in C shocks, grains can be destroyed in ∼25 km s^{-1} J shocks due to their high-velocity gyration around the magnetic field lines. J-type shocks therefore seem to also be a reasonable candidate for the interpretation of SiO observations from outflows, even at low shock velocities. In order to better compare our results with observations we are currently planning to calculate SiO emissivities and line profiles using a LVG model (Gusdorf et al. 2008a,b).

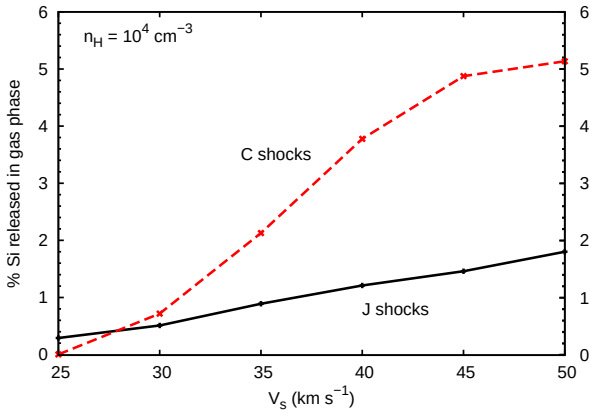


Fig. 11. Percentage of Si released into the gas phase as a function of the shock velocity for C-type (Gusdorf et al. 2008a) and J-type shocks (this study) propagating in a molecular cloud ($n_H = 10^4$ cm^{-3}, $B = 100\mu$G, *i.e.* $b = 1$). The May et al. (2000) sputtering yields were used in both cases. In the work of Gusdorf et al. (2008a), a fractional abundance $X(PAH) = 10^{-6}$ is necessary in order to raise the magnetosonic velocity to ∼ 60 km s^{-1} (see Paper I, Table 1) and allow for the existence of C-shocks as fast as 50 km s^{-1}. Both of these shock models show the same order of magnitude for silicate dust destruction (to within a factor 2-3).

In a following article (Paper III), we will consider the processing of dust in C-type shocks, including the sputtering, vaporisation, shattering and coagulation of grains, and their feedback onto the shock structure.

Acknowledgements. We wish to thank Hugues Leroux for many useful discussion on the erosion and vaporisation of silicate materials.

References

Barlow, M. J. 1978, MNRAS, 183, 367
Borkowski, K. J. & Dwek, E. 1995, ApJ, 454, 254
Draine, B. T. & McKee, C. F. 1993, ARA&A, 31, 373
Draine, B. T. & Sutin, B. 1987, ApJ, 320, 803
Flower, D. R., Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., & Cabrit, S. 2003, MNRAS, 341, 70
Flower, D. R. & Pineau des Forêts, G. 1994, MNRAS, 268, 724
Giannini, T., McCoey, C., Caratti o Garatti, A., et al. 2004, A&A, 419, 999
Giannini, T., McCoey, C., Nisini, B., et al. 2006, A&A, 459, 821
Guillet, V., Pineau Des Forêts, G., & Jones, A. P. 2007, A&A, 476, 263
Gusdorf, A., Cabrit, S., Flower, D. R., & Pineau Des Forêts, G. 2008a, A&A, 482, 809
Gusdorf, A., Pineau des Forêts, G., Cabrit, S., & Flower, D. R. 2008b, ArXiv e-prints, 803
Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. J. 1996, ApJ, 469, 740
Larsson, B., Liseau, R., Pagani, L., et al. 2007, A&A, 466, 999
Le Picard, S. D., Canosa, A., Pineau des Forêts, G., Rebrion-Rowe, C., & Rowe, B. R. 2001, A&A, 372, 1064
Mathis, J. S., Rumpl, W., & Nordsieck, K. H. 1977, ApJ, 217, 425

May, P. W., Pineau des Forêts, G., Flower, D. R., et al. 2000, MNRAS, 318, 809
McCoey, C., Giannini, T., Flower, D. R., & Caratti o Garatti, A. 2004, MNRAS, 353, 813
Mizuno, H., Markiewicz, W. J., & Voelk, H. J. 1988, A&A, 195, 183
Nagahara, H. & Ozawa, K. 1996, Geochim. Cosmochim. Acta, 60, 1445
Nisini, B., Codella, C., Giannini, T., et al. 2007, A&A, 462, 163
Schilke, P., Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R. 1997, A&A, 321, 293
Slavin, J. D., Jones, A. P., & Tielens, A. G. G. M. 2004, ApJ, 614, 796
Tielens, A. G. G. M., McKee, C. F., Seab, C. G., & Hollenbach, D. J. 1994, ApJ, 431, 321
Wang, J. 1999, Geochim. Cosmochim. Acta, 63, 953
Woitke, P., Dominik, C., & Sedlmayr, E. 1993, A&A, 274, 451

Appendix A: Modelling grain-grain collisions

The aim of our study is to estimate the degree of dust processing in J shocks due to gas-grain and grain-grain collisions as well as the feedback of this processing onto the shock structure and the gas phase chemistry. As the code calculates the intensity of dust processing at the same time it solves the shock structure, we can not manage any backward movement of dust grains through the shock like those of Fig. 2. We must therefore model the evolution of the velocity of each grain size through the shock in terms of an average gyration velocity.

In our code we consider two cases: a simplified model and a more elaborate model. In the simplified model, which follows the approach adopted in Paper I, we ignore the detailed dynamics of the grains in the shock. The evolution of the gyration velocity is integrated as defined in Paper I, where we assume that the grain velocities are isotropic in the gas frame as soon as they enter the shock. As a consequence, the compression of the grain fluids follow that of the magnetic field, *i.e.* that of the gas. The processing resulting from the collisions of grains of differing sizes with gyration velocities v_1 and v_2 is calculated as the average processing resulting from four collisions with relative velocities $v_1 + v_2$, $|v_2 - v_1|$ and $(v_1^2 + v_2^2)^{0.5}$ counted twice. This model has the interesting property that the results are independent of the pre-shock density as well as the charge model for dust grains.

In the more elaborate model, designed for high density clouds ($n_\mathrm{H} \geq 10^4$ cm^{-3}), the dynamics of the grains of a given size is divided into two phases (see Fig. A.1) : 1) an inertial phase, where the grain velocities are not yet isotropic, followed by 2) a gyration phase, which corresponds to our simplified model. We choose to distinguish these two phases at the point where grains make their first gyration in the shock. Fig. A.1 shows how our more elaborate model can reproduce the average evolution of the gyration velocity of all dust grains through the shock, both at low ($n_\mathrm{H} = 10^4$ cm^{-3}) and high ($n_\mathrm{H} = 10^6$ cm^{-3}) pre-shock densities. When the two colliding grains are in their inertial phase, there exist no head-on collisions because all grains basically move forward, so that impact velocities, $|v_2 - v_1|$, are low. The grains move faster than the ions during this phase and the compression ratio of the grain fluids is therefore lower than the compression of the ions by a factor $V_\mathrm{i}/V_\mathrm{z}$, where V_i is the velocity of ions and V_z the component of the grain velocity $\mathbf{V}$ in the shock direction. Both these effects tend to reduce the intensity of vaporisation in this phase compared to our simplified model. When at least one of the colliding grains is in its gyration phase our simplified model then applies and we average the processing over the outcome of the four considered impact velocities. The presence of reflected, and therefore accelerated, grains tends to increase dust destruction. Modelling the average dynamics we have to ignore the first gyration of the grains and apply the two grain dynamic phases from the moment they definitively enter the shock (see Fig. A.1). With this approximation we underestimate the number of grains per unit volume at the shock front. This slightly lowers the intensity of dust processing by vaporisation and shattering, but not by inertial sputtering which is inefficient before the acceleration by the Fermi I process takes place.

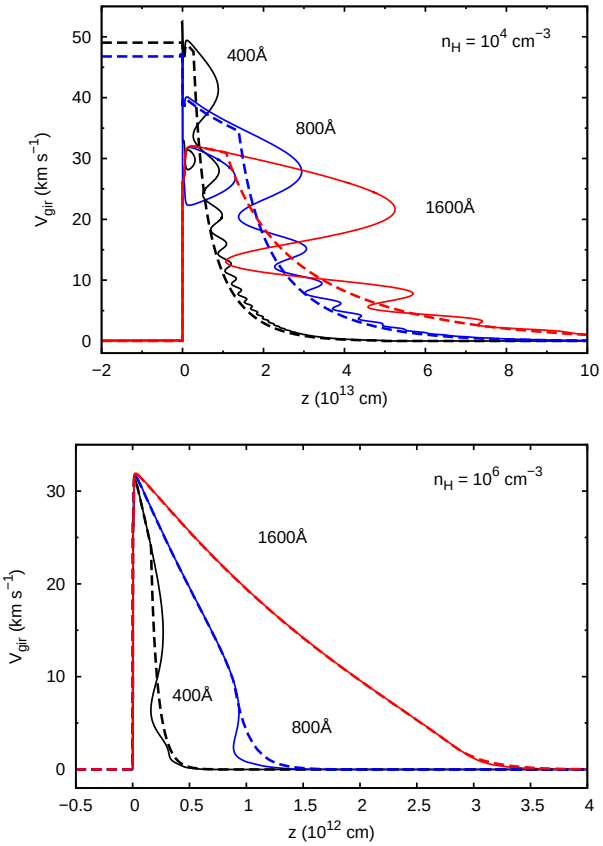


Fig. A.1. The results of our more elaborate model for the gyration velocity of dust grains (dashed lines) compared to the gyration velocity presented in Figs. 2 and 3 (solid lines) for 35 km s^{-1} shocks. The reflected grains are injected into the shock with the velocity they have when they finally enter the shock. Here we distinguish two phases: 1) an inertial phase where the grain is launched in the shock and our model strictly follows the detailed dynamics of grains, which is followed by 2) a gyration phase where our model only represents the average gyration velocity.

Our calculation of the shock structure therefore coherently takes into account the dust charging, dynamics and processing. This is done in five steps:

1. We solve the steady-state chemistry and grain charge for the pre-shock cloud, assuming a gas temperature of 10 K and a fixed dust mantle composition (see Paper I).
2. We calculate the shock profile with the Flower et al. (2003) shock code, starting from the pre-shock steady-state conditions and assuming that the dust follows the motion of ions with no processing (Fig. 1).
3. We integrate the dynamics of the silicate and carbon grains as test particles through this shock profile in order to allow backward motion of the dust grains (*e.g.* Fig. 2)..

4. The resulting trajectories and velocity profiles are used to define the relevant parameters for the integration of the average gyration velocity of the grains through the shock (Fig. A.1): position in the shock separating the inertial phase from the gyration phase and entrance velocity for the reflected grains.
5. We integrate the shock structure using the conservation equations governing the physics and chemistry in the shock and couple them with the calculation of grain charge, average dynamics and processing.

Chapitre 10

Coagulation des poussières dans les chocs C

*Les observations montrent qu'une croissance des grains a lieu dans le milieu interstellaire (*cf. *chapitre 1). Cette croissance pourrait être qualitativement expliquée par la coagulation entre grains et l'adsorption de manteaux glacés ou peut-être organiques à la surface des grains. Pour être efficace, la coagulation exige l'existence d'un champ de vitesse modéré entre les différentes tailles de grain (c'est-à-dire inférieur à la vitesse limite de coagulation qui est fonction de la taille des grains,* cf. *chapitre 1). Dans les chocs C*[1] *de basse vitesse, les faibles différentiels de vitesse que la friction du gaz impose aux grains dans la queue du choc sont propices à la coagulation des grains. Le champ de vitesse n'est pas le seul critère d'efficacité de la coagulation. Le temps caractéristique qui s'écoule entre deux collisions pour grain donné étant inversement proportionnel à la densité, il faut également que le nombre de poussières par unité de volume soit suffisamment élevé.*

Dans ce chapitre, nous nous limitons à estimer, avec un modèle simplifié de coagulation, si la coagulation dans les chocs C lents ($V_s \leq 10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$) traversant des nuages denses ($n_H = 10^6$ $\mathrm{cm^{-3}}$) permet 1) de faire croître significativement la taille des grains, 2) de faire disparaître les fragments produits, et 3) de reformer les gros grains détruits par fragmentation.

10.1 Modèle physique de coagulation

Dans notre modèle de poussières, tous les grains ont des cœurs réfractaires, homogènes (non poreux) et sphériques, et sont recouverts d'une certaine épaisseur de glaces (*cf.* chapitre 4). Notre modèle de coagulation est quant à lui basé sur les simplifications suivantes :

- Deux grains de rayon a_1 et a_2 entrant en collision à la vitesse ΔV
  1. coagulent avec un rendement de 100% si la vitesse d'impactΔV est inférieure à une vitesse limite de coagulation :

$$V_{\mathrm{limite}}^{\mathrm{coag}} = V_{\mathrm{coag}} \times \min(a_1, a_2)^{-5/6}\,, \tag{10.1}$$

1. La coagulation est négligeable dans les chocs J car ceux-ci, mono-fluides, n'imposent pas de différentiels de vitesse entre les grains, en dehors de la phase de giration qui est dominée par la fragmentation des poussièress.

où $V_{\rm coag}$ est un paramètre choisi égal à 0,4 (Poppe & Blum, 1997).

2. se fragmentent mutuellement si la vitesse d'impact est supérieure à la vitesse seuil de fragmentation, qui dépend de la composition du grain. Dans le modèle de Jones *et al.* (Jones et al. (1996)), elle vaut 2,7 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ pour des collisions entre grains silicatés ou entre grains silicatés et carbonés, et 1,2 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ entre grains carbonés. La fraction de masse de chaque grain fragmentée est fonction de ΔV (*cf.* chapitre 9).
3. rebondissent l'un sur l'autre si $V_{\rm limite}^{\rm coag} \leq \Delta V < V_{\rm seuil}^{\rm frag}$.

- Les grains carbonés ne peuvent pas coaguler avec les grains silicatés. Ce modèle sous-estime donc l'intensité de la coagulation [1] ;
- Deux grains de même nature (silicatés ou carbonés) de masse m_1 et m_2 qui coagulent forment un grain homogène et sphérique de masse $m_1 + m_2$ enrobé d'un manteau de glace dont l'épaisseur est imposée par la taille du grain coagulé. Notre modèle n'assure donc pas la conservation de la matière composant les manteaux pendant la coagulation et sous estime la section efficace des grains coagulés.

10.2 Modèle numérique

10.2.1 Algorithmes à une et deux boîtes collectrices

La coagulation des poussières se traduit numériquement par des échanges de masse de poussières entre les différentes boîtes de taille de nos distributions de poussières. L'équation (4.3) définit la relation entre le nombre de boîtes $k_{\rm max}$ et les bornes a_+ et a_- de la distribution en taille. Elle peut s'écrire sous forme inversée :

$$k_{\rm max} = 3\,\frac{\ln\left(a_+/a_-\right)}{ln(1/\eta)}\,, \tag{10.2}$$

où

$$\eta = m_{(k+1)+}/m_{k+} < 1 \tag{10.3}$$

est le rapport des bornes supérieures de masse de deux boîtes consécutives.

L'algorithme de coagulation à une boîte collectrice nécessite un nombre de boîtes minimal $k_{\rm max}^{\rm coag}$ pour fonctionner :

$$k_{\rm max}^{\rm coag} = 3\,\frac{\ln\left(a_+/a_-\right)}{\ln\left(2\right)}\,. \tag{10.4}$$

Il faut en effet que le produit de la coagulation de deux grains d'une même boîte passe dans la boîte supérieure (c'est-à-dire $m_{(k+1)+} + m_{(k+1)+} \geq m_{k+}$ soit $1/\eta \leq 2$), sans quoi la modélisation de la croissance des grains serait réduite à un simple transfert des petits grains dans les boîtes des gros grains sans apparition de grains de taille supérieure. Ce critère impose ~ 10 boîtes par ordre de grandeur de la distribution en rayon, ou ~ 3 boîtes par ordre de grandeur en masse. Pour notre distribution initiale MRN sur [100 Å : 3000 Å], un minimum

1. Ce défaut pourrait être corrigé en modifiant la section efficace de collision des grains.

de 15 boîtes par distribution en taille est exigé, soit 30 boîtes pour les deux distributions silicatées et carbonées.

Cet algorithme a été légèrement amélioré de manière à diminuer le nombre de boîtes nécessaire à son fonctionnement. Nous ne pouvons pas en effet nous permettre d'utiliser beaucoup de boîtes car chaque boîte supplémentaire est lourde en temps de calcul. A la différence des publications habituelles sur la coagulation, nous associons en effet à chaque boîte une mutiplicité de variables (composantes de la vitesse, distribution de charge) qui sont non pas calculées mais intégrées au sein d'un réseau d'équations qui définissent la structure du choc. Ce couplage complet de la poussière, du gaz et du champ magnétique empêche actuellement d'utiliser plus de quelques dizaines de boîtes pour l'ensemble des distributions carbonées et silicatées.

Notre algorithme actuel se base sur deux boîtes collectrices qui assurent un fonctionnement correct dès que $1/\eta \leq 2,8$, c'est-à-dire pour un minimum de 6-7 boîtes par ordre de grandeur en rayon de la distribution. Nous montrons dans cette section comment nous avons testé l'efficacité de cet algorithme à deux boîtes à l'aide des solutions analytiques autosimilaires de l'équation de coagulation de Smoluchowski. La méthode numérique de collecte des grains coagulés dans deux boîtes collectrices est présentée à l'annexe F.5.

10.2.2 Equation de coagulation de Smoluchowski

L'équation de Smoluchowski (1916) décrit sous forme différentielle l'évolution par coagulation d'une distribution en taille continue de grains. Si on note $n(m,t)$ le nombre de grains de masse comprise entre m et $m+\mathrm{d}m$ à l'instant t, et $K(m,m')$ le *kernel* de collision, c'est-à-dire le taux par unité de volume de collisions aboutissant à la coagulation entre deux grains de masse m et m', alors l'évolution de la distribution en taille des poussières sous l'effet de la coagulation s'écrit (Smoluchowski, 1916; Menon & Pego, 2004) :

$$\frac{\partial n(m,t)}{\partial t} = \frac{1}{2}\int_0^m K(m', m-m')\, n(m',t)\, n(m-m',t)\, \mathrm{d}m' - n(m,t)\int_0^\infty K(m',m)\, n(m',t)\, \mathrm{d}m' \,. \quad (10.5)$$

Cette équation ne fait aucune hypothèse *a priori* sur les processus physiques responsables des collisions entre grains ni sur l'efficacité de la coagulation lors des collisions. La microphysique à l'œuvre doit être traduite dans l'expression du kernel K. Pour des collisions purement géométriques entre grains sphériques, avec un rendement de collage de 100 %, $K = \pi(a+a')^2\Delta V$ où $a \propto m^{1/3}$ et $a' \propto m'^{1/3}$ sont les rayons respectifs des grains de masse m et m' et ΔV la vitesse relative entre ces deux tailles de grains. Mais K pourrait aussi dépendre d'autres paramètres comme les charges portées par les poussières pour tenir compte de l'interaction coulombienne entre grains chargés.

Il n'existe pas de solution générale à l'équation de Smoluchowski pour un kernel quelconque (ni même pour le kernel géométrique). Ces solutions doivent être trouvées par intégration numérique et c'est justement l'objet de notre algorithme à deux boîtes collectrices. Il existe cependant des solutions analytiques pour certains kernels qui n'ont pas forcement un sens physique : le kernel constant $K = 2$, le kernel additif $K = m + m'$ et le kernel

multiplicatif $K = m \times m'$. Les solutions de l'équation de Smoluchowski pour ces kernels ont la propriété d'être auto-similaires et sont donc facilles à manipuler. Elles sont très utiles pour tester des algorithmes de coagulation et vérifier que ces algorithmes ne divergent pas (Mizuno et al., 1988). C'est uniquement dans ce cadre que nous allons les utiliser.

10.2.3 Test de l'algorithme de coagulation

Nous allons tester notre algorithme de coagulation à deux boîtes en comparant l'évolution temporelle de la solution numérique de notre modèle de coagulation avec la solution analytique qui lui correspond, pour deux kernels ayant des solutions analytiques auto-similaires.

Kernel constant

Le kernel constant ($K = 2$) ne décrit aucune situation physique crédible. Il est difficile de concevoir que le taux de collision par unité de volume soit indépendant de la taille des grains. Ce kernel va cependant nous permettre d'évaluer la qualité de notre algorithme de coagulation. Pour cela, nous remplaçons dans notre algorithme numérique de coagulation le taux de collision par unité de volume $\sigma \Delta V$ par le nombre 2.

La solution auto-similaire de l'équation continue de Smoluchowski pour le kernel constant est (Menon & Pego, 2004) :

$$n_{\mathrm{C}}(t, m) = \frac{1}{t^2}\, \mathrm{e}^{-m/t}\,. \tag{10.6}$$

La masse moyenne $\tilde{m}$ des grains de cette distribution auto-similaire est proportionnelle au temps : $\tilde{m} = 1 + t$. Les solutions auto-similaires sont des solutions adimensionnées. Dans cette formulation mathématique, les grandeurs m et t et n symbolisent respectivement la masse d'une particule, le temps, et le nombre de particules par unité de volume et par intervalle de masse, mais sont en fait sans dimension. La dimension de ces grandeurs n'a aucune importance quand il s'agit de tester un algorithme de coagulation. Ce n'est qu'un problème numérique, dont la signification physique est secondaire.

Pour reproduire numériquement l'évolution de cette solution auto-similaire, nous modélisons la distribution $n_{\mathrm{C}}(t, m)$ à $t = 1$ par une série géométrique de $k_{\max}$ boîtes de taille. Nous remplissons initialement chaque boîte k avec la densité de masse ρ_k :

$$\rho_k = \int_{m_{k-}}^{m_{k+}} m\, n_{\mathrm{C}}(1, m) = \int_{m_{k-}}^{m_{k+}} m\, \mathrm{e}^{-m}\, \mathrm{d}m\,,$$

$$\rho_k = (1 + m_{k-})\, \mathrm{e}^{-m_{k-}} - (1 + m_{k+})\, \mathrm{e}^{-m_{k+}}\,. \tag{10.7}$$

Le test de l'algorithme s'effectue avec une distribution initiale de masse sur 9 ordres de grandeur ($2.10^{-6} \leq m \leq 2.10^{3}$), soit 3 ordres de grandeur pour la distribution en rayon. Nous traçons ensuite la solution analytique continue $n_{\mathrm{C}}(t, m)$ et la solution numérique en boîtes de taille au temps maximal que notre modèle numérique nous permet d'atteindre sans perdre de précision [1].

1. Les solutions analytique et numérique ne sont pas directement comparables. En effet, dans notre modèle numérique $n(t, m) = \mathrm{d}n/\mathrm{d}m = A\, m^{\beta}$ (*cf.* annexe A de l'article 2, page 193). En travaillant avec des boîtes de taille, nos points sont tracés pour les masses moyennes $\tilde{m}_k$ des grains de chaque boîte k, ce qui

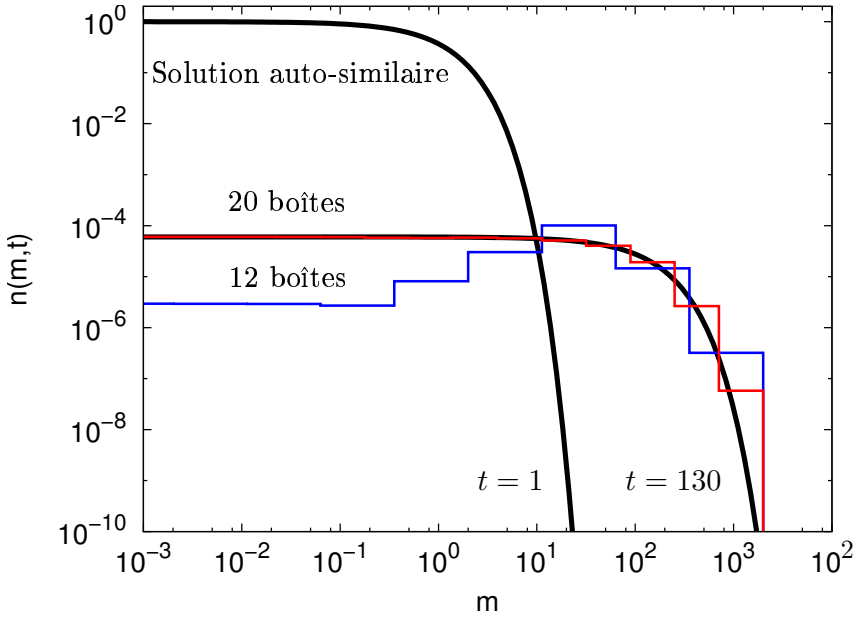


FIGURE 10.1 – Comparatif entre la solution numérique et la solution analytique du kernel constant $K = 2$ de l'équation de Smoluchowski à un temps t ~ 130. La solution numérique suit la solution analytique dès que la distribution compte 20 boîtes pour 9 ordres de grandeur en masse.

La figure 10.1 montre comment notre algorithme à deux boîtes collectrices arrive à suivre la solution analytique du kernel constant de Smoluchowski entre $t = 1$ et $t = 130$, soit pour une croissance d'un facteur 130 de la masse moyenne (ou un facteur 5 en rayon). Il faut pour cela un minimum de 20 boîtes, c'est-à-dire une largeur logarithmique des boîtes $\eta \simeq 1/2.8$. Un algorithme à une seule boîte collectrice exige d'office au moins 30 boîtes ($\eta = 1/2$) pour fonctionner correctement sur 9 ordres de grandeur en masse. Remarquons que si le nombre de boîtes est inférieur au minimum requis (par exemple avec 12 boîtes, Fig. 10.1), l'algorithme de coagulation tend à surestimer la croissance des grains de taille intermédiaire aux dépens de la population des très petits grains qui se trouvent beaucoup trop déplétés. Ceci est un défaut bien connu des algorithmes de coagulation qui emploient trop peu de boîtes (Ohtsuki et al., 1990).

---

nous donne $k_{\max}$ points de coordonnées $(\tilde{m}_k, A\,\tilde{m}_k^{\beta})$. La constante A se calcule facilement connaissant ρ_k et $\tilde{m}_k$:

$$\rho_k \;=\; \int_{m_{k-}}^{m_{k+}} m \times A\,\frac{\mathrm{d}n(m)}{\mathrm{d}m}\,\mathrm{d}m = A\,\frac{m_{k+}^{2+\beta_k} - m_{k-}^{2+\beta_k}}{2+\beta_k}\,,$$

d'où l'ordonnée à tracer des points d'abscisse $\tilde{m}_k$: $n(t,\tilde{m}_k) = A\,\tilde{m}_k^{\beta} = \rho_k\,\frac{2+\beta_k}{m_{k+}^{2+\beta_k} - m_{k-}^{2+\beta_k}}\,\tilde{m}_k^{\beta}$

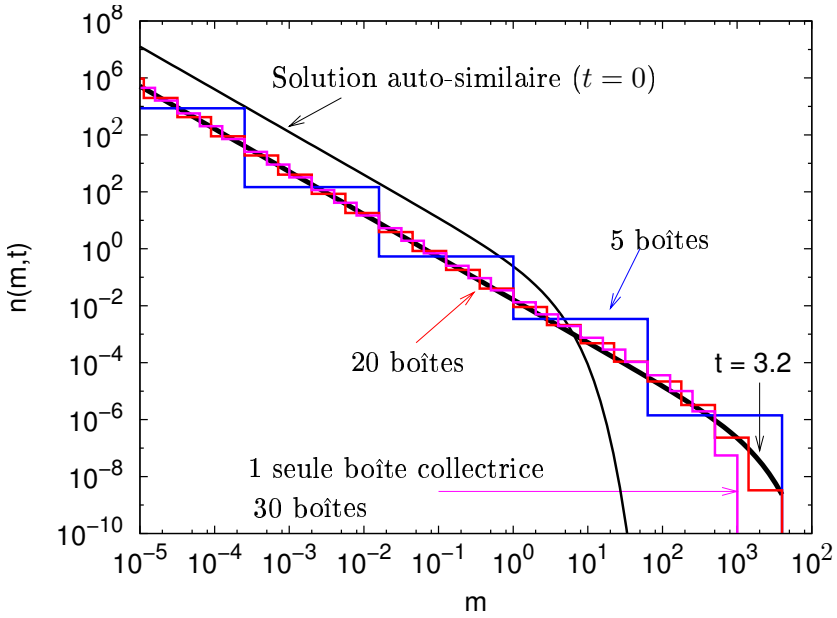


FIGURE 10.2 – Comparaison entre la solution numérique et la solution analytique du kernel additif $K = m + m'$ de l'équation de Smoluchowski à un temps t $\sim$ 3,2. Un nombre de 20 boîtes (rouge) convient, mais la solution est également convenable pour 5 boîtes seulement. Un modèle à une seule boîte collectrice diverge encore avec 30 boîtes.

Kernel additif

Pour un kernel additif $K = m + m'$, la solution auto-similaire de l'équation continue de Smoluchowski est (Menon & Pego, 2004) :

$$n_{\rm A}(t, m) = \frac{{\rm e}^{-t}}{\sqrt{2\pi\, m^3}}\, {\rm e}^{-\frac{m}{2}{\rm e}^{-2t}}\,. \tag{10.8}$$

Nous rappelons que les grandeurs n, t et m sont sans dimensions. La masse moyenne $\tilde{m}$ des grains de cette distribution auto-similaire évolue exponentiellement avec le temps : $\tilde{m} = {\rm e}^{2t}$. Nous construisons la distribution initiale des boîtes à l'état initial $t = 0$ comme suit :

$$\rho_k \;=\; \int_{m_{k-}}^{m_{k+}} m\, n_{\rm A}(0, m) = \int_{m_{k-}}^{m_{k+}} \frac{e^{-m/2}}{\sqrt{2\pi m}}\, {\rm d}m\,,$$

$$\rho_k = {\rm erf}\left(\sqrt{\frac{m_{k+}}{2}}\right) - {\rm erf}\left(\sqrt{\frac{m_{k-}}{2}}\right), \tag{10.9}$$

où ${\rm erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x {\rm e}^{-y^2}\, {\rm d}y$ est la fonction d'erreur. La figure 10.2 montre que notre modèle de coagulation fonctionne très bien avec ce kernel, même avec seulement 5 boîtes, pour une croissance de la masse moyenne des grains d'un facteur ${\rm e}^{2\times 3.2} \simeq 600$ (soit un facteur 8 en rayon).

Conclusions L'algorithme de coagulation à deux boîtes collectrices se comporte très bien pour nos besoins actuels. Il est moins gourmand en nombre de boîte que l'algorithme à une

boîte collectrice. Le nombre de boîtes exigé pour une distribution MRN sur [100 Å : 3000 Å] est de 10, soient 20 boîtes pour nos deux distributions MRN de grains silicatés et carbonés. Nous devons encore y ajouter les boîtes vides collectrices des fragments (9 boîtes de 100 à 5 Å) et des gros grains coagulés (1 boîte de 3000 à $\sim$ 5000 Å) de chaque population de grains, ce qui nous fait un total de 40 boîtes.

Kernel multiplicatif - gélation

Pour le kernel multiplicatif $K = m \times m'$, il existe également une solution auto-similaire qui diverge au bout d'un temps fini [1]. Ce kernel a une signification physique simple : il se produit un phénomène de *gélation*, l'agglomération soudaine d'une fraction très importante des particules en un bloc de taille importante. Ce kernel n'a pas été testé avec notre modèle numérique, mais le phénomène physique de gélation étant potentiellement très intéressant pour l'étude de la croissance des grains dans le milieu interstellaire, nous le présentons de manière succinte.

Si les effets coulombiens entre grains chargés sont négligeables, le kernel de collision est d'origine purement géométrique et s'exprime sous la forme $K = \sigma \Delta V$ où σ est la section efficace géométrique de collision et ΔV la vitesse relative entre les grains. Si la vitesse relative ΔV est indépendante de la masse des grains, ce kernel n'est pas susceptible de générer un processus de gélation, à moins que les grains soient poreux de dimension fractale $D_\mathrm{f} < 2$ (Ivlev et al., 2002). Si le champ de vitesse est brownien ($\Delta V \propto m^{-1/2}$), la gélation ne peut se produire pour un kernel géométrique que si $D_\mathrm{f} < 1$, ce qui n'est pas réaliste.

L'interaction coulombienne entre deux grains chargés n'est attractive que pour des grains de charges opposées. Son effet est faible sur les gros grains, dont l'inertie est importante. L'interaction charge-dipole est une interaction à courte portée, *attractive* entre deux grains chargés *quel que soit le signe de leur charge*. Elle est induite par la polarisation réciproque de la charge des grains. Ivlev et al. (2002) présentent une modélisation de la gélation de poussières induite par l'interaction charge-dipôle, dans l'hypothèse où la charge portée par les agrégats est conservée au cours de la coagulation [2]. A l'inverse de la gélation géométrique, la gélation charge-dipôle est défavorisée dans le cas d'un champ de vitesse constant, mais favorisée dans le cas brownien. Konopka et al. (2005) ont pu démontrer expérimentalement dans la station internationale ISS que la gélation induite par l'interaction charge-dipôle permettait, avec un champ de vitesse brownien, de produire des grains macroscopiques en des temps considérablement (10^4 à 10^5 fois) plus courts que par la coagulation sans gélation. Bien que cette gélation s'effectue à des densités bien supérieures à celles du milieu interstellaire, ces découvertes de nouveaux mécanismes rapides de coagulation sont d'un grand intérêt pour la physique de coagulation des grains, dans les disques ou dans les nuages denses.

1. La masse moyenne des grains évolue en $1/(1-t)$
2. Cette hypothèse est essentielle à ce type de gélation. L'interaction dipôle-dipôle ne peut pas à elle seule accélérer de manière aussi importante le taux de coagulation.

10.3 Evolution de la distribution en taille des poussières

La coagulation exige des densités importantes pour être efficace. Dans cette section, nous présentons l'évolution de la distribution en taille des poussières dans des chocs C de 5 et 10 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}. La vitesse critique correspondante, pour un champ magnétique d'intensité $B_0 = 1$ mG ($b = 1$), est de ~ 28 km s^{-1} avec les abondances fractionnelles des cœurs et des manteaux définies dans les tables 4.1 et 4.2.

A haute densité, la giration des grains autour des lignes de champ magnétique est très rapidement amortie par l'intense friction exercée par le gaz (*cf.* chapitre 8). Nous pouvons donc ignorer la phase de giration des poussières et ne considérer que leur vitesses fluides définies par les équations (8.8), (8.13) et (8.14).

Au chapitre 4, nous avons défini un modèle de calcul de l'épaisseur Δa commune de tous les manteaux de glace présents à la surface des grains dans le milieu pré-choc. Ce modèle a été étendu à l'étude de la dynamique des poussières dans les chocs C car la giration des grains autour des lignes de champ, beaucoup plus faible que dans les chocs J, n'est pas critique pour le calcul de l'épaisseur des manteaux. La vitesse relative gaz-grain dans les chocs C est *en moyenne* la même pour tous les grains couplés au champ magnétique : c'est la vitesse de diffusion ambipolaire $V_{\rm n} - V_{\rm i}$, ce qui justifie de rester dans ce cadre pour l'étude du traitement des manteaux.

10.3.1 Coagulation seule

Dans un choc de 5 km s^{-1}, les vitesses relatives entre grains sont trop faibles pour pouvoir fragmenter les grains. Nous étudions donc le traitement des poussières dans ce choc sans activation de la fragmentation. Afin que le modèle numérique de coagulation ne diverge pas (*cf.* § 10.2), nous prenons 10 boîtes pour chaque distribution MRN [100 Å : 3000 Å] et deux boîtes vides sur [3000 : 6000] chargés de collecter les plus gros grains produits par la coagulation, soit un total de 24 boîtes.

La figure 10.3 montre le profil de vitesse des poussières dans la direction de propagation du choc de 5 km s^{-1}. On observe une dispersion des vitesses, les gros grains tendant à se coupler au gaz tandis que les petits grains sont couplés au champ magnétique (*e.g.* Pilipp & Hartquist, 1994; Caselli et al., 1997).

La faible dispersion des vitesses des poussières dans le choc est très favorable à la coagulation, comme le montre la figure 10.4 où l'on présente la distribution en taille des poussières silicatées et carbonées après le passage du choc (à un temps $t = 5.10^4$ ans). La coagulation a pu opérer de manière significative en augmentant la population des gros grains ($a \geq 1000$ Å) déjà présents dans la distribution initiale, aux dépens des grains plus petits. On observe la formation de grains plus gros que les plus gros grains de la distribution MRN pré-choc. Nous présenterons au paragraphe 10.4 comment l'efficacité de la coagulation peut être quantifiée par le calcul de l'opacité totale $\langle n\sigma \rangle$ de la distribution avant et après le passage du choc.

La coagulation a été plus intense pour la population de grains silicatés que pour la population carbonée, mais ce n'est qu'un artifice numérique qui tient à l'impossible numérique de faire coaguler des grains silicatés et des grains carbonés. Etant donné que le modèle de coagu-

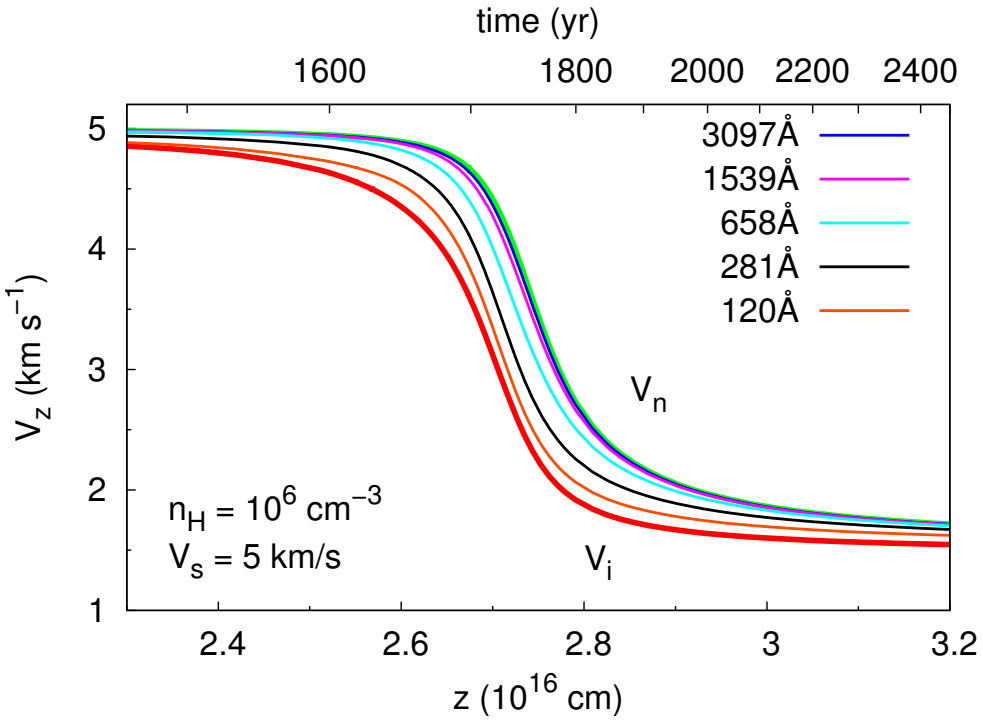


FIGURE 10.3 – Profil de la vitesse du gaz neutre (V_n), des ions (V_i) et de cinq tailles de poussières dans la direction de propagation d'un choc C stationnaire de 5 km s^{-1}. Densité pré-choc du nuage : $n_\mathrm{H} = 10^6$ cm^{-3}.

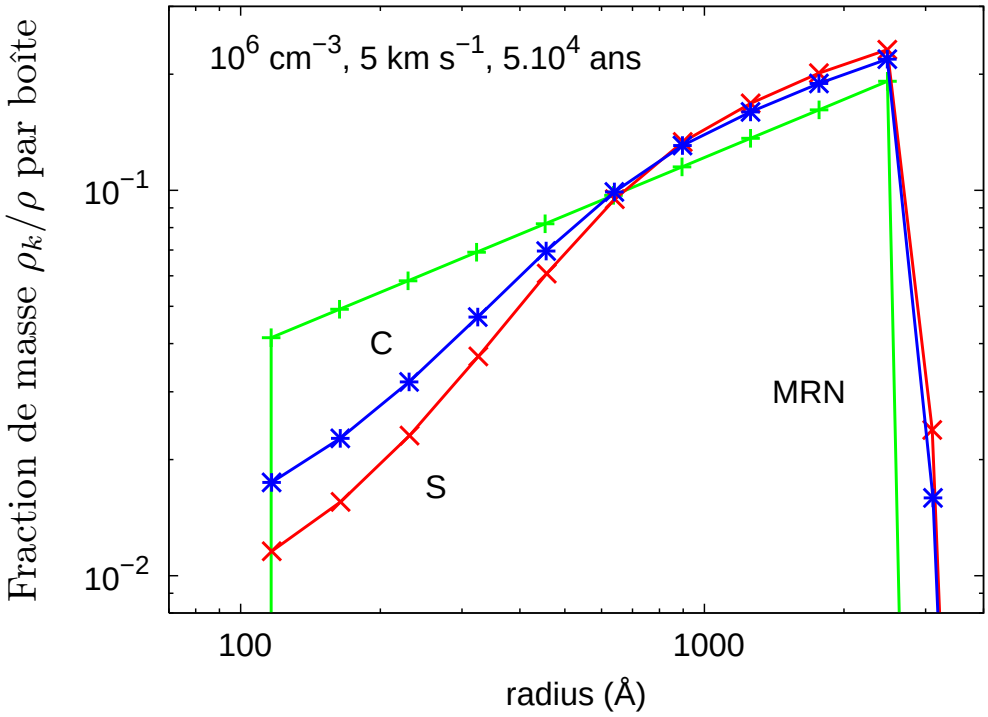


FIGURE 10.4 – Distributions en taille des poussières silicatées (S) et carbonées (C) initiales et après le passage du choc de la figure 10.3 à un temps $t = 5.10^4$ ans. Les distributions n'évoluent plus ensuite.

lation est le même pour les deux populations et que les dynamiques fluides sont identiques [1], cette croissance plus lente des grains carbonés s'explique par leur abondance fractionnelle plus faible comparativement aux poussières silicatées.

10.3.2 Compétition entre la coagulation et la fragmentation

Dans un choc plus rapide (10 $\mathrm{km\,s^{-1}}$), la fragmentation entre en jeu. Nous ajoutons un jeu de 9 boîtes vides chargées de collecter pour chaque distribution les fragments de taille comprise entre 5 et 100 Å. Le nombre total de boîtes est donc porté à 42. Comme de très petits grains sont produits, il est nécessaire de prendre en compte l'influence des fluctuations de leur charge sur leur dynamique.

Pénurie d'électrons

La figure 10.5 compare la dynamique des grains à travers le choc avec et sans traitement. Dans le modèle sans traitement, les petits grains sont couplés aux ions dans tout le choc, tandis que les gros grains sont partiellement découplés du champ magnétique. Si la fragmentation est prise en compte ainsi que sa rétroaction sur l'ionisation du gaz, tous les grains de taille supérieure à 100 Å se couplent au gaz à $t \sim 330$ ans et y restent couplés dans la queue du choc. Les très petits grains ont eux une dynamique stochastique (non représentée sur la figure 10.4, *cf.* chapitre 8 et Fig. 8.3 pour un exemple).

Ce découplage des grains du champ magnétique est induit par une pénurie d'électrons libres (Fig. 10.6(a)). Cette pénurie est le produit de l'attachement électronique sur la multitude de très petits grains ($\ll$ 100 Å) produits par la fragmentation. Ces grains restent chargés négativement dans tout le choc (Fig. 10.6b), tandis que les plus gros voient leur charge changer de signe [2] à l'apparition de la pénurie d'électrons (Fig. 10.6c). Les gros grains restent chargés positivement dans toute la queue du choc, mais leur charge est proche de zéro ce qui explique leur découplage total du champ magnétique et leur couplage au gaz.

Charge hors-équilibre des petits grains

Si les charges portées par les grains étaient à l'équilibre, alors chaque grain porterait à tout instant la charge déterminée par l'équation (5.1). Tous les grains seraient en conséquence chargés négativement, la pénurie ne faisant que diminuer la charge de *tous* les grains dans les mêmes proportions. Le comportement hors-équilibre de la charge des très petits grains vient du fait que leur temps de mise à l'équilibre de charge $\tau_Z \propto 1/a$ est beaucoup plus long que celui des gros grains (*cf.* chapitre 5). Ce sont les gros grains qui réagissent les premiers à la pénurie d'électrons induite par la charge des très petits grains, en se chargeant positivement. C'est donc parce que la charge des petits grains se fait sur des temps caractéristiques long devant les temps de variation de l'état d'ionisation que la fragmentation peut créer les

1. La vitesse fluide des poussières est une fonction du facteur de Hall des poussières qui est *indépendant* de la densité du matériau constituant les grains (*cf.* chapitre 6).

2. Les gros grains sont effet les plus rapides à s'adapter aux modifications du courant électrique de charge, ceux qui ont le moins d'inertie électrique (Eq. (5.6)).

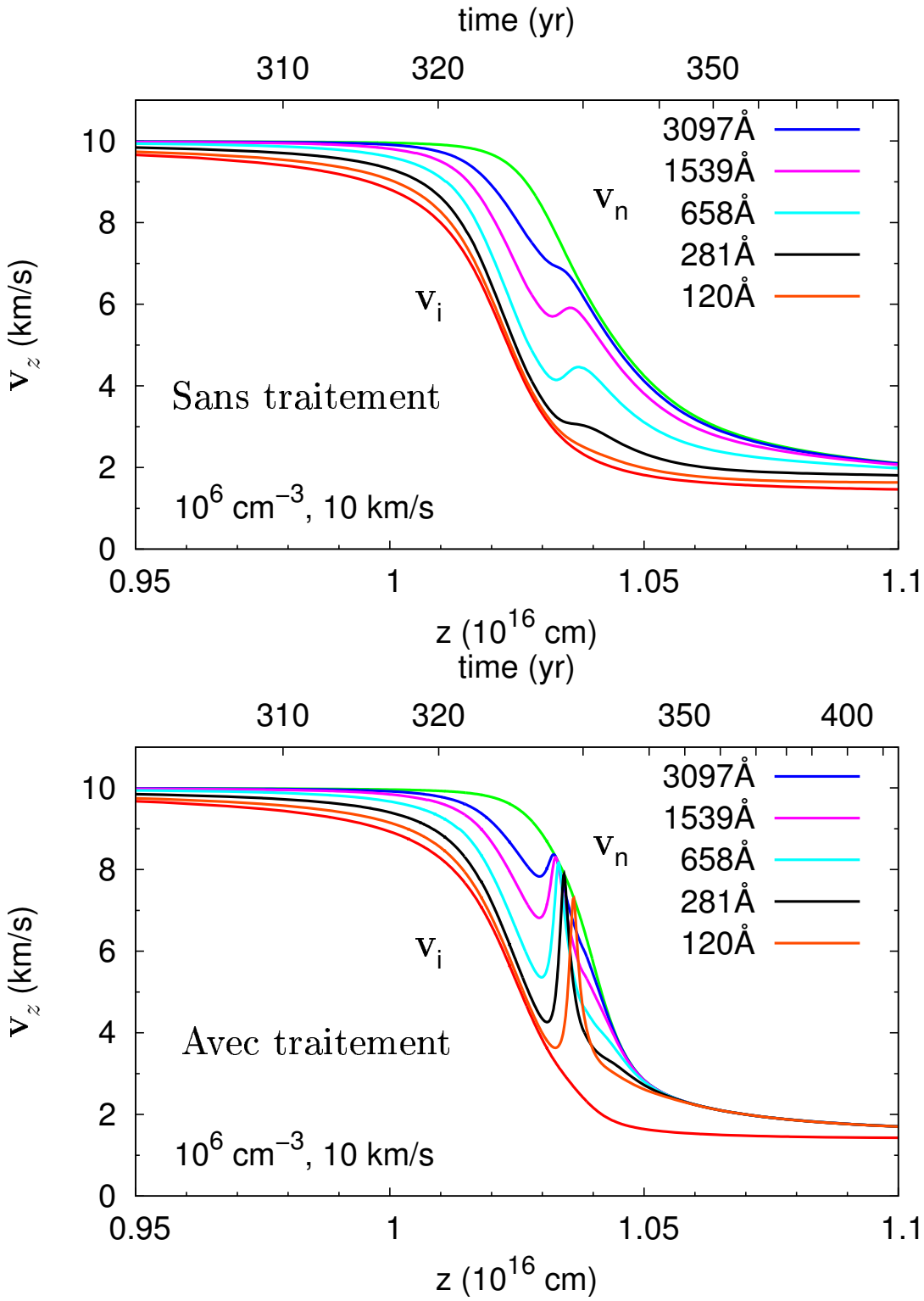


FIGURE 10.5 – Comparaison des profils de vitesse des poussières silicatées dans la direction de propagation d'un choc de 10 km s^{-1} traversant un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}, avec (**Haut**) et sans (**Bas**) traitement des poussières. La fragmentation des poussières influence à la fois la dynamique des gros grains et, dans une moindre mesure, la longueur du choc comme on peut le voir en comparant les axes des temps des deux figures.

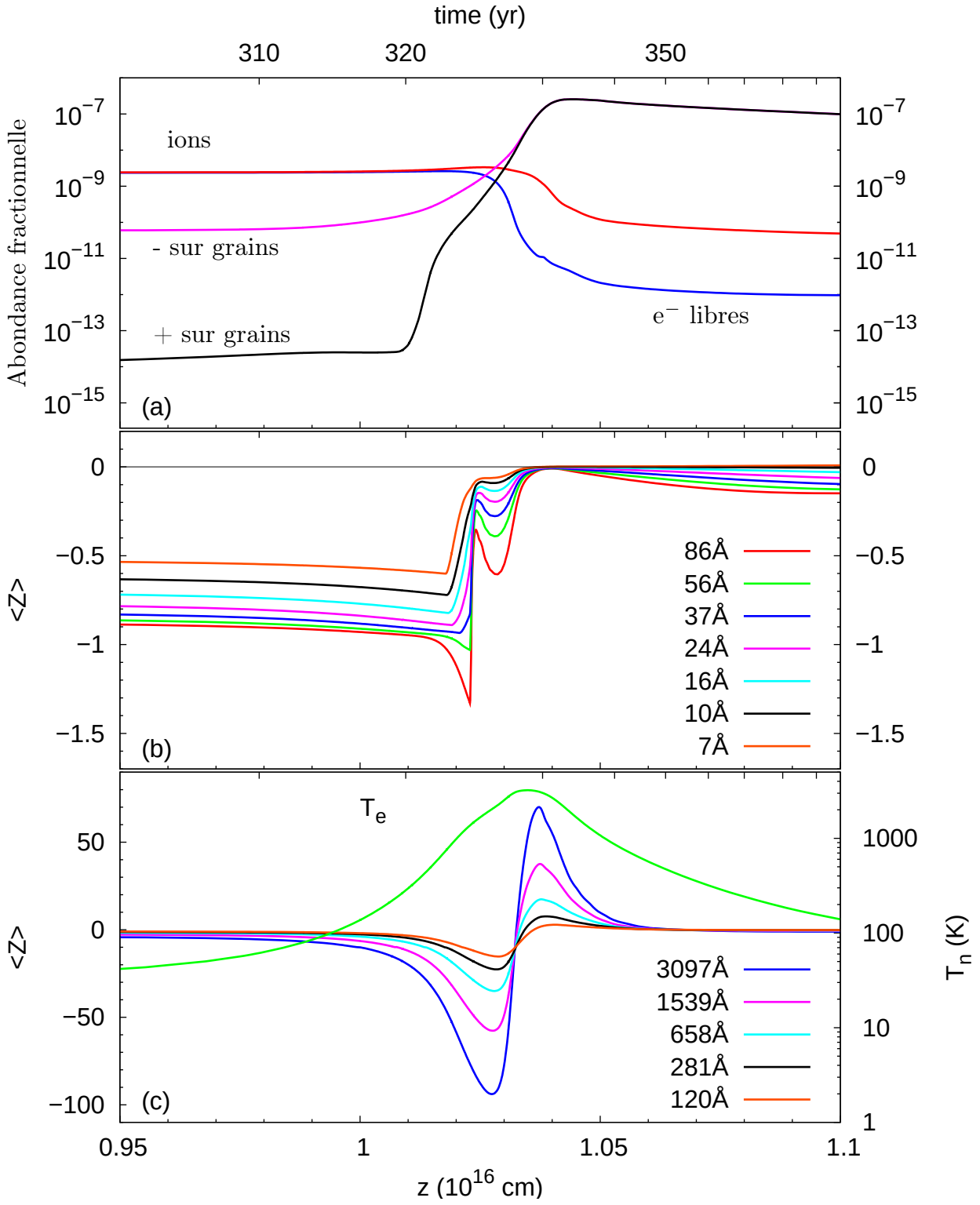


FIGURE 10.6 – (**a**) Abondance fractionnelle des électrons et des ions en phase gazeuse, et des charges positives et négatives à la surface des grains dans le choc de la figure 10.5 quand le traitement des poussières est activé, mettant en évidence une pénurie d'électrons. (**b**) La multitude de fragments dans la zone de grande diffusion ambipolaire du choc C, chargée négativement, prélève la quasi-totalité des électrons libres. (**c**) Conséquence de cette pénurie, les grains les plus rapides à s'adapter aux changements de conditions d'ionisation, c'est-à-dire les gros grains, voient leur charge changer de signe et rester positive, proche de zéro, dans toute la queue du choc.

conditions d'une cohabitation de gros grains chargés positivement et de petits grains neutres et négatifs, comme anticipé par Goertz (1989) dans un contexte physique différent.

Séparation spatiale des processus de fragmentation et de coagulation

Les processus de fragmentation et de coagulation sont clairement séparés dans le choc. Il n'y a pas à proprement parler compétition entre ces deux processus, l'un étant toujours largement dominant sur l'autre en tout endroit du choc. On peut séparer la structure du choc en deux zones : une zone "chaude" de fragmentation qui correspond à l'entrée du choc, là où la diffusion ambipolaire dépasse la vitesse seuil de fragmentation (~ 1 km s^{-1}), et une zone "froide" de coagulation qui se situe dans la queue du choc. La séparation entre ces deux zones se fait au point où la diffusion ambipolaire tombe en dessous de ~ 1 km s^{-1}.

Estimation de l'effet de l'interaction coulombienne entre grains chargés

La queue du choc est un site très favorable à la coagulation des grains, et plus particulièrement des très petits grains négatifs sur les gros grains positifs du fait de l'attraction coulombienne qui s'exerce entre eux (Goertz, 1989). Notre modèle coulombien est un modèle simplifié. Nous nommons projectile le plus petit des deux grains entrant en collision, et cible le plus gros. Nous assimilons le grain projectile à une particule chargée non polarisable. Nous utilisons ensuite l'expression approximative [1] de (Draine & Sutin, 1987, Eq. (2.12)) de la section efficace de collision σ entre un grain chargé (le grain cible) et une particule chargée (le grain projectile) :

$$\sigma = \pi \left(a_{\rm P} + a_{\rm T}\right)^2 \left(1 - \frac{\nu}{\epsilon} + \frac{\sqrt{2\epsilon - \nu}}{\epsilon}\right), \tag{10.10}$$

$$\epsilon = \frac{m_{\rm P} \Delta V^2 \; a_{\rm T}}{2e^2}, \tag{10.11}$$

$$\nu = \frac{Z_{\rm T}}{Z_{\rm P}}, \tag{10.12}$$

où $a_{\rm P}$ et $a_{\rm T}$ sont les rayons respectifs des grains projectile et cible (T pour target), et $Z_{\rm P}e$ et $Z_{\rm T}e$ leur charge. L'interaction coulombienne tend à augmenter la section efficace de collisions entre les gros grains (positifs) et les très petits grains (négatifs), à diminuer la section efficace entre les très petits grains, mais n'a pas d'effet sur les collisions entre plus gros grains du fait de leur grande inertie.

La figure 10.7 montre la distribution en taille finale des poussières silicatées dans ce choc C après un temps $t = 5.10^4$ années, avec ou sans prise en compte de la modification de la section efficace de collision par l'interaction coulombienne. La courbe supérieure montre le niveau de la distribution en taille après un temps $t = 340$ ans, alors que la phase de fragmentation vient de se terminer et que la phase de coagulation ne l'a pas encore modifiée de façon significative. Des grains de plus grosses tailles se forment lentement par coagulation

1. Cette expression n'est strictement valable que si $|\nu| \gg 1$ (Draine & Sutin, 1987), ce qui n'est pas toujours le cas. Cependant, cette approximation n'induit pas de dérive majeure quand $|\nu|$ est proche de 0 ou 1.

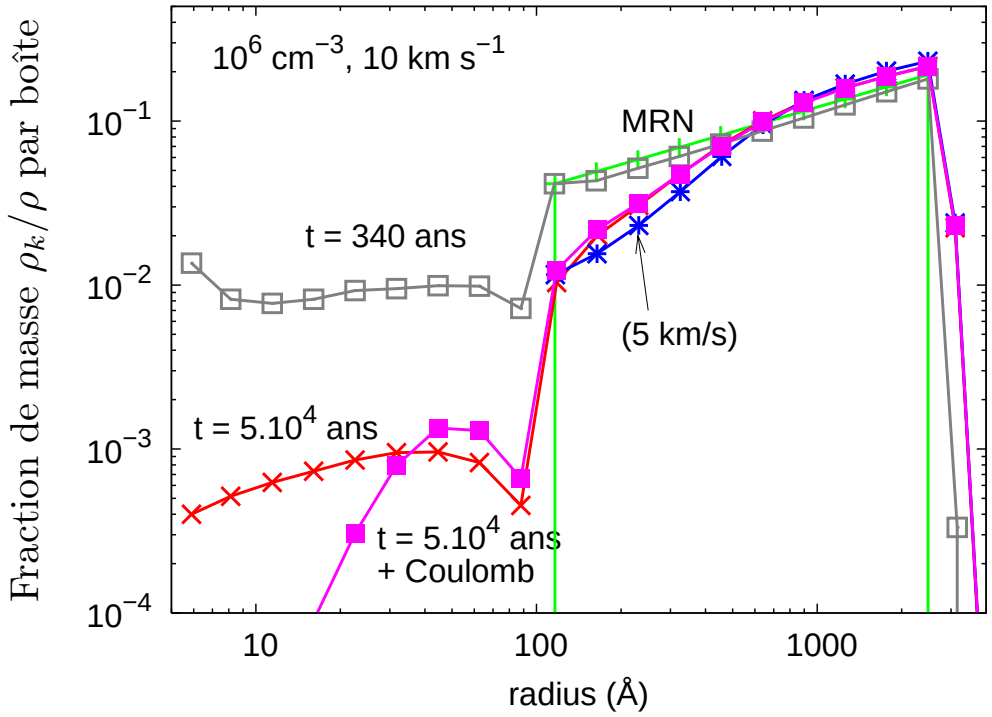


FIGURE 10.7 – Distribution en taille des poussières silicatées avant (MRN), à la fin de la phase de fragmentation des poussières ($t = 340$ ans) et après le passage du choc ($t = 5.10^4$ ans) pour un choc de 10 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité initiale $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}. On observe une nette accélération de la coagulation par attraction coulombienne entre petits grains chargés négativement et gros grains positifs. La distribution finale des grains silicatés du choc de 5 km s^{-1} de la figure 10.4 est indiquée comme point de comparaison.

des petits grains les plus nombreux ($a \sim$ 100-300 Å) sur les plus gros grains de la distribution. L'effet coulombien accélère le processus de coagulation des très petits grains ($a <$ 30 Å), mais pas des plus gros grains. Au final, la coagulation a bénéficié de la fragmentation : des grains plus gros sont apparus, produits par la coagulation des plus petits fragments sur les plus gros grains de la MRN. La distribution finale comporte moins de petits grains (100 Å $< a <$ 500 Å) que la distribution initiale. Les fragments ont presque tous disparus après un temps $t = 5.10^4$ ans.

10.4 Influence du traitement sur la longueur du choc

Pour conclure, nous comparons l'évolution de la section efficace géométrique totale $\langle n\sigma \rangle$ portée par les poussières dans les deux chocs de 5 et 10 km s^{-1}, rapportée à sa valeur $\langle n\sigma \rangle_0$ dans le gaz pré-choc (Fig. 10.8). Afin de mettre en évidence les effets dûs à la coagulation et à la fragmentation et de s'abstraire des modifications de $\langle n\sigma \rangle$ dues à la seule compression différentielle des fluides de grains relativement au gaz, nous représentons l'évolution du flux $\langle n\sigma \rangle V$ de cette section efficace, plutôt que $\langle n\sigma \rangle / n_{\rm H}$. Ce profil est placé en vis-à-vis du profil de vitesse du choc correspondant, mettant en évidence que le traitement des poussières peut, dans les milieux denses, modifier la longueur du choc. La coagulation dans le choc de 5 km s^{-1}

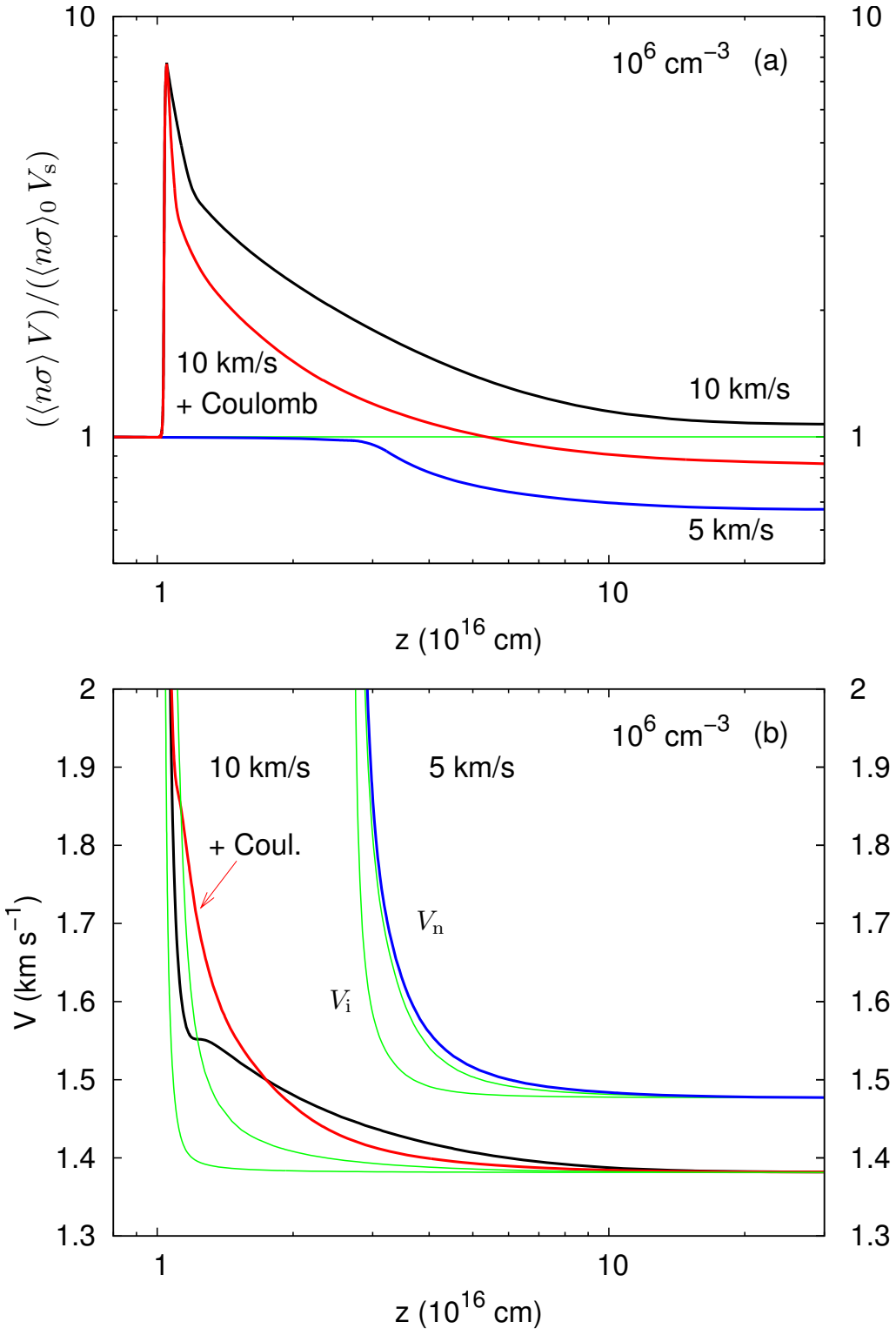


FIGURE 10.8 – (**Haut**) Evolution de la section efficace géométrique totale $\langle n\sigma\rangle$ portée par les poussières pour les chocs des figures 10.3 et 10.5. (**Bas**) Profil de vitesse des ions et du gaz neutre pour ces mêmes chocs. Les axes des abscisses des deux figures sont identiques de façon à mettre en évidence l'influence de la fragmentation et de la coagulation sur la longueur du choc. Les courbes en vert correspondent au modèle de choc sans traitement. Le traitement des poussières ne modifie pas la dynamique des ions de manière significative.

réduit d'un tiers l'opacité totale des poussières, ce qui tend à augmenter la longueur du choc. La fragmentation des poussières intervient au début du choc de 10 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, augmentant le couplage entre les fluides chargé et neutre. Le choc suit alors une dynamique qui tend à le raccourcir par rapport au même choc sans traitement. Mais dès que la fragmentation est devenue inefficace, c'est-à-dire dès que la diffusion ambipolaire a suffisamment diminué, la coagulation des très petits fragments sur les gros grains s'accélère ce qui diminue rapidement le couplage entre les fluides chargé et neutre, et augmente d'autant la longueur du choc. Ce changement de régime intervient plus tôt si on prend en compte les effets électrostatiques entre grains car la coagulation est alors efficace à plus basse densité [1].

10.5 Conclusion et perspectives

Nous avons montré avec un modèle simplifié de coagulation que les chocs C lents étaient des sites favorables à la croissance des poussières, mais que l'efficacité de la coagulation dans les chocs C restait faible, malgré une densité que nous avions choisie assez élevée ($n_{\mathrm{H}} = 10^6$ $\mathrm{cm^{-3}}$). En l'absence de fragmentation, le passage du choc peut aboutir à une diminution de l'opacité totale de la distribution des poussières, d'un facteur 1/3 en 5.10^4 ans dans un choc de 5 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Les petits grains de la MRN se collent sur les plus gros grains, ce qui diminue la pente de la distribution en taille. La fragmentation des poussières dans les chocs plus rapides (10 $\mathrm{km\,s^{-1}}$) semble être capable de faire croître la taille des grains les plus gros de la distribution, en créant une multitude de petits fragments qui iront se coller sur eux. Ces fragments créent une pénurie d'électrons libres qui impose la coexistence de grains positifs et de très petits grains négatifs. L'interaction coulombienne entre ces grains de charge de signe contraire accélère la coagulation des fragments sur les gros grains, mais son effet semble se limiter aux plus petits fragments. Il reste toujours une quantité non négligeable de petits grains si bien que l'opacité totale n'est pas autant diminuée au final que dans un choc sans fragmentation. Ces résultats sont encore préliminaires et demandent une investigation plus approfondie.

Les processus de coagulation sont actuellement très étudiés pour la formation des planétésimaux dans les disques d'accrétion, au moyen de méthodes numériques puissantes (Brauer et al., 2007). Notre modèle de coagulation est une première étape dans l'étude de la croissance des grains dans les nuages moléculaires. A l'avenir, il faudrait :

1. évaluer les temps caractéristiques de croissances des poussières ;
2. considérer des agrégats poreux (fractaux) composés d'une distribution en taille de grains ;
3. gérer simultanément et de manière cohérente l'accrétion de manteaux et la coagulation entre grains ;
4. tester l'influence des effets de charge, et particulièrement l'interaction charge-dipôle qui peut, sous certaines hypothèses, générer un processus de gélation.

1. Les effets électrostatiques n'augmentent pas l'efficacité de la fragmentation des grains car celle-ci s'effectue principalement entre gros grains qui ont une énergie cinétique bien plus grande que l'énergie potentielle d'interaction coulombienne.

Chapitre 11

Traitement des poussières dans les chocs C

Le traitement des poussières dans les chocs C a déjà fait l'objet de plusieurs études (Caselli et al., 1997; Schilke et al., 1997; Gusdorf et al., 2008a,b), mais aucune d'entre elles ne s'est, pour l'instant, intéressée à l'effet de la fragmentation et à ses répercussions sur la destruction des poussières et la structure des chocs C. Nous venons de voir au chapitre précédent que la fragmentation est capable d'induire une pénurie d'électrons libres dans un choc lent ($V_s \sim 10$ $km\,s^{-1}$) se propageant dans un milieu dense ($n_H = 10^6$ cm^{-3}) où l'ionisation est déjà très faible ($X_i \sim 10^{-8}$). Cette pénurie d'électrons pousse la charge des gros grains vers des valeurs positives ou proches de zéro et modifie ainsi leur couplage au champ magnétique, tandis que celle des très petits grains reste négative. Ce scénario rappelle les prédictions de Goertz (1989) sur l'évolution de la charge des grains dans un plasma poussiéreux dont la température varie, mais ici cet effet est induit par la fragmentation. Nous retrouvons les mêmes effets, plus accentués, dans des chocs plus rapides ($20 \leq V_s \leq 40$ $km\,s^{-1}$) se propageant dans des milieux moins denses ($n_H = 10^4$ cm^{-3}).

11.1 Intensité de la fragmentation et effet rétroactif sur le choc

En nous limitant à des vitesses de choc C inférieures à 30 $km\,s^{-1}$, nous pouvons continuer momentanément à ignorer les processus de destruction des cœurs (vaporisation et érosion) qui feront l'objet de la section suivante. Nous considérons cependant toujours l'érosion des manteaux dans le choc, en suivant comme au chapitre précédent le modèle de calcul de l'épaisseur commune Δa des manteaux défini dans l'article 2 (*cf.* chapitre 4).

Dans un choc traversant un nuage de densité $n_H = 10^4$ cm^{-3}, la friction du gaz n'est pas assez élevée pour que la giration des poussières autour des lignes de champ puisse être négligée. Pour des raisons de temps de calcul, nous limitons le nombre de boîtes à 8 pour chaque MRN, ce qui correspond à $1/\eta = 3{,}6$, valeur supérieure à la limite maximale de 2,8 assurant une non-divergence de notre algorithme de coagulation. Cependant, la densité étant

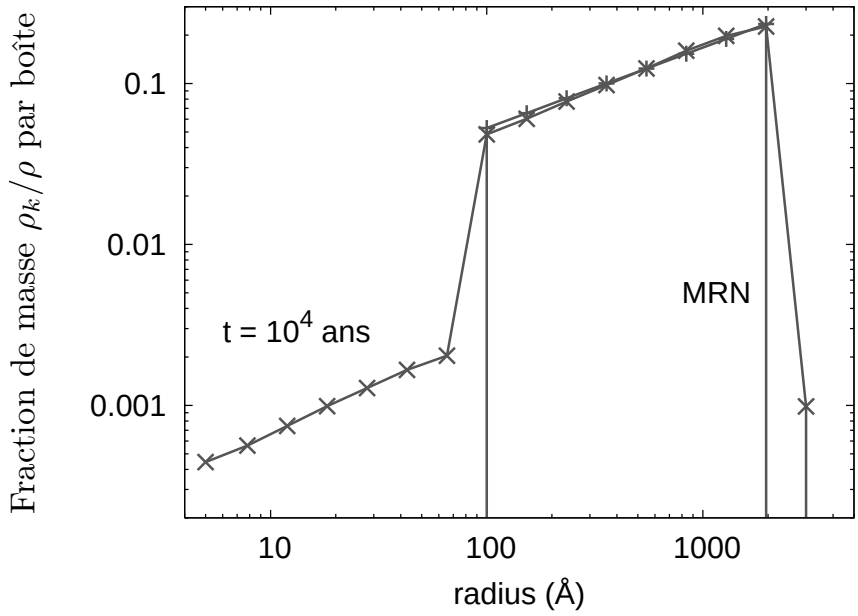


FIGURE 11.1 – Distribution en taille des poussières au temps $t = 10^4$ années dans un choc C de 20 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. Les grains plus petits que 100 Å sont les produits de la fragmentation des grains de la MRN. Ceux-ci coagulent dans la queue du choc pour former une très petite quantité de gros grains dont la taille dépasse celle des plus gros grains de notre MRN initiale (3000 Å).

trop faible pour que la coagulation des grains soit efficace, l'erreur commise ne sera pas très importante.

11.1.1 Traitement sans fluctuations de charge

Nous choisissons d'abord d'ignorer les fluctuations de charge des très petits grains [1]. La figure 11.1 montre la distribution en taille des grains silicatés au passage ($t = 10^4$ années) d'un choc C de 20 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. L'impact de la fragmentation sur la distribution des poussières est très réduit [2], contrairement au choc C à 10 km s^{-1} et $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3} du chapitre précédent. Cela tient au meilleur couplage des poussières au champ magnétique dans un environnement où la friction du gaz est plus réduite.

La phase de fragmentation des poussières est limitée à la phase de giration des grains à l'entrée du choc (Fig. 11.2(a,b)). Les grains sont ensuite couplés au champ magnétique dans toute la queue du choc. Les très petits grains produits créent une faible pénurie d'électrons dans la queue du choc (Fig. 11.2c), qui est responsable du léger découplage des gros grains dans la queue du choc observé sur la figure 11.2(a,b). La dynamique des poussières dans ce choc est très semblable à la figure 11 de l'article 2 (page 193) qui supposait, sans considération de traitement des poussières, l'existence d'une importante abondance fractionnelle

1. Ces fluctuations sont responsables du découplage des très petits grains chargés et des très petits grains neutres (*cf.* chapitre 8)
2. La longueur du choc n'est pas affectée par les fragments produits.

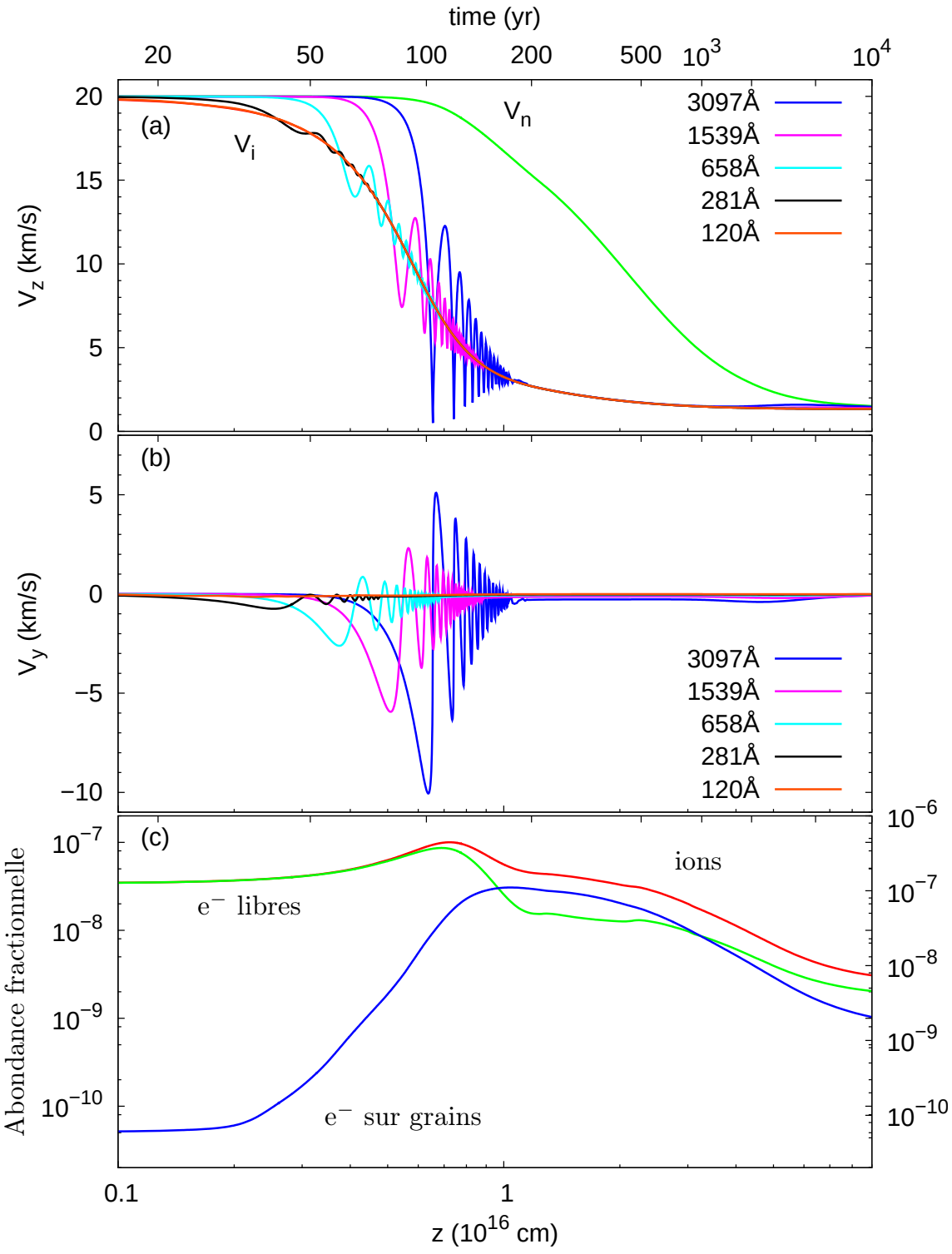


FIGURE 11.2 – Profils de vitesse des grains silicatés dans la direction de propagation du choc (**a**) et parallèlement au front de choc (**b**) pour un choc de 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ se propageant dans un nuage de densité initiale $n_{\mathrm{H}} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$, avec prise en compte de la fragmentation des grains mais sans considération des fluctuations de la charge des très petits grains. (**c**) Abondance fractionnelle des électrons et des ions en phase gazeuse, ainsi que des électrons attachés à la surface des grains.

($X(\mathrm{PAH}) = 10^{-6}$) de PAHs dans le milieu pré-choc. Malgré ce découplage, la coagulation est inefficace et n'arrive pas à faire disparaître les fragments produits, comme le montre la distribution en taille finale.

11.1.2 Traitement avec prise en compte des fluctuations de charge

Nous avons choisi dans un premier temps de négliger les fluctuations de charge uniquement pour clarifier l'analyse des résultats du traitement des poussières. Ces fluctuations ne sont en aucun cas négligeables, comme nous l'avons montré au chapitre 10.

La pénurie d'électrons s'emballe

Les fluctuations de charge sont responsables de l'existence dans le choc de très petits grains neutres qui sont partiellement ou totalement couplés au gaz et non au champ magnétique comme les autres tailles et charges de grains. Ces grains se déplacent dans le choc plus rapidement que les gros grains chargés, avec une vitesse relative qui peut être bien supérieure au seuil de vitesse de fragmentation. Comme ces projectiles sont très petits, ils n'ont pas l'énergie nécessaire pour fragmenter les gros grains ($a \sim 1000$ Å), mais ils peuvent cratériser leur surface [1]. Ils peuvent également fragmenter les grains plus petits ($a \sim 100$ Å), mais pas les vaporiser ni être vaporisés car les différentiels de vitesse grain-grain sont inférieurs au seuil de vaporisation ($\sim 20\ \mathrm{km\,s^{-1}}$) dans ces chocs C de vitesse inférieure à $30\ \mathrm{km\,s^{-1}}$. Ces fragments alimentent à leur tour la pénurie d'électrons en prélevant une partie des électrons libres quand ils se chargent et en cratérisant à leur tour les gros grains quand ils sont neutres. Nous avons donc tous les éléments d'une boucle de rétroaction positive qui peut conduire à un emballement de la cratérisation des gros grains et de la fragmentation des petits grains de la MRN. Les limites d'une telle modélisation sont discutées au paragraphe 11.3.

Reprise de giration des gros grains

La figure 11.3a montre l'évolution de la dynamique des grains de la MRN dans le choc. La phase de giration ne diffère pas de celle de la figure 11.2. Mais peu après la fin de la giration des gros grains (Fig. 11.3b, $z \simeq 10^{16}$ cm), une pénurie d'électrons apparaît. Les gros grains perdent alors rapidement leurs électrons par recombinaison avec des ions et leur charge tend alors vers zéro (Fig. 11.4). Le facteur de Hall de ces grains diminuant avec leur charge, ces grains se découplent du champ magnétique ce qui conduit à une relance de leur giration (Fig. 11.3a). La reprise de la giration des gros grains relance la fragmentation et donc la production de très petits grains.

L'impact sur la structure du choc se fait rapidement sentir. La forte augmentation de la section efficace totale portée par les grains (Fig. 11.3c) augmente le taux de recombinaison des ions sur les poussières, ce qui fait chuter brutalement la fraction d'ionisation (c'est-à-dire la densité d'ions libres, *cf.* le décrochage à $z \simeq 1,2.10^{16}$ cm). Pour la même raison, le couplage entre le fluide chargé et le fluide neutre augmente fortement, ce qui conduit à la

1. La cratérisation arrache des morceaux solides du grain et non des ions ou des atomes comme l'érosion.

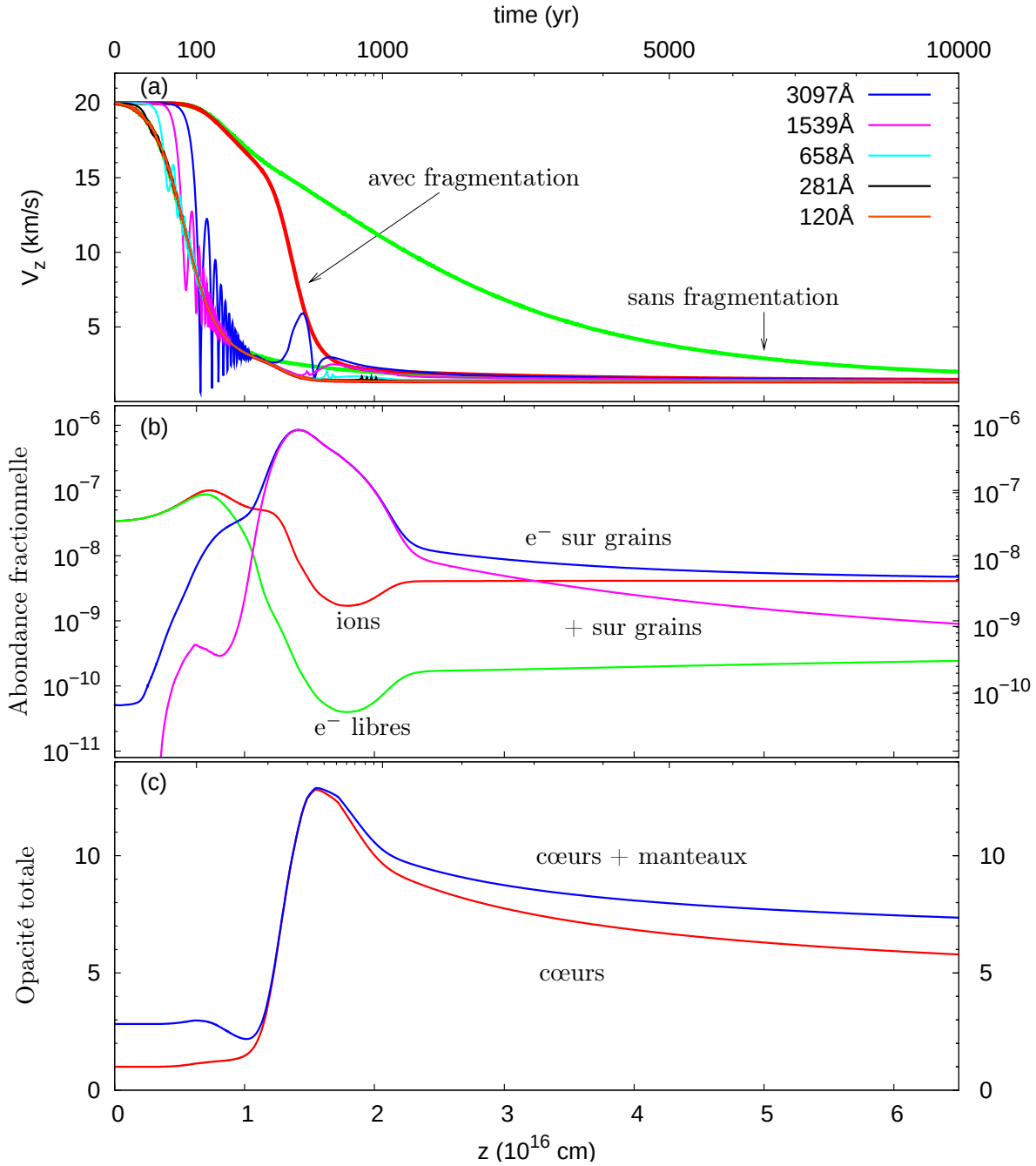


FIGURE 11.3 – (**a**) Profil de vitesse des grains silicatés dans la direction de propagation du choc de la figure 11.2 mais avec prise en compte de la fluctuation de charge des très petits grains. L'axe des temps correspond au choc avec traitement. (**b**) Densité d'électrons et d'ions en phase gazeuse, et charges positives (+) et négative (e^-) à la surface des grains dans le même choc. Les poussières deviennent par la fragmentation l'espèce chargée dominante dans le choc, plus abondants que les ions et les électrons. (**c**) Evolution de la section efficace totale portée par les poussières (cœurs et cœurs + manteaux), relativement à la section efficace totale portée par les cœurs dans le milieu pré-choc. L'augmentation importante de la section efficace portée par les grains diminue brutalement la fraction d'ionisation dans le choc d'un ordre de grandeur (*cf.* courbe des ions Fig. (b) à $z \simeq 2.10^{16}$ cm).

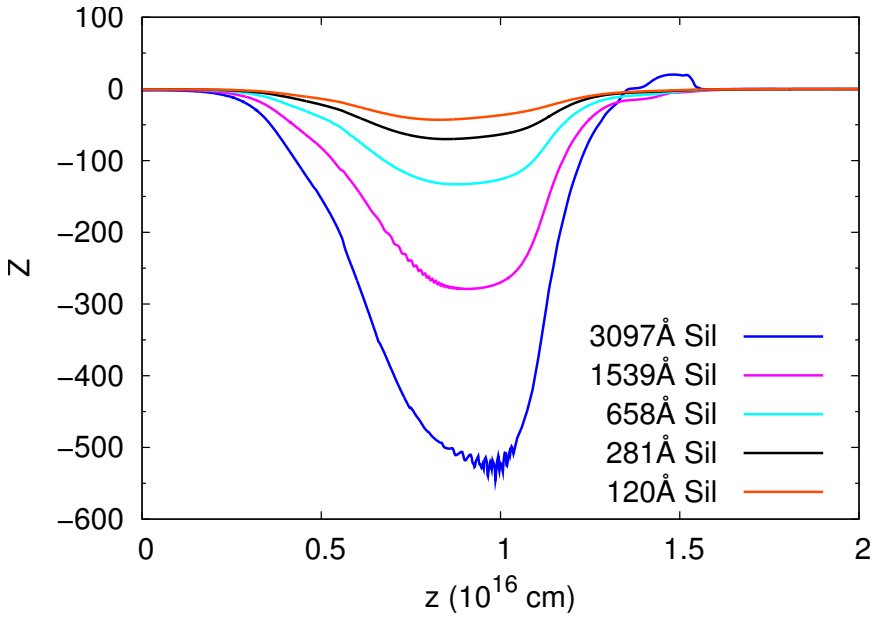


FIGURE 11.4 – Profil de la charge moyenne des grains dans le choc de la figure 11.3. Les oscillations de la charge autour de $z = 10^{16}$ cm ne sont pas des erreurs numériques mais montrent au contraire l'influence de la giration sur le taux d'attachement des ions et donc sur la charge des grains.

fois à un freinage accentué des ions[1] et à un freinage très fort du gaz en comparaison du profil d'un choc sans traitement (Fig. 11.3a). Le choc est au final plus court de presqu'un ordre de grandeur que dans un modèle sans fragmentation des poussières.

Distribution en taille finale des poussières silicatées

La distribution en taille des poussières silicatées est profondément altérée par le passage de l'onde de choc (Fig. 11.5). Une faible fraction des gros grains ($a \simeq 1000$ Å) a d'abord été fragmentée lors de leur phase de giration, remplissant les boîtes initialement vides à la même hauteur que sur la figure 11.1. Ensuite, les fragments neutres résultants ont brisé les grains les plus petits de la MRN ($a \simeq$ 100-300 Å) et également les plus gros fragments de la phase précédente ($a \simeq$ 30-100 Å), produisant une énorme quantité de très petits grains ($a \simeq$ 5-10 Å, Fig. 11.5 courbe 1). Les vitesses relatives entre grains dans la queue du choc permettent à la coagulation de reformer de plus gros grains à partir des fragments les plus petits qui tendent donc à disparaître avec le temps. Une très forte population de petits grains reste cependant présente au sortir du choc : la coagulation dans la queue du choc n'est pas capable de reformer les grains détruits par fragmentation (courbe 2), ni de faire disparaître les fragments, même en tenant compte de l'interaction coulombienne entre grains (courbe 3) et dans un temps 10 fois plus long (courbe 4). L'opacité totale des cœurs a augmenté d'un facteur ~ 6 (Fig. 11.3c).

1. Une augmentation du couplage conduit à une augmentation de la pression magnétique et donc à un ralentissement des ions (*cf.* Eq. 8.2).

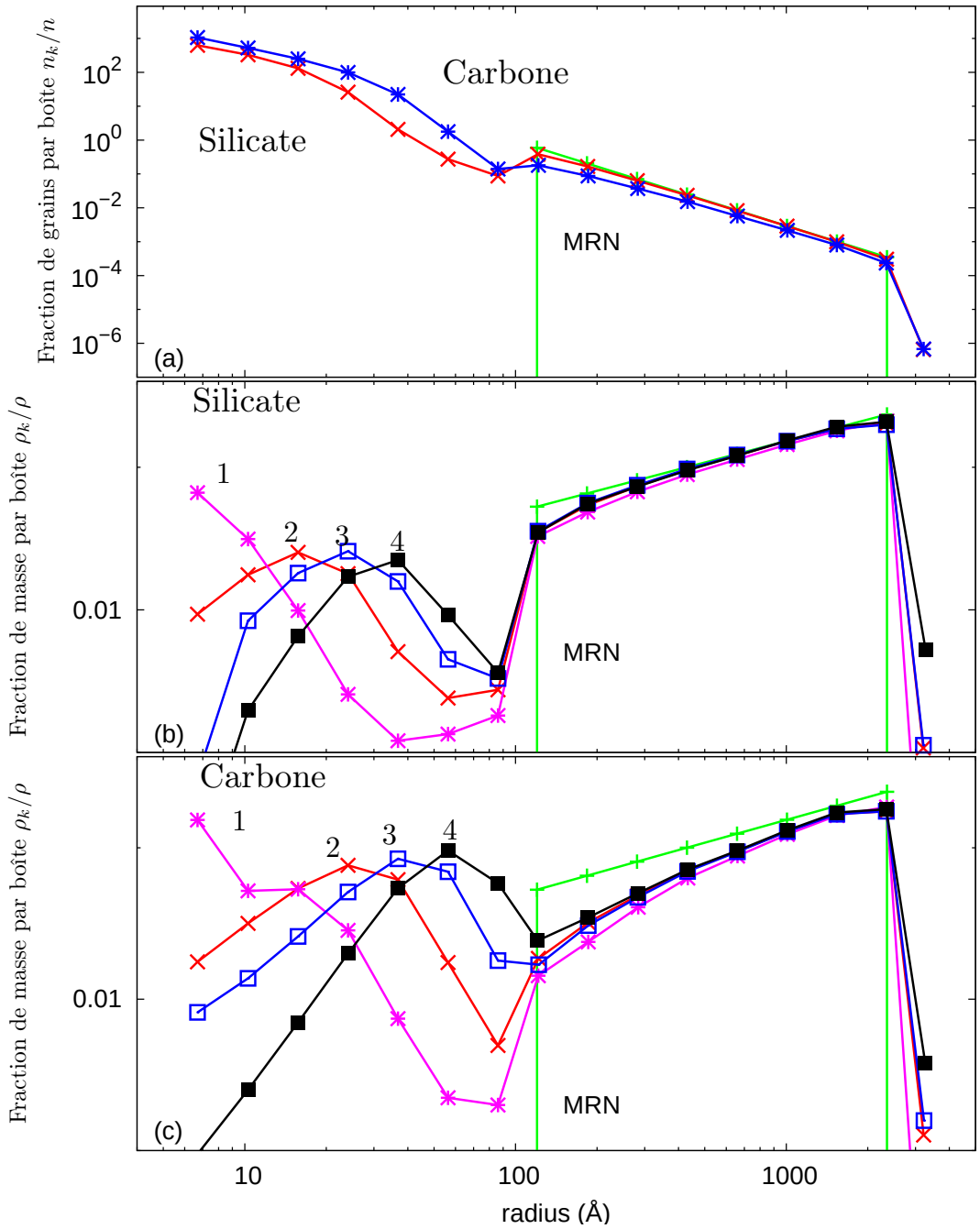


FIGURE 11.5 – Distribution en taille des grains dans le choc de la figure 11.3 : (**a**) Nombre de grains par boîte en fonction du rayon moyen des grains de chaque boîte, pour les populations silicatées et carbonées, rapporté au nombre total n de grains dans le milieu pré-choc. (**b**) Masse de grains silicatés par boîte pour 4 scénarios : (1) $t \simeq 300$ ans, soit à la fin de la phase de fragmentation avant que la coagulation commence, (2) $t = 10^4$ ans, (3) $t = 10^4$ ans avec prise en compte de l'interaction coulombienne entre grains, et (4) $t = 10^5$ ans avec interaction coulombienne. (**c**) Comme pour (b) mais pour les grains carbonés. La section efficace géométrique totale des poussières $\langle n\sigma \rangle$ des cœurs augmente d'un facteur 4 pour les grains silicatés et 9 pour les grains carbonés. Le choc est plus court de presque un ordre de grandeur relativement à un modèle où la fragmentation est ignorée.

11.1.3 Les chocs C sont-ils des plasmas hyper-poussiéreux ?

En retrouvant la pénurie d'électrons au centre de la dynamique d'un choc C dans lequel la fragmentation est prise en compte, on ne peut manquer de faire des rapprochements avec les études publiées sur les plamas poussiéreux (*e.g.* Goertz, 1989; Horanyi, 1996; Shukla & Mamun, 2002). Comme nous l'avons vu au chapitre 5, un plasma poussiéreux se caractérise par le fait que les charges portées par les grains de poussières ne sont pas écrantées les unes des autres, mais que tous les grains participent à l'écrantage de Debye. Cela signifie qu'il y a de nombreux grains à l'intérieur de la sphère de Debye de chaque grain. Deuxième caractéristique des plasmas poussiéreux : la charge des grains y est réduite par la présence des autres grains. Dans la littérature sur les *dusty plasmas* (*e.g.* Shukla & Mamun, 2002), cet effet est quantifié par la grandeur suivante :

$$P = \lambda_{\rm D}^2 \times 4\pi\, n\, a\,, \tag{11.1}$$

où $\lambda_{\rm D}$ est la longueur de Debye des poussières (Eq. (5.30)), $n_{\rm p}$ est le nombre de poussières par unité de volume et a leur rayon (cas où tous les grains sont de la même taille). Quand P est très inférieur à 1, les grains sont isolés les uns des autres (nous dirions qu'il n'y a pas de pénurie d'électrons libres). Quand P se rapproche de 1, la charge portée par chaque grain est diminuée par la présence des autres grains (nous dirions qu'il y a pénurie d'électrons).

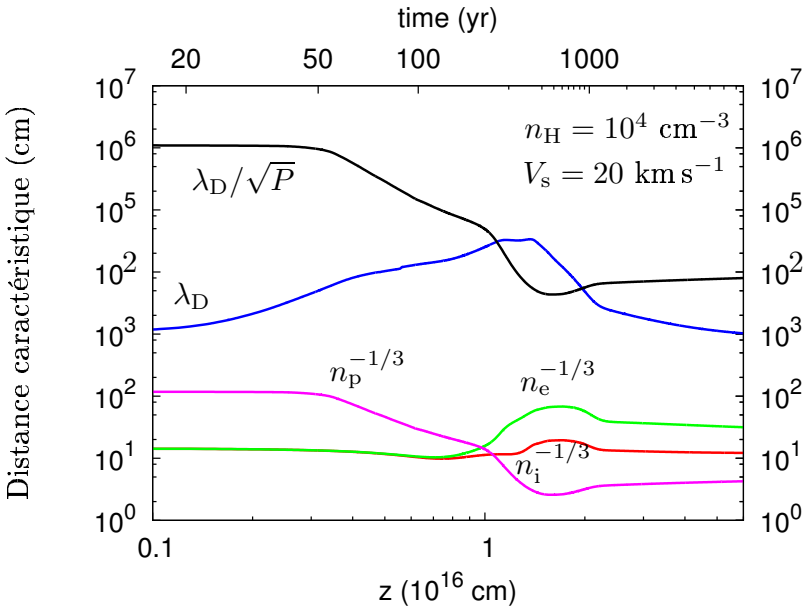


FIGURE 11.6 – Comparaison de l'évolution des longueurs caractéristiques des plasmas poussiéreux dans le choc C de la figure 11.3. $n^{-1/3}$ est la distance moyenne entre deux particules ((p)oussières, (é)lectrons ou (i)ons). Suite à la fragmentation, le plasma passe d'un état dominé par les ions et les électrons à un état dominé par les poussières chargées. P est un indicateur de pénurie d'électrons (pour $P \geq 0,1$, donc pour $\lambda_{\rm D}/\sqrt{P} \leq 3\lambda_{\rm D}$). La comparaison de la longueur de Debye $\lambda_{\rm D}$ et de la distance moyenne entre grains $n_{\rm p}^{-1/3}$ montre qu'il y a dans les chocs C une énorme quantité de petits grains à l'intérieure de chaque sphère de Debye. Les chocs C sont des plasmas particulièrement poussiéreux.

Nous avons representé sur la figure 11.6 l'évolution dans le choc de 20 km s^{-1} des longueurs qui permettent de mesurer le caractère d'un plasma poussiéreux : la longueur de Debye $\lambda_{\rm D}$ des grains, la longueur $\lambda_{\rm D}/\sqrt{P}$ qui traduit, rapporté à $\lambda_{\rm D}$, une éventuelle pénurie d'électrons, et la distance moyenne entre grains $n_{\rm p}^{-1/3}$. Nous voyons que la distance moyenne entre grains est partout plus faible que la longueur de Debye, même dans le milieu pré-choc. La longueur de Debye augmente dans le choc du fait de l'augmentation de la température des ions et des électrons (*cf.* Eq. (5.30)). Au pic de température du choc ($z \simeq 1,5.10^{16}$ cm), la longueur de Debye est plus grande de 4 ordres de grandeur que la distance moyenne entre grains. Cela signifie qu'il y a quelques milliards de petits grains à l'intérieur de la sphère de Debye de chaque grain ! En comparant les distances moyennes entre deux électrons ($n_{\rm e}^{-1/3}$), deux ions ($n_{\rm i}^{-1/3}$) ou deux grains de poussières ($n_{\rm p}^{-1/3}$), on constate que la fragmentation a transformé la nature du plasma : on est passé d'un plasma dominé par les ions et les électrons dans le milieu pré-choc à un plasma dominé par les poussières chargées dans toute la queue du choc.

Nous nous contenterons de soulever les questions suivantes : quelle est la validité de l'hypothèse d'un champ magnétique gelé dans le fluide des ions et des électrons (*cf.* § 3.2.1), quand les ions et les électrons ne sont pas les porteurs de charge majoritaires du fluide chargé ? Les poussières étant beaucoup moins mobiles que les ions et les électrons, c'est toute la dynamique des ondes MHD qui doit s'en trouver changée (Shukla & Mamun, 2002). Ce changement de régime induit par la fragmentation est-il susceptible de transformer la nature ou la structure des chocs C ? Si ces résultats sont confirmés, l'étude des chocs C gagnerait être revue à l'aune des récentes découvertes sur les plasmas poussiéreux, un peu dans l'esprit du travail entrepris par Ciolek & Roberge (2002) et Ciolek et al. (2004), mais avec une prise en compte de la fragmentation qui accentue encore l'importance des poussières.

11.2 Destruction des poussières par érosion et vaporisation

La destruction des poussières est envisageable pour des vitesses de chocs C supérieures à 30 km s^{-1} (Flower & Pineau des Forêts, 2003; Gusdorf et al., 2008a). Pour qu'un choc C puisse se propager à 30-40 km s^{-1} dans un nuage de densité initiale $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}, il faut augmenter la vitesse critique des chocs C (qui vaut 20 km s^{-1} pour $b = 1$), c'est-à-dire la vitesse magnétosonique dans le fluide chargé. Nous avons montré au chapitre 6 qu'à cette densité, la présence éventuelle d'une forte abondance de PAHs ne modifie pas beaucoup la vitesse critique des chocs C dans le modèle de Guillet et al. (2007). La seule possibilité qui nous reste est donc d'augmenter l'intensité du champ magnétique pré-choc. En posant $b \sim 2$, la vitesse critique monte à 41 km s^{-1}. Avec ces conditions pré-choc, nous pouvons étudier la propagation de chocs C jusqu'à une vitesse ~ 40 km s^{-1}.

La destruction des poussières dans les chocs C peut s'opérer par érosion (seuil ~ 30 km s^{-1}) ou vaporisation (seuil ~ 20 km s^{-1}) des cœurs. Un choc de 30 km s^{-1} peut-il détruire les poussières par vaporisation ? La figure 11.7 montre le profil de vitesse des poussières dans la direction de propagation d'un tel choc, et la distribution finale résultant de cette dynamique, pour les poussières silicatées. Ces résultats ne sont pas très différents de ceux du choc de 20 km s^{-1} des figures 11.3a et 11.5. Aucune destruction des poussières n'est

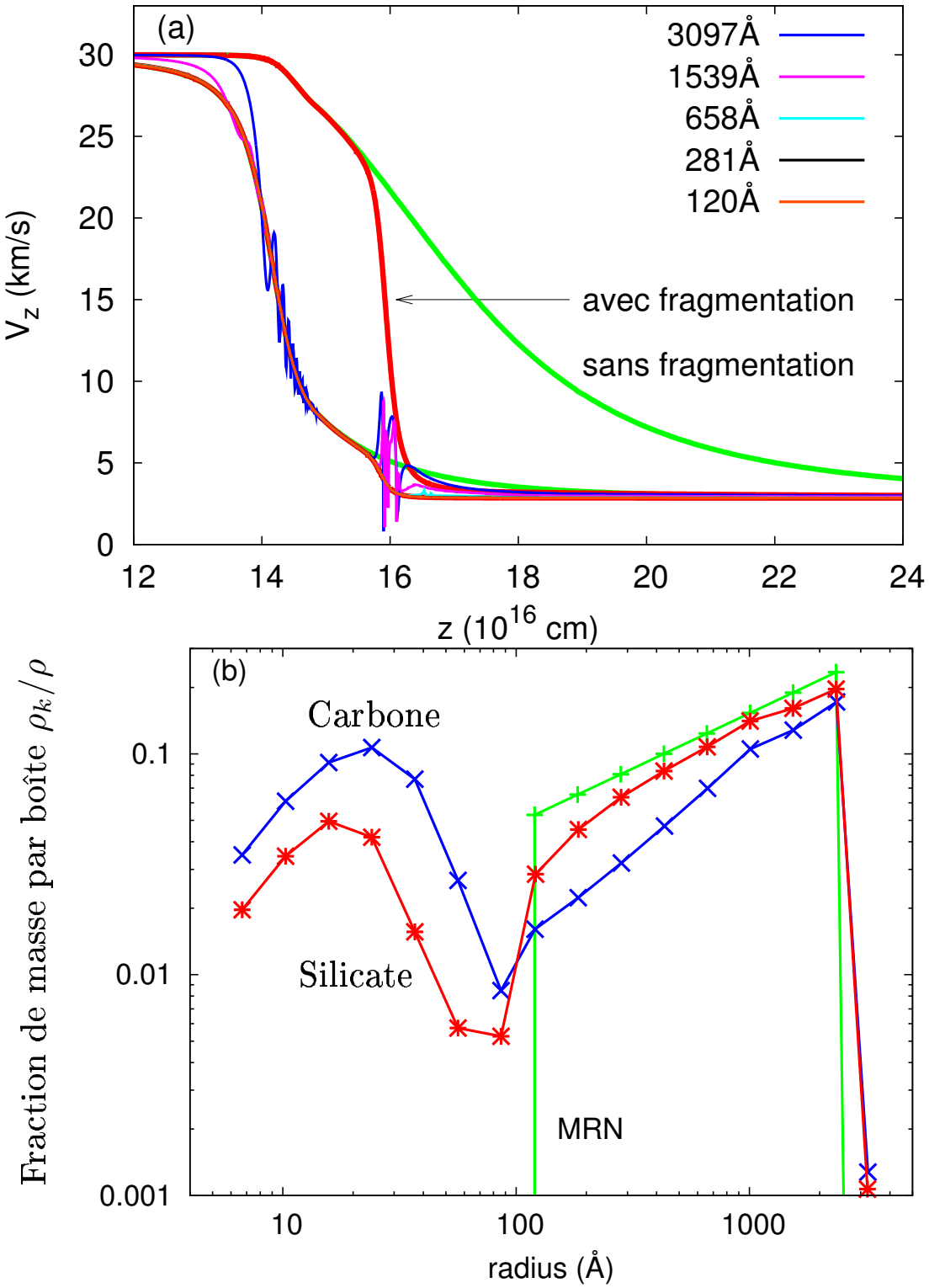


FIGURE 11.7 – (**a**) Profil de vitesse dans la direction de propagation du choc dans un choc C de 30 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité initiale $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. (**b**) Distribution en taille des poussières silicatées et carbonées à la sortie du choc.

	silicate	graphite
érosion	1,3 %	1,2 %
vaporisation	8,2 %	6,7 %
Total	10 %	8 %
$\langle n\sigma \rangle$	$\times 6$	$\times 11$

TABLE 11.1 – Pourcentage de destruction des grains carbonés et silicatés par érosion et vaporisation dans un choc se propageant à 40 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ dans un nuage de densité initiale $n_\mathrm{H} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$ plongé dans un champ magnétique transverse $B_0 = 100$ μG.

constatée car les poussières sont mieux couplées au champ magnétique qu'avec $b = 1$ et sont en conséquence freinées plus efficacement par le freinage non collisionnel exercé par le champ magnétique (*cf.* chapitre 8 § 8.2.2).

Considérons maintenant un choc de 40 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ traversant un nuage de densité $n_\mathrm{H} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$. La figure 11.8 montre le profil de vitesse des poussières et du gaz ainsi que la distribution en taille finale des poussières. La fragmentation est beaucoup plus importante que dans le modèle à 30 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ de la figure 11.7. Le tableau 11.1 donne les pourcentages de destruction des poussières silicatées et carbonées par érosion et par vaporisation dans ce choc. Le pourcentage d'*érosion* des cœurs est en accord avec les derniers résultats de Gusdorf et al. (2008a) dont le travail se base sur la version du code MHD de Flower & Pineau des Forêts (2003). La vaporisation des poussières est remarquablement importante. Elle n'a pas lieu pendant la phase de giration car les vitesses relatives entre grains ne sont pas suffisantes à cause du freinage non collisionnel exercé par la force de Lorentz. Ce sont les très petits grains neutres qui sont vaporisés quand il frappent de plus gros grains chargés avec une vitesse d'impact proche de la vitesse de diffusion ambipolaire $V_\mathrm{n} - V_\mathrm{i}$. La fragmentation dans les chocs C, combinée à l'effet des fluctuations de charge sur la dynamique stochastique des très petits grains, tend donc à permettre la destruction des poussières par vaporisation qui serait sinon impossible entre grains chargés.

11.3 Paramètres clefs de notre modèle de traitement

Dans cette section, nous analysons l'origine de l'importante fragmentation dans les chocs C.

11.3.1 Rôle mineur de la giration des gros grains

Les modèles existants de traitement des poussières dans les chocs C ont tous jusqu'à présent ignoré l'inertie des grains, responsable de leur giration autour des lignes de champ (Caselli et al., 1997; Flower & Pineau des Forêts, 2003; Gusdorf et al., 2008a,b). Suivant les travaux de Jones et al. (1994, 1996), nous avions choisi au contraire d'en tenir compte. Nous pensions initialement que la phase de giration des grains serait la principale zone du choc où les grains seraient fragmentés voire vaporisés. Cette impression était renforcée par le fait que la pénurie des électrons pouvait relancer la giration et donc la fragmentation.

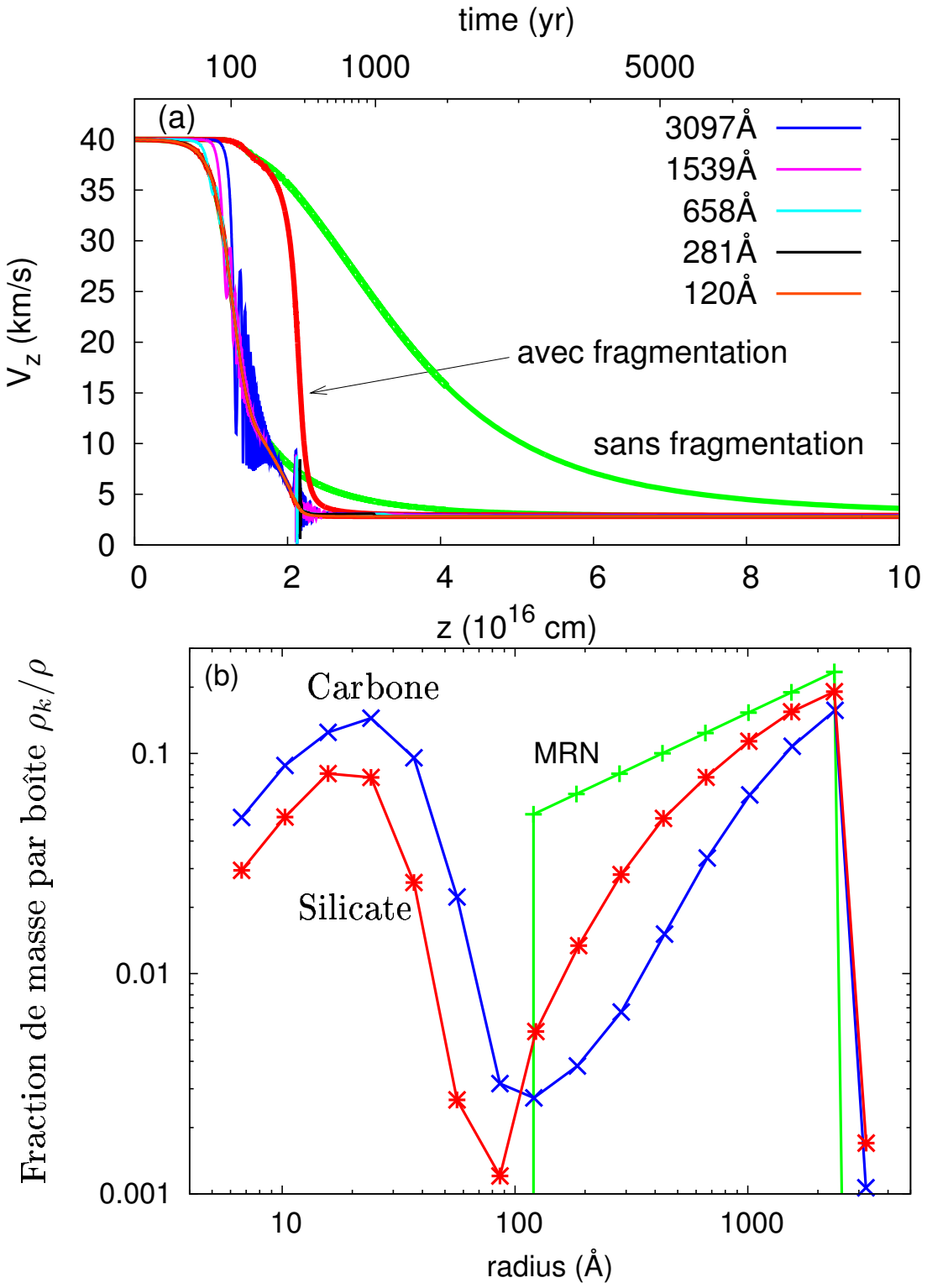


FIGURE 11.8 – (**a**) Profil de vitesse dans la direction de propagation du choc dans un choc C de 40 km s^{-1} se propageant dans un nuage de densité initiale $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. (**b**) Distribution en taille des poussières silicatées et carbonées au sortir du choc. La densité de masse par boîte ρ_k est rapportée à la densité de masse totale des poussières silicatées dans le milieu pré-choc.

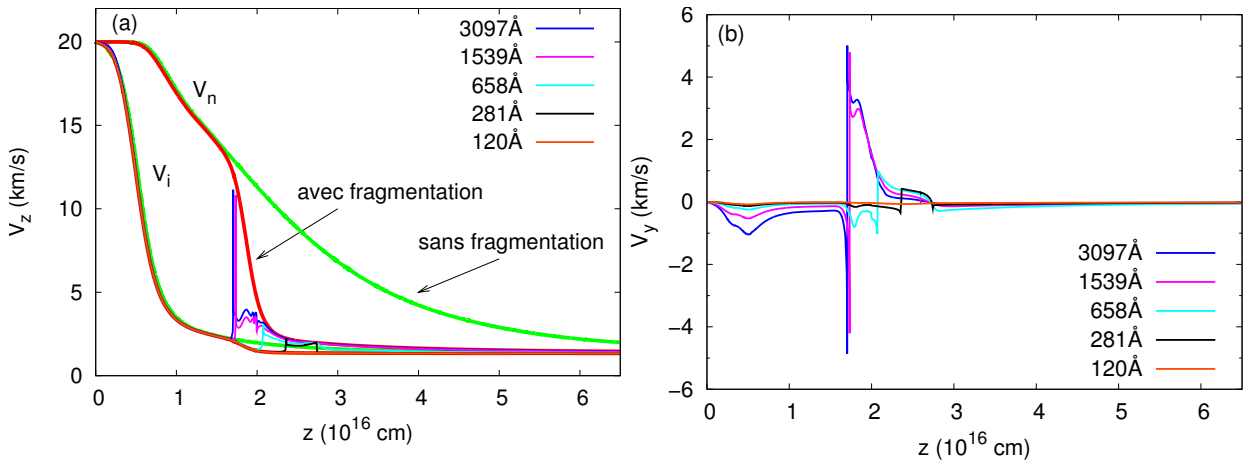


FIGURE 11.9 – Profil calculé de la vitesse fluide (c'est-à-dire à inertie nulle) des poussières silicatées (**a**) dans la direction de propagation d'un choc C de 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ se propageant dans un nuage de densité initiale $n_{\mathrm{H}} = 10^4$ $\mathrm{cm^{-3}}$, et (**b**) parallèlement au front de choc. A comparer avec la dynamique intégrée des mêmes grains dans le même choc à partir des lois du mouvement qui incluent l'inertie du grain (Fig. 11.3a)

Notre modèle permet d'évaluer le traitement des poussières en ignorant l'inertie des grains, c'est-à-dire en assimilant leur vitesse instantanée à leur vitesse fluide calculée par l'équation (8.8), comme cela est couramment fait dans l'étude de la structure des chocs C obliques à haute densité (Pilipp & Hartquist, 1994; Wardle, 1998; Chapman & Wardle, 2006). La dynamique *fluide* des poussières dans un choc C à 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ se propageant à travers un nuage de densité 10^4 $\mathrm{cm^{-3}}$ est présentée sur la figure 11.9, à comparer avec la figure 11.3a. Dans le modèle fluide, les grains silicatés de la MRN sont fortement couplés au champ magnétique dans la direction de propagation du choc, mais pas parallèlement au front de choc. Ce faible différentiel ($\sim 1-2$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$) suffit à fragmenter et à cratériser les grains carbonés (vitesse seuil : 1,2 $\mathrm{km\,s^{-1}}$). Une fois amorcée la production de très petits grains neutres, la fragmentation peut s'emballer comme dans le modèle qui tient compte de l'inertie des grains.

La phase de giration des gros grains ne semble donc pas critique dans notre modélisation. Nous obtenons des résultats très similaires avec un modèle fluide qui ignore l'inertie des grains.

11.3.2 Rôle critique des très petits fragments neutres

Nos résultats avec et sans prise en compte de ces fluctuations de charge diffèrent par contre totalement. Qu'il s'agisse de la fragmentation importante des petits grains ($a \simeq 100$ Å), de la cratérisation des gros grains ($a \simeq 1000$ Å), ou de la vaporisation des très petits grains lors des collisions avec les gros grains, ce sont à chaque fois les très petits grains neutres qui sont à l'œuvre.

Nous avons vu que la fragmentation est négligeable si nous ignorons les fluctuations de charge. Des tests supplémentaires ont permis de conclure que la fragmentation dans le choc était également négligeable si on imposait artificiellement à chaque grain de porter la charge

qu'il aurait porté s'il avait été le seul grain du plasma (plasma avec poussières ou *dust in plasma*) et non la charge réduite que lui impose la présence d'une multitude d'autres grains (plasma poussiéreux ou *dusty plasma*).

Nous pouvons décrire le scénario conduisant à une importante fragmentation des poussières dans les chocs C :

1. L'intense fragmentation dans les chocs C est généré par la rétroaction de la fragmentation sur la densité d'électrons libres dans le gaz qui induit une pénurie d'électrons libres ;
2. L'apparition d'une pénurie d'électrons libres diminue la charge moyenne portée par les très petits grains, avec un retard lié à leur inertie électrique ;
3. La diminution de la charge moyenne des très petits grains augmente la fraction de ces grains qui sont neutres qui tendent à être couplés au gaz ;
4. L'augmentation de la densité de grains découplés du champ magnétique augmente la fragmentation des grains couplés au champ magnétique, relançant la production de très petits fragments.

Tous les éléments sont réunis pour une boucle de rétroaction positive de la fragmentation, et donc une augmentation *exponentielle* du nombre de fragments. L'augmentation de la section efficace totale portée par les poussières introduit dans le choc une boucle de rétroaction, négative celle-ci, qui tend à diminuer la longueur du choc et limite l'intensité totale de la fragmentation dans le choc.

La reprise de giration des gros grains à l'apparition de la pénurie d'électrons libres est finalement anecdotique. Ce n'est pas la fragmentation des gros grains qui contrôle l'emballement de la fragmentation, mais la charge, la dynamique et le traitement des fragments. Le fait que nos résultats dépendent autant des très petits grains complique beaucoup notre tâche. Les paramètres de notre modèle qui régissent le comportement des très petits grains sont en effet mal contraints, voire pour certains artificiels :

Taille des fragments

1. Aucun grain ne peut être plus petit que $a_{\rm inf} = 5$ Å, qui est la limite inférieure de la dernière boîte.
2. Tous nos grains sont sphériques.
3. Les fragments ont une distribution en taille en loi de puissance (coefficient -3.3) jusqu'à 5 Å sans rupture de pente aux petites tailles.

La taille minimale $a_{\rm inf}$ des fragments produits lors des collisions grain-grain a été choisie égale à 5 Å (Jones et al., 1996). Nous considérons qu'en dessous de cette taille (plus précisément, en dessous de la masse correspondante, et donc du nombre d'atomes dans le grain), les grains ressemblent plus à de grosses molécules, comme les PAHs. En choisissant $a_{\rm inf} = 10$ Å, nous aurions fortement limité le nombre de fragments produits [1] et donc l'intensité de la pénurie d'électrons. Pour retrouver les mêmes effets, il aurait alors fallu plus de fragmentation, et donc des vitesses de choc plus élevées. Le problème resterait cependant le même.

1. La distribution en taille des fragments est une loi de puissance $\mathrm{d}n(a)/\mathrm{d}a \propto a^{-3.3}$, *cf.* chapitre 4

En choisissant un modèle de grains sphériques, nous minimisons leur section efficace qui intervient dans le calcul de leur charge. Nous surestimons donc leur inertie électrique et l'effet des fluctuations de charge sur leur dynamique. Mais inversement, nous sous-estimons leur section efficace de collision avec les autres grains, et donc leur traitement.

Modèle de dynamique des fragments

Le modèle de dynamique stochastique des fragments est fondé sur l'étude de Ciolek & Mouschovias (1993). Il ne semble pas que ce modèle doive être remis en cause.

Modèle de charge des fragments

La charge des très petits fragments n'est à notre connaissance pas contrainte par des données expérimentales [1]. Pour la modéliser, nous avons choisi de nous donner une distribution de charge *a priori* et de la modifier de manière à ce que la charge totale soit conservée lors de la fragmentation d'un grain.

Conservation de la charge lors de la fragmentation Le choix d'une conservation de la charge lors de la fragmentation n'est pas évident. On pourrait imaginer que des électrons (ou des ions) puissent être relachés en phase gazeuse lors de la fragmentation des grains. Nous avons testé cette possibilité : les électrons éjectés limitent la pénurie d'électrons libres, et donc le découplage des gros grains, et donc la fragmentation. Mais il ne nous est pas possible, en dehors de toute données expérimentales de fixer le taux d'électrons éjectés lors de la fragmentation, s'il existe. La technique numérique de conservation du flux de charge lors de la fragmentation et la coagulation des grains est présentée en détail à l'annexe F. Elle est indispensable à la résolution de la structure du choc quand la fragmentation est activée, et permet seule à l'intégrateur de passer le cap de la pénurie d'électrons.

Distribution de charge *a priori* pour les fragments Dans notre modèle actuel, la distribution de charge *a priori* des fragments ne contient aucun grain neutre. Ce choix s'appuie sur les nombreuses études sur le tribocharging (*e.g.* Poppe & Schräpler, 2005) qui montrent que les grains tendent à s'échanger des charge (positives ou négatives) lors de collisions. Autre possibilité que nous avons étudiée : mettre une fraction de fragments neutres, ou la totalité. Cette dernière option n'est pas particulièrement crédible et crée une boucle de rétroaction positive. En créant des fragments neutres, nous alimentons directement le réservoir de grains couplés au gaz qui cratérisent les gros grains.

Un dilemne Nous pensons qu'il n'existe pas de modèle de charge des fragments capables de supprimer l'emballement de la fragmentation dans les chocs C. Ce scénario est selon nous crédible, et ne fait que traduire les propriétés des plasmas pousiéreux.

1. Soit les fragments sont tous chargés négativement, et alors une pénurie d'électrons apparaît très rapidement car les fragments consomment beaucoup d'électrons libres.

1. Des données existent pour la charge des gros grains suite à des collisions (Poppe & Schräpler, 2005).

2. Soit la distribution en charge des fragments contient beaucoup de grains neutres, qui iront fragmenter et cratériser les grains chargés, produisant des fragments qui eux-mêmes etc..
3. Soit la distribution en charge est composée à part égale de grains négatifs et positifs. Une telle distribution globalement neutre ne génère pas immédiatement de pénurie d'électrons, mais avec un certain retard lorsque les grains positifs collectent des électrons et deviennent neutres. Les très petits grains neutres apparaissent donc tôt ou tard.
4. Soit les très petits grains sont chargés négativement, et les gros grains chargés positivement. Cette distribution de charge semble résoudre notre dilemne car elle ne génère pas de pénurie d'électrons, et ne produit pas de très petits grains neutres. Cependant, afin de respecter la conservation de la charge, les gros grains devraient porter une charge positive qui s'avère extrêmement élevée. Cela est-il crédible ?

Modèle de traitement des fragments

Le modèle de fragmentation de Tielens et al. (1994) et Jones et al. (1996) est-il toujours valable pour des grains aussi petits que 5 ou 10 Å ? Les collisions avec de si petits grains pourraient-elles aboutir à une destruction du petit grain en dessous de la vitesse seuil de vaporisation ? Cela résoudrait-il pour autant notre problème ?

D'un point de vue numérique, nous avons choisi, suivant l'approche de Jones et al. (1996), d'empêcher les grains de la dernière boîte de participer à la fragmentation (ou à la cratérisation) de manière à ne pas rajouter une boucle de rétroaction positive d'origine purement numérique. La figure 11.10 compare les distributions finales des poussières silicatées pour un choc de 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ suivant plusieurs modèles de test : (1) Modèle présenté jusqu'ici ; (2) comme (1) mais en ignorant l'inertie des grains (vitesse fluide) ; et (3) comme (1) mais avec une distribution de charge des fragments égale à celle de la boîte dans lesquels on les collecte ; (4) comme (1) mais avec les grains de la dernière boîte autorisés à fragmenter et cratériser les autres tailles de grain. Nous pouvons remarquer que les résultats des modèles 1, 2 et 4 sont similaires tandis que le modèle 3 s'en distingue nettement. Pour l'étude du traitement des poussières dans les chocs C, le modèle de distribution de charge des fragments est donc bel est bien plus critique que le modèle de taille, de dynamique ou de traitement des gros grains.

11.4 Conclusions

11.4.1 Comparaison avec les résultats de Caselli et al.§ (1997)

Caselli et al. (1997) ont réalisé la première étude de l'impact de la vaporisation sur la destruction des poussières silicatées et la production concomitante de SiO dans les chocs C. Ces auteurs comparent l'intensité de l'érosion et de la vaporisation des grains en fonction de la vitesse du choc et de la densité pré-choc, dans le cadre d'un modèle de choc C oblique sans chimie intégrant deux fluides de grains : un fluide de gros grains (4000 Å) et un fluide de petits grains (400 Å). Le modèle d'érosion et de vaporisation est repris de Tielens et al.

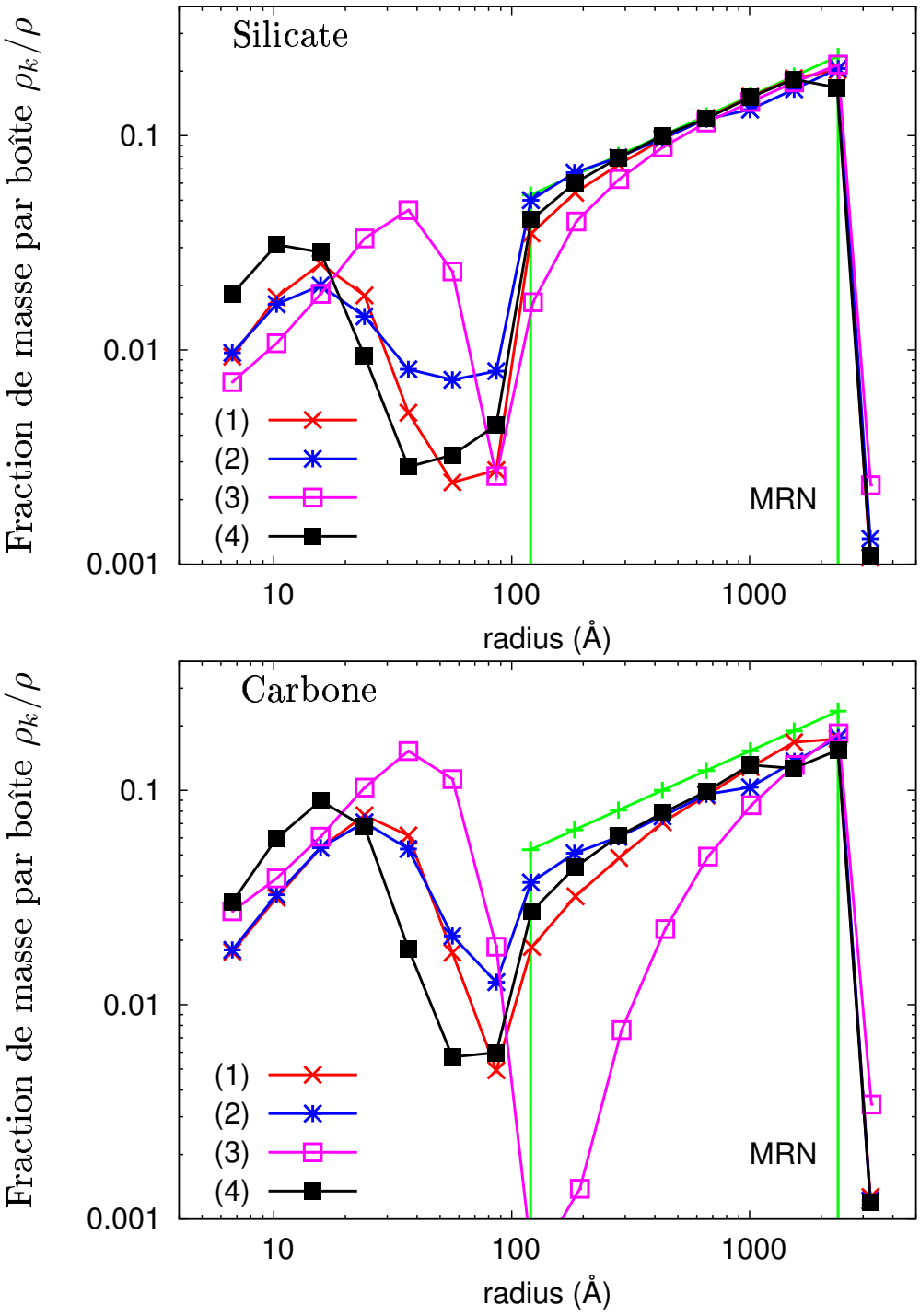


FIGURE 11.10 – Distribution de taille finale des poussières silicatées (**Haut**) et carbonées (**Bas**) en fonction du modèle, pour un choc de 20 km s^{-1} traversant un nuage de densité $n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}. Les densités de masse par boîte ρ_k ont été rapportées à la densité de masse totale de chaque population dans le milieu pré-choc. (1) Résultats de la figure 11.5 à 10^4 ans sans interaction coulombienne ; (2) Comme (1) mais en ignorant l'inertie des grains (vitesse fluide) ; (3) comme (1) avec une distribution initiale de charge des fragments comportant une fraction non négligeable de grains neutres ; et (4) en autorisant les grains de la dernière boîte à fragmenter et cratériser les autres grains.

(1994). L'inertie des grains est négligée mais, comme nous l'avons montré, ce point n'est pas critique pour l'étude du traitement dans les chocs C à haute densité. La vaporisation étant, dans ce modèle, fonction de la vitesse relative entre les gros grains et les petits grains, elle est négligeable à basse densité ($n_{\rm H} = 10^4$ cm^{-3}) car les deux tailles de grain sont alors fortement couplées au champ magnétique. A plus haute densité ($n_{\rm H} = 10^5 - 10^6$ cm^{-3}), les gros grains sont découplés du champ magnétique et couplés au gaz alors que les petits grains restent fortement couplés au champ magnétique (*cf.* chapitres 6 et 10). La vitesse relative entre ces deux tailles de grains est alors approximativement égale à la vitesse de diffusion ambipolaire du choc. Ces auteurs concluent que la vaporisation dans les chocs C obliques domine la destruction des poussières pour des densités supérieures à 5.10^5 cm^{-3} et des vitesses de choc comprises entre 25 et 35 km s^{-1}. Pour des vitesses de choc supérieures, c'est l'érosion des petits grains qui domine.

Nous avons montré qu'il n'est pas possible de négliger l'effet rétroactif de la fragmentation des grains sur l'état d'ionisation du gaz dans les nuages denses, du fait de la faible densité d'électrons libres. Alors que dans le modèle de Caselli et al. (1997), les grains de 400 Å et de 4000 Å sont découplés (comme dans la figure 10.5 pour un choc de 10 km s^{-1}, avec $n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3} et sans traitement des grains), nous trouvons que ces grains tendent à se coupler tous deux au gaz en présence d'une pénurie d'électrons induite par la fragmentation (Fig. 10.5 avec traitement), ce qui favorise la coagulation des petits grains sur les gros grains et non leur vaporisation dans des collisions mutuelles. Cette comparaison est schématique puisqu'il s'agit dans notre cas d'un choc de 10 km s^{-1}, et non de 30 km s^{-1} comme chez Caselli et al. (1997), mais l'effet reste vraisemblablement le même à plus grande vitesse.

La fragmentation tend donc à empêcher la vaporisation des gros grains à haute densité. Ce sont les très petits fragments produits ($a < 30$ Å) qui sont sujets à la vaporisation, étant fortement couplés aux ions quand ils sont chargés et au gaz quand ils sont neutres. Le bilan final du traitement à haute densité reste à faire.

11.4.2 Importance de la fragmentation dans les chocs C

Nous avons montré que la fragmentation était un processus majeur de traitement des poussières dans les milieux denses, et qu'il ne pouvait être ignoré car il détermine non seulement l'intensité de la vaporisation des poussières, mais également la longueur du choc et donc potentiellement l'intensité de l'érosion. Cette conclusion inattendue tient au rôle particulier que jouent les poussières de petites tailles dans les nuages : le gaz étant peu ionisé, la fragmentation fait des poussières le premier composant chargé du plasma, devant les électrons et les ions. Ces résultats suggèrent une révision des modèles de chocs C dans les milieux denses, pour prendre en compte même de façon approximative l'augmentation importante de l'opacité totale des poussières dans le choc par l'emballement de la fragmentation des grains dans un milieu qui n'est pas capable de coupler fortement toutes les tailles de grains au champ magnétique ou au gaz.

Chapitre 12

Conclusions et perspectives

12.1 Modèle

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'évolution des poussières interstellaires en général, et à la modélisation de leur traitement dans les ondes de choc en particulier. Notre modélisation numérique a été intégrée dans le code MHD multi-fluide stationnaire de Flower & Pineau des Forêts (2003) qui résoud de manière consistante l'évolution hors-équilibre 1) de la dynamique (diffusion ambipolaire) et de la température du gaz neutre, des ions et des électrons, 2) de la fraction d'ionisation et de l'abondance de $\sim$ 130 espèces chimiques en phase gazeuse *via* un réseau de $\sim$ 900 équations chimiques en phase gazeuse et sur les grains (*cf.* annexe G pour la liste des espèces et réactions chimiques incluses dans notre modèle), et 3) de la population des niveaux de H_2. Nous avons étendu ce code pour qu'il calcule l'évolution hors-équilibre de la distribution de charge, de la dynamique et du traitement d'une distribution en taille de poussières, de manière à ce que cette évolution soit entièrement couplée à l'évolution du gaz. La dynamique des grains prend en compte les fluctuations de charge et l'inertie des grains. Le traitement des poussières inclut l'effet sur la distribution en taille de deux populations silicatés et carbonées de poussières de la fragmentation, de la coagulation et de la vaporisation lors des collisions grain-grain, de la destruction des cœurs et des manteaux de glaces par érosion et de l'accrétion des manteaux de glaces.

Le champ d'application de notre modèle numérique ne se limite pas aux chocs, mais permet d'étudier l'effet de tout champ de vitesse sur la destruction et l'évolution de la distribution en taille des poussières.

12.2 Résultats

Couplage intime entre poussières et gaz

Nous avons montré que l'évolution des poussières est, dans les milieux denses, intimement couplée à celle du gaz, et que ces milieux méritent bien le nom de plasmas poussiéreux (*dusty plasmas*). Le calcul de la *distribution de charge hors-équilibre* des grains est à tout point de vue l'élément central de notre modélisation. C'est la grandeur qui dicte la dynamique

relative des différentes tailles de grains. Elle est couplée à l'état d'ionisation du gaz et s'avère *critique* pour l'étude du traitement des poussières. L'évolution de la charge des poussières est, malheureusement, très sensible à certains paramètres qui sont pour l'instant assez mal contraints expérimentalement.

Conclusion importante de notre étude, les micro-processus qui déterminent l'évolution des poussières sont capables de modifier les échelles dynamiques caractéristiques du gaz choqué. La fragmentation des poussières, qui accentue encore le couplage entre gaz et poussières, est à cet égard critique. Nous avons démontré qu'un couplage complet de l'évolution des poussières et du gaz est non seulement nécessaire, mais également possible d'un point de vue numérique. Le code, basé sur l'intégrateur VODE, gère entre $\sim$ 600 et 2000 variables d'intégration selon les situations étudiées. Le temps de calcul est tout au plus de l'ordre de quelques heures pour la résolution de la structure d'un choc C.

Traitement des poussières dans les chocs

Nous avons présenté la première étude du traitement des poussières dans les chocs J traversant les milieux denses. Les chocs J se révèlent capables de détruire les poussières à hauteur de quelques pourcents, principalement par vaporisation, mais potentiellement aussi par érosion dans les chocs les plus rapides ($\sim 50\ \mathrm{km\,s^{-1}}$), contrairement à ce qui est généralement admis. Ce sont donc des candidats, d'habitude mis de côté, pour l'interprétation des raies de SiO observées dans les flots moléculaires et les jets.

Dans les chocs C, à la destruction des poussières par érosion (qui a déjà fait l'objet de plusieurs études) s'ajoute une destruction par vaporisation qui peut être plus importante. La vaporisation des poussières dans les chocs C de vitesse $\sim 40\ \mathrm{km\,s^{-1}}$ est stimulée par la fragmentation des grains.

Les chocs C modifient fortement la distribution en taille des poussières. La fragmentation des grains déclenche l'apparition d'une pénurie d'électrons libres dans le gaz qui impose la coexistence de gros grains chargés positivement et de très petits grains chargés négativement. Cette situation est, du fait de l'interaction coulombienne entre grains, très favorable à l'augmentation du taux de coagulation dans la queue du choc. Le processus de coagulation ne s'avère cependant pas capable, pour une densité pré-choc $n_{\mathrm{H}} = 10^4\ \mathrm{cm^{-3}}$ et dans les limites de notre modèle de coagulation (*cf.* paragraphe suivant), de reformer les gros grains détruits par fragmentation, ni de faire croître de manière significative la taille des gros grains, ni même de faire disparaître les fragments produits dans le choc. La fragmentation et la cratérisation des grains est si intense dans les chocs C de vitesse supérieure à $20\ \mathrm{km\,s^{-1}}$ que, dans nos résultats préliminaires, la taille du choc est diminuée d'à peu près un ordre de grandeur pour un milieu pré-choc de densité $n_{\mathrm{H}} = 10^4\ \mathrm{cm^{-3}}$. Si ce résultat se confirme, cela implique notamment qu'un choc C pourrait devenir stationnaire en un temps beaucoup plus court que considéré habituellement, et que la probablité d'observer des chocs C stationnaires autour des jeunes étoiles serait donc plus élevée.

Limites de notre modélisation

La modélisation actuelle n'est pas bien adaptée à l'étude de la croissance des grains par coagulation et accrétion de manteaux de glace :

- Les grains sont supposés sphériques, homogènes et non poreux, alors que les produits de la coagulation sont vraisemblablement poreux, inhomogènes, et avec une structure fractale.
- Le traitement des manteaux lors des collisions grain-grain est ignoré (*cf.* § 9.2.2).
- La température des grains n'est pas traitée.

Il nous est impossible dans le cadre du modèle actuel d'étudier la formation de grains non homogènes par coagulation entre des grains carbonés et silicatés enrobés de manteaux de glace. En effet, les grains produits ont une composition qui dépend de leur histoire. Si la taille d'un grain homogène suffit à définir entièrement ce grain (sa densité spécifique étant connue), cela n'est plus vrai pour les grains inhomogènes. Il faudrait également connaître la stœchiométrie de leur composition chimique, voire leur structure. Seule une approche statistique pourrait contourner cette difficulté.

Nos résultats préliminaires pour le traitement des poussières dans les chocs C sont également à confirmer. Ils reposent sur un modèle de charge pour les fragments qui n'est pas contraint expérimentalement. Cependant, la rétroaction importante de la fragmentation sur la structure des chocs semble difficilement contournable.

Synthèse des effets de rétroaction sur les chocs C

Nous résumons ci-dessous, avec les références aux figures et sections correspondantes, les principaux effets de rétroaction des poussières dans les chocs C, en raison de la charge qu'elles portent, des fluctuations de charge qu'elles subissent, de leur dynamique et de leur traitement dans le choc.

Apparition d'une pénurie d'électrons libres La fragmentation génère une pénurie durable d'électrons libres (Fig. 11.3b) qui découple les gros grains du champ magnétique, relance leur giration et leur fragmentation.

Coexistence de grains chargés de signe contraire La pénurie d'électrons a pour conséquence de faire coexister des gros grains positifs et des très petits grains négatifs, du fait du comportement hors-équilibre de la charge des grains, plus prononcé pour les très petits grains (*cf.* Fig. 11.3b). L'interaction coulombienne entre ces grains de charges opposées augmente le taux de coagulation des grains dans la queue des chocs (Fig. 11.5(b,c)).

Modification du couplage entre le gaz et le champ magnétique Comme nous l'avons montré aux chapitres 10 et 11, la fragmentation et la coagulation des poussières peuvent modifier profondément l'intensité du couplage entre le gaz et le champ magnétique, et donc la longueur du choc C (Figs. 10.8, 11.3a, 11.7a,11.9a et 11.9a).

Vaporisation des poussières La fragmentation des poussières produit de très nombreux petits grains qui peuvent être vaporisés lors de collisions avec de plus gros grains. La vaporisation des silicates aboutit directement à la formation de SiO, sans chimie en phase gazeuse. A la différence de la vaporisation des silicates dans les chocs J, ce SiO vaporisé ne sera pas dissocié dans le choc (Table 11.1).

Diminution de la fraction d'ionisation par la fragmentation Le taux de recombinaison des ions sur les poussières chargées négativement est grandement augmenté par la fragmentation des grains car la section efficace totale de recombinaison sur les poussières est alors plus importante. La fraction d'ionisation dans la partie chaude du choc est donc plus basse que dans un modèle sans fragmentation (Fig. 11.3b).

Modification de la vitesse critique des chocs C La charge moyenne portée par chaque taille de poussières détermine, par leur facteur de Hall, la vitesse critique des chocs C (*cf.* chapitre 6)

Les nuages denses et les chocs C sont des *dusty plamas* La charge totale portée par les grains, accentuée encore par leur fragmentation, fait des poussières le premier constituant chargé du gaz dans les chocs C, bien loin devant les ions et les électrons (Fig. 11.6). Il est nécessaire de réévaluer l'importance des très petits grains poussières sur la propagation des chocs C.

Effets du découplage des poussières sur la structure des chocs C Deux sections de l'article 2 sont consacrées à la rétroaction de la dynamique des grains sur la structure d'un choc se propageant dans un nuage à haute densité ($n_{\rm H} = 10^6$ cm^{-3}) : 1) l'apparition d'un champ électrique dans la direction $\mathbf{e}_z$ de propagation du choc, généré par le découplage des gros grains (chargés) du champ magnétique, et 2) l'effet du découplage de ces gros grains sur l'intensité des échanges de quantité de mouvement et d'énergie entre le gaz neutre et le fluide des ions, et donc sur la longueur du choc.

Effet rétroactif dans les chocs J dissociatifs : reformation de H_2

Nous mentionnons également cet effet rétroactif du traitement des grains, qui n'a pas été détaillé dans la thèse mais qui est bien pris compte. Le taux de reformation du dihydrogène dans la queue des chocs J est fonction de la section efficace totale des fragments, et donc de l'intensité de la fragmentation et de l'éventuelle destruction des très petits grains par érosion.

12.3 Perspectives

Dans un futur proche, il serait souhaitable de mettre en place le calcul des propriétés optiques de la distribution de poussières dans les choc C et J (ce qui implique de calculer la température des grains), ainsi qu'un calcul de l'intensité de raies caractéristiques comme celles de SiO à partir d'un modèle LVG, afin de proposer des résultats directement confrontables aux observations des nuages choqués autour des jeunes étoiles.

Il sera également très profitable de suivre de près l'évolution des recherches sur les plasmas poussiéreux. D'une part, des expériences de laboratoire ont montré que les plasmas denses et peu ionisés voient leurs propriétés transformées par la présence d'une grande abondance de poussières. De nouveaux comportements collectifs (ondes MHD, ondes de choc) apparaissent, qui placent les poussières au rang de constituant à part entière du plasma, à l'égal des ions

et des électrons. Ce champ de recherche très fécond devrait aider à reconsidérer sous un jour nouveau les mécanismes de croissance des grains dans les milieux denses. Il faudra également approfondir l'étude de l'effet de l'interaction coulombienne sur la croissance des grains. La mise en évidence expérimentale de la gélation induite par l'attraction dipolaire entre grains (Ivlev et al., 2002; Konopka et al., 2005) semble prometteuse. D'autre part, la charge et la dynamique des grains sont depuis longtemps des sujets d'étude féconds de la recherche sur le milieu interplanétaire. La découverte au début des années 80 par les sondes Voyager de « rayons » (« spokes ») sur les anneaux de Saturne, qui se révélèrent par la suite être des poussières en lévitation électrostatique sur les anneaux, a contribué à dynamiser ce champ d'étude (Goertz, 1989; Hartquist et al., 1992; Horanyi, 1996). Les travaux effectués dans ce domaine de recherche sont plus élaborés que ce qui se fait pour le milieu interstellaire. C'est un champ de recherche plus ancien et qui a tiré un grand profit des expérience in-situ des missions spatiales.

Il ne semble pas envisageable pour l'instant de passer à un modèle 2D qui permettrait par exemple d'étudier la physique MHD des chocs d'étrave et le traitement des poussières qui s'ensuit. Un modèle 1D local sera peut-être suffisant. Dans la lignée de l'étude de Chapman & Wardle (2006), il serait très intéressant d'étudier l'effet de la fragmentation sur la rotation du champ magnétique dans les chocs obliques (celle-ci devrait en toute logique la réduire), en restant dans le cadre d'un modèle fluide sans inertie qui est justifié à haute densité.

Le traitement des poussières par la turbulence est une des futures applications importantes de notre modélisation. La turbulence est un bon candidat pour expliquer la croissance des grains dans les nuages ou dans les disques d'accrétion. La turbulence en présence de champ magnétique est un sujet sur lequel peut se nouer une collaboration stimulante entre observations, simulations numériques et modélisation. La mission Herschel, qui va ouvrir aux observateurs la fenêtre de l'infrarouge lointain au submillimétrique (là où les grains froids, gros ou très petits, émettent leur spectre thermique), complètera le spectre d'émission de la distribution de poussières, et permettra peut-être de mettre en évidence les conditions physiques qui gouvernent l'évolution de la poussière dans les nuages moléculaires : turbulence ? chocs ? comportements collectifs de type *dusty plasmas* ? Cette étude pourra être étendue au traitement des poussières à l'interface entre les phases diffuses et denses, dans les PDRs, lors des phases d'intermittence etc..

Pour finir, l'émission des poussières dans l'infrarouge est un traceur de la formation stellaire dans la Galaxie et les galaxies « starburst », et aussi de l'activité d'un AGN dans les ULIRGs. A l'heure actuelle, les modélisations de l'émission à grande longueur d'onde des galaxies infrarouges n'intègrent pas de modèle d'évolution des poussières dans les conditions physiques qui doivent y présider. A long terme, il serait très intéressant d'appliquer à ces contextes astrophysiques plus larges notre modèle couplé au calcul des propriétés optiques des poussières, afin de contribuer à la définition de modèles physiques explicatifs de l'émission des poussières des galaxies infrarouges.

Annexe A

Equations différentielles pour la résolution des chocs C

Dans cette section, nous présentons les caractéristiques principales du modèle de choc MHD 3-fluides de Flower & Pineau des Forêts (2003), en mettant l'accent sur la gestion des poussières.

A.1 Variables MHD et équations de conservation

Nous présentons d'abord un modèle 3 fluides simplifié qui ignore la présence des PAHs ou des poussières :

- les ions positifs [1] : vitesse V_i, température T_i, masse ρ_i par unité de volume, nombre n_i par unité de volume ;
- le gaz neutre : vitesse V_n, température T_n, masse ρ_n par unité de volume, nombre n_n par unité de volume ;
- les électrons : même vitesse V_i que les ions (car tous deux fortement couplés au champ magnétique) mais avec une température propre T_e ; le nombre d'électrons n_e par unité de volume est déterminé par l'équation de neutralité.

Au total nous avons 9 variables indépendantes : V_i, V_n, T_i, T_n, T_e, ρ_n, ρ_i, n_n, et n_i.

Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie nous fournissent les 9 équations différentielles nécessaires au calcul de ces 9 variables indépendantes (Draine, 1980) :

- Gaz neutre :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(n_\mathrm{n} V_\mathrm{n}\right) = N_\mathrm{n} \tag{A.1}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\rho_\mathrm{n} V_\mathrm{n}\right) = S_\mathrm{n}\,, \tag{A.2}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\rho_\mathrm{n} V_\mathrm{n}^2 + n_\mathrm{n} k T_\mathrm{n}\right) = A_\mathrm{n}\,, \tag{A.3}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\left(\frac{1}{2}\rho_\mathrm{n} V_\mathrm{n}^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} n_\mathrm{n} k T_\mathrm{n}\right) V_\mathrm{n}\right) = B_\mathrm{n}\,. \tag{A.4}$$

1. Le modèle de Flower & Pineau des Forêts (2003) n'inclut pas d'ions négatifs.

- Fluide chargé :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(n_\mathrm{i}V_\mathrm{i}\right) = N_\mathrm{i} \tag{A.5}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}\right) = S_\mathrm{i}\,, \tag{A.6}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2 + n_\mathrm{i}k\left(T_\mathrm{i}+T_\mathrm{e}\right) + \frac{B^2}{8\pi}\right) = A_\mathrm{i}\,, \tag{A.7}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\left(\frac{1}{2}\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1}n_\mathrm{i}k\left(T_\mathrm{i}+T_\mathrm{e}\right) + \frac{B^2}{4\pi}\right)V_\mathrm{i}\right) = B_\mathrm{i}+B_\mathrm{e}\,, \tag{A.8}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\left(\frac{\gamma}{\gamma-1}n_\mathrm{i}k\left(T_\mathrm{i}-T_\mathrm{e}\right)\right)V_\mathrm{i}\right) = B_\mathrm{i}-B_\mathrm{e}\,. \tag{A.9}$$

La masse moyenne des particules d'un fluide est $\mu = \rho/n$, la densité d'électrons libres n_e est égale à celle des ions n_i par l'équation de neutralité, la pression thermique est $P = nkT/\mu$. B_0 est le champ magnétique du milieu pré-choc. Si on rajoute l'hypothèse du *champ gelé* (*cf.* § 3.2.1), alors :

$$B = B_0\frac{V_\mathrm{s}}{V_\mathrm{i}}\,, \tag{A.10}$$

ce qui permet de définir entièrement le problème à l'aide des 9 variables physiques définies au paragraphe précédent.

Les termes sources N, S, A, et B quantifient les contributions des neutres (indice n), des ions (indice i), des électrons (indice e) et de la poussières (indice d pour *dust*) respectivement aux échanges de particules, de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les trois fluides. Ce sont ces termes qui définissent la micro-physique à l'œuvre dans le choc. Leur expression est détaillée au paragraphe A.4.

A.2 Equations différentielles dans un modèle sans poussières

Des trois équations de conservation, on peut déduire après quelques manipulations les équations différentielles permettant l'intégration directe du profil de la vitesse, température et densité de masse des écoulements neutre et chargé à travers le choc depuis les conditions pré-choc.

Equations pour le fluide neutre

On cherche d'abord à déterminer l'expression de la différentielle $\mathrm{d}V_\mathrm{n}/\mathrm{d}z$. Pour cela, il faut faire disparaître la différentielle $\mathrm{d}T_\mathrm{n}/\mathrm{d}z$ de l'équation (A.4), en y introduisant le membre gauche de l'équation différentielle (A.3) :

$$\begin{aligned}(\gamma-1)B_\mathrm{n} &= \gamma\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\left(\rho_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2 + n_\mathrm{n}kT_\mathrm{n}\right)V_\mathrm{n}\right] - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\frac{\gamma+1}{2}\rho_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^3\right)\\ &= \gamma\left[A_\mathrm{n}V_\mathrm{n} + \left(\rho_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2 + n_\mathrm{n}kT_\mathrm{n}\right)\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z}\right] - \frac{\gamma+1}{2}\left(S_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2 + 2\rho_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z}\right)\,,\end{aligned}$$

d'où

$$\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z} = \frac{\frac{1}{2}(\gamma+1)\,S_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2 - \gamma A_\mathrm{n}V_\mathrm{n} + (\gamma-1)\,B_\mathrm{n}}{\rho_\mathrm{n}\,(c_\mathrm{n}^2 - V_\mathrm{n}^2)}\,, \tag{A.11}$$

où $c_\mathrm{n} = \sqrt{\gamma k T_\mathrm{n}/\mu_\mathrm{n}}$ est la vitesse du son dans le gaz neutre.

L'équation différentielle (A.11) n'est pas définie quand la vitesse V_n d'écoulement du gaz neutre dans le référentiel du choc est égale à la vitesse du son c_n dans ce gaz. Quand cela arrive, l'intégration a rencontré un *point sonique* qui empêche d'aller plus loin. Cela signifie que le problème posé (caractéristiques du milieu pré-choc, vitesse du choc) ne présente pas de solution de type choc C stationnaire, mais de type J ou C* (Chernoff, 1987).

Une fois connue l'expression de $\mathrm{d}V_\mathrm{n}/\mathrm{d}z$, les équations différentielles (A.1) et (A.2) régissant respectivement l'évolution de la densité et de la densité de masse ρ_n des neutres s'écrivent simplement :

$$\frac{\mathrm{d}n_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_\mathrm{n}}\left(N_\mathrm{n} - n_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z}\right)\,, \tag{A.12}$$

$$\frac{\mathrm{d}\rho_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_\mathrm{n}}\left(S_\mathrm{n} - \rho_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z}\right)\,. \tag{A.13}$$

Pour déterminer la différentielle $\mathrm{d}T_\mathrm{n}/\mathrm{d}z$ de la température es neutres, on développe les équations (A.4) et (A.3) :

$$\begin{aligned}
B_\mathrm{n} &= \frac{1}{2}S_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2 + \rho_\mathrm{n}V_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z} + \frac{\gamma}{\gamma-1}k\left[N_\mathrm{n}T_\mathrm{n} + n_\mathrm{n}V_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}T_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z}\right]\,,\\
A_\mathrm{n}V_\mathrm{n} &= S_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2 + \rho_\mathrm{n}V_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z} + k\left[n_\mathrm{n}V_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}T_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z} + T_\mathrm{n}\left(N_\mathrm{n} - \rho_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z}\right)\right]\,,\\
B_\mathrm{n} - A_\mathrm{n}V_\mathrm{n} + \frac{1}{2}S_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2 &= k\left(\frac{1}{\gamma-1}n_\mathrm{n}V_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}T_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z} + \frac{1}{\gamma-1}N_\mathrm{n}T_\mathrm{n} + n_\mathrm{n}T_\mathrm{n}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z}\right)\,,
\end{aligned}$$

pour aboutir à l'expression différentielle suivante :

$$\frac{\mathrm{d}T_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z} = \frac{(\gamma-1)}{k n_\mathrm{n}V_\mathrm{n}}\left(\frac{1}{2}S_\mathrm{n}V_\mathrm{n}^2 - A_\mathrm{n}V_\mathrm{n} + B_\mathrm{n}\right) - \left(N_\mathrm{n} + (\gamma-1)\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{n}}{\mathrm{d}z}\right)\frac{T_\mathrm{n}}{V_\mathrm{n}}\,. \tag{A.14}$$

Equations pour les fluides chargés

Les équations différentielles (A.5) et (A.6) régissant l'évolution de la densité et de la densité de masse des ions s'écrivent :

$$\frac{\mathrm{d}n_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_\mathrm{i}}\left(N_\mathrm{i} - n_\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right)\,. \tag{A.15}$$

$$\frac{\mathrm{d}\rho_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_\mathrm{i}}\left(S_\mathrm{i} - \rho_\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right)\,, \tag{A.16}$$

Pour déterminer l'expression de la différentielle $\mathrm{d}V_\mathrm{i}/\mathrm{d}z$ de la vitesse commune des ions et des électrons, on fait apparaître le terme A_i dans l'équation (A.8) de façon à en faire disparaître

la différentielle $\mathrm{d}(T_\mathrm{i}+T_\mathrm{e})/\mathrm{d}z$:

$$\begin{aligned}
&(\gamma-1)\,(B_\mathrm{i}+B_\mathrm{e})\\
=\;&\gamma\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\left(\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2+n_\mathrm{i}k\,(T_\mathrm{i}+T_\mathrm{e})+\frac{B^2}{8\pi}\right)V_\mathrm{i}\right]-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\left(\frac{(\gamma+1)}{2}\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2-(\gamma-2)\frac{B^2}{8\pi}\right)V_\mathrm{i}\right]\\
=\;&\gamma\left[A_\mathrm{i}V_\mathrm{i}+\left(\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2+n_\mathrm{i}k\,(T_\mathrm{i}+T_\mathrm{e})+\frac{B^2}{8\pi}\right)\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right]-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\frac{\gamma+1}{2}\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^3-(\gamma-2)\frac{B^2}{8\pi}V_\mathrm{i}\right)\\
=\;&\gamma\left[A_\mathrm{i}V_\mathrm{i}+\left(\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2+n_\mathrm{i}k\,(T_\mathrm{i}+T_\mathrm{e})+\frac{B^2}{8\pi}\right)\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right]-\frac{\gamma+1}{2}\left(S_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2+2\rho_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right)\\
&-(\gamma-2)\frac{B^2}{8\pi}\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\,,
\end{aligned}$$

en utilisant l'hypothèse du champ gelé (Eq. (A.10)). Cette dernière équation se simplifie pour donner l'équation différentielle suivante directement intégrable sur z :

$$\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}=\frac{\frac{1}{2}\,(\gamma+1)\,S_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2-\gamma A_\mathrm{i}V_\mathrm{i}+(\gamma-1)\,(B_\mathrm{i}+B_\mathrm{e})}{\rho_\mathrm{i}\,(V_\mathrm{ims}^2-V_\mathrm{i}^2)}\,, \tag{A.17}$$

où

$$V_\mathrm{ims}=\sqrt{\gamma\frac{k\,(T_\mathrm{i}+T_\mathrm{e})}{\mu_\mathrm{i}}+\frac{B^2}{4\pi\rho_\mathrm{i}}} \tag{A.18}$$

est la vitesse magnétosonique dans le fluide des ions. Dans un choc C, l'écoulement est par définition moins rapide que les ondes magnétosoniques dans le fluide chargé ($V_\mathrm{i}<V_\mathrm{ims}^2$) et cette équation est donc toujours intégrable.

Les équations différentielles régissant les températures T_i des ions et T_e des électrons s'expriment sous la forme :

$$\frac{\mathrm{d}T_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}=\frac{(\gamma-1)}{kn_\mathrm{i}V_\mathrm{i}}\left(\frac{1}{2}S_\mathrm{i}V_\mathrm{i}^2-A_\mathrm{i}V_\mathrm{i}+B_\mathrm{i}\right)-\left(N_\mathrm{i}+(\gamma-1)\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right)\frac{T_\mathrm{i}}{V_\mathrm{i}}\,, \tag{A.19}$$

$$\frac{\mathrm{d}T_\mathrm{e}}{\mathrm{d}z}=\frac{(\gamma-1)}{kn_\mathrm{i}V_\mathrm{i}}B_\mathrm{e}-\left(N_\mathrm{i}+(\gamma-1)\frac{\mathrm{d}V_\mathrm{i}}{\mathrm{d}z}\right)\frac{T_\mathrm{e}}{V_\mathrm{i}}\,. \tag{A.20}$$

A.3 Introduction des poussières

Dans notre modèle, la distribution en taille des poussières modélisée par k_max boîtes de taille n'est *pas* gérée comme autant de fluides supplémentaires. La variable d'intégration pertinente pour les poussières est le flux de masse f_k, qui a la propriété d'être conservé en l'absence de traitement. Si nous faisons abstraction pour l'instant du calcul de la distribution de charge des grains, pour nous concentrer sur le traitement et la dynamique, f_k vérifie les équations différentielles suivantes :

Conservation de la masse

$$\frac{\mathrm{d}f_k}{\mathrm{d}z}=\sum_j F_{j,k}+G_k\,, \tag{A.21}$$

où $F_{j,k}$ est le terme source de transfert de flux de masse de la boîte j vers la boîte k (pour la fragmentation et la coagulation) et G_k est la perte de flux de masse de la boîte k par érosion et vaporisation. Par conservation de la masse totale de poussières lors de la fragmentation et de la coagulation des grains :

$$\sum_k \sum_j F_{j,k} = 0\,. \tag{A.22}$$

Conservation de la quantité de mouvement

La dynamique des poussières, incluant leur inertie, est déterminée à partir de l'intégration des lois du mouvement. Le couplage collisionnel entre le gaz et les poussières s'exprime sous la forme d'un terme source pour le fluide neutre qui s'ajoute à A_n dans l'équation (A.3) :

$$A_\mathrm{dn} = \rho_\mathrm{n} \sum_k \sigma_k \Big[n_{k,0} \sqrt{(\mathbf{V}_{k,0} - \mathbf{V}_\mathrm{n})^2 + \frac{128k}{9\pi m_\mathrm{n}} T_\mathrm{n}}\ (V_{k,0z} - V_\mathrm{n}) + n_{k,\mathrm{c}} \sqrt{(\mathbf{V}_{k,\mathrm{c}} - \mathbf{V}_\mathrm{n})^2 + \frac{128k}{9\pi m_\mathrm{n}} T_\mathrm{n}}\ (V_{k,\mathrm{c}z} - V_\mathrm{n}) \Big]\,, \tag{A.23}$$

où $V_{\mathrm{k},0}$ et $V_{\mathrm{k},\mathrm{c}}$ sont les vitesses fluides des poussières de la boîte k respectivement neutres (Eq. (8.14)) et chargées (Eq. (8.13)), $n_{k,0}$ et $n_{k,\mathrm{c}}$ leurs nombres par unité de volume, σ_k la section efficace moyenne des grains (cœurs + manteaux) de la boîte k.

Influence de l'apparition de grains chargés sur la formation du précurseur magnétique Les transferts de quantité de mouvement entre fluides ne se limitent pas aux collisions. Quand les grains se chargent à l'entrée du choc, leur facteur de Hall Γ qui détermine leur couplage au champ magnétique augmente (*cf.* chapitre 6). A cette augmentation du facteur de Hall correspond donc un transfert de quantité de mouvement et d'énergie cinétique du gaz vers le champ magnétique. Le transfert total correspond cependant tout au plus à 1 % de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique du gaz pré-choc, ce qui est négligeable devant ce que le gaz va transférer au champ magnétique dans le choc (à la limite 100% pour une compression infinie du gaz). Ce terme devrait pouvoir être négligé. Il a pour effet de comprimer le fluide des ions tôt dans le précurseur magnétique, là où la température des électrons et des ions a déjà augmenté, et avant que les neutres aient eu le temps d'etre freiné, et donc d'avoir cédé une partie significative (plus de 1 %) de leur énergie cinétique et de leur quantité de mouvement.

Pas de transfert de quantité de mouvement lors du traitement des grains Nous n'assurons pas la conservation de la quantité de mouvement lors du traitement des grains, chaque boîte de grain ayant une vitesse associée indépendante de l'histoire des grains.

Conservation de l'énergie

Les pertes d'énergie des poussières sont d'origine frictionnelles ou magnétiques. La partie frictionnelle est gérée côté poussières par l'intégration des lois du mouvement. Côté gaz, elle

se traduit par l'ajout d'un terme source B_d d'origine frictionnelle dans le membre de droite de l'équation (A.4) :

$$B_\mathrm{dn} = \rho_\mathrm{n} \sum_k \sigma_k \Big[n_{k,0} \sqrt{(\mathbf{V}_{k,0} - \mathbf{V}_\mathrm{n})^2 + \frac{128k}{9\pi m_\mathrm{n}} T_\mathrm{n}} \; (V_{k,0z} - V_\mathrm{n}) \; V_{k,0z} + n_{k,\mathrm{c}} \sqrt{(\mathbf{V}_{k,\mathrm{c}} - \mathbf{V}_\mathrm{n})^2 + \frac{128k}{9\pi m_\mathrm{n}} T_\mathrm{n}} \; (V_{k,\mathrm{c}z} - V_\mathrm{n}) \; V_{k,\mathrm{c}z} \Big] . \quad \text{(A.24)}$$

Le transfert d'énergie cinétique des grains au champ magnétique (résultat de la pression magnétique) se traduit par l'emploi, dans l'équation (A.17), de la vitesse magnétosonique dans le fluide chargé (ions + poussières) en place de la vitesse magnétosonique dans le fluide des ions :

$$V_\mathrm{cms} = \sqrt{\gamma \frac{k\,(T_\mathrm{i} + T_\mathrm{e})}{\mu_\mathrm{i}} + \frac{B^2}{4\pi\,(\rho_\mathrm{i} + \rho_\mathrm{c})}} , \quad \text{(A.25)}$$

où ρ_c est la masse par unité de volume de poussières couplées au champ magnétique (c'est-à-dire avec $\Gamma \geq 1$, *cf.* chapitre 6).

Pas de transfert d'énergie lors du traitement des grains Comme pour la quantité de mouvement, notre modèle ne nous permet pas d'assurer la conservation de l'énergie cinétique des poussières entre l'avant et l'après traitement.

A.4 Liste des termes sources

Pour coupler la résolution de la structure MHD du choc avec la chimie, nous devons introduire une équation de conservation supplémentaire pour chaque espèce chimique α. Les réactions chimiques (ionisation et dissociation collisionelle ou radiative, recombinaisons radiative et dissociative, réaction neutre-neutre etc.) produisent et détruisent à chaque instant des espèces chimiques neutres et chargées. On note $C_{\alpha,r}$ le taux de réaction de l'espèce chimique α (ions, atome, molécule, grain) dans la réaction r, et α_n (resp. α_i) l'ensemble des espèces chimiques neutres (resp. chargées) :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}(n_\alpha V_\mathrm{n}) = C_\alpha \qquad (\alpha \in \alpha_\mathrm{n}) , \quad \text{(A.26)}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}(n_\alpha V_\mathrm{i}) = C_\alpha \qquad (\alpha \in \alpha_\mathrm{i}) . \quad \text{(A.27)}$$

Les termes sources N sont donc simplement :

$$N_\mathrm{i} = \sum_{\alpha \in \alpha_\mathrm{n}} C_\alpha , \quad \text{(A.28)}$$

$$N_\mathrm{n} = \sum_{\alpha \in \alpha_\mathrm{i}} C_\alpha . \quad \text{(A.29)}$$

Le choc stationnaire pris dans son ensemble étant un système isolé, nous devons avoir :

$$S_{\rm n} + S_{\rm i} = 0\,, \tag{A.30}$$
$$A_{\rm n} + A_{\rm i} + A_{\rm d} = 0\,, \tag{A.31}$$
$$B_{\rm n} + B_{\rm i} + B_{\rm e} + B_{\rm d} = 0\,. \tag{A.32}$$

Comme la gestion des poussières se fait seulement pour partie dans le cadre MHD des 3 fluides, la conservation totale de la quantité de mouvement et de l'énergie n'est qu'approximative.

Echange et création de particules en phase gazeuse

Les réactions chimiques produisent des échanges entre le fluide chargé et le fluide neutre avec les taux suivants

- Nombre d'espèces chimiques par unité de volume :

$$N^\chi = \sum_{\alpha,\, r>0} C_{\alpha,r} - \sum_{\alpha,\, r<0} C_{\alpha,r}\,, \tag{A.33}$$

  où $r > 0$ designe les réactions de production et $r < 0$ les réactions de destruction de l'espèce chimique α.

- Masse :

$$S^\chi = \sum_{\alpha,\, r>0} C_{\alpha,r}\,\mu_\alpha - \sum_{\alpha,\, r<0} C_{\alpha,r}\,\mu_\alpha\,. \tag{A.34}$$

- Quantité de mouvement :

$$A^\chi = \sum_{\alpha,\, r>0} C_{\alpha,r}\,\mu_\alpha\,V_{\rm cm} - \sum_{\alpha,\, r<0} C_{\alpha,r}\,\mu_\alpha\,V_\alpha\,, \tag{A.35}$$

  où $V_{\rm cm}$ est la vitesse du centre de masse des réactifs (et donc aussi celui des produits par conservation de la quantité de mouvement au cours de la réaction) et V_α est la vitesse incidente de l'espèce chimique α ($V_{\rm i}$ pour les ions et les électrons, $V_{\rm n}$ pour les atomes et les molécules).

- Energie :

$$B^\chi_{\rm n} = \sum_{\alpha,\, r>0} C_{\alpha,r}\,\frac{1}{2}\,\mu_\alpha\,\left(V^2_{\rm cm} + \frac{\mu_{\rm R}\,\mu_{\rm P}}{\mu^2_\alpha}\Delta V_{\rm R}\right) - \sum_{\alpha,\, r<0} C_{\alpha,r}\,\frac{1}{2}\,\mu_\alpha\,V_\alpha\,, \tag{A.36}$$

  où $\mu_{\rm R}$ est la masse réduite des réactifs, $\mu_{\rm P}$ celle des produits et $\Delta V_{\rm R}$ la différence de vitesse entre les réactifs (c'est-à-dire $V_{\rm n} - V_{\rm i}$ pour une réaction ion - neutre, zéro sinon).

Recombinaison des ions sur les grains

Mise à part la formation de H_2, les seules réactions chimiques sur les grains prises en compte dans notre modèle sont les réactions d'attachement électronique et ionique responsables des fluctuations de charge des grains. Ce terme d'attachement cache en fait des réactions chimiques de recombinaison des ions, le produit neutre étant ensuite expulsé en phase

gazeuse [1]. Comme nous l'avons vu, les fluctuations de charge des gros grains ($a \geq 100$ Å) sont suffisamment rapides pour que la neutralisation d'un grain ne supprime pas son couplage [2] au champ magnétique. Dès lors, lorsqu'un grain de chargé devient neutre par attachement d'un ion ou d'un électron, sa masse, sa quantité de mouvement et son énergie cinétique ne sont transférées au fluide neutre. Elles restent associées au fluide chargé, du fait des rapides fluctuations de charge du grain [3].

Les équations (A.33) et (A.34) de conservation du nombre de grain et de la masse totale des grains sont gérés indépendamment de la chimie par notre module de traitement des grains. La masse des grains est considérable en comparaison de celle des particules du gaz. Les équations (A.35) et (A.36) de transfert de quantité de mouvement et d'énergie entre les fluides sont en principe valables quelles que soient les masses des réactifs. Cependant, aucun intégrateur ne peut additionner un grand nombre à une donnée puis lui soustraire ce même grand nombre sans perdre automatiquement toute précision sur la donnée initiale. Il est donc proscrit d'un point de vue numérique d'utiliser la vraie masse des grains dans ces équations, qui doivent donc être adaptées aux réactions à la surface des grains. Mis à part les photons UV responsables de l'effet photoélectrique [4] sur les grains (*cf.* annexe D.3), les seules particules réagissant à la surface des grains sont des ions. Les grains étant dans leur grande majorité couplés au champ magnétique comme les ions, la réaction chimique de recombinaison d'un ion sur un grain ne donne lieu à aucun transfert de quantité de mouvement ni d'énergie entre le grain et l'ion. Nous pouvons alors conserver le formalisme général des équations (A.35) et (A.36) en imposant que pour toutes les réactions où des grains sont en jeu :

$$\mu_{\rm grain} = 0\,, \tag{A.37}$$
$$V_{\rm cm} = V_{\rm i}\,, \tag{A.38}$$
$$\Delta V_{\rm R} = 0\,. \tag{A.39}$$

Collisions élastiques (non réactives)

La diffusion ambipolaire dans les chocs C est à l'origine de collisions entre le gaz neutre d'une part et les ions et les grains d'autre part. Ces collisions se traduisent par des transferts de quantité de mouvement et d'énergie entre les deux fluides (sachant que $m_{\rm e} \ll \mu_{\rm n}$)

- Quantité de mouvement :

$$A_{\rm n}^{\phi_{\rm i}} = \frac{\rho_{\rm i}\,\rho_{\rm n}}{\mu_{\rm i}+\mu_{\rm n}}\,\langle\sigma v\rangle_{\rm in}\,(V_{\rm i}-V_{\rm n})\,, \tag{A.40}$$
$$A_{\rm n}^{\phi_{\rm d}} = \sum_k n_k\,\sigma_k^2\,|\mathbf{V}_k - V_{\rm n}|\,(V_{kz}-V_{\rm n})\,. \tag{A.41}$$

1. Sans cette réaction de recombinaison entre l'ion et un électron présent à la surface du grain, suivi de l'éjection du produit de la réaction, le grain grossirait par accrétion.
2. Le facteur de couplage d'un grain au champ magnétique est le facteur de Hall du grain, qui est fonction de sa charge moyenne et non de sa charge instantanée (*cf.* chapitre 6).
3. Quand le grain neutre redevient chargé, aucun transfert en sens inverse ne se fait.
4. Les réactions de photoémission des électrons du grain ne mettent en jeu aucun échange d'énergie ni de quantité de mouvement.

- Energie :

$$B_{\rm n}^{\phi_{\rm i}} = \frac{\rho_{\rm i}\,\rho_{\rm n}\,\langle\sigma v\rangle_{\rm in}}{(\mu_{\rm i}+\mu_{\rm n})^2}\Big(3k\,(T_{\rm i}-T_{\rm n})+(V_{\rm i}-V_{\rm n})\,(\mu_{\rm i}V_{\rm i}+\mu_{\rm n}V_{\rm n})\Big) = -B_{\rm i}^{\phi_{\rm n}}\,, \quad \text{(A.42)}$$

$$B_{\rm n}^{\phi_{\rm e}} = \frac{\rho_{\rm i}\,\rho_{\rm n}\,\langle\sigma v\rangle_{\rm in}}{\mu_{\rm i}+\mu_{\rm n}}\,\frac{m_{\rm e}}{\mu_{\rm n}}\Big(4k\,(T_{\rm e}-T_{\rm n})+(V_{\rm i}-V_{\rm n})\;\mu_{\rm n}V_{\rm n}\Big) = -B_{\rm e}^{\phi_{\rm n}}\,, \quad \text{(A.43)}$$

$$B_{\rm n}^{\phi_{\rm d}} = A_{\rm n}^{\phi_{\rm d}}\,V_{\rm i}\,. \quad \text{(A.44)}$$

Autres transferts d'énergie

Transfert d'énergie thermique entre réactants Les espèces chimiques neutres (température $T_{\rm n}$) sont produits en phase gazeuse par recombinaison radiative ou dissociative d'un ion (température $T_{\rm i}$) et d'un électron (température $T_{\rm e}$). Cette réaction donne lieu au transfert d'énergie thermique :

$$B_{\rm n}^{\rm Q} = \sum_{\alpha_{\rm n}}\left[\sum_{r>0}C_{\alpha,r}\frac{3}{2}k\frac{T_{\rm i}+T_{\rm e}}{2}+\sum_{r<0}C_{\alpha,r}\frac{3}{2}kT_{\rm n}\right]\,, \quad \text{(A.45)}$$

$$B_{\rm i}^{\rm Q} = \sum_{\alpha_{\rm i}}\left[\sum_{r<0}C_{\alpha,r}\frac{3}{2}kT_{\rm i}+\sum_{r>0}C_{\alpha,r}\frac{3}{2}kT_{\rm n}\right]\,, \quad \text{(A.46)}$$

$$B_{\rm e}^{\rm Q} = \sum_{\alpha_{\rm i}}\left[\sum_{r<0}C_{\alpha,r}\frac{3}{2}kT_{\rm e}\right]\,. \quad \text{(A.47)}$$

Endothermicité ou exothermicité des réactions chimiques L'endothermicité ou l'exothermicité des réactions chimiques peut agir comme facteur refroidissant ou facteur de chauffage de chaque fluide. Si ΔE est la différence d'énergie et M la masse totale des produits de la réaction :

$$B^{\rm E} = \sum_{\alpha}\sum_{r>0}C_{\alpha,r}\frac{M_r-\mu_\alpha}{M_r}\Delta E\,. \quad \text{(A.48)}$$

Collisions élastiques électrons/ions Les électrons sont chauffés par diffusion coulombienne sur les ions :

$$B_{\rm e}^{\rm C} = \frac{4e^2}{\mu_{\rm i}kT_{\rm e}}\sqrt{\frac{8kT_{\rm e}}{\pi m_{\rm e}}}\ln\Lambda\left(\frac{\rho_{\rm i}}{\mu_{\rm i}}\right)^2 k\,(T_{\rm i}-T_{\rm e}) = -B_{\rm i}^{\rm C}\,. \quad \text{(A.49)}$$

Annexe B

Démonstrations des expressions du chapitre 7

B.1 Dérive électrique

En l'absence d'un champ électrique, un grain chargé décrit dans un champ magnétique uniforme un mouvement circulaire uniforme autour des lignes de champ. Considérons maintenant l'existence, dans un référentiel noté $\Re$, d'un champ électrique $\mathbf{E}$ uniforme et *perpendiculaire* à $\mathbf{B}$. Comme le champ électrique dépend du référentiel d'étude, nous pouvons le faire disparaître par un simple changement de référentiel, nous ramenant ainsi au cas simple du mouvement cyclotron.

Considérons un référentiel $\Re'$ en mouvement rectiligne uniforme à la vitesse $\mathbf{V}_{\Re'/\Re}$ par rapport à $\Re$. Pour des vitesses $\mathbf{V}_{\Re'/\Re}$ non-relativistes :

- le vecteur champ magnétique $\mathbf{B}$ en un point donné est indépendant du référentiel considéré $\Re$ ou $\Re'$;
- le vecteur champ électrique $\mathbf{E}$ en un point donné est transformé par changement de référentiel suivant la loi :

$$\mathbf{E}_{\Re'} = \mathbf{E}_{\Re} + \mathbf{V}_{\Re'/\Re} \times \mathbf{B}\,. \tag{B.1}$$

On montre facilement que, dans le référentiel $\Re'$ en mouvement uniforme à la vitesse :

$$\mathbf{V}_{\Re'/\Re} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \tag{B.2}$$

par rapport au référentiel $\Re$, le champ électrique $\mathbf{E}_{\Re'}$ est uniformément nul. Le mouvement du grain chargé est donc dans ce référentiel $\Re'$ un simple mouvement cyclotron autour d'un centre immobile, appelé *centre-guide*.

On en conclut que, dans le référentiel $\Re$ où le champ électrique n'est pas nul, le grain est animé d'un mouvement de *giration à rayon constant autour de son centre-guide qui est en mouvement*. Cette vitesse du centre-guide du grain, appelée vitesse de *dérive électrique,* est donnée par l'équation B.2.

B.2 Une force constante ne peut pas accélérer un grain chargé

Nous allons montrer dans ce paragraphe que des forces constantes ne peuvent modifier l'énergié cinétique moyenne d'un grain chargé évoluant dans un champ magnétique uniforme.

Un seule force constante perpendiculaire à B

Dans le cas où une seule force non magnétique s'applique sur la particule, la puissance instantanée fournie par cette force est :

$$\begin{aligned} P_F &= \mathbf{F}\cdot\mathbf{v}\,, \\ P_F &= \mathbf{F}\cdot\mathbf{V}+\mathbf{F}\cdot\mathbf{v}_{\rm gir}\,, \\ P_F &= \mathbf{F}\cdot\mathbf{v}_{\rm gir}\,, \end{aligned}$$

car $\mathbf{F}$ est perpendiculaire à $\mathbf{V}=\mathbf{F}\times\mathbf{B}/(qB^2)$.

Si l'on suppose la force constante, la puissance moyenne sur une giration est :

$$\langle P_F\rangle = \mathbf{F}\cdot\langle\mathbf{v}_{\rm gir}\rangle\,.$$

Si l'on suppose également la vitesse de giration constante en module au cours d'une giration, alors :

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{v}_{\rm gir}\rangle &= \mathbf{0}\,, \\ \langle P_F\rangle &= 0\,. \end{aligned}$$

On en conclut, à partir du théorème de l'énergie cinétique, que l'énergie cinétique *moyenne* de la particule reste constante au cours du temps. Ce résultat n'est valable que pour la moyenne de l'énergie cinétique sur une giration, l'énergie cinétique instantanée variant au cours de la giration du fait de la puissance instantanée de la force $\mathbf{F}$.

Deux forces constantes perpendiculaires à B

Considérons maintenant le cas où deux forces s'exercent sur la particule chargée, toutes deux perpendiculaires au vecteur champ magnétique $\mathbf{B}$. Nous choisissons de plus, par clarté, de les choisir perpendiculaires entre elles, mais cela n'enlève rien à la généralité de la démonstration.

La force électrique $\mathbf{F}_E = q\mathbf{E}$ génère une dérive $\mathbf{V}_E = \mathbf{E}\times\mathbf{B}/(B^2)$, tandis que la force non électrique $\mathbf{F}$ génère la dérive $\mathbf{V}=\mathbf{F}\times\mathbf{B}/(qB^2)$. La puissance instantanée fournie par la force électrique est :

$$\begin{aligned} P_E &= \mathbf{F}_E\cdot\mathbf{v}\,, \\ &= \mathbf{F}_E\cdot\mathbf{V}_E+\mathbf{F}_E\cdot\mathbf{V}_F+\mathbf{F}_E\cdot\mathbf{v}_{\rm gir}\,. \end{aligned}$$

Pour la même raison qu'au paragraphe précédent, la puissance moyenne électrique sur une giration est :

$$\langle P_E\rangle = \mathbf{F}_E\cdot\mathbf{V}_F\,.$$

De la même manière, on montre que la puissance moyenne fournie par la force non électrique sur une giration est :

$$\langle P_F \rangle = \mathbf{F} \cdot \mathbf{V}_E \,.$$

La puissance totale reçue par la particule sur une giration est donc :

$$\begin{aligned}
\langle P \rangle &= \langle P_E \rangle + \langle P_F \rangle \,, \\
\langle P \rangle &= \mathbf{F}_E \cdot \mathbf{V}_E + \mathbf{F} \cdot \mathbf{V}_F \,, \\
\langle P \rangle &= q\mathbf{E} \cdot \frac{\mathbf{F} \times \mathbf{B}}{qB^2} + \mathbf{F} \cdot \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \,, \\
\langle P \rangle &= \frac{1}{B^2}(\mathbf{E} \cdot (\mathbf{F} \times \mathbf{B}) + \mathbf{F} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B})) \,, \\
\langle P \rangle &= 0 \,.
\end{aligned}$$

La puissance moyenne reçue par la particule est nulle. La puissance fournie par la première force est compensée par celle prélevée par la seconde. L'énergie cinétique de la particule moyennée sur chaque giration reste constante au cours du temps.

B.3 Effet des forces fluides sur la dynamique du grain

Une force fluide $\mathbf{F} = -k\,\mathbf{v}$ amortit la giration

Nous allons démontrer l'expression littérale de la vitesse d'un grain chargé plongé dans un champ magnétique uniforme et soumis à une force fluide de type $-k\mathbf{v}$. L'équation du mouvement de la particule soumise à la force magnétique et à la force de frottement s'écrit :

$$m\frac{\mathrm{d}\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} - k\mathbf{v} \,. \tag{B.3}$$

Nous allons résoudre cette équation vectorielle en passant en notation complexe. Prenons $\mathbf{e}_y$ comme axe des réels et $\mathbf{e}_z$ comme axe des imaginaires purs. En posant la notation $\overline{V} = v_y + iv_z$, l'équation du mouvement s'écrit

$$m\frac{\mathrm{d}\overline{V}}{\mathrm{d}t} = -iqB_0\overline{V} - k\overline{V} \,, \tag{B.4}$$

$$\frac{\mathrm{d}\overline{V}}{\mathrm{d}t} + (i.s(q)\omega + \frac{k}{m})\overline{V} = 0 \,, \tag{B.5}$$

avec $\omega = |q|B_0/m$ la fréquence cyclotron du grain, $\tau = m/k$ le temps caractéristique de freinage et $s(q)$ la fonction signe de la charge q. Cette équation différentielle a pour solution :

$$\overline{V} = e^{-(\tau + i.s(q)\omega)t}\overline{V_0} \,, \tag{B.6}$$

où $\overline{V}_0$ est une vitesse déterminée par les conditions initiales. Le mouvement de la particule est donc une giration amortie autour du centre-guide de la particule qui ne dérive pas (*cf.* Fig. 7.5).

Une force fluide $\mathbf{F} = -k(\mathbf{v} - \mathbf{V}_\mathrm{n})$ génère de plus une dérive

De la même manière qu'au paragraphe précédent, nous allons démontrer l'expression littérale de la vitesse d'un grain chargé plongé dans un champ électromagnétique $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ uniforme et soumis à une force fluide de type $-k(\mathbf{v} - \mathbf{V}_\mathrm{n})$. L'équation du mouvement de la particule est :

$$m\frac{\mathrm{d}\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} + q\mathbf{E} - k(\mathbf{v} - \mathbf{V}_\mathrm{n})\,. \tag{B.7}$$

Nous résolvons cette équation vectorielle en passant en notation complexe avec $\overline{V} = v_y + iv_z$:

$$m\frac{\mathrm{d}\overline{V}}{\mathrm{d}t} = -iqB_0\overline{V} - qE_0 - k\overline{V} + ikV_\mathrm{n}\,. \tag{B.8}$$

Avec les même notations qu'au paragraphe précédent, nous obtenons l'équation différentielle suivante :

$$\frac{\mathrm{d}\overline{V}}{\mathrm{d}t} + (i.s(q)\omega + \frac{1}{\tau})\overline{V} = -s(q)\omega\frac{E_0}{B_0} + i\frac{1}{\tau}V_n\,. \tag{B.9}$$

Cette équation différentielle a pour solution la solution générale déjà déterminée au paragraphe précédent, ajoutée à une solution particulière de cette équation. Nous obtenons donc la solution générale suivante :

$$\overline{V} = e^{-(\frac{1}{\tau}+is(q)\omega)t}\overline{V_0} + \frac{-s(q)\omega\tau\frac{E_0}{B_0} + iV_n}{1 + is(q)\omega\tau}\,, \tag{B.10}$$

où $\overline{V_0}$ est une vitesse déterminée par les conditions initiales.

$$\begin{aligned}
\overline{V} &= e^{-\frac{t}{\tau}}e^{-is(q)\omega t}\overline{V_0} + \frac{(-s(q)\omega\tau\frac{E_0}{B_0} + iV_\mathrm{n})(1 - i.s(q)\omega\tau)}{(1 + i.s(q)\omega\tau)(1 - i.s(q)\omega\tau)}\,,\\
\overline{V} &= e^{-\frac{t}{\tau}}e^{-is(q)\omega t}\overline{V_0} + \frac{s(q)\omega\tau(V_n - \frac{E_0}{B_0}) + i(V_\mathrm{n} + \frac{E_0}{B_0}(\omega\tau)^2)}{1 + (\omega\tau)^2}\,.
\end{aligned}$$

En coordonnées cartésiennes, les composantes de la vitesse de la particule sont :

$$\begin{aligned}
v_y &= v_{0y}e^{-\frac{t}{\tau}}cos(-s(q)\omega t) + \frac{s(q)\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}(V_\mathrm{n} - \frac{E_0}{B_0})\,,\\
v_z &= v_{0z}e^{-\frac{t}{\tau}}sin(-s(q)\omega t) + \frac{E_0}{B_0} + \frac{1}{1 + (\omega\tau)^2}(V_\mathrm{n} - \frac{E_0}{B_0})\,.
\end{aligned}$$

La partie de ces expressions indépendante du temps défini *la vitesse de dérive de friction* induite par le mouvement du gaz relativement au grain. Elle est fonction du paramètre $\omega\tau$ qui est le *facteur de Hall* de la particule (*cf.* chapitres 6). L'équation (34) de Draine (1980) nous en donne une formulation similaire.

B.4 Dérive inertielle

Supposons que, le champ électrique étant uniformément nul, la force non électromagnétique $\mathbf{F}$ soit suceptible de varier en intensité, tout en restant constante en direction. Pour rester dans un modèle linéaire, nous n'analysons que les cas de variations suffisamment lentes de la dérive du centre-guide, c'est-à-dire dans les cas où la force F varie lentement. Pour des raisons de simplicité de l'exposé, nous nous limiterons ici au modèle suivant :

$$\mathbf{F} = k \times z\, \mathbf{e}_y \,, \tag{B.11}$$

où z est la position du grain selon $\mathbf{e}_z$, et $k > 0$ un coefficient de proportionnalité choisi de telle manière que les variations de F sur une giration soient suffisamment faible et qu'il soit possible d'appliquer la formule de la vitesse de dérive (7.3).

Le champ magnétique étant uniforme, la vitesse de dérive du centre-guide du grain chargé V_F augmente proportionnellement à F et est dirigée selon $\mathbf{e}_z$:

$$\mathbf{V}_F = \frac{\mathbf{F} \times \mathbf{B}}{qB^2} \,, \tag{B.12}$$

$$= \frac{k}{qB} \times z\, \mathbf{e}_z \,. \tag{B.13}$$

La figure B.1 présente la trajectoire d'un grain soumis à cette force. Nous pouvons vérifier que la vitesse de dérive du grain $\mathbf{V}_{\text{inertie}}$ augmente selon z, comme le montre la distance grandissante entre deux girations successives. Nous observons également une dérive du grain selon $\mathbf{e}_y$ (la dérive inertielle) et une variation du rayon de giration (et donc de la vitesse de giration puisque le champ magnétique est uniforme).

Nous écrivons l'expression de la dérive inertielle à partir de l'équation (7.5) :

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{\text{inertie}} &= -m \frac{\mathrm{d}\mathbf{V}_F}{\mathrm{d}t} \times \frac{\mathbf{B}}{qB^2} \,, \\ &= \frac{mk}{q^2B^2} \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}\, \mathbf{e}_y \,. \end{aligned}$$

Nous pouvons alors déterminer l'équation de la trajectoire du centre-guide du grain dans le cas que nous nous sommes choisi :

$$\begin{aligned} Y &= \int_0^t V_{\text{inertie}}\, \mathrm{d}t \,, \\ &= \int_0^z \frac{mk}{q^2B^2}\, \mathrm{d}z \,, \\ &= \frac{mk}{q^2B^2}\, z \,. \end{aligned}$$

Cette trajectoire rectiligne est tracée sur la figure B.1. Une fois recentrée, elle reproduit parfaitement la dynamique du centre-guide du grain, ce qui confirme, sans la démontrer, notre expression (7.5) pour la vitesse de la dérive inertielle.

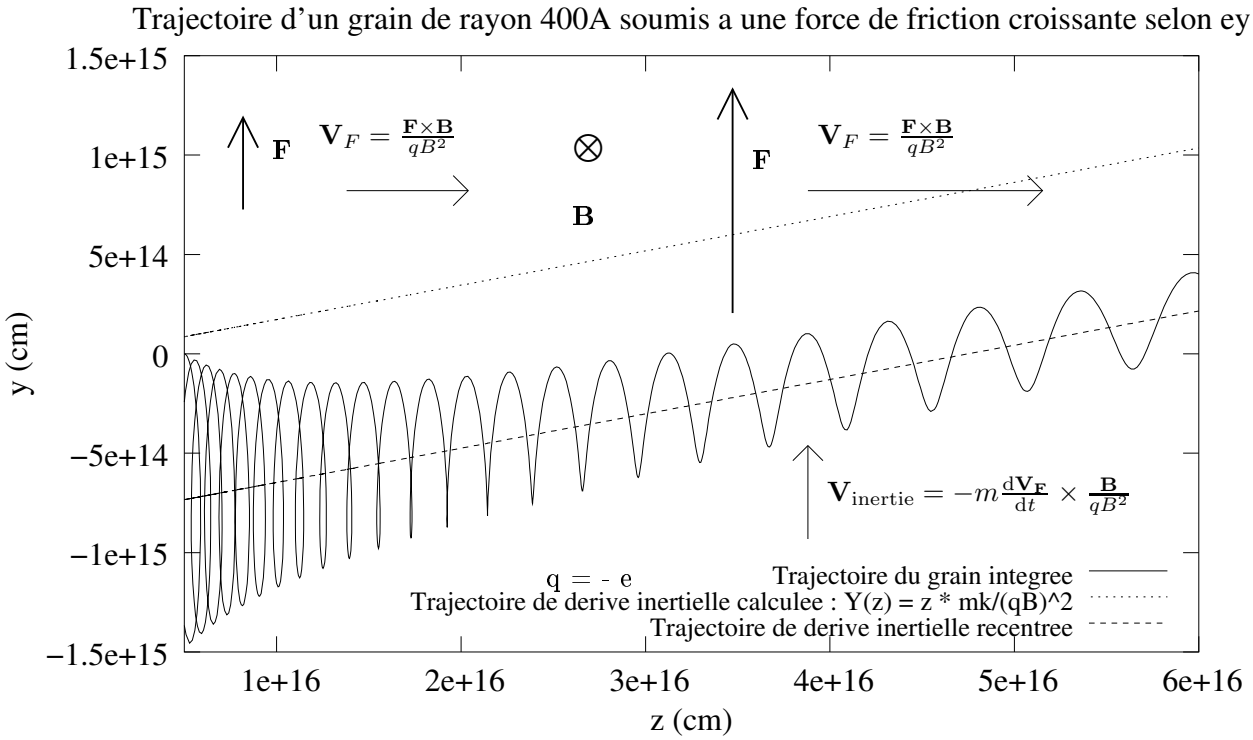


FIGURE B.1 – Trajectoire d'un grain chargé négativement dans un champ électromagnétique uniforme et soumis à une force $\mathbf{F}$ dirigée selon $\mathbf{e}_y$ et dont l'intensité augmente selon $\mathbf{e}_z$. Pour des raisons de présentation, les échelles selon $\mathbf{e}_y$ et $\mathbf{e}_z$ ne peuvent être les mêmes et les girations quasi circulaires apparaissent donc très aplaties selon $\mathbf{e}_z$.

Origine de la dérive inertielle Dans un champ magnétique uniforme, la vitesse de dérive inertielle peut être considérée comme *le terme du premier ordre dans le développement linéaire de la vitesse de dérive induite par une force non constante.*

$$\begin{aligned}
\mathbf{V}_{\text{inertie}} &= -m\frac{\mathrm{d}\mathbf{V}_F}{\mathrm{d}t} \times \frac{\mathbf{B}}{qB^2}\,, \\
&= -m\frac{\mathrm{d}\left(\frac{\mathbf{F}\times\mathbf{B}}{qB^2}\right)}{\mathrm{d}t} \times \frac{\mathbf{B}}{qB^2}\,, \\
&= \left(--m\frac{\mathrm{d}\mathbf{F}}{\mathrm{d}t} \times \frac{\mathbf{B}}{qB^2}\right) \times \frac{\mathbf{B}}{qB^2}\,,
\end{aligned}$$

ce qui nous donne le terme correcteur à ajouter à l'équation (7.3) pour pouvoir l'appliquer au cas d'une force lentement variable :

$$\mathbf{V}_F = \left(\mathbf{F} - -m\frac{\mathrm{d}\mathbf{F}}{\mathrm{d}t} \times \frac{\mathbf{B}}{qB^2}\right) \times \frac{\mathbf{B}}{qB^2}\,. \tag{B.14}$$

B.5 Force magnétique moyenne

Nous nous plaçons dans le cas d'un champ magnétique lentement variable, c'est-à-dire que la variation de l'intensité du champ magnétique est très faible au cours de la giration de

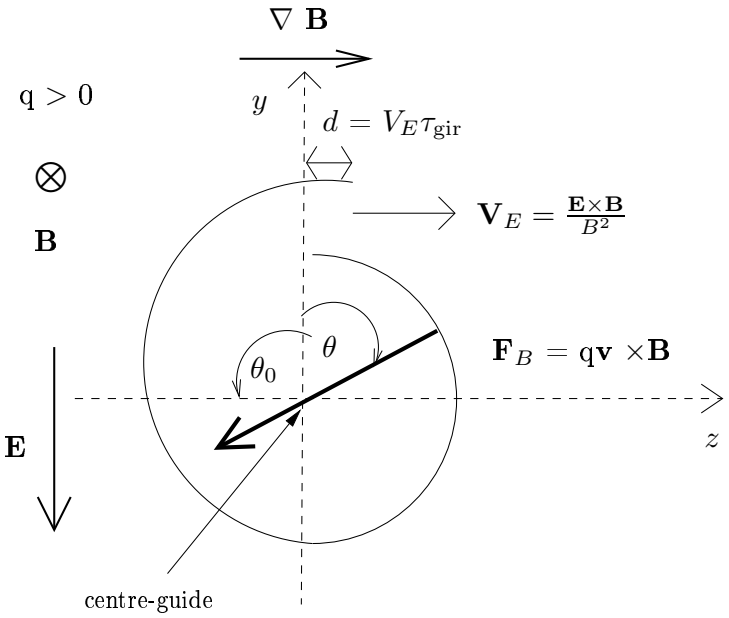


FIGURE B.2 – Valeur moyenne de la force magnétique sur une giration dans le cas d'un champ magnétique lentement variable dans l'espace

la particule et peut être considérée comme constante. Nous rappelons que dans toute notre étude, le gradient de champ magnétique est *perpendiculaire* au vecteur champ magnétique.

La figure B.2 présente la situation dans le cas d'un champ électrique $\mathbf{E}$ uniforme et d'un gradient de champ magnétique $\nabla\mathbf{B}$ constant sur une giration.

On développe la valeur du champ magnétique B au premier ordre en ∇B :

$$B = B_0 + z\nabla B\,. \tag{B.15}$$

La particule pénètre dans des champs magnétiques plus intense du fait de sa giration et de sa dérive électrique :

$$z = R_{\text{gir}} \sin\theta + V_E t\,. \tag{B.16}$$

Comme $\theta = (qB_0/m)t$, nous obtenons :

$$B = B_0 + \frac{m}{qB_0}(v_{\text{gir}} \sin\theta + V_E\theta)\nabla B\,. \tag{B.17}$$

Pour des raisons de symétrie, la force magnétique moyenne est dirigée selon $\mathbf{e}_z$ et a pour valeur :

$$\langle F_B \rangle = \frac{1}{2\pi} \oint q v_y B\,. \tag{B.18}$$

La vitesse de la particule selon y est une simple giration, les variations de courbure n'étant imputables qu'aux varations du champ magnétique traversé. On a donc $v_y = v_{\text{gir}} \sin\theta$.

$$\langle F_B \rangle = \frac{1}{2\pi} \quad \Big(\quad \oint q v_{\text{gir}} B_0 \sin\theta \, d\theta \,,$$
$$+ \quad \oint \frac{m v_{\text{gir}}^2}{B_0} \nabla B \sin^2\theta \, d\theta \,,$$
$$+ \quad \oint q v_{\text{gir}} V_E \nabla B \theta \sin\theta \, d\theta \, \Big) \,.$$

Dans le cas d'un champ magnétique lentement variable dans l'espace, v_{gir} et ∇B peuvent être considérés constants sur une giration. Le développement de $V_E = E/B$ au premier ordre en ∇B n'apportant que des termes en $(\nabla B)^2$, nous considérons V_E comme constant sur une giration et égale à E/B_0.

Avec ces approximations :

- la première de ces trois intégrales est nulle
- la deuxième est la valeur moyenne de la fonction $\sin^2$ qui vaut $1/2$
- la troisième exige de préciser les bornes d'intégration : intégrant de θ_0 à $\theta_0 + 2\pi$, θ_0 étant un angle quelconque, une intégration par partie donne :

$$\int_{\theta 0}^{\theta 0 + 2\pi} \theta \sin\theta \, d\theta = -2\pi \cos\theta_0 \,. \tag{B.19}$$

La valeur moyenne de cette intégrale prise sur tout angle θ_0 est donc nulle. Cette troisième intégrale est donc nulle en moyenne au cours du mouvement.

$$\langle F_B \rangle = \frac{m v_{\text{gir}}^2}{2B_0} \nabla B \,. \tag{B.20}$$

Utilisant la définition du moment magnétique d'une particule $\mu = m v_{\text{gir}}^2/(2B)$, nous obtenons l'expression suivante de la force magnétique moyennée sur une giration

$$\langle \mathbf{F_B} \rangle = \mu \nabla \mathbf{B} \,. \tag{B.21}$$

La force magnétique moyennée sur une giration ne dépend donc pas explicitement de la vitesse de pénétration de la particule dans le champ magnétique, tant que l'approximation du champ magnétique lentement variable reste valable.

B.6 Conservation du moment magnétique

Cette étude énergétique fait référence à la figure 7.10 qui montre graphiquement la conservation du moment magnétique du grain chargé. Le grain chargé pénètre dans un gradient de champ magnétique faible et constant $\nabla \mathbf{B} = \nabla B \, \mathbf{e}_z$, et dans un champ électrique uniforme $\mathbf{E} = E \, \mathbf{e}_y$ perpendiculaire à $\mathbf{B} = B \, \mathbf{e}_x$ et à $\nabla \mathbf{B}$.

Dans ces conditions, le grain chargé subit trois dérives :

- une dérive électrique d'expression $\mathbf{V}_E$ qui le pousse vers les champs magnétiques intenses ;
- une dérive de gradient d'expression $\mathbf{V}_{\nabla B} = -\mu \nabla B/(qB^2) \, \mathbf{e}_y$;

- une dérive inertielle d'expression $V_{\text{inertie}} = mV_E^2 \nabla B/(qB^3)\,\mathbf{e}_y$.

Sur une giration, la force électrique fournit la puissance moyenne

$$\begin{aligned}
\langle P_E \rangle &= q\mathbf{E}\cdot\mathbf{V}\,,\\
\langle P_E \rangle &= q\mathbf{E}\cdot\left(\frac{E}{B}\,\mathbf{e}_z + (-\mu + \frac{mV_E^2}{B})\frac{\nabla B}{qB^2}\,\mathbf{e}_y\right)\,,\\
\langle P_E \rangle &= (\mu - \frac{mV_E^2}{B})V_E \nabla B\,,
\end{aligned}$$

d'où l'expression :

$$\langle P_E \rangle = (\mu - \frac{mV_E^2}{B})\frac{dB}{dt}\,. \tag{B.22}$$

L'énergie cinétique instantanée de la particule positionnée à l'angle θ_0 est :

$$\begin{aligned}
E_{\text{c}} &= \frac{1}{2}m(\mathbf{V}_E + \mathbf{v}_{\text{gir}})^2\,,\\
E_{\text{c}} &= \frac{1}{2}m(V_E^2 + v_{\text{gir}}^2 + 2\mathbf{V}_E\cdot\mathbf{v}_{\text{gir}}\,,\\
E_{\text{c}} &= \frac{1}{2}mV_E^2 + \frac{1}{2}mv_{\text{gir}}^2 + mV_E v_{\text{gir}}\cos\theta_0\,.
\end{aligned}$$

Le troisième terme de cette expression est nulle en moyenne sur une giration.

$$\begin{aligned}
\langle E_{\text{c}} \rangle &= \frac{1}{2}mV_E^2 + \frac{1}{2}mv_{\text{gir}}^2\,,\\
\langle E_{\text{c}} \rangle &= \frac{1}{2}m(\frac{E}{B})^2 + \mu B\,.
\end{aligned}$$

La variation d'énergie cinétique instantanée vaut donc en moyenne :

$$\frac{\mathrm{d}\langle E_{\text{c}} \rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{mV_E^2}{B}\frac{dB}{dt} + \mu\frac{dB}{dt} + B\frac{d\mu}{dt}\,. \tag{B.23}$$

Posons maintenant le bilan énergétique de la particule. La force magnétique ne travaillant pas :

$$\frac{\mathrm{d}\langle E_{\text{c}} \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle P_E \rangle_{\text{giration}}\,.$$

La plupart des termes de ces deux expressions s'annulant deux à deux, nous obtenons la relation :

$$\frac{d\mu}{dt} = 0\,. \tag{B.24}$$

La valeur moyenne prise sur une giration du moment magnétique μ de la particule est donc bien conservée au cours de la dérive pour des champs magnétique lentement variables. La conservation du moment magnétique est assurée par le travail de la force électrique imposé principalement par la dérive diamagnétique (terme en $\mu\,\mathrm{d}B/\mathrm{d}t$ de l'équation (B.22)) mais aussi par la dérive inertielle (terme en $mV_E^2/B\,\mathrm{d}B/\mathrm{d}t$ de l'équation (B.22)).

Remarque sur le lien entre dérive inertielle et conservation du moment magnétique μ Cette démonstration de la conservation du moment magnétique μ met en évidence comment *la vitesse de dérive inertielle est indispensable pour assurer la conservation de* μ. La perte d'énergie cinétique du grain lors du freinage du centre-guide est représentée par le terme en $-\frac{mV_E^2}{B}\frac{dB}{dt}$ de l'équation B.23 : c'est une conséquence de l'augmentation du champ magnétique. Pour assurer la conservation de μ, cette perte doit être compensée par un terme en $-\frac{mV_E^2}{B}\frac{dB}{dt}$ du travail de la force électrique de l'équation B.22 : ce terme-ci est fourni par la dérive inertielle et n'existe que par elle. La dérive inertielle participe donc dans notre étude à la conservation du moment magnétique μ.

Annexe C

Respect des lois de conservation lors d'une réaction chimique

Dans ce paragraphe, je présente la correction que j'ai apportée au code de choc sur la gestion de la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie des réactifs et des produits des réactions chimiques en phase gazeuse. Pour l'exemple, nous nous intéressons à une réaction chimique mettant en jeu 2 réactifs et 2 produits :

$$E_1 + E_2 \rightarrow E_3 + E_4 \,. \tag{C.1}$$

L'espèce chimique E_j a une masse m_j et une vitesse V_j selon $\mathbf{e}_z$: celle des ions V_i si l'espèce est chargée et celle du gaz V_n si elle est neutre. La conservation de la masse est automatiquement assurée par conservation de la matière :

$$m_1 + m_2 = m_3 + m_4 \,. \tag{C.2}$$

C.1 Bilan de quantité de mouvement

Modèle de Flower etal (1985)

Flower et al. (1985) considèrent que les produits E_3 et E_4 sont produits à la vitesse du centre de masse (vitesse des molécules réunies en cours de réaction) :

$$V_\mathrm{cm} = \frac{m_1 V_1 + m_2 V_2}{m_1 + m_2} \,. \tag{C.3}$$

Dans ce modèle, la quantité de mouvement $m_r\, V_\mathrm{cm}$ de chaque réactif r est soustraite du fluide auquel il appartient, et la quantité de mouvement $m_p\, V_\mathrm{cm}$ de chaque produit p est ajouté au fluide auquel il appartient. La conservation de la quantité de mouvement des deux fluides réunis est alors une simple conséquence de la conservation de la masse au cours de la réaction.

Cependant, ce modèle n'est pas correct : les réactifs sont liés à leur fluide avant la réaction, et aucunement au centre de masse de la réaction à venir. C'est pourquoi nous proposons ci-dessous un nouveau modèle de gestion des échanges de quantité de mouvement dans les réactions chimiques.

Nouveau modèle

Dans ce nouveau modèle, nous considérons que les réactifs apportent une quantité de mouvement $m_r\,V_r$ et non $m_r\,V_{\rm cm}$. Par contre, nous supposons tout comme Flower et al. (1985) que les produits de la réaction sont expulsés avec une vitesse moyenne nulle dans la référentiel du centre de masse. En effet, toutes les directions d'éjection des produits ont en première approximation une probabilité égale. La vitesse moyenne des molécules éjectées est donc égale à celle du centre d'éjection, le centre de masse : $V_p = V_{\rm cm}$.

On retire donc la quantité de mouvement $m_r\,V_r$ des fluides de chaque réactif, et on ajoute la quantité de mouvement $m_p\,V_{\rm cm}$ aux fluides de chaque produit.

La conservation au cours de la réaction de la quantité de mouvement totale des deux fluides réunis est automatiquement assurée par la conservation de la masse (Eq. (C.2)) et la définition de la vitesse du centre de masse (Eq. (C.3)).

$$\begin{aligned} m_3 V_{\rm cm} + m_4 V_{\rm cm} - (m_1 V_1 + m_2 V_2) &= (m_3 + m_4) V_{\rm cm} - (m_1 + m_2) V_{\rm cm} \\ &= 0\,. \end{aligned}$$

C.2 Bilan d'énergie

Modèle de Flower etal (1985)

Dans le modèle de Flower et al. (1985), on retire l'énergie cinétique $\frac{1}{2} m_r\,V_{\rm cm}^2$ du fluide de chaque réactif et on ajoute la quantité de mouvement $\frac{1}{2} m_p\,V_{\rm cm}^2$ au fluide de chaque produit.

Cette gestion assure bien la conservation de l'énergie cinétique totale des réactifs et des produits (simple conséquence de la conservation de la masse). Cependant, elle n'est pas correcte car le réactif r qui disparaît au cours de la réaction emmène avec lui une énergie cinétique $\frac{1}{2} m_r\,V_r^2$ et non $\frac{1}{2} m_r\,V_{\rm cm}^2$. Conséquence immédiate : l'énergie cinétique moyenne du produit p après expulsion du centre de masse ne peut plus être $+\frac{1}{2} m_p\,V_{\rm cm}^2$ car cette expression n'assure plus la conservation de l'énergie cinétique. Les termes d'échanges d'énergie entre les deux fluides dans ce modèle ne sont donc pas corrects, bien que l'énergie totale soit conservée. Nous proposons ci-dessous une nouvelle gestion des échanges d'énergie dans les réactions chimiques.

Nouveau modèle

On définit la masse réduite des réactifs :

$$\mu_{\rm R} = \frac{m_1\,m_2}{m_1 + m_2}\,, \tag{C.4}$$

et la masse réduite des produits :

$$\mu_{\rm P} = \frac{m_3\,m_4}{m_3 + m_4}\,. \tag{C.5}$$

Si on applique la conservation de la quantité de mouvement totale et de l'énergie cinétique totale des réactifs et des produits, on montre facilement que les produits doivent être éjectés

du centre de masse dans toutes les directions avec une vitesse moyenne :

$$\langle V \rangle = \frac{\sqrt{\mu_{\mathrm{R}}\,\mu_{\mathrm{P}}}}{m_p}\Delta V\,, \tag{C.6}$$

où

$$\Delta V = |V_1 - V_2| \tag{C.7}$$

est la différence de vitesse entre les fluides des réactifs 1 et 2. On montre également que, dans le référentiel du choc, l'énergie cinétique moyenne des produits (moyenne faite sur toutes les directions d'éjection possible) est :

$$\langle E_{\mathrm{c}} \rangle = \frac{1}{2} m_p \left(V_{\mathrm{cm}}^2 + \frac{\mu_{\mathrm{R}}\,\mu_{\mathrm{P}}}{m_p^2}\Delta V^2 \right)\,. \tag{C.8}$$

Du point de vue numérique, l'énergie $\frac{1}{2}m_r\,V_r^2$ est retirée du fluide de chaque réactif r. L'énergie $\frac{1}{2}m_p\,(V_{\mathrm{cm}}^2 + \frac{\mu_{\mathrm{R}}}{m_p}\frac{\mu_{\mathrm{P}}}{m_p}\Delta V^2)$ est ajoutée au fluide de chaque produit p de la réaction.

Nous vérifions maintenant que ce modèle plus réaliste assure bien la conservation de l'énergie cinétique totale des réactifs et des produits. D'après l'équation (C.8) :

$$\frac{1}{2}m_3{V_3}^2 + \frac{1}{2}m_4{V_4}^2 \;=\; \sum_{p=3,4}\frac{1}{2}m_p(V_{\mathrm{cm}}^2 + \frac{\mu_{\mathrm{P}}}{m_p}\frac{\mu_{\mathrm{R}}}{m_p}\Delta V^2)\,.$$

Par définition de μ_{P} (Eq. (C.5))

$$\sum_{p=3,4}\frac{\mu_{\mathrm{P}}}{m_p} \;=\; 1\,,$$

donc

$$\begin{aligned}\sum_{p=3,4}\frac{1}{2}m_p(V_{\mathrm{cm}}^2 + \frac{\mu_{\mathrm{P}}}{m_p}\frac{\mu_{\mathrm{R}}}{m_p}\Delta V^2) &= \frac{1}{2}(m_3+m_4)V_{\mathrm{cm}}^2 + \frac{1}{2}\mu_{\mathrm{R}}\Delta V^2\,,\\ &= \frac{1}{2}(m_1+m_2)V_{\mathrm{cm}}^2 + \frac{1}{2}\mu_{\mathrm{R}}\Delta V^2\,,\end{aligned}$$

par conservation de la masse.

On développe la deuxième partie de l'équation à partir des équations (C.3) et (C.7) :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(m_1+m_2)V_{\mathrm{cm}}^2 + \frac{1}{2}\mu_{\mathrm{R}}\Delta V^2 &= \frac{1}{2}\left(\frac{m_1^2V_1^2 + m_2^2V_2^2 + 2m_1m_2V_1V_2}{m_1+m_2}\right)\\ &\quad + \frac{1}{2}\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}(V_1^2 + V_2^2 - 2V_1V_2)\\ &= \frac{1}{2}\frac{m_1(m_1V_1^2 + m_2V_2^2) + m_2(m_1V_1^2 + m_2V_2^2)}{m_1+m_2}\\ \frac{1}{2}m_3{V_3}^2 + \frac{1}{2}m_4{V_4}^2 &= \frac{1}{2}m_1{V_1}^2 + \frac{1}{2}m_2{V_2}^2\,.\end{aligned}$$

L'énergie cinétique totale est donc bien conservée au cours de la réaction dans ce nouveau modèle plus réaliste où les réactifs de la réaction ont la vitesse du fluide auxquels ils appartiennent et les produits de la réaction une vitesse moyenne respectant les lois de conservation.

Au final, des tests ont montré que cette correction des échanges entre fluides de quantité de mouvement et d'énergie pendant les réactions chimiques ne change pas la dynamique du choc.

Annexe D

Modèle de charge des grains

Dans l'article 2 et au chapitre 5, nous reprenions l'approche de Flower et al. (1985) qui définit une température effective des ions permettant de modéliser de manière approximative l'effet sur le taux d'attachement $\tilde{J}_{\rm i}$ des ions d'une vitesse relative entre les grains et les ions [1], tout en restant dans le cadre du modèle de Draine & Sutin (1987). Cette approximation n'est plus justifiée quand la vitesse des grains devient de l'ordre de ou plus grande que la vitesse thermique des ions, comme cela peut être le cas dans les chocs J.

Shull (1978) fournit quant à lui les expressions exactes des taux d'attachement $\tilde{J}$ pour des grains en mouvement par rapport au gaz, mais sans polarisation des grains. Un nouveau modèle de charge a donc été défini dans l'article 3 (page 235) pour gérer cette limitation, basé sur le modèle de Shull (1978). Une nouvelle approche définie pour les chocs rapides combine ces deux modèles :

1. Pour les grains dont la giration a été stoppée (et donc pour tous les fragments dont la charge est proche de zéro et qui sont très sensibles à la polarisation) : modèle de Draine & Sutin (1987) avec température effective des ions.

2. Pour les grains en mouvement : modèle de Shull (1978).

Le basculement entre ces deux modes est automatique pour chaque taille de grain.

Je présente dans ce chapitre l'étude préliminaire que j'avais effectuée en début de thèse pour généraliser la formulation des taux d'attachement de Draine & Sutin (1987) à des grains en mouvement. Je ne l'ai pas utilisée par la suite car j'ai mis en place la modélisation simplifiée présentée ci-dessus, plus souple pour l'intégrateur. Cette analyse a cependant son intérêt propre et c'est pour cela que je la présente ici.

1. Cette vitesse relative n'a aucun effet sur l'attachement des électrons car la vitesse thermique des électrons est bien supérieure à celle des ions.

D.1 Distribution maxwellienne déplacée

Pour un grain immobile par rapport au fluide des ions et des électrons, la distribution de vitesse des particules est une maxwellienne :

$$f(v) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} 4\pi v^2 \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\,, \tag{D.1}$$

$$\alpha = \frac{m}{2kT}\,. \tag{D.2}$$

Pour un grain en mouvement à la vitesse V par rapport au fluide de particules chargées, la distribution de vitesse est une maxwellienne *déplacée* (*skewed or shifted maxwellian*) dont je donne deux expressions équivalentes :

$$f(v) = (\frac{\alpha}{\pi})^{1/2} \frac{v}{V} \left(\mathrm{e}^{-\alpha(v-V)^2} - \mathrm{e}^{-\alpha(v+V)^2}\right)\,, \tag{D.3}$$

$$f(v) = (\frac{\alpha}{\pi})^{1/2} \frac{v}{V} \mathrm{e}^{-\alpha(v^2+V^2)}\, 2\sinh(2\alpha v V)\,. \tag{D.4}$$

Démonstration On note $\mathbf{v}$ le vecteur vitesse de la particule chargée, dont les coordonnées sphériques sont ($v_x = v\,\sin\theta\,\cos\phi, v_y = v\,\sin\theta\,\sin\phi, v_z = v\,\cos\theta$). Nous supposerons, sans que cela ne change rien à la généralité de la démonstration, que le vecteur vitesse du grain est dirigé selon $\mathbf{e}_z$: $\mathbf{V} = V\,\mathbf{e}_z$.

Les distributions des composantes v_x et v_y de la vitesse sont des gaussiennes centrées sur zéro, tandis que celle de v_z est centrée sur V :

$$f(v_x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\alpha v_x^2}\,, \tag{D.5}$$

$$f(v_y) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\alpha v_y^2}\,, \tag{D.6}$$

$$f(v_z) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\alpha (v_z-V)^2}\,. \tag{D.7}$$

La fonction de probabilité du vecteur vitesse $\mathbf{v}$ est le produit de ces trois fonctions

$$f(\mathbf{v}) = f(v_x)\,f(v_y)\,f(v_z)\,, \tag{D.8}$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\alpha(V^2+v_x^2+v_y^2+v_z^2-2v_zV)}\,, \tag{D.9}$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\alpha(v^2+V^2)}\,\mathrm{e}^{-2\alpha v V\cos\theta}\,. \tag{D.10}$$

La maxwellienne déplacée, c'est-à-dire la fonction de probabilité de la valeur v de la vitesse,

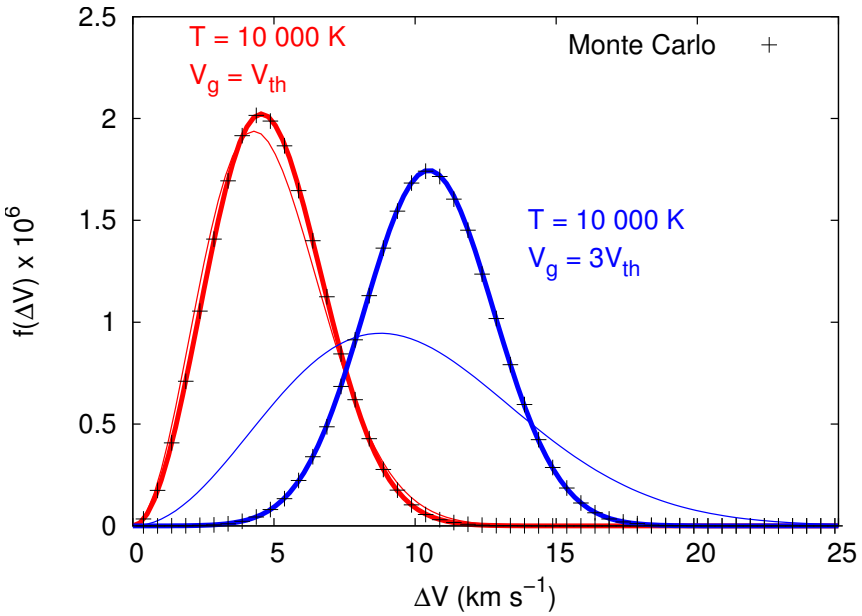


FIGURE D.1 – Distributions en vitesse des ions par rapport à un grain en mouvement - comparatif maxwellienne déplacée / maxwellienne de température effective

s'obtient par intégration :

$$f(v) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} v^2\, f(\mathbf{v})\, \sin\theta\, \mathrm{d}\theta\, \mathrm{d}\phi\,, \tag{D.11}$$

$$= 2\pi \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\alpha(v^2+V^2)} \int_0^{\pi} v^2\, \mathrm{e}^{-2\alpha v V\cos\theta}\, \sin\theta\, \mathrm{d}\theta\,, \tag{D.12}$$

$$= 2\pi \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\alpha(v^2+V^2)} \left[\frac{v^2}{2\alpha v V}\, \mathrm{e}^{-2\alpha v V\cos\theta}\right]_0^{\pi}\,, \tag{D.13}$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\, \frac{v}{V}\, \mathrm{e}^{-\alpha(v^2+V^2)} \left(\mathrm{e}^{2\alpha v V} - \mathrm{e}^{-2\alpha v V}\right)\,, \tag{D.14}$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\, \frac{v}{V} \left(\mathrm{e}^{-\alpha(v-V)^2} - \mathrm{e}^{-\alpha(v+V)^2}\right)\,. \tag{D.15}$$

La figure D.1 présente les distributions de vitesse des particules chargées par rapport au grain en mouvement pour deux valeurs de sa vitesse V_g. Deux modèles sont comparés : 1) maxwellienne avec température effective (courbe fine), et 2) maxwellienne déplacée (courbe épaisse). Le modèle 2 représente la distribution réelle, vérifiée par simulation Monte Carlo (croix noires reproduisant parfaitement les courbes du modèle 2).

Si la vitesse des grains V_g est de l'ordre de la vitesse thermique V_th des ions (courbes rouges), le modèle 1 basé sur la température effective constitue une approximation correcte de la distribution réelle (modèle 2). Si la vitesse du grain vaut 3 fois la vitesse thermique (courbes bleues), la distribution de vitesse prédite par le modèle 1 diffère fortement de la distribution réelle : le pic de probabilité est décalé, et les queues à basse et haute vitesses du modèle 1 sont artificielles. Le modèle 1 n'est donc utilisable en toute rigueur que lorsque la vitesse de giration des grains ne dépasse pas notablement la vitesse thermique des ions.

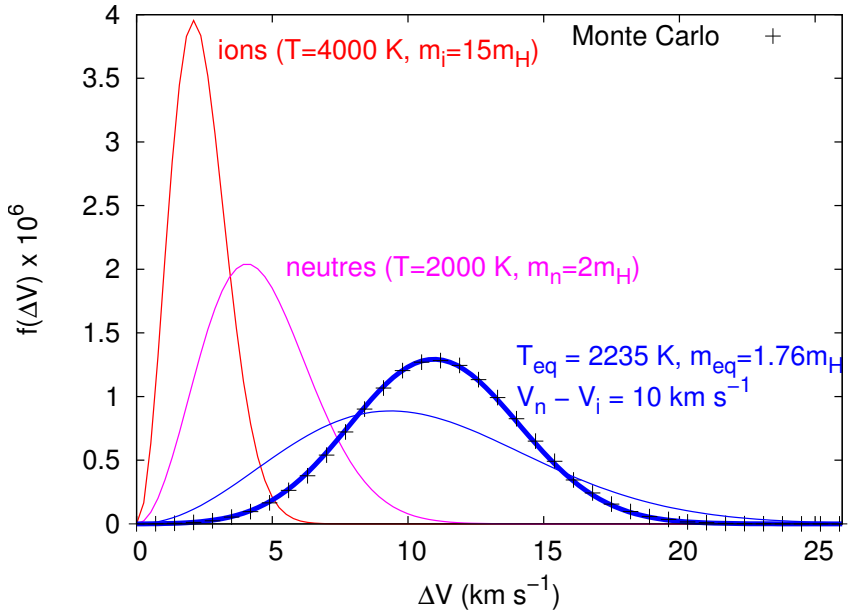


FIGURE D.2 – Distributions en vitesse relatives entre le fluide des neutres et le fluide des ions dans un choc C - comparatif maxwellienne déplacée / mawellienne de température effective

Cette condition est vérifiée la plupart du temps dans les chocs C, mais pas toujours dans les chocs J.

Distribution de vitesse entre ions et neutres dans un choc C

Un problème identique se pose pour la densité de probabilité de la distribution de vitesse relative entre les ions et les neutres dans un choc C. Voyons d'abord la situation dans un nuage au repos où les neutres (température T_n et masse moyenne μ_n) et les ions (température T_i et masse moyenne μ_i) sont parfaitement couplés. D'après Flower et al. (1985) Eq. (41), la distribution de vitesse des ions telle qu'elle est perçue par les neutres (ou inversement des neutres par les ions) est une maxwellienne de température :

$$T_\mathrm{r} = \frac{\mu_\mathrm{n} T_\mathrm{i} + \mu_\mathrm{i} T_\mathrm{n}}{\mu_\mathrm{i} + \mu_\mathrm{n}}\,, \tag{D.16}$$

dont les particules auraient la masse réduite

$$\mu = \frac{\mu_\mathrm{n}\,\mu_\mathrm{i}}{\mu_\mathrm{n} + \mu_\mathrm{i}}\,. \tag{D.17}$$

Flower et al. (1985) utilisent la méthode de la température effective pour caractériser la distribution de vitesse entre ions et neutres dans les chocs C où ces deux fluides sont découplés (vitesse V_i pour les ions, V_n pour les neutres). Cette distribution de vitesse, qui est une maxwellienne déplacée de vitesse $V_\mathrm{n} - V_\mathrm{i}$, est assimilée à une maxwellienne de température effective (Flower et al., 1985, , Eq. (43)) :

$$T_\mathrm{eff} = \frac{\mu_\mathrm{n} T_\mathrm{i} + \mu_\mathrm{i} T_\mathrm{n}}{\mu_\mathrm{i} + \mu_\mathrm{n}} + \frac{\mu}{3k}(V_\mathrm{n} - V_\mathrm{i})^2\,. \tag{D.18}$$

La figure D.2 compare cette modélisation à base de température effective (courbe fine bleue), à la distribution réelle (maxwellienne déplacée, courbe épaisse bleue), confirmée par simulation Monte Carlo (croix noires) dans un cas quelconque ($T_\mathrm{i} = 4000$ K, $\mu_\mathrm{i} = 15 m_\mathrm{H}$, $T_\mathrm{n} = 2000$ K, $\mu_\mathrm{n} = 2 m_\mathrm{H}$ et $V_\mathrm{n} - V_\mathrm{i} = 10\ \mathrm{km\,s^{-1}}$). Nos conclusions sont identiques à celles du paragraphe D.1 : la méthode de la température effective n'est valable que si la vitesse cinétique ($V_\mathrm{n} - V_\mathrm{i}$) est tout au plus de l'ordre de la vitesse thermique ($\sqrt{2kT_\mathrm{r}/\mu}$).

Code FORTRAN de la simulation Monte Carlo

Le programme ci-dessous fournit en sortie un fichier permettant de tracer la distribution de vitesse d'une maxwellienne déplacée. Les résultats de ces simulations ont permis de vérifier l'exactitude de l'équation D.4 que nous avons également démontrée analytiquement.

```
PROGRAM SHIFTED_MAXWELLIAN

! -------------------------------------
! Simulation MONTE-CARLO d'une maxwellienne deplacee
! -------------------------------------
!
! Nous avons besoin de trois variables aleatoires (v.a.) gaussiennes
! independantes pour les 3 vitesse Vx, Vy et Vz
!
! Pour simuler un couple de deux v.a. gaussiennes independantes, on commence
! par simuler deux v.a. uniformes sur [0,1], notees U et V
!
! A partir de U on simule une variable aleatoire exponentielle en posant
!             R = racine(-2*ln(1-U)),
! A partir de V on simule une variable aleatoire uniforme sur [0,2*pi] en posant
!             PHI = 2*pi V
!
! On peut alors en deduire X et Y en posant simplement
!             Vx = R cos(PHI)
!          et Vy = R sin(PHI)
!
! On refait la meme chose avec deux v.a. uniformes sur [0:1] W et X, puis
! la v.a. exponentielle S et uniforme sur [0:2pi] THETA
!
! On en deduit Vz = S cos(THETA).
! Il reste une v.a. gaussienne non utilisee : S sin(THETA)
!
! -------------------------------------


  IMPLICIT NONE

  ! Parameters
  REAL :: Ti,X_Vth,V_MAX

  INTEGER,PARAMETER :: NB_PTS = 200
  INTEGER,PARAMETER :: MAX_NB_TIRS = 1000000

  REAL,PARAMETER :: PI = 3.1415927
  REAL,PARAMETER :: XMAX = 5.
  REAL,PARAMETER :: mu = 15.D0
```

```
REAL,PARAMETER :: mp = 1.67D-24

LOGICAL :: again = .TRUE.
REAL    :: U,V,W,X,R,S,PHI,TETA,Vx,Vy,Vz
INTEGER,DIMENSION(0:NB_PTS) :: histogramme

INTEGER :: counter = 0,i

! Densite de probabilite de vitesse par rapport au grain
REAL :: Vgr,dv,V_ref,Vth

REAL,PARAMETER :: m = mu*mp
REAL,PARAMETER :: k = 1.38D-16

write(*,'(''# -------------------------'')')
write(*,'(''# MONTE-CARLO simulation of a "shifted" maxwellian'')')
write(*,'(''# with ''I4'' points, mI = ''F4.1''*mp'')') NB_PTS,mu
write(*,'(''# -------------------------'')')

! Plasma temperature (ions, e-)
write(*,'(''# Temperature of ionized fluid (K) ? '')',advance="no")
read(*,*) Ti
write(*,*) Ti
! Vitesse thermique de reference pour la construction de la maxwellienne
V_ref = sqrt(k*Ti/m)
Vth = sqrt(2*k*Ti/m)
write(*,'(''# => thermal velocity : Vth = ''F5.2'' km/s'')') Vth/1.D5

! Relative velocity between fluids
write(*,'(''# Relative velocity between both fluids (* Vth) ? '')',advance="no")
read(*,*) X_Vth
write(*,*) X_Vth
! Vitesse relative du grain, exprimee en multiple de la vitesse thermique
Vgr = X_Vth * Vth
write(*,'(''# => V_grain = ''F5.2'' km/s'')') Vgr/1.D5

! Vitesse maximale pour la construction de l'histogramme
write(*,'(''# Maximal velocity displayed (* Vth) ? '')',advance="no")
read(*,*) V_MAX
write(*,*) V_MAX
V_MAX = V_MAX * Vth

! Mets l'histogramme a zero
histogramme = 0

DO WHILE(again)

   counter = counter + 1

   ! Generateur de loi uniforme
   call RANDOM_NUMBER(U)
   call RANDOM_NUMBER(V)

   ! Transformation en loi exponentielle x*exp(-x)
   R = SQRT(-2*ALOG(U))
   S = SQRT(-2*ALOG(V))
```

```
      ! Generateur de loi uniforme
      call RANDOM_NUMBER(W)
      call RANDOM_NUMBER(X)

      ! Transformation en loi uniforme sur [0,2PI]
      PHI = 2 * PI * W
      TETA = 2 * PI * X

      ! Loi Maxwelliennes
      Vx = R * cos(PHI) * V_ref
      Vy = R * sin(PHI) * V_ref
      Vz = S * cos(TETA) * V_ref

      ! construction de l'histogramme a partir de X
      ! ----------------

      ! La maxwellienne est un chi2 a trois variables
      ! Transformation en loi maxwellienne x**2*exp(-x**2)
      ! avec son maximum en sqrt ( 2 * k * T / m )
      dv = sqrt((Vz-Vgr)**2 + Vy**2 + Vx**2)

      ! Indice de la boite ou mettre ce tir
      i = INT(dv/V_MAX*NB_PTS)+1

      ! Ajoute ce tir dans la boite correspondante de l'histogramme
      histogramme(i) = histogramme(i) + 1

      ! Skip to next tir if out of bound
      if (i >= NB_PTS) cycle

      ! Arreter apres N tirs
      IF (counter >= MAX_NB_TIRS) again = .FALSE.

   END DO


   DO i = 0,NB_PTS

       ! On remet les indices en x: *XMAX/NB_PTS
       ! On norme la fonction: / counter
       print*,((i-0.5)*V_MAX/NB_PTS),histogramme(i)*1./counter*NB_PTS/V_MAX

   END DO

END PROGRAM
```

D.2 Taux d'attachement des ions sur un grain polarisable en mouvement

Le taux d'attachement des ions J_i est affecté par le mouvement du grain car il dépend de la distribution de vitesse des particules incidentes par rapport au grain :

$$\begin{aligned} J_\mathrm{i} &= \int_0^\infty n_\mathrm{i}\, s_\mathrm{i}\, v\, \pi a^2\, \tilde{\sigma}\, f(v)\, \mathrm{d}v\,, \\ &= n_\mathrm{i}\, s_\mathrm{i}\, \pi a^2 \int_0^\infty \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{v^2}{V}\, \mathrm{e}^{-\alpha(v^2+V^2)}\, 2\sinh(2\alpha v V)\, \tilde{\sigma}\, \mathrm{d}v\,, \\ &= n_\mathrm{i}\, s_\mathrm{i}\, \pi a^2\, \mathrm{e}^{-\alpha V^2} \int_0^\infty \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} 4\alpha v^3\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, \frac{\sinh(2\alpha v V)}{2\alpha v V}\, \tilde{\sigma}\, \mathrm{d}v\,, \\ &= n_\mathrm{i}\, s_\mathrm{i}\, \pi a^2\, \mathrm{e}^{-\alpha V^2} \int_0^\infty (\frac{\alpha}{\pi})^{3/2} 4\pi v^3\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, \mathrm{sinhc}(2\alpha v V)\, \tilde{\sigma}\, \mathrm{d}v\,, \end{aligned}$$

avec la fonction sinus hyperbolique cardinale : $\mathrm{sinhc}(x) = \frac{\sin(x)}{x}$ qui vaut 1 en 0.

Nous obtenons alors l'expression suivante du taux d'attachement des ions J_i :

$$J_\mathrm{i}(Z) = n_\mathrm{i}\, s_\mathrm{i}\, \pi a^2 \sqrt{\frac{8kT_\mathrm{i}}{\pi m_\mathrm{i}}}\, \tilde{J}_\mathrm{i}(\tau, \nu, M)\,, \tag{D.19}$$

avec

$$\tilde{J}_\mathrm{i}(\tau, \nu, M) = \mathrm{e}^{-M^2} \int_0^\infty x \mathrm{e}^{-x}\, \mathrm{sinhc}(2M\sqrt{x})\, \tilde{\sigma}(\epsilon = x\tau, \nu)\, \mathrm{d}x\,, \tag{D.20}$$

$$M^2 = \alpha V^2\,, \tag{D.21}$$

$$x = \alpha v^2\,. \tag{D.22}$$

Si $M = 0$, c'est-à-dire si le grain est au repos par rapport aux ions comme dans le modèle de Draine & Sutin (1987), alors $\mathrm{sinhc}(2M\sqrt{x}) = 1$ et on retrouve bien l'équation (3.2) de $\tilde{J}_\mathrm{i}(\tau, \nu)$ de Draine & Sutin (1987).

Conclusion Dans le cas où les grains sont en mouvement par rapport au fluide des ions, $\tilde{J}_\mathrm{i}$ est une fonction de τ, ν, mais aussi de $M = \sqrt{mV^2/(2kT_\mathrm{i})}$, qui est le carré du rapport de la vitesse relative des grains à la vitesse thermique des ions, ou encore le rapport de l'énergie cinétique à l'énergie thermique de la particule incidente. On peut calculer numériquement les valeurs de la fonction $\tilde{J}_\mathrm{i}(\tau, \nu, M)$ à partir de l'équation (D.19). Cela nous donne la figure D.3 tracée pour des valeurs de $M = 0$, 1, 2, et 3.

D.3 Modélisation de l'effet photoélectrique sur les grains

Dans cette section, nous présentons la modélisation de l'effet photoélectrique sur les grains dans les milieux diffus, réalisée par Weingartner & Draine (2001), ainsi que la gestion numérique que nous en avons faite pour l'étude de la charge des grains dans les nuages diffus au repos et dans les chocs qui les traversent.

Les photons UV du rayonnement stellaire ont une énergie suffisante pour éjecter :

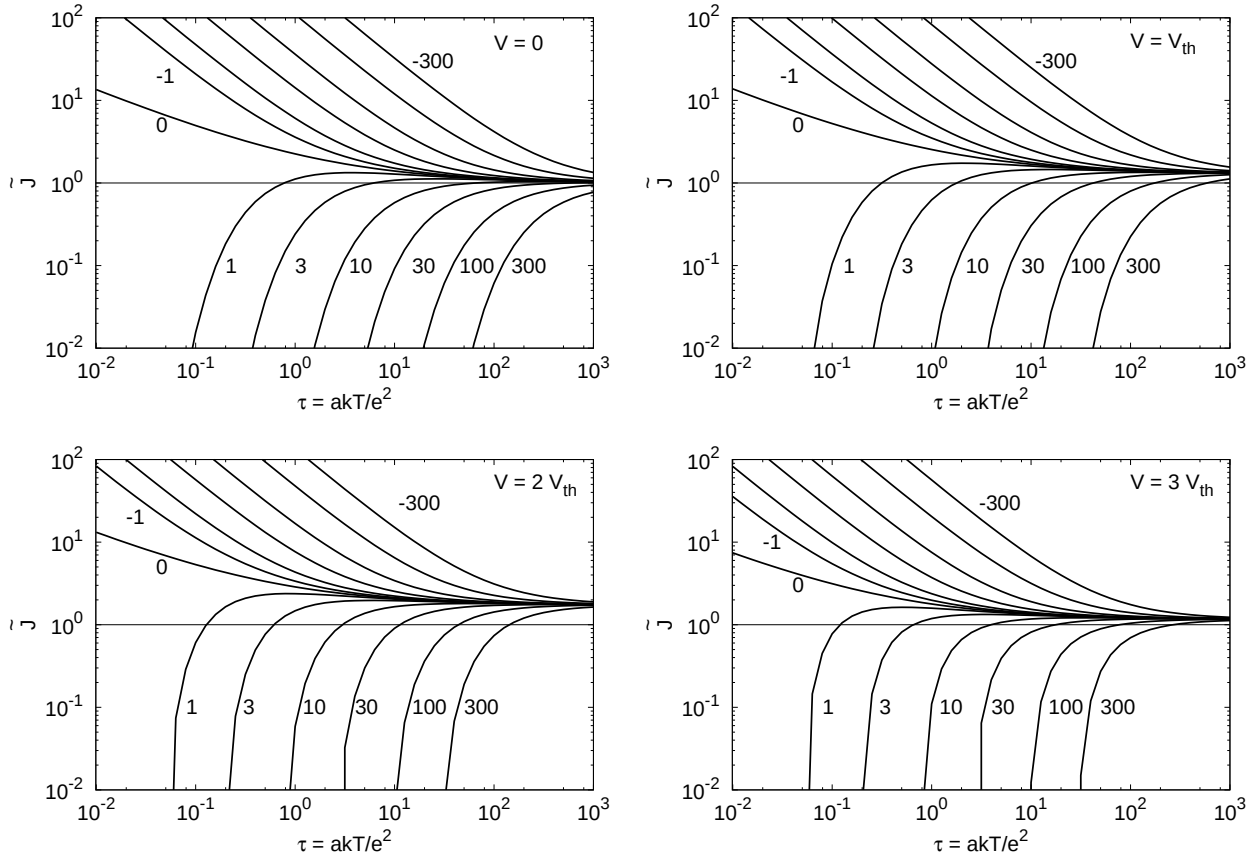


FIGURE D.3 – Evolution du facteur électrostatique $\tilde{J}$ en fonction de la température réduite $\tau = akT/e^2$ pour différentes valeurs du paramètre $M = \sqrt{mv^2/(2kT)}$, rapport de la vitesse V du grain à la vitesse thermique des ions $V_{\rm th}$.

- un électron de valence d'un grain neutre ou chargé : on parle de *photoémission*
- un électron attaché sur un grain chargé négativement : on parle de *photodétachement*

Les électrons attachés représentent une fraction infime des électrons présents dans le grain. La section efficace de photodétachement est donc extrêmement faible, à la différence de la section efficace de photoémission qui est de l'ordre de la section géométrique du grain. Le photodétachement est donc en pratique négligeable devant la photoémission, bien que les électrons attachés soient moins liés au grain que les électrons de valence.

Photoémission d'électrons de valence

La figure D.4 (Weingartner & Draine, 2001) schématise les niveaux d'énergie des électrons dans un grain chargé négativement, neutre ou positivement. Les notations du schéma, reprises de Weingartner & Draine (2001), sont expliquées ci-dessous.

Work function W

W (*work function*) est le travail à fournir pour envoyer à l'infini un électron d'un grain neutre, sans prise en compte des effets quantiques pour les petits grains :

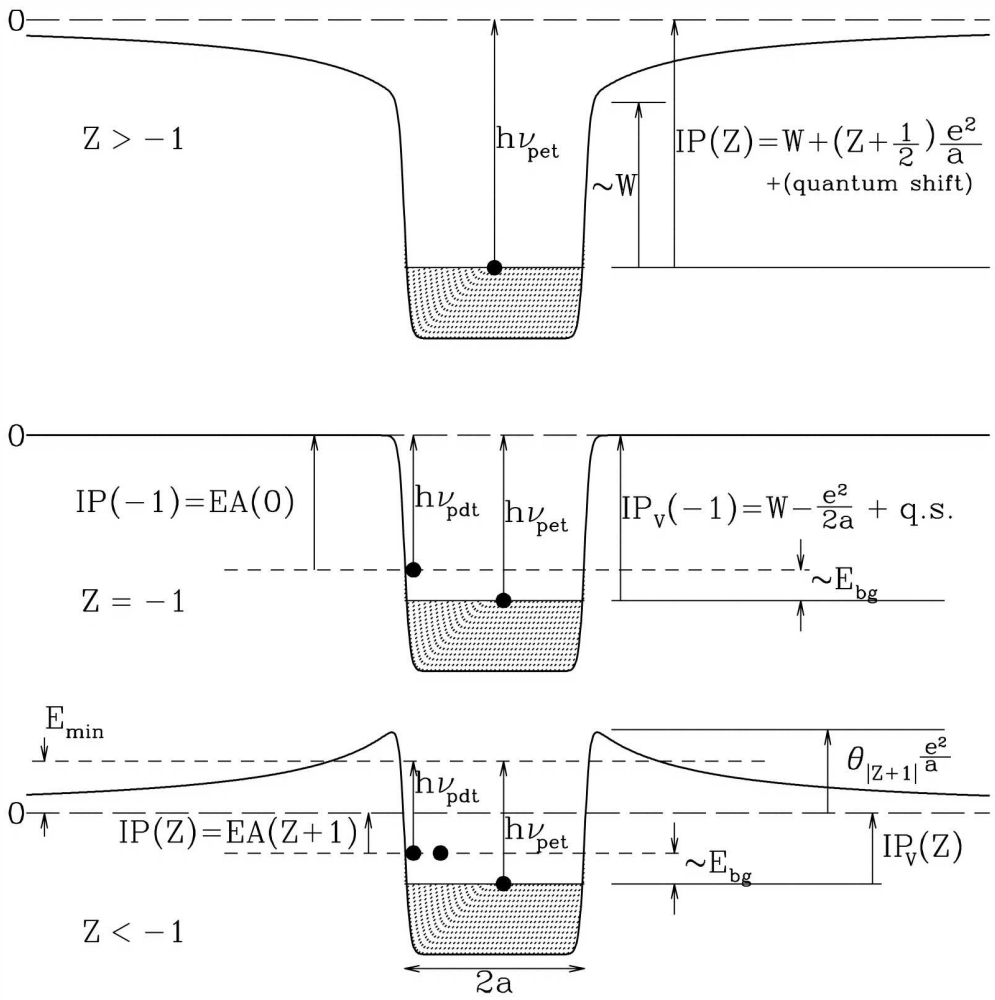


FIGURE D.4 – Schéma extrait de Weingartner & Draine (2001) représentant les niveaux d'énergie des électrons dans un grain de rayon a et de charge Z.

- pour les grains carbonés, $W = 4{,}4\,\mathrm{eV}$;
- pour les grains silicatés, $W = 8\,\mathrm{eV}$.

Potentiel d'ionisation $IP_V(Z,a)$

$IP_\mathrm{V}(Z,a)$ est le potentiel d'ionisation de bande de valence, égal à la différence en énergie entre l'infini et le sommet de la bande de valence.

$$IP_V(Z,a) = W + (Z+\frac{1}{2})\frac{e^2}{a} + (Z+2)\frac{e^2}{a}\frac{0.3\text{Å}}{a}\,. \tag{D.23}$$

Ejection d'un électron de valence par effet tunnel : $E_\mathrm{min}(Z,a)$

La figure D.4 montre qu'une barrière de potentiel apparaît quand le grain est chargé négativement. La physique classique prédit qu'un électron doit avoir une énergie supérieure ou égale au potentiel de cette barrière pour pouvoir s'échapper du grain. La physique quantique

prédit qu'une énergie légèrement inférieure peut suffire pour que l'électron s'échappe par *effet tunnel*.

$E_{\rm min}(Z,a)$ est l'énergie de l'électron pour laquelle la probabilité d'effet tunnel vaut 10^{-3}.

- Si Z <0, l'électron peut traverser par effet tunnel la barrière électrostatique présente :

$$E_{\rm min}(a) = -\frac{(Z+1)e^2/a}{1+(27\text{Å}/a)^{0.75}}\,. \tag{D.24}$$

- Si $Z \geq 0$, la barrière électrostatique n'existe pas : $E_{\rm min}(a,Z) = 0\,.$

Seuil énergétique $h\nu_{\rm pet}$ de photoémission d'un électron du grain

$h\nu_{\rm pet}$ est le seuil énergétique de photoémission d'un électron (de valence) du grain

- pour $Z \geq -1$,

$$h\nu_{\rm pet} = IP_V(Z,a)\,, \tag{D.25}$$

- pour Z < -1,

$$h\nu_{\rm pet} = IP_V(Z,a) + E_{\rm min}(a)\,. \tag{D.26}$$

Calcul du rendement photoélectrique de photoémission y

Weingartner & Draine (2001) donnent les formules pour calculer le rendement de photoémission y d'un photon d'énergie $h\nu$ sur un grain de rayon a et de charge Z :

$$y(h\nu,Z,a) = y_2(h\nu,Z,a)\min\left(y_0(\Theta)y_1(a,h\nu),1\right)\,. \tag{D.27}$$

Chacun des rendements y_0, y_1 et y_2 est détaillé ci-dessous.

Rendement y_2 fonction de la charge du grain Le rendement y_2 correspondant à la fraction d'électrons arrivant à s'échapper une fois la surface atteinte. Si Z <0, l'électron est repoussé par la force électrostatique et $y_2 = 1$. Mais si $Z \geq 0$, l'électron peut retomber sur le grain par l'attraction électrostatique et alors $y_2 < 1$.

$$y_2(Z<0) = 1 \tag{D.28}$$

$$E_{\rm high}(Z\geq 0) = h\nu - h\nu_{\rm pet}\,, \tag{D.29}$$

$$E_{\rm low}(Z\geq 0) = -(Z+1)\frac{e^2}{a}\,, \tag{D.30}$$

$$y_2(Z\geq 0) = \frac{E_{\rm high}^2(E_{\rm high}-3E_{\rm low})}{(E_{\rm high}-E_{\rm low})^3}\,. \tag{D.31}$$

Rendement $y_0(\Theta)$ fonction de la nature du grain

$$\Theta(Z\geq 0) = h\nu - h\nu_{\rm pet} + (Z+1)\frac{e^2}{a}\,, \tag{D.32}$$

$$\Theta(Z<0) = h\nu - h\nu_{\rm pet}\,, \tag{D.33}$$

$$y_0(\Theta) = \frac{9.10^{-3}(\Theta/W)^5}{1+3,7.10^{-2}(\Theta/W)^5} \qquad \text{(graphite)}\,, \tag{D.34}$$

$$y_0(\Theta) = \frac{0.5\times\Theta/W}{1+5\times\Theta/W} \qquad \text{(silicate)}\,. \tag{D.35}$$

Rendement $y_1(a, h\nu)$ fonction de la taille du grain Les expériences de laboratoire qui soutende la théorie de Weingartner & Draine (2001) ont été effectuée sur des échantillons macroscopique (*bulk*) bien plus gros que les grains qui nous concernent ici. Le rendement y_1 permet de prendre en compte la taille du grain. On peut avoir $y_1 > 1$.

On définit :

- $m(\lambda)$ l'indice de réfraction complexe du grain pour la radiation de longueur d'onde λ.
- l_a la longueur d'atténuation du photon :

$$l_{\rm a} = \frac{\lambda}{4\pi Im(m)} \qquad \text{(silicates)}\,, \tag{D.36}$$

$$l_{\rm a}^{-1} = \frac{2}{3} l_{\rm a}^{-1} m_{\perp} + \frac{1}{3} l_{\rm a}^{-1} m_{\parallel} \qquad \text{(graphite)}\,, \tag{D.37}$$

  où $m_\perp$ et $m_\parallel$ sont les indices de réfraction complexes du graphite pour les champs électriques respectivement perpendiculaire et parallèle à l'axe de symétrie du graphite.
- $\beta = a/l_{\rm a}$
- $\alpha = a/l_{\rm a} + a/l_{\rm e}$ où $l_{\rm e}$ est la profondeur de pénétration des électrons.

Alors

$$y_1 = (\frac{\beta}{\alpha})^2 \frac{\alpha^2 - 2\alpha + 2 - 2\exp(-\alpha)}{\beta^2 - 2\beta + 2 - 2\exp(-\beta)}\,. \tag{D.38}$$

Taux de photoémission intégré sur l'ISRF

Le champ de radiation interstellaire ISRF du milieu diffus défini par Mezger et al. (1982) et rappelé dans l'équation (31) de Weingartner & Draine (2001) est présenté sur la figure 5.6. Le nombre d'électrons de valence arrachés par seconde par les photons de l'ISRF sur un grain de charge Z et de rayon a est intégré sur la distribution en énergie des photons de l'ISRF :

$$J_{\rm pe} = \pi a^2 \int_{v_{\rm pet}}^{v_{\rm max}} d\nu Y(a, h\nu, Z) Q_{\rm abs}(a, h\nu, Z) \frac{c u_\nu}{h\nu}\,. \tag{D.39}$$

Ce calcul intégral a été effectué dans un code séparé. Les taux de photoémission $J_{\rm pe}$ des grains carbonés (graphite) et silicatés (Draine astronomical silicates) ont été calculés pour une grille logarithmique de rayon a (50 valeurs de 2 Å à 1 μm) et de charge Z (100 valeurs de -20,000 à +20,000). Les propriétés optiques de ces matériaux (indice de réfraction complexe m, $Q_{\rm abs}$) ont été prises sur le site internet de Bruce Draine [1]. La grille 2D produite (fichier d'input `Jpe_ISRF_WD01.in`) est lue par le code de choc quand l'émission photoélectrique par l'ISRF est sélectionnée (variable `RAD` non nulle dans le fichier d'entrée `input_MHD.in`). Les taux $J_{\rm pe}$ sont ensuite calculés en temps réel par interpolation 2D sur cette grille en (a, Z).

Photodétachement d'électrons attachés

Dans le cas où le grain est chargé négativement, les électrons attachés peuvent être détachés par le champ de rayonnement interstellaire.

1. http://www.astro.princeton.edu/~draine/

Band gap E_{bg}

On note $E_{\rm bg}$ le *band gap*, c'est-à-dire l'écart d'énergie entre la bande valence et la bande de conduction.

- pour les grains carbonés (le graphite est conducteur) : $E_{\rm bg} = 0$,
- pour les grains silicatés (semi-conducteur) : $E_{\rm bg} = 5\,eV$.

Affinité électronique $EA(Z, a)$

L'affinité électronique est l'énergie qu'il faut fournir pour arracher le premier électron attaché :

- pour les grains carbonés : $EA(Z < 0, a) = W + (Z - \frac{1}{2})\frac{e^2}{a} - \frac{e^2}{a}\frac{4\text{Å}}{a+7\text{Å}}$,
- pour les grains silicatés : $EA(Z < 0, a) = W - E_{\rm bg} + (Z - \frac{1}{2})\frac{e^2}{a}$.

Seuil énergétique $h\nu_{\rm pdt}$ de photodétachement électronique

$$h\nu_{\rm pdt}(Z < 0) = EA(Z + 1) + E_{\rm min}(Z, a)\,. \tag{D.40}$$

Section efficace de photodétachement électronique

La section efficace de photodétachement n'existe que pour Z < 0 :

$$\sigma_{\rm pdt}(h\nu, Z < 0, a) = 1,2.10^{-17} cm^2\,|Z|\,\frac{x}{(1 + x^2/3)^2}\,, \tag{D.41}$$

avec $x = (h\nu - h\nu_{\rm pdt})/\Delta E$, et $\Delta E = 3$ eV.

Taux de photodétachement électronique

Le taux d'électrons attachés détachés par les photons de l'ISRF sur un grain de charge Z et de rayon a est :

$$J_{\rm pdt} = \int_{\upsilon_{\rm pdt}}^{\upsilon_{\rm max}} d\nu \sigma_{\rm pdt}(h\nu, Z, a)\frac{cu_\nu}{h\nu}\,. \tag{D.42}$$

Il est négligeable devant le taux de photoémission $J_{\rm pe}$ (Eq. (D.39)).

Tests du modèle numérique

Les figures D.5 et D.6 sont reproduites à partir des formules précédentes et des fichiers de données disponibles sur le site de B. Draine, fournissant $m(a, \lambda)$ et $Q_{\rm abs}(a, \lambda)$. L'accord entre notre modèle et les figures publiées dans l'article de Weingartner & Draine (2001) est correct. Le chapitre 5 présente plusieurs tests de comparaison de nos résultats avec ceux de Draine (2002), McKee et al. (1987) et du programme `CLOUDY`, et valide ainsi notre modèle de charge dans le milieu diffus,

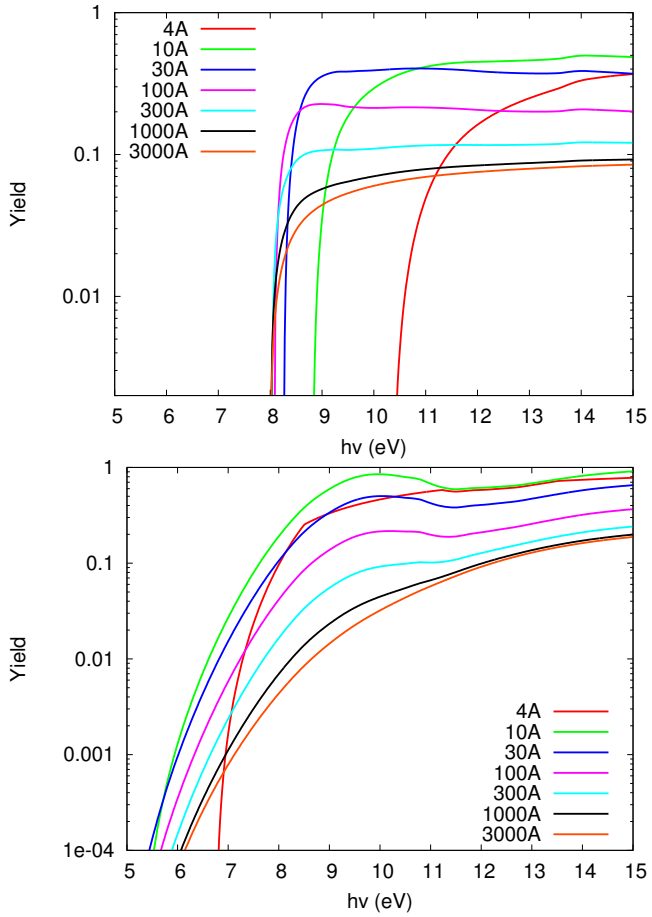


FIGURE D.5 – Reproduction de la Fig. 5 de Weingartner & Draine (2001) à partir de notre code : rendement de photoémission sur différentes tailles de grains neutres silicatés (**Haut**) et carbonés (**Bas**).

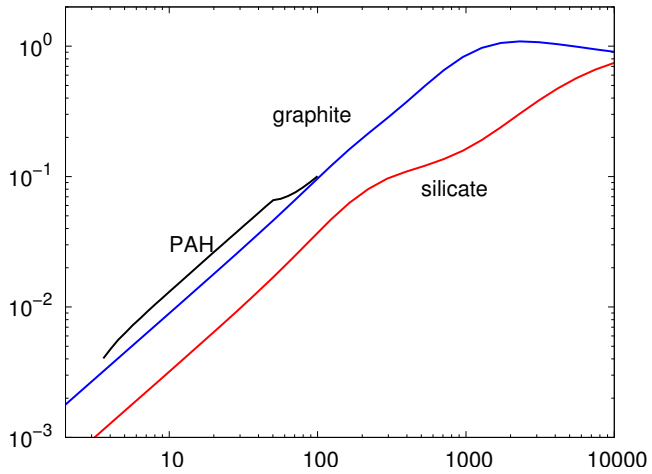


FIGURE D.6 – Reproduction de la Fig. 8 de Weingartner & Draine (2001) à partir de notre code : $< Q_{\rm abs} >$ pour les grains neutres (graphitiques, silicatés et PAH).

Annexe E

Modélisation de la giration des grains dans les chocs J

Nous présentons deux modèlisations de la vitesse de giration des poussières dans les chocs J :

1. Un modèle adapté aux milieux où toutes les tailles de grains effectuent un grand nombre de giration avant d'être stoppé par le gaz : les milieux peu denses. Ce modèle est simple, et sa simplicité lui confère des propriétés intéressantes.
2. Un modèle spécifique pour le cas où certaines tailles de grains n'ont pas même le temps d'effectuer une giration complète avant amortissement complet. Les prédictions de ce modèle, plus élaboré, ne se distinguent que dans les chocs J traversant les milieux très denses.

E.1 Modèle simplifié de dynamique pour les nuages peu denses

Le modèle de dynamique des poussières de Jones et al. (1996) que nous avons repris a été défini pour étudier le traitement des grains dans les chocs J radiatifs traversant un milieu ténu et préalablement ionisé par le précurseur radiatif. Dans ces chocs, les grains sont soumis à la force de Lorentz, au freinage collisionnel exercé par le gaz, et à une force de freinage non collisionnelle d'origine coulombienne, exercée par les ions et les électrons [1]. La modélisation du freinage coulombien nécessite de définir un modèle de charge adapté au contexte étudié (McKee et al., 1987).

Dans les chocs J de vitesse inférieure à 50 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ se propageant dans les nuages denses, la fraction d'ionisation reste assez faible pour que ce freinage coulombien puisse être ignoré. Nous faisons de plus l'hypothèse très simplicatrice [2] que les grains de toutes tailles réussissent

1. Le freinage frictionnel est efficace à grande vitesse, et le freinage coulombien à basse vitesse.
2. Cette hypothèse est abusivement simplificatrice car elle est contredite par la dynamique de certaines tailles de grains dans les milieux denses (*cf.* Fig. 9.2). Cependant, elle est totalement justifiée pour les milieux peu denses et diffus, et permettra de mettre en relief, par comparaison, les processus déterminants du traitement des grains dans les milieux denses.

à pénétrer dans le choc à leur première tentative, et effectuent au moins une giration complète avant d'être stoppée par le gaz. L'amortissement de la giration étant d'origine purement collisionnelle, la durée de la phase de giration est, dans ce modèle simplifié, *indépendante de la charge des grains*. Ce modèle a donc l'avantage de permettre de s'abstraire du modèle de charge et de ses nombreux paramètres libres.

Le traitement des poussières dans les chocs J que nous étudions est causé par la seule giration des grains autour des lignes de champ, qu'il s'agisse de la fragmentation, de la vaporisation et de l'érosion inertielle [1]. Pendant sa phase de giration, chaque grain entre en collision avec une masse de gaz (d'où érosion inertielle) de l'ordre de sa propre masse, *quelle que soit la densité du milieu traversé*. Si l'on fait de plus l'hypothèse que les distributions de poussières pré-choc sont identiques à toutes les densités, chaque grain rencontre la même quantité de poussières pendant sa phase de giration (d'où vaporisation et fragmentation) pour des vitesses de choc égales, quelle que soit la densité du milieu pré-choc. Notre modèle simplifié a donc la propriété remarquable de prédire le même niveau de traitement des poussières gaz-grain ou grain-grain quelle que soit la densité du milieu pré-choc et quel que soit le modèle de charge des poussières, toutes choses égales par ailleurs.

Equations du mouvement Les chocs J étant des chocs mono-fluides, l'intensité de la force de friction du gaz (Eq. (8.3)) s'exprime simplement sous la forme :

$$F_{\rm drag} = \rho_{\rm n}\,\sigma\,V_{\rm gyr}\sqrt{V_{\rm gyr}^2 + \frac{128k}{9\pi m_{\rm n}}T}\,. \tag{E.1}$$

L'intégration en coordonnées polaires $(V_{\rm gyr}, \theta)$ de la vitesse de giration moyenne

$$\mathbf{V}_{\rm gyr} = V_{\rm gyr}\,\sin\theta\,\mathbf{e}_y + V_{\rm gyr}\,\cos\theta\,\mathbf{e}_z \tag{E.2}$$

des grains autour des lignes de champ magnétique se fait sur la position z suivant les deux équations différentielles [2] en $V_{\rm gyr}$ et θ (*cf.* article 2 annexe C.2 pour la démonstration) :

$$\frac{{\rm d}V_{\rm gyr}}{{\rm d}t} = -\frac{{\rm d}V_{\rm i}}{{\rm d}t}\cos\theta - \frac{\rho_{\rm n}\sigma}{m}V_{\rm gyr}\sqrt{V_{\rm gyr}^2 + 128kT/(9\pi m_{\rm n})}\,, \tag{E.3}$$

$$\frac{{\rm d}\theta}{{\rm d}t} = \frac{ZeB}{mc} + \frac{{\rm d}V_{\rm i}}{{\rm d}t}\frac{\sin\theta}{V_{\rm gyr}}\,, \tag{E.4}$$

$$\frac{\rm d}{{\rm d}z} = \frac{1}{V_{\rm i}}\frac{\rm d}{{\rm d}t}\,, \tag{E.5}$$

où le terme ${\rm d}V_{\rm i}/{\rm d}t$ de l'équation (E.3) est la traduction en coordonnées polaires de l'inertie du grain, le second terme de l'équation (E.3) représente la friction du gaz et $ZeB/(mc)$ (Eq. (E.4)) est la pulsation cyclotron du grain. La charge moyenne Ze de chaque taille de grain est intégrée en même temps que la phase de giration θ et la vitesse de giration $V_{\rm gyr}$.

1. Dans ces chocs trop lents ($V_{\rm s} < 100$ km s^{-1}), l'érosion thermique est négligeable.
2. Dans ce modèle, nous faisons abstraction de l'effet bétatron, qui est négligeable dans les environnements que nous considérons ($n_{\rm H} \geq 10^4$ cm^{-3} Draine et al., 1983).

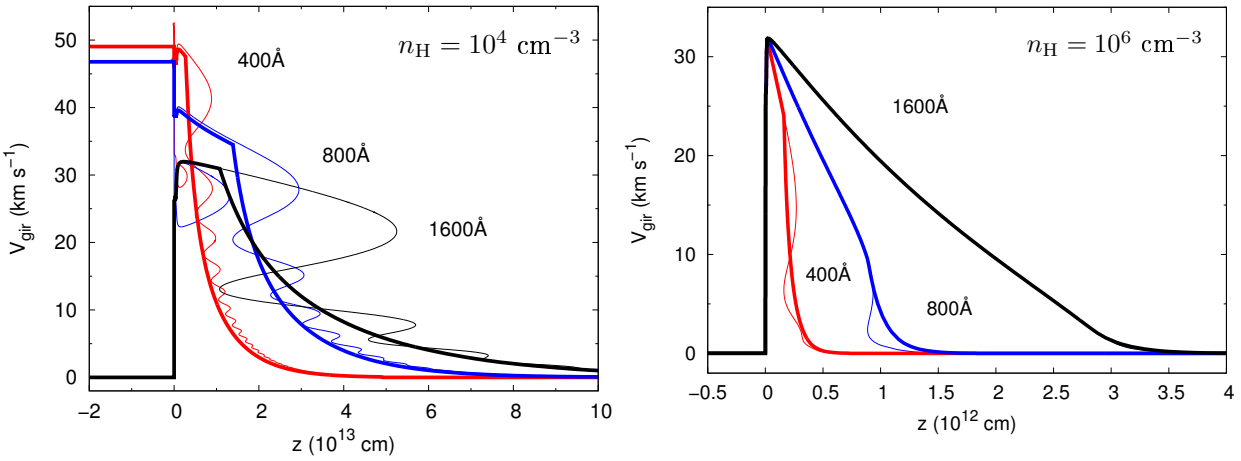


FIGURE E.1 – Modélisation de la vitesse de giration des grains (traits fins) obtenue par intégration des lois du mouvement en coordonnées cartésiennes et sur le temps t, par une vitesse moyenne intégrée sur la position z (traits épais) qui permet de résoudre la structure du choc tout en calculant la dynamique et le traitement des grains. Dans cette modélisation, les grains réfléchis sont injectés dans le choc avec la vitesse de giration qu'ils avaient avant de réussir à pénétrer dans le choc. Les chocs sont ceux de la figure 9.2.

E.2 Modèle de dynamique plus élaboré pour les nuages denses

Dans chocs J traversant les nuages denses, les gros grains n'accomplissent pas même une giration avant de suivre le mouvement du gaz (Fig. 9.2, colonne de droite). Etant donné que la giration des grains est à l'origine de leur traitement, la modélisation de leur première giration doit être effectuée avec soin afin de ne pas surestimer l'intensité des collisions grain-grain. La dynamique des grains peut être décomposée en deux phases :

1. une première phase *inertielle* (délimitée sur la figure 9.2 par les flèches intitulées "découplé") pendant laquelle le grain n'est pas couplé au champ magnétique : son mouvement, conséquence de son inertie, est essentiellement un mouvement de translation vers l'avant. Cette phase est absente dans les milieux moins denses (Fig. 9.2, colonne de gauche).
2. une deuxième phase *giratoire* où le grain, couplé au champ magnétique, tourne autour des lignes de champ. La phase θ de giration des grains d'une même boîte de taille est alors aléatoire [1]. Notre modèle simplifié ne comprend que cette phase.

La position z_{gyr} dans le choc où les grains d'une même boîte de taille entrent en collision entre eux pour la première fois (extrémité droite de la double flèche sur la figure 9.2) est choisie comme frontière entre les phases inertielle et giratoire d'une taille de grain.

Avec ce modèle à deux phases de la dynamique des poussières, nous arrivons à reproduire par intégration sur z de la loi du mouvement exprimé en coordonnées polaires (Eq. (E.3) et (E.4)) l'évolution de la valeur *moyenne* de la vitesse de giration que nous avions obtenue par

1. La distribution des grains d'une même boîte possède une dispersion en masse suffisamment large pour justifier cette hypothèse.

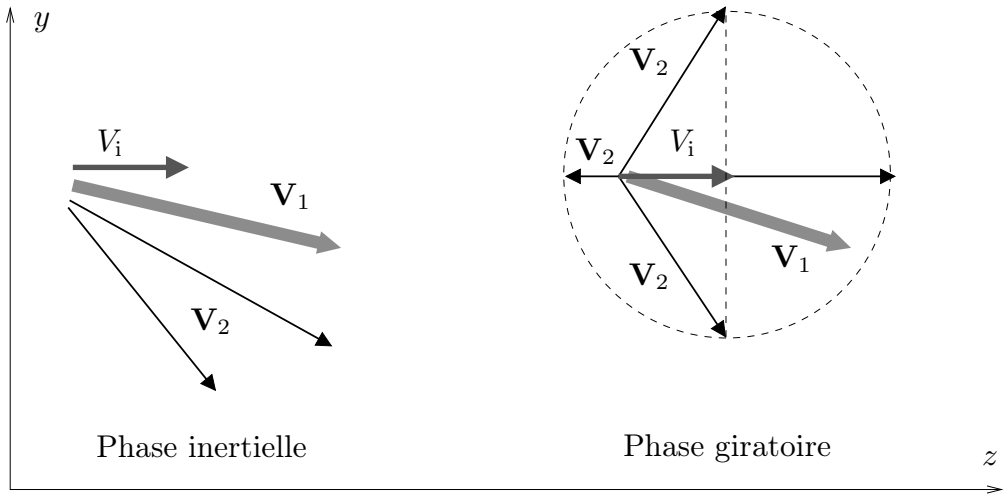


FIGURE E.2 – Schéma de calcul de la vitesse d'impact lors d'une collision entre deux grains numérotés 1 et 2. (**Gauche**) Quand les deux grains sont chacun dans leur phase inertielle, la vitesse d'impact est le module de la différence des vecteurs vitesses des deux grains (tous deux dirigés dans le sens de propagation du choc avec $V_z > V_\mathrm{i}$). (**Droite**) Quand au moins un des deux grains (ici le grain 2) est dans sa phase giratoire, son vecteur vitesse est la somme vectorielle de la vitesse des ions $\mathbf{V}_\mathrm{i}$ et d'une vitesse de giration dont la phase est aléatoire. Dans ce cas-ci, les collisions entre les deux grains peuvent survenir de manière équiprobable sous n'importe quel angle. Dans notre modèle, nous traitons séparément 4 vitesses d'impact pour 4 valeurs de la phase de giration θ (0, 90, 180, et 270 degrés).

une intégration des lois du mouvement en coordonnées cartésiennes (Eq. (8.7) et Fig. E.1) sur le temps t. Il suffit pour cela d'intégrer les équations (E.3) et (E.4) d'une façon spécifique pour chacune des phases inertielle et giratoire :

1. Phase inertielle ($z < z_\mathrm{gyr}$) : $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$
2. Phase giratoire ($z \geq z_\mathrm{gyr}$) : $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{V_\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$

Dans ce modèle, nous ignorons volontairement la première giration des grains réfléchis qui les ramène dans le gaz pré-choc, c'est-à-dire que nous ne prenons pas en compte le traitement qu'ils subissent et font subir aux autres grains pendant cette première giration. Les grains réfléchis sont injectés directement dans le choc avec la vitesse de giration qu'ils ont acquis par accélération Fermi I.

E.3 Calcul de la vitesse d'impact grain-grain

Le modèle numérique de dynamique présenté au paragraphe E.2 permet d'approcher en moyenne la solution exacte des lois du mouvement, tout en intégrant sur la position z dans le choc. Dans ce cadre, il possible d'intégrer le traitement gaz-grain et grain-grain des poussières tout en résolvant la structure du choc.

Nous présentons schématiquement sur la figure E.2 notre mode de calcul de la vitesse d'impact entre deux grains pendant les phases inertielle et giratoire du mouvement des grains.

	Phase inertielle	Phase giratoire
Position	$z < z_{\text{gyr}}$	$z \geq z_{\text{gyr}}$
Vitesse moyenne selon $\mathbf{e}_z$	$V_z > V_{\text{i}}$	V_{i}
Relation d'intégration $\frac{\text{d}}{\text{d}z}$	$\frac{1}{V_z}\frac{\text{d}}{\text{d}t}$	$\frac{1}{V_{\text{i}}}\frac{\text{d}}{\text{d}t}$
Phase de giration	$\lvert\theta\rvert < \pi/2$	$\theta \in [0 : 2\pi]$
Masse par unité de volume	$f/V_z < f/V_{\text{i}}$	f/V_{i}
Vitesse d'impact	$\lvert\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1\rvert$	$\lvert\mathbf{V}_{\text{i}} + V_{\text{gyr},2}\,(\cos\theta_2\,\mathbf{e}_z + sin\theta_2\,\mathbf{e}_y)$ $-\mathbf{V}_1\rvert$ (pour $\theta = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$)

TABLE E.1 – Caractéristiques des phases inertielle et giratoire de la dynamique des grains dans les chocs J. Le flux de densité de masse f est la variable d'intégration de chaque boîte de grain (*cf.* annexe F). La formule de la vitesse d'impact de la phase inertielle est applicable si les deux grains entrant en collision sont dans leur phase inertielle. Celle de la phase giratoire si au moins un des deux grains est dans sa phase giratoire.

Si deux grains numérotés 1 et 2 sont tous deux dans leur phase inertielle, leur collision se fait avec une vitesse d'impact faible devant la vitesse du choc et égale à $|\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1|$ où $\mathbf{V}$ est le vecteur vitesse des grains dans le référentiel du front de choc. Si au moins l'un des deux grains est dans sa phase giratoire, alors les collisions doivent être traitées de manière statistique. Nous traitons séparément 4 cas de collisions pour 4 valeurs de la phase de giration du grain 2 ($\theta_2 = 0, \pi/2, \pi$ et $3\pi/2$). Dans ce cadre, la vitesse d'impact entre le grain 1 et le grain 2 (qui peut pour $\theta = \pi$ être plus élevée que la vitesse du choc) a pour expression :

$$\Delta V(\theta_2) = |\mathbf{V}_1 - (V_{\text{i}}\,\mathbf{e}_z + V_{\text{gyr},2}\,(\cos\theta_2\,\mathbf{e}_z + sin\theta_2\,\mathbf{e}_y))| \ . \tag{E.6}$$

Le tableau E.1 résume les différences entre la phase inertielle et la phase giratoire. Comme nous le verrons au chapitre 9, la phase inertielle tend à diminuer l'intensité du traitement des grains dans le choc.

Annexe F

Gestion numérique du traitement des grains

La conservation de la matière (gaz + grains) dans un choc stationnaire se traduit par la conservation du flux de densité de masse (que nous désignons plus simplement par le terme *flux*), grandeur physique exprimée en $\mathrm{g\,cm^{-2}\,s^{-1}}$. Si on ignore le traitement des grains dans le choc, le flux de chaque boîte de taille reste constant à travers le choc. Le flux est donc la variable d'intégration la plus adaptée à notre étude du traitement des grains dans un choc.

F.1 Calcul des grandeurs caractéristiques des grains d'une boîte

En tout point du choc, chaque boîte de cœurs est caractérisée par la *distribution en charge* de son flux $f_k(Z)$ pour chaque charge Z de sa distribution de charge. Le domaine de charge de cette distribution de flux est compris entre les bornes $Z_{k,\mathrm{inf}}$ et $Z_{k,\mathrm{sup}}$ propres à la boîte k. Ces bornes sont mobiles. Elles s'adaptent automatiquement à l'évolution de la distribution en charge du flux [1].

Connaissant la distribution en charge du flux (variables intégrées), on calcule successivement :

1. les caractéristiques *moyennes* des cœurs : masse $\tilde{m}_k$ et moments $\langle n\,a^i\rangle_k$ de la distribution de taille de chaque boîte k par la méthode [2] de Mizuno et al. (1988) (*cf.* annexe A de l'article 2) ;
2. les caractéristiques *moyennes* des grains (coeurs + manteau de glace) : rayon a_k, section efficace σ_k et masse m_k (*cf.* annexe B de l'article 2) ;
3. les vitesses fluides moyennes $\langle V_k(Z)\rangle$ des grains, données par l'équation (8.14) pour les grains neutres [3] (Z=0) et l'équation (8.13) pour les grains chargés (Z≠0) ;

1. L'article 2 explique en détail comment on déduit de cette distribution en charge de flux les caractéristiques du grain moyen associé à la boîte : charge, rayon, section efficace, masse et vitesse fluide.
2. En supposant, pour cette étape seulement, que tous les grains suivent le mouvement des ions
3. Dans les chocs C, les très petits grains ont une dynamique stochastique (*cf.* § 8.3.2) : les grains neutres ne suivent pas la dynamique des grains chargés et doivent donc être traités séparément. Cette distinction

4. la densité de masse $\rho_k(Z)$ ($\mathrm{g\,cm^{-3}}$) des grains de charge Z dans la boîte k

$$\rho_k(Z) = \frac{f_k(Z)}{\langle V_{kz}(Z)\rangle}\,, \tag{F.1}$$

5. la densité de grains $n_k(Z)$ de charge Z dans la boîte k.

$$n_k(Z) = \frac{\rho_k(Z)}{\tilde{m}_k}\,, \tag{F.2}$$

6. la charge moyenne Z_k des grains de la boîte k

$$Z_k = \frac{1}{n_k}\sum_Z n_k(Z)\,, \tag{F.3}$$

7. la distribution de charge $\tilde{F}_k(Z)$ des grains de la boîte k

$$\tilde{F}_k(Z) = \frac{n_k(Z)}{\sum_Z n_k(Z)}\,, \tag{F.4}$$

8. la distribution de charge $F^{\neq 0}(Z)$ des grains chargés[1] (pour les petits grains des chocs C) :

$$F_k^{\neq 0}(Z \neq 0) = \frac{\rho_k(Z)}{\sum_{Z\neq 0}\rho_k(Z)}\,, \tag{F.5}$$

9. le flux de charge porté par les grains de la boîte k

$$\frac{1}{\tilde{m}_k}\sum_Z Z\, f_k(Z)\,, \tag{F.6}$$

10. la densité d'électrons libres (par application de la conservation du flux de charge, *cf.* article 2, Eq. (16) *corrigée*) :

$$n_{\mathrm{e}} = n_{\mathrm{i}} + n_{\mathrm{PAH^+}} - n_{\mathrm{PAH^-}} + \frac{1}{V_{\mathrm{i}}}\sum_k \frac{1}{\tilde{m}_k}\sum_Z Z\, f_k(Z)\,. \tag{F.7}$$

F.2 Intégration de la distribution de charge du grain moyen

Les variations de la distribution de charge $\tilde{F}_k(Z)$ des grains de la boîte k entre z et $z+\mathrm{d}z$ se traduisent numériquement par des transferts de flux $\mathrm{d}f_k(Z)/\mathrm{d}z$ entre les différentes charges Z de la distribution en charge de cette boîte. La variation de flux $\mathrm{d}f_k(Z)/\mathrm{d}z$ entre z et $z+\mathrm{d}z$ se ramène à une variation $\mathrm{d}\rho_k(Z)/\mathrm{d}t$ de la densité de masse entre t et $t+\mathrm{d}t$:

$$\mathrm{d}z = \langle V_{kz}(Z)\rangle\,\mathrm{d}t\,, \tag{F.8}$$

$$\frac{\mathrm{d}f_k(Z)}{\mathrm{d}z} = \frac{\mathrm{d}\rho_k(Z)}{\mathrm{d}t}\,. \tag{F.9}$$

n'a pas lieu d'être dans les chocs J qui sont mono-fluides.

1. La distribution de charge des grains neutres est simplement $F_k^0(0) = 1$.

Les transferts de flux pour le calcul de la distribution en charge du flux $f_k(Z)$ se calculent donc avec l'équation différentielle suivante (Eq. (C.1) de l'article 2, *corrigée* [1] et simplifiée) :

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}f_k(Z)}{\mathrm{d}z} = {} & \rho_k(Z+1)\left(J_\mathrm{e}(Z+1) + J_{\mathrm{PAH}-}(Z+1)\right) \\ & + \rho_k(Z-1)(J_\mathrm{i}(Z-1) + J_\mathrm{pe}(Z-1)) \\ & - \rho_k(Z)\left(J_\mathrm{e}(Z) + J_{\mathrm{PAH}-}(Z) + J_\mathrm{i}(Z) + J_\mathrm{pe}(Z)\right)\,, \end{aligned} \quad \text{(F.10)}$$

où J_e, J_i, $J_{\mathrm{PAH}-}$, J_pe, sont respectivement les taux d'attachement des électrons, des ions, des PAH^- et de photoémission électronique (*cf.* Eqn (5.12), (5.13) et (5.19) du chapitre 5).

Ces transferts conservent automatiquement le flux total $f_k = \sum_Z f_k(Z)$ de la boîte.

F.3 Gestion des collisions en coordonnées cartésiennes et polaires

Entre z et $z + \mathrm{d}z$, une part infinitésimale $\mathrm{d}f_k(Z)/\mathrm{d}z$ du flux de chaque boîte k subit un traitement, qu'il s'agisse de fragmentation, de coagulation, d'érosion ou de vaporisation. La prise en charge numérique de ce traitement se traduit, pour les processus de fragmentation et de coagulation, par un échange de cette variation de flux entre la boîte k et d'autres boîtes collectrices, et pour l'érosion et la vaporisation par un échange entre la boîte k et le gaz.

Vitesse d'impact en coordonnées cartésiennes

L'intégration de la dynamique des grains se fait soit en coordonnées cartésiennes, soit en coordonnées polaires. En coordonnées cartésiennes, la vitesse d'impact entre les grains projectile de la boîte p et cible de la boîte t est simplement

$$\Delta V = |\mathbf{V}_t - \mathbf{V}_p|\,, \quad \text{(F.11)}$$

où $\mathbf{V}_{\mathrm{t,p}}$ est le vecteur vitesse instantanée des grains dont la dynamique est intégrée (gros grains, peu sensibles aux fluctuations de charge) et le vecteur vitesse fluide moyenne $\langle\mathbf{V}\rangle$ des grains dont la vitesse est calculée (très petits grains, sujets aux fluctuations de charge).

Vitesse d'impact en coordonnées polaires

En coordonnées polaires, on deux distinguer deux cas :

1. Si les deux grains sont dans leur phase inertielle, alors la vitesse d'impact est $\Delta V = |\mathbf{V}_t - \mathbf{V}_p|$ comme en coordonnées cartésiennes.
2. Si au moins un des deux grains est dans sa phase giratoire, alors les phases relatives de giration entre grains des deux boîtes sont aléatoires, et l'on doit traiter les collisions

1. $\mathrm{d}t/\mathrm{d}z = \langle V_{kz}(Z)\rangle$ (vitesse fluide moyenne) et non V_{kz} (vitesse instantanée du grain) comme indiqué dans l'article 2.

grain-grain de manière statistique. On traite les N cas, affectés chacun d'une probabilité 1/N :

$$\Delta V_{i=1,N} = \sqrt{V_{t,\mathrm{gir}}^2 + V_{p,\mathrm{gir}}^2 + 2V_{t,\mathrm{gir}}\, V_{p,\mathrm{gir}}\, \cos\left(2\pi/N\right)}\,. \tag{F.12}$$

On choisit N = 4.

Ce mode de calcul ne fonctionne pas si les grains ont des vitesses de dérive différentes. Cependant, on utilise l'intégration en coordonnées polaires quand les grains sont fortement couplés au champ magnétique (chocs J, chocs C en milieu diffus) : les grains ont alors tous une vitesse de dérive commune égale à la vitesse des ions $\mathbf{V}_\mathrm{i}$.

Kernel de collision

Considérons une boîte cible d'indice t (t pour *target*, la cible) et une boîte projectile d'indice p. Les projectiles sont des grains plus petits que les grains cibles.

$$p \geq t \Leftrightarrow m_p \leq m_t\,. \tag{F.13}$$

Un grain cible (resp. projectile) entre en collisions avec les grains projectiles (resp. cibles) à la fréquence $n_p \times K$ (resp. $n_t \times K$) où K est le *kernel* de collision ($\mathrm{cm}^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}$). Pour un processus collisionnel de nature purement géométrique :

$$K = \sigma \Delta V\,, \tag{F.14}$$

où $\sigma = \pi(a_t + a_p)^2$ est la section efficace géométrique et ΔV la vitesse d'impact. Le kernel peut avoir une expression plus complexe si, par exemple, l'attraction électrostatique entre grains est prise en compte.

Le flux élémentaire $\mathrm{d}f_t/\mathrm{d}z$ de grains cibles entrés en collision avec les grains projectiles a donc pour expression : $\mathrm{d}f_t/\mathrm{d}z = f_t \times K\, n_p$. Comme $\mathrm{d}f/\mathrm{d}z = \mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t$ (Eq. (F.9)),

$$\frac{\mathrm{d}f_t}{\mathrm{d}z} = \rho_t \times K\, n_p\,, \tag{F.15}$$

$$\frac{\mathrm{d}f_p}{\mathrm{d}z} = \rho_p \times K\, n_t\,. \tag{F.16}$$

F.4 Gestion numérique de la masse et de la charge des fragments

Nous reprenons intégralement le modèle de (Tielens et al., 1994; Jones et al., 1996) qui calcule la fraction en volume (et donc en masse) du grain qui est réduite en fragment lors d'une collision grain-grain. En cas de vaporisation partielle du grain, cette fraction est limitée par la fraction du grain déjà vaporisée.

Affectation des fragments dans les boîtes collectrices

Lors de la collision entre grains cibles (boîte t) et grains projectiles (boîte p), une fraction de masse x_t^{frag} (resp. x_p^{frag}) de chaque grain de la boîte cible (resp. projectile) est fragmentée.

Si $x^{\rm frag} \ll 1$, il s'agit d'une processus de cratérisation. Si $x^{\rm frag} > 0,5$ d'une fragmentation catastrophique.

Les fragments suivent une distribution en taille caractérisée une loi puissance $\mathrm{d}n(m)/\mathrm{d}m \propto m^{-\beta_{\rm f}}$ moins pentue que la MRN ($\beta_{\rm f} = 1{,}77$ contre 1,86 pour la MRN). La boîte *collectrice* d'indice $c \geq t$ reçoit de la part de la boîte t la fraction de flux suivante (Annexe B de Jones et al., 1996, , Eq. (B8)) :

$$x_c^{\rm coll} = \frac{m_{c+}^{2-\beta_{\rm f}}}{m_{\rm f+}^{2-\beta_{\rm f}} - m_{\rm f-}^{2-\beta_{\rm f}}} \left(1 - \eta^{2-\beta_{\rm f}}\right) , \tag{F.17}$$

$$\sum_{c \geq t} x_c^{\rm coll} = 1 \tag{F.18}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}f_c}{\mathrm{d}z}\right)_{\rm coll} = x_t^{\rm frag} \frac{\mathrm{d}f_t}{\mathrm{d}z} \times x_c^{\rm coll} , \tag{F.19}$$

où η est la largeur géométrique de chaque boîte (Eq. (4.3)), $\tilde{m}_c$ est la masse du grain moyen de la boîte collectrice c, m_{f-} la masse minimale (correspondant ici à un grain de 5 Å), et m_{f+} est la masse maximale des fragments issus de cette collision (Jones et al., 1996)

$$m_{f+} = 2,04.10^{-2}\, x_t^{\rm frag}\, \tilde{m}_k \qquad (x_t^{\rm frag} < 0,5) , \tag{F.20}$$

$$m_{f+} = 1,02.10^{-2}\, \tilde{m}_k \qquad (x_t^{\rm frag} \geq 0,5) . \tag{F.21}$$

La même chose doit être effectuée avec les fragments issus de la boîte projectile p.

Distributions de charge des fragments

La distribution de charge des fragments, notée $G(Z)$, n'a *a priori* aucun raison d'être celle $F(Z)$ des grains des boîtes collectrices. C'est un paramètre qui n'a pas, à notre connaissance, été étudié en laboratoire. On pourrait l'ignorer si le milieu n'était pas si peu ionisé. La charge des fragments a un tel effet sur l'ionisation du gaz qu'elle doit être clairement définie.

A défaut d'autre chose, on se donne les modèles simples suivants :

$$G(Z) = F(Z) . \tag{F.22}$$

Conservation du flux de charge lors de la fragmentation

Quel traitement des grains dans le cas d'une pénurie d'électrons ?

Dans un milieu très peu ionisé, le traitement des poussières par boîtes de taille pose un problème numérique lorsque la densité d'électrons libres devient très faible devant celle portée par les grains, comme cela se passe dans les chocs C ou dans la queue de recombinaison des chocs J. Dans le modèle actuel, la fragmentation est une grosse consommatrice d'électrons car elle transforme des gros grains en très petits fragments qui collectivement portent plus d'électrons que le grain dont ils sont issus [1]. Ce prélèvement sur les électrons libres du gaz charge n'est reporté qu'*a posteriori* sur la densité d'électrons libres et peut donc faire planter

1. La charge des grains est proportionnelle au rayon et non à la masse.

l'intégrateur VODE si il y a déjà une pénurie d'électrons libres dans le choc. Si l'on veut résoudre la structure du choc en simultané avec le calcul du traitement des grains, il est donc *indispensable* d'assurer la conservation du flux de charge lors de la fragmentation (et, de manière moins dramatique, lors de la coagulation des grains).

Conservation du flux de charge lors de la fragmentation d'un grain

Dans le modèle défini jusqu'à présent, le flux de charge n'est pas automatiquement conservé lors de la fragmentation du grain t car les distributions de charge $F_t(Z)$ du grain t et $G_c(Z)$ de ses fragments n'ont aucun lien (*cf.* § F.4)[1]. Considérons le flux élémentaire $(\mathrm{d}f_c/\mathrm{d}z)_{\mathrm{coll}}$ que reçoit la boîte collectrice c de la boîte cible t. La variation de flux de charge au cours de ce transfert de flux entre boîtes est d'après l'équation (F.24) :

$$\left(\frac{\mathrm{d}f_c}{\mathrm{d}z}\right)_{\mathrm{coll}} \times \left(\frac{1}{\tilde{m}_c}\sum_Z G_c(Z)\times Z - \frac{1}{\tilde{m}_t}\sum_Z F_t(Z)\times Z\right) \neq 0\,.$$

Pour assurer la conservation du flux de charge, nous n'avons pas d'autre possibilité que d'adapter la distribution de charge $G_c(Z)$ des fragments. Nous souhaitons cependant conserver notre modèle de distribution de charge des fragments $G_c(Z)$ pour les cas où la conservation du flux de charge n'est indispensable à l'intégration de la structure du choc. Ces deux exigences sont compatibles si l'on ajoute une distribution de charge *algébrique* $H_c(Z)$ aux fragments, distribution qui n'apporte pas de flux de masse mais compense la différence de flux de charge.

$$\sum_Z H_c(Z) = 0\,, \tag{F.23}$$

$$\frac{1}{\tilde{m}_c}\sum_Z \left(G_c(Z)+H_c(Z)\right)\times Z = \frac{1}{\tilde{m}_t}\sum_Z F_t(Z)\times Z\,. \tag{F.24}$$

Pour faciliter le travail de l'intégrateur, chaque distribution de charge algébrique $H_c(Z)$ doit avoir une forme qui rappelle celle des distributions $F_c(Z)$ des boîtes collectrices, basées sur l'attachement d'ions et d'électrons du gaz. Le modèle de construction des distributions de charge $H_c(Z)$ est le suivant. La distribution des fragments dans les boîtes collectrices c avec une distribution en charge $G_c(Z)$ génère une non-conservation de la charge ΔZ par grain collecté dans la boîte c :

$$\Delta Z = \frac{\tilde{m}_c}{\tilde{m}_t}\sum_Z F_t(Z)\times Z - \sum_Z G_c(Z)\times Z\,. \tag{F.25}$$

Si $\Delta Z > 0$, nous pouvons considérer que des charges positives ont été perdues lors du transfert de flux depuis la boîte cible t vers la boîte collectrice c. Si $\Delta Z < 0$, des charge négatives ont été perdues. La distribution $H_c(Z)$ compensatrice est celle qui traduit l'attachement sur les fragments de ces charges positives (ions) ou négatives (électrons) perdues.

1. Le flux de charge ne serait pas plus conservé si on choisissait $G_c = F_c$.

- attachement d'électrons si $\Delta Z > 0$:

$$H_c(Z) = K_c \left(G_c(Z+1)\tilde{J}_\mathrm{e}(Z+1) - G_c(Z)\tilde{J}_\mathrm{e}(Z) \right) , \tag{F.26}$$

- attachement d'ions si $\Delta Z < 0$:

$$H_c(Z) = K_c \left(G_c(Z-1)\tilde{J}_\mathrm{i}(Z-1) - G_c(Z)\tilde{J}_\mathrm{i}(Z) \right) , \tag{F.27}$$

où $\tilde{J}_\mathrm{e}$ et $\tilde{J}_\mathrm{i}$ sont les facteurs électrostatiques d'attachement des électrons et des ions (définis par les équations (1) et (2) de l'article 2), et K_c est une constante qui dépend de ΔZ et dont nous allons donner l'expression en reformulant l'équation (F.24) :

$$\sum_Z H_c(Z) \times Z \;\; = \;\; \Delta Z \, ,$$

d'où

$$K_c = \frac{\Delta Z}{\sum_Z G_c(Z) \times \tilde{J}(Z)} \, , \tag{F.28}$$

où la somme au dénominateur est effectuée avec $\tilde{J}_\mathrm{e}$ de $Z_\mathrm{inf}+1$ à Z_sup si $\Delta Z > 0$ et avec $\tilde{J}_\mathrm{i}$ de Z_inf à $Z_\mathrm{sup}-1$ si $\Delta Z < 0$.

La distribution de charge $H_c(Z)$ ainsi construite assure la conservation du flux de la charge pour la fraction de flux de la boîte t collectée dans la boîte c. Cette procédure doit être répétée sur toutes les boîtes collectrices.

Conservation du flux de charge avec intégration de la charge moyenne

L'intégration de la charge des grains peut s'effectuer de deux manières pour chaque taille de grain : par l'intégration de la distribution en charge du flux $f_k(Z)$ et par l'intégration de la charge moyenne Z_c. La première méthode est utilisée quand la charge des grains est faible ($|Z| \simeq 1$), la deuxième quand elle est élevée ($|Z| \gg 1$). Le mode d'intégration de la charge bascule automatiquement de l'un à l'autre dès que cela est nécessaire (*cf.* article 2).

Quand la charge des grains des boîtes collectrices est intégrée en valeur moyenne non en distribution de charge, la charge des fragments est prise égale à celle de la boîte collectrice, ce qui donne une variation de charge ΔZ :

$$\Delta Z = \frac{\tilde{m}_c}{\tilde{m}_t} \times Z_t - Z_c \, . \tag{F.29}$$

La variation du flux de charge est selon l'équation (F.24) :

$$\left(\frac{\mathrm{d}f_c}{\mathrm{d}z}\right)_\mathrm{coll} \left(\frac{Z_c}{\tilde{m}_c} - \frac{Z_t}{\tilde{m}_t}\right) = -\frac{1}{\tilde{m}_c} \left(\frac{\mathrm{d}f_c}{\mathrm{d}z}\right)_\mathrm{coll} \Delta Z = \frac{f_c}{\tilde{m}_c} \times \frac{\mathrm{d}Z_c}{\mathrm{d}z} \, .$$

la conservation du flux de charge lors de la fragmentation des grains s'effectue alors en ajoutant le terme compensateur $\mathrm{d}Z_c/\mathrm{d}z$ (cinquième terme de la parenthèse) dans l'équation différentielle (Eq. (C.3) de l'article 2) de calcul de la charge moyenne de la boîte collectrice c :

$$\frac{\mathrm{d}Z_c}{\mathrm{d}z} = \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}z} \times \left(J_\mathrm{i}(Z_c) + J_\mathrm{pe}(Z_c) - J_\mathrm{e}(Z_c) - J_{\mathrm{PAH}^-}(Z_c) - \Delta Z \frac{1}{f_c} \left(\frac{\mathrm{d}f_c}{\mathrm{d}z}\right)_\mathrm{coll} \right) . \tag{F.30}$$

F.5 Algorithme de coagulation à deux boîtes collectrices

La méthode de Mizuno et al. (1988), décrite dans l'article 2, permet de définir à chaque pas d'intégration le facteur de puissance β_k de la distribution en masse des grains de chaque boîte :

$$\frac{\mathrm{d}n_k(m)}{\mathrm{d}m} \propto m^{\beta_k} \qquad (m_{k-} < m \leq m_{k+}) \,. \tag{F.31}$$

Si les grains des boîtes cible t et projectile p coagulent, dans quelles boîtes les grains coagulés doivent-ils être collectés ?

Les grains coagulés se répartissent sur l'intervalle de masse $[m_{p-} + m_{t-} : m_{p+} + m_{t+}]$. Cet intervalle de masse est à cheval sur les boîtes c et $c-1$ (si $c > 1$) où c est défini par :

$$c = 1 + \mathrm{int}\left(\frac{\ln\left((m_{p-} + m_{t-})/m_{+}\right)}{\ln \eta}\right) . \tag{F.32}$$

La boîte projectile étant composée de grains de même taille ou plus petits que ceux de la boîte cible ($p \leq t$), on peut de manière approximative assimiler tous les grains projectiles à leur grain moyen de masse m_p. Les grains cibles (boîte t) qui vont être mis dans la boîte collectrice supérieure d'indice $c-1$ ont donc une masse minimale

$$\mu_t = \min(m_{t-}, m_{c-} - m_p) \,. \tag{F.33}$$

Le flux élémentaire de grains (projectile + cible) à transférer dans la boîte $c-1$ est

$$\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}(\mu_t)\right)_{\mathrm{c-1}} = \int_{\mu_t}^{m_{t+}} \int_{m_{p-}}^{m_{p+}} K\, n_t(m)\, n_p(m')\, (m_t \langle V_{tz}\rangle + m_p \langle V_{pz}\rangle)\, \mathrm{d}m\, \mathrm{d}m'$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}(\mu_t)\right)_{\mathrm{c-1}} \propto \langle V_{tz}\rangle \times \left[\frac{m^{2+\beta_t}}{2+\beta_t}\right]_{\mu_t}^{m_{t+}} \times \left[\frac{m^{1+\beta_t}}{1+\beta_t}\right]_{m_{p-}}^{m_{p+}} + \langle V_{pz}\rangle \times \left[\frac{m^{1+\beta_t}}{1+\beta_t}\right]_{\mu_t}^{m_{t+}} \times \left[\frac{m^{2+\beta_t}}{2+\beta_t}\right]_{m_{p-}}^{m_{p+}} ,$$

où K est le kernel de collision (*cf.* § F.3).

Ce flux élémentaire est une fraction x_{c-1} du flux total de collision $\mathrm{d}f_t/\mathrm{d}z + \mathrm{d}f_p/\mathrm{d}z$ (Eq. (F.15) et (F.16)) :

$$x_{c-1} = \frac{\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}(\mu_t)\right)_{\mathrm{c-1}}}{\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}(m_{t-})\right)_{\mathrm{c-1}}} \,. \tag{F.34}$$

La boîte collectrice d'indice $c-1$ reçoit donc un flux $x_{c-1} \times \mathrm{d}f/\mathrm{d}z$ de chacune des boîtes projectile et cible, tandis que la boîte d'indice c reçoit le reste, c'est-à-dire un flux $(1 - x_{c-1}) \times \mathrm{d}f/\mathrm{d}z$.

Conservation du flux de charge lors de la coagulation

La méthode de conservation du flux de charge appliquée à la fragmentation des grains (*cf.* § F.4) est également applicable à la coagulation des grains. Elle s'effectue indépendamment sur la boîte cible et sur la boîte projectile.

Annexe G

Fichiers de chimie

G.1 Liste des espèces chimiques

```
!-- list of chemical species -- Setup for research of stationnary state ---
!-- WARNING : order = neutrals, mantles, cores, ions >0, ions <0 -------
!-- name, abundance (/H), formation enthalpy (kCal/mol) -----------
!---------------------------------------
H        2.00D-03    51.634                        !
H2       4.99D-01     0.000                        !
He       1.00D-01     0.000                        !
C        1.000D-16   169.980     -> C/H = 8.27e-5  cf C+ !
CH       1.000D-16   141.600         A&G : 3.55e-4 !
CH2      1.000D-16    93.900                       !
CH3      1.000D-16    34.800                       !
CH4      1.000D-16   -15.970                       !
O        1.24D-04    58.980     -> O/H = 1.24e-4 !
O2       1.000D-16     0.000         A&G : 7.41e-4 !
OH       1.000D-16     9.250                       !
H2O      1.000D-16   -57.100                       !
CO       1.000D-16   -27.200                       !
CO2      1.000D-16   -93.965                       !
C2       1.000D-16   198.200                       !
C2H      1.000D-16   113.300                       !
C2H2     1.000D-16    56.320                       !
C3       1.000D-16   194.000                       !
C3H      1.000D-16   177.000   ***                 !
C3H2     1.000D-16   114.000   ***                 !
CH3OH    1.000D-16   -99.999                       !
H2CO     1.000D-16   -99.999                       !
HCO2H    1.000D-16   -99.999                       !
N        6.39D-05    112.530     -> N/H = 6.39e-5 !
NH       1.000D-16    90.000         A&G : 9.33e-5 !
NH2      1.000D-16    46.200                       !
NH3      1.000D-16    -9.299                       !
CN       1.000D-16   103.200                       !
HCN      1.000D-16    32.390                       !
HNC      1.000D-16    48.000                       !
N2       1.000D-16     0.000                       !
NO       1.000D-16    21.460                       !
S        1.000D-16    65.600         A&G : 1.86e-5 !
SH       1.000D-16    32.600                       !
```

```
H2S      1.000D-16    -4.230                      !
CS       1.000D-16    63.000                      !
SO       1.000D-16     1.200                      !
SO2      1.000D-16   -70.300                      !
OCS      1.000D-16   -34.000                      !
Si       1.000D-16   106.700        A&G : 3.55e-5 !
SiH      1.000D-16    89.690                      !
SiH2     1.000D-16    69.140   *                  !
SiH3     1.000D-16    48.540   *                  !
SiH4     1.000D-16    11.000                      !
SiO      1.000D-16   -24.300                      !
SiO2     1.000D-16   -73.000                      !
Mg       1.000D-16    35.000                      !
Fe       1.000D-16    98.700                      !
C54H18   1.000D-16   -99.999     PAH/nH  =1(-16)   !
C60      0.000D-00   -99.999    Ngrain = calcule   !
H2O*     1.030D-04               H2O*/nH =1.03(-4) !
O2*      1.000D-16                                 !
CO*      8.270D-06               CO*/nH  =8.27(-6) !
CO2*     1.340D-05               CO2*/nH =1.34(-5) !
CH4*     1.550D-06               CH4*/nH =1.55(-6) !
NH3*     1.550D-05               NH3*/nH =1.55(-5) !
N2*      1.000D-16                                 !
CH3OH*   1.860D-05              CH3OH*/nH =1.86(-6) !
H2CO*    6.200D-06               H2CO*/nH =6.20(-6) !
HCO2H*   7.240D-06              HCO2H*/nH =7.24(-6) !
OCS*     2.070D-07               OCS*/nH =2.07(-7) !
H2S*     3.720D-06               H2S*/nH =3.72(-6) !
Fe*      1.000D-16                                 !
SiH4*    1.000D-16                                 !
SiO*     1.000D-16                                 !
SiO2*    1.000D-16                                 !
O**      1.400D-04               Noyaux = 4*3.50(-5)!
Si**     3.370D-05               Noyaux = 3.370(-5) !
Mg**     3.700D-05               Noyaux = 3.700(-5) !
Fe**     3.230D-05               Noyaux = 3.230(-5) !
C**      2.170D-04               Noyaux = 1.630(-4) !
H+       1.000D-16   365.200                       !
H2+      1.000D-16   355.700                       !
H3+      1.000D-16   265.000                       !
He+      1.000D-16   567.000                       !
C+        8.27D-05   429.700     -> C/H = 8.27e-5 !
CH+      1.000D-16   387.000         A&G : 3.55e-4 !
CH2+     1.000D-16   331.000                       !
CH3+     1.000D-16   262.000                       !
CH4+     1.000D-16   272.000   **                  !
CH5+     1.000D-16   216.000   *                   !
O+       1.000D-16   373.000                       !
O2+      1.000D-16   278.400                       !
OH+      1.000D-16   309.310                       !
H2O+     1.000D-16   233.700                       !
H3O+     1.000D-16   143.000                       !
CO+      1.000D-16   295.970                       !
HCO+     1.000D-16   197.300                       !
HCO2+    1.000D-16   141.000    *                  !
C2+      1.000D-16   476.000                       !
C2H+     1.000D-16   404.000                       !
```

```
C2H2+    1.000D-16   317.500                      !
C2H3+    1.000D-16   267.900                      !
C3+      1.000D-16   479.000    *                 !
C3H+     1.000D-16   381.000    *                 !
C3H2+    1.000D-16   330.000   * **               !
C3H3+    1.000D-16   282.000   * **               !
N+       1.000D-16   447.690                      !
NH+      1.000D-16   401.100                      !
NH2+     1.000D-16   302.700                      !
NH3+     1.000D-16   224.900                      !
NH4+     1.000D-16   151.000    *                 !
CN+      1.000D-16   429.300                      !
C2N+     1.000D-16   410.000    *                 !
HCN+     1.000D-16   346.000                      !
H2CN+    1.000D-16   226.000    *                 !
H2NC+    1.000D-16   265.000    *                 !
N2+      1.000D-16   359.298                      !
N2H+     1.000D-16   247.500                      !
NO+      1.000D-16   235.330                      !
HNO+     1.000D-16   256.800                      !
S+       1.47D-05   304.000     -> S/H = 1.47e-5 !
SH+      1.000D-16   271.800          A&G : 1.86e-5 !
H2S+     1.000D-16   237.000                      !
H3S+     1.000D-16   190.000 *                    !
CS+      1.000D-16   324.000                      !
HCS+     1.000D-16   243.000                      !
SO+      1.000D-16   239.200                      !
HSO+     1.000D-16   210.000                      !
HSO2+    1.000D-16   143.000                      !
HOCS+    1.000D-16   181.000                      !
Si+      1.000D-16   295.000                      !
SiH+     1.000D-16   271.820                      !
SiH2+    1.000D-16   276.360   *                  !
SiH3+    1.000D-16   237.320   *                  !
SiH4+    1.000D-16   279.900                      !
SiH5+    1.000D-16   219.380   *                  !
SiO+     1.000D-16   239.520                      !
SiOH+    1.000D-16   -99.999                      !
Fe+      1.50D-08   280.240     LM: Fe/nH=1.5(-8) !
C54H18+  1.000D-16   -99.999       PAH/nH = 1(-16) !
C60+     0.000D-00   -99.999    Ngrain = calcule   !
C54H18-  1.000D-16   -99.999       PAH/nH = 1(-16) !
C60-     0.000D-00   -99.999    Ngrain = calcule   !
```

G.2 Réseau de réactions chimiques

```
#-----------------------------------------------
!
! update :
! ----
!
!   29/08/01: ajout de C** (meme taux d'erosion que Si**)
!
!   12/01/01: ajout des reactions d'erosion pour les especes Si**, Mg**, Fe**, O**
!       attention: les alpha,beta, gamma d'ont plus le meme sens
```

```
!
!   24/08/00 :
!       * creation from the file Chemistry.dat
!       * suppression of one reaction that appears twice :
!              ADSOR C3     +GRAIN  =CH4*    CH4*    CH4*
!       * suppression of the column 'DE' :
!              the excess of energy is computed in the shock code.
!              Remark : The old format is unchanged, if there is a value
!                     for DE, it is not read in the code.
!       * change in one reaction (problem of conservation)
!              SiOH+  +PHOTON =SiO+    O  --> SiOH+  +PHOTON =SiO+    H
!       * change 17 reactions : -> new specy=SECPHO (secondary photon)
!              first reaction : 56 88 C      +CRP    =C+      ELECTR
!              last reaction  : 56 88 CO     +CRP    =C       O
!              changes are (idem for the 17 reactions):
!                     CRP             -> SECPHO in reactants
!                     beta = 140000.0 -> beta = 0.0
!   31/08/00 :
!       * change 23 reactions : same as last change of 24/08/00
!              first reaction : 56 88 C54H18 +SECPHO =C54H18+ ELECTR
!              last reaction  : 13 87 SiH4   +SECPHO =SiH3    H
!              changes are (idem for the 22 reactions):
!                     CRP                      -> SECPHO in reactants
!                     beta = 0.0 or 140000.0 -> beta = 0.0
!
!
! columns :
! -----
!       * reference or comment
!       * R1, R2, P1, P2, P3, P4 : reactants and product of the reaction
!                     R1 + R2 -> P1 + P2 + P3 + P4
!       * gamma(cm3.s-1), beta(K), alpha : Ahrrenius coefficients
!         in general    :
!                              rate = gamma*EXP(-beta/T)*(T/300)**alpha
!         special cases :
!              * photo-reactions
!                     rate = gamma*EXP(-beta*Av)*RAD
!              * CR induced desorption from grains
!                     rate = gamma*sigma(grain)*N(grains)/N(species on grains)
!              * CR ionisation or dissociation
!                     rate = gamma*EXP(-beta/T)*(T/300)**alpha + other terms...
!              * H2 and HD formation
!                     rate = gamma*(T/300)**alpha*nH/n(H)
!              * three body reactions on grains surface
!                     rate = gamma*<sigma.v>(grain)*N(grains)/N(species on grains)
!                             /(Teff/beta+1)^2
!              * sputtering of grain mantle
!                     complicated !
!              * erosion of grain cores
!                     rate = gamma*EXP(-beta/T)*(T/300)**alpha * <sigma.v>(grain)
!              * adsorption on grains
!                     rate = gamma*<sigma.v>(grain)
!
!     R1      R2      P1      P2      P3      P4      gamma   alpha    beta   (DE)
!end ------ do not change this line !!! ----------------------
87 88 H      +H      =H2                             8.14D-17  0.5
IONIZ H      +ELECTR =H+      ELECTR  ELECTR         9.20D-10  0.5  157890.0
```

```
IONIZ H2     +ELECTR =H2+     ELECTR  ELECTR          1.40D-09  0.5  179160.0
IONIZ H      +H+     =H+      H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +H3+    =H3+     H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +He+    =He+     H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +H3O+   =H3O+    H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +H3S+   =H3S+    H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +HCO+   =HCO+    H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +Fe+    =Fe+     H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +NH3+   =NH3+    H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +NH4+   =NH4+    H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +S+     =S+      H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +SiOH+  =SiOH+   H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H      +O2+    =O2+     H+      ELECTR          1.30D-13  0.5  157890.0
IONIZ H2     +H+     =H+      H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +H3+    =H3+     H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +He+    =He+     H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +H3O+   =H3O+    H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +H3S+   =H3S+    H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +HCO+   =HCO+    H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +Fe+    =Fe+     H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +NH3+   =NH3+    H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +NH4+   =NH4+    H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +S+     =S+      H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +SiOH+  =SiOH+   H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ H2     +O2+    =O2+     H2+     ELECTR          1.10D-13  0.5  179160.0
IONIZ He     +H+     =H+      He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +H3+    =H3+     He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +He+    =He+     He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +H3O+   =H3O+    He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +H3S+   =H3S+    He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +HCO+   =HCO+    He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +Fe+    =Fe+     He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +NH3+   =NH3+    He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +NH4+   =NH4+    He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +S+     =S+      He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +SiOH+  =SiOH+   He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
IONIZ He     +O2+    =O2+     He+     ELECTR          1.10D-13  0.5  285328.0
DISSO H2     +ELECTR =ELECTR  H       H               2.00D-09  0.5  116300.0
DISSO H2     +H      =H       H       H               1.00D-10  0.0   52000.0
DISSO H2     +He     =He      H       H               1.00D-11  0.0   52000.0
DISSO H2     +H2     =H2      H       H               1.25D-11  0.0   52000.0
DISSO H2     +H+     =H+      H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +H3+    =H3+     H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +He+    =He+     H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +H3O+   =H3O+    H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +H3S+   =H3S+    H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +HCO+   =HCO+    H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +Fe+    =Fe+     H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +NH3+   =NH3+    H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +NH4+   =NH4+    H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +S+     =S+      H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +SiOH+  =SiOH+   H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
DISSO H2     +O2+    =O2+     H       H               3.00D-11  0.5   52000.0
# TEST VG 15/04/08 -> article 3
DISSO SiO    +H      =Si      O       H               1.00D-10  0.0  100000.0
      C54H18 +ELECTR =C54H18- PHOTON                  1.00D-07  0.00      0.0
      C54H18++ELECTR =C54H18  PHOTON                  3.30D-06  -.50      0.0
```

```
C54H18-+H+      =C54H18   H                        7.50D-08  -.50      0.0
C54H18-+C54H18+=C54H18   C54H18                    3.00D-09  -.50      0.0
C54H18-+H3+     =C54H18   H2       H               2.20D-08  -.50      0.0
C54H18-+H3+     =C54H18   H        H        H      2.20D-08  -.50      0.0
C54H18-+He+     =C54H18   He                       3.80D-08  -.50      0.0
C54H18-+C+      =C54H18   C                        2.20D-08  -.50      0.0
C54H18-+H3O+    =C54H18   H2O      H               1.70D-08  -.50      0.0
C54H18-+H3S+    =C54H18   H2S      H               1.30D-08  -.50      0.0
C54H18-+NH4+    =C54H18   NH3      H               1.80D-08  -.50      0.0
C54H18-+HCO+    =C54H18   CO       H               1.40D-08  -.50      0.0
C54H18-+HCS+    =C54H18   CS       H               1.10D-08  -.50      0.0
C54H18-+H2CN+   =C54H18   HCN      H               1.40D-08  -.50      0.0
C54H18-+CH3+    =C54H18   CH3                      1.90D-08  -.50      0.0
C54H18-+SH+     =C54H18   SH                       1.30D-08  -.50      0.0
C54H18-+H2S+    =C54H18   SH       H               1.30D-08  -.50      0.0
C54H18-+HCO2+   =C54H18   CO2      H               1.10D-08  -.50      0.0
C54H18-+Si+     =C54H18   Si                       1.40D-08  -.50      0.0
C54H18-+Fe+     =C54H18   Fe                       1.00D-08  -.50      0.0
C54H18-+S+      =C54H18   S                        1.30D-08  -.50      0.0
C54H18-+SO+     =C54H18   SO                       1.10D-08  -.50      0.0
C54H18-+NH3+    =C54H18   NH2      H               1.80D-08  -.50      0.0
C54H18-+C2N+    =C54H18   CN       C               1.20D-08  -.50      0.0
C54H18-+H2NC+   =C54H18   NH2      C               1.40D-08  -.50      0.0
C54H18-+O2+     =C54H18   O        O               1.30D-08  -.50      0.0
C54H18-+N2H+    =C54H18   N2       H               1.40D-08  -.50      0.0
C54H18-+HSO+    =C54H18   SO       H               1.10D-08  -.50      0.0
C54H18-+HSO2+   =C54H18   SO       OH              9.30D-09  -.50      0.0
C54H18-+SiOH+   =C54H18   SiO      H               1.10D-08  -.50      0.0
C54H18 +H+      =C54H18+  H                        4.40D-09  0.00      0.0
C54H18 +H3+     =C54H18+  H2       H               1.30D-09  0.00      0.0
C54H18 +H3+     =C54H18+  H        H        H      1.30D-09  0.00      0.0
C54H18 +He+     =C54H18+  He                       2.20D-09  0.00      0.0
C54H18 +C+      =C54H18+  C                        1.30D-09  0.00      0.0
C54H18 +H3O+    =C54H18+  H2O      H               1.00D-09  0.00      0.0
C54H18 +H3S+    =C54H18+  H2S      H               7.40D-10  0.00      0.0
C54H18 +NH4+    =C54H18+  NH3      H               1.00D-09  0.00      0.0
C54H18 +HCO+    =C54H18+  CO       H               8.20D-10  0.00      0.0
C54H18 +HCS+    =C54H18+  CS       H               6.50D-10  0.00      0.0
C54H18 +H2CN+   =C54H18+  HCN      H               8.30D-10  0.00      0.0
C54H18 +CH3+    =C54H18+  CH3                      1.10D-09  0.00      0.0
C54H18 +SH+     =C54H18+  SH                       7.70D-10  0.00      0.0
C54H18 +H2S+    =C54H18+  SH       H               7.60D-10  0.00      0.0
C54H18 +HCO2+   =C54H18+  CO2      H               6.60D-10  0.00      0.0
C54H18 +Si+     =C54H18+  Si                       8.30D-10  0.00      0.0
C54H18 +Fe+     =C54H18+  Fe                       5.90D-10  0.00      0.0
C54H18 +S+      =C54H18+  S                        7.80D-10  0.00      0.0
C54H18 +SO+     =C54H18+  SO                       6.40D-10  0.00      0.0
C54H18 +NH3+    =C54H18+  NH2      H               1.10D-09  0.00      0.0
C54H18 +C2N+    =C54H18+  CN       C               7.20D-10  0.00      0.0
C54H18 +H2NC+   =C54H18+  NH2      C               8.30D-10  0.00      0.0
C54H18 +O2+     =C54H18+  O        O               7.80D-10  0.00      0.0
C54H18 +N2H+    =C54H18+  N2       H               8.20D-10  0.00      0.0
C54H18 +HSO+    =C54H18+  SO       H               6.30D-10  0.00      0.0
C54H18 +HSO2+   =C54H18+  SO       OH              5.50D-10  0.00      0.0
C54H18 +SiOH+   =C54H18+  SiO      H               6.60D-10  0.00      0.0
C54H18-+H       =C54H18   H        ELECTR          3.30D-09  0.00   5500.0
C54H18-+C       =C54H18   C        ELECTR          9.60D-10  0.00   5500.0
```

```
      C54H18-+CH     =C54H18  CH      ELECTR          9.60D-10  0.00   5500.0
      C54H18-+O      =C54H18  O       ELECTR          8.30D-10  0.00   5500.0
      C54H18-+OH     =C54H18  OH      ELECTR          8.30D-10  0.00   5500.0
56 88 C54H18 +SECPHO =C54H18+ ELECTR                  2.00D+04  0.00 140000.0
56 88 C54H18-+SECPHO =C54H18  ELECTR                  2.00D+04  0.00 140000.0
      C60    +ELECTR =C60-    PHOTON                  6.900D-5  0.50      0.0
      C60+   +ELECTR =C60     PHOTON                  6.900D-5  0.50      0.0
      C60    +SECPHO =C60+    ELECTR                  0.63D+08  0.00 140000.0
      C60-   +SECPHO =C60     ELECTR                  0.41D+09  0.00 140000.0
      C60-   +C54H18+=C60     C54H18                  6.22D-08  0.50      0.0
      C60+   +C54H18-=C60     C54H18                  6.22D-08  0.50      0.0
      C60    +C54H18-=C60-    C54H18                  6.22D-08  0.50      0.0
      C60    +C54H18+=C60+    C54H18                  6.22D-08  0.50      0.0
      C60-   +H+     =C60     H                       1.60D-06  0.50      0.0
      C60-   +H2+    =C60     H       H               1.13D-06  0.50      0.0
      C60-   +H3+    =C60     H2      H               4.61D-07  0.50      0.0
      C60-   +H3+    =C60     H       H       H       4.61D-07  0.50      0.0
      C60-   +He+    =C60     He                      8.00D-07  0.50      0.0
      C60-   +C+     =C60     C                       4.61D-07  0.50      0.0
      C60-   +H3O+   =C60     H2O     H               3.66D-07  0.50      0.0
      C60-   +H3S+   =C60     H2S     H               2.70D-07  0.50      0.0
      C60-   +NH4+   =C60     NH3     H               3.76D-07  0.50      0.0
      C60-   +HCO+   =C60     CO      H               2.96D-07  0.50      0.0
      C60-   +HCS+   =C60     CS      H               2.38D-07  0.50      0.0
      C60-   +H2CN+  =C60     HCN     H               3.03D-07  0.50      0.0
      C60-   +CH3+   =C60     CH3                     4.14D-07  0.50      0.0
      C60-   +SH+    =C60     SH                      2.79D-07  0.50      0.0
      C60-   +H2S+   =C60     SH      H               2.75D-07  0.50      0.0
      C60-   +HCO2+  =C60     CO2     H               2.39D-07  0.50      0.0
      C60-   +Si+    =C60     Si                      3.01D-07  0.50      0.0
      C60-   +Fe+    =C60     Fe                      2.13D-07  0.50      0.0
      C60-   +S+     =C60     S                       2.82D-07  0.50      0.0
      C60-   +SO+    =C60     SO                      2.32D-07  0.50      0.0
      C60-   +NH3+   =C60     NH2     H               3.89D-07  0.50      0.0
      C60-   +C2N+   =C60     CN      C               2.60D-07  0.50      0.0
      C60-   +H2NC+  =C60     NH2     C               3.03D-07  0.50      0.0
      C60-   +O2+    =C60     O       O               2.84D-07  0.50      0.0
      C60-   +N2H+   =C60     N2      H               2.98D-07  0.50      0.0
      C60-   +HSO+   =C60     SO      H               2.29D-07  0.50      0.0
      C60-   +HSO2+  =C60     SO      OH              1.99D-07  0.50      0.0
      C60-   +SiOH+  =C60     SiO     H               2.39D-07  0.50      0.0
      C60    +H+     =C60+    H                       1.60D-06  0.50      0.0
      C60    +H2+    =C60+    H       H               1.13D-06  0.50      0.0
      C60    +H3+    =C60+    H2      H               4.61D-07  0.50      0.0
      C60    +H3+    =C60+    H       H       H       4.61D-07  0.50      0.0
      C60    +He+    =C60+    He                      8.00D-07  0.50      0.0
      C60    +C+     =C60+    C                       4.61D-07  0.50      0.0
      C60    +H3O+   =C60+    H2O     H               3.66D-07  0.50      0.0
      C60    +H3S+   =C60+    H2S     H               2.70D-07  0.50      0.0
      C60    +NH4+   =C60+    NH3     H               3.70D-07  0.50      0.0
      C60    +HCO+   =C60+    CO      H               2.96D-07  0.50      0.0
      C60    +HCS+   =C60+    CS      H               2.38D-07  0.50      0.0
      C60    +H2CN+  =C60+    HCN     H               3.03D-07  0.50      0.0
      C60    +CH3+   =C60+    CH3                     4.14D-07  0.50      0.0
      C60    +SH+    =C60+    SH                      2.79D-07  0.50      0.0
      C60    +H2S+   =C60+    SH      H               2.75D-07  0.50      0.0
      C60    +HCO2+  =C60+    CO2     H               2.39D-07  0.50      0.0
```

```
      C60    +Si+    =C60+    Si                    3.01D-07  0.50      0.0
      C60    +Fe+    =C60+    Fe                    2.13D-07  0.50      0.0
      C60    +S+     =C60+    S                     2.82D-07  0.50      0.0
      C60    +SO+    =C60+    SO                    2.32D-07  0.50      0.0
      C60    +NH3+   =C60+    NH2     H             3.89D-07  0.50      0.0
      C60    +C2N+   =C60+    CN      C             2.60D-07  0.50      0.0
      C60    +H2NC+  =C60+    NH2     C             3.03D-07  0.50      0.0
      C60    +O2+    =C60+    O       O             2.84D-07  0.50      0.0
      C60    +N2H+   =C60+    N2      H             2.98D-07  0.50      0.0
      C60    +HSO+   =C60+    SO      H             2.29D-07  0.50      0.0
      C60    +HSO2+  =C60+    SO      OH            1.99D-07  0.50      0.0
      C60    +SiOH+  =C60+    SiO     H             2.39D-07  0.50      0.0
P & H H      +CRP    =H+      ELECTR                4.60D-01  0.00      0.0
P & H He     +CRP    =He+     ELECTR                5.00D-01  0.00      0.0
P & H H2     +CRP    =H+      H       ELECTR        4.00D-02  0.00      0.0
P & H H2     +CRP    =H       H                     1.50D+00  0.00      0.0
P & H H2     +CRP    =H2+     ELECTR                9.60D-01  0.00      0.0
P & H C      +CRP    =C+      ELECTR                1.80D+00  0.00      0.0
P & H O      +CRP    =O+      ELECTR                2.80D+00  0.00      0.0
56 88 C      +SECPHO =C+      ELECTR                1.02D+03  0.00 140000.0
 2Z89 CH     +SECPHO =C       H                     1.46D+03  0.00 140000.0
13 87 CH4    +SECPHO =CH3     H                     4.68D+03  0.00 140000.0
 2Z89 CH+    +SECPHO =C       H+                    3.52D+02  0.00 140000.0
 2Z89 OH     +SECPHO =O       H                     1.02D+03  0.00 140000.0
 2Z89 H2O    +SECPHO =OH      H                     1.94D+03  0.00 140000.0
 2Z89 O2     +SECPHO =O2+     ELECTR                2.34D+02  0.00 140000.0
 2Z89 O2     +SECPHO =O       O                     1.50D+03  0.00 140000.0
 2Z89 CO2    +SECPHO =CO      O                     3.42D+03  0.00 140000.0
 2Z89 C2     +SECPHO =C       C                     4.74D+02  0.00 140000.0
77 87 C2H    +SECPHO =C2      H                     8.16D+03  0.00 140000.0
 2Z89 C2H2   +SECPHO =C2H     H                     1.03D+04  0.00 140000.0
 2Z89 C2H2   +SECPHO =C2H2+   ELECTR                2.62D+03  0.00 140000.0
 2Z88 C3     +SECPHO =C2      C                     2.24D+03  0.00 140000.0
13 87 C3H    +SECPHO =C3      H                     8.16D+03  0.00 140000.0
13 87 C3H2   +SECPHO =C3H     H                     8.16D+03  0.00 140000.0
56 88 CO     +SECPHO =C       O                     6.80D+02  1.20 140000.0
16B83 O      +H2     =OH      H                     1.55D-13  2.80   2980.0
UMIST CO     +H      =OH      C                     1.10D-10  0.50  77700.0
72 83 O2     +H      =OH      O                     1.63D-09  -.90   8750.0
16B83 OH     +H      =O       H2                    7.00D-14  2.80   1950.0
16B83 OH     +H2     =H2O     H                     9.54D-13  2.00   1490.0
16B83 H2O    +H      =OH      H2                    5.24D-12  1.90   9265.0
17B73 C      +H2     =CH      H                     1.16D-09  0.50  14100.0
P & H C      +H      =CH      PHOTON                1.00D-17  0.00      0.0
22 86 CH     +H2     =CH2     H                     2.38D-10  0.00   1760.0
17B73 CH2    +H2     =CH3     H                     5.18D-11  0.17   6400.0
23B83 CH3    +H2     =CH4     H                     3.00D-10  0.00   5460.0
59 82 C2     +H2     =C2H     H                     1.60D-10  0.00   1419.0
  S88 C2H    +H2     =C2H2    H                     1.14D-11  0.00    950.0
17B73 CH     +H      =C       H2                    1.16D-09  0.50   2200.0
22 86 CH2    +H      =CH      H2                    4.70D-10  0.00    370.0
17B73 CH3    +H      =CH2     H2                    5.18D-11  0.17   5600.0
23B83 CH4    +H      =CH3     H2                    3.00D-10  0.00   6560.0
P & H O2     +C      =CO      O                     3.30D-11  0.50      0.0
93 88 OH     +CO     =CO2     H                     4.40D-13 -1.15    390.0
95 88 OH     +C      =CO      H                     3.10D-11  -.36      0.0
94 88 OH     +O      =O2      H                     3.10D-11  -.36      0.0
```

```
61 81 CH     +O      =HCO+    ELECTR                2.40D-14  0.50      0.0
61 81 CH     +O      =CO      H                     9.50D-11  0.50      0.0
P & H CH2    +O      =CO      H       H             2.00D-11  0.50      0.0
  X   CH3    +O      =CO      H2      H             1.80D-10  0.50      0.0
P & H C2     +O      =CO      C                     5.00D-11  0.50      0.0
P & H C2H    +O      =CO      CH                    1.00D-10  0.00    250.0
  X   C3     +O      =CO      C2                    5.00D-11  0.50      0.0
13 87 C3H    +O      =C2H     CO                    5.00D-11  0.50      0.0
13 87 C3H2   +O      =C2H2    CO                    5.00D-11  0.50      0.0
24Y83 C+     +H      =CH+     PHOTON                7.00D-17  0.00      0.0
GRE92 C+     +H2     =CH2+    PHOTON                5.00D-16  0.00      0.0
14 87 C+     +H2     =CH+     H                     1.50D-10  0.00   4640.0
14 87 CH+    +H      =C+      H2                    1.50D-10  0.00      0.0
27B77 CH+    +H2     =CH2+    H                     1.20D-09  0.00      0.0
27B77 CH2+   +H      =CH+     H2                    1.20D-09  0.00   2700.0
28B75 CH2+   +H2     =CH3+    H                     7.00D-10  0.00      0.0
28B75 CH3+   +H      =CH2+    H2                    7.00D-10  0.00  10560.0
 4Z89 CH3+   +H2     =CH5+    PHOTON                6.00D-15  0.00      0.0
28B75 CH3+   +H2     =CH4+    H                     2.00D-10  0.00  32500.0
28B75 CH4+   +H      =CH3+    H2                    2.00D-10  0.00      0.0
28B75 CH4+   +H2     =CH5+    H                     4.00D-11  0.00      0.0
28B75 CH5+   +H      =CH4+    H2                    4.00D-11  0.00   2200.0
      H+     +ELECTR =H       PHOTON                2.90D-12  -.74      0.0
22Z90 H2+    +ELECTR =H       H                     1.60D-08  -.43      0.0
P & H He+    +ELECTR =He      PHOTON                4.50D-12  -.67      0.0
McC03 H3+     ELECTR  H       H       H             5.10d-08  -.52      0.0
McC03 H3+     ELECTR  H2      H                     1.70d-08  -.52      0.0
P & H C+     +ELECTR =C       PHOTON                4.40D-12  -.61      0.0
22Z90 CH+    +ELECTR =C       H                     1.50D-07  -.42      0.0
22Z90 CH2+   +ELECTR =C       H2                    1.25D-07  -.50      0.0
22Z90 CH2+   +ELECTR =CH      H                     1.25D-07  -.50      0.0
22Z90 CH3+   +ELECTR =CH2     H                     1.75D-07  -.50      0.0
22Z90 CH3+   +ELECTR =CH      H2                    1.75D-07  -.50      0.0
P & H CH4+   +ELECTR =CH3     H                     3.00D-07  -.50
P & H CH4+   +ELECTR =CH2     H       H             3.00D-07  -.50
22Z90 CH5+   +ELECTR =CH      H2      H2            8.75D-08  -.30      0.0
22Z90 CH5+   +ELECTR =CH2     H2      H             8.75D-08  -.30      0.0
22Z90 CH5+   +ELECTR =CH3     H2                    8.75D-08  -.30      0.0
22Z90 CH5+   +ELECTR =CH4     H                     8.75D-08  -.30      0.0
79 79 H+     +H2     =H2+     H                     6.40D-10  0.00  21300.0
01R79 H2+    +H      =H+      H2                    6.40D-10  0.00      0.0
P & H H2+    +H2     =H3+     H                     2.10D-09  0.00      0.0
P & H H3+    +H      =H2+     H2                    2.10D-09  0.00  20000.0
52R84 H+     +O      =O+      H                     6.00D-10  0.00    227.0
P & H H+     +OH     =OH+     H                     2.10D-09  0.00      0.0
80R74 H+     +O2     =O2+     H                     1.20D-09  0.00      0.0
80R74 H+     +H2O    =H2O+    H                     8.20D-09  0.00      0.0
P & H H+     +CH     =CH+     H                     1.90D-09  0.00      0.0
P & H H+     +CH2    =CH+     H2                    1.40D-09  0.00      0.0
P & H H+     +CH2    =CH2+    H                     1.40D-09  0.00      0.0
P & H H+     +CH3    =CH3+    H                     3.40D-09  0.00      0.0
80R74 H+     +CH4    =CH3+    H2                    2.28D-09  0.00      0.0
80R74 H+     +CH4    =CH4+    H                     1.52D-09  0.00      0.0
18R80 H+     +CO2    =HCO+    O                     4.20D-09  0.00      0.0
P & H H2+    +C      =CH+     H                     2.40D-09  0.00      0.0
P & H H2+    +O      =OH+     H                     1.50D-09  0.00      0.0
38R75 H2+    +CO     =HCO+    H                     2.16D-09  0.00      0.0
```

```
38R75 H2+     +CO      =CO+     H2                        6.44D-10  0.00      0.0
P & H H2+     +OH      =OH+     H2                        7.60D-10  0.00      0.0
38R75 H2+     +H2O     =H2O+    H2                        3.90D-09  0.00      0.0
38R75 H2+     +H2O     =H3O+    H                         3.40D-09  0.00      0.0
P & H H2+     +CH      =CH+     H2                        7.10D-10  0.00      0.0
P & H H2+     +CH      =CH2+    H                         7.10D-10  0.00      0.0
P & H H2+     +CH2     =CH3+    H                         1.00D-09  0.00      0.0
P & H H2+     +CH2     =CH2+    H2                        1.00D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +O       =OH+     H2                        8.00D-10  0.00      0.0
P & H H3+     +OH      =H2O+    H2                        1.30D-09  0.00      0.0
 5Z89 H3+     +CO      =HCO+    H2                        1.70D-09  0.00      0.0
39R82 H3+     +CO2     =HCO2+   H2                        2.00D-09  0.00      0.0
40R75 H3+     +H2O     =H3O+    H2                        4.30D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +C       =CH+     H2                        2.00D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +CH      =CH2+    H2                        1.20D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +CH2     =CH3+    H2                        1.70D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +CH3     =CH4+    H2                        2.10D-09  0.00      0.0
 5Z89 H3+     +CH4     =CH5+    H2                        1.90D-09  0.00      0.0
85 86 He+     +H2      =H+      H        He               1.10D-13  -.24      0.0
P & H He+     +OH      =OH+     He                        5.50D-10  0.00      0.0
P & H He+     +OH      =O+      H        He               5.50D-10  0.00      0.0
74 85 He+     +H2O     =OH+     H        He               2.30D-10  -.94      0.0
74 85 He+     +H2O     =H2O+    He                        4.86D-11  -.94      0.0
74 85 He+     +H2O     =H+      OH       He               1.64D-10  -.94      0.0
42R85 He+     +CO      =C+      O        He               1.50D-09  0.00      0.0
42R85 He+     +O2      =O+      O        He               1.00D-09  0.00      0.0
81R77 He+     +CO2     =CO+     O        He               7.70D-10  0.00      0.0
81R77 He+     +CO2     =O+      CO       He               1.80D-10  0.00      0.0
81R77 He+     +CO2     =C+      O2       He               4.00D-11  0.00      0.0
P & H He+     +CH      =C+      H        He               1.10D-09  0.00      0.0
P & H He+     +CH2     =C+      H2       He               7.50D-10  0.00      0.0
P & H He+     +CH2     =CH+     H        He               7.50D-10  0.00      0.0
P & H He+     +CH3     =CH+     H2       He               9.00D-10  0.00      0.0
P & H He+     +CH3     =CH2+    H        He               9.00D-10  0.00      0.0
43R76 He+     +CH4     =H+      CH3      He               4.00D-10  0.00      0.0
43R76 He+     +CH4     =CH+     H2       H        He      2.56D-10  0.00      0.0
43R76 He+     +CH4     =CH2+    H2       He               8.48D-10  0.00      0.0
43R76 He+     +CH4     =CH3+    H        He               8.00D-11  0.00      0.0
43R76 He+     +CH4     =CH4+    He                        1.60D-11  0.00      0.0
88 85 C+      +OH      =CO+     H                         8.00D-10  0.00      0.0
88 85 C+      +OH      =H+      CO                        8.00D-10  0.00      0.0
74 85 C+      +H2O     =HCO+    H                         2.43D-09  -.63      0.0
73R84 C+      +O2      =O+      CO                        5.15D-10  0.00      0.0
73R84 C+      +O2      =CO+     O                         3.15D-10  0.00      0.0
82R81 C+      +CO2     =CO+     CO                        1.10D-09  0.00      0.0
78 83 C+      +CH      =C2+     H                         3.80D-10  0.00      0.0
78 83 C+      +CH      =CH+     C                         3.80D-10  0.00      0.0
P & H C+      +CH2     =CH2+    C                         5.20D-10  0.00      0.0
P & H C+      +CH2     =C2H+    H                         5.20D-10  0.00      0.0
 7R82 C+      +CH4     =C2H2+   H2                        3.25D-10  0.00      0.0
 7R82 C+      +CH4     =C2H3+   H                         9.75D-10  0.00      0.0
52R84 O+      +H       =H+      O                         6.00D-10  0.00      0.0
52R84 O+      +H2      =OH+     H                         1.20D-09  0.00      0.0
P & H O2+     +C       =CO+     O                         5.20D-11  0.00      0.0
P & H O2+     +C       =C+      O2                        5.20D-11  0.00      0.0
44R81 OH+     +H2      =H2O+    H                         1.01D-09  0.00      0.0
44R81 H2O+    +H2      =H3O+    H                         8.30D-10  0.00      0.0
```

```
P & H H3O+    +H       =H2O+     H2                6.10D-10  0.00  20500.0
P & H H3O+    +C       =HCO+     H2                1.00D-11  0.00      0.0
P & H H3O+    +CH      =CH2+     H2O               6.80D-10  0.00      0.0
P & H H3O+    +CH2     =CH3+     H2O               9.40D-10  0.00      0.0
P & H O+      +ELECTR  =O        PHOTON            3.40D-12  -.64      0.0
 1Z83 O2+     +ELECTR  =O        O                 1.95D-07  -.70      0.0
22Z90 OH+     +ELECTR  =O        H                 3.75D-08  -.50      0.0
22Z90 H2O+    +ELECTR  =OH       H                 3.15D-07  -.50      0.0
90 88 H3O+    +ELECTR  =OH       H2                8.45D-07  -.50      0.0
90 88 H3O+    +ELECTR  =H2O      H                 4.55D-07  -.50      0.0
49R76 CH3+    +O       =HCO+     H2                3.10D-10  0.00      0.0
49R76 CH3+    +O       =H3+      CO                1.30D-11  0.00      0.0
 8R80 CH5+    +O       =H3O+     CH2               2.16D-10  0.00      0.0
51R80 CH5+    +CO      =HCO+     CH4               9.90D-10  0.00      0.0
40R75 CH5+    +H2O     =H3O+     CH4               3.70D-09  0.00      0.0
52R84 CO+     +H2      =HCO+     H                 1.30D-09  0.00      0.0
52R84 CO+     +H       =H+       CO                7.50D-10  0.00      0.0
52R84 HCO+    +H       =CO+      H2                1.30D-09  0.00  24500.0
P & H HCO+    +C       =CH+      CO                1.10D-09  0.00      0.0
P & H HCO+    +CH      =CH2+     CO                6.30D-10  0.00      0.0
P & H HCO+    +CH2     =CH3+     CO                8.60D-10  0.00      0.0
27R77 HCO+    +CH3     =CH4+     CO                1.40D-09  0.00   9060.0
51R80 HCO+    +CH4     =CH5+     CO                9.90D-10  0.00   4920.0
65R78 HCO+    +H2O     =H3O+     CO                2.50D-09  0.00      0.0
15    HCO+    +O2      =HCO2+    O                 1.00D-09  0.00   1450.0
15    HCO2+   +O       =HCO+     O2                1.00D-09  0.00      0.0
15    HCO+    +OH      =HCO2+    H                 1.00D-09  0.00      0.0
15    HCO2+   +H       =HCO+     OH                1.00D-09  0.00   7500.0
15    HCO2+   +CO      =HCO+     CO2               1.00D-09  0.00      0.0
15    HCO+    +CO2     =HCO2+    CO                1.00D-09  0.00   5000.0
 6R80 HCO2+   +CH4     =CH5+     CO2               7.80D-10  0.00      0.0
22Z90 CO+     +ELECTR  =C        O                 1.00D-07  -.46      0.0
22Z90 HCO+    +ELECTR  =CO       H                 2.40D-07  -.69      0.0
 6Z88 HCO2+   +ELECTR  =CO2      H                 2.24D-07  -.50      0.0
 6Z88 HCO2+   +ELECTR  =CO       OH                1.16D-07  -.50      0.0
27C77 C2+     +H2      =C2H+     H                 1.40D-09  0.00      0.0
45C77 C2+     +H2      =H+       C2H               1.50D-09  0.00   1260.0
45C77 C2H+    +H2      =C2H2+    H                 1.70D-09  0.00      0.0
46C84 C2H2+   +H2      =C2H3+    H                 5.00D-10  0.00    800.0
22Z90 C2+     +ELECTR  =C        C                 3.00D-07  -.50      0.0
22Z90 C2H+    +ELECTR  =C2       H                 1.35D-07  -.50      0.0
22Z90 C2H+    +ELECTR  =CH       C                 1.35D-07  -.50      0.0
75 88 C2H2+   +ELECTR  =C2H      H                 1.50D-07  -.50      0.0
75 88 C2H2+   +ELECTR  =CH       CH                1.50D-07  -.50      0.0
75 88 C2H3+   +ELECTR  =C2H      H2                1.35D-07  -.50      0.0
75 88 C2H3+   +ELECTR  =CH2      CH                1.35D-07  -.50      0.0
75 88 C2H3+   +ELECTR  =C2H2     H                 3.00D-08  -.50      0.0
58 83 C3+     +H2      =C3H+     H                 3.00D-10  0.00      0.0
46C84 C3H+    +H2      =C3H2+    H                 1.00D-09  0.00    500.0
62 86 C3H+    +H2      =C3H3+    PHOTON            3.00D-13  -1.0      0.0
46C84 C3H2+   +H2      =C3H3+    H                 1.00D-10  0.00   2000.0
P & H C3+     +ELECTR  =C2       C                 3.00D-07  -.50      0.0
P & H C3H+    +ELECTR  =C2       CH                1.50D-07  -.50      0.0
P & H C3H+    +ELECTR  =C2H      C                 1.50D-07  -.50      0.0
75 88 C3H2+   +ELECTR  =C3H      H                 1.50D-07  -.50      0.0
75 88 C3H2+   +ELECTR  =C2H      CH                1.50D-07  -.50      0.0
75 88 C3H3+   +ELECTR  =C3H2     H                 1.50D-07  -.50      0.0
```

```
75 88 C3H3+  +ELECTR =C2H2    CH                    1.50D-07  -.50      0.0
P & H H+     +C2     =C2+     H                     3.10D-09  0.00      0.0
P & H H+     +C2H    =C2+     H2                    1.50D-09  0.00      0.0
P & H H+     +C2H    =C2H+    H                     1.50D-09  0.00      0.0
78 83 H+     +C2H2   =C2H+    H2                    2.00D-09  0.00      0.0
78 83 H+     +C2H2   =C2H2+   H                     2.00D-09  0.00      0.0
 4 84 H+     +C3H    =C3+     H2                    2.00D-09  0.00      0.0
 4 84 H+     +C3H    =C3H+    H                     2.00D-09  0.00      0.0
 4 84 H+     +C3H2   =C3H+    H2                    2.00D-09  0.00      0.0
 4 84 H+     +C3H2   =C3H2+   H                     2.00D-09  0.00      0.0
P & H He+    +C2H    =C+      CH       He           5.10D-10  0.00      0.0
P & H He+    +C2H    =CH+     C        He           5.10D-10  0.00      0.0
P & H He+    +C2H    =C2+     H        He           5.10D-10  0.00      0.0
 3R75 He+    +C2H2   =CH+     CH       He           7.70D-10  0.00      0.0
 3R75 He+    +C2H2   =C2+     H2       He           1.61D-09  0.00      0.0
 3R75 He+    +C2H2   =C2H+    H        He           8.75D-10  0.00      0.0
 3R75 He+    +C2H2   =C2H2+   He                    2.45D-10  0.00      0.0
 4 84 He+    +C3H    =C3+     H        He           2.00D-09  0.00      0.0
 4 84 He+    +C3H2   =C3H+    H        He           1.00D-09  0.00      0.0
 4 84 He+    +C3H2   =C3+     H2       He           1.00D-09  0.00      0.0
P & H H3+    +C2H    =C2H2+   H2                    1.70D-09  0.00      0.0
 2R77 H3+    +C2H2   =C2H3+   H2                    2.90D-09  0.00      0.0
 4 84 H3+    +C3H    =C3H2+   H2                    2.00D-09  0.00      0.0
 4 84 H3+    +C3H2   =C3H3+   H2                    2.00D-09  0.00      0.0
P & H C+     +C2H    =C3+     H                     1.00D-09  0.00      0.0
 7R82 C+     +C2H2   =C3H+    H                     2.20D-09  0.00      0.0
P & H HCO+   +C2H    =C2H2+   CO                    7.80D-10  0.00      0.0
54R77 HCO+   +C2H2   =C2H3+   CO                    1.36D-09  0.00      0.0
 4 84 HCO+   +C3H    =C3H2+   CO                    1.40D-09  0.00      0.0
 4 84 HCO+   +C3H2   =C3H3+   CO                    1.40D-09  0.00      0.0
10R86 H3O+   +C2H    =C2H2+   H2O                   2.20D-10  0.00   4100.0
15    H3O+   +C2H2   =C2H3+   H2O                   1.00D-09  0.00   7330.0
75 88 H3O+   +C3H    =C3H2+   H2O                   2.00D-09  0.00      0.0
75 88 H3O+   +C3H2   =C3H3+   H2O                   3.00D-09  0.00      0.0
10R86 C2H2+  +H2O    =H3O+    C2H                   2.20D-10  0.00      0.0
10R86 C2H3+  +H2O    =H3O+    C2H2                  1.11D-09  0.00      0.0
83R83 C3H+   +H2O    =HCO+    C2H2                  2.48D-10  0.00      0.0
83R83 C3H+   +H2O    =C2H3+   CO                    2.02D-10  0.00      0.0
P & H H+     +Fe     =Fe+     H                     7.40D-09  0.00      0.0
P & H H3+    +Fe     =Fe+     H2       H            4.90D-09  0.00      0.0
P & H C+     +Fe     =Fe+     C                     2.60D-09  0.00      0.0
P & H HCO+   +Fe     =Fe+     CO       H            1.90D-09  0.00      0.0
P & H H3O+   +Fe     =Fe+     H2O      H            3.10D-09  0.00      0.0
P & H O2+    +Fe     =Fe+     O2                    1.10D-09  0.00      0.0
P & H Fe+    +ELECTR =Fe      PHOTON                3.70D-12  -.65      0.0
P & H N       CRP     N+      ELECTR                2.10E+00  0.00      0.0
 2Z89 CN     +SECPHO =C       N                     2.12D+04  0.00 140000.0
 2Z89 HCN    +SECPHO =CN      H                     6.23D+03  0.00 140000.0
 2Z89 HNC    +SECPHO =CN      H                     6.23D+03  0.00 140000.0
 2Z89 NH2    +SECPHO =NH      H                     1.60D+02  0.00 140000.0
 2Z89 NH2    +SECPHO =NH2+    ELECTR                1.30D+03  0.00 140000.0
 2Z89 NH3    +SECPHO =NH2     H                     2.63D+03  0.00 140000.0
 2Z89 NH3    +SECPHO =NH      H2                    1.08D+03  0.00 140000.0
 2Z89 NH3    +SECPHO =NH3+    ELECTR                1.15D+03  0.00 140000.0
 2Z89 NO     +SECPHO =N       O                     9.64D+02  0.00 140000.0
 2Z89 NO     +SECPHO =NO+     ELECTR                9.88D+02  0.00 140000.0
97 83 N       H2      NH      H                     8.66D-10  0.50  14600.0
```

```
97 83 NH      H2      NH2     H                      5.25D-12  0.79   6700.0
97 83 NH2     H2      NH3     H                      6.22D-11  0.50   6300.0
14Z90 CN      H2      HCN     H                      3.53D-13  3.31    756.0
97 83 NH      H       N       H2                     8.66D-10  0.50   2400.0
97 83 NH2     H       NH      H2                     5.25D-12  0.79   2200.0
97 83 NH3     H       NH2     H2                     6.22D-11  0.50   5700.0
P & H NH      O       OH      N                      2.90D-11  0.50      0.0
P & H NH2     O       NH      OH                     3.50D-12  0.50      0.0
97 83 NH3     O       NH2     OH                     2.50D-12  0.00   3020.0
P & H CN      O       CO      N                      1.80D-11  0.50     50.0
97 83 NH3     OH      NH2     H2O                    2.30D-12  0.00    800.0
P & H NH      C       CN      H                      1.10D-10  0.50      0.0
94 88 CH      N       CN      H                      2.10D-11  0.00      0.0
97 83 CN      N       N2      C                      7.30D-10  0.00   4500.0
P & H NH      N       N2      H                      5.00D-11  0.50      0.0
94E88 OH      N       NO      H                      5.30D-11  0.00     50.0
97 83 O2      N       NO      O                      3.30D-12  1.00   3150.0
P & H NO      C       CN      O                      1.10D-10  0.50      0.0
94E88 NO      N       N2      O                      3.40D-11  0.00     50.0
97 83 NO      O       O2      N                      7.50D-13  1.00  16000.0
GUESS HNC     H       HCN     H                      1.00D-10  0.50    200.0
GUESS HNC     O       CO      NH                     2.00D-10  0.50    200.0
GUESS HNC     OH      H2O     CN                     2.00D-10  0.50    200.0
GUESS HNC     O2      CO2     NH                     2.00D-11  0.50   2000.0
 3Z82 NH2     C       HNC     H                      2.00D-11  0.50      0.0
P & H CH2     N       HCN     H                      2.00D-11  0.50      0.0
P & H CH3     N       HCN     H2                     2.00D-11  0.50      0.0
GUESS CH5+    HNC     C2H3+   NH3                    1.00D-09  0.00      0.0
GUESS CH5+    HCN     C2H3+   NH3                    1.00D-09  0.00   5120.0
13R85 N+      H2      NH+     H                      8.40D-10  0.00    168.5
10R80 NH+     H2      NH2+    H                      1.27D-09  0.00      0.0
10R80 NH+     H2      H3+     N                      2.25D-10  0.00      0.0
10R80 NH2+    H2      NH3+    H                      2.70D-10  0.00      0.0
07R83 NH3+    H2      NH4+    H                      2.40D-12  0.00      0.0
13R85 NH+     H       N+      H2                     6.52D-10  0.00      0.0
10R80 NH2+    H       NH+     H2                     1.27D-09  0.00  24000.0
10R80 NH3+    H       NH2+    H2                     2.25D-10  0.00  12800.0
15    NH4+    H       NH3+    H2                     1.00D-09  0.00  11000.0
04R84 CN+     H2      HCN+    H                      1.00D-09  0.00      0.0
04R84 HCN+    H       CN+     H2                     1.00D-09  0.00  15800.0
01R79 HCN+    H2      H2CN+   H                      9.80D-10  0.00      0.0
01R79 H2CN+   H       HCN+    H2                     9.80D-10  0.00  34400.0
 9Z89 N2+     H2      N2H+    H                      2.00D-09  0.24      0.0
10R80 N2H+    H       N2+     H2                     2.10D-09  0.00  30300.0
08R82 N2H+    H2      H3+     N2                     1.80D-09  0.00   8300.0
 52   H+      HNC     H+      HCN                    1.00D-09  0.00      0.0
15    H+      HCN     H+      HNC                    1.00D-09  0.00   7850.0
P & H H+      NH      NH+     H                      2.10D-09  0.00      0.0
P & H H+      NH2     NH2+    H                      2.90D-09  0.00      0.0
12R85 H+      NH3     NH3+    H                      5.20D-09  0.00      0.0
15    H+      CN      CN+     H                      2.10D-09  0.00   6150.0
12R85 H+      HCN     HCN+    H                      1.10D-08  0.00      0.0
01R72 H+      NO      NO+     H                      1.90D-09  0.00      0.0
P & H He+     NH      N+      H       He             1.10D-09  0.00      0.0
P & H He+     NH2     NH+     H       He             8.00D-10  0.00      0.0
P & H He+     NH2     N+      H2      He             8.00D-10  0.00      0.0
02R75 He+     NH3     NH3+    He                     2.64D-10  0.00      0.0
```

02R75	He+	NH3	NH2+	H	He	1.76D-09	0.00	0.0
02R75	He+	NH3	NH+	H2	He	1.76D-10	0.00	0.0
P & H	He+	CN	C+	N	He	8.80D-10	0.00	0.0
P & H	He+	CN	N+	C	He	8.80D-10	0.00	0.0
01R77	He+	HCN	CN+	H	He	1.46D-09	0.00	0.0
01R77	He+	HCN	CH+	N	He	6.20D-10	0.00	0.0
01R77	He+	HCN	C+	NH	He	7.75D-10	0.00	0.0
01R77	He+	HCN	N+	CH	He	2.48D-10	0.00	0.0
01R77	He+	HNC	CN+	H	He	1.55D-09	0.00	0.0
01R77	He+	HNC	C+	NH	He	1.55D-09	0.00	0.0
02R77	He+	N2	N+	N	He	7.92D-10	0.00	0.0
02R77	He+	N2	N2+	He		4.08D-10	0.00	0.0
02R77	He+	NO	N+	O	He	1.38D-09	0.00	0.0
02R77	He+	NO	O+	N	He	2.24D-10	0.00	0.0
P & H	H3+	NH	NH2+	H2		1.30D-09	0.00	0.0
P & H	H3+	NH2	NH3+	H2		1.80D-09	0.00	0.0
5Z89	H3+	NH3	NH4+	H2		9.10D-09	0.00	0.0
	H3+	N	NH2+	H		4.50D-10	0.00	0.0
P & H	H3+	CN	HCN+	H2		1.00D-09	0.00	0.0
P & H	H3+	CN	H2CN+	H		1.00D-09	0.00	0.0
12R85	H3+	HCN	H2CN+	H2		9.50D-09	0.00	0.0
12R85	H3+	HNC	H2CN+	H2		9.50D-09	0.00	0.0
5Z89	H3+	N2	N2H+	H2		1.30D-09	0.00	0.0
08R82	H3+	NO	HNO+	H2		1.10D-09	0.00	0.0
19R80	H3O+	NH3	NH4+	H2O		2.20D-09	0.00	0.0
	H3O+	CN	H2CN+	OH		4.50D-09	0.00	0.0
19R78	H3O+	HCN	H2CN+	H2O		4.50D-09	0.00	0.0
19R78	H2CN+	H2O	H3O+	HCN		4.50D-09	0.00	2460.0
19R78	H3O+	HNC	H2CN+	H2O		4.50D-09	0.00	0.0
19R78	H2CN+	H2O	H3O+	HNC		4.50D-09	0.00	10300.0
P & H	HCO+	NH	NH2+	CO		6.40D-10	0.00	0.0
P & H	NH2+	CO	HCO+	NH		6.40D-10	0.00	6100.0
P & H	HCO+	NH2	NH3+	CO		8.90D-10	0.00	0.0
05R78	HCO+	NH3	NH4+	CO		1.90D-09	0.00	0.0
12R85	HCO+	HCN	H2CN+	CO		3.70D-09	0.00	0.0
12R85	HCO+	HNC	H2CN+	CO		3.70D-09	0.00	0.0
04R71	HCO2+	NO	HNO+	CO2		1.00D-10	0.00	0.0
P & H	C+	NH	CN+	H		7.80D-10	0.00	0.0
P & H	C+	NH2	HCN+	H		1.10D-09	0.00	0.0
05R79	C+	NH3	NH3+	C		5.29D-10	0.00	0.0
05R79	C+	NH3	H2NC+	H		7.80D-10	0.00	0.0
05R79	C+	NH3	H2CN+	H		7.80D-10	0.00	0.0
05R79	C+	NH3	HCN+	H2		2.08D-10	0.00	0.0
12R85	C+	HCN	C2N+	H		3.40D-09	0.00	0.0
12R85	C+	HNC	C2N+	H		3.40D-09	0.00	0.0
09R84	C+	NO	NO+	C		3.40D-09	0.00	0.0
09R84	C+	NO	N+	CO		9.02D-10	0.00	0.0
09R84	N+	CO	C+	NO		9.02D-10	0.00	15400.0
17R77	O2+	N	NO+	O		7.84D-11	0.00	0.0
18R83	O2+	NH3	NH3+	O2		2.00D-09	0.00	0.0
08R78	O2+	NO	NO+	O2		4.40D-10	0.00	0.0
P & H	CH2+	N	HCN+	H		9.40D-10	0.00	0.0
P & H	C2H+	N	C2N+	H		8.30D-10	0.00	0.0
P & H	CH3+	N	HCN+	H2		6.70D-11	0.00	0.0
M88	CH3+	N	H2CN+	H		6.70D-11	0.00	0.0
M88	C2H2+	N	CH+	HCN		2.50D-11	0.00	0.0
M88	C2H2+	N	CH+	HNC		2.50D-11	0.00	2600.0

```
  M88 C2H2+   N        C2N+     H2                    2.25D-10  0.00      0.0
17R80 N+      O2       O2+      N                     2.81D-10  0.00      0.0
17R80 N+      O2       NO+      O                     2.37D-10  0.00      0.0
17R80 N+      O2       O+       NO                    3.30D-11  0.00      0.0
09R84 N+      CO       CO+      N                     8.25D-10  0.00      0.0
09R84 N+      CO       NO+      C                     1.46D-10  0.00      0.0
10R80 N+      NO       NO+      N                     4.51D-10  0.00      0.0
10R80 N+      NO       N2+      O                     7.95D-11  0.00      0.0
13R83 NH3+    H2O      NH4+     OH                    2.50D-10  0.00      0.0
13R83 NH4+    OH       NH3+     H2O                   2.50D-10  0.00   3400.0
06R80 N2H+    O        OH+      N2                    1.40D-10  0.00   3400.0
08R82 N2H+    H2O      H3O+     N2                    2.60D-09  0.00      0.0
06R80 N2H+    CO       HCO+     N2                    8.80D-10  0.00      0.0
06R80 HCO+    N2       N2H+     CO                    8.80D-10  0.00  11200.0
08R82 N2H+    CO2      HCO2+    N2                    1.40D-09  0.00      0.0
08R82 HCO2+   N2       N2H+     CO2                   1.40D-09  0.00   6400.0
15R74 N2H+    NH3      NH4+     N2                    2.30D-09  0.00      0.0
15R74 NH4+    N2       N2H+     NH3                   2.30D-09  0.00  44000.0
08R82 N2H+    NO       HNO+     N2                    3.40D-10  0.00      0.0
01R83 C2N+    NH3      N2H+     C2H2                  1.90D-10  0.00      0.0
01R83 C2N+    NH3      H2CN+    HCN                   1.70D-09  0.00      0.0
P & H HNO+    C        CH+      NO                    1.00D-09  0.00      0.0
04R71 HNO+    CO       HCO+     NO                    1.00D-10  0.00      0.0
04R71 HNO+    CO2      HCO2+    NO                    1.00D-10  0.00      0.0
P & H HNO+    OH       H2O+     NO                    6.20D-10  0.00      0.0
08R82 HNO+    H2O      H3O+     NO                    2.30D-09  0.00      0.0
P & H NO+     Fe       Fe+      NO                    1.00D-09  0.00      0.0
P & H N+      ELECTR   N        PHOTON                3.80D-12 -0.62      0.0
P & H NH+     ELECTR   N        H                     2.00D-07 -0.50      0.0
P & H NH2+    ELECTR   NH       H                     1.50D-07 -0.50      0.0
P & H NH2+    ELECTR   N        H        H            1.50D-07 -0.50      0.0
22Z90 NH3+    ELECTR   NH2      H                     3.00D-07 -0.50      0.0
22Z90 NH4+    ELECTR   NH2      H2                    7.60D-07 -0.50      0.0
22Z90 NH4+    ELECTR   NH3      H                     7.60D-07 -0.50      0.0
P & H CN+     ELECTR   C        N                     1.80D-07 -0.50      0.0
75 88 C2N+    ELECTR   C2       N                     1.00D-07 -0.50      0.0
75 88 C2N+    ELECTR   CN       C                     2.00D-07 -0.50      0.0
75 88 HCN+    ELECTR   CN       H                     1.50D-07 -0.50      0.0
75 88 HCN+    ELECTR   CH       N                     1.50D-07 -0.50      0.0
22Z90 N2+     ELECTR   N        N                     3.60D-08 -0.42      0.0
 6Z88 N2H+    ELECTR   N2       H                     1.70D-07 -1.00      0.0
 7Z88 H2CN+   ELECTR   HCN      H                     1.75D-07 -0.50      0.0
 7Z88 H2CN+   ELECTR   HNC      H                     1.75D-07 -0.50      0.0
 7Z88 H2NC+   ELECTR   HNC      H                     1.75D-07 -0.50      0.0
 7Z88 H2NC+   ELECTR   NH2      C                     1.75D-07 -0.50      0.0
22Z90 NO+     ELECTR   N        O                     4.30D-07 -0.37      0.0
P & H HNO+    ELECTR   NO       H                     3.00D-07 -0.50      0.0
 15   SO      +SECPHO  =S       O                     9.64D+02  0.00 140000.0
 15   CS      +SECPHO  =S       C                     2.12D+04  0.00 140000.0
 15   SH      +SECPHO  =S       H                     1.46D+03  0.00 140000.0
 2Z89 OCS     +SECPHO  =CO      S                     1.07D+04  0.00 140000.0
 2Z89 H2S     +SECPHO  =S       H2                    1.03D+04  0.00 140000.0
 2Z89 H2S     +SECPHO  =H2S+    ELECTR                3.39D+03  0.00 140000.0
 2Z89 SO2     +SECPHO  =SO      O                     1.77D+03  0.00 140000.0
16Z88 S       +H2      =SH      H                     1.04D-10  .132   9620.0
16Z88 SH      +H2      =H2S     H                     6.41D-12  .087   8050.0
16Z88 SH      +H       =S       H2                    2.50D-11  0.00      0.0
```

```
16Z88 H2S     +H      =SH      H2                      1.29D-11  0.00    860.0
16Z88 SO      +H      =OH      S                       5.90D-10  -.31  11100.0
16Z88 SO2     +H      =SO      OH                      9.25D-09  -.74  14700.0
16Z88 OCS     +H      =SH      CO                      1.70D-11  0.00   2000.0
UMIST SH      +O      =SO      H                       1.60D-10  0.00    100.0
17Z88 SH      +O      =OH      S                       1.70D-11  0.67    950.0
16Z88 H2S     +O      =SH      OH                      1.40D-11  0.00   1920.0
16Z88 H2S     +OH     =SH      H2O                     6.30D-12  0.00     80.0
16Z88 CS      +O      =CO      S                       2.70D-10  0.00    760.0
16Z88 CS      +OH     =OCS     H                       1.55D-13  1.12    800.0
24Z87 S       +O2     =SO      O                       5.19D-12  0.00    265.0
16Z88 SO      +O      =S       O2                      6.60D-13  0.00   2760.0
16Z88 SO      +O2     =SO2     O                       1.40D-12  0.00   2820.0
23Z90 SO      +OH     =SO2     H                       1.96D-10  -.17      0.0
UMIST SO      +N      =NO      S                       1.73D-11  0.50    750.0
16Z88 SO      +C      =CO      S                       7.20D-11  0.00      0.0
16Z88 SO      +C      =CS      O                       1.70D-10  0.00      0.0
16Z88 SO2     +O      =SO      O2                      9.27D-11  -.46   9140.0
16Z88 OCS     +O      =SO      CO                      2.60D-11  0.00   2250.0
16Z88 CH      +S      =CS      H                       1.10D-12  0.00      0.0
16Z88 CH      +S      =SH      C                       1.73D-11  0.50   4000.0
16Z88 OH      +S      =SO      H                       1.00D-10  0.00    100.0
16Z88 SH      +C      =CS      H                       2.00D-11  0.00      0.0
16Z88 SH      +C      =CH      S                       1.20D-11  0.58   5880.0
16Z88 SH      +CO     =OCS     H                       5.95D-14  1.12   8330.0
18Z86 S+      +H2     =SH+     H                       2.20D-10  0.00   9860.0
18Z86 SH+     +H2     =H2S+    H                       1.90D-10  0.00   8500.0
P & H SH+     +H2     =H3S+    PHOTON                  1.00D-15  0.00      0.0
18Z86 H2S+    +H2     =H3S+    H                       1.40D-11  0.00   2300.0
 1R84 CS+     +H2     =HCS+    H                       4.80D-10  0.00      0.0
18Z86 SH+     +H      =S+      H2                      1.10D-10  0.00      0.0
18Z86 H2S+    +H      =SH+     H2                      2.00D-10  0.00      0.0
18Z86 H3S+    +H      =H2S+    H2                      6.00D-11  0.00      0.0
P & H SO+     +H      =S+      OH                      6.10D-10  0.00  11385.0
GUESS H+      +S      =S+      H                       1.00D-15  0.00      0.0
P & H H+      +SH     =SH+     H                       1.60D-09  0.00      0.0
P & H H+      +SH     =S+      H2                      1.60D-09  0.00      0.0
P & H H+      +H2S    =H2S+    H                       7.60D-09  0.00      0.0
P & H H+      +CS     =CS+     H                       4.90D-09  0.00      0.0
P & H H+      +SO     =SO+     H                       3.20D-09  0.00      0.0
P & H H+      +OCS    =SH+     CO                      5.90D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +S      =SH+     H2                      2.60D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +SH     =H2S+    H2                      1.90D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +H2S    =H3S+    H2                      3.70D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +CS     =HCS+    H2                      2.90D-09  0.00      0.0
P & H H3+     +SO     =HSO+    H2                      1.90D-09  0.00      0.0
 8R82 H3+     +SO2    =HSO2+   H2                      1.30D-09  0.00      0.0
 8R82 H3+     +OCS    =HOCS+   H2                      1.90D-09  0.00      0.0
P & H He+     +SH     =S+      H       He              1.70D-09  0.00      0.0
P & H He+     +H2S    =S+      H2      He              3.60D-09  0.00      0.0
P & H He+     +H2S    =SH+     H       He              4.80D-10  0.00      0.0
P & H He+     +H2S    =H2S+    He                      3.10D-10  0.00      0.0
P & H He+     +CS     =C+      S       He              1.30D-09  0.00      0.0
P & H He+     +CS     =S+      C       He              1.30D-09  0.00      0.0
P & H He+     +SO     =O+      S       He              8.30D-10  0.00      0.0
P & H He+     +SO     =S+      O       He              8.30D-10  0.00      0.0
P & H He+     +OCS    =CS+     O       He              7.60D-10  0.00      0.0
```

```
P & H He+     +OCS     =S+      CO       He              7.60D-10  0.00      0.0
P & H He+     +OCS     =CO+     S        He              7.60D-10  0.00      0.0
P & H He+     +OCS     =O+      CS       He              7.60D-11  0.00      0.0
 2R73 He+     +SO2     =S+      O2       He              8.60D-10  0.00      0.0
 2R73 He+     +SO2     =SO+     O        He              3.44D-09  0.00      0.0
P & H C+      +S       =S+      C                        1.50D-09  0.00      0.0
P & H C+      +SH      =CS+     H                        1.10D-09  0.00      0.0
 3R78 C+      +H2S     =HCS+    H                        1.28D-09  0.00      0.0
 3R78 C+      +H2S     =H2S+    C                        4.25D-10  0.00      0.0
P & H C+      +CS      =CS+     C                        1.60D-09  0.00    700.0
P & H C+      +SO      =S+      CO                       2.60D-10  0.00      0.0
P & H C+      +SO      =CS+     O                        2.60D-10  0.00      0.0
P & H C+      +SO      =SO+     C                        2.60D-10  0.00      0.0
P & H C+      +SO      =CO+     S                        2.60D-10  0.00      0.0
P & H C+      +OCS     =CS+     CO                       1.60D-09  0.00      0.0
P & H C+      +SO2     =SO+     CO                       2.30D-09  0.00      0.0
P & H CH+     +S       =S+      CH                       4.70D-10  0.00      0.0
P & H CH+     +S       =SH+     C                        4.70D-10  0.00      0.0
P & H CH+     +S       =CS+     H                        4.70D-10  0.00      0.0
19Z82 CH+     +SO      =OH+     CS                       1.00D-09  0.00      0.0
19Z82 CH+     +SO      =SH+     CO                       1.00D-09  0.00      0.0
P & H CH3+    +S       =HCS+    H2                       1.40D-09  0.00      0.0
P & H CH3+    +SO      =HOCS+   H2                       9.50D-10  0.00      0.0
P & H CH5+    +S       =SH+     CH4                      1.30D-09  0.00      0.0
P & H H3O+    +S       =SH+     H2O                      3.20D-10  0.00   4930.0
 4R79 H3O+    +H2S     =H3S+    H2O                      1.90D-09  0.00      0.0
P & H HCO+    +S       =SH+     CO                       3.30D-10  0.00      0.0
P & H HCO+    +SH      =H2S+    CO                       8.20D-10  0.00      0.0
P & H HCO+    +CS      =HCS+    CO                       1.20D-09  0.00      0.0
P & H HCO+    +SO      =HSO+    CO                       7.50D-10  0.00      0.0
 7R75 HCO+    +H2S     =H3S+    CO                       1.60D-09  0.00      0.0
 5R78 HCO+    +OCS     =HOCS+   CO                       1.10D-09  0.00      0.0
P & H O2+     +S       =SO+     O                        5.40D-10  0.00      0.0
P & H O2+     +S       =S+      O2                       5.40D-10  0.00      0.0
P & H O2+     +H2S     =H2S+    O2                       1.40D-09  0.00      0.0
P & H S+      +CH      =CS+     H                        6.20D-10  0.00      0.0
P & H S+      +CH2     =HCS+    H                        1.00D-11  0.00      0.0
P & H S+      +OH      =SO+     H                        6.10D-10  0.00      0.0
P & H S+      +OH      =SH+     O                        2.90D-10  0.00   8820.0
P & H S+      +SH      =SH+     S                        9.70D-10  0.00    350.0
 1R84 S+      +NO      =NO+     S                        3.20D-10  0.00      0.0
10R81 S+      +NH3     =NH3+    S                        1.60D-09  0.00      0.0
 1R84 S+      +O2      =SO+     O                        2.30D-11  0.00      0.0
 5R84 NH3+    +H2S     =NH4+    SH                       6.00D-10  0.00      0.0
P & H HNO+    +S       =SH+     NO                       1.10D-09  0.00      0.0
P & H N2H+    +S       =SH+     N2                       1.10D-09  0.00      0.0
P & H SH+     +O       =SO+     H                        2.90D-10  0.00      0.0
P & H SH+     +O       =S+      OH                       2.90D-10  0.00      0.0
P & H SH+     +S       =S+      SH                       9.70D-10  0.00      0.0
P & H SH+     +C       =CS+     H                        9.90D-10  0.00      0.0
P & H SH+     +CH      =CH2+    S                        5.80D-10  0.00      0.0
P & H SH+     +OH      =H2S+    O                        3.10D-10  0.00   7500.0
P & H SH+     +OH      =H2O+    S                        4.30D-10  0.00   9200.0
10R81 SH+     +H2O     =H3O+    S                        6.30D-10  0.00      0.0
10R81 SH+     +H2S     =H2S+    SH                       5.00D-10  0.00   1000.0
10R81 SH+     +H2S     =H3S+    S                        5.00D-10  0.00      0.0
 1R84 SH+     +NO      =NO+     SH                       3.30D-10  0.00      0.0
```

```
10R81 SH+     +NH3     =NH3+     SH                    5.25D-10  0.00      0.0
10R81 SH+     +NH3     =NH4+     S                     9.75D-10  0.00      0.0
P & H H2S+    +O       =SH+      OH                    3.10D-10  0.00      0.0
P & H H2S+    +O       =SO+      H2                    3.10D-10  0.00      0.0
P & H H2S+    +C       =HCS+     H                     1.00D-09  0.00      0.0
P & H H2S+    +S       =S+       H2S                   1.10D-09  0.00      0.0
10R81 H2S+    +SH      =SH+      H2S                   5.00D-10  0.00      0.0
10R81 H2S+    +NO      =NO+      H2S                   3.70D-10  0.00      0.0
10R81 H2S+    +H2O     =H3O+     SH                    8.10D-10  0.00      0.0
10R81 H2S+    +NH3     =NH4+     SH                    1.36D-09  0.00      0.0
10R81 H2S+    +NH3     =NH3+     H2S                   3.40D-10  0.00      0.0
10R81 H3S+    +NH3     =NH4+     H2S                   1.90D-09  0.00      0.0
13R78 H3S+    +HCN     =H2CN+    H2S                   1.90D-09  0.00      0.0
19Z82 HCS+    +O       =HCO+     S                     1.00D-09  0.00      0.0
P & H SO+     +NH3     =NH3+     SO                    1.30D-09  0.00      0.0
P & H S+      +Fe      =Fe+      S                     1.80D-10  0.00      0.0
P & H SH+     +Fe      =Fe+      SH                    1.60D-09  0.00      0.0
P & H SO+     +Fe      =Fe+      SO                    1.60D-09  0.00      0.0
P & H H2S+    +Fe      =Fe+      H2S                   1.80D-09  0.00      0.0
P & H S+      +ELECTR  =S        PHOTON                3.90D-12  -.63      0.0
P & H SH+     +ELECTR  =S        H                     2.00D-07  -.50      0.0
P & H H2S+    +ELECTR  =SH       H                     1.50D-07  -.50      0.0
P & H H2S+    +ELECTR  =S        H        H            1.50D-07  -.50      0.0
P & H H2S+    +ELECTR  =H2S      PHOTON                1.10D-10  -.70      0.0
P & H H3S+    +ELECTR  =H2S      H                     3.00D-07  -.50      0.0
P & H H3S+    +ELECTR  =SH       H2                    1.00D-07  -.50      0.0
P & H CS+     +ELECTR  =C        S                     2.00D-07  -.50      0.0
21Z91 HCS+    +ELECTR  =CS       H                     7.00D-07  -.50      0.0
P & H SO+     +ELECTR  =S        O                     2.00D-07  -.50      0.0
P & H HSO+    +ELECTR  =SO       H                     2.00D-07  -.50      0.0
UMIST HSO2+    ELECTR   SO       H        O            1.00E-07  -.50      0.0
UMIST HSO2+    ELECTR   SO       OH                    1.00E-07  -.50      0.0
P & H HOCS+   +ELECTR  =OH       CS                    2.00D-07  -.50      0.0
P & H HOCS+   +ELECTR  =OCS      H                     2.00D-07  -.50      0.0
L&G90 Si      +SECPHO  =Si+      ELECTR                3.00D+03  0.00 140000.0
L&G90 SiO     +SECPHO  =Si       O                     3.00D+03  0.00 140000.0
L&G90 SiO2    +SECPHO  =SiO      O                     3.00D+03  0.00 140000.0
 2Z89 SiH     +SECPHO  =Si       H                     1.46D+03  0.00 140000.0
13 87 SiH4    +SECPHO  =SiH3     H                     4.68D+03  0.00 140000.0
McKay SiH4     H        SiH3     H2                    2.60D-11  0.00   1400.0
McKay SiH3     H        SiH2     H2                    2.00D-11  0.00      0.0
McKay SiH2     H        SiH      H2                    2.00D-11  0.00      0.0
McKay SiH      H        Si       H2                    2.00D-11  0.00      0.0
McKay SiH2     O2       SiO      H2O                   7.50D-12  0.00      0.0
McKay SiH      O2       SiO      OH                    1.70D-10  0.00      0.0
UMIST SiH2     O        SiO      H        H            5.00D-11  0.50      0.0
UMIST SiH      O        SiO      H                     4.00D-11  0.50      0.0
#L&G90 Si       O2       SiO      O                     2.70D-10  0.00    111.0
ROW01 Si       O2       SiO      O                     1.72D-10 -0.53     17.0
#L&G90 Si       OH       SiO      H                     1.00D-10  0.00    111.0
GUESS Si       OH       SiO      H                     2.00D-11 -0.50     0.00
HRBST SiO      OH       SiO2     H                     1.00D-12 -0.70      0.0
 2063 Si+      H2       SiH2+    PHOTON                3.00D-18  0.00      0.0
 2227 SiH+     H2       SiH3+    PHOTON                3.00D-17 -1.00      0.0
 2459 SiH3+    H2       SiH5+    PHOTON                1.00D-18 -0.50      0.0
 1724 Si+      H2       SiH+     H                     1.50D-10  0.00  14310.0
27B77 SiH+     H2       SiH2+    H                     1.20D-09  0.00  28250.0
```

28B75	SiH2+	H2	SiH3+	H		7.00D-10	0.00	6335.0
28B75	SiH3+	H2	SiH4+	H		2.00D-10	0.00	47390.0
2570	SiH4+	H2	SiH5+	H		1.00D-09	0.00	0.0
2223	SiH+	H	Si+	H2		1.90D-09	0.00	0.0
27B77	SiH2+	H	SiH+	H2		1.20D-09	0.00	0.0
28B75	SiH3+	H	SiH2+	H2		7.00D-10	0.00	0.0
28B75	SiH4+	H	SiH3+	H2		2.00D-10	0.00	0.0
28B75	SiH5+	H	SiH4+	H2		4.00D-11	0.00	4470.0
2791	SiO+	H2	SiOH+	H		3.20D-10	0.00	0.0
383	H+	Si	Si+	H		9.90E-10	0.00	0.0
411	H+	SiH	SiH+	H		1.70E-09	0.00	0.0
412	H+	SiH	Si+	H2		1.70E-09	0.00	0.0
419	H+	SiH2	SiH2+	H		1.50E-09	0.00	0.0
420	H+	SiH2	SiH+	H2		1.50E-09	0.00	0.0
425	H+	SiH3	SiH3+	H		1.50E-09	0.00	0.0
426	H+	SiH3	SiH2+	H2		1.50E-09	0.00	0.0
429	H+	SiH4	SiH4+	H		1.50E-09	0.00	0.0
430	H+	SiH4	SiH3+	H2		1.50E-09	0.00	0.0
461	H+	SiO	SiO+	H		3.30E-09	0.00	0.0
759	He+	Si	Si+	He		3.30E-09	0.00	0.0
812	He+	SiH	Si+	H	He	1.80E-09	0.00	0.0
821	He+	SiH2	SiH+	H	He	1.00E-09	0.00	0.0
822	He+	SiH2	Si+	H2	He	1.00E-09	0.00	0.0
829	He+	SiH3	SiH2+	H	He	1.00E-09	0.00	0.0
830	He+	SiH3	SiH+	H2	He	1.00E-09	0.00	0.0
834	He+	SiH4	SiH3+	H	He	1.00E-09	0.00	0.0
835	He+	SiH4	SiH2+	H2	He	1.00E-09	0.00	0.0
879	He+	SiO	Si+	O	He	8.60E-10	0.00	0.0
880	He+	SiO	O+	Si	He	8.60E-10	0.00	0.0
L&G90	He+	SiO2	SiO+	O	He	5.00E-10	0.00	0.0
L&G90	He+	SiO2	Si+	O2	He	5.00E-10	0.00	0.0
1033	C+	Si	Si+	C		2.10E-09	0.00	0.0
1072	C+	SiH2	SiH2+	C		1.00E-09	0.00	0.0
1078	C+	SiH3	SiH3+	C		1.00E-09	0.00	0.0
1125	C+	SiO	Si+	CO		5.40E-10	0.00	0.0
L&G90	C+	SiO2	SiO+	CO		1.00E-09	-0.60	0.0
2471	S+	Si	Si+	S		1.60E-09	0.00	0.0
2489	S+	SiH	SiH+	S		4.20E-10	0.00	0.0
618	H3+	Si	SiH+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
644	H3+	SiH	SiH2+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
	H3+	Si	SiH2+	H		1.70E-09	0.00	0.0
648	H3+	SiH2	SiH3+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
652	H3+	SiH3	SiH4+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
654	H3+	SiH4	SiH5+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
680	H3+	SiO	SiOH+	H2		2.00E-09	0.00	0.0
1731	H3O+	Si	SiH+	H2O		1.80E-09	0.00	0.0
1745	H3O+	SiH	SiH2+	H2O		9.70E-10	0.00	0.0
1746	H3O+	SiH2	SiH3+	H2O		2.00E-09	0.00	0.0
1764	H3O+	SiO	SiOH+	H2O		2.00E-09	0.00	0.0
2258	HCO+	Si	SiH+	CO		1.60E-09	0.00	0.0
2279	HCO+	SiH	SiH2+	CO		8.70E-10	0.00	0.0
2283	HCO+	SiH2	SiH3+	CO		2.00E-09	0.00	0.0
2286	HCO+	SiH4	SiH5+	CO		1.40E-09	0.00	0.0
2305	HCO+	SiO	SiOH+	CO		7.90E-10	0.00	0.0
2071	Si+	OH	SiO+	H		6.30E-10	0.00	0.0
L&G90	Si+	H2O	SiOH+	H		2.30E-10	-0.60	0.0
2082	Si+	O2	SiO+	O		1.00E-13	0.00	0.0

```
 2226 SiH+    O       SiO+    H                    4.00E-10  0.00      0.0
 2229 SiH+    NH3     NH4+    Si                   1.00E-09  0.00      0.0
 2230 SiH+    H2O     H3O+    Si                   8.00E-10  0.00      0.0
 2391 SiH2+   O       SiOH+   H                    6.30E-10  0.00      0.0
 2393 SiH2+   O2      SiOH+   OH                   2.40E-11  0.00      0.0
 2458 SiH3+   O       SiOH+   H2                   2.00E-10  0.00      0.0
 2571 SiH4+   H2O     H3O+    SiH3                 2.00E-09  0.00      0.0
 2572 SiH4+   CO      HCO+    SiH3                 1.00E-09  0.00      0.0
 2623 SiH5+   H2O     H3O+    SiH4                 2.00E-09  0.00      0.0
 3116 Si+     ELECTR  Si      PHOTON               4.90E-12 -0.60      0.0
 3125 SiH+    ELECTR  Si      H                    2.00E-07 -0.50      0.0
 3135 SiH2+   ELECTR  Si      H       H            2.00E-07 -0.50      0.0
 3136 SiH2+   ELECTR  SiH     H                    1.50E-07 -0.50      0.0
 3137 SiH2+   ELECTR  Si      H2                   1.50E-07 -0.50      0.0
 3146 SiH3+   ELECTR  SiH2    H                    1.50E-07 -0.50      0.0
 3147 SiH3+   ELECTR  SiH     H2                   1.50E-07 -0.50      0.0
 3156 SiH4+   ELECTR  SiH3    H                    1.50E-07 -0.50      0.0
 3157 SiH4+   ELECTR  SiH2    H2                   1.50E-07 -0.50      0.0
 3163 SiH5+   ELECTR  SiH4    H                    1.50E-07 -0.50      0.0
 3164 SiH5+   ELECTR  SiH3    H2                   1.50E-07 -0.50      0.0
 3227 SiO+    ELECTR  Si      O                    2.00E-07 -0.50      0.0
 3247 SiOH+   ELECTR  SiO     H                    1.50E-07 -0.50      0.0
 3248 SiOH+   ELECTR  Si      OH                   1.50E-07 -0.50      0.0
# VG 20/11/07 : Fit to Tielens etal 94: Y_May(x, 1., 32, 125., 6.4e-2)
# Divided by 7 (Mg,Fe,Si) and 7/4 (O) for stoechiometric proportions in MgFeSiO4
EROSI Mg**   +H      =GRAIN   H       Mg           9.100D-3  32.0  125.000
EROSI Fe**   +H      =GRAIN   H       Fe           9.100D-3  32.0  125.000
EROSI Si**   +H      =GRAIN   H       Si           9.100D-3  32.0  125.000
# Yield for C by H  must be fitted from Tielens etal 1994 (A FAIRE PROCHAINEMENT)
EROSI C**    +H      =GRAIN   H       C            6.400D-2  32.0  125.000
EROSI O**    +H      =GRAIN   H       O            3.700D-2  32.0  125.000
# Rate H2 = 2 x rate(H)
EROSI Mg**   +H2     =GRAIN   H2      Mg           1.820D-2  32.0  125.000
EROSI Fe**   +H2     =GRAIN   H2      Fe           1.820D-2  32.0  125.000
EROSI Si**   +H2     =GRAIN   H2      Si           1.820D-2  32.0  125.000
EROSI C**    +H2     =GRAIN   H2      C            1.280D-1  32.0  125.000
EROSI O**    +H2     =GRAIN   H2      O            7.400D-2  32.0  125.000
# Fin test VG 20/11/07
EROSI Mg**   +He     =GRAIN   He      Mg           1.221D-2  73.0   41.187
EROSI Fe**   +He     =GRAIN   He      Fe           1.151D-2  73.0   40.976
EROSI Si**   +He     =GRAIN   He      Si           1.224D-2  73.0   42.175
EROSI C**    +He     =GRAIN   He      C            9.359D-2  73.0   36.030
EROSI O**    +He     =GRAIN   He      O            5.348D-2  73.0   36.030
# Fit from Field etal 97 double-curve with May etal 2000 one-curve
#EROSI C**    +He     =GRAIN   He      C             2.000D-1  18.0  150.000
EROSI Mg**   +C      =GRAIN   C       Mg           2.935D-2  48.0   36.740
EROSI Fe**   +C      =GRAIN   C       Fe           2.386D-2  47.0   42.794
EROSI Si**   +C      =GRAIN   C       Si           2.698D-2  48.0   36.502
EROSI C**    +C      =GRAIN   C       C            1.845D-1  48.0   30.812
EROSI O**    +C      =GRAIN   C       O            1.054D-1  48.0   30.812
# N is ~ like C
EROSI Mg**   +N      =GRAIN   N       Mg           2.935D-2  48.0   36.740
EROSI Fe**   +N      =GRAIN   N       Fe           2.386D-2  47.0   42.794
EROSI Si**   +N      =GRAIN   N       Si           2.698D-2  48.0   36.502
EROSI C**    +N      =GRAIN   N       C            1.845D-1  48.0   30.812
EROSI O**    +N      =GRAIN   N       O            1.054D-1  48.0   30.812
EROSI Mg**   +O      =GRAIN   O       Mg           2.884D-2  48.0   30.238
```

```
EROSI Fe**   +O      =GRAIN   O       Fe            4.116D-2  44.0   59.438
EROSI Si**   +O      =GRAIN   O       Si            3.373D-2  47.0   37.810
EROSI C**    +O      =GRAIN   O       C             1.761D-1  47.0   31.588
EROSI O**    +O      =GRAIN   O       O             1.006D-1  47.0   31.588
# H2O is ~ like O
EROSI Mg**   +H2O    =GRAIN   H2O     Mg            2.884D-2  48.0   30.238
EROSI Fe**   +H2O    =GRAIN   H2O     Fe            4.116D-2  44.0   59.438
EROSI Si**   +H2O    =GRAIN   H2O     Si            3.373D-2  47.0   37.810
EROSI C**    +H2O    =GRAIN   H2O     C             1.761D-1  47.0   31.588
EROSI O**    +H2O    =GRAIN   H2O     O             1.006D-1  47.0   31.588
# N2 is like Si (same mass)
EROSI Mg**   +N2     =GRAIN   N2      Mg            2.093D-2  48.0   27.730
EROSI Fe**   +N2     =GRAIN   N2      Fe            4.324D-2  47.0   42.335
EROSI Si**   +N2     =GRAIN   N2      Si            2.217D-2  47.0   28.013
EROSI C**    +N2     =GRAIN   N2      C             2.011D-1  46.0   46.018
EROSI O**    +N2     =GRAIN   N2      O             1.149D-1  46.0   46.018
# CO is like Si (same mass)
EROSI Mg**   +CO     =GRAIN   CO      Mg            2.093D-2  48.0   27.730
EROSI Fe**   +CO     =GRAIN   CO      Fe            4.324D-2  47.0   42.335
EROSI Si**   +CO     =GRAIN   CO      Si            2.217D-2  47.0   28.013
EROSI C**    +CO     =GRAIN   CO      C             2.011D-1  46.0   46.018
EROSI O**    +CO     =GRAIN   CO      O             1.149D-1  46.0   46.018
# O2 is ~ like Si
EROSI Mg**   +O2     =GRAIN   O2      Mg            2.093D-2  48.0   27.730
EROSI Fe**   +O2     =GRAIN   O2      Fe            4.324D-2  47.0   42.335
EROSI Si**   +O2     =GRAIN   O2      Si            2.217D-2  47.0   28.013
EROSI C**    +O2     =GRAIN   O2      C             2.011D-1  46.0   46.018
EROSI O**    +O2     =GRAIN   O2      O             1.149D-1  46.0   46.018
ADSOR C      +GRAIN  =CH4*                          1.00D+00          102.
ADSOR CH     +GRAIN  =CH4*                          1.00D+00          102.
ADSOR CH2    +GRAIN  =CH4*                          1.00D+00          102.
ADSOR CH3    +GRAIN  =CH4*                          1.00D+00          102.
ADSOR CH4    +GRAIN  =CH4*                          1.00D+00          102.
ADSOR O      +GRAIN  =H2O*                          1.00D+00          102.
ADSOR O2     +GRAIN  =O2*                           1.00D+00          102.
ADSOR OH     +GRAIN  =H2O*                          1.00D+00          102.
ADSOR H2O    +GRAIN  =H2O*                          1.00D+00          102.
ADSOR CO     +GRAIN  =CO*                           1.00D+00          102.
ADSOR CO2    +GRAIN  =CO2*                          1.00D+00          102.
ADSOR C2     +GRAIN  =CH4*    CH4*                  1.00D+00          102.
ADSOR C2H    +GRAIN  =CH4*    CH4*                  1.00D+00          102.
ADSOR C2H2   +GRAIN  =CH4*    CH4*                  1.00D+00          102.
ADSOR C3     +GRAIN  =CH4*    CH4*    CH4*          1.00D+00          102.
ADSOR C3H    +GRAIN  =CH4*    CH4*    CH4*          1.00D+00          102.
ADSOR C3H2   +GRAIN  =CH4*    CH4*    CH4*          1.00D+00          102.
ADSOR N      +GRAIN  =NH3*                          1.00D+00          102.
ADSOR NH     +GRAIN  =NH3*                          1.00D+00          102.
ADSOR NH2    +GRAIN  =NH3*                          1.00D+00          102.
ADSOR NH3    +GRAIN  =NH3*                          1.00D+00          102.
ADSOR CN     +GRAIN  =CH4*    NH3*                  1.00D+00          102.
ADSOR HCN    +GRAIN  =CH4*    NH3*                  1.00D+00          102.
ADSOR HNC    +GRAIN  =CH4*    NH3*                  1.00D+00          102.
ADSOR N2     +GRAIN  =N2*                           1.00D+00          102.
ADSOR NO     +GRAIN  =H2O*    NH3*                  1.00D+00          102.
ADSOR S      +GRAIN  =H2S*                          1.00D+00          102.
ADSOR SH     +GRAIN  =H2S*                          1.00D+00          102.
ADSOR H2S    +GRAIN  =H2S*                          1.00D+00          102.
```

```
ADSOR CS      +GRAIN  =CH4*    H2S*                    1.00D+00          102.
ADSOR SO      +GRAIN  =H2O*    H2S*                    1.00D+00          102.
ADSOR SO2     +GRAIN  =H2O*    H2O*    H2S*            1.00D+00          102.
ADSOR OCS     +GRAIN  =OCS*                            1.00D+00          102.
ADSOR Fe      +GRAIN  =Fe*                             1.00D+00          102.
ADSOR Si      +GRAIN  =SiH4*                           1.00D+00          102.
ADSOR SiH     +GRAIN  =SiH4*                           1.00D+00          102.
ADSOR SiH2    +GRAIN  =SiH4*                           1.00D+00          102.
ADSOR SiH3    +GRAIN  =SiH4*                           1.00D+00          102.
ADSOR SiH4    +GRAIN  =SiH4*                           1.00D+00          102.
ADSOR SiO     +GRAIN  =SiO*                            1.00D+00          102.
ADSOR SiO2    +GRAIN  =SiO2*                           1.00D+00          102.
SPUTT CH4*    +H      =CH4     H       GRAIN           4.00D-05  0.00   2000.0
SPUTT CH4*    +H2     =CH4     H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   2000.0
SPUTT CH4*    +He     =CH4     He      GRAIN           8.00D-04  0.00   2000.0
SPUTT H2O*    +H      =H2O     H       GRAIN           4.00D-05  0.00   6000.0
SPUTT H2O*    +H2     =H2O     H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT H2O*    +He     =H2O     He      GRAIN           8.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT CO*     +H      =CO      H       GRAIN           4.00D-05  0.00   1900.0
SPUTT CO*     +H2     =CO      H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   1900.0
SPUTT CO*     +He     =CO      He      GRAIN           8.00D-04  0.00   1900.0
SPUTT CO2*    +H      =CO2     H       GRAIN           4.00D-05  0.00   3100.0
SPUTT CO2*    +H2     =CO2     H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   3100.0
SPUTT CO2*    +He     =CO2     He      GRAIN           8.00D-04  0.00   3100.0
SPUTT NH3*    +H      =NH3     H       GRAIN           4.00D-05  0.00   3600.0
SPUTT NH3*    +H2     =NH3     H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   3600.0
SPUTT NH3*    +He     =NH3     He      GRAIN           8.00D-04  0.00   3600.0
SPUTT CH3OH*  +H      =CH3OH   H       GRAIN           4.00D-05  0.00   6000.0
SPUTT CH3OH*  +H2     =CH3OH   H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT CH3OH*  +He     =CH3OH   He      GRAIN           8.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT H2CO*   +H      =H2CO    H       GRAIN           4.00D-05  0.00   6000.0
SPUTT H2CO*   +H2     =H2CO    H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT H2CO*   +He     =H2CO    He      GRAIN           8.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT HCO2H*  +H      =HCO2H   H       GRAIN           4.00D-05  0.00   6000.0
SPUTT HCO2H*  +H2     =HCO2H   H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT HCO2H*  +He     =HCO2H   He      GRAIN           8.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT OCS*    +H      =OCS     H       GRAIN           4.00D-05  0.00   6000.0
SPUTT OCS*    +H2     =OCS     H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT OCS*    +He     =OCS     He      GRAIN           8.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT H2S*    +H      =H2S     H       GRAIN           4.00D-05  0.00   6000.0
SPUTT H2S*    +H2     =H2S     H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT H2S*    +He     =H2S     He      GRAIN           8.00D-04  0.00   6000.0
# Ajout VG : O2 same mass as CH4
SPUTT O2*     +H      =O2      H       GRAIN           4.00D-05  0.00   6000.0
SPUTT O2*     +H2     =O2      H2      GRAIN           1.00D-04  0.00   6000.0
SPUTT O2*     +He     =O2      He      GRAIN           8.00D-04  0.00   6000.0
DESOR CH4*    +CRP    =CH4     GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR H2O*    +CRP    =H2O     GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR CO*     +CRP    =CO      GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR CO2*    +CRP    =CO2     GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR NH3*    +CRP    =NH3     GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR CH3OH*  +CRP    =CH3OH   GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR H2CO*   +CRP    =H2CO    GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR HCO2H*  +CRP    =HCO2H   GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR OCS*    +CRP    =OCS     GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
DESOR H2S*    +CRP    =H2S     GRAIN                   7.00D+01  0.00      0.0
# Ajout VG
```

```
DESOR O2*     +CRP     =O2       GRAIN                    7.00D+01  0.00       0.0
END
```

Bibliographie

Adamson, A. J., Whittet, D. C. B., Chrysostomou, A., et al. 1999, ApJ, 512, 224 [ADS]

Aitken, D. K. 1996, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 97, Polarimetry of the Interstellar Medium, ed. W. G. Roberge & D. C. B. Whittet, 225–+ [ADS]

Anders, E. & Zinner, E. 1993, Meteoritics, 28, 490 [ADS]

Barlow, M. J. 1978, MNRAS, 183, 367 [ADS]

Bates, D. R. & Spitzer, L. J. 1951, ApJ, 113, 441 [ADS]

Beck, R., Fletcher, A., Shukurov, A., et al. 2005, A&A, 444, 739 [ADS]

Borkowski, K. J. & Dwek, E. 1995, ApJ, 454, 254 [ADS]

Brauer, F., Dullemond, C. P., Johansen, A., et al. 2007, A&A, 469, 1169 [ADS]

Cardelli, J. A., Clayton, G. C., & Mathis, J. S. 1989, ApJ, 345, 245 [ADS]

Caselli, P., Hartquist, T. W., & Havnes, O. 1997, A&A, 322, 296 [ADS]

Cesarsky, D., Lequeux, J., Abergel, A., et al. 1996, A&A, 315, L305 [ADS]

Chapman, J. F. & Wardle, M. 2006, MNRAS, 371, 513 [ADS]

Chernoff, D. F. 1987, ApJ, 312, 143 [ADS]

Chièze, J.-P., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R. 1998, MNRAS, 295, 672 [ADS]

Chokshi, A., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. 1993, ApJ, 407, 806 [ADS]

Chow, V. W., Mendis, D. A., & Rosenberg, M. 1993, J. Geophys. Res., 98, 19065 [ADS]

Ciolek, G. E. & Mouschovias, T. C. 1993, ApJ, 418, 774 [ADS]

Ciolek, G. E. & Roberge, W. G. 2002, ApJ, 567, 947 [ADS]

Ciolek, G. E., Roberge, W. G., & Mouschovias, T. C. 2004, ApJ, 610, 781 [ADS]

Codella, C., Bachiller, R., & Reipurth, B. 1999, A&A, 343, 585 [ADS]

Compiègne, M., Abergel, A., Verstraete, L., et al. 2007, A&A, 471, 205 [ADS]

Costantini, E., Freyberg, M. J., & Predehl, P. 2005, A&A, 444, 187 [ADS]

Courant, R. & Friedrichs, K. O. 1948, Supersonic flow and shock waves (Pure and Applied Mathematics, New York : Interscience, 1948) [ADS]

Cowie, L. L. 1978, ApJ, 225, 887 [ADS]

Crutcher, R. M. 1999, ApJ, 520, 706 [ADS]

Davoisne, C., Djouadi, Z., Leroux, H., et al. 2006, A&A, 448, L1 [ADS]

Day, K. L. 1977, MNRAS, 178, 49P [ADS]

Désert, F.-X., Boulanger, F., & Puget, J. L. 1990, A&A, 237, 215 [ADS]

Dominik, C. & Tielens, A. G. G. M. 1997, ApJ, 480, 647 [ADS]

Dopita, M. A. & Sutherland, R. S. 2003, Astrophysics of the diffuse universe (Berlin, New York : Springer, Astronomy and Astrophysics Library) [ADS]

Draine, B. T. 1980, ApJ, 241, 1021 [ADS]

Draine, B. T. 1990, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 12, The Evolution of the Interstellar Medium, ed. L. Blitz, 193–205 [ADS]

Draine, B. T. 2002, The Cold Universe, Swiss Society for Astrophysics and Astronomy, Saas-Fee Advanced Course 32 (Blain, A. W., Combes, F., Draine, B. T., Pfenniger, D. and Revaz, Y., Springer-Verlag)

Draine, B. T. 2003, ARA&A, 41, 241 [ADS]

Draine, B. T. 2004, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 309, Astrophysics of Dust, ed. A. N. Witt, G. C. Clayton, & B. T. Draine, 691–+ [ADS]

Draine, B. T. & Lee, H. M. 1984, ApJ, 285, 89 [ADS]

Draine, B. T. & McKee, C. F. 1993, ARA&A, 31, 373 [ADS]

Draine, B. T., Roberge, W. G., & Dalgarno, A. 1983, ApJ, 264, 485 [ADS]

Draine, B. T. & Salpeter, E. E. 1979a, ApJ, 231, 438 [ADS]

Draine, B. T. & Salpeter, E. E. 1979b, ApJ, 231, 77 [ADS]

Draine, B. T. & Sutin, B. 1987, ApJ, 320, 803 [ADS]

Dwek, E. 1998, ApJ, 501, 643 [ADS]

Dwek, E. 2005, in American Institute of Physics Conference Series, Vol. 761, The Spectral Energy Distributions of Gas-Rich Galaxies : Confronting Models with Data, ed. C. C. Popescu & R. J. Tuffs, 103 [ADS]

Dwek, E., Arendt, R. G., Bouchet, P., et al. 2008, ApJ, 676, 1029 [ADS]

Dwek, E., Foster, S. M., & Vancura, O. 1996, ApJ, 457, 244 [ADS]

Dwek, E. & Scalo, J. M. 1980, ApJ, 239, 193 [ADS]

Ellison, D. C., Drury, L. O., & Meyer, J.-P. 1997, ApJ, 487, 197 [ADS]

Elmegreen, B. G. 1979, ApJ, 232, 729 [ADS]

Ferrière, K. M. 2001, Reviews of Modern Physics, 73, 1031 [ADS]

Field, G. B. 1974, ApJ, 187, 453 [ADS]

Fitzpatrick, E. L. 1996, ApJ, 473, L55+ [ADS]

Flower, D. R., Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., & Cabrit, S. 2003, MNRAS, 341, 70 [ADS]

Flower, D. R. & Pineau des Forêts, G. 2003, MNRAS, 343, 390 [ADS]

Flower, D. R., Pineau des Forêts, G., & Hartquist, T. W. 1985, MNRAS, 216, 775 [ADS]

Frisch, P. C., Dorschner, J. M., Geiss, J., et al. 1999, ApJ, 525, 492 [ADS]

Goertz, C. K. 1989, Reviews of Geophysics, 27, 271 [ADS]

Gould, R. J. & Salpeter, E. E. 1963, ApJ, 138, 393 [ADS]

Gredel, R., Lepp, S., Dalgarno, A., & Herbst, E. 1989, ApJ, 347, 289 [ADS]

Greenberg, J. 1989, in IAU Symposium, Vol. 135, Interstellar Dust, ed. L. J. Allamandola & A. G. G. M. Tielens, 345–+ [ADS]

Grün, E. & Svestka, J. 1996, Space Science Reviews, 78, 347 [ADS]

Guillet, V., Pineau Des Forêts, G., & Jones, A. P. 2007, A&A, 476, 263 [ADS]

Gusdorf, A., Cabrit, S., Flower, D. R., & Pineau Des Forêts, G. 2008a, A&A, 482, 809 [ADS]

Gusdorf, A., Pineau des Forêts, G., Cabrit, S., & Flower, D. R. 2008b, ArXiv e-prints, 803 [ADS]

Hagen, W., Tielens, A. G. G. M., & Greenberg, J. M. 1983, A&A, 117, 132 [ADS]

Hall, J. S. & Mikesell, A. H. 1949, AJ, 54, 187 [ADS]

Hartigan, P., Carpenter, J. M., Dougados, C., & Skrutskie, M. F. 1996, AJ, 111, 1278 [ADS]

Hartquist, T. W., Havnes, O., & Morfill, G. E. 1992, Fundamentals of Cosmic Physics, 15, 107 [ADS]

Hollenbach, D. & McKee, C. F. 1989, ApJ, 342, 306 [ADS]

Horanyi, M. 1996, ARA&A, 34, 383 [ADS]

Ivlev, A. V., Morfill, G. E., & Konopka, U. 2002, Physical Review Letters, 89, 195502 [ADS]

Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., & Martín, S. 2005, ApJ, 627, L121 [ADS]

Joblin, C., D'Hendecourt, L., Leger, A., & Maillard, J. P. 1990, Nature, 346, 729 [ADS]

Jones, A. P. 2000, J. Geophys. Res., 105, 10257 [ADS]

Jones, A. P. 2004, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 309, Astrophysics of Dust, ed. A. N. Witt, G. C. Clayton, & B. T. Draine, 347–+ [ADS]

Jones, A. P. 2005, in ESA Special Publication, Vol. 577, ESA Special Publication, ed. A. Wilson, 239–244 [ADS]

Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. J. 1996, ApJ, 469, 740 [ADS]

Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., Hollenbach, D. J., & McKee, C. F. 1994, ApJ, 433, 797 [ADS]

Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., Hollenbach, D. J., & McKee, C. F. 1997, in American Institute of Physics Conference Series, Vol. 402, American Institute of Physics Conference Series, ed. E. K. Zinner & T. J. Bernatowicz, 595–+ [ADS]

Jura, M. 1980, ApJ, 235, 63 [ADS]

Jurac, S., Baragiola, R. A., Johnson, R. E., & Sittler, E. C. 1995, J. Geophys. Res., 100, 14821 [ADS]

Jurac, S., Johnson, R. E., & Donn, B. 1998, ApJ, 503, 247 [ADS]

Kemper, F., Vriend, W. J., & Tielens, A. G. G. M. 2004, ApJ, 609, 826 [ADS]

Kim, S.-H. & Martin, P. G. 1996, ApJ, 462, 296 [ADS]

Kim, S.-H., Martin, P. G., & Hendry, P. D. 1994, ApJ, 422, 164 [ADS]

Klein, R. I., McKee, C. F., & Colella, P. 1994, ApJ, 420, 213 [ADS]

Konopka, U., Mokler, F., Ivlev, A. V., et al. 2005, New Journal of Physics, 7, 227 [ADS]

Kouchi, A., Kudo, T., Nakano, H., et al. 2002, ApJ, 566, L121 [ADS]

Landau, L. D. & Lifshitz, E. M. 1959, Fluid mechanics (Course of theoretical physics, Oxford : Pergamon Press, 1959) [ADS]

Lazarian, A. 2000, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 215, Cosmic Evolution and Galaxy Formation : Structure, Interactions, and Feedback, ed. J. Franco, L. Terlevich, O. López-Cruz, & I. Aretxaga, 69–+ [ADS]

Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., Flower, D. R., & Cabrit, S. 2002, MNRAS, 332, 985 [ADS]

Le Picard, S. D., Canosa, A., Pineau des Forêts, G., Rebrion-Rowe, C., & Rowe, B. R. 2001, A&A, 372, 1064 [ADS]

Lesaffre, P., Chièze, J.-P., Cabrit, S., & Pineau des Forêts, G. 2004, A&A, 427, 157 [ADS]

Li, A. & Greenberg, J. M. 2003, in Solid State Astrochemistry, ed. V. Pirronello, J. Krelowski, & G. Manicò, 37–84 [ADS]

Liszt, H. S. 2006, A&A, 447, 533 [ADS]

Mac Low, M.-M., McKee, C. F., Klein, R. I., Stone, J. M., & Norman, M. L. 1994, ApJ, 433, 757 [ADS]

Mac Low, M.-M. & Smith, M. D. 1997, ApJ, 491, 596 [ADS]

Marshall, D. J., Fux, R., Robin, A. C., & Reylé, C. 2008, A&A, 477, L21 [ADS]

Martin-Pintado, J., Bachiller, R., & Fuente, A. 1992, A&A, 254, 315 [ADS]

Mathis, J. S., Rumpl, W., & Nordsieck, K. H. 1977, ApJ, 217, 425 [ADS]

May, P. W., Pineau des Forêts, G., Flower, D. R., et al. 2000, MNRAS, 318, 809 [ADS]

McKee, C. 1989, in IAU Symposium, Vol. 135, Interstellar Dust, ed. L. J. Allamandola & A. G. G. M. Tielens, 431 [ADS]

McKee, C. F. & Cowie, L. L. 1975, ApJ, 195, 715 [ADS]

McKee, C. F., Cowie, L. L., & Ostriker, J. P. 1978, ApJ, 219, L23 [ADS]

McKee, C. F. & Hollenbach, D. J. 1980, ARA&A, 18, 219 [ADS]

McKee, C. F., Hollenbach, D. J., Seab, G. C., & Tielens, A. G. G. M. 1987, ApJ, 318, 674 [ADS]

McKee, C. F. & Ostriker, J. P. 1977, ApJ, 218, 148 [ADS]

Mendis, D. A. & Rosenberg, M. 1994, ARA&A, 32, 419 [ADS]

Mennella, V., Colangeli, L., Bussoletti, E., Palumbo, P., & Rotundi, A. 1998, ApJ, 507, L177 [ADS]

Menon, G. & Pego, R. L. 2004, Comm. Pure Appl. Math., 57, 1197 [LINK]

Meny, C., Gromov, V., Boudet, N., et al. 2007, A&A, 468, 171 [ADS]

Messenger, S., Keller, L. P., & Lauretta, D. S. 2005, Science, 309, 737 [ADS]

Mestel, L. & Spitzer, Jr., L. 1956, MNRAS, 116, 503 [ADS]

Meyer-Vernet, N. 1982, A&A, 105, 98 [ADS]

Mezger, P. G., Mathis, J. S., & Panagia, N. 1982, A&A, 105, 372 [ADS]

Miesch, M. S. & Zweibel, E. G. 1994, ApJ, 432, 622 [ADS]

Miville-Deschênes, M.-A., Boulanger, F., Joncas, G., & Falgarone, E. 2002, A&A, 381, 209 [ADS]

Mizuno, H., Markiewicz, W. J., & Voelk, H. J. 1988, A&A, 195, 183 [ADS]

Mostefaoui, S. & Hoppe, P. 2004, ApJ, 613, L149 [ADS]

Mullan, D. J. 1971, MNRAS, 153, 145 [ADS]

Nagahara, H. & Ozawa, K. 1996, Geochim. Cosmochim. Acta, 60, 1445 [ADS]

Nakamura, F., McKee, C. F., Klein, R. I., & Fisher, R. T. 2006, ApJS, 164, 477 [ADS]

Neufeld, D. A. & Stone, J. M. 1997, ApJ, 487, 283 [ADS]

Nisini, B., Codella, C., Giannini, T., & Richer, J. S. 2002, A&A, 395, L25 [ADS]

Norman, M. L. & Winkler, K.-H. A. 1985, Los Alamos Science

Ohtsuki, K., Nakagawa, Y., & Nakazawa, K. 1990, Icarus, 83, 205 [ADS]

Oort, J. H. & van de Hulst, H. C. 1946, Bull. Astron. Inst. Netherlands, 10, 187 [ADS]

Ostriker, J. P. & McKee, C. F. 1988, Reviews of Modern Physics, 60, 1 [ADS]

Pilipp, W. & Hartquist, T. W. 1994, MNRAS, 267, 801 [ADS]

Pilipp, W., Hartquist, T. W., & Havnes, O. 1990, MNRAS, 243, 685 [ADS]

Pilipp, W., Morfill, G. E., Hartquist, T. W., & Havnes, O. 1987, ApJ, 314, 341 [ADS]

Pineau des Forêts, G., Flower, D. R., Hartquist, T. W., & Dalgarno, A. 1986, MNRAS, 220, 801 [ADS]

Podio, L., Bacciotti, F., Nisini, B., et al. 2006, A&A, 456, 189 [ADS]

Popel, S. I. & Gisko, A. A. 2006, Nonlinear Processes in Geophysics, 13, 223 [ADS]

Poppe, T. & Blum, J. 1997, Advances in Space Research, 20, 1595 [ADS]

Poppe, T. & Schräpler, R. 2005, A&A, 438, 1 [ADS]

Raymond, J. C. 1979, ApJS, 39, 1 [ADS]

Roberge, W. G. & Draine, B. T. 1990, ApJ, 350, 700 [ADS]

Routly, P. M. & Spitzer, L. J. 1952, ApJ, 115, 227 [ADS]

Savage, B. D. & Sembach, K. R. 1996, ARA&A, 34, 279 [ADS]

Schilke, P., Pineau des Forêts, G., Walmsley, C. M., & Martín-Pintado, J. 2001, A&A, 372, 291 [ADS]

Schilke, P., Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R. 1997, A&A, 321, 293 [ADS]

Sembach, K. R. & Savage, B. D. 1996, ApJ, 457, 211 [ADS]

Shenoy, S. S., Whittet, D. C. B., Chiar, J. E., et al. 2003, ApJ, 591, 962 [ADS]

Shin, M.-S., Stone, J. M., & Snyder, G. F. 2008, ArXiv e-prints, 802 [ADS]

Shukla, P. K. & Mamun, A. A. 2002, Introduction to dusty plasma physics (Bristol and Philadelphia : Institute of Physics Publishing, Series in plasma physics) [ADS]

Shull, J. M. 1977, ApJ, 215, 805 [ADS]

Shull, J. M. 1978, ApJ, 226, 858 [ADS]

Slavin, J. D. 2008, ArXiv e-prints, 804 [ADS]

Slavin, J. D., Jones, A. P., & Tielens, A. G. G. M. 2004, ApJ, 614, 796 [ADS]

Smith, M. D. 1992, ApJ, 390, 447 [ADS]

Smith, M. D. 1993, ApJ, 406, 520 [ADS]

Smith, M. D. & Mac Low, M.-M. 1997, A&A, 326, 801 [ADS]

Smith, R. K. & Dwek, E. 1998, ApJ, 503, 831 [ADS]

Smoluchowski, M. V. 1916, Zeitschrift fur Physik, 17, 557 [ADS]

Snow, T. P. & Witt, A. N. 1996, ApJ, 468, L65+ [ADS]

Spitzer, L. 1962, Physics of Fully Ionized Gases (Physics of Fully Ionized Gases, New York : Interscience (2nd edition), 1962) [ADS]

Spitzer, L. 1968, Diffuse matter in space (New York : Interscience Publication, 1968) [ADS]

Spitzer, L. 1976, Comments on Astrophysics, 6, 177 [ADS]

Spitzer, Jr., L. 1985, ApJ, 290, L21 [ADS]

Spitzer, L. J. 1941, ApJ, 93, 369 [ADS]

Stepnik, B., Abergel, A., Bernard, J.-P., et al. 2003, A&A, 398, 551 [ADS]

Stone, J. M. 1997, ApJ, 487, 271 [ADS]

Suszcynsky, D. M., Borovsky, J. E., & Goertz, C. K. 1993, Advances in Space Research, 13, 183 [ADS]

Syer, D. & Narayan, R. 1993, MNRAS, 262, 749 [ADS]

Tielens, A. 1989, in IAU Symposium, Vol. 135, Interstellar Dust, ed. L. J. Allamandola & A. G. G. M. Tielens, 239–+ [ADS]

Tielens, A. G. G. M. 1998, ApJ, 499, 267 [ADS]

Tielens, A. G. G. M., McKee, C. F., Seab, C. G., & Hollenbach, D. J. 1994, ApJ, 431, 321 [ADS]

Toth, G. 1995, MNRAS, 274, 1002 [ADS]

Trumpler, R. J. 1930, PASP, 42, 214 [ADS]

Umebayashi, T. & Nakano, T. 1980, PASJ, 32, 405 [ADS]

Vrba, F. J., Coyne, G. V., & Tapia, S. 1993, AJ, 105, 1010 [ADS]

Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R. 1999, A&A, 342, 542 [ADS]

Walmsley, M., Pineau Des Forêts, G. P., & Flower, D. 2005, in IAU Symposium, Vol. 231, Astrochemistry : Recent Successes and Current Challenges, ed. D. C. Lis, G. A. Blake, & E. Herbst, 135–140 [ADS]

Wang, J. 1999, Geochim. Cosmochim. Acta, 63, 953 [ADS]

Wardle, M. 1990, MNRAS, 246, 98 [ADS]

Wardle, M. 1998, MNRAS, 298, 507 [ADS]

Waters, L. B. F. M. 2004, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 309, Astrophysics of Dust, ed. A. N. Witt, G. C. Clayton, & B. T. Draine, 229–+ [ADS]

Weingartner, J. C. & Draine, B. T. 2001, ApJS, 134, 263 [ADS]

Welty, D. E., Jenkins, E. B., Raymond, J. C., Mallouris, C., & York, D. G. 2002, ApJ, 579, 304 [ADS]

Westley, M. S., Baragiola, R. A., Johnson, R. E., & Baratta, G. A. 1995, Nature, 373, 405 [ADS]

Whittet, D. C. B., Gerakines, P. A., Hough, J. H., & Shenoy, S. S. 2001, ApJ, 547, 872 [ADS]

Whittet, D. C. B. & van Breda, I. G. 1978, A&A, 66, 57 [ADS]

Woitke, P., Dominik, C., & Sedlmayr, E. 1993, A&A, 274, 451 [ADS]

Xu, J. & Stone, J. M. 1995, ApJ, 454, 172 [ADS]

Yamashita, T., Sato, S., Nagata, T., et al. 1989, ApJ, 336, 832 [ADS]

Zeldovich, Y. B. & Raizer, Y. P. 1966, Elements of gasdynamics and the classical theory of shock waves (New York : Academic Press, 1966, edited by Hayes, W.D.; Probstein, Ronald F.) [ADS]

Zhukovska, S., Gail, H.-P., & Trieloff, M. 2008, A&A, 479, 453 [ADS]

Zubko, V., Dwek, E., & Arendt, R. G. 2004, ApJS, 152, 211 [ADS]

Liste des tableaux

2.1 Caractéristiques des 3 phases du modèle de McKee & Ostriker (1977), complété avec les données de Ferrière (2001) 73

4.1 Abondance fractionnelle de C, O, Mg, Si et Fe en phase gazeuse, dans les manteaux et dans les cœurs (Flower & Pineau des Forêts, 2003) 120
4.2 Abondances des espèces chimiques présentes dans les manteaux de glace recouvrant les cœurs (Flower & Pineau des Forêts, 2003) 120

5.1 Paramètres caractérisant l'émission secondaire d'électrons de différents matériaux composant les poussières. 133

9.1 Vitesse seuil de fragmentation (Jones et al., 1996) et de vaporisation (Tielens et al., 1994) pour des grains de silicate, de carbone et de glace 222
9.2 Pourcentage total de destruction des poussières silicatées dans les chocs J, en fonction de la vitesse du choc et de la densité pré-choc 232

11.1 Pourcentage de destruction des grains carbonés et silicatés par érosion et vaporisation dans le choc à 40 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ de la figure 11.8 271

E.1 Caractéristiques des phases inertielle et giratoire de la dynamique des grains dans les chocs J 325

Index

Accrétion, **21**, 24, 35, 125
  temps caractéristique, 22

Bétatron, 20, **174**, 180
Bilan d'énergie d'un choc, 79, 103

Carbone amorphe, 23, 121, 134, 232
Champ électrique, 180, 189
Champ magnétique
  énergie, 105
  hypothèse du champ gelé, **98**, 269, 286
  intensité (choc), 180
  intensité (nuage au repos), 155
  pression, **98**, 99, 266
  rotation (chocs obliques), 113
Charge des grains
  coefficient de collage, **130**, 226, 230
  courant électrique de charge, 128, 151, 161
  durée de vie d'un grain neutre, **156**, 158, 186
  fluctuations de charge, 158, 186, 264, 273
  inertie électrique, **129**, 150, 274
  interaction coulombienne, 137, 251, **257**
  moyenne, **129**, 132, 140
  polarisabilité des grains, 137, 146
  potentiel électrique de surface, 128, **129**, 135, 147
  processus
    émission de champ, 136
    émission secondaire d'électrons, 132
    attachement électronique, 128
    effet photoélectrique, **135**, 140, 314
    photons secondaires, 135, 138, 139
    réflexion/diffusion des ions et des électrons, 130
    recombinaison des ions, 128
  taux d'attachement, 137, 146, 314
  température effective des ions, **149**, 309
  température réduite, **129**, 130, 131, 137, 315
  temps de mise à l'équilibre, 129
  variance, 130
Choc
  à précurseur radiatif, 83
  d'étrave, 88
  dans un milieu inhomogène, 86, 89
  de cisaillement, 116
  dissociatif, **80**, 213, 228, 282
  J non dissociatif, 79, 109, 228
  non collisionnel, 116
  non stationnaire et C-J, 107
  oblique, **111**, 276
  radiatif, **79**, 83
  switch-on, 112
Coagulation, **22**, 23, 24, 26, 35
  chocs C, 245
  influence des manteaux, 22
  temps caractéristique, 22
  vitesse limite, 22, 245
Courant électrique (chocs C), 112, 168, 189

Découplage des grains du champ magnétique
  effet rétroactif (chocs C), 188
  grains neutres, 186
  par friction du gaz, 184
  par inertie (chocs J), 191, 217, 323
  par pénurie d'électrons, 254
Déplétions, 14, 26–28, 30, 34, 120, 121
Dérive
  électrique, 167
  de friction, 170
  diamagnétique, 173
  inertielle, 170, 303
Diffusion ambipolaire, 3, **102**, 113
Discontinuité de contact, **72**, 73, 87, 90

Distribution en taille
log-normale, 123
MRN, 121
Dusty plasmas, 153
Dynamique stochastique, 186, 187

Equations du mouvement
en coordonnées cartésiennes, 181
en coordonnées polaires, 322
Equipartition thermique/magnétique, 160
Erosion, **18**
chocs C, 271
chocs J, 21, 225, 229, 230, 232
différentielle, 29
rendements (cœurs et manteaux), 221
thermique et inertielle, 18

Facteur de compression d'un choc
hydro adiabatique, 75
hydro isotherme, 85
MHD adiabatique, 98
MHD isotherme, 99
Facteur de Hall, **157**, 181
Fermi I (accélération), 219, 229
Flots moléculaires et jets, 30, 78, 90, 213
Fraction d'ionisation
chocs C, 150, 263, 265, 268
chocs J, 321
nuage pré-choc, 100, **137**
Fragmentation, **18**, 22, 25
chocs C, 255, 257, 259, 262, 267, 270, 272
chocs J, 18, 21, 224, 225
modèle, 220, 275
vitesse seuil, 222
Freinage des grains
collisionnel, 156, 158, 180, 185, 224
coulombien, 20, 180, 321
non collisionnel, 185, **185**, 269, 271
Freinage des ions et du gaz (chocs C), 104

Gélation, 251
Giration
amortissement, 170, 171, 185
centre-guide de, **166**, 169
premier quart de, 191, 218
reprise après arrêt (chocs C), 264, 265, 270, 272
temps caractéristique, 156

Largeur du front de choc (hydro), 78
Longueur
d'un choc C, 105, 188, 258, 264
d'un choc J, 103, 105
de Debye, 151, 153, 154, 268

Manteaux de glace
épaisseur des, 126
érosion des, 220, 221
bandes d'absorption, 12
inconsistance numérique, 224
Maxwellienne déplacée, 308
Moment magnétique, **171**, 174, 301

Neutralité / non-neutralité électrique, 189
Nombre de Mach
alfvénique, **98**, 114
sonique, 74

Pénurie d'électrons, 151, 161, 254, 264, 268
Piégeage des grains, 219, 229, 233
rayon caractéristique des grains, 218
Piston adiabatique ou isotherme, 87
Plasmas poussiéreux, 151, 153, 162, 268
Point sonique, 106–108, 287
Précurseur
magnétique, 102, 105, 109, 161, 162
radiatif, 83

Réflexion magnétique, 217, 227
Rankine-Hugoniot, relations de
choc hydro adiabatique, 74
choc hydro fort, 76
choc hydro isotherme, 84
choc MHD adiabatique, 98
choc MHD isotherme, 99
Rayons cosmiques, 17
Refroidissement du gaz
chocs C, 104, 105
chocs J, 80–82
isochore ou isobare, 81
temps caractéristique de, 99

SiO, molécule de, 30, 228, 233
Smoluchowski, équation et solutions de, 247
Supernova, 141
    destruction des poussières, 17, 26, 33
    formation des poussières, 32, 136

Vaporisation, **18**
    chocs C, 271, 276, 278
    chocs J, 18, 21, 225, 228, 232
    rendement, 222
    vitesse seuil, 222
Vitesse
    critique des chocs C, 106, 158
    d'Alfven, 96
    des ondes MHD (lentes, rapides et intermédiaires), 96
    du son, 63, 70, 74, 107, 108
    fluide des poussières chargées, 181
    magnétosonique
      dans le fluide chargé, **100**, 160
      des ions, 102
      des neutres, 100
    moyenne des grains neutres, 186
    seuil de dissociation de H_2, 106, **158**

Wardle, instabilité de, 113